MAT02034 - Métodos bayesianos para análise de dados

Métodos de Monte Carlo via Cadeias de Markov

Rodrigo Citton P. dos Reis citton.padilha@ufrgs.br

Universidade Federal do Rio Grande do Sul Instituto de Matemática e Estatística Departamento de Estatística

Porto Alegre, 2022



Introdução

Introdução

Introdução

- Uma séria desvantagem da amostragem padrão de Monte Carlo ou amostragem por importância de Monte Carlo é que a determinação completa da forma funcional da densidade a posteriori é necessária para sua implementação.
- Situações em que as distribuições a posteriori são especificadas de forma incompleta ou são especificadas indiretamente não podem ser tratadas.
- Uma dessas instâncias é onde a distribuição a posteriori conjunta do vetor de parâmetros é especificada em termos de várias distribuições condicionais e marginais, mas não diretamente.
 - Isso realmente cobre uma gama muito grande de análises bayesianas.

Introdução

- Acontece que é de fato possível em tais casos adotar um esquema de amostragem de Monte Carlo iterativo, que no ponto de convergência garantirá uma geração aleatória da distribuição (alvo) a posteriori conjunta.
- Esses procedimentos iterativos de Monte Carlo normalmente geram uma sequência aleatória com a propriedade de Markov, tal que essa cadeia de Markov é ergódica com a distribuição limite sendo a distribuição a posteriori alvo.
- Na verdade, existe toda uma classe de tais procedimentos iterativos coletivamente chamados de procedimentos de Monte Carlo via Cadeias de Markov (MCMC).
 - Diferentes procedimentos desta classe são adequados para diferentes situações.

Cadeias de Markov para MCMC

▶ Uma sequência de variáveis aleatórias $\{X_n\}_{n\geq 0}$ é uma **cadeia de Markov** se para qualquer n, dado o valor atual, X_n , o **passado** $\{X_j: j \leq n-1\}$ e o **futuro** $\{X_j: j \geq n+1\}$ são **independentes**. Em outras palavras,

$$Pr(A \cap B|X_n) = Pr(A|X_n) Pr(B|X_n),$$

em que A e B são eventos definidos respectivamente em termos do passado e do futuro.

- Entre as cadeias de Markov existe uma subclasse que possui ampla aplicabilidade.
- ▶ São as cadeias de Markov com **probabilidades de transição estacionárias** ou homogêneas no tempo, o que significa que a distribuição de probabilidade de X_{n+1} dado $X_n = x$, e o passado, $\{X_j : j \le n-1\}$ depende apenas de x e não depende dos valores de $\{X_j : j \le n-1\}$ ou n.

Se o conjunto S de valores que $\{X_n\}$ pode assumir, conhecido como espaço de estados, é contável, isso se reduz a especificar a matriz de probabilidades de transição $P \equiv ((p_{ij}))$ em que para quaisquer dois valores i, j em S,

$$p_{ij} = \Pr(X_{n+1} = j | X_n = i)$$

 $\acute{\mathrm{e}}$ a probabilidade de passar do estado \emph{i} para o estado \emph{j} em uma unidade de tempo.

Para o espaço de estados S que não é contável, deve-se especificar um **kernel** de transição ou função de transição $P(x, \cdot)$ em que

$$P(x,A) = \Pr(X_{n+1} \in A | X_n = x)$$

é a probabilidade de passar de x para A em uma etapa (passo).

- ▶ Dada a probabilidade de transição e a distribuição de probabilidade do valor inicial X_0 , pode-se construir a distribuição de probabilidade conjunta de $\{X_j: 0 \le j \le n\}$ para qualquer n finito.
 - Estas são conhecidas como as distribuições finito-dimensionais.
- Por exemplo, no caso do espaço de estados contável

$$Pr(X_0 = i_0, X_1 = i_1, \dots, X_n = i_n)$$

$$= Pr(X_n = i_n | X_0 = i_0, \dots, X_{n-1} = i_{n-1}) \times Pr(X_0 = i_0, \dots, X_{n-1} = i_{n-1})$$

$$= p_{i_{n-1}i_n} Pr(X_0 = i_0, \dots, X_{n-1} = i_{n-1})$$

$$= Pr(X_0 = i_0) p_{i_0i_1} p_{i_1i_2} \dots p_{i_{n-1}i_n}.$$

- ▶ Uma distribuição de probabilidade π é chamada **estacionária** ou **invariante** para uma probabilidade de transição P ou a cadeia de Markov associada $\{X_n\}$ se for o caso de quando a distribuição de probabilidade de X_0 é π então o mesmo é verdadeiro para X_n para todo n>1.
- No caso do espaço de estados contável uma distribuição de probabilidade $\pi = \{\pi_i : i \in S\}$ é estacionária para uma matriz de probabilidade de transição P se para cada j em S,

$$Pr(X_1 = j) = \sum_{i} Pr(X_1 = j | X_0 = i) Pr(X_0 = i)$$

= $\sum_{i} \pi_i p_{ij} = Pr(X_0 = j) = \pi_j$.

Da mesma forma, se S é contínuo, uma distribuição de probabilidade π com densidade p(x) é estacionária para o kernel de transição $P(\cdot, \cdot)$ se

$$\pi(A) = \int_A p(x)dx = \int_S P(x,A)p(x)dx,$$

para $A \subset S$.

▶ Uma cadeia de Markov $\{X_n\}$ com um espaço de estados contável S e matriz de probabilidade de transição $P \equiv ((p_{ij}))$ é dita **irredutível** se para quaisquer dois estados i e j a probabilidade da cadeia de Markov visitar j começando em i for positiva, ou seja, para algum $n \ge 1$,

$$p_{ij}^{(n)} \equiv \Pr(X_n = j | X_0 = i) > 0.$$

Uma noção semelhante de irredutibilidade, conhecida como irredutibilidade de Harris ou Doeblin, também existe para o caso geral do espaço de estados.

Teorema (Lei dos grandes números para cadeias de Markov)

Seja $\{X_n\}_{n\geq 0}$ uma cadeia de Markov com um espaço de estado contável S e uma matriz de probabilidade de transição P. Além disso, suponha que seja irredutível e tenha uma distribuição de probabilidade estacionária $\pi=(\pi,i\in S)$. Então, para qualquer função limitada $h:S\to R$ e para qualquer distribuição inicial de X_0

$$\frac{1}{n}\sum_{i=0}^{n-1}h(X_i)\to \sum_{j}h(j)\pi_j=\mathsf{E}_{\pi}[h(X_j)] \tag{1}$$

em probabilidade conforme $n \to \infty$. (Às vezes é chamado de **Teorema Ergódico**.)

- Um resultado semelhante é válido quando o espaço de estados S não é contável.
- O valor limite será a integral de h em relação à distribuição estacionária π.
 - Uma condição suficiente para a validade deste é que a cadeia de Markov {X_n} seja Harris irredutível e possua uma distribuição estacionária π.

- Para ver como isso é útil para nós, considere o seguinte: dada uma distribuição de probabilidade π em um conjunto S e uma função h em S, suponha que se deseja calcular a "integral de h em relação a π ", que se reduz a $\sum_i h(j)\pi_i$ no caso de S contável.
- Procure uma cadéia de Markov irredutível $\{X_n\}$ com espaço de estados S e distribuição estacionária π . Então, a partir de algum valor inicial X_0 , "corra" (uma trajetória d) a cadeia de Markov $\{X_j\}$ por um período de tempo, digamos $0,1,2,\ldots,n-1$ e considere como uma estimativa

$$\mu_n = \frac{1}{n} \sum_{j=0}^{n-1} h(X_j).$$

Pela Lei dos grandes números para cadeias de Markov (LGNCM), esta estimativa μ_n será próxima de $\sum_i h(j)\pi_j$ para n grande.

- Esta técnica é chamada de Monte Carlo via cadeia de Markov (MCMC).
- Por exemplo, se alguém está interessado em $\pi(A) \equiv \sum_{j \in A} \pi_j$ algum $A \subset S$ então pela LGNCM isso se reduz a

$$\pi_n(A) \equiv \frac{1}{n} \sum_{j=0}^{n-1} I_A(X_j) \to \pi(A)$$

em probabilidade conforme $n \to \infty$, em que $I_A(X_j) = 1$ se $X_j \in A$ e 0 caso contrário.

- ▶ Uma cadeia de Markov irredutível $\{X_n\}$ com um espaço de estados contável S é chamada **aperiódica** se para algum $i \in S$ o máximo divisor comum, $\{n : p_{ii}^{(n)} > 0\} = 1$ $(p_{ii}^{(n)}$ é a probabilidade de retornar ao estado i em n passos da cadeia).
- ► Então, além do LGNCM, vale o seguinte resultado sobre a convergência de $Pr(X_n = j)$

$$\sum_{j} |\operatorname{Pr}(X_n = j) - \pi_j| \to 0.$$
 (2)

conforme $n \to \infty$, para qualquer distribuição inicial de X_0 .

- Em outras palavras, para n grande a distribuição de probabilidade de X_n estará próxima de π .
- Existe um resultado semelhante para o caso do espaço de estado geral.

lsso sugere que, em vez de fazer uma trajetória de comprimento n, pode-se fazer N trajetórias independentes, cada uma de comprimento m, de modo que n = Nm e, em seguida, da i-ésima trajetória, use apenas a m-ésima observação, digamos, $X_{m,i}$ e considere a estimativa

$$\tilde{\mu}_{N,m} \equiv \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} h(X_m, i).$$

 Outras variações também existem. Algumas das cadeias de Markov especiais sadas nos MCMC são discutidas nas próximas duas seções.

- Nesta seção, discutimos um método MCMC muito geral com amplas aplicações.
- Logo ficará claro por que essa importante descoberta levou a um progresso considerável na inferência baseada em simulação, particularmente na análise bayesiana.
- A ideia aqui não é simular diretamente a partir de uma determinada densidade alvo (que pode ser computacionalmente muito difícil), mas sim simular uma cadeia de Markov fácil que tenha essa densidade alvo como a densidade de sua distribuição estacionária.

- Seja 5 um conjunto finito ou contável.
- ightharpoonup Seja π uma distribuição de probabilidade em S.
 - ightharpoonup Chamaremos π de **distribuição alvo**.
- ▶ Seja $Q \equiv ((q_{ij}))$ uma matriz de probabilidade de transição tal que para cada i, seja computacionalmente fácil gerar uma amostra da distribuição $\{q_{ij}: j \in S\}$.

Algoritmo Metropolis-Hastings Vamos gerar uma cadeia de Markov $\{X_n\}$ como segue.

- 1. Se $X_n = i$, primeiro amostre da distribuição $\{q_{ii} : j \in S\}$ e denote essa observação Y_n .
- 2. Em seguida, escolha X_{n+1} dos dois valores X_n e Y_n de acordo com

$$Pr(X_{n+1} = Y_n | X_n, Y_n) = \rho(X_n, Y_n)$$

$$Pr(X_{n+1} = X_n | X_n, Y_n) = 1 - \rho(X_n, Y_n),$$

em que a "probabilidade de aceitação" $\rho(\cdot,\cdot)$ é dada por

$$\rho(i,j) = \min\left\{\frac{\pi_j}{\pi_i}\frac{q_{ji}}{q_{ij}}, 1\right\}$$

para todo (i, j) tal que $\pi_i q_{ii} > 0$.

▶ Observe que $\{X_n\}$ é uma cadeia de Markov com matriz de probabilidade de transição $P = ((p_{ij}))$ dada por

$$p_{ij} = \left\{ \begin{array}{ll} q_{ij} \rho_{ij}, & j \neq i, \\ 1 - \sum_{k \neq i} p_{ik}, & j = i. \end{array} \right.$$

ightharpoonup Q é chamada de "probabilidade de transição proposta" e ho de "probabilidade de aceitação" .

• Uma característica significativa deste mecanismo de transição P é que P e π satisfazem

$$\pi_i p_{ij} = \pi_j p_{ji}$$
 para todo i, j .

► Isso implica que para qualquer j

$$\sum_{i} \pi_{i} p_{ij} = \pi_{j} \sum_{i} p_{ji} = \pi_{j},$$

ou, π (a distribuição alvo) é uma distribuição de probabilidade estacionária para P.

- Agora suponha que S é irredutível em relação a Q e $\pi_i > 0$ para todo i em S
- Pode-se então mostrar que P é irredutível e, como tem uma distribuição estacionária π, a LGNCM está disponível.
- Este algoritmo é, portanto, muito flexível e útil.
- ▶ A escolha de Q está sujeita apenas à condição de que S seja irredutível em relação a Q.
- Claramente, não há perda de generalidade supor que $\pi_i > 0$ para todo i em S.

Uma condição suficiente para a aperiodicidade de P é que $p_{ii} > 0$ para algum i ou equivalente

$$\sum_{j\neq i}q_{ij}\rho_{ij}<1.$$

- ▶ Uma condição suficiente para isso é que exista um par (i,j) tal que $\pi_i q_{ij} > 0$ e $\pi_j q_{ji} < \pi_i q_{ij}$.
- ▶ Lembre-se de que, se P for aperiódica, tanto o LGNCM (1) quanto o resultado de (2) serão válidos.

Se S não é finito ou contável, mas é um contínuo e a distribuição alvo $\pi(\cdot)$ tem uma densidade $g(\cdot)$, então procede-se da seguinte forma:

- 1. Seja Q uma função de transição tal que para cada x, $Q(x, \cdot)$ tem uma densidade q(x, y).
- 2. Em seguida, proceda como no caso discreto, mas defina a "probabilidade de aceitação" $\rho(x, y)$ como

$$\rho(x,y) = \min \left\{ \frac{g(y)q(y,x)}{g(x)q(x,y)}, 1 \right\}$$

para todo (x, y) tal que g(x)q(x, y) > 0.

- ▶ Uma característica particularmente útil do algoritmo acima é que é suficiente conhecer $g(\cdot)$ a menos de uma constante multiplicativa, pois na definição da "probabilidade de aceitação" $\rho(\cdot, \cdot)$ apenas as razões g(y)/g(x) precisam ser calculados (note que a constante de normalização é cancelada na razão g(y)/g(x)).
- Isso nos assegura que em aplicações bayesianas não é necessário ter a constante de normalização da densidade a posteriori disponível para cálculo das quantidades a posteriori de interesse.

- Suponha que X é o número de defeituosos na produção diária de um produto.
- Considere $(X|Y,\theta) \sim binomial(Y,\theta)$, em que Y, a produção de um dia, é uma **variável aleatória** com uma distribuição de Poisson com média conhecida λ , e θ é a probabilidade de que qualquer produto seja defeituoso.
- A distribuição a priori é tal que $(\theta|Y=y)\sim Beta(\alpha,\gamma)$, com α e γ conhecidos independentes de Y.

▶ Observe que $X|\theta \sim Poisson(\lambda \theta)$. Em seguida, $\theta \sim Beta(\alpha, \gamma)$. Portanto,

$$g(\theta|X=x) \propto \exp(-\lambda\theta)\theta^{x+\alpha-1}(1-\theta)^{\gamma-1}, \ 0 \leq \theta \leq 1.$$

A única dificuldade é que esta não é uma distribuição padrão e, portanto, as quantidades a posteriori não podem ser obtidas de forma fechada.

- Mesmo que o método da amostragem por rejeição (SIR também) possa ser empregado aqui, nós gostaríamos de usar este exemplo para ilustrar o algoritmo M-H.
- A cadeia de Markov necessária é gerada tomando a densidade de transição $q(\theta, \theta^c) = q(\theta^c | \theta) = q(\theta^c)$, independente de θ . Uma boa escohla para $q(\cdot)$ é a densidade de $Beta(x + \alpha, \gamma)$.

- ▶ Em nosso exemplo, suponha X=1, $\alpha=1$, $\gamma=49$ e $\lambda=100$.
- ► Ainda, a probabilidade de aceitação é

$$\rho(\theta, \theta^c) = \min \left\{ \frac{g(\theta^c)q(\theta)}{g(\theta)q(\theta^c)}, 1 \right\} = \min \left\{ \exp[-\lambda(\theta^c - \theta)], 1 \right\}.$$

Assim, os passos envolvidos neste **algoritmo M-H "independente"** são os seguintes. Comece em t=0 com um valor θ_0 no suporte da distribuição alvo; neste caso, $0<\theta_0<1$. Dado θ_t , gere o próximo valor na cadeia conforme indicado abaixo.

- **a.** Gere θ_t^c de $Beta(x + \alpha, \gamma)$.
- b. Seja

$$\theta_{t+1} = \left\{ \begin{array}{ll} \theta_t^c & \text{com probabilidade} & \rho_t, \\ \theta_t & \text{caso contrário.} \end{array} \right.$$

em que
$$\rho_t = \min \{ \exp[-\lambda (\theta_t^c - \theta_t)], 1 \}.$$

c. Faça t = t + 1 e volte ao passo (a).

Rode esta cadeia até t = n, um inteiro grande adequadamente escolhido.

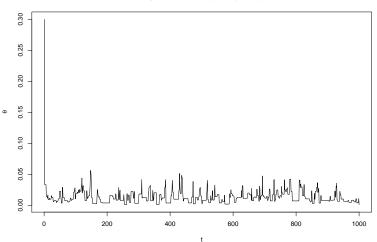
```
# Configuração

x <- 1
alpha <- 1
gamma <- 49
lambda <- 100

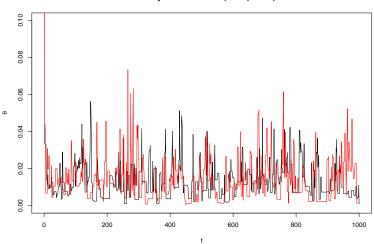
n <- 1000
theta <- vector(length = n)
```

```
# Alogritmo M-H
theta[1] \leftarrow 0.3 # theta 0 = 0.3
for (t in 1:(n-1)){
  theta cand <- rbeta(
    n = 1, shape1 = x + alpha, shape2 = gamma)
  rho <- min(exp(-lambda * (theta_cand - theta[t])),</pre>
              1)
  theta[(t+1)] <- sample(c(theta_cand, theta[t]),
                          size = 1.
                          prob = c(rho, 1 - rho))
```

Trajetória da cadeia (1.000 passos)

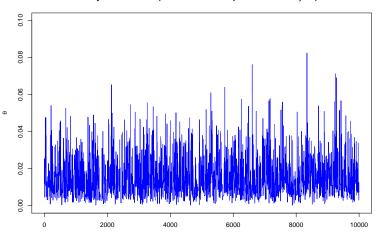


Duas trajetórias da cadeia (1.000 passos)

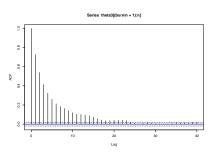


- Para que a escolha do valor inicial não influencie na amostra da distribuição alvo, e para "garantirmos" que estamos amostrando da distribuição alvo (dist. estacionária/limite), uma estratégia de amostragem consiste em deixar a cadeia "correr" por um período inicial (burn-in period, ou warm-up), e só após este período iniciar a amostragem das realizações de θ.
- Escolha de valores para o *burn-in* podem variar (1.000, 10.000, etc.).
 - Esta escolha está relacionada com a convergência da cadeia. Logo, está proximamente relacionada com a escolha da distribuição proposta $q(\cdot,\cdot)$.

Trajetória da cadeia (descartando 10.000 primeiras observações)

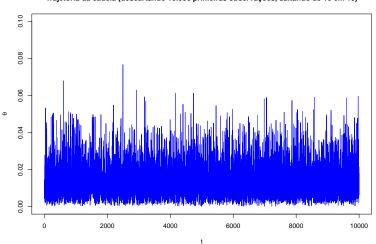


▶ Note ainda, que estas observações são correlacionadas.

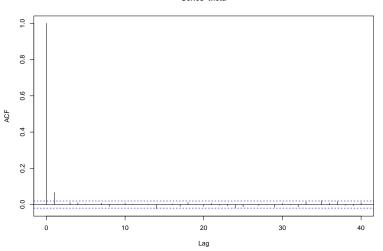


- Uma estratégia consiste em amostrar da "distribuição limite" a cada k observações.
 - Isto também permite "correr" uma trajetória maior da cadeia, aumentando a eficiência do método em explorar o espaço paramétrico de θ.

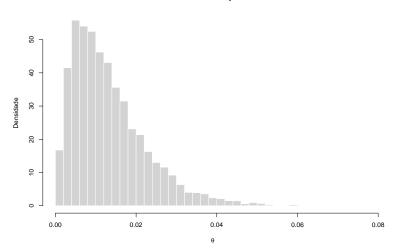
Trajetória da cadeia (descartando 10.000 primeiras observações, saltando de 10 em 10)



Series theta



Amostra da dist. a posteriori



- A maioria dos novos problemas que a inferência bayesiana é solicitada a resolver são de alta dimensão.
 - Aplicações em áreas como microarrays (DNA) e processamento de imagens são alguns exemplos.
- A análise bayesiana de tais problemas invariavelmente envolve distribuições alvo (a posteriori) que são distribuições multivariadas de alta dimensão.

- O amostrador de Gibbs é uma técnica especialmente adequada para gerar uma cadeia de Markov aperiódica irredutível que tem como distribuição estacionária uma distribuição alvo em um espaço de alta dimensão, mas com alguma estrutura especial.
- O aspecto mais interessante desta técnica é que para "correr" esta cadeia de Markov, basta gerar observações a partir de distribuições univariadas.

O amostrador de Gibbs no contexto de uma distribuição de probabilidade bivariada pode ser descrito como segue.

- Seja π uma distribuição de probabilidade alvo de um vetor aleatório bivariado (X, Y).
- Para cada x, seja $P(x, \cdot)$ a distribuição de probabilidade condicional de Y dado X = x.
 - Da mesma forma, seja Q(y,·) a distribuição de probabilidade condicional de X dado Y = y.
- ▶ Observe que para cada x, $P(x, \cdot)$ é uma distribuição univariada, e para cada y, $Q(y, \cdot)$ também é uma distribuição univariada.

Agora gere uma **cadeia de Markov bivariada** $Z_n = (X_n, Y_n)$ como segue:

- 1. Comece com algum $X_0 = x_0$.
- **2.** Gere uma observação Y_0 da distribuição $P(x_0, \cdot)$
- **3.** Então gere uma observação X_1 de $Q(Y_0, \cdot)$.
- **4.** Em seguida, gere uma observação Y_1 de $P(X_1, \cdot)$ e assim por diante.

No passo n da cadeia, se $Z_n = (X_n, Y_n)$ for conhecido, então gere X_{n+1} de $Q(Y_n, \cdot)$ e Y_n de $P(X_{n+1}, \cdot)$.

- Se π é uma distribuição discreta concentrada em $\{(x_i,y_j): 1\leq i\leq K, 1\leq j\leq L\}$ e se $\pi_{ij}=\pi(x_i,y_j)$ então $P(x_i,y_j)=\pi_{ij}/\pi_{i\cdot}$ e $Q(y_j,x_i)=\pi_{ij}/\pi_{\cdot j}$, em que $\pi_{i\cdot}=\sum_j \pi_{ij}$ e $\pi_{\cdot j}=\sum_i \pi_{ij}$.
- Assim, a matriz de probabilidades de transição $R = ((r_{(ij),(k\ell)}))$ da cadeia $\{Z_n\}$ é dada por

$$r_{(ij),(k\ell)} = Q(y_j, x_k)P(x_k, y_\ell) = \frac{\pi_{kj}}{\pi_{-i}} \frac{\pi_{k\ell}}{\pi_{k}}.$$

- Pode-se verificar que esta cadeia é irredutível, aperiódica e tem π como sua distribuição estacionária.
- Assim, LGNCM (1) e (2) valem neste caso.
- Assim, para n grande, Z_n pode ser visto como uma amostra de uma distribuição próxima a π e pode-se aproximar $\sum_{i,j} h(i,j)\pi_{ij}$ por $\sum_{i=1}^{n} h(X_i, Y_i)/n$.
 - Por exemplo, se $h(X_i, Y_i) = X_i$, então $\sum_{i=1}^n h(X_i, Y_i)/n = \sum_{i=1}^n X_i / n$ é uma estimativa de $\sum_{i,j} h(i,j)\pi_{ij} = \sum_i i \sum_j \pi_{ij} = \sum_i i \pi_i = \operatorname{E}_{\pi}(X)$.

A extensão multivariada do caso bivariado mencionado acima é muito direta.

- Suponha que π seja uma distribuição de probabilidade de um vetor aleatório k-dimensional (X_1, X_2, \dots, X_k) .
- Se $\mathbf{u} = (u_1, u_2, \dots, u_k)$ é qualquer vetor de comprimento k, seja $\mathbf{u}_{-i} = (u_1, u_2, \dots, u_{i-1}, u_{i+1}, \dots, u_k)$ seja o vetor de comprimento k-1 resultante da eliminação do componente u_i .
- Seja $\pi(\cdot|x_{-i})$ a distribuição condicional univariada de X_i dado que $\mathbf{X}_{-i} \equiv (X_1, X_2, \dots, X_{i-1}, X_{i+1}, \dots, X_k) = \mathbf{x}_{-i}$.
- Agora começando com algum valor inicial para $\mathbf{X}_0 = (x_{01}, x_{02}, \dots, x_{0k})$ gere $\mathbf{X}_1 = (X_{11}, X_{12}, \dots, X_{1k})$ sequencialmente gerando X_{11} de acordo com a distribuição univariada $\pi(\cdot|\mathbf{x}_{0-1})$ e, em seguida, gerando X_{12} de acordo com $\pi(\cdot|X_{11}, x_{03}, \dots, x_{0k})$ e assim por diante.

- A característica mais importante a reconhecer aqui é que todas as distribuições condicionais univariadas, X_i|X_{-i} = x_{-i}, conhecidas como condicionais completas devem permitir facilmente a amostragem delas, o que acaba sendo o caso na maioria dos problemas hierárquicos de Bayes.
- Assim, o amostrador de Gibbs é particularmente bem adaptado para cálculos bayesianos com distribuição a priori hierárquicas.

Novamente considere o problema de estimar θ , a probabilidade de um item produzido ser defeituoso. Relembrando:

$$(X|Y,\theta) \sim bin(Y,\theta)$$

 $(Y|\lambda) \sim Poi(\lambda)$
 $(\theta|Y=y) \sim Beta(\alpha,\gamma)$

- Embora outros métodos já tenham sido utilizados para obter uma amostra da distribuição a posteriori com sucesso, o amostrador de Gibbs oferece uma excelente alternativa.
- Em vez de focar em $\theta | X$ diretamente, veja-o como um **componente** marginal de $(Y, \theta | X)$.
- A partir da distribuição a posteriori conjunta, $g(Y, \theta | X = x)$, vamos obter as **distribuições condicionais completas** para $Y \in \theta$.
- Note que,

$$g(Y,\theta|X=x) \propto \frac{1}{(y-x)!} \lambda^y e^{-\lambda} \theta^{\alpha+x-1} (1-\theta)^{y-x} (1-\theta)^{\gamma-1}.$$

Portanto, temos:

$$p(y|\theta, X = x) \propto \frac{1}{(y - x)!} \lambda^{y} e^{-\lambda} (1 - \theta)^{y - x}$$

$$= \frac{1}{(y - x)!} \lambda^{y} \left(\frac{\lambda^{-x}}{\lambda^{-x}}\right) e^{-\lambda} \left(\frac{e^{-\lambda \theta}}{e^{-\lambda \theta}}\right) (1 - \theta)^{y - x}$$

$$\propto \frac{1}{(y - x)!} e^{-\lambda (1 - \theta)} [\lambda (1 - \theta)]^{y - x},$$

е

$$p(\theta|y, X = x) \propto \theta^{\alpha+x-1} (1-\theta)^{\gamma+y-x-1}$$

 Assim, temos que as distribuições condicionais completas são dadas por

$$(Y|\theta, X = x) \sim x + Poi(\lambda(1-\theta))$$

 $(\theta|Y = y, X = x) \sim Beta(\alpha + x, \gamma + y - x)$

Note que estas são distribuições padrões e fáceis de simular.

```
# Configuração

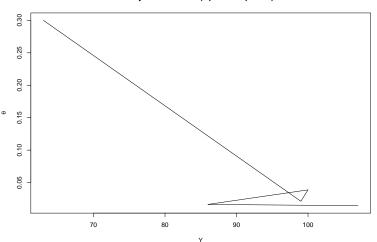
x <- 1
alpha <- 1
gamma <- 49
lambda <- 100

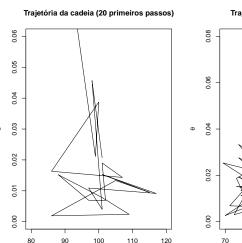
n <- 1000
theta <- vector(length = n)

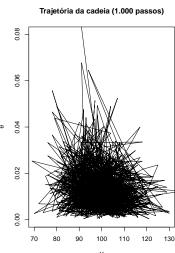
Y <- vector(length = n)
```

```
# Amostrador de Gibbs
theta[1] \leftarrow 0.3 # theta 0 = 0.3
for (t in 1:(n-1)){
  Y[t] \leftarrow x + rpois(n = 1,
                      lambda = lambda * (1 - theta[t]))
  theta[(t+1)] \leftarrow rbeta(n = 1,
                           shape1 = alpha + x,
                           shape2 = gamma + Y[t] - x)
}
Y[n] \leftarrow x + rpois(n = 1,
                      lambda = lambda * (1 - theta[n]))
```

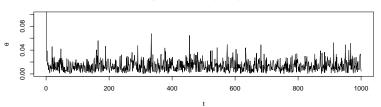
Trajetória da cadeia (5 primeiros passos)



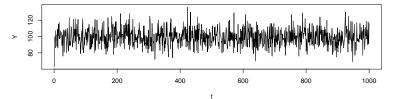




Trajetória da cadeia (1.000 passos)



Trajetória da cadeia (1.000 passos)



Mais uma vez podemos descartar observações gerados no período de burn-in e armazenar apenas observações a cada k passos da cadeia (thinning).

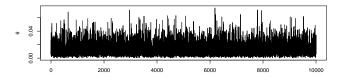
```
# Configuração

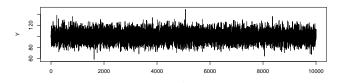
n <- 10000
burnin <- 10000
k <- 10

theta <- vector(length = n)
Y <- vector(length = n)
```

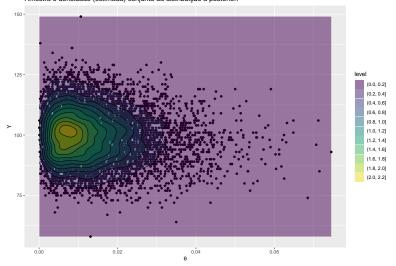
```
# Amostrador de Gibbs
# Período de burn-in
theta b <- 0.3 # theta 0 = 0.3
Y_b \leftarrow x + rpois(n = 1,
                  lambda = lambda * (1 - theta_b))
for (t in 1:(burnin-1)){
  theta b \leftarrow rbeta(n = 1,
                     shape1 = alpha + x,
                     shape2 = gamma + Y_b - x)
  Y_b \leftarrow x + rpois(n = 1,
                     lambda = lambda * (1 - theta_b))
```

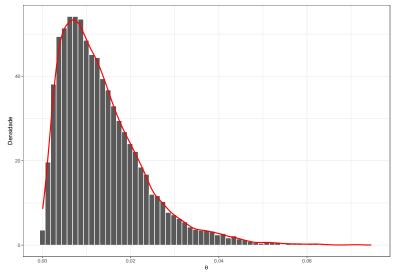
```
# Amostrador de Gibbs
# Período pós burn-in
theta n <- theta b
Y n <- Y b
for (t in 1:(k*n)){
  theta n \leftarrow rbeta(n = 1,
                     shape1 = alpha + x,
                     shape2 = gamma + Y n - x)
  Y_n \leftarrow x + rpois(n = 1,
                    lambda = lambda * (1 - theta n))
  if (t \% k == 0) {
    theta[(t/k)] <- theta n
    Y[(t/k)] \leftarrow Y_n
```





Amostra e densidade (estimada) conjunta da distribuição a posteriori





média a posteriori

Amostrador de Gibbs: exemplo

- Assim como nos outros métodos de Monte Carlo, uma vez que temos uma amostra da distribuição a posteriori podemos realizar inferências para o parâmetro de interesse com base em resumos da distribuição:
 - média a posteriori;
 - mediana a posteriori;
 - ▶ proabilidade *a posteriori* da ocorrência de um certo evento de interesse $(\theta \ge 0.07$, por exemplo);
 - intervalos de credibilidade.

proabilidade _a posteriori_ theta >= 0.07

```
mean(theta)
## [1] 0.01347836
# mediana _a posteriori_
median(theta)
## [1] 0.011396
```

```
## [1] 4e-04
```

mean(theta >= 0.07)

```
# intervalos de credibilidade (quantílico)
quantile(theta, c(0.025, 0.975))

## 2.5% 97.5%
## 0.001723109 0.038419274

# intervalos de credibilidade (HPD)
library(HDInterval)
hdi(theta, credMass = 0.95)

## lower upper
## 0.0004380295 0.0322941573
## attr(,"credMass")
## [1] 0.95
```

Avaliando a convergência das saídas do MCMC

Avaliando a convergência das saídas do MCMC

Avaliando a convergência das saídas do MCMC

- Como já vimos, abordagens baseadas em amostragem de Monte Carlo para inferência fazem uso de **teoremas limite**, como a lei dos grandes números, para justificar sua validade.
- Quando adicionamos mais uma dimensão a esta amostragem e adotamos esquemas MCMC, são necessários teoremas limite mais fortes.
 - ► Teoremas ergódicos para cadeias de Markov, como os dados nas equações (1) e (2) são esses resultados úteis.
- Este procedimento necessariamente depende de esperar até que a cadeia de Markov **convirja** para a distribuição invariante alvo, e então amostrar desta distribuição.

Avaliando a convergência das saídas do MCMC

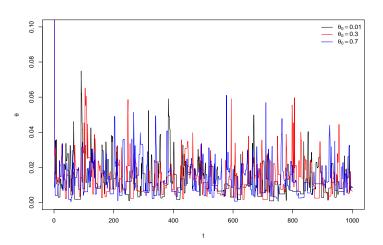
- No entanto, como saber que a cadeia de fato convergiu para a distribuição invariante?
- Nesta aula, vamos considerar algumas estratégias para avaliação da convergência das cadeias geradas pelos métodos MCMC.
- ► Também veremos um exemplo de aparente convergência, mas que a distribuição *a posteriori* é imprópria.

Gráficos de traço ou histórico

- Os gráficos de histórico (traço da cadeia) são um dos métodos mais antigos de avaliar qualitativamente o desempenho da amostragem MCMC.
- O número de iteração MCMC está no eixo x e o valor do parâmetro gerado em cada iteração está no eixo y.
- Os valores sucessivos são unidos por uma linha.
- Quando mais de uma cadeia foi rodada, as linhas de todas as cadeias são apresentadas em diferentes cores no mesmo gráfico.

Gráficos de traço ou histórico

▶ De volta ao exemplo (θ , prob. de defeituoso).



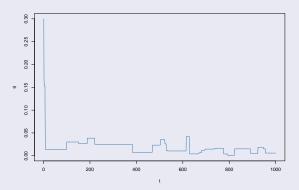
Gráficos de traço ou histórico

- Apesar do fato de termos iniciado as três cadeias a partir de valores iniciais (bastante) diferentes, elas imediatamente passam a gerar valores da mesma faixa do espaço paramétricos.
- Além disso, elas se parecem com ruído branco apenas rabiscos aleatórios nesse intervalo, sem nenhum padrão consistente.
 - Estas são características da rápida convergência MCMC (good mixing).

Gráficos de traco ou histórico

Exemplo de poor mixing

Considere mais uma vez o exemplo de estimar a probabilidade de defeituosos, θ , utilizando o mesmo modelo, com o algoritmo M-H, porém com a distribuição proposta Beta(1,1).



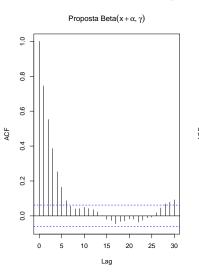
- Mencionamos que geralmente há dependência nas amostras produzidas por uma cadeia de Markov.
- A autocorrelação é uma medida quantitativa dessa dependência.
- ➤ Os valores de autocorrelação devem estar entre -1 (significando correlação negativa perfeita) e 1.

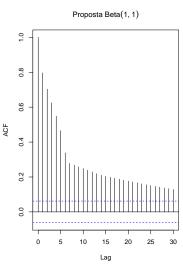
- A autocorrelação de defasagem (lag) 1 na saída do MCMC é a correlação entre amostras da mesma cadeia separadas por 1 iteração.
 - Em nosso exemplo, podemos chamar os valores extraídos de iterações sucessivas de $\theta^{(1)}, \theta^{(2)}, \theta^{(3)}$ e assim por diante.
 - ► Então, para calcular a autocorrelação de *lag* 1, emparelhamos $\theta^{(1)}$ com $\theta^{(2)}$, $\theta^{(2)}$ com $\theta^{(3)}$, $\theta^{(3)}$ com $\theta^{(4)}$, etc.
- ▶ Da mesma forma, a autocorrelação de lag k é a correlação entre amostras extraídas com k iterações de separação.

- Em um gráfico de autocorrelação, as defasagens estão no eixo x e a altura de cada barra representa a magnitude da autocorrelação nessa defasagem.
- ▶ A primeira barra (para *lag* 0) sempre tem uma altura de 1; ela fornece uma escala visual com a qual comparar as alturas das barras restantes.
- Normalmente, na saída do MCMC, a autocorrelação de lag 1 é positiva e a autocorrelação diminui à medida que a defasagem aumenta até atingir uma defasagem limite além do qual é essencialmente 0.

Uma cadeia de Markov na qual a **autocorrelação é grande na defasagem 1** e **decai lentamente à medida que a defasagem aumenta** é dita ser *mix slowly*, e convergirá lentamente em todos os três sentidos:

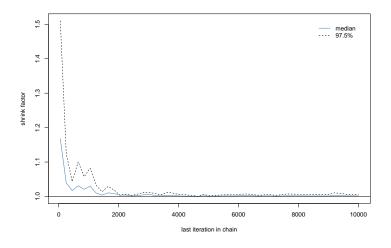
- 1. levará muito tempo para encontrar sua distribuição estacionária;
- uma vez na distribuição estacionária, serão necessárias muitas iterações para explorar todo o suporte da distribuição;
- e um número muito grande de iterações será necessário para obter uma estimativa útil e precisa das características da distribuição a posteriori.





- Além das verificações visuais de convergência, existem também verificações numéricas.
- Uma verificação numérica popular é uma medida de quanta variância existe entre as cadeias em relação a quanta variância existe dentro das cadeias.
- ▶ A ideia é que, se todas as cadeias se estabeleceram em uma amostragem representativa da distribuição invariante, a diferença média entre as cadeias deve ser a mesma que a diferença média (entre etapas) dentro das cadeias.
- Mas, se uma ou mais cadeias ficarem "presas" (em um subconjunto do espaço paramétrico), aumentará a variação entre as cadeias em relação à variação dentro da cadeia.

A figura a seguir mostra o gráfico dessa medida.



- Podemos ver que durante o período de inicial, a medida excede muito 1.0.
- Após o período de inicial, a medida rapidamente se aproxima muito de 1.0.
 - Poderia ser utilizado para especificar o período de burn-in?

A medida numérica específica é chamada de estatística Gelman-Rubin¹, ou estatística Brooks-Gelman-Rubin², ou o "fator de redução de escala potencial", ou simplesmente o "fator de encolhimento" (shrink factor).

¹Andrew Gelman. Donald B. Rubin. Inference from Iterative Simulation Using Multiple Sequences. *Statist. Sci.* 7 (4) 457 - 472, November, 1992. https://doi.org/10.1214/ss/1177011136

²Stephen P. Brooks & Andrew Gelman (1998) General Methods for Monitoring Convergence of Iterative Simulations, *Journal of Computational and Graphical Statistics*, 7:4, 434-455, DOI: 10.1080/10618600.1998.10474787

- ▶ Intuitivamente, seu valor é 1.0 se as cadeias forem totalmente convergentes, mas seu valor é maior que 1.0 se houver cadeias órfãs ou presas.
- Como uma heurística, se a estatística Gelman-Rubin for maior que 1.1, devemos nos preocupar que talvez as cadeias não tenham convergido adequadamente.
- ➤ A definição exata da estatística Gelman-Rubin envolve muitos detalhes que não são essenciais para os propósitos do nosso curso.

- Há uma situação importante, no entanto, onde a amostragem MCMC pode levar a inferências absurdas.
- É aqui que se recorre à amostragem MCMC sem perceber que a distribuição a posteriori alvo não é uma distribuição de probabilidade, mas imprópria.

Probabilidade de defeituosos ()

Lembre-se que, neste problema, $(X|Y,\theta) \sim bin(Y,\theta)$, onde $(Y|\lambda) \sim Poi(\lambda)$. Anteriormente, trabalhamos com uma média conhecida λ , mas vamos ver agora se é possível lidar com esse problema com λ desconhecida. Como Y não é observado e apenas X é observado, existe um problema de "identificação" aqui, como pode ser visto observando que $(X|\theta) \sim Poi(\lambda\theta)$. Já temos a distribuição a priori Beta (α,γ) em θ . Suponha que $0<\alpha\leq 1$. Considere uma distribuição a priori independente em λ de acordo com $g(\lambda) \propto I(\lambda>0)$. Então,

$$g(\lambda, \theta|x) \propto \exp(-\lambda \theta) \lambda^x \theta^{x+\alpha-1} (1-\theta)^{\gamma-1}, 0 < \theta < 1, \lambda > 0.$$

Esta densidade conjunta é imprópria porque

$$\begin{split} &\int_0^\infty \int_0^1 \exp(-\lambda \theta) \lambda^x \theta^{x+\alpha-1} (1-\theta)^{\gamma-1} d\theta d\lambda \\ &= \int_0^1 \left(\int_0^\infty \exp(-\lambda \theta) \lambda^x d\lambda \right) \theta^{x+\alpha-1} (1-\theta)^{\gamma-1} d\theta \\ &= \int_0^1 \frac{\Gamma(x+1)}{\theta^{x+1}} \theta^{x+\alpha-1} (1-\theta)^{\gamma-1} d\theta \\ &= \Gamma(x+1) \int_0^1 \theta^{\alpha-2} (1-\theta)^{\gamma-1} d\theta = \infty. \end{split}$$

- De fato, as distribuições marginais (a posteriori) também são impróprias.
- No entanto, ela possui distribuições condicionais completas que são próprias (CUIDADO!):

$$(\lambda|\theta,x) \sim Gama(x+1,\theta)$$

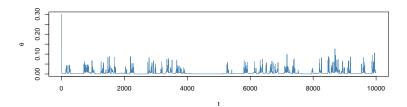
 $g(\theta|\lambda,x) \propto \exp(-\lambda\theta)\theta^{x+\alpha-1}(1-\theta)^{\gamma-1}.$

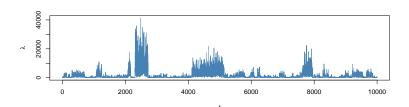
- Assim, por exemplo, o amostrador de Gibbs pode ser empregado com sucesso com essas condicionais completas próprias.
- Para gerar θ de $g(\theta|\lambda,x)$, pode-se usar o algoritmo M-H independente descrito anteriormente.
 - Este algoritmo é conhecido como Metropolis in Gibbs³
- O algoritmo é válido como um método MCMC, desde que a distribuição a posteriori seja própria. Neste exemplo, ilustramos o método, mas salientamos que qualquer inferência sobre as distribuições marginais a posteriori derivadas desta amostra será totalmente errônea.

³Também chamando de Metropolis *within* Gibbs, ou, Gibbs com passo de Metropolis.

```
# Configuração
x <- 1
alpha <- 1
gamma <- 49
# lambda <- 100
n <- 10000
theta <- vector(length = n)
lambda <- vector(length = n)</pre>
```

```
# Amostrador de Gibbs
theta[1] <-0.3 # theta 0 = 0.3
for (t, in 1:(n-1)){
  lambda[t] \leftarrow rgamma(n = 1, shape = x + 1, rate = theta[t])
  # Passo de M-H
  theta cand <- rbeta(
    n = 1, shape1 = x + alpha, shape2 = gamma)
  rho <- min(exp(-lambda[t] * (theta cand - theta[t])), 1)</pre>
  theta[(t+1)] <- sample(c(theta_cand, theta[t]),
                           size = 1.
                           prob = c(rho, 1 - rho))
lambda[n] \leftarrow rgamma(n = 1, shape = x + 1, rate = theta[n])
```





- ▶ De fato, a não convergência da cadeia encontrada no último exemplo está longe de ser incomum.
- Muitas vezes, quando temos uma distribuição a priori hierárquica, a distribuição no estágio final da hierarquia é uma "priori objetiva"⁴ imprópria.
- Então não é fácil verificar se a posteriori conjunta é própria.
- Então, nenhum dos teoremas sobre a convergência das cadeias pode se aplicar, mas a cadeia ainda pode parecer convergir.
- ► Nesses casos, a inferência baseada no MCMC pode ser enganosa no sentido do que foi visto no exemplo acima.

⁴A priori de Jeffreys e a priori de Berger-Bernardo são regras de especificação da distribuição *a priori* conhecidas como "objetivas" (em contraste com a elicitação da *priori* a partir do conhecimento [subjetivo] do pesquisador).

Para casa

- Rodar os códigos dos exemplos de aula.
 - Trazer as dúvidas para o Fórum Geral do Moodle e para a próxima aula.
- Atividade de avaliação (Moodle).

Próxima aula

► Modelos bayesianos hierárquicos (introdução).

Por hoje é só!

Bons estudos!

