Fundamentos de Inferencia Bayesiana

Algoritmos de Muestreo

El/los problema/s

1) Generar *muestras* de $p(\mathbf{x})$

2) Estimar el valor esperado de funciones bajo $p(\mathbf{x})$

$$\Phi = \int \phi(\mathbf{x}) p(\mathbf{x}) d\mathbf{x}$$

Si resolvemos el primero… $\{\mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(2)}, \ldots, \mathbf{x}^{(R)}\}$

Estimador $\hat{\Phi} = \frac{1}{R} \sum_r \phi(\mathbf{x}^{(r)})$

¿Por qué es difícil?

¡¡Tenemos *p*(**x**)!!

Dos dificultades:

1) Normalización: $p(\mathbf{x}) = p^*(\mathbf{x})/Z$

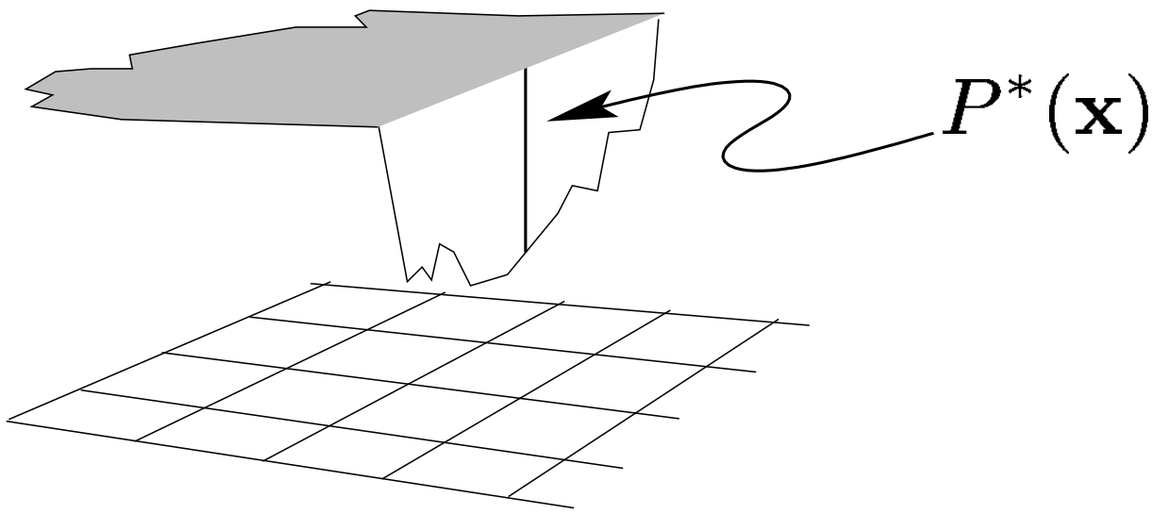
Muchas veces, tenemos sólo $p^*(\mathbf{x})$

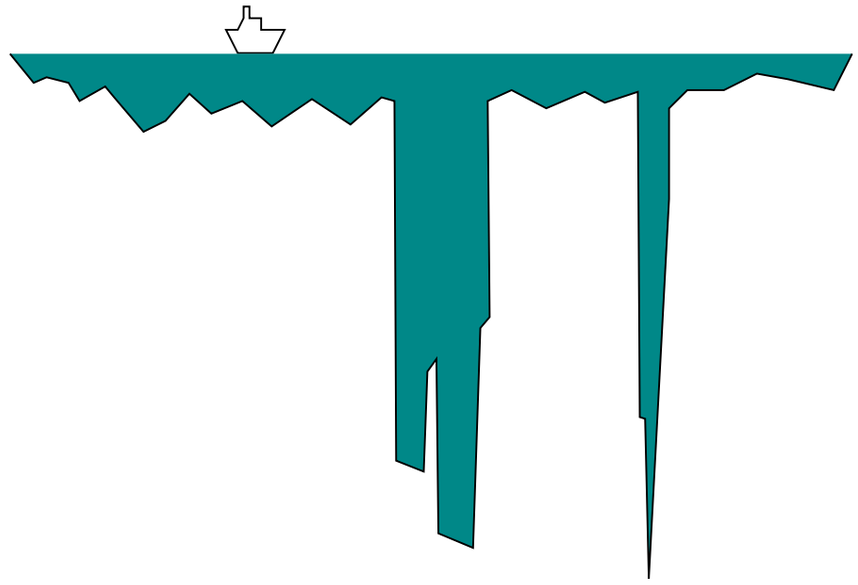
Ej. Bayes: $p(H|D) \propto p(D|H)p(H)$

2) Aun con *Z*, podemos evaluar *p*(**x**) en **cualquier** punto, pero no en **todo** punto **x**

Las muestras deberían venir principalmente de dónde *p*(**x**) es grande, pero, ¿cómo saber dónde es grande sin evaluarla en todos lados?

Analogía: medir la concentración de plankton en un lago





Problema 1: tomar muestras de agua
Problema 2: estimar la concentración media de plankton

Algunos números

Modelo de 30 variables continuas, tomamos un *grid* de 50 pasos para cada dimensión, y una computadora de 10 GHz que evalúa la posterior 10^10 veces por segundo…

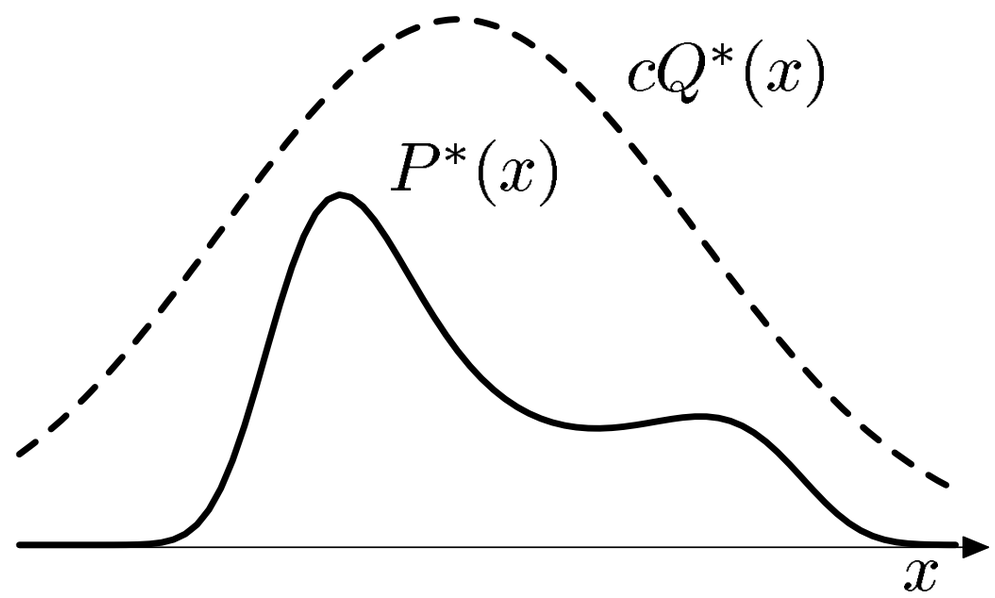
50^30 evaluaciones / 10^10 (evaluaciones/s) ~ 2^132 s

Edad del universo: 2^58 s

Rejection Sampling

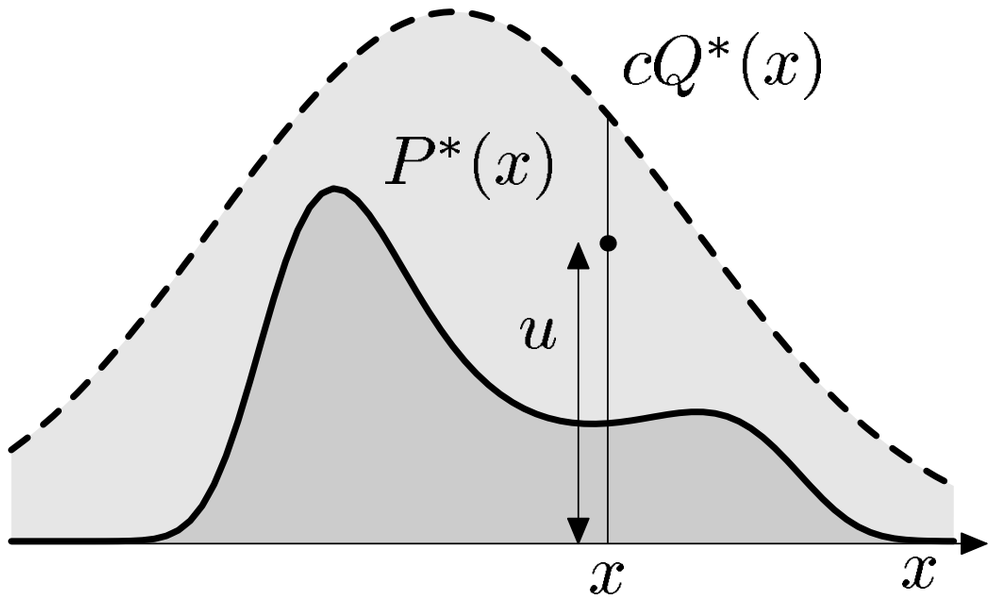
Tenemos *Q*(*x*) de la que **sí** podemos tomar muestras, y *c* tal que:

$$c\,Q^*(x) > P^*(x)$$

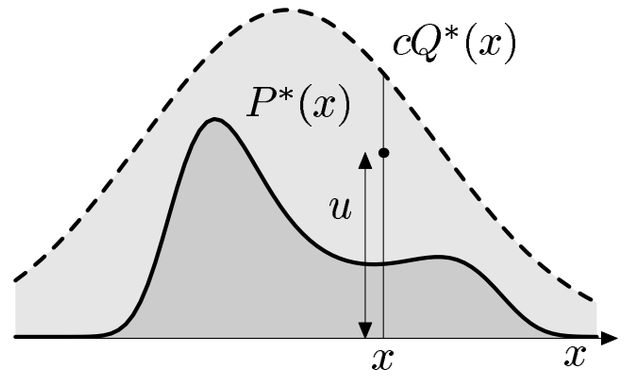


<u>Algoritmo</u>:

1) Tomamos muestra *x* de *Q(x)*
2) Evaluamos *cQ*(x)* y tomamos muestra *u* de *Uniforme(0, cQ*(x))*
3) Si *u > P*(x)*, rechazamos *x*, si no, la aceptamos



Rejection Sampling



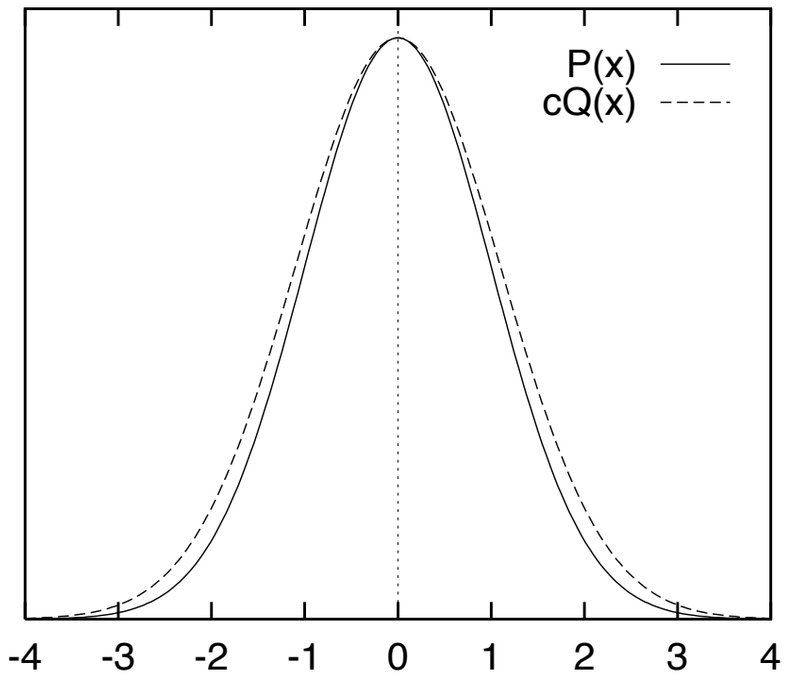
Funciona bien si *Q* es una buena aproximación a *P*

Si no, c va a tener que ser grande, y
habrá muchos rechazos

En muchas dimensiones: por lo general,
difícil incluso *hallar c*

Rejection Sampling

Ej. dos gaussianas, una con desvio 1% mayor



$$p(x) = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{N/2}} e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}$$

$$c = \frac{(2\pi\sigma_Q^2)^{N/2}}{(2\pi\sigma_P^2)^{N/2}} = \exp\left(N \ln \frac{\sigma_Q}{\sigma_P}\right)$$

c crece exponencialmente con la dimensión *N*
aquí *c~1.35* para *N=30* pero *c~20000* para *N=1000*

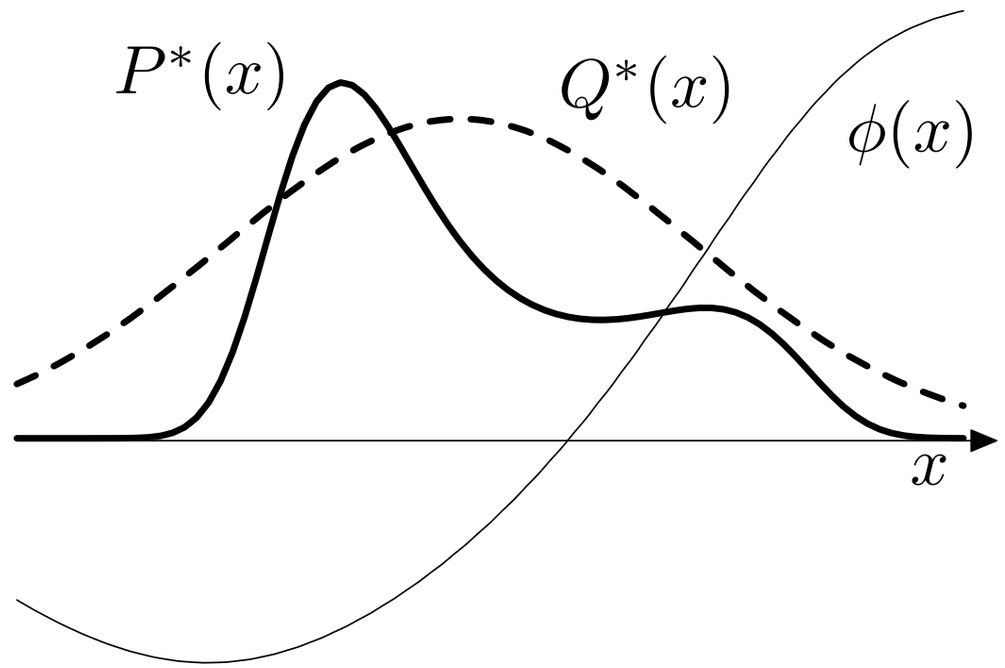
Útil para distribuciones unidimensionales,
pero no para dimensiones altas

Importance Sampling

Técnica para el problema 2, estimar valores esperados de funciones, no para tomar muestras.

Nuevamente, podemos evaluar *P*(x)* pero no tomar muestras de *P(x)*, y contamos con *Q(x)* de la que podemos tomar muestras y podemos evaluar *Q*(x)*

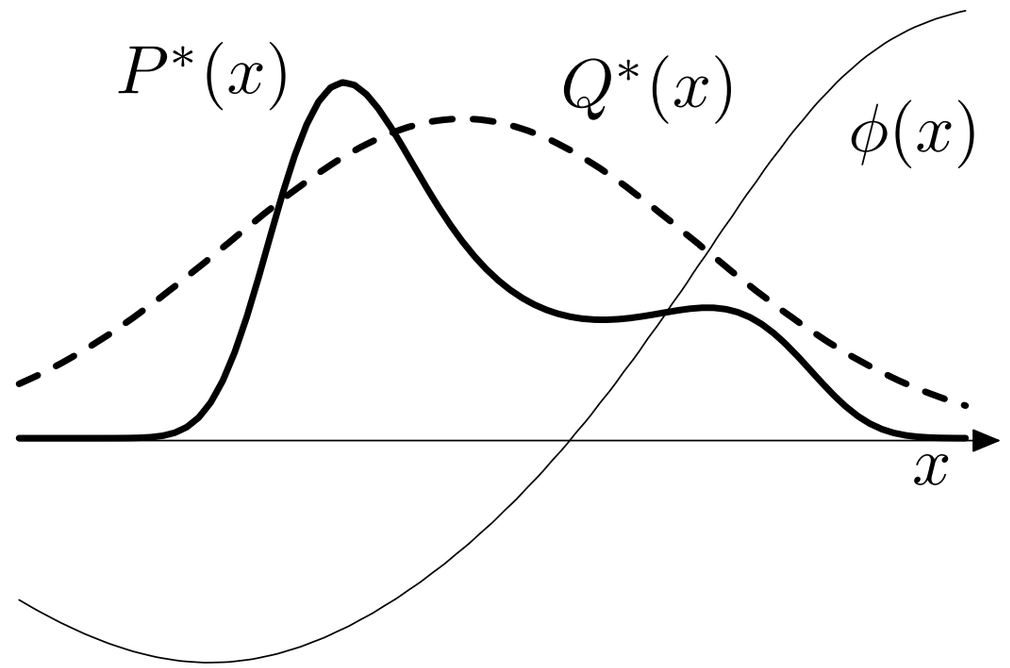
Queremos estimar el valor esperado de $\phi(x)$



Importance Sampling

Queremos estimar el valor esperado de $\phi(x)$

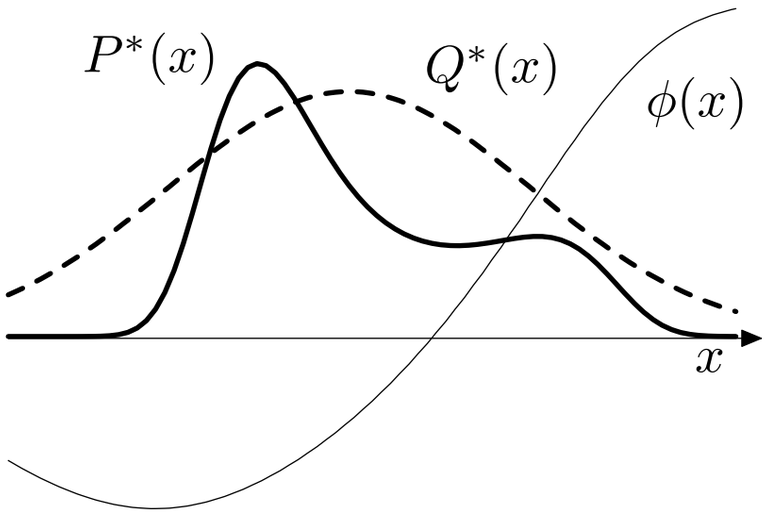
$$\hat{\Phi} = \frac{1}{R}\sum_r \phi(\mathbf{x}^{(r)})$$



<u>Algoritmo:</u>

1) Generar *R* muestras de *Q(x)*: $\{\mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(2)}, \ldots, \mathbf{x}^{(R)}\}$
2) Computar los *pesos* de las distintas muestras: $w_r \equiv \frac{P^*(x^{(r)})}{Q^*(x^{(r)})}$
3) Estimar el valor esperado como: $\hat{\Phi} \equiv \frac{\sum_r w_r \phi(x^{(r)})}{\sum_r w_r}$

Importance Sampling



$$w_r \equiv \frac{P^*(x^{(r)})}{Q^*(x^{(r)})} \qquad \hat{\Phi} \equiv \frac{\sum_r w_r \phi(x^{(r)})}{\sum_r w_r}$$

Difícil estimar cuán confiable es el estimador: si *Q(x)* es chica en un lugar donde $|\phi(x)P^*(x)|$ es grande, estimamos mal sin enterarnos..

Tamaño efectivo de muestra

$$R_{\text{eff}} = \frac{R^2}{\sum_r \tilde{w}_r^2}$$

Pesos normalizados

$$\tilde{w}_r = \frac{R w_r}{\sum_{r'} w_{r'}}$$

En muchas dimensiones, difícil “embocar” la región típica de probabilidad de *P(x)*, luego gran variación en los pesos.. Incluso en la región típica, los pesos difieren por factores de orden $\exp(\sqrt{N})$

Entonces.. ¿qué hacemos?

MCMC

Markov Chain Monte Carlo

Cadenas de Markov: la probabilidad del siguiente estado depende del estado en que estamos

Monte Carlo: Proceso Aleatorio

Algoritmo de *Metropolis*

Nuevamente, somos capaces de evaluar *P*(x)* en cualquier *x*

Densidad de *propuestas Q(x;x')*, que *depende del estado actual x'*, y es *simétrica* en *x, x'*

Algoritmo:

1) Elegir valor inicial $x^{(0)}$
2) Para *t=1…*, repetir:
   a) Tomar muestra de $Q(x'; x^{(t-1)})$
   b) Calcular la razón de densidades $r = \dfrac{P^*(x')}{P^*(x^{(t-1)})}$
   c) Tomar:

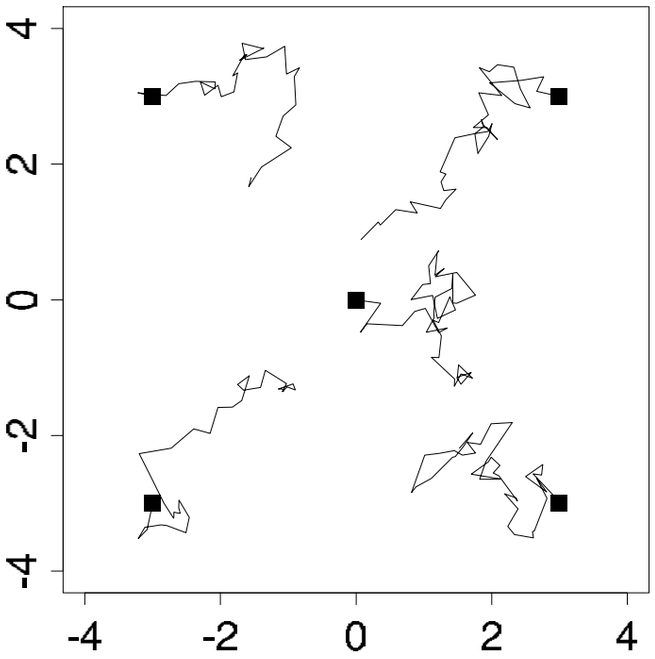
$$x^{(t)} = \begin{cases} x' & \text{con probabilidad } \min(r, 1) \\ x^{(t-1)} & \text{en otro caso} \end{cases}$$

Las muestras repetidas *no se descartan*, son muestras válidas

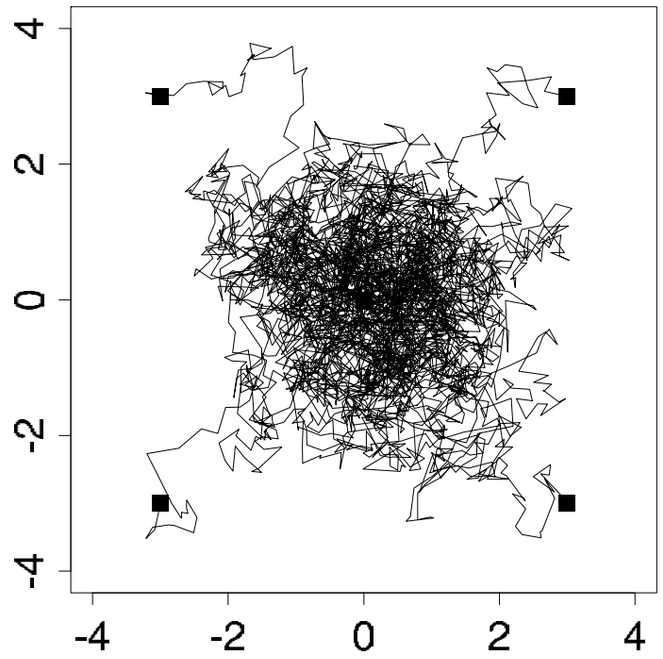
Algoritmo de *Metropolis*

Normal bivariada

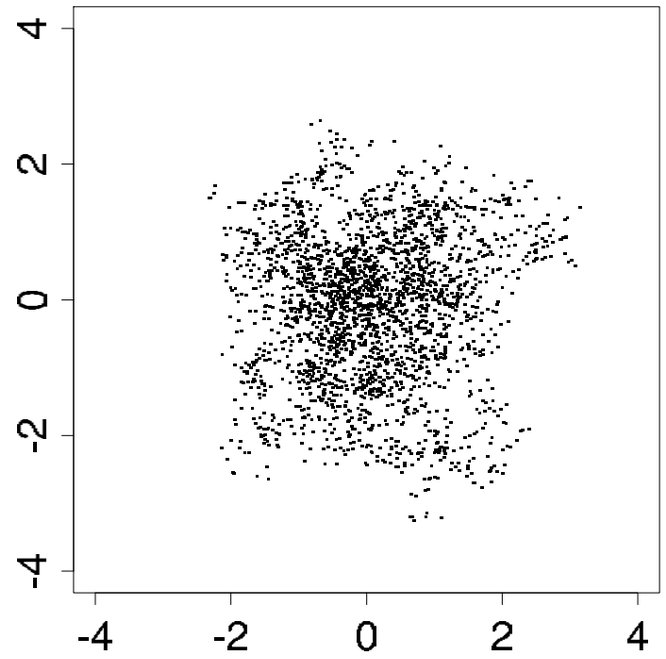
50 pasos



1000 pasos



Muestras



Aquí: saltos pequeños, comportamiento *random walk.. ineficiente*

¡Método útil en altas dimensiones!

Algoritmo de *Metropolis* ¿Por qué funciona?

Esquema de la prueba, en dos pasos:

1) Probar que la secuencia simulada es una cadena de Markov con una distribución estacionaria única (paso técnico, usando propiedades de estas cadenas)

$$\Pi(x)Q(x';x) = \Pi(x')Q(x;x')$$ Balance detallado, condición suficiente para estacionareidad

2) Probar que la distribución estacionaria de la cadena es la distribución deseada

Tomamos $x_a, x_b : P^*(x_b) \geq P^*(x_a)$

$$x_a \to x_b \quad P^*(x_a)Q(x_b;x_a) \qquad r = \frac{P^*(x')}{P^*(x^{(t-1)})}$$

$$x_b \to x_a \quad P^*(x_b)Q(x_a;x_b)\frac{P^*(x_a)}{P^*(x_b)} = P^*(x_a)Q(x_b;x_a)$$

Algoritmo de *Metropolis-Hastings*

Similar a *Metropolis*, sin imponer simetría en la densidad *Q(x;x')*

$$r = \frac{P^*(x')}{P^*(x^{(t-1)})}$$

Algoritmo:

1) Elegir valor inicial $x^{(0)}$
2) Para *t=1…*, repetir:
   a) Tomar muestra de $Q(x'; x^{(t-1)})$
   b) Calcular la razón de densidades $r = \frac{P^*(x')}{P^*(x^{(t-1)})} \frac{Q(x^{(t-1)}; x')}{Q(x'; x^{(t-1)})}$
   c) Tomar:

$$x^{(t)} = \begin{cases} x' & \text{con probabilidad } \min(r, 1) \\ x^{(t-1)} & \text{en otro caso} \end{cases}$$

Las muestras repetidas *no se descartan*, son muestras válidas

Prueba idéntica, ahora los factores *Q* en *r* compensan la falta de simetría

Algoritmo de *Gibbs*

No podemos muestrear de $P(\boldsymbol{x})$, pero sí de las *condicionales* $P(x_i | \{x_j\}_{j \neq i})$

Muestreamos una a una…

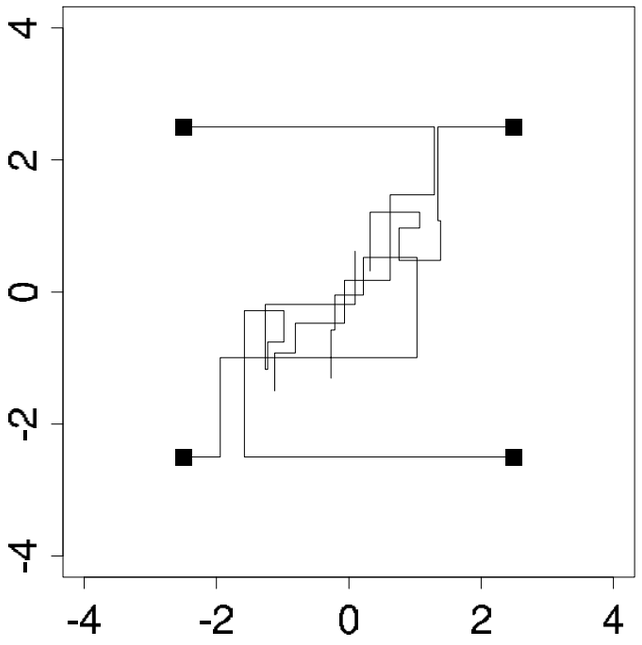
$$
\begin{aligned}
x_1^{(t+1)} &\sim P(x_1 \,|\, x_2^{(t)}, x_3^{(t)}, \ldots, x_K^{(t)}) \\
x_2^{(t+1)} &\sim P(x_2 \,|\, x_1^{(t+1)}, x_3^{(t)}, \ldots, x_K^{(t)}) \\
x_3^{(t+1)} &\sim P(x_3 \,|\, x_1^{(t+1)}, x_2^{(t+1)}, \ldots, x_K^{(t)}), \text{ etc.}
\end{aligned}
$$

Prueba de convergencia: cada paso es un método *Metropolis* en el que se aceptan todas las propuestas

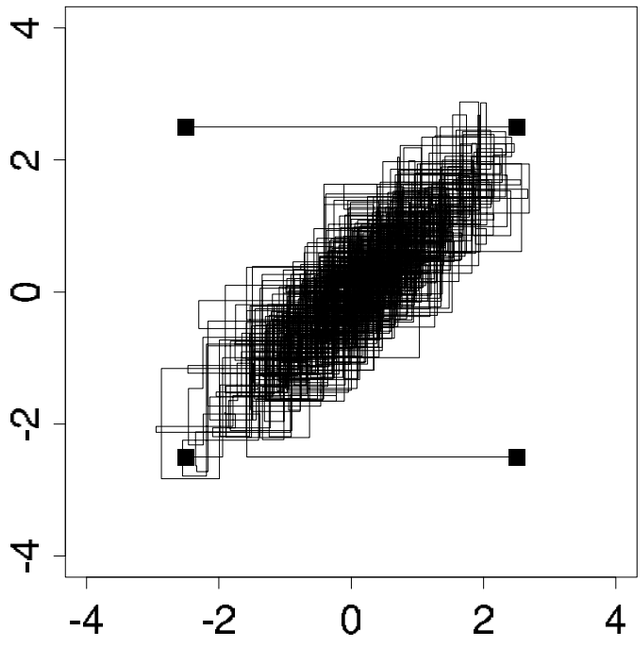
Algoritmo de *Gibbs*

Normal bivariada con corr=0.8

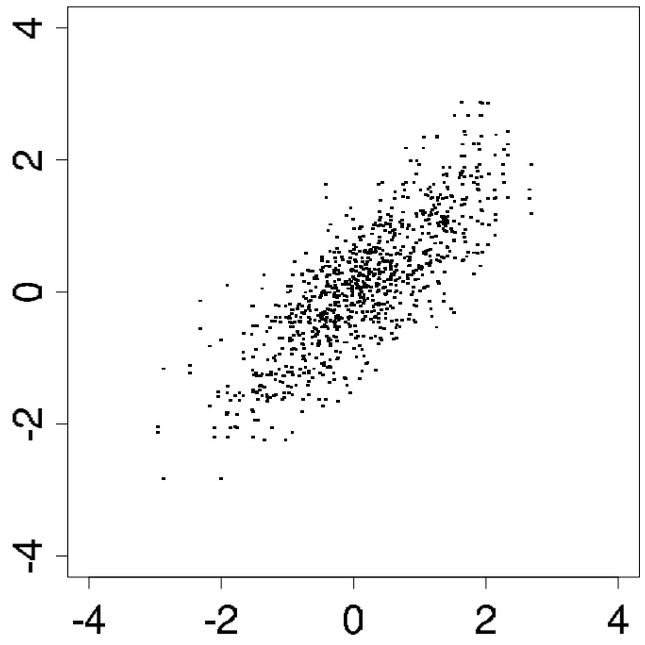
10 pasos



50 pasos



Muestras



Random walk “cuadrado”

Otras técnicas

- *Hamiltonian Monte Carlo (HMC)*
  Inspirado en física, usa el *momento* de las muestras además de la posición. Método robusto y de uso general (STAN).

- *Sequential Monte Carlo (SMC)*
  En lugar de acumular muestras en la *historia (MCMC),* a cada paso llevamos una estimación de la distribución.
  Ejemplos: *particle filters.*
  En general, buenos modelos cognitivos, ya que demandan menos, por lo que son más plausibles como mecanismo psicológico.

Práctica

Wagenmakers & Lee: 6.1, 6.2