

# Bayesiánská analýza

## IV. Normální lineární regresní model s jinou apriorní hustotou

# Obsah tématu

- 1 NLRM s nezávislou normální-gama apriorní hustotou
  - Apriorní hustota
  - Posteriorní hustota
  - Gibbsův vzorkovač
  - Konvergenční diagnostiky
  - Porovnání modelů: Savageho-Dickeyeho poměr hustot
  - Predikce
  - Empirická ilustrace
- 2 NLRM s omezeními ve tvaru nerovnosti
  - Apriorní hustota
  - Posteriorní hustota
  - Importance sampling
  - Porovnání modelů
  - Predikce
  - Empirická ilustrace

- Přirozeně konjugovaná apriorní hustota pro NLRM – omezující.
- Nezávislost apriorních omezení – neexistují analytické výsledky → potřeba posteriorních simulátorů.
- Gibbsův vzorkovač a Importance sampling.
- Věrohodnostní funkce se nemění! (stále NLRM)

# Obsah tématu

- 1 NLRM s nezávislou normální-gama apriorní hustotou
  - Apriorní hustota
  - Posteriorní hustota
  - Gibbsův vzorkovač
  - Konvergenční diagnostiky
  - Porovnání modelů: Savageho-Dickeyeho poměr hustot
  - Predikce
  - Empirická ilustrace
- 2 NLRM s omezeními ve tvaru nerovnosti
  - Apriorní hustota
  - Posteriorní hustota
  - Importance sampling
  - Porovnání modelů
  - Predikce
  - Empirická ilustrace

# Obsah tématu

- 1 NLRM s nezávislou normální-gama apriorní hustotou
  - Apriorní hustota
  - Posteriorní hustota
  - Gibbsův vzorkovač
  - Konvergenční diagnostiky
  - Porovnání modelů: Savageho-Dickeyeho poměr hustot
  - Predikce
  - Empirická ilustrace
- 2 NLRM s omezeními ve tvaru nerovnosti
  - Apriorní hustota
  - Posteriorní hustota
  - Importance sampling
  - Porovnání modelů
  - Predikce
  - Empirická ilustrace

# Apriorní hustota

- Rozdělení vektoru  $\beta$  není podmíněno přesností chyby,  $h$ .

$$p(\beta, h) = p(\beta)p(h)$$

- $p(\beta)$  z normálního rozdělení a  $p(h)$  z rozdělení gama:

$$p(\beta) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{k}{2}} |\underline{V}|^{-\frac{1}{2}}} \exp \left[ -\frac{1}{2} (\beta - \underline{\beta})' \underline{V}^{-1} (\beta - \underline{\beta}) \right],$$

$$p(h) = c_G^{-1} h^{\frac{\nu-2}{2}} \exp \left( -\frac{h\nu}{2\underline{s}^{-2}} \right),$$

kde  $c_G$  je integrační konstanta pro funkci gama rozdělení.

- $\underline{V}$  – apriorní kovarianční matice vektoru parametrů  $\beta$ .

# Obsah tématu

- 1 NLRM s nezávislou normální-gama apriorní hustotou
  - Apriorní hustota
  - **Posteriorní hustota**
  - Gibbsův vzorkovač
  - Konvergenční diagnostiky
  - Porovnání modelů: Savageho-Dickeyeho poměr hustot
  - Predikce
  - Empirická ilustrace
- 2 NLRM s omezeními ve tvaru nerovnosti
  - Apriorní hustota
  - Posteriorní hustota
  - Importance sampling
  - Porovnání modelů
  - Predikce
  - Empirická ilustrace

# Sdružená hustota

- Sdružená hustota nemá tvar známé hustoty:

$$p(\beta, h|y) \propto \left\{ \exp \left[ -\frac{1}{2} \left\{ h(y - X\beta)'(y - X\beta) + (\beta - \underline{\beta})' \underline{V}^{-1} (\beta - \underline{\beta}) \right\} \right] \right\} \\ \times h^{\frac{N+\nu-2}{2}} \exp \left[ -\frac{h\nu}{2\underline{s}^{-2}} \right].$$

- Podmíněné hustoty mají známou formu.
- $p(\beta|y, h) = \frac{p(\beta, h|y)}{p(h|y)}$ .
- Z  $p(\beta, h|y)$  můžeme vyvodit informaci o  $p(\beta|y, h)$  pokud fixujeme  $h$ .

# Sdružená hustota – úpravy

$$\begin{aligned} & h(\mathbf{y} - \mathbf{X}\beta)'(\mathbf{y} - \mathbf{X}\beta) + (\beta - \underline{\beta})'\underline{\mathbf{V}}^{-1}(\beta - \underline{\beta}) \\ &= (\beta - \underline{\beta})'\overline{\mathbf{V}}^{-1}(\beta - \underline{\beta}) + Q, \end{aligned}$$

kde

$$\begin{aligned} \overline{\mathbf{V}} &= (\underline{\mathbf{V}}^{-1} + h\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}, \\ \underline{\beta} &= \overline{\mathbf{V}}(\underline{\mathbf{V}}^{-1}\underline{\beta} + h\mathbf{X}'\mathbf{y}), \\ Q &= h\mathbf{y}'\mathbf{y} + \underline{\beta}'\underline{\mathbf{V}}^{-1}\underline{\beta} - \underline{\beta}'\overline{\mathbf{V}}^{-1}\underline{\beta}. \end{aligned}$$

# Podmíněná hustota pro $\beta$

- Vypuštění členů nezahrnující vektor  $\beta$  (včetně výrazu  $Q$ ):

$$p(\beta|y, h) \propto \exp \left[ -\frac{1}{2}(\beta - \bar{\beta})' \bar{V}^{-1} (\beta - \bar{\beta}) \right].$$

- Jádrová hustota vícerozměrného normálního rozdělení.

$$\beta|y, h \sim N(\bar{\beta}, \bar{V})$$

## Podmíněná hustota pro $h$

- Z posteriorní hustoty jako funkce  $h$ .

$$p(h|y, \beta) \propto h^{\frac{N+\nu-2}{2}} \exp \left[ -\frac{h}{2} \{ (y - X\beta)'(y - X\beta) \} \right].$$

- Jádrová hustota gama rozdělení.

$$h|y, \beta \sim G(\bar{s}^{-2}, \bar{\nu}),$$

kde

$$\begin{aligned} \bar{\nu} &= N + \underline{\nu}, \\ \bar{s}^2 &= \frac{(y - X\beta)'(y - X\beta) + \underline{\nu}s^2}{\bar{\nu}}. \end{aligned}$$

# Obsah tématu

- 1 NLRM s nezávislou normální-gama apriorní hustotou
  - Apriorní hustota
  - Posteriorní hustota
  - **Gibbsův vzorkovač**
  - Konvergenční diagnostiky
  - Porovnání modelů: Savageho-Dickeyeho poměr hustot
  - Predikce
  - Empirická ilustrace
- 2 NLRM s omezeními ve tvaru nerovnosti
  - Apriorní hustota
  - Posteriorní hustota
  - Importance sampling
  - Porovnání modelů
  - Predikce
  - Empirická ilustrace

# Motivace

- $p(\beta, h|y) \neq p(\beta|y, h)p(h|y, \beta) \Rightarrow$  podmíněné hustoty neříkají vše o  $p(\beta, h|y)$ .
- Posteriorní simulátor – Gibbsův vzorkovač.
- Náhodné výběry z podmíněných hustot  $\rightarrow$  množina náhodných vzorků z odpovídající sdružené hustoty.

# Východiska

- $p$ -rozměrný vektor parametrů  $\theta$ , věrohodnostní funkce  $p(y|\theta)$ , apriorní hustota  $p(\theta)$  a posteriorní hustota  $p(\theta|y)$ .
- Rozdělení vektoru parametrů  $\theta$  do několika ( $B$ ) bloků, tedy  $\theta = (\theta'_{(1)}, \theta'_{(2)}, \dots, \theta'_{(B)})'$ , kde  $\theta_{(j)}$  je skalár nebo vektor pro  $j = 1, 2, \dots, B$ .
- V LRM: obvyklý počet bloků  $B = 2$  (první blok  $\theta_{(1)} = \beta$  a druhý blok  $\theta_{(2)} = h$ ).
- *Plně podmíněná množina posteriorních rozdělení* (jsme z nich schopni generovat výběry):

$$p(\theta_{(1)}|y, \theta_{(2)}, \dots, \theta_{(B)}), p(\theta_{(2)}|y, \theta_{(1)}, \theta_{(3)}, \dots, \theta_{(B)}), \dots \\ \dots, p(\theta_{(B-1)}|y, \theta_{(1)}, \dots, \theta_{(B-2)}, \theta_{(B)}), p(\theta_{(B)}|y, \theta_{(1)}, \dots, \theta_{(B-1)}).$$

## Postup (příklad)

- Sekvence vzorků  $\theta^{(1)}, \theta^{(2)}, \dots, \theta^{(S)} \rightarrow$  Monte Carlo integrace pro získání  $E[g(\theta)|y]$ .
- Pro  $B = 2$  mějme počáteční náhodný výběr z  $p(\theta_{(2)}|y)$ :  $\theta_{(2)}^{(0)}$ .
- $p(\theta|y) = p(\theta_{(1)}|y, \theta_{(2)})p(\theta_{(2)}|y) \Rightarrow$  výběr z  $p(\theta_{(1)}|y, \theta_{(2)}^{(0)})$  je řádným výběrem  $\theta_{(1)}$  z  $p(\theta|y) \rightarrow \theta_{(1)}^{(1)}$ .
- $p(\theta|y) = p(\theta_{(2)}|y, \theta_{(1)})p(\theta_{(1)}|y) \Rightarrow$  náhodný výběr z  $p(\theta_{(2)}|y, \theta_{(1)}^{(1)})$  je platným výběrem  $\theta_{(2)}$  z  $p(\theta|y)$ .
- $\theta^{(1)} = (\theta_{(1)}^{(1)'}, \theta_{(2)}^{(1)'})'$  je řádným výběrem z  $p(\theta|y)$ .
- Postup do nekonečna.
- Pokud najdeme  $\theta_{(2)}^{(0)} \Rightarrow$  sekvenční výběr z  $\theta_{(1)}$  podmíněný předchozím výběrem  $\theta_{(2)}$  a výběr  $\theta_{(2)}$  podmíněný takto získaným  $\theta_{(1)}$  dává řadu náhodných výběrů (vzorků) z posteriorního rozdělení = Gibbsův vzorkovač.

## Počáteční podmínky

- Problémem s  $\theta_{(2)}^{(0)}$ .
- Pokud bychom uměli získávat náhodné výběry z  $p(\theta_{(2)}|y) \rightarrow$  přímé využití spolu s  $p(\theta_{(1)}|\theta_{(2)}, y)$  v rámci MC integrace.
- Splnění tzv. slabých podmínek = počáteční výběr  $\theta_{(2)}^{(0)}$  žádnou roli  $\rightarrow$  Gibbsův vzorkovač konverguje k sekvenci výběrů z  $p(\theta|y)$ .
- Obvyklá volba  $\theta_{(2)}^{(0)} \rightarrow S$  replikací  $\rightarrow$  prvních  $S_0$  vzorků odstraníme (tzv. *burn-in replications*)  $\Rightarrow S_1$  vzorků použijeme dále ( $S_0 + S_1 = S$ ).
- Příklad nesplnění: posteriorní hustota definována ve dvou různých oblastech, které nejsou vzájemně propojeny  $\rightarrow$  Gibbsův vzorkovač poskytne výběry jen z jedné z těchto oblastí (do druhé oblasti se nebude schopen dostat).
- Není případ normálního-gama rozdělení.

# Shrnutí algoritmu

- 1 Zvolíme počáteční hodnotu vektoru parametrů,  $\theta^{(0)}$ .  
Pro  $s = 1, \dots, S$ :
- 2 Provedeme náhodný výběr  $\theta_{(1)}^{(s)}$  z  $p(\theta_{(1)}|y, \theta_{(2)}^{(s-1)}, \theta_{(3)}^{(s-1)}, \dots, \theta_{(B)}^{(s-1)})$ .
- 3 Provedeme náhodný výběr,  $\theta_{(2)}^{(s)}$  z  $p(\theta_{(2)}|y, \theta_{(1)}^{(s)}, \theta_{(3)}^{(s-1)}, \dots, \theta_{(B)}^{(s-1)})$ .  
...
- 4 Provedeme náhodný výběr  $\theta_{(B)}^{(s)}$  z  $p(\theta_{(B)}|y, \theta_{(1)}^{(s)}, \theta_{(2)}^{(s)}, \dots, \theta_{(B-1)}^{(s)})$ .

# Monte Carlo integrace

- $S$  výběrů,  $\theta^{(s)}$  pro  $s = 1, \dots, S$ .
- Prvních  $S_0$  výběrů vyhodíme (eliminace efektu počáteční volby  $\theta^{(0)}$ ).
- $S_1$  výběrů zprůměrujeme  $\rightarrow$  požadované posteriorní charakteristiky.
- Funkce parametrů  $g(\cdot)$  a

$$\hat{g}_{S_1} = \frac{1}{S_1} \sum_{s=S_0+1}^S g(\theta^{(s)}).$$

- $\hat{g}_{S_1}$  konverguje ke střední hodnotě  $E[g(\theta)|y]$  pro  $S_1$  jdoucí k nekonečnu.

# Problémy

- Jakákoliv volba bloků (ve většině případů se nabízí sama).
- Centrální limitní věta – přibližné určení chyby aproximace.
- Dva problémy:
  - 1 Potřeba ověřit, že volba  $\theta^{(0)}$  nemá vliv na získané výsledky.
  - 2 Sekvence výběrů není i.i.d.; vektory  $\theta^{(s)}$  a  $\theta^{(s-1)}$  nejsou vzájemně nezávislé, neboť  $\theta_{(j)}^{(s)}$  závisí na  $\theta_{(l)}^{(s-1)}$  pro  $j = 1, \dots, B - 1$  a  $l > j$ .
- Prakticky nutné pro dosažení požadované úrovně přesnosti vygenerovat mnohem více výběrů.

# Obsah tématu

- 1 NLRM s nezávislou normální-gama apriorní hustotou
  - Apriorní hustota
  - Posteriorní hustota
  - Gibbsův vzorkovač
  - **Konvergenční diagnostiky**
  - Porovnání modelů: Savageho-Dickeyeho poměr hustot
  - Predikce
  - Empirická ilustrace
- 2 NLRM s omezeními ve tvaru nerovnosti
  - Apriorní hustota
  - Posteriorní hustota
  - Importance sampling
  - Porovnání modelů
  - Predikce
  - Empirická ilustrace

# Numerická standardní chyba

- Využití centrální limitní věty – problém závislosti výběrů.
- Centrální limitní věta – přibližné určení chyby aproximace.

$$\sqrt{S_1} \{ \hat{g}_{S_1} - E[g(\theta)|y] \} \rightarrow N(0, \sigma_g^2)$$

pro  $S_1$  jdoucí k nekonečnu.

- $\sigma_g^2$  má mnohem složitější formu; v literatuře zatím nebyl publikován dostatečně ověřený způsob jejího odhadu.
- Intuice:  $\sigma_g^2$  by měla zohledňovat skutečnost, že  $\theta^{(s)}$  pro  $s = 1, \dots, S$  je vzájemně korelovaná řada.

# NSE – Geweke (1992)

- Z teorie časových řad.

$$\hat{\sigma}_g^2 = \frac{S(0)}{S_1}$$

- Oprávnění tohoto odhadu spíše neformální  $\times$  v praxi se osvědčuje.
- $S(0)$  je spektrální hustota řady  $\theta^{(s)}$  pro  $s = S_0 + 1, \dots, S$  vyhodnocená v 0.
- NSE:  $\frac{\hat{\sigma}_g}{\sqrt{S_1}}$ .

## Geweke (1992) – pokračování

- Z ponechaných vzorků: první sadu  $S_A$  výběrů, prostřední  $S_B$  a poslední  $S_C$ .
- V praxi osvědčeno:  $S_A = 0.1S_1$ ,  $S_B = 0.5S_1$  a  $S_C = 0.4S_1$ .
- Pro potřeby diagnostiky nepoužíváme prostřední množinu vzorků  $S_B$ .
- Necht'  $\hat{g}_{S_A}$  a  $\hat{g}_{S_C}$  jsou odhady  $E[g(\theta)|y]$  za použití prvních  $S_A$  vzorků (po vyhození  $S_0$  výběrů) a  $S_C$  vzorků.
- Definujme  $\frac{\hat{\sigma}_A}{\sqrt{S_A}}$  a  $\frac{\hat{\sigma}_C}{\sqrt{S_C}}$  jako NSE odhadů.
- Centrální limitvní věta:

$$CD \rightarrow N(0, 1)$$

- Konvergenční diagnostika  $CD$ :

$$CD = \frac{\hat{g}_{S_A} - \hat{g}_{S_C}}{\frac{\hat{\sigma}_A}{\sqrt{S_A}} + \frac{\hat{\sigma}_C}{\sqrt{S_C}}},$$

- Porovnání s kritickými hodnotami standardizovaného normálního rozdělení.

# Problémy

- Gibbsův vzorkovač – prochází posteriorní rozdělení.
- Bimodální posteriorní hustota – diagnostika selhává.
- Počáteční výběr  $\theta^{(0)}$  je extrémě vzdálen + míra korelace ve vzorcích vysoká (většinou CD diagnostika neselže).

# Gelman a Rubin (1992) – motivace

- Problém neodeznění efektu počátečního výběru  $\theta^{(0)}$ .
- Praxe: použít různá  $\theta^{(0)}$ .
- $\theta^{(0,i)}$  pro  $i = 1, \dots, m$  označuje  $m$  počátečních hodnot z různých oblastí parametrického prostoru (*overdispersed starting values*).
- $\theta^{(s,i)}$  pro  $s = 1, \dots, S$  označuje  $S$  výběrů navzorkovaných Gibbsovým vzorkovačem z  $i$ -té počáteční hodnoty a  $\hat{g}_{S_i}^{(i)}$  označuje odpovídající odhad  $E[g(\theta)|y]$ .
- Pokud efekt počátečních podmínek odezněl, měly by být sekvence podobné  $\Rightarrow$  porovnání rozptylů v rámci a mezi sekvencemi.

# Gelman a Rubin (1992) – pokračování

- Vnitřní rozptyl sekvence:

$$s_i^2 = \frac{1}{S_1 - 1} \sum_{s=S_0+1}^{S_1} \left[ g(\theta^{(s,i)}) - \hat{g}_{S_i}^{(i)} \right]^2.$$

- Průměrný rozptyl vnitřních rozptylů sekvencí:

$$W = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m s_i^2.$$

- Mezisekvenční rozptyl:

$$B = \frac{S_1}{m-1} \sum_{i=1}^m (\hat{g}_{S_i}^{(i)} - \hat{g})^2,$$

kde

$$\hat{g} = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m \hat{g}_{S_i}^{(i)}.$$

## Gelman a Rubin (1992) – statistika

- $W$  je odhadem  $\text{var}[g(\theta)|y]$ .
- Další odhad rozptylu,  $\text{var}[g(\theta)|y]$ :

$$\widehat{\text{var}}[g(\theta)|y] = \frac{S_1 - 1}{S_1} W + \frac{1}{S_1} B.$$

- MCMC kovergenční diagnostika má podobu:

$$\widehat{R} = \frac{\widehat{\text{var}}[g(\theta)|y]}{W}.$$

- Hodnoty  $R$  by měly být větší než jedna; hodnoty blízké jedné indikují úspěšnou konvergenci.
- $\sqrt{\widehat{R}}$  označována jako *estimated potential scale reduction* (mez toho, jak vzdálené mohou být odhady směrodatné odchylky  $g(\theta)$  díky nedostatečné konvergenci).

# Obsah tématu

- 1 NLRM s nezávislou normální-gama apriorní hustotou
  - Apriorní hustota
  - Posteriorní hustota
  - Gibbsův vzorkovač
  - Konvergenční diagnostiky
  - **Porovnání modelů: Savageho-Dickeyeho poměr hustot**
  - Predikce
  - Empirická ilustrace
- 2 NLRM s omezeními ve tvaru nerovnosti
  - Apriorní hustota
  - Posteriorní hustota
  - Importance sampling
  - Porovnání modelů
  - Predikce
  - Empirická ilustrace

# Savage-Dickey – motivace

- Není obecně uplatnitelná.
- Bayesův faktor pro vnořené modely (v případě určitých apriorních hustot).
- Neomezená verze modelu  $M_2$  s vektorem parametrů  $\theta = (\omega', \psi)'$ .
- Věrohodnostní funkce a apriorní hustota:  $p(y|\omega, \psi, M_2)$  a  $p(\omega, \psi, M_2)$ .
- Omezená verze modelu  $M_1$  má  $\omega = \omega_0$ , kde  $\omega_0$  je vektor konstant (parametry vektoru  $\psi$  neomezené pro oba modely).
- Věrohodnostní funkce a apriorní hustota:  $p(y|\psi, M_1)$  a  $p(\psi|M_1)$  ( $\omega = \omega_0$  v  $M_1 \Rightarrow$  není třeba specifikovat apriorní hustotu pro tento vektor parametrů).

# Savage-Dickey – definice

- Předpokládáme

$$p(\psi|\omega = \omega_0, M_2) = p(\psi, M_1).$$

- Potom  $BF_{12}$ , Bayesův faktor porovnávající  $M_1$  a  $M_2$  má podobu:

$$BF_{12} = \frac{p(\omega = \omega_0|y, M_2)}{p(\omega = \omega_0|M_2)}.$$

- $p(\omega = \omega_0|y, M_2)$  a  $p(\omega = \omega_0|M_2)$  jsou neomezená apriorní a posteriorní hustota pravděpodobnosti vyhodnocená v bodě  $\omega_0$ .
- Mnohdy  $p(\psi|M_2) = p(\psi|M_1)$  (předchozí podmínka slabší).
- Nezatěžujeme se posteriorní analýzou  $M_1$ ; není potřeba přímý výpočet marginální věrohodnosti.

# Savage-Dickey – ilustrace

- $M_1$ : omezení  $\beta = \beta_0$  ( $R\beta = r$  je jednoduchým rozšířením).
- Bayesův faktor:

$$BF_{12} = \frac{p(\beta = \beta_0 | y, M_2)}{p(\beta = \beta_0 | M_2)}.$$

- Jmenovatel lze snadno spočítat (marginální apriorní hustota pro  $\beta$  je normální):

$$p(\beta = \beta_0 | M_2) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{k}{2}}} |\underline{V}|^{-\frac{1}{2}} \exp \left[ -\frac{1}{2} (\beta_0 - \underline{\beta})' \underline{V}^{-1} (\beta_0 - \underline{\beta}) \right]$$

## Savage-Dickey – ilustrace (pokračování)

- Hustota  $p(\beta|y, h, M_2)$  odpovídá normálnímu rozdělení  $\times$  neznáme podobu  $p(\beta|y, M_2)$ .
- $p(\beta = \beta_0|y, M_2)$  lze snadno odhadnout.
- Gibbsovým vzorkovačem získáme  $\beta^{(s)}$  a  $h^{(s)}$  pro  $s = S_0 + 1, \dots, S$ ; zprůměrováním  $p(\beta = \beta_0|y, h^{(s)}, M_2)$  přes všechny výběry  $h^{(s)}$  získáme odhad  $p(\beta = \beta_0|y, M_2)$ .

$$\frac{1}{S_1} \sum_{s=S_0+1}^S p(\beta = \beta_0|y, h^{(s)}, M_2) \rightarrow p(\beta = \beta_0|y, M_2)$$

pro  $S_1$  jdoucí k nekonečnu.

- Platí:

$$p(\beta = \beta_0|y, h^{(s)}, M_2) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{k}{2}}} |\bar{V}|^{-\frac{1}{2}} \exp \left[ -\frac{1}{2} (\beta_0 - \bar{\beta})' \bar{V}^{-1} (\beta_0 - \bar{\beta}) \right].$$

## Savage-Dickey – ilustrace (dokončení)

- Zákony pravděpodobnosti implikují

$$p(\beta = \beta_0 | y, M_2) = \int p(\beta = \beta_0 | y, h, M_2) p(h | y, M_2) dh.$$

- $p(\beta = \beta_0 | y, h, M_2)$  v sobě neobsahuje nadále  $\beta$  (jen vektor konstant  $\beta_0$ ).
- Lze psát:

$$p(\beta = \beta_0 | y, M_2) = \int g(h) p(h | y) dh = E[g(h) | y],$$

kde  $g(h) = p(\beta = \beta_0 | y, h, M_2)$ .

- Posteriorní simulátory použitelné právě pro výpočet charakteristik jako je  $E[g(h) | y]$ .

# Obsah tématu

- 1 NLRM s nezávislou normální-gama apriorní hustotou
  - Apriorní hustota
  - Posteriorní hustota
  - Gibbsův vzorkovač
  - Konvergenční diagnostiky
  - Porovnání modelů: Savageho-Dickeyeho poměr hustot
  - **Predikce**
  - Empirická ilustrace
- 2 NLRM s omezeními ve tvaru nerovnosti
  - Apriorní hustota
  - Posteriorní hustota
  - Importance sampling
  - Porovnání modelů
  - Predikce
  - Empirická ilustrace

# Predikční hustota

- NLRM:  $y^* = X^*\beta + \epsilon^*$ .

$$p(y^*|y) = \iint p(y^*|y, \beta, h)p(\beta, h|y)d\beta dh$$

- $\epsilon^*$  je nezávislé na  $\epsilon \Rightarrow p(y^*|y, \beta, h) = p(y^*|\beta, h)$ :

$$p(y^*|\beta, h) = \frac{h^{\frac{T}{2}}}{(2\pi)^{\frac{T}{2}}} \exp \left[ -\frac{h}{2}(y^* - X^*\beta)'(y^* - X^*\beta) \right].$$

- Zajímá nás  $E[g(y^*)|y] = \int g(y^*)p(y^*|y)dy^*$ .
- $y^{*(s)}$  pro  $s = 1, \dots, S$  jakožto výběry z  $p(y^*|y) \Rightarrow \hat{g}_Y = \frac{1}{S} \sum_{s=1}^S g(y^{*(s)})$  konverguje k  $E[g(y^*)|y]$ .
- Sumace od  $S_0 + 1$  do  $S$  (vyhození prvních vzorků).

# Predikční hustota a Gibbsův vzorkovač

- Obecný postup pro získání vzorků  $y^*$ .
- Pro každé  $\beta^{(s)}$  a  $h^{(s)}$ , vezmeme výběr  $y^{*(s)}$  z predikční hustoty  $p(y^*|y, \beta^{(s)}, h^{(s)})$  (normální rozdělení).
- Máme tak  $\beta^{(s)}$ ,  $h^{(s)}$  a  $y^{*(s)}$  pro  $s = 1, \dots, S \rightarrow$  zákony pravděpodobnosti říkají  $p(\beta, h, y^*|y) = p(y^*|y, \beta, h)p(\beta, h|y)$ .
- Strategie výběru nejdříve z posteriorní hustoty a potom z  $p(y^*|y, \beta, h) \rightarrow$  výběr z  $p(\beta, h, y^*|y)$ .
- Obecné pravidlo: pokud máme výběry ze sdružené hustoty pravděpodobnosti  $p(\theta, y^*|y)$ , potom samostatné výběry  $\theta$  jsou výběry z marginálního rozdělení  $p(\theta|y)$  a samotné výběry  $y^*$  jsou výběrem z  $p(y^*|y)$ .

# Obsah tématu

- 1 NLRM s nezávislou normální-gama apriorní hustotou
  - Apriorní hustota
  - Posteriorní hustota
  - Gibbsův vzorkovač
  - Konvergenční diagnostiky
  - Porovnání modelů: Savageho-Dickeyeho poměr hustot
  - Predikce
  - **Empirická ilustrace**
- 2 NLRM s omezeními ve tvaru nerovnosti
  - Apriorní hustota
  - Posteriorní hustota
  - Importance sampling
  - Porovnání modelů
  - Predikce
  - Empirická ilustrace

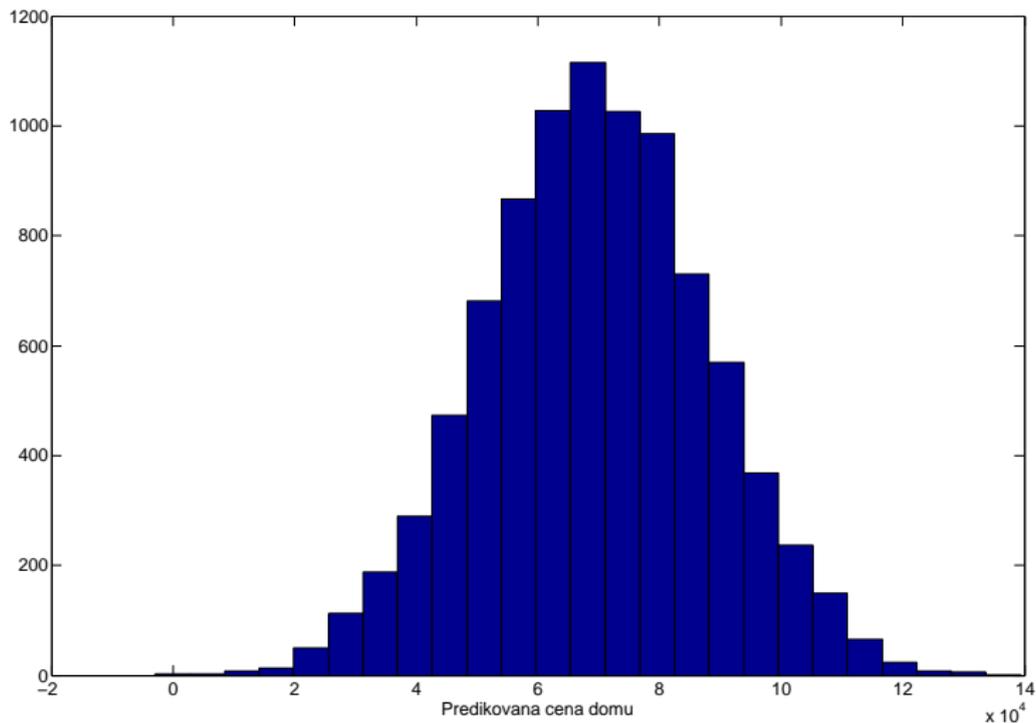
## Příklad – ceny domů ve Windsoru

- Analogie předchozího příkladu.
- Nezávislé apriorní hustoty pro  $\beta$  (normální) a přesnost chyby,  $h$  (gama rozdělení).

# Posteriorní výsledky pro parametr $\beta$

	Prior	Posterior	NSE	Gewekeho CD	P. podíl šancí pro $\beta_j = 0$
$\beta_1$	0 (10000)	-4119.01 (3251.44)	34.273	-0.065	1.39
$\beta_2$	10 (5)	5.45 (0.36)	0.004	-1.474	0.00
$\beta_3$	5000 (2500)	3228.83 (1080.46)	11.389	1.073	0.18
$\beta_4$	10000 (5000)	16136.64 (1605.11)	16.919	0.144	0.00
$\beta_5$	10 (5)	7685.55 (987.20)	10.406	-0.597	0.00

# Predikční hustota pro dům o rozloze 5000 čtverečních stop.



# Obsah tématu

- 1 NLRM s nezávislou normální-gama apriorní hustotou
  - Apriorní hustota
  - Posteriorní hustota
  - Gibbsův vzorkovač
  - Konvergenční diagnostiky
  - Porovnání modelů: Savageho-Dickeyeho poměr hustot
  - Predikce
  - Empirická ilustrace
- 2 NLRM s omezeními ve tvaru nerovnosti
  - Apriorní hustota
  - Posteriorní hustota
  - Importance sampling
  - Porovnání modelů
  - Predikce
  - Empirická ilustrace

# Omezení ve tvaru nerovnosti

- $\beta \in A$ , kde  $A$  je příslušná relevantní oblast parametrického prostoru.
- Bayesiánské řešení: zakomponovat omezení do apriorní hustoty.
- Posteriorní analýza: Importance Sampling.

# Obsah tématu

- 1 NLRM s nezávislou normální-gama apriorní hustotou
  - Apriorní hustota
  - Posteriorní hustota
  - Gibbsův vzorkovač
  - Konvergenční diagnostiky
  - Porovnání modelů: Savageho-Dickeyeho poměr hustot
  - Predikce
  - Empirická ilustrace
- 2 NLRM s omezeními ve tvaru nerovnosti
  - Apriorní hustota
  - Posteriorní hustota
  - Importance sampling
  - Porovnání modelů
  - Predikce
  - Empirická ilustrace

# Apriorní hustota

- $\beta \in A \Leftrightarrow$  oblast parametrického prostoru mimo  $A$  má apriorní váhy hodnoty 0.
- Pro ilustraci principu: přirozeně konjugovaná apriorní hustota.

$$p(\beta, h) \propto f_{NG}(\beta, h | \underline{\beta}, \underline{V}, \underline{s}^{-2}, \underline{\nu}) 1(\beta \in A)$$

- Indikační funkce  $1(\beta \in A)$  nabývá hodnot 1, pokud  $\beta \in A$  a 0 jinak.
- Marginální hustota pro  $\beta$  z omezeného  $t$ -rozdělení:

$$p(\beta) \propto f_t(\beta | \underline{\beta}, \underline{s}^2 \underline{V}, \underline{\nu}) 1(\beta \in A).$$

- Neinformativní varianta:

$$p(\beta, h) \propto \frac{1}{h} 1(\beta \in A).$$

# Obsah tématu

- 1 NLRM s nezávislou normální-gama apriorní hustotou
  - Apriorní hustota
  - Posteriorní hustota
  - Gibbsův vzorkovač
  - Konvergenční diagnostiky
  - Porovnání modelů: Savageho-Dickeyeho poměr hustot
  - Predikce
  - Empirická ilustrace
- 2 NLRM s omezeními ve tvaru nerovnosti
  - Apriorní hustota
  - **Posteriorní hustota**
  - Importance sampling
  - Porovnání modelů
  - Predikce
  - Empirická ilustrace

# Posteriorná hustota

- Odvození analogické z předchozích přednášek (navíc jen omezení skrze indikační funkce):

$$p(\beta|y) \propto f_t(\beta|\bar{\beta}, \bar{s}^2\bar{V}, \bar{\nu})1(\beta \in A).$$

- Posteriorní hyperparametry: vztahy pro informativní nebo neinformativní apriorní hustotu.
- Pokud předpokládáme nezávislou normální-gama apriorní hustotou  $\rightarrow$  vztah pro  $p(\beta|y, h)$  násoben  $1(\beta \in A)$ .

# Obsah tématu

- 1 NLRM s nezávislou normální-gama apriorní hustotou
  - Apriorní hustota
  - Posteriorní hustota
  - Gibbsův vzorkovač
  - Konvergenční diagnostiky
  - Porovnání modelů: Savageho-Dickeyeho poměr hustot
  - Predikce
  - Empirická ilustrace
- 2 NLRM s omezeními ve tvaru nerovnosti
  - Apriorní hustota
  - Posteriorní hustota
  - **Importance sampling**
  - Porovnání modelů
  - Predikce
  - Empirická ilustrace

# Úvod

- Pro některé volby  $A$  existují analytické výsledky.
- Vektor parametrů  $\theta$ , věrohodnostní funkce  $p(y|\theta)$ , apriorní hustota  $p(\theta)$  a posteriorní hustota  $p(\theta|y)$ .
- *Importance function*,  $q(\theta)$ : jsme schopni z ní získat náhodné výběry  $\theta^{(s)}$  pro  $s = 1, \dots, S$ .

$$\hat{g}_S = \frac{1}{S} \sum_{s=1}^S g(\theta^{(s)})$$

nebude konvergovat k  $E[g(\theta)|y]$  pro  $S \rightarrow \infty$ .

# Importance sampling

- Vážené průměrování.
- Nechť  $\theta^{(s)}$  pro  $s = 1, \dots, S$  je náhodný výběr z  $q(\theta)$  a definujme

$$\hat{g}_S = \frac{\sum_{s=1}^S w(\theta^{(s)})g(\theta^{(s)})}{\sum_{s=1}^S w(\theta^{(s)})}$$

kde

$$w(\theta^{(s)}) = \frac{p(\theta = \theta^{(s)}|y)}{q(\theta = \theta^{(s)})}$$

- $\hat{g}_S$  koverguje k  $E[g(\theta)|y]$  pro  $S$  jdoucí k nekonečnu (při splnění slabých podmínek).
- Podmínka zejména, že  $q(\theta)$  pokrývá  $p(\theta|y)$  a  $E[g(\theta|y)]$  existuje.

# Importance sampling – pokračování

- Váhy jen v čitateli i jmenovateli  $\rightarrow$  potřeba vyhodnotit pouze jádrové hustoty  $p(\theta|y)$  a  $q(\theta)$ .
- Pokud  $p^*(\theta|y) \propto p(\theta|y)$  a  $q^*(\theta) \propto q(\theta)$ , lze využít

$$w(\theta^{(s)}) = \frac{p^*(\theta = \theta^{(s)}|y)}{q^*(\theta = \theta^{(s)})}.$$

# Importance sampling – problémy

- $q(\theta)$  dobře neaproximuje  $p(\theta|y)$  ( $w(\theta^{(s)})$  je nula pro téměř každý výběr) → potřeba enormně velkého  $S$  pro dostatečně přesný odhad  $E[g(\theta)|y]$ .
- Mnohdy raději Gibbsův vzorkovač.
- $\theta$  vícedimenzionální: obtížné nalezení vhodné importance funkce.

# Importance sampling – příklad

- NLRM s omezením ve formě nerovností:

$$q(\beta) = f_t(\beta | \bar{\beta}, \bar{s}^2 \bar{V}, \bar{\nu}).$$

- Výpočet vah:

$$w(\beta^{(s)}) = 1(\beta^{(s)} \in A).$$

- Váhy rovny jedné ( $\beta^{(s)} \in A$ ) nebo nule ( $\beta^{(s)} \notin A$ ).
- Numerická standardní chyba:

$$\sqrt{S} \{ \hat{g}_S - E[g(\theta) | y] \} \rightarrow N(0, \sigma_g^2)$$

- $\sigma_g^2$  je možno konzistentně odhadnout jako

$$\hat{\sigma}_g^2 = \frac{\frac{1}{S} \sum_{s=1}^S \left[ w(\theta^{(s)}) \left\{ g(\theta^{(s)}) - \hat{g}_S \right\} \right]^2}{\left[ \frac{1}{S} \sum_{s=1}^S w(\theta^{(s)}) \right]^2}.$$

- $NSE = \frac{\hat{\sigma}_g}{\sqrt{S}}$ .

# Obsah tématu

- 1 NLRM s nezávislou normální-gama apriorní hustotou
  - Apriorní hustota
  - Posteriorní hustota
  - Gibbsův vzorkovač
  - Konvergenční diagnostiky
  - Porovnání modelů: Savageho-Dickeyeho poměr hustot
  - Predikce
  - Empirická ilustrace
- 2 NLRM s omezeními ve tvaru nerovnosti
  - Apriorní hustota
  - Posteriorní hustota
  - Importance sampling
  - **Porovnání modelů**
  - Predikce
  - Empirická ilustrace

# Porovnání modelů – úvod

- $M_1$ : NLRM s přirozeně konjugovaným priorem s omezeními ve tvaru nerovnosti ( $\beta \in A$ ).
- $M_2$ : tentýž model, přičemž předchozí restriktce neplatí ( $\beta \notin A$ ).
- Např. ekonomická teorie může implikovat  $\beta \in A \Rightarrow p(M_1|y)$  označuje pravděpodobnost, že ekonomická teorie je v souladu s daty.
- Neomezený NLRM s přirozeně konjugovaným priorem pro výpočet  $p(M_1|y) = p(\beta \in A|y)$  a  $p(M_2|y) = 1 - p(M_1|y)$ .
- Analytické řešení pro lineární omezení, alternativně importance sampling pro neomezený model,  $p(\beta \in A|y) = E[g(\theta)|y]$ , kde  $g(\theta) = 1(\beta \in A)$ .
- Náhodné výběry u neomezené posteriorní hustoty ( $f_t(\beta|\bar{\beta}, \bar{s}^2\bar{V}, \bar{\nu})$ ) a spočítání podílu těch, které splňují  $\beta \in A \Rightarrow$  odhad  $p(\beta \in A|y)$ .
- Provedení importance sampling a zachováním informace o tom, kolik vzorků jsme nechali a kolik vyhodili (přičítali jim nulovou váhu)  $\rightarrow$  základ pro výpočet  $p(M_1|y)$  a  $p(M_2|y)$ .

# Vnořené modely

- Savageho-Dickeyeho poměr hustot:  $M_2$  je NLRM s přirozeně konjugovaným priorem a nerovnostními omezeními a  $M_1$  je stejný jako  $M_2$  s tou výjimkou, že  $\beta = \beta_0$ .
- Předpokládáme v obou modelech tutéž apriorní hustotu pro  $h$ :

$$BF_{12} = \frac{p(\beta = \beta_0 | y, M_2)}{p(\beta = \beta_0 | M_2)}.$$

- Známe jen jádrové hustoty  $\times$  formálně:

$$p(\beta) = \underline{c}f_t(\beta | \underline{\beta}, \underline{s}^2 \underline{V}, \underline{\nu}) 1(\beta \in A), \quad p(\beta | y) = \bar{c}f_t(\beta | \bar{\beta}, \bar{s}^2 \bar{V}, \bar{\nu}) 1(\beta \in A).$$

# Vnořené modely – dokončení

$$BF_{12} = \frac{\bar{c}f_t(\beta|\bar{\beta}, \bar{s}^2\bar{V}, \bar{\nu})}{\underline{c}f_t(\beta|\underline{\beta}, \underline{s}^2\underline{V}, \underline{\nu})}.$$

- Vyhodnocení dvou hustot v  $\beta = \beta_0$  a výpočet konstant  $\underline{c}$  a  $\bar{c}$ .
- Někdy snadno z tabulek, jinak předchozí metoda výpočtu  $p(M_1|y)$  (omezení  $\beta \in A$  platí).
- $\bar{c} = \frac{1}{p(M_1|y)}$ , protože

$$\bar{c} = \frac{1}{\int f_t(\beta|\bar{\beta}, \bar{s}^2\bar{V}, \bar{\nu})\mathbf{1}(\beta \in A)d\beta}$$

$$\text{a } p(M_1|y) = \int f_t(\beta|\bar{\beta}, \bar{s}^2\bar{V}, \bar{\nu})\mathbf{1}(\beta \in A)d\beta.$$

- Výpočet  $\underline{c}$  analogicky (využití importance sampling v rámci apriorní hustoty pravděpodobnosti).

# Obsah tématu

- 1 NLRM s nezávislou normální-gama apriorní hustotou
  - Apriorní hustota
  - Posteriorní hustota
  - Gibbsův vzorkovač
  - Konvergenční diagnostiky
  - Porovnání modelů: Savageho-Dickeyeho poměr hustot
  - Predikce
  - Empirická ilustrace
- 2 NLRM s omezeními ve tvaru nerovnosti
  - Apriorní hustota
  - Posteriorní hustota
  - Importance sampling
  - Porovnání modelů
  - **Predikce**
  - Empirická ilustrace

# Predikční hustota

- Standardní postup získání výběrů  $y^*$ .
- Výběry z importance function je třeba převážít.
- $\theta^{(s)}$ , náhodný výběr z importance function a  $y^{*(s)}$ , náhodný výběr z  $p(y^*|y, \theta^{(s)})$  pro  $s = 1, \dots, S$ , potom

$$\hat{g}_Y = \frac{\sum_{s=1}^S w(\theta^{(s)})g(y^{*(s)})}{\sum_{s=1}^S w(\theta^{(s)})}$$

konverguje k  $E[g(y^*)|y]$  pro  $S$  jdoucí k nekonečnu.

- Váha  $w(\theta^{(s)})$  vychází z definice importance sampling.
- Výpočet predikčních charakteristik všude tam, kde je prováděno importance sampling.

# Obsah tématu

- 1 NLRM s nezávislou normální-gama apriorní hustotou
  - Apriorní hustota
  - Posteriorní hustota
  - Gibbsův vzorkovač
  - Konvergenční diagnostiky
  - Porovnání modelů: Savageho-Dickeyeho poměr hustot
  - Predikce
  - Empirická ilustrace
- 2 NLRM s omezeními ve tvaru nerovnosti
  - Apriorní hustota
  - Posteriorní hustota
  - Importance sampling
  - Porovnání modelů
  - Predikce
  - **Empirická ilustrace**

## Příklad – ceny domů ve Windsoru

- Apriorní hyperparametry stejné jako v předchozích příkladech.
- Omezení:  $\beta_2 > 5$ ,  $\beta_3 > 2500$ ,  $\beta_4 > 5000$  a  $\beta_5 > 5000$ .

# Posterioční výsledky pro parametr $\beta$

	Stř. hodnota	Směrodatná odchylka	NSE	P. podíl šancí pro $\beta_j = \underline{\beta}_j$
$\beta_1$	-5658.15	3011.44	41.245	1.20
$\beta_2$	5.50	0.30	0.004	0.00
$\beta_3$	3571.50	777.15	10.644	0.49
$\beta_4$	16638.59	1671.19	22.889	0.00
$\beta_5$	7454.92	925.41	12.675	0.22