## Mistura de Normais com Variância Contaminada

Caio Gabriel Barreto Balieiro Taiguara Melo Tupinambás Walmir dos Reis Miranda Filho

Programa de Pós-Graduação em Estatística Departamento de Estatística - UFMG

02 de dezembro de 2019

## Sumário

- Introdução
- Método de Quadratura de Riemann
- 3 Reamostragem por importância sequêncial(SIR)
- Integração via Monte Carlo em cadeias de Markov
- Considerações finais

- Introdução
- 2 Método de Quadratura de Riemann
- 3 Reamostragem por importância sequêncial(SIR)
- 4 Integração via Monte Carlo em cadeias de Markov
- Considerações finais



- O presente trabalho tem como objetivo obter, dada uma densidade a posteriori conjunta dos parâmetros de um modelo probabilístico para uma amostra previamente observada, as densidades a posteriori marginais de cada parâmetro.
- Além disso, deseja-se obter as estatísticas de média; variância; assimetria e curtose associadas as densidades a posteriori marginais de cada parâmetro, a partir da implementação de três métodos numéricos:
- Integração via quadratura de Riemann;
- Reamostragem por importância sequencial (em inglês, Sequential Importance Resampling, ou SIR);
- Integração via Monte Carlo em cadeias de Markov (em inglês, Markov Chain Monte Carlo, ou MCMC) com inovações dadas pelo algoritmo de Metropolis-Hastings (MH).

• Sejam  $X_1, \ldots, X_n$  amostras aleatórias iid, condicionalmente a um vetor de parâmetros  $\theta = (\mu, \sigma^2, \nu)$ , com função densidade dada por

$$f(x|\mu, \sigma^2, \nu) = \nu \phi(x|\mu, 100\sigma^2) + (1 - \nu)\phi(x|\mu, \sigma^2), \ x \in \mathbb{R},$$
 (1)

onde  $\phi(x|\mu,\sigma^2)$  é a função densidade da distribuição normal com média  $\mu$  e variância  $\sigma^2$  avaliada no ponto x. Para o suporte de cada parâmetro, tem-se que  $\mu \in \mathbb{R}, \sigma^2 \in \mathbb{R}_+$  e  $\nu \in (0,1)$ .

- ullet Para os parâmetros em heta serão pressupostas as seguintes distribuições a priori:
- $\mu | \sigma^2 \sim N(m, V \sigma^2)$ , onde  $N(\cdot)$  denota a distribuição normal com média  $m \in \mathbb{R}$  e variância  $V \sigma^2$ , V > 0;
- ②  $\sigma^2 \sim GI(a, d)$ , onde  $GI(\cdot)$  denota a distribuição gama inversa com parâmetros de forma a > 0 e de taxa d > 0 (inverso da escala);
- $v \sim U(0,1),$  a distribuição uniforme contínua padrão.



Desta forma, a distribuição a priori conjunta assume a seguinte forma

$$p(\theta) = p(\mu|\sigma^2)p(\sigma^2)p(\nu). \tag{2}$$

Para gerar uma amostra aleatória do modelo em (1), foi utilizada uma representação hierárquica (Lachos et al., 2013) tal que

$$X_i | \mu, \sigma^2, U_i = u_i \sim N(\mu, \sigma^2 u_i^{-1}),$$
  
 $U_i | \mu \sim p_d(1, 100) : P(U_i = 100) = \nu,$  (3)

onde  $p_d(a, b)$  denota uma função de probabilidade (discreta) que atribui massa probabilística apenas aos pontos  $a \in b$ .



Com isto, nossa distribuição a posteriori é definida por

$$p(\mu, \sigma^{2}, \nu | \mathbf{x}) = \frac{f(\mathbf{x} | \mu, \sigma^{2}, \nu) \times p(\mu, \sigma^{2}, \nu)}{f(\mathbf{x})}$$

$$\propto \prod_{i=1}^{n} f(x_{i}) \times p(\mu | \sigma^{2}) \times p(\sigma^{2}) \times p(\nu)$$

$$\propto \prod_{i=1}^{n} \left[ \nu \phi(x_{i} | \mu, 100\sigma^{2}) + (1 - \nu) \phi(x_{i} | \mu, \sigma^{2}) \right] \times$$

$$\times \phi(\mu | m, V \sigma^{2}) \times \frac{d^{3}}{\Gamma(a)} \left( \frac{1}{\sigma^{2}} \right)^{a+1} \exp\left( -\frac{d}{\sigma^{2}} \right)$$

$$\propto \left( \frac{1}{\sigma^{2}} \right)^{(n+1)/2+a+1} \exp\left\{ -\frac{\left[ (\mu - m)^{2}/(2V) + d \right]}{\sigma^{2}} \right\}$$

$$\times A(\mathbf{x} | \mu, \sigma^{2}, \nu), \tag{4}$$

onde

$$\mathrm{A}(\mathbf{x}|\mu,\sigma^2,\nu) = \prod_{i=1}^n \left\{ \frac{\nu}{10} \exp\left[-\frac{(x_i-\mu)^2}{200\sigma^2}\right] + (1-\nu) \exp\left[-\frac{(x_i-\mu)^2}{2\sigma^2}\right] \right\}.$$



7 / 39

- Para o presente trabalho, foram considerados uma amostra de tamanho n=500, da mistura finita de normais com variância contaminada parametrizada de tal forma que  $\mu=11$ ;  $\sigma^2=0.64$  e  $\nu=0.2$ .
- Os valores escolhidos para os hiperparâmetros são m = 11; V = 1; a = 7 e
   d = 4 nas distribuições a priori.
- Como não se tem uma expressão fechada para  $p(\mu, \sigma^2, \nu | \mathbf{x})$ , mas apenas de seu núcleo, para obter as densidades *a posteriori* marginais de  $\mu$ ,  $\sigma^2$  e  $\nu$  dado  $\mathbf{x}$ , bem como as estatísticas associadas a cada uma delas, é necessário aproximálas por algum método numérico.

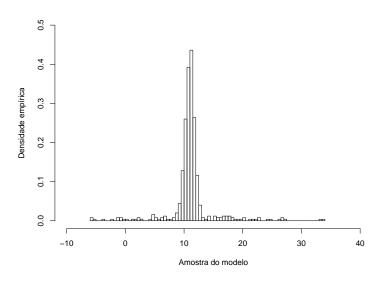
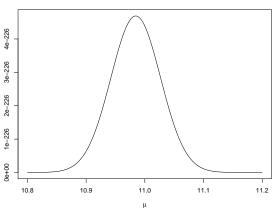


Figura 1: Histograma da amostra gerada do modelo



(a) 
$$I_{\mu}=$$
 (10.85, 11.13), dados  $\sigma^2=$  0.64,  $\nu=$  0.2

Figura 2: Intervalos de massa probabilística para cada parâmetro (variável aleatória) do núcleo de  $p(\mu, \sigma^2, \nu | \mathbf{x})$ 



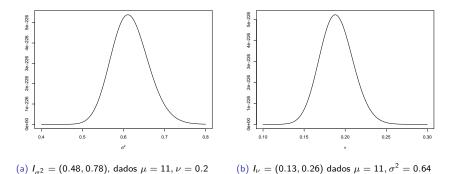


Figura 3: Intervalos de massa probabilística para cada parâmetro (variável aleatória) do núcleo de  $p(\mu, \sigma^2, \nu | \mathbf{x})$ 

11 / 39

- Introdução
- Método de Quadratura de Riemann
- 3 Reamostragem por importância sequêncial(SIR)
- 4 Integração via Monte Carlo em cadeias de Markov
- Considerações finais

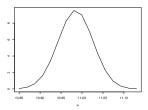
- Antes de aproximar as densidades a posteriori marginais de cada parâmetro, é necessário aproximar o inverso da constante de proporcionalidade.
- Dados três parâmetros  $(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$  e uma amostra dos dados **y**, quaisquer, suponha que se deseja aproximar a densidade *a posteriori* marginal de  $\alpha_3$  dados os pontos  $r_i, s_j, t_k$  da grade formada por todos os subintervalos de integração,  $i, j, k \in \{1, \dots, L\}$ . Temos pela quadratura de Riemann que

$$p(\alpha_{3}|\mathbf{y}) = \iint p(\alpha_{1}, \alpha_{2}, \alpha_{3}|\mathbf{y}) d\alpha_{1} d\alpha_{2}$$

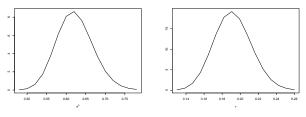
$$\Rightarrow p(t_{k}|\mathbf{y}) = \iint p(\alpha_{1}, \alpha_{2}, t_{k}|\mathbf{y}) d\alpha_{1} d\alpha_{2} \approx \sum_{i=1}^{L} \sum_{j=1}^{L} p(r_{i}, s_{j}, t_{k}|\mathbf{y}) \Delta_{i} \Delta_{j}$$

$$= \sum_{i=1}^{L} \sum_{i=1}^{L} c \cdot h(r_{i}, s_{j}, t_{k}|\mathbf{y}) \Delta_{i} \Delta_{j}.$$
(5)

- Como c, a constante de proporcionalidade, é dada pelo inverso da densidade a priori preditiva f(y), a qual é obtida integrando-se em todo o espaço paramétrico o produto entre a função de verossimilhança  $f(y|\alpha_1,\alpha_2,\alpha_3)$  e as densidades (ou funções de probabilidade) a priori para  $\alpha_1$ ,  $\alpha_2$  e  $\alpha_3$ , também é possível aproximar c pela quadratura de Riemann.
- Neste caso,  $c^{-1} \approx \sum_{i=1}^{L} \sum_{j=1}^{L} \sum_{k=1}^{L} h(r_i, s_j, t_k | y) \Delta_i \Delta_j \Delta_k$ . Com o valor aproximado para c, é possível calcular (5) nos limites superior e inferior de todos os subintervalos de um dado parâmetro e enfim obter uma aproximação da densidade a posteriori marginal deste mesmo parâmetro através de uma curva gráfica que liga todos os valores calculados.



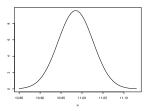
(a) Densidade a posteriori de  $\mu$ 



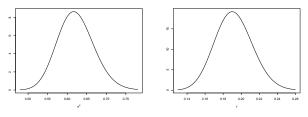
(b) Densidade a posteriori de  $\sigma^2$ 

(c) Densidade a posteriori de  $\nu$ 

Figura 4: Densidades a posteriori marginais pela quadratura de Riemann com L=15



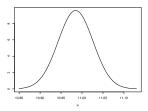
(a) Densidade a posteriori de  $\mu$ 



(b) Densidade *a posteriori* de  $\sigma^2$ 

(c) Densidade a posteriori de  $\nu$ 

Figura 5: Densidades a posteriori marginais pela quadratura de Riemann com L=50



(a) Densidade a posteriori de  $\mu$ 

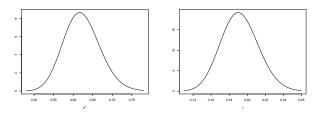


Figura 6: Densidades a posteriori marginais pela quadratura de Riemann com L=100

(b) Densidade a posteriori de  $\sigma^2$ 

(c) Densidade a posteriori de  $\nu$ 

Tabela 1: Estatísticas a posteriori para  $(\mu, \sigma^2, \nu)$  pela quadratura de Riemann

Cenário	Parâmetro	Média	Variância	Assimetria	Curtose
L = 15	$\mu$	10.9847	0.0017	0.0022	2.9603
	$\sigma^2$	0.6222	0.0022	0.2230	2.9984
	$\nu$	0.1918	0.0004	0.1572	2.9348
<i>L</i> = 50	$\mu$	10.9848	0.0017	0.0056	2.9346
	$\sigma^2$	0.6222	0.0021	0.2149	2.9625
	$\nu$	0.1918	0.0004	0.1523	2.8995
<i>L</i> = 100	$\mu$	10.9848	0.0017	0.0064	2.9284
	$\sigma^2$	0.6222	0.0021	0.2131	2.9542
	$\nu$	0.1918	0.0004	0.1512	2.8913

- Introdução
- Método de Quadratura de Riemann
- 3 Reamostragem por importância sequêncial(SIR)
- 4 Integração via Monte Carlo em cadeias de Markov
- Considerações finais

- Proposto por Gordon et al. (1993), o método SIR utiliza uma função de amostragem por importância g para aproximar (sem perda de generalidade) uma densidade de interesse p.
- Sejam  $\theta_1, \ldots, \theta_t$  uma amostra aleatória de g e  $y = (y_1, \ldots, y_n)$  uma amostra do modelo para os dados observados. Para cada ponto  $\theta_j$ ,  $j = 1, \ldots, t$ , os pesos são dados por

$$w_j(\theta_j) = \frac{p(\theta_j|\mathbf{y})/g(\theta_j)}{\sum_{j=1}^k p(\theta_j|\mathbf{y})/g(\theta_j)}.$$
 (6)

onde g é uma densidade conhecida e da qual se sabe gerar uma amostra.

• Como feito em muitos trabalhos, para g será escolhida uma densidade normal trivariada  $N_3(\mu, \Sigma)$ , onde as componentes de  $\mu$  têm suporte na reta real.

- Note que para 2 parâmetros,  $\sigma^2$  e  $\nu$ , o respectivo espaço paramétrico não é a reta real ( $\Theta_{\sigma^2}=\mathbb{R}_+$  e  $\Theta_{\nu}=[0,1]$ ). Logo, será feita uma reparametrização.
- Para isso, considere as transformações  $\theta_1=\mu, \theta_2=\log(\sigma^2)$  e  $\theta_3=\log[\nu/(1-\nu)]$ . Assim, a expressão do núcleo reparametrizado é dada por

$$p(\theta_{1}, \theta_{2}, \theta_{3} | \mathbf{x}) = p(\theta_{1} = \mu, \theta_{2} = \log(\sigma^{2}), \theta_{3} = \log[\nu/(1 - \nu)] | \mathbf{x})$$

$$= p(\mu = \theta_{1}, \sigma^{2} = \exp(\theta_{2}), \nu = 1/[1 + \exp(-\theta_{3})] | \mathbf{x}) \times |J(\theta_{1}, \theta_{2}, \theta_{3})|$$

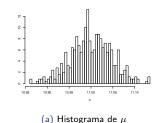
$$\propto [\exp(\theta_{2})]^{-[(n+1)/2 + a+1]} \times \exp\left\{-\frac{[(\theta_{1} - m)^{2}/(2V) + d]}{\exp(\theta_{2})}\right\}$$

$$\times A^{*}(\mathbf{x}|\theta_{1}, \theta_{2}, \theta_{3}) \times \frac{\exp(\theta_{2}) \exp(\theta_{3})}{[1 + \exp(-\theta_{3})]^{-2}}$$

$$\propto \left(\frac{1}{\sigma^{2}}\right)^{\frac{n+1}{2 + a+1}} \times \exp\left\{-\frac{[(\mu - m)^{2}/(2V) + d]}{\sigma^{2}}\right\} \times A(\mathbf{x}|\mu, \sigma^{2}, \nu)$$

$$\times \sigma^{2} \nu^{3} (1 - \nu)^{-1}.$$
(7)

- Para a amostra de tamanho n=500 da mistura finita de normais com variância contaminada tal que  $\mu=11;~\sigma^2=0.64;~\nu=0.2;~m=11;~V=1;~a=7$  e d=4 (Figura 1).
- Para as médias das componentes desta distribuição, será fixado  $\mu = (\theta_1, \theta_2, \theta_3) = (\mu, \log(\sigma^2), \log[\nu/(1-\nu)]) = (11, \log(0.64), \log[0.2/0.8]).$
- Para a matriz de covariância  $\Sigma$ , cada elemento da diagonal principal será dado pelo quadrado de 1/6 do intervalo de massa probabilística do parâmetro correspondente.
- Esta escolha se justifica pelo fato de que as distribuições mostradas de 2a a
   3b têm comportamento próximo à normalidade.



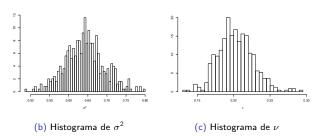
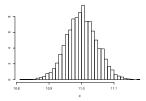


Figura 7: Densidades a posteriori marginais pela método SIR com k = 500



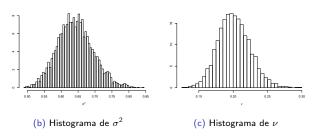
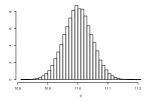


Figura 8: Densidades a posteriori marginais pela método SIR com k = 5000

4 中 x 4 图 x 4 图 x 4 图 x



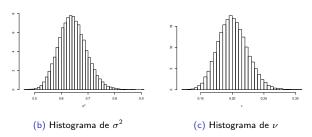


Figura 9: Densidades a posteriori marginais pela método SIR com k = 50000

Tabela 2: Estatísticas a posteriori para  $(\mu, \sigma^2, \nu)$  pelo método SIR

Cenário	Parâmetro	Média	Variância	Assimetria	Curtose
k = 500	$\mu$	11.0003	0.0023	-0.0610	3.0351
	$\sigma^2$	0.6422	0.0026	0.1261	3.1453
	$\nu$	0.2028	0.0006	0.3510	3.5475
k = 5000	$\mu$	11.0006	0.0022	0.0216	3.0234
	$\sigma^2$	0.6418	0.0027	0.2349	3.0118
	$\nu$	0.2013	0.0005	0.2485	3.1646
k = 50000	$\mu$	11.0002	0.0022	-0.0081	3.0451
	$\sigma^2$	0.6420	0.0027	0.2353	3.1153
	$\nu$	0.2009	0.0005	0.2608	3.0849

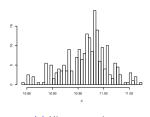
- Introdução
- Método de Quadratura de Riemann
- 3 Reamostragem por importância sequêncial(SIR)
- Integração via Monte Carlo em cadeias de Markov
- Considerações finais

- Por fim, será usado o algoritmo de Metropolis-Hastings (Metropolis et al., 1953; Hastings, 1970), aqui abreviado por MH, no método iterativo MCMC.
- Assim como o SIR, o algoritmo MH também é baseado no uso de uma distribuição auxiliar ou proposta, aqui denotada por q(y,z). Assumindo-se que na interação  $j, j=1,\ldots,k$  a cadeia está no estado  $y^{(j)}$ , a posição da mesma na iteração j+1, denotada por  $y^{(j+1)}$ , será dada após:
- Propor uma transição ou movimento para  $y^*$ , onde  $y^*$  é gerada de  $q(y^{(j)}, \cdot)$ , a distribuição proposta, e, o valor inicial da cadeia  $y^{(1)}$ ;
- Aceitar a transição proposta com probabilidade

$$\rho(\mathbf{y}^{(j)}, \mathbf{y}^*) = \min\left(1, \frac{p(\mathbf{y}^*)/q(\mathbf{y}^{(j)}, \mathbf{y}^*)}{p(\mathbf{y}^{(j)})/q(\mathbf{y}^*, \mathbf{y}^{(j)})}\right)$$
(8)

e neste caso atribuir  $y^{(j+1)} = y^*$  ou rejeitar a transição proposta e atribuir  $y^{(j+1)} = y^{(j)}$ , com probabilidade  $1 - \rho(y^{(j)}, y^*)$ .

- Para decidir sobre a aceitação ou não de y\* quando amostrada a cada passo
   j, gere uma amostra u<sub>1</sub>,..., u<sub>k</sub>, onde k é o total de iterações prefixadas, da distribuição uniforme padrão U(0,1), independentemente de y\*.
- Se a probabilidade de aceitação  $\rho(y^{(j)}, y^*)$  for maior do que ou igual a  $u_j$ , então a transição proposta é aceita. Do contrário, ela é rejeitada.
- Para a distribuição proposta  $q(\cdot)$  também será escolhida uma normal trivariada  $N_3(\mu, \Sigma)$ , com valores do vetor de médias, e será reutilizado a reparametrização  $\mu = (\mu, \log(\sigma^2), \log[\nu/(1-\nu)]) = (11, \log(0.64), \log[0.2/0.8])$  e da matriz de covariância  $\Sigma = \mathrm{diag}\{0.0022, 0.0065, 0.0203\}$ .
- É necessário definir um estado inicial da cadeia, em geral com densidade conjunta muito baixa, escolheu-se o ponto  $y^{(1)} = (10.86, \log(0.50), \log(0.14/0.86))$ .



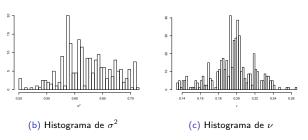
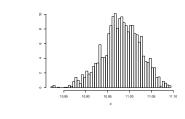


Figura 10: Densidades a posteriori marginais pelo método MCMC-MH, k = 500



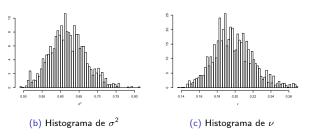
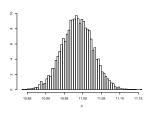


Figura 11: Densidades a posteriori marginais pela método MCMC-MH, k = 5000



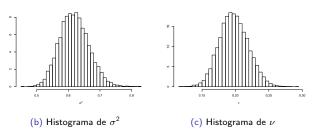


Figura 12: Densidades a posteriori marginais pela método MCMC-MH, k = 50000

Tabela 3: Estatísticas a posteriori para  $(\mu, \sigma^2, \nu)$  pelo método MCMC-MH

Cenário	Parâmetro	Média	Variância	Assimetria	Curtose
k = 500	$\mu$	10.9672	0.0018	-0.3768	3.2193
	$\sigma^2$	0.6226	0.0020	-0.0684	2.6117
	$\nu$	0.1957	0.0006	-0.3313	3.2991
k = 5000	$\mu$	10.9818	0.0019	-0.2466	2.9894
	$\sigma^2$	0.6197	0.0023	0.2372	3.0057
	$\nu$	0.1977	0.0005	0.3878	3.2038
k = 50000	$\mu$	10.9852	0.0017	-0.0272	2.9451
	$\sigma^2$	0.6188	0.0021	0.2472	3.1088
	$\nu$	0.1978	0.0005	0.1331	2.8971

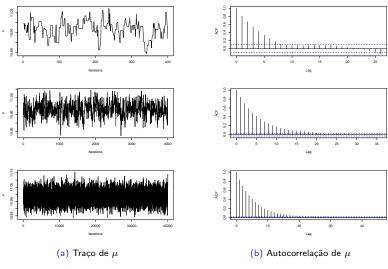


Figura 13: Traço e autocorrelação da cadeia de  $\mu$ ,  $k = \{500, 5000, 50000\}$ , respectivamente

34 / 39

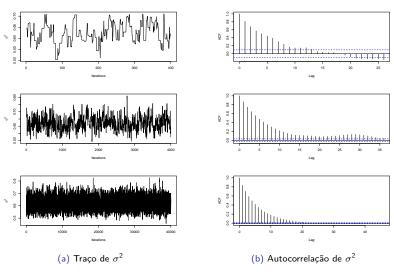


Figura 14: Traço e autocorrelação da cadeia de  $\sigma^2$ ,  $k=\{500,5000,50000\}$ , respectivamente

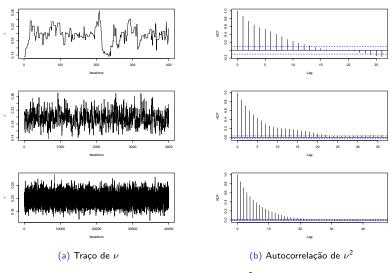


Figura 15: Traço e autocorrelação da cadeia de  $\nu^2$ ,  $k=\{500,5000,50000\}$ , respectivamente

- Introdução
- Método de Quadratura de Riemann
- 3 Reamostragem por importância sequêncial(SIR)
- 4 Integração via Monte Carlo em cadeias de Markov
- Considerações finais



- Neste trabalho, as densidades marginais a posteriori dos parâmetros de interesse  $(\mu, \sigma^2, \nu)$  foram aproximadas por três métodos numéricos, para uma amostra observada de tamanho 500.
- Para os três métodos implementados, foram desenvolvidos 3 cenários diferentes, para análise de convergência e complexidade computacional.
- Na quadratura de Riemann, 3 quantidades diferentes de intervalos de integração L foram escolhidos: 15, 50 e 100. O primeiro resultado não é muito satisfatório, apesar de aproximar bem os dois primeiros momentos.
- Para 50 e 100 subintervalos, a aproximação é bem melhor, mas o custo computacional é bem maior, crescendo exponencialmente em relação à dimensão do espaço paramétrico  $\mathcal{O}(L^n)$ , com n igual a 3.

- Para ambos os métodos estocásticos SIR e MCMC foram considerados tamanhos amostrais a posteriori k iguais a 500, 5000 e 50000.
- Nos dois métodos, para k igual a 500, as distribuições marginais aproximadas não foram muito satisfatórias, apresentando muitos outliers e modas locais.
- Para o SIR, a partir de 5000 amostras as distribuições marginais ficam bem mais suaves, com assimetria e curtose melhor definidos.
- No MCMC, ainda se observa uma melhoria considerável de k igual a 5000 para k igual a 50000 passos de integração, quando o método parece convergir.
- Por fim, podemos concluir que, para o modelo probabilístico estudado, todos os três métodos desempenham bem a tarefa de aproximar a distribuição a posteriori, se escolhidos hiperparâmetros de convergência adequados.