

Inferência Bayesiana e algoritmos MCMC

Prof. Caio Azevedo

Visão geral: inferência Bayesiana

- Seja θ um parâmetro associado a um determinado modelo $p(\mathbf{x}|\theta)$ verossimilhança para o qual assumimos uma priori $p(\theta)$.
- Posteriori:
$$p(\theta|\mathbf{x}) = \frac{p(\mathbf{x}|\theta)p(\theta)}{\int_{\Theta} p(\mathbf{x}|\theta)p(\theta)d\theta}$$
- Problema (nos modelos mistos): é muito complicado obter as posterioris marginais de interesse, de forma analítica. Se $\theta = (\theta_1, \theta_2)'$ elas seriam dadas por $p(\theta_1|\mathbf{x})$ e $p(\theta_2|\mathbf{x})$.
- Distribuições condicionais completas: $p(\theta_1|\theta_2, \mathbf{x})$ e $p(\theta_2|\theta_1, \mathbf{x})$.
- Uma solução maximizar a posteriori (marginal) dos parâmetros dos itens.

Aplicação de IB nos modelos estudados

- MMM : parâmetros de interesse $(\beta^t, \theta^t)^t$.
- MLM : parâmetros de interesse $(\beta^t, \theta_1^t, \theta_2^t, \mathbf{b}^t)^t$.
- MLGM : parâmetros de interesse $(\beta^t, \theta^t, \phi, \mathbf{b}^t)^t$.
- Usualmente, em IB, trabalha-se com a verossimilhança completa (original) ao invés da marginal.

Aplicação de IB nos modelos estudados

- Mesmo sob o modelo multivariado marginal (o mais simples) não é possível obter as distribuições a posteriori marginais de interesse (por conta da estruturação das matrizes de covariância) veja http://www.ime.unicamp.br/~cnaber/aula_Mod_Mult_Marg_ADL_2S_2018.pdf.
- Nem mesmo as algumas das chamadas distribuições condicionais completas, possuem forma conhecida.
- Uma forma de obter condicionais completas com forma conhecida pode ser vista em: <https://link.springer.com/article/10.1007/s11222-014-9518-5>.

Posteriores: MMM

$$\begin{aligned} p(\boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\theta} | \mathbf{y}) &\propto \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{j=1}^n (\mathbf{Y}_j - \mathbf{X}_j \boldsymbol{\beta})' \boldsymbol{\Sigma}_j^{-1} (\mathbf{Y}_j - \mathbf{X}_j \boldsymbol{\beta}) \right\} |\boldsymbol{\Sigma}_j|^{-n/2} p(\boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\theta}) \\ &= \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{j=1}^n (\mathbf{Y}_j - \mathbf{X}_j \boldsymbol{\beta})' \boldsymbol{\Sigma}_j^{-1} (\mathbf{Y}_j - \mathbf{X}_j \boldsymbol{\beta}) \right\} |\boldsymbol{\Sigma}_j|^{-n/2} p(\boldsymbol{\beta}) p(\boldsymbol{\theta}) \end{aligned}$$

$\boldsymbol{\Sigma}_j = \boldsymbol{\Sigma}_j(\boldsymbol{\theta})$. Posteriores marginais: calcular a integral para cada parâmetro em $\boldsymbol{\vartheta} = (\boldsymbol{\beta}^t, \boldsymbol{\theta}^t)^t$, com relação as demais componentes, ou seja:

$$p(\boldsymbol{\vartheta}_k | \mathbf{y}) = \int_{\boldsymbol{\vartheta}_{(-k)}} p(\boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\theta} | \mathbf{y}) d\boldsymbol{\vartheta}_{(-k)}$$

Posteriores: MLM

$$\begin{aligned} p(\boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\theta}_1, \boldsymbol{\theta}_2, \mathbf{b} | \mathbf{y}) &\propto \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{j=1}^n (\mathbf{Y}_j - \mathbf{X}_j \boldsymbol{\beta})' \boldsymbol{\Sigma}_j^{-1} (\mathbf{Y}_j - \mathbf{X}_j \boldsymbol{\beta}) \right\} |\boldsymbol{\Sigma}_j|^{-n/2} \\ &\times p(\boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\theta}_1) p(\mathbf{b} | \boldsymbol{\Psi}) p(\boldsymbol{\theta}_2) \\ &= \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{j=1}^n (\mathbf{Y}_j - \mathbf{X}_j \boldsymbol{\beta})' \boldsymbol{\Sigma}_j^{-1} (\mathbf{Y}_j - \mathbf{X}_j \boldsymbol{\beta}) \right\} |\boldsymbol{\Sigma}_j|^{-n/2} \\ &\times p(\boldsymbol{\beta}) p(\boldsymbol{\theta}_1) p(\mathbf{b} | \boldsymbol{\Psi}) p(\boldsymbol{\theta}_2) \end{aligned}$$

Posteriores: MLM

$\Sigma_j = \Sigma_j(\theta_1)$, $\Psi = \Psi(\theta_2)$. Posteriores marginais: calcular a integral para cada parâmetro em $\vartheta = (\beta^t, \theta_1^t, \theta_2^t, \mathbf{b}^t)^t$, com relação as demais componentes, ou seja:

$$p(\vartheta_k | \mathbf{y}) = \int_{\vartheta_{(-k)}} p(\beta, \theta_1, \theta_2, \mathbf{b} | \mathbf{y}) d\vartheta_{(-k)}$$

Posteriores: MLGM

$$\begin{aligned} p(\boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\theta}, \phi, \mathbf{b} | \mathbf{y}) &\propto \exp \left\{ \phi \sum_{j=1}^n \left[\sum_{i=1}^{k_j} y_{ij} \theta_{ij} - b(\theta_{ij}) \right] + \sum_{j=1}^n \sum_{i=1}^{k_j} c(y_{ij}, \phi) \right\} \\ &\times p(\boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\theta}, \phi) p(\mathbf{b} | \boldsymbol{\Psi}) \\ &= \exp \left\{ \phi \sum_{j=1}^n \left[\sum_{i=1}^{k_j} y_{ij} \theta_{ij} - b(\theta_{ij}) \right] + \sum_{j=1}^n \sum_{i=1}^{k_j} c(y_{ij}, \phi) \right\} \\ &\times p(\boldsymbol{\beta}) p(\boldsymbol{\theta}) p(\phi) p(\mathbf{b} | \boldsymbol{\Psi}) \end{aligned}$$

Posteriores: MLGM

$\Psi = \Psi(\theta_2)$. Posteriores marginais: calcular a integral para cada parâmetro em $\vartheta = (\beta^t, \theta^t, \phi^t, \mathbf{b}^t)^t$, com relação as demais componentes, ou seja:

$$p(\vartheta_k | \mathbf{y}) = \int_{\vartheta_{(-k)}} p(\beta, \theta, \phi, \mathbf{b} | \mathbf{y}) d\vartheta_{(-k)}$$

Priors

- $\beta \sim N_p(\mu_\beta, \Psi_\beta)$.
- $\theta_1, \theta_2, \theta$: depende da estrutura adotada. AR(1) - $\sigma^2 \sim \text{gama}(\alpha_{\sigma^2}, \beta_{\sigma^2})$, $\rho \sim U(0, 1)$; ARH(1) $\sigma_i^2 \sim \text{gama}(\alpha_{\sigma_i^2}, \beta_{\sigma_i^2})$, $i = 1, 2, \dots, T(k_j)$, mesma priori para ρ .
- $\phi \sim IG(\alpha_\phi, \beta_\phi)$.
- $\mathbf{b}_j \sim N_q(0, \Psi)$ (outras opções como t de Student multivariada, normal assimétrica multivariada, mistura de escala (skew) normal).
- $\Psi \sim IW_q(\nu_\Psi, \mathbf{W}_\Psi)$.

Obtenção das posteriores

- Como visto, não é possível obter, analiticamente, as distribuições marginais.
- Alternativa: emprego de algum método numérico.
 - Algoritmos MCMC.
 - INLA (Integrated Nested Laplace Approximation).
 - Maximização (obtenção da moda a posteriori).

Exemplo da normal bivariada

- Seja $\mathbf{Y} = (Y_1, Y_2) \sim N_2(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$. Desejamos estimar as fdp's marginais de Y_1, Y_2 , com $\boldsymbol{\mu}$ e $\boldsymbol{\Sigma}$, conhecidos.
- Sabemos que $Y_i \sim N(\mu_i, \sigma_i^2), i = 1, 2$.
- Suponha, no entanto, que saibamos apenas que:

$$Y_1|y_2, \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma} \sim N_1(\bar{\mu}_1, \bar{\sigma}_1^2), \text{ em que } \bar{\mu}_1 = \mu_1 + \sigma_{12} (\sigma_2^2)^{-1} (y_2 - \mu_2) \text{ e } \bar{\sigma}_1^2 = \sigma_1^2 - (\sigma_{12})^2 (\sigma_2^2)^{-1}.$$

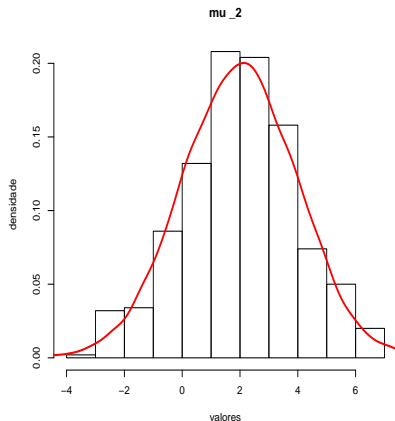
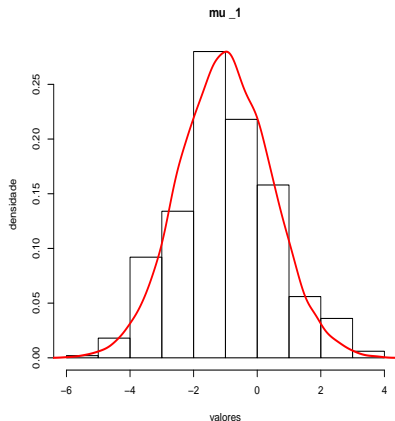
$$Y_2|y_1, \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma} \sim N_1(\bar{\mu}_2, \bar{\sigma}_2^2), \text{ em que } \bar{\mu}_2 = \mu_2 + \sigma_{12} (\sigma_1^2)^{-1} (y_1 - \mu_1) \text{ e } \bar{\sigma}_2^2 = \sigma_2^2 - (\sigma_{12})^2 (\sigma_1^2)^{-1}.$$

- As distribuições condicionais podem ser utilizadas para estimar as distribuições marginais?

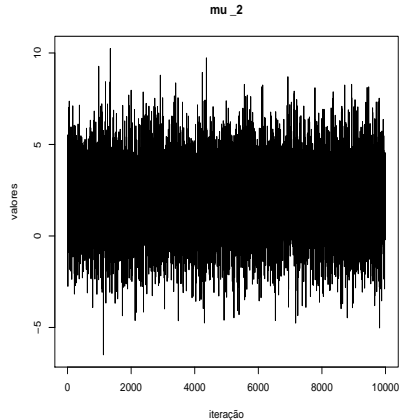
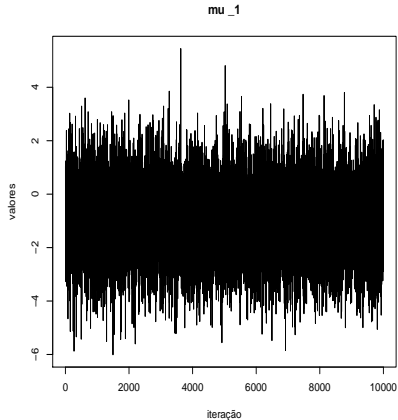
Simulação iterativa

- Simule $y_1^{(1)} \sim N(0, 1)$, por exemplo. Com este valor, simule $y_2^{(1)} | y_1^{(1)}, \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}$.
- Repita o passo acima R vezes, obtendo-se $(y_1^{(1)}, y_2^{(1)}), (y_1^{(2)}, y_2^{(2)}), \dots, (y_1^{(R)}, y_2^{(R)})$

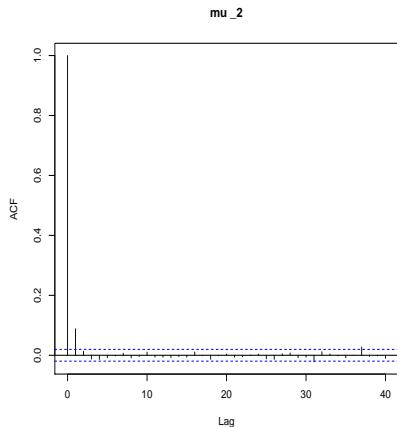
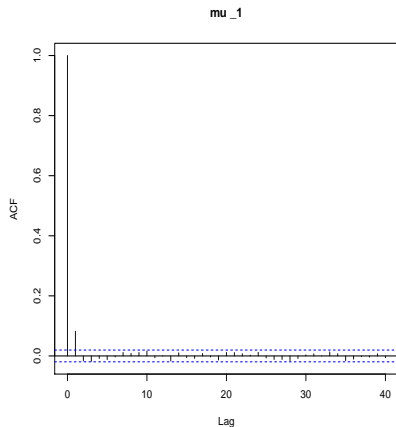
Histograma das amostras MCMC



Gráficos das trajetórias (Trace plots) das amostras MCMC



ACF das amostras MCMC



Cadeias de Markov

- Estudo de sequências (conjuntos) de variáveis aleatórias que guardam alguma estrutura de dependência entre si.
- Exemplo: seja X_1, X_2, \dots um sequência de Bernoullis que representam resultados de lançamentos de duas moedas (0, cara ; 1, coroa).
- Caso $X_i = 0$, lança-se uma moeda com probabilidade de cara igual a 0,55, caso contrário lança-se uma moeda com probabilidade de cara igual à 0,35.

Exemplo: lançamento de moedas

- Matriz de transição

$$\mathbf{P} = \begin{bmatrix} P(X_i = 0 | x_{i-1} = 0) & P(X_i = 1 | x_{i-1} = 0) \\ P(X_i = 0 | x_{i-1} = 1) & P(X_i = 1 | x_{i-1} = 1) \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{P} = \begin{bmatrix} 0,55 & 0,45 \\ 0,35 & 0,65 \end{bmatrix}$$

- Distribuição estacionária: $\mathbf{x} = \mathbf{P}\mathbf{x}$.

Exemplo: lançamento de moedas

- Resultado: Se a Cadeia de Markov (definida pela matriz de transição), for reversível, a distribuição estacionária existe e é única.
- Distribuição estacionária: Obtida através de observações da cadeia de Markov, $\mathbf{x} = \mathbf{P}^n$, para n suficiente grande.
- Neste caso $\mathbf{x} = [0, 45; 0, 55]$

Exemplo: normal bivariado

- No exemplo da normal bivariada, a matriz de transição (que possui um número infinito não enumerável de elementos) é definida pelas densidades de transição (distribuições condicionais completas):

$$Y_1|y_2, \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}; Y_2|y_1, \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}$$

- Neste caso, faz sentido calcular $P(Y_1 \in a|y_2, \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$ e $P(Y_2 \in b|y_1, \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$, em que a, b são intervalos da reta.
- Resultado: se a Cadeia de Markov, com matriz de transição definida pelas condicionais completas, for reversível, sua distribuição estacionária será única e convergirá para as distribuições marginais de interesse.

Algoritmos de Monte Carlo via Cadeias de Markov

- O conjunto de algoritmos que permitem simular variáveis aleatórias (iterativamente) a partir das distribuições condicionais completas é conhecido como algoritmos de Monte Carlo via Cadeias de Markov (MCMC).
- Monte Carlo (resolver integrais) Cadeias de Markov (gera cadeias de Markov).
- Aplicações: obter distribuições (marginais, condicionais, conjuntas) de interesse. Em particular: Inferência Bayesiana.

Aplicações em Inferência Bayesiana

- Distribuição inversa gama $X \sim IG(r, \gamma)$:

$$p(x) = \frac{\gamma^r}{\Gamma(r)} e^{-x/\gamma} x^{-(r+1)} \mathbb{1}_{(0, \infty)}(x)$$

- Distribuição normal-inversa gama $(X, Y) \sim NIG(\mu, \nu, r, \gamma)$

$$X|y \sim N(\mu, y/\nu)$$

$$Y \sim IG(r, \gamma)$$

Continuação

- Densidade conjunta

$$p(x, y) = \frac{\sqrt{\nu}}{\sqrt{2\pi}} y^{-1/2} y^{-(r+1)} \exp\left(-\frac{\gamma}{y}\right) \exp\left\{-\frac{1}{2} \frac{\nu(x-\mu)^2}{\sigma^2}\right\} \\ \times \mathbb{1}_{(0, \infty)}(y) \mathbb{1}_{(-\infty, \infty)}(x)$$

- Distribuição marginal de X , $X \sim t_{(2r)}\left(\mu, \sqrt{\frac{\gamma}{r\nu}}\right)$,

$$p(x) = \frac{\Gamma\left(\frac{2r+1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{2r}{2}\right)\Gamma\left(\frac{1}{2}\right)} (\sqrt{2r}\delta)^{-1} \left[1 + \frac{(x-\mu)^2}{2r\delta^2}\right]^{-\frac{2r+1}{2}} \mathbb{1}_{(-\infty, \infty)}(x) \\ \delta^2 = \sqrt{\frac{\gamma}{r\nu}}$$

Aplicações em Inferência Bayesiana

- Seja $X_1|\boldsymbol{\theta}, \dots, X_n|\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\theta} = (\mu, \sigma^2)$ uma amostra aleatória de $X|\boldsymbol{\theta} \sim N(\mu, \sigma^2)$.
- Família conjugada (normal inversa gama)

$$\mu|\sigma^2 \sim N(\alpha, \sigma^2/\kappa)$$

$$\sigma^2 \sim \text{IG}(\gamma, \beta)$$

Continuação

- Posteriori conjunta

$$\mu|\mathbf{x}, \sigma^2 \sim N(\alpha^*, \sigma^2/\nu^*)$$

$$\sigma^2|\mathbf{x} \sim \text{IG}(r^*, \gamma^*)$$

em que $\nu^* = \nu + n$, $\gamma^* = \frac{1}{2} \left[\frac{n\nu}{n+\nu} (\bar{x} - \alpha)^2 + (n-1)s^2 + \gamma \right]$,

$$r^* = \frac{n}{2} + r.$$

- Além disso, $\mu|\mathbf{x} \sim t_{(2r^*)} \left(\alpha^*, \sqrt{\frac{\gamma^*}{r^*\nu^*}} \right)$.

- Assim, as posterioris marginais são: $\mu|\mathbf{x} \sim t_{(2r^*)} \left(\alpha^*, \sqrt{\frac{\gamma^*}{r^*\nu^*}} \right)$ e $\sigma^2|\mathbf{x} \sim \text{IG}(r^*, \gamma^*)$.

Continuação

- Pode-se provar que (distribuições condicionais completas):

$$\mu | \mathbf{x}, \sigma^2 \sim N(\alpha^*, \sigma^2 / \nu^*)$$

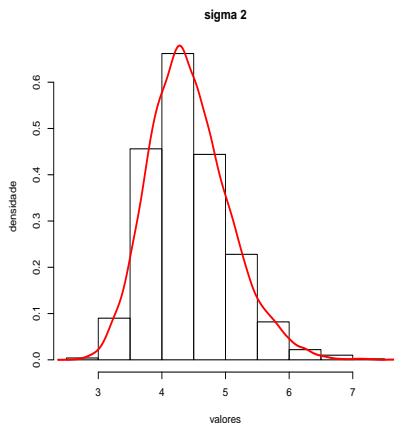
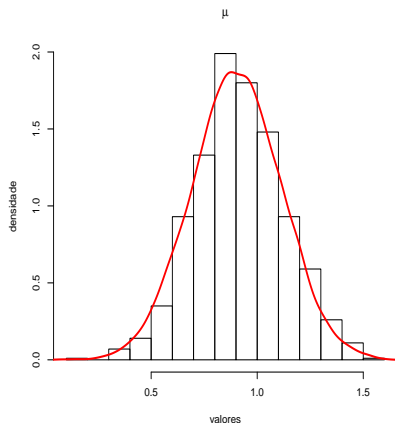
$$\sigma^2 | \mathbf{x}, \mu \sim \text{IG}(r^{**}, \gamma^{**})$$

em que

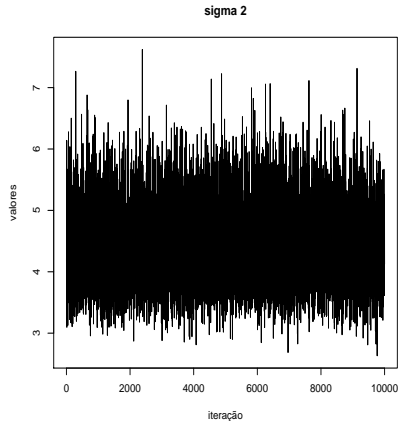
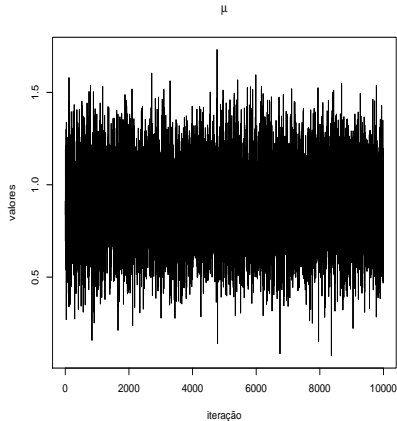
$$r^{**} = \frac{n+1}{2} + r; \gamma^{**} = \frac{n}{2} (\bar{x} - \mu)^2 + \frac{\nu}{2} (\mu - \alpha)^2 + \frac{1}{2} (n-1) s^2 + \gamma$$

$$\bar{x} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i; s^2 = \frac{1}{n-2} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2.$$

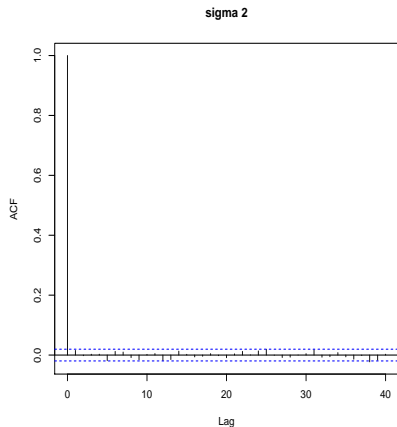
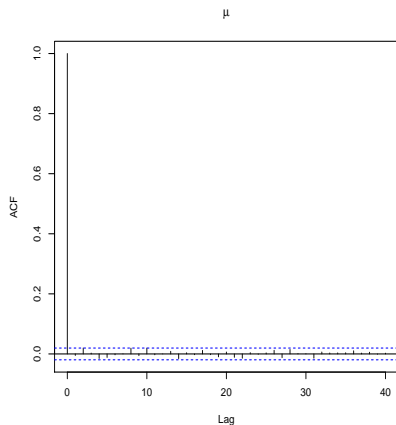
Histograma das amostras MCMC



Gráficos das trajetórias (Trace plots) MCMC



ACF das amostras MCMC



Definição geral dos algoritmos MCMC

- Seja $p(\boldsymbol{\theta}|\mathbf{x}) \propto p(\mathbf{x}|\boldsymbol{\theta})p(\boldsymbol{\theta})$ a distribuição a posteriori de interesse (com forma analítica intratável).
- Considere a seguinte partição para o (vetor) p-paramétrico $\boldsymbol{\theta} = (\boldsymbol{\theta}_1, \boldsymbol{\theta}_2, \dots, \boldsymbol{\theta}_k), k \leq p$.
- Sejam $\theta_j|\boldsymbol{\theta}_{(-j)}, \mathbf{x}, i = 1, 2, \dots, k$ em que $\boldsymbol{\theta}_{(-j)}$ denota o vetor paramétrico $\boldsymbol{\theta}$ menos a componente $\boldsymbol{\theta}_j$, as **distribuições condicionais completas**.

Definição geral dos algoritmos MCMC

- Inicie a cadeia com um conjunto de valores apropriados (respeitando o espaço paramétrico).
- Para $r = 1, 2, \dots, R$, $j = 1, 2, \dots, k$ simule $\theta_j^{(r)}$ de $\theta_j | \theta_{(-j)}^{(r-1)}, \mathbf{x}$.
- A partir de algum $B > 1$ (burn-in), retenha os valores a cada t (espaçamento) iterações (para evitar a presença de autocorrelação).
- Os valores retidos, se a cadeia tiver alcançado a convergência, corresponderá à uma amostra aleatória das posteriores (distribuições) de interesse.

Questões de interesse (verificação da convergência)

- 1 Como simular de θ_j caso a distribuição condicional completa não seja conhecida ou possível de simular diretamente?
- 2 Como verificar a convergência da cadeia gerada?
- 3 Como determinar B, t, R ?

Ferramentas para verificação de convergência

- Simular diferentes cadeias, a partir de valores iniciais diferentes.
- Colocar, num mesmo gráfico, as trajetórias (trace plots) de todas as cadeias, para cada parâmetros (B,t,R) .
- Gráficos de autocorrelação (t) .
- Acompanhar, visualmente, a evolução de momentos e/ou quantis, calculados desde o primeiro valor gerado até a iteração r , para cada valor de r (B,R) .
- Estatística de Geweke: teste de igualdade de médias para sub-amostras disjuntas de uma única cadeia (B,R) .
- Estatística de Gelman-Rubin: análise de variância entre as cadeias geradas (B,R) .

Estatística de Geweke (EG)

- Considere uma única cadeia (para cada parâmetro).
- A primeira metade da cadeia é subdividida em b intervalos disjuntos (com aproximadamente o mesmo tamanho).
- Selecionam-se amostras de tamanho n_1 e n_2 , da primeira e segunda metades respectivamente.
- Seja $\bar{\theta}_1 = \frac{1}{n_1} \sum_{r=1}^{n_1} \theta_1^{(r)}$ e $\bar{\theta}_2 = \frac{1}{n_2} \sum_{r=1}^{n_2} \theta_2^{(r)}$ (valores simulados).
- $EG = \frac{\bar{\theta}_1 - \bar{\theta}_2}{\sqrt{\frac{\hat{s}_1^2(0)}{n_1} + \frac{\hat{s}_2^2(0)}{n_2}}}$
em que $\hat{s}_i^2(0)$ é a variância da amostra calculada pela estimativa consistente da densidade espectral na frequência zero (por causa de possível existência de autocorrelação), da amostra i .

Estatística de Geweke (EG)

- Repete-se o processo acima, descartando-se o primeiro subintervalo da primeira metade da cadeia.
- Repete-se, uma segunda vez, descartando-se os dois primeiros subintervalos da primeira metade da cadeia.
- Repete-se o processo até ficar-se com somente o último subintervalo.
- Espera-se, se a cadeia tiver convergido, que a partir de um determinado “descarte”, as estatísticas não sejam mais significativas (estejam entre $(-2,2)$).

Estatística de Gelman Rubin (EGR)

- Consiste em uma análise de variância considerando M diferentes cadeias para cada parâmetro.
- Defina

$$W = \frac{1}{M} \sum_{j=1}^M s_j^2; s_j^2 = \frac{1}{R-1} \sum_{r=1}^R (\theta_j^{(r)} - \bar{\theta}_j)^2; \bar{\theta}_j = \frac{1}{R} \sum_{r=1}^R \theta_j^{(r)}$$

$$V = \frac{R}{M-1} \sum_{j=1}^M (\bar{\theta}_j - \bar{\bar{\theta}})^2; \bar{\bar{\theta}} = \frac{1}{M} \sum_{j=1}^M \bar{\theta}_j$$

$$\widehat{Var}(\theta) = \left(1 - \frac{1}{R}\right) W + \frac{M+1}{MR} V; R_c = \sqrt{\frac{\widehat{d} + 3}{\widehat{d} + 1} \frac{\widehat{Var}(\theta)}{W}}$$

Estatística de Gelman Rubin (EGR)

- É possível provar que $R_c \geq 1$. Em geral, se $R_c \leq 1,2$, então a cadeia convergiu.
- Na prática: cada cadeia (para cada parâmetro) é subdividida em intervalos. Calcula-se a estatística R_c utilizando o primeiro intervalo (descartando-se a primeira metade) de todas as M cadeias. Depois, calcula-se R_c utilizando-se os dois primeiros intervalos (descartando-se a primeira metade do intervalo resultante), depois os três primeiros (descartando-se a primeira metade do intervalo resultante), assim por diante.
- Analisa-se o comportamento da estatística (calculando-se um intervalo de confiança) ao longo desse processo.

Modelo gama

- Exemplo: posteriori associada ao modelo gama(r, λ).
- Suponha uma amostra aleatória de tamanho n de $X|r, \lambda \sim \text{gama}(r, \lambda)$, com r conhecido.

$$p(x|r) = \frac{1}{\lambda^r \Gamma(r)} e^{-x/\lambda} x^{r-1} \mathbb{1}_{(0, \infty)}(x)$$

- Priori: $p(r)$ alguma fdp com suporte em \mathcal{R}^+ .
- Verossimilhança:

$$p(\mathbf{x}|r) = \frac{1}{\lambda^{nr} \Gamma(r)^n} e^{-n\bar{x}/\lambda} \prod_{i=1}^n x_i^{r-1}$$



Priori e posteriori

- Priori ($r \sim \text{gama}(\alpha, \gamma)$ e $\lambda \sim \text{IG}(\delta, \phi)$).

$$\begin{aligned} p(r, \lambda) = p(r)p(\lambda) &= \frac{1}{\gamma^\alpha \Gamma(\alpha)} e^{-r/\gamma} r^{\alpha-1} \mathbb{1}_{(0, \infty)}(r) \\ &\times \frac{\phi^\delta}{\Gamma(\phi)} e^{-\phi/\lambda} \lambda^{-\delta-1} \mathbb{1}_{(0, \infty)}(\lambda) \end{aligned}$$

- Posteriori

$$\begin{aligned} p(r, \lambda | \mathbf{x}) &\propto \frac{1}{\lambda^{nr} \Gamma(r)^n} e^{-n\bar{x}/\lambda} \prod_{i=1}^n x_i^{r-1} \times e^{-r/\gamma} r^{\alpha-1} \\ &\times e^{-\phi/\lambda} \lambda^{-\delta-1} \mathbb{1}_{(0, \infty)}(r) \mathbb{1}_{(0, \infty)}(\lambda) \end{aligned}$$

Distribuições condicionais completas

- Condicionais completas

$$p(r|\lambda, \mathbf{x}) \propto \frac{1}{\lambda^{nr} \Gamma(r)^n} \prod_{i=1}^n x_i^{r-1} \times e^{-r/\gamma} r^{\alpha-1}$$

$$p(\lambda|r, \mathbf{x}) \propto e^{-(n\bar{x}+\phi)/\lambda} \lambda^{-nr-\delta-1}$$

- Note que: $\lambda|r, \mathbf{x} \sim \text{IG}(nr + \delta, n\bar{x} + \phi)$ mas $r|\lambda, \mathbf{x}$ não corresponde à nenhuma distribuição catalogada.
- Algoritmo: simular, iterativamente, valores para (r, λ) através das duas distribuições acima.

Simulação das distribuições condicionais completas

- Se todas as distribuições condicionais completas forem conhecidas e fáceis de simular, teremos o algoritmo do amostrador de Gibbs (“Gibbs sampling”).
- Como no exemplo anterior da distribuição normal.
- Ponto importante, identificada a distribuição condicional completa, eg, normal, inversa gama, t de Student, devemos escolher algoritmos apropriados para simular delas (eg, transformada inversa, rejeição, rejeição adaptativa, amostragem por importância).

Simulação das distribuições condicionais completas

- Caso alguma(a) distribuição(ões) condicional(is) completa(s) não seja(m) “conhecida(s)”, algum algoritmo auxiliar para simular valores dela tem de ser usado: Metropolis-Hastings, rejeição adaptativa, amostragem por corte etc.

Amostrador de Gibbs

- Inicie as cadeias com valores iniciais conveniente.

- Simule, para $r=1,2,\dots,R$:

1 $\theta_1^{(r)}$ de $\theta_1^{(r)} | \theta_2^{(r-1)}, \theta_3^{(r-1)}, \dots, \theta_k^{(r-1)}, \mathbf{x}$.

2 $\theta_2^{(r)}$ de $\theta_2^{(r)} | \theta_1^{(r)}, \theta_3^{(r-1)}, \dots, \theta_k^{(r-1)}, \mathbf{x}$.

3 $\theta_3^{(r)}$ de $\theta_3^{(r)} | \theta_1^{(r)}, \theta_2^{(r)}, \dots, \theta_k^{(r-1)}, \mathbf{x}$.

⋮

4 $\theta_k^{(r)}$ de $\theta_k^{(r)} | \theta_1^{(r)}, \theta_2^{(r)}, \dots, \theta_{k-1}^{(r)}, \mathbf{x}$.

WinBUGS

- Programa WinBugs: permite ajustar modelos complexos usando diversos algoritmos do tipo MCMC.
- Em geral, basta apenas fornecer o modelo (verossimilhança) e prioris.
- Limitações no uso de prioris impróprias (Jeffreys).
- Dispõe de mecanismos para inserir verossimilhanças e prioris que não são padrão (não constam em seu banco de dados).
- Pode ser utilizado de modo mais simples através do pacote *R2WinBUGS* do R.
- O diagnóstico de convergência pode ser facilmente realizado através do pacote *coda*, disponível no programa R.

Algoritmos para simular das cond.(tradução do manual)

- Condicional completa contínua
 - Conjugada (conhecida): amostragem direta usando algoritmos padrão.
 - Log-côncava: Rejeição adaptativa de derivação livre (Gilks, 1992).
 - Espaço paramétrico restrito: Amostragem por corte (“slice-sampling”), Neal, 1997.
 - Espaço paramétrico irrestrito: Metropolis-Hastings (adaptativo).
- Condicional completa discreta
 - Limite superior finito: transformada inversa.
 - Poisson deslocada: amostragem direta usando algoritmos padrão.

Comparação de modelos

- Seja $h(\boldsymbol{\theta}) = -2 \ln p(\mathbf{x}|\boldsymbol{\theta})$, $\boldsymbol{\theta} = (\theta_1, \dots, \theta_k)$ (quanto menor, melhor o ajuste do modelo).
- Seja $\boldsymbol{\theta}^{(1)}, \boldsymbol{\theta}^{(2)}, \dots, \boldsymbol{\theta}^{(s)}$, uma amostra MCMC válida de tamanho s .
Defina: $\bar{\boldsymbol{\theta}} = (\bar{\theta}_1, \dots, \bar{\theta}_k)$, em que $\bar{\theta}_j = \frac{1}{s} \sum_{r=1}^s \theta_j^{(r)}$, $j = 1, 2, \dots, k$.
- Defina ainda: Deviance = $\bar{D} = \frac{1}{s} \sum_{r=1}^s h(\boldsymbol{\theta}^{(s)})$ e $\hat{D} = h(\bar{\boldsymbol{\theta}})$.
- Estatística de comparação de ajuste de modelos: Deviance, $p_D = \bar{D} - \hat{D}$ e $DIC = \bar{D} + p_D$.

Comparação de modelos

- Quanto maior o valor de p_D e menor os valores do *Deviance* e do *DIC* melhor o ajuste do modelo. O WinBUGS calcula ambos.
- Atenção: mesmo o modelo que apresenta o melhor ajuste (segundo os critérios acima) pode não estar bem ajustado aos dados. Faz-se necessário, sempre, a verificação de qualidade de ajuste do modelo eleito por análise de resíduos, distribuição preditiva, etc.

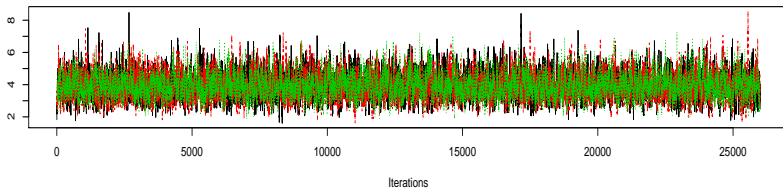
Voltando ao exemplo da potência das turbinas de aviões

- Prioris $r \sim \text{gama}(0, 01; 1/0, 01)$, $\mathcal{E}(R) = 1$, $\mathcal{V}(R) = 100$ e $\lambda \sim \text{IG}(0, 01; 0, 01)$ (vaga).
- Algoritmo WinBUGS para o ajuste do modelo.

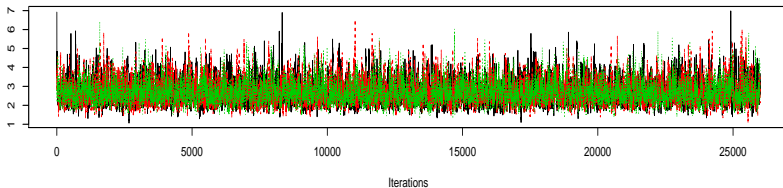
```
ComTurb
gamamodel<-function(){
  for (i in 1 : N){
    y[i]~dgamma(r, lambdaa)
  }
  r~dgamma(0.01,0.01)
  lambdaa~dgamma(0.01,0.01)
  lambda<-pow(lambdaa,-1)
}
```


Traceplots para os três conjuntos de cadeias geradas

Trace of r



Trace of λ



Autocorrelações para um dos conjuntos de cadeias

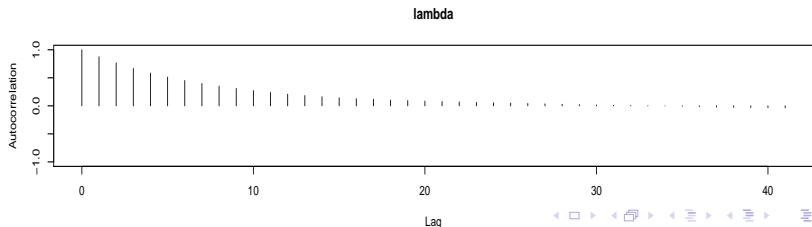
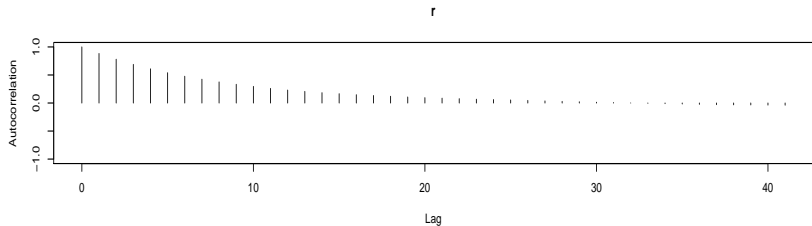


Gráfico das medianas acumuladas para um dos conjuntos de cadeias

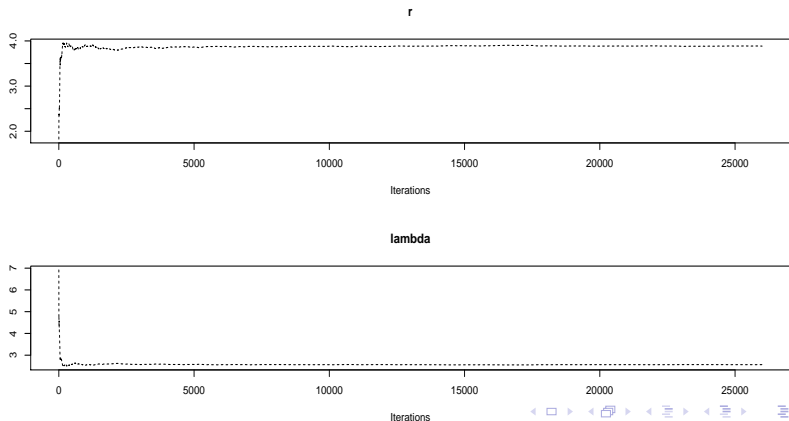


Gráfico da estatística de Geweke para um dos conjuntos de cadeias

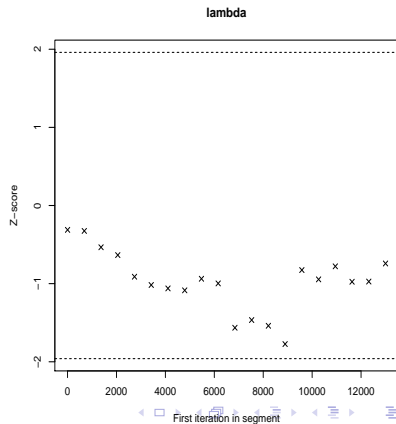
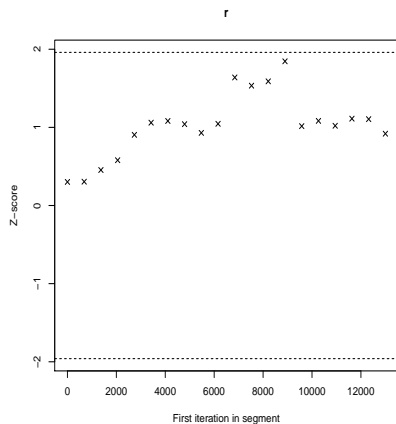
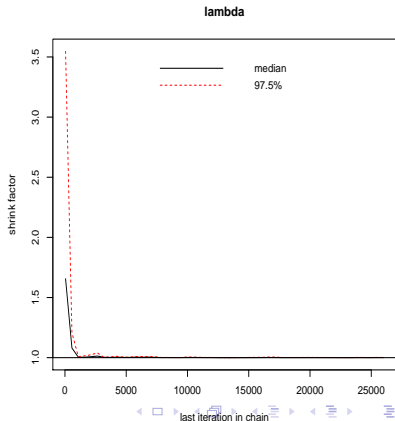
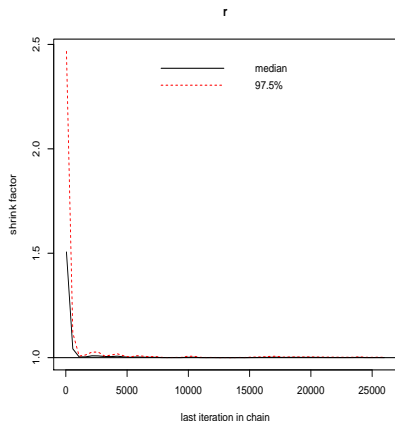
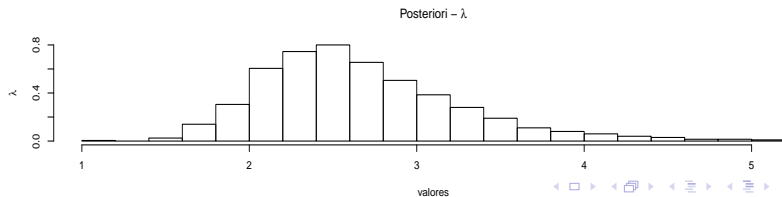
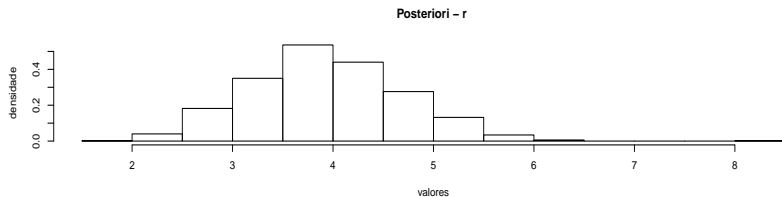


Gráfico da estatística de Gelman-Rubin utilizando os três conjuntos de cadeias



Histograma da amostra válida para um dos conjuntos de cadeias



Estimativas Bayesianas para um dos conjuntos de cadeias

■ Resumo

Estatística	Parâmetro	
	r	λ
EAP	3,92	2,66
EPAP	0,76	0,59
$IC_B(95\%)$	[2,55; 5,47]	[1,75; 4,15]
$HPD(95\%)$	[2,47; 5,39]	[1,62;3,87]

- Modelo gama: Deviance = 295,7, $p_D = 2,1$; $DIC = 297,7$. Modelo exponencial Deviance = 331,0; $p_D = 1,0$; $DIC = 332,1$.

Voltando ao exemplo do número acidentes

- Modelo proposto para analisar os dados: Considere ($i = 1$, ano de 1961, $i=2$, ano de 1962). Lembrando que: 1961 (sem limite de velocidade) 1962 (com limite de velocidade), temos

$$Y_{ij}|\beta \stackrel{ind.}{\sim} \text{Poisson}(\mu_i), i = 1, 2, j = 1, \dots, 43$$

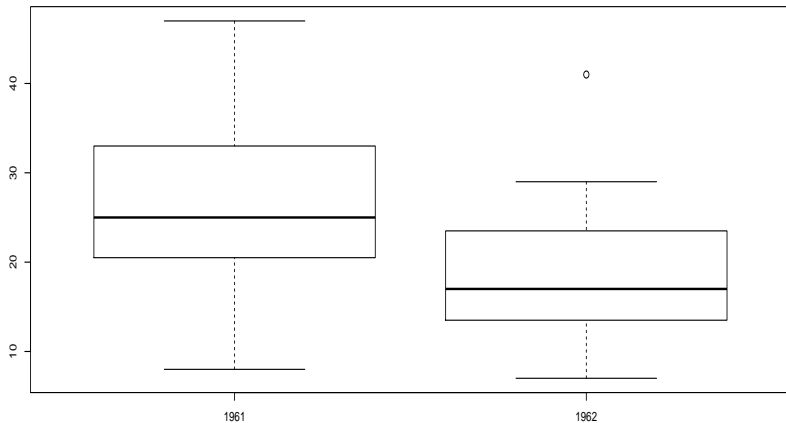
$$\ln \mu_i = \mu + \alpha_i, \alpha_1 = 0$$

em que $\beta = (\mu, \alpha_2)'$. Assim, concluí-se que $\mathcal{E}(Y_{ij}|\beta) = e^{\mu + \alpha_i}$.

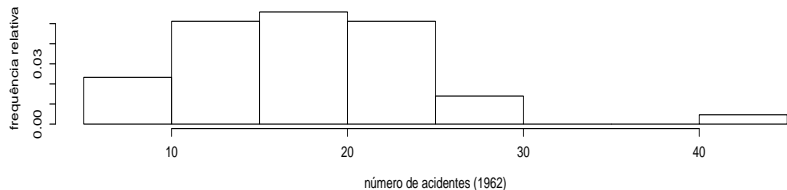
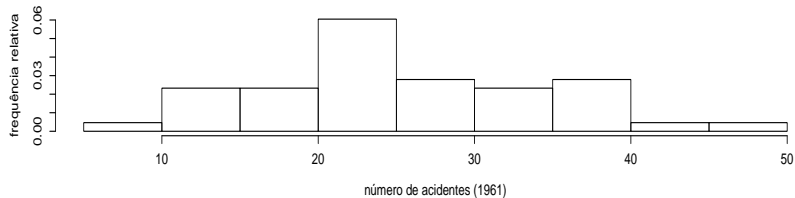
Medidas Resumo

Ano	Média	Var.	DP	CV(%)	Mín.	Med.	Máx.
1961	26,05	82,66	9,09	34,91	8,00	25,00	47,00
1962	18,05	44,71	6,69	37,05	7,00	17,00	41,00

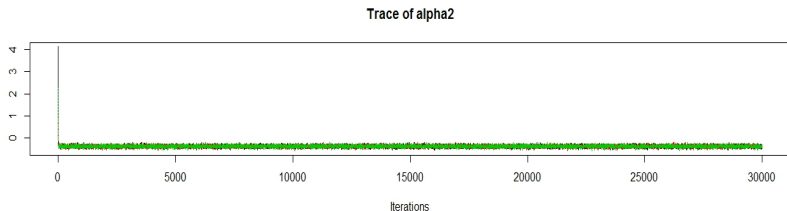
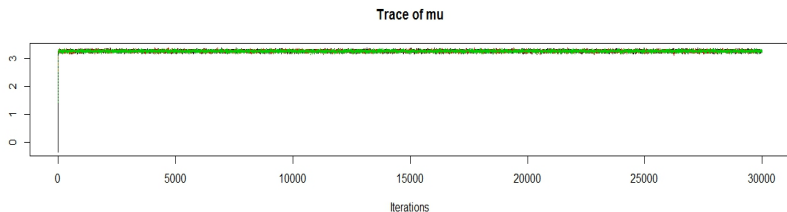
Boxplots do número de acidentes por ano



Histogramas do número de acidentes por ano



Traceplots para os três conjuntos de cadeias geradas



Autocorrelações para um dos conjuntos de cadeias

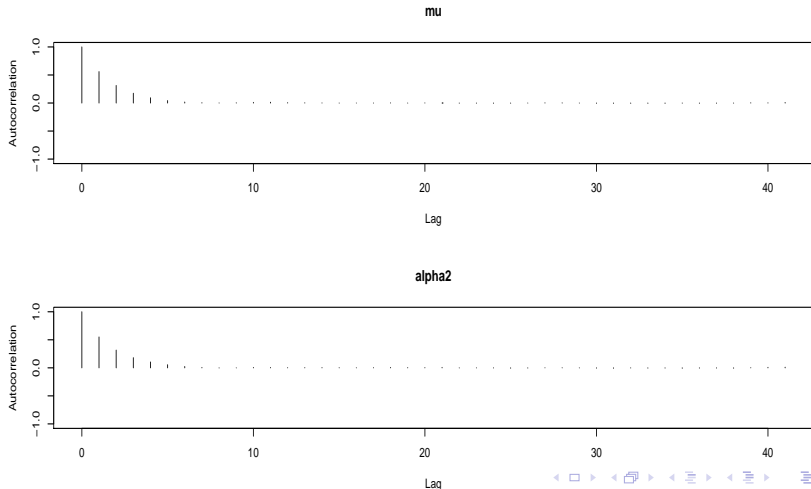


Gráfico das medianas acumuladas para um dos conjuntos de cadeias

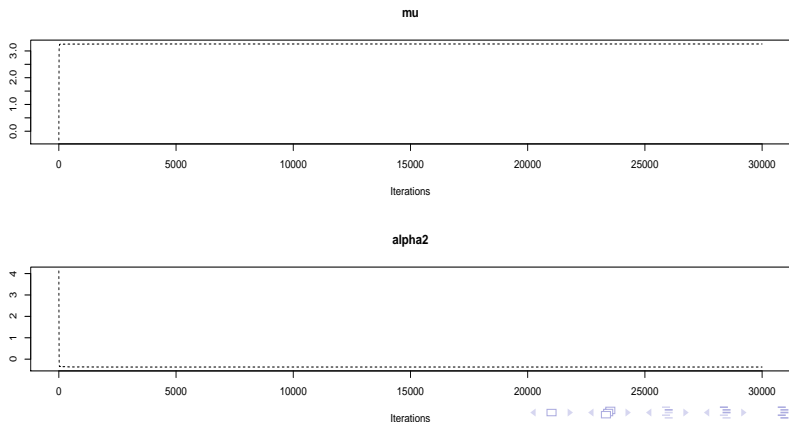


Gráfico da estatística de Geweke para um dos conjuntos de cadeias

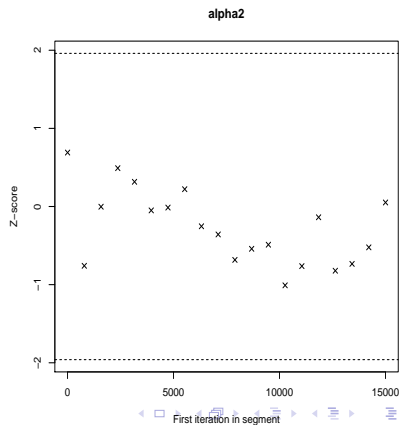
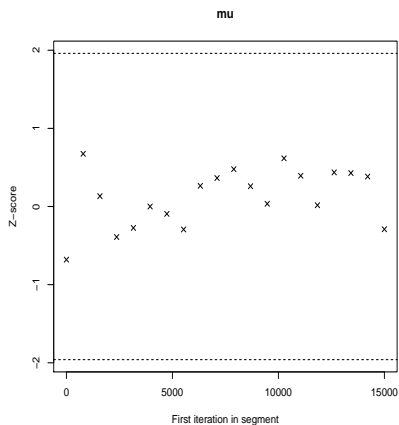
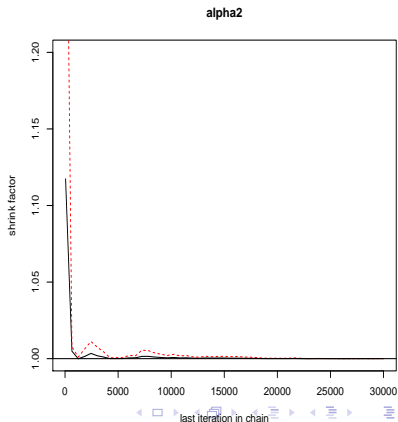
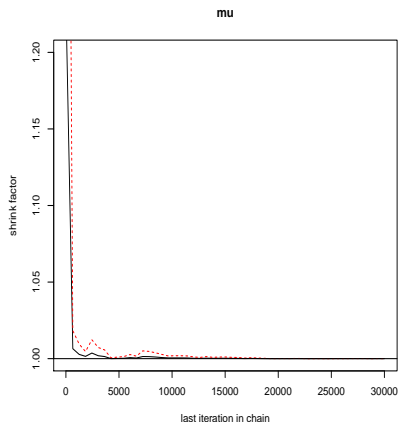
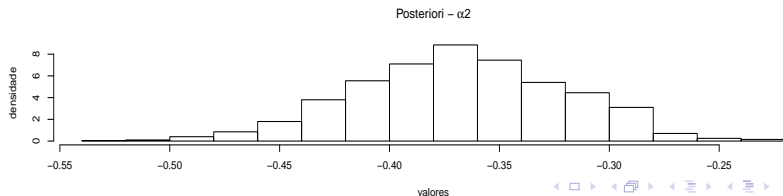
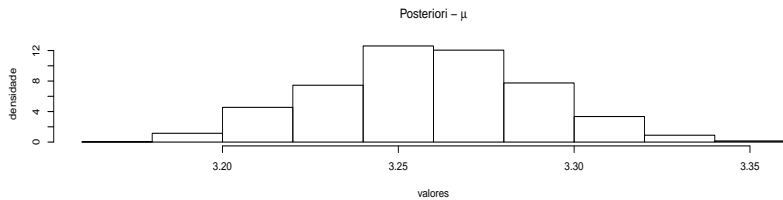


Gráfico da estatística de Gelman-Rubin utilizando os três conjuntos de cadeias



Histograma da amostra válida para um dos conjuntos de cadeias



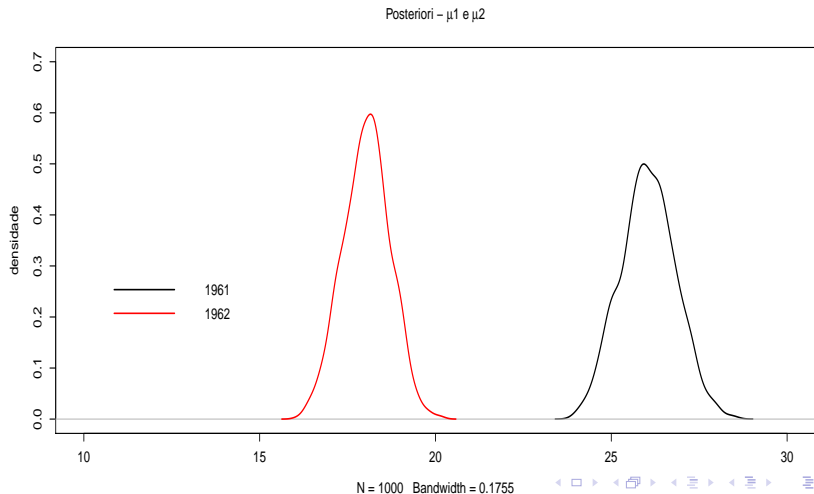
Estimativas Bayesianas para um dos conjuntos de cadeias

■ Resumo

Parâmetro	EAP	DPAP	$IC_B(95\%)$	$HPD(95\%)$
μ	3,25	0,03	[3,20 ; 3,32]	[3,20 ; 3,32]
α_2	-0,37	0,05	[-0,46 ; -0,28]	[-0,46 ; -0,28]
$\mu_1 = \exp(\mu)$	26,05	0,79	[24,58 ; 27,58]	[24,58 ; 27,58]
$\mu_2 = \exp(\mu + \alpha_2)$	18,04	0,67	[16,73 ; 19,30]	[16,68 ; 19,22]

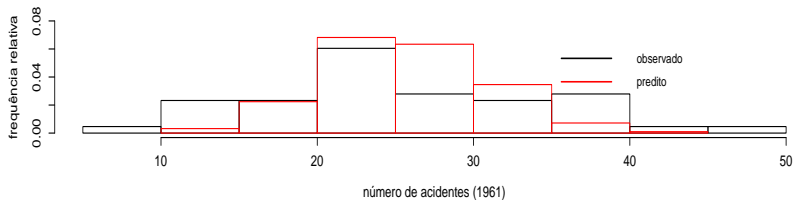
- Modelo com α_2 : Deviance = 654,8, $p_D = 1,8$; $DIC = 656,6$. Modelo sem α_2 : Deviance= 716,7 $p_D = 1,0$; $DIC = 717,8$.

Posteriors das médias de cada grupo

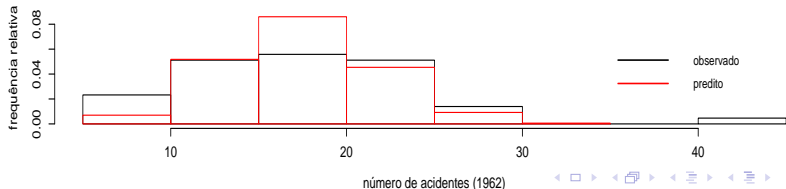


Valores observados e distribuições preditivas

Frequências observadas e preditas sob cada uma das priors



Frequências observadas e preditas sob cada uma das priors



Outro modelo para analisar o exemplo do número acidentes

- Modelo proposto para analisar os dados: Considere ($i = 1$, ano de 1961, $i=2$, ano de 1962). Lembrando que: 1961 (sem limite de velocidade) 1962 (com limite de velocidade), temos

$$Y_{ij} | \beta, b_i \stackrel{i.i.d.}{\sim} \text{Poisson}(\mu_{ij}), i = 1, 2, j = 1, \dots, 43$$

$$\ln \mu_{ij} = \mu + \alpha_i + b_j, \alpha_1 = 0$$

$$b_j \stackrel{i.i.d.}{\sim} N(0, \sigma^2)$$

em que $\beta = (\mu, \alpha_2, \sigma^2)'$.

Outro modelo para analisar o exemplo do número acidentes

- Se $b_j \sim N(0, \sigma^2)$, então $e^{b_j} \sim \text{log-normal}(0, \sigma^2)$
- Neste caso,

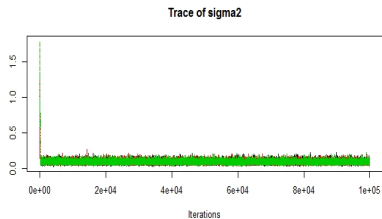
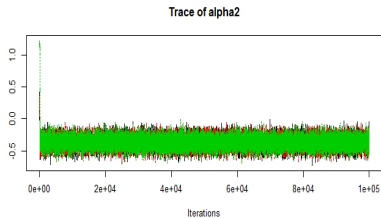
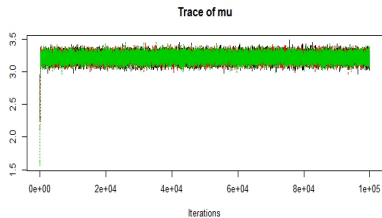
$$\mathcal{E}(Y_{ij}|\beta, \sigma^2) \equiv \mathcal{E}(Y_{ij}) = \mathcal{E}(\mathcal{E}(Y_{ij}|b_j)) = e^{\mu+\alpha_i} \mathcal{E}(e^{b_j}) = e^{\mu+\alpha_i} e^{\sigma^2/2} > e^{\mu+\alpha_i}$$

e

$$\begin{aligned} \mathcal{V}(Y_{ij}) &= \mathcal{V}(\mathcal{E}(Y_{ij}|b_j)) + \mathcal{E}(\mathcal{V}(Y_{ij}|b_j)) = e^{2(\mu+\alpha_i)} \mathcal{V}(e^{b_j}) + e^{\mu+\alpha_i} \mathcal{E}(e^{b_j}) \\ &= e^{2(\mu+\alpha_i)} (e^{\sigma^2} - 1) e^{\sigma^2} + e^{\mu+\alpha_i} e^{\sigma^2/2} > e^{\mu+\alpha_i} \end{aligned}$$

- Assim, o modelo em questão consegue contemplar uma variância maior do que aquela apresentada pelo modelo de regressão de Poisson.

Traceplots para os três conjuntos de cadeias geradas



Autocorrelações para um dos conjuntos de cadeias

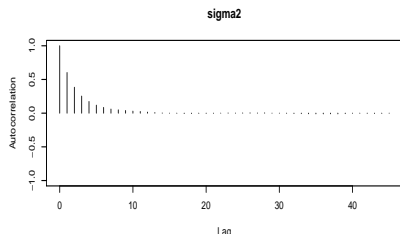
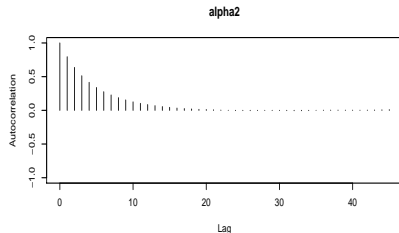
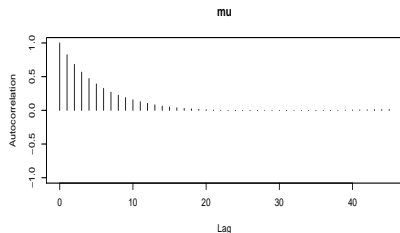


Gráfico das medianas acumuladas para um dos conjuntos de cadeias

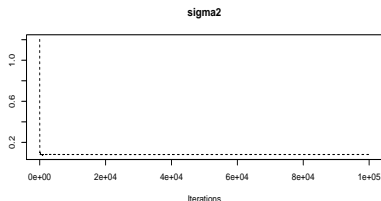
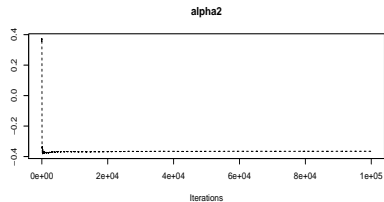
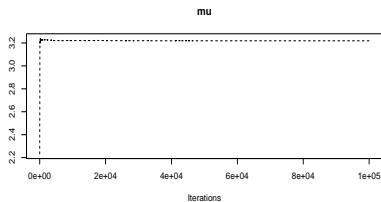


Gráfico da estatística de Geweke para um dos conjuntos de cadeias

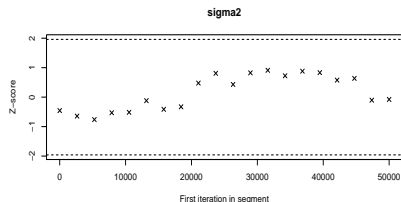
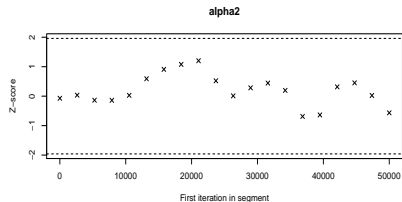
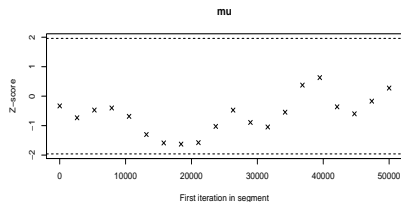
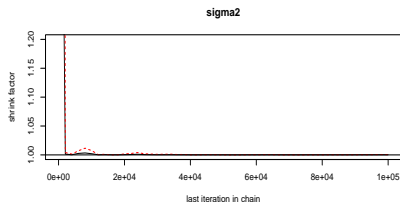
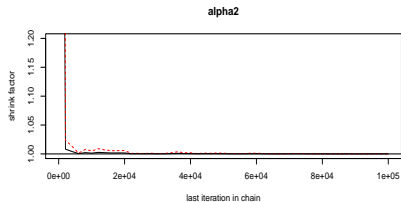
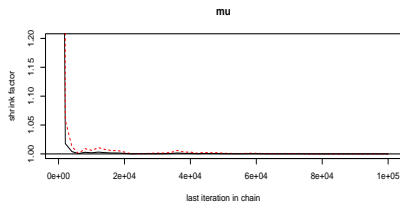
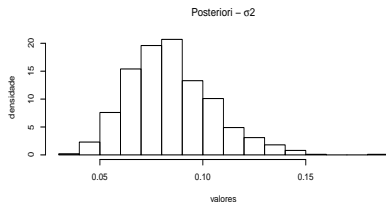
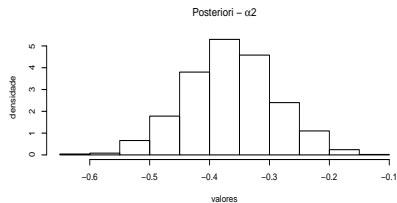
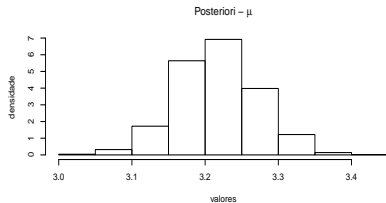


Gráfico da estatística de Gelman-Rubin utilizando os três conjuntos de cadeias



Histograma da amostra válida para um dos conjuntos de cadeias



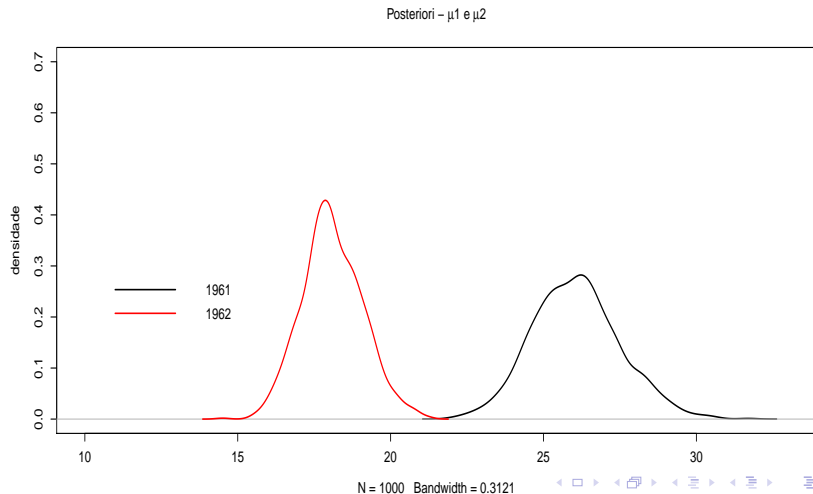
Estimativas Bayesianas para um dos conjuntos de cadeias

■ Resumo

Parâmetro	EAP	DPAP	$IC_B(95\%)$	$HPD(95\%)$
μ	3,22	0,05	[3,12 ; 3,33]	[3,11 ; 3,31]
α_2	-0,37	0,08	[-0,51 ; -0,22]	[-0,51 ; -0,23]
σ^2	0,08	0,02	[0,05 ; 0,13]	[0,05 ; 0,13]
$\mu_1 = e^\mu e^{\sigma^2/2}$	26,07	1,43	[23,46 ; 29,10]	[23,50 ; 29,10]
$\mu_2 = e^{\mu+\alpha_2} e^{\sigma^2/2}$	18,10	0,99	[16,26 ; 20,16]	[16,24 ; 20,00]

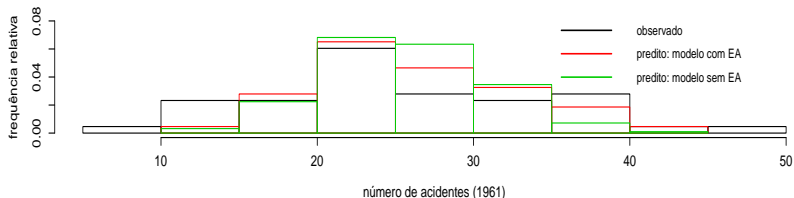
- Deviance = 505,3, $p_D = 55, 30$; $DIC = 560, 6$. Modelo sem efeito aleatório: Deviance = 654,8, $p_D = 1, 8$; $DIC = 656, 6$.

Posteriors das médias de cada grupo

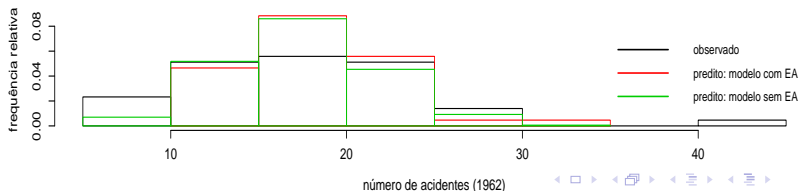


Valores observados e distribuições preditivas

Frequências observadas e preditas sob cada uma das priors



Frequências observadas e preditas sob cada uma das priors



Recursos Computacionais

- Implementar o modelo diretamente em R.
- Implementar o modelo diretamente nos programas: WinBUGS, OpenBUGS, JAGS, Stan; ou fazê-lo através dos respectivos pacotes que permitem usá-los diretamente no R, R2WinBUGS (WinBUGS/OpenBUGS), rjags, R2jags (JAGS), rstan (Stan).
- Pacotes no R: blme, MCMCgImm, MCMCpack, brms (modelos previamente implementados).