統計計算與模擬

政治大學統計系余清祥

2024年5月28日～6月4日

第八單元：貝氏計算

http://csyue.nccu.edu.tw

貝氏(Bayesian)分析

- 貝氏理論(Bayesian Theory)

→由Thomas Bayes於1763年發表的貝氏定理而得名。貝氏分析可合併經驗與資料，可隨著資料累積更新想法，較為符合知識發展的路徑。(註：***我站在巨人的肩膀上***...)

→以往受限於計算較為複雜，因為電腦科技發展使得貝氏計算更為可行，自1990年代起愈發受到重視。

Bayesian vs. Frequentist

- 參數(Parameter)是已知或未知？

→對於參數的詮釋，大致可分為頻率學派、貝氏學派。

→兩者在觀念、分析、解釋上的特色？

問題：初等統計學多半採納那種方式？

- 多數統計教學採取頻率學派，但有些概念可能引起誤解。

→如：95%信賴區間的詮釋？

- 貝氏方法將過去經驗作為先驗資訊(Prior Information)，結合本次蒐集的資料(Data)，綜合可得新的經驗(驗後結果, Posterior)：

先驗資訊 ＋ 實驗結果 → 驗後結果

(Prior ＋ Data → Posterior)

→貝氏方法於實際應用時，可將過去經驗或是其他相關研究的結果視為先驗資訊。

→然而，使用時需注意假設條件及參數是否改變，如果情況不盡相同，可透過調整先驗分配的權數因應。

貝氏(Bayesian)定理

$$f(\theta\,|\,D)=\frac{f(D\,|\,\theta)f(\theta)}{f(D)}=\frac{f(D\,|\,\theta)f(\theta)}{\int f(D\,|\,\theta')f(\theta')d\theta'}$$

- 貝氏觀點：根據新蒐集資料更新認知。

→有人認為貝氏分析偏向「主觀機率」，但先驗分配不應主宰驗後結果。

- 範例一、某君投擲一硬幣100次，出現42次正面；第二天再投擲同一硬幣100次，出現52次正面。檢驗此硬幣是否為公平硬幣。

→投擲硬幣100次，出現正面的次數可視為二項分配的變數，與觀察某地區同年齡居民在一年內的死亡人數類似，投擲兩天就像是觀察連續兩年的死亡率。

→以估算死亡率的角度來看，我們應該使用第一年、第二年、或是兩年合併的資料估計出現正面的機率，又該如何合併兩年的資料？（例如：加權平均、直接相加？）

- 範例一(續)、你/妳覺得硬幣出現正面的機會(p)等於多少？$X \sim B(100, p)$

→只使用第一天資料，$\hat{p} = \dfrac{42}{100} = 0.42$ 。

→只使用第二天資料，$\hat{p} = \dfrac{52}{100} = 0.52$。

→兩天資料相加，$\hat{p} = \dfrac{42+52}{100+100} = \dfrac{94}{200} = 0.47$。

- 問題：第二天的權重是否應該較重？

貝氏分析

- 若無特別指定，貝氏分析原則上將所有資料直接合併，也就是平均加權。

→先驗與驗後屬於同一類型的分配，稱為共軛先驗分配(Conjugate Prior Distribution)，常見的例子有：

Beta＋Binomial→ Beta

Gamma + Poisson → Gamma

Normal ＋ Normal → Normal

Dirichlet ＋Multinomial → Dirichlet

- 以範例一為例，硬幣出現正面的次數大多視為二項分配，如果假設正面出現的機會服從Beta分配，則在加入資料的分析後，出現正面的機會仍舊服從驗後Beta分配。

→正面、反面個數分別相加。

$$p \sim Beta(\alpha,\beta) \Rightarrow \pi(p) = \frac{\Gamma(\alpha+\beta)}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta)} p^{\alpha-1}(1-p)^{\beta-1}$$

$$X \sim B(n,p) \Rightarrow f(x|p) = \frac{n!}{x!(n-x)!} p^{x}(1-p)^{n-x}$$

$$p|x \sim Beta(\alpha+x,\beta+n-x) \Rightarrow \pi(p|x) \propto p^{\alpha+x-1}(1-p)^{\beta+n-x-1}$$

- 上述的先驗Beta分配中，參數α及β可視為過去的經驗中，正面及反面出現的次數，因此驗後Beta分配中的參數，可解釋為累積的正面及反面出現次數。

→Beta分配的期望值滿足 $E(p) = \alpha/(\alpha+\beta)$，因此

$$E(p\,|\,x) = \frac{\alpha + x}{\alpha + \beta + n}$$

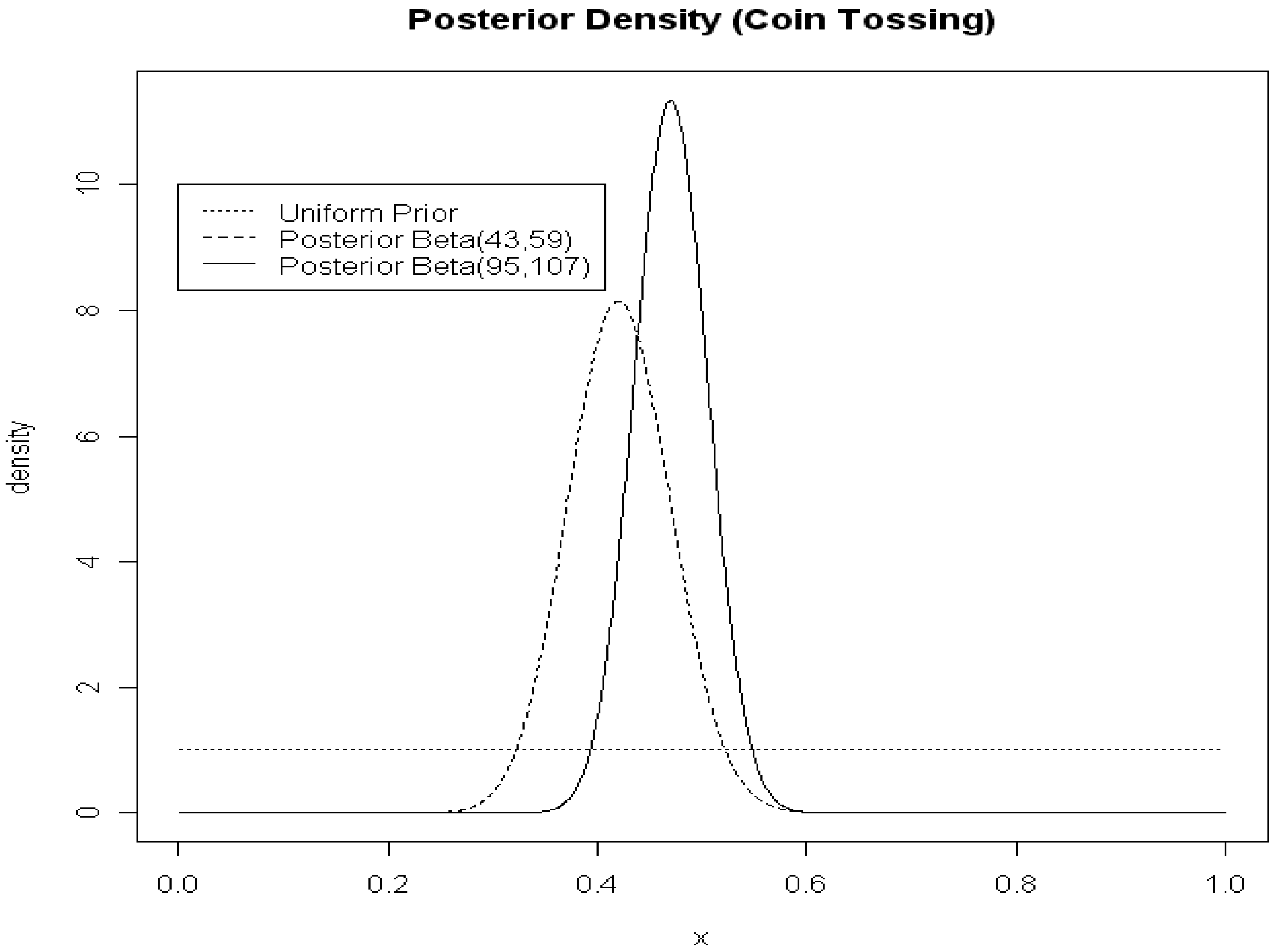
$$= \frac{\alpha + \beta}{\alpha + \beta + n} \cdot \frac{\alpha}{\alpha + \beta} + \frac{n}{\alpha + \beta + n} \cdot \frac{x}{n}$$

為先驗分配及實驗結果的加權平均，權數為個別的樣本數。

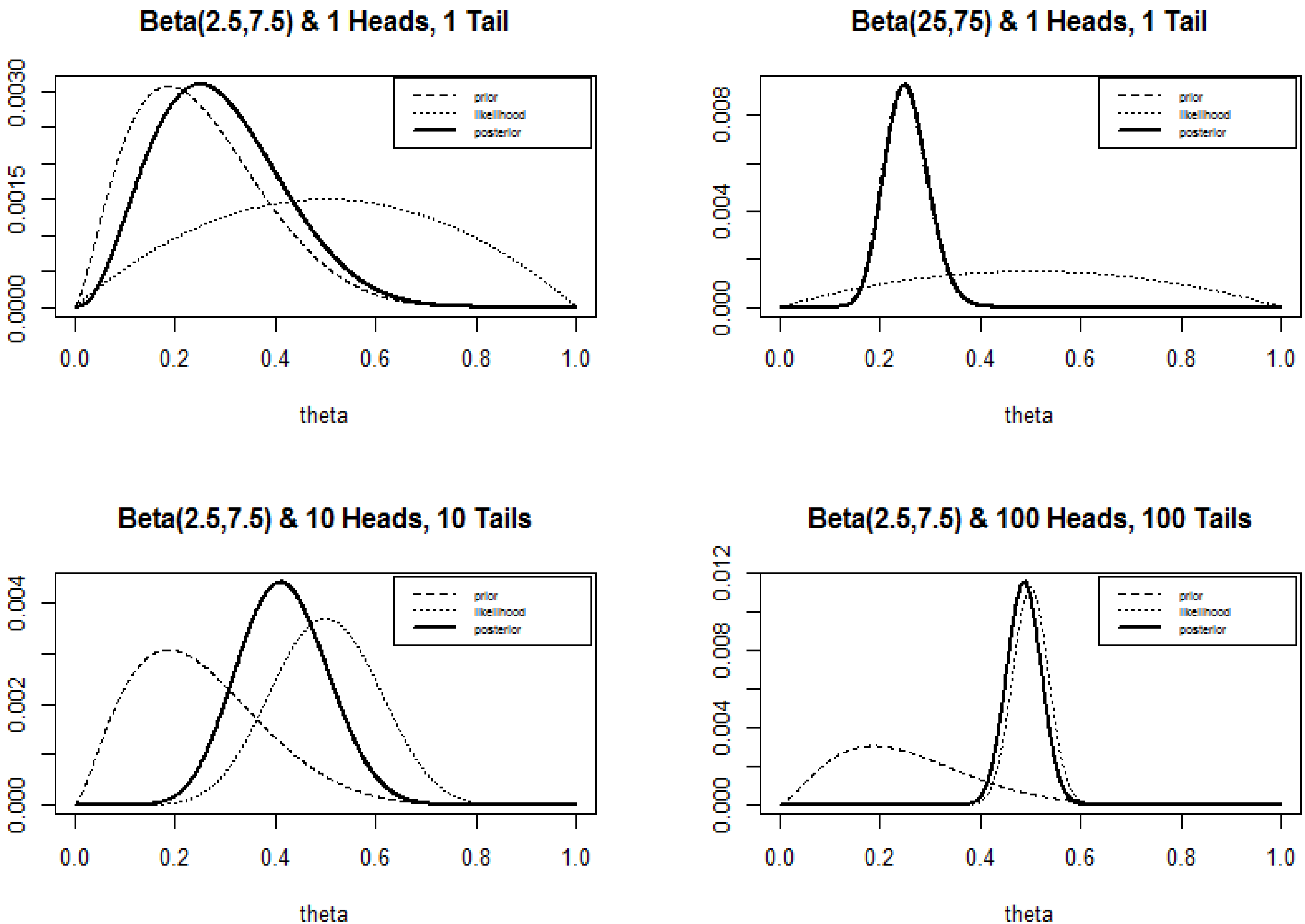
- 如果過去經驗記為s_x(標準生命表的數值)，死亡率的觀察值為u_x，範例一可視為：

$$v_x = \frac{\alpha+\beta}{\alpha+\beta+n}\cdot s_x + \frac{n}{\alpha+\beta+n}\cdot u_x$$

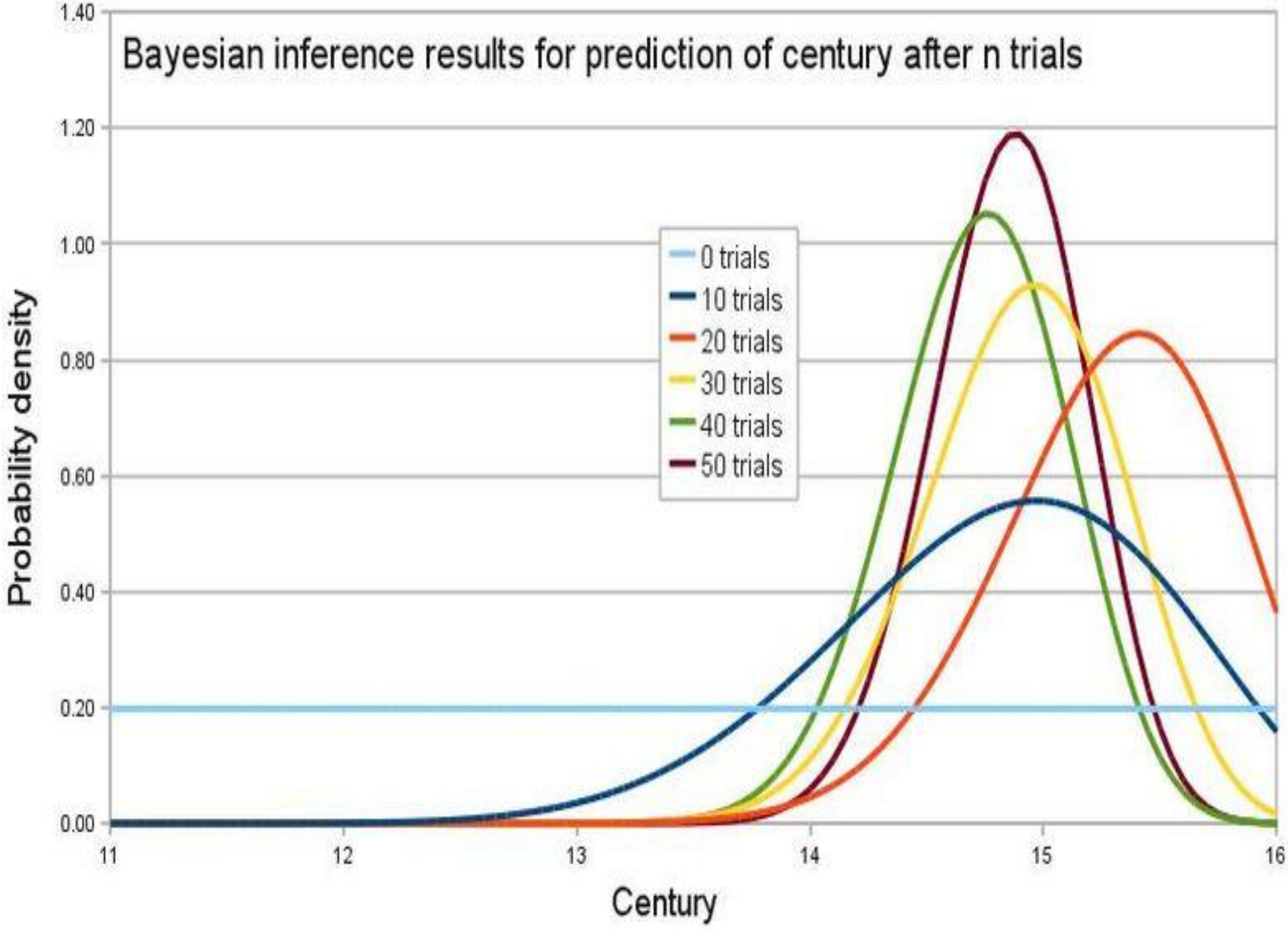
修勻值為經驗值與死亡觀察值的加權平均。過去經驗的樣本數如果較多，則修勻值較接近經驗值；反之，如果本次蒐集的資料比數較多(n較大)，最近的經驗佔較大的比重，甚至可推翻過去的經驗。（「三人成虎」！）

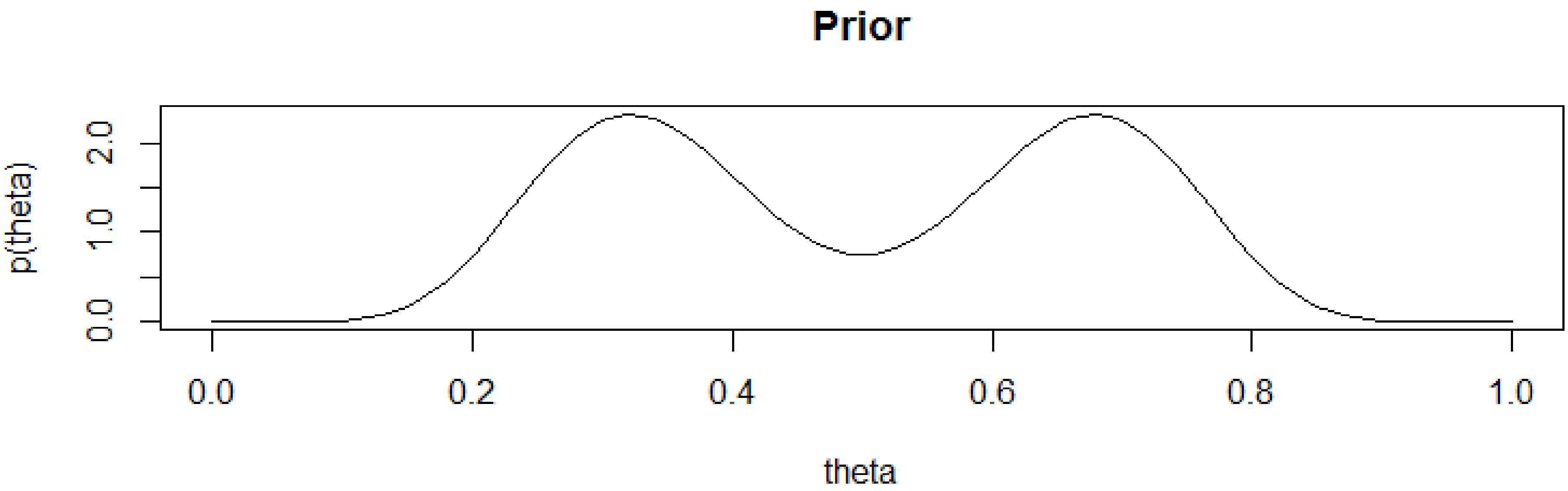


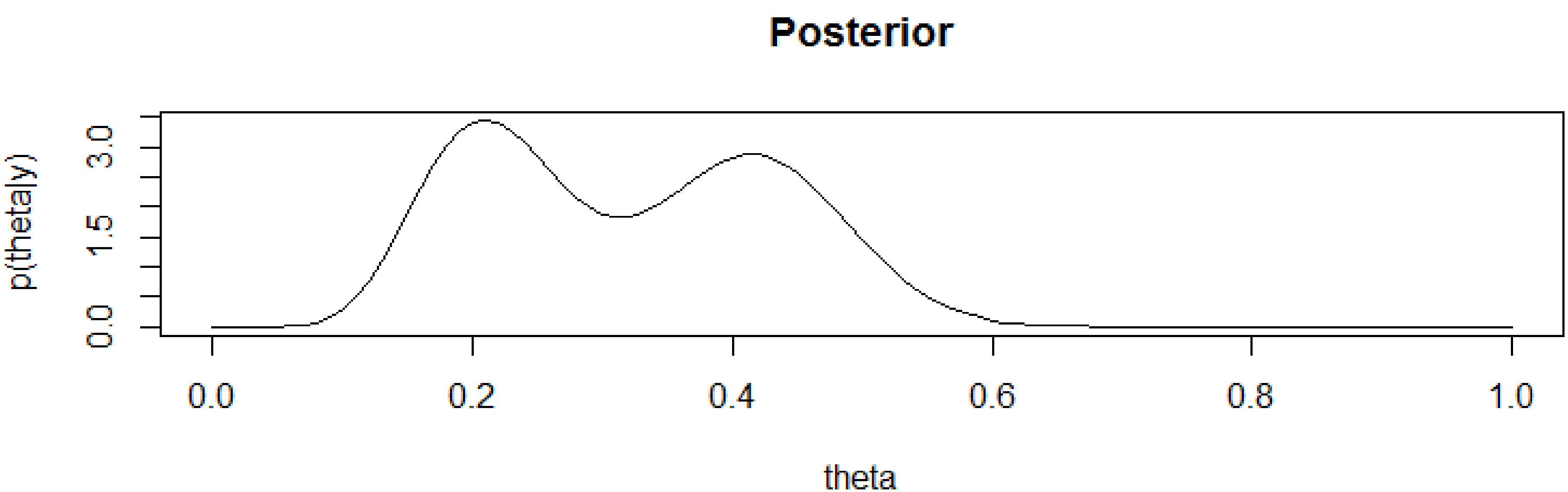
Posterior Density (Coin Tossing)
Uniform Prior
Posterior Beta(43,59)
Posterior Beta(95,107)
density
x
0
2
4
6
8
10
0.0
0.2
0.4
0.6
0.8
1.0



Prior與Data的樣本數對Posterior的影響


Bayesian inference results for prediction of century after n trials
Probability density
Century
0 trials
10 trials
20 trials
30 trials
40 trials
50 trials
0.00
0.20
0.40
0.60
0.80
1.00
1.20
1.40
11
12
13
14
15
16





Data樣本數夠大就能扭轉Prior的影響！

貝氏分析的理念

- 一般對參數的假設是「未知但固定」，貝氏則認為參數「具有某種分配」，對參數的瞭解通常隨著樣本數增加而更確定。

→以上述投擲硬幣為例，正面出現機會的驗後分配，滿足變異數

$$Var(p \mid x) = \frac{(\alpha + x)(\beta + n - x)}{(\alpha + \beta + n + 1)(\alpha + \beta + n)^2}$$

隨著樣本數增加趨近於0，即收斂至一點。

貝氏分析的理念(續)

- 如果缺乏過去經驗，先驗分配可假設無資訊的先驗分配(Non-informative Prior)，意謂先驗分配對整體的影響力極小。

→出現正面機會中的先驗Beta分配，一般會給定均勻分配U(0,1) = Beta(1,1)為無資訊先驗分配，也就是過去只有一次正面、一次反面的經驗。因此驗後期望值為 $\frac{x+1}{n+2}$ ，與最大概似估計量MLE $\frac{x}{n}$ 非常接近。

貝氏分析的理念(續)

- 常態分配是另一個常見的共軛先驗分配，因為各年齡的人數動輒以萬計算，以常態分配近似還算適當。(註：死亡率大小？)

→假設某年齡的死亡率滿足 $\theta \sim N(\mu,\tau^2)$，而某年度蒐集的該年齡死亡資料也滿足 $X|\theta \sim N(\theta,\sigma^2)$，則死亡率的驗後分配服從 $\theta|X=x \sim N(\frac{\sigma^2\mu+\tau^2 x}{\tau^2+\sigma^2},\frac{\tau^2\sigma^2}{\tau^2+\sigma^2})$

或是 $E(\theta|X=x)=\frac{1/\tau^2}{1/\sigma^2+1/\tau^2}\mu+\frac{1/\sigma^2}{1/\sigma^2+1/\tau^2}x$。

Normal + Normal → Normal

- 常態分配的共軛先驗分配，其型態和計算方法與二項分配類似。

→若真實死亡率的先驗分配滿足 $\underset{\sim}{t} \sim N(\underset{\sim}{m}, A)$

觀察的死亡率服從常態分配 $\underset{\sim}{u} \mid \underset{\sim}{t} \sim N(\underset{\sim}{t}, B)$

$$\pi(\underset{\sim}{t}) = k_1 \cdot \exp[-\tfrac{1}{2}(\underset{\sim}{t} - \underset{\sim}{m})' A^{-1} (\underset{\sim}{t} - \underset{\sim}{m})]$$

$$f(\underset{\sim}{u} \mid \underset{\sim}{t}) = k_1 \cdot \exp[-\tfrac{1}{2}(\underset{\sim}{u} - \underset{\sim}{t})' B^{-1} (\underset{\sim}{u} - \underset{\sim}{t})]$$

- 驗後分配需要先計算出 $\underset{\sim}{u}$ 的邊際分配 (Marginal distribution) $f(\underset{\sim}{u})$，藉由

$$f(\underset{\sim}{t},\underset{\sim}{u}) = \pi(\underset{\sim}{t})\cdot f(\underset{\sim}{u}\,|\,\underset{\sim}{t}) = f(\underset{\sim}{u})\cdot \pi(\underset{\sim}{t}\,|\,\underset{\sim}{u})$$

算出真實死亡率的驗後分配。

→因為計算不易，一般只考慮與 $\underset{\sim}{t}$ 有關的項次，或是令 $\underset{\sim}{t}\,|\,\underset{\sim}{u} \sim N(\underset{\sim}{v},C)$，其中

$$(\underset{\sim}{t}-\underset{\sim}{v})'C^{-1}(\underset{\sim}{t}-\underset{\sim}{v}) \propto$$

$$(\underset{\sim}{t}-\underset{\sim}{m})'A^{-1}(\underset{\sim}{t}-\underset{\sim}{m}) + (\underset{\sim}{u}-\underset{\sim}{t})'B^{-1}(\underset{\sim}{u}-\underset{\sim}{t})$$

$$C^{-1} = A^{-1} + B^{-1}$$

- 上式對$\underset{\sim}{t}$微分可得

$$2C^{-1}(\underset{\sim}{t}-\underset{\sim}{v})=2A^{-1}(\underset{\sim}{t}-\underset{\sim}{m})+2B^{-1}(\underset{\sim}{u}-\underset{\sim}{t})$$

或是修勻值 $\underset{\sim}{v}=C(A^{-1}\underset{\sim}{m}+B^{-1}\underset{\sim}{u})$。

→重新排列，令 I 為單位矩陣，修勻值可表達為 $\underset{\sim}{v}=\underset{\sim}{u}+(I+AB^{-1})^{-1}(\underset{\sim}{m}-\underset{\sim}{u})$ ，也就是根據觀察死亡率 $\underset{\sim}{u}$，再加入經驗值 $\underset{\sim}{m}$ 的效果來修勻。同理，也可以經驗值再加入觀察死亡率來調整 $\underset{\sim}{v}=\underset{\sim}{m}+(I+BA^{-1})^{-1}(\underset{\sim}{u}-\underset{\sim}{m})$。

Choices of $\underset{\sim}{m}$, A, & B

- 先驗分配中的參數 $\underset{\sim}{m}$ 及 A 對結果有相當的影響，以下列出參數選擇的建議：

→ $\underset{\sim}{m}$ 的選擇大多是經驗中最有可能的數值。以修勻今年生命表為例，通常會以上一次、或是去年死亡經驗當作經驗值。

→ 因為A代表各年齡死亡率間的關係，一般會先決定每個年齡變異數，再藉由年齡間的相關程度決定共變異數。

Choices of $\underset{\sim}{m}$, A, & B (cont.)

→共變數矩陣A需要滿足

(i)正定、對稱矩陣 (ii)可逆矩陣

建議可選取 $A_{xy} = \sqrt{A_{xx}}\sqrt{A_{yy}}\, r^{|x-y|},\ 0 \le r < 1$

其中A_{xx}及A_{yy}為x歲及y歲死亡率的變異數。

→因為原始死亡率服從二項分配，變異數矩陣B通常假設為對角矩陣，各年齡死亡率的變異數為

$$B_{xx} = Var(u_x) = \frac{t_x(1-t_x)}{n_x} \cong \frac{m_x(1-m_x)}{n_x}$$

Correlation Matrix (Positive Definite)

```
PDM=function(n,rho) {
    A=NULL
     j=c(1:n)
      for (i in 1:n) {
       A=rbind(A,rho^abs(i-j))
       }
    return(A)
   }
#
#  Use "eigen" to check the result.
eigen(PDM(5,0.9))
 $values
[1] 4.26213409 0.45446614 0.14592141 0.07943386 0.05804450
```

參數A與B的特例

→共變數矩陣A與B均為對角矩陣

$$v_x = \frac{b_{xx}}{a_{xx}+b_{xx}} m_x + \frac{a_{xx}}{a_{xx}+b_{xx}} u_x$$

→ 如果

$$A = \underset{\sim}{1}\,\underset{\sim}{1}'\sigma^2 = \begin{bmatrix} 1 & 1 & . & . & 1 \\ 1 & 1 & . & . & 1 \\ . & . & . & . & . \\ . & . & . & . & . \\ 1 & 1 & . & . & 1 \end{bmatrix} \sigma^2, \quad B = I_{n\times n}$$

$$\Rightarrow E(\underset{\sim}{t} \mid \underset{\sim}{u}) = \underset{\sim}{m} + \mu \underset{\sim}{1}, \ \mu = \tfrac{1}{2}(\underset{\sim}{1} B^{-1} \underset{\sim}{1} + \frac{n^2}{\sigma^2}) \underset{\sim}{1}' B^{-1} (\underset{\sim}{u} - \underset{\sim}{m})$$

其它共軛貝氏分配

- 死亡率除了假設常態分配，常見的是令其服從多項分配，

$$f(d_1,d_2,\ldots,d_k \mid \underset{\sim}{t}) = \frac{d\,!}{\prod_{i=1}^{k} d_i\,!} \prod_{i=1}^{k} t_i^{d_i}$$

其中d為所有死亡人數，d_i為第i年齡組死亡人數。

→ 如果死亡率服從Dirichlet假設，記為

$$\underset{\sim}{t} = (t_1,t_2,\ldots,t_k) \sim Dirichlet(a_1,a_2,\ldots,a_k)$$

其它共軛貝氏分配(續)

→Dirichlet分配的密度函數為

$$f(t_1,t_2,\ldots,t_k)=\frac{\Gamma(\sum_{1}^{k} a_i)}{\prod_{i=1}^{k}\Gamma(a_i)}\prod_{i=1}^{k} t_i^{a_i-1}$$

驗後的分配變成

$$\underset{\sim}{t} \mid \underset{\sim}{d} \sim Dirichlet(a_1+d_1, a_2+d_2, \ldots, a_k+d_k)$$

→ 其中第i組死亡率的修勻值滿足

$$v_i=\frac{a}{a+d}\cdot\frac{a_i}{a}+\frac{d}{a+d}\cdot\frac{d_i}{d}$$

非共軛分配的貝氏計算

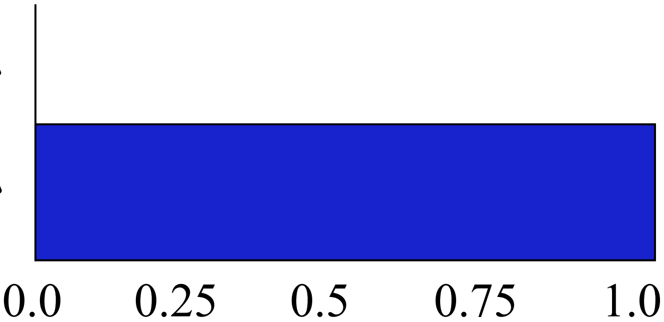
- 共軛分配可簡化計算，但也限制貝氏分析的應用範圍，只要先驗分配與假設略有差異，計算複雜度將大為提高。

→近年電腦科技進步快速，貝氏分析因為蒙地卡羅馬可夫鏈(Monte Carlo Markov Chain；MCMC)而更為可行，不需要共軛分配假設、或是事先指定先驗分配。

關於貝氏計算

- 透過貝氏計算可估計出參數的驗後分配。

→根據經驗值決定先驗分配，或是使用無資訊先驗分配(Non-informative Prior)；



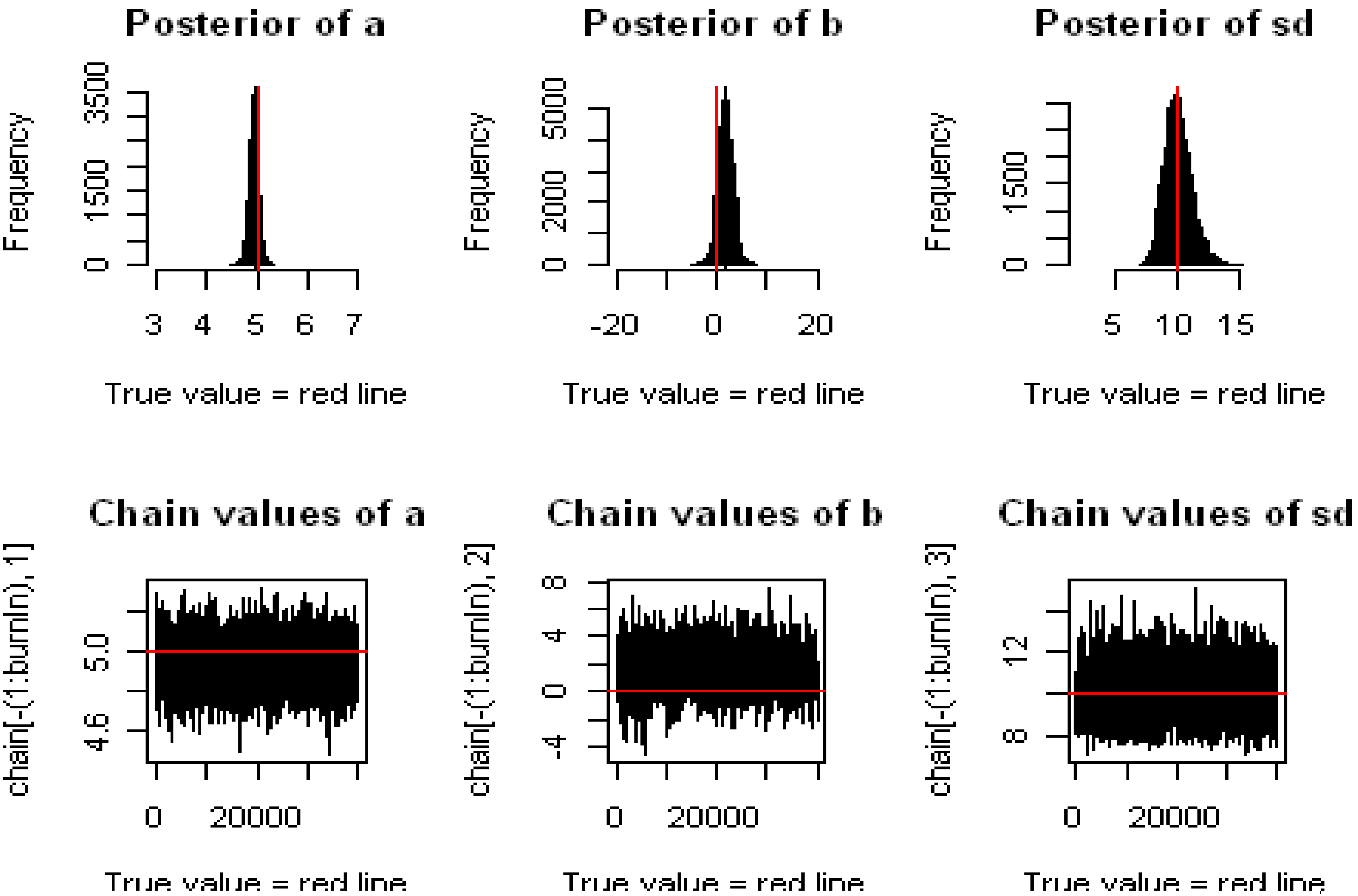
→經驗貝氏(Empirical Bayes)：可將資料折成兩部分，一部份用於估計先驗分配。

- MCMC是近年常見的貝氏計算方法，透過多次遞迴的電腦模擬，估計出參數的驗後分配。

MCMC方法簡介

- 若先驗分配與驗後分配屬於不同形態的函數，必須仰賴數值積分之類的方法求出驗後機率，而MCMC以另一種方式簡化問題。

→正如蒙地卡羅法的隨機產生亂數，MCMC使用Markov Chain從某個分配（驗後分配）中產生亂數（抽樣），再以這些樣本估計期望值、變異數等參數；不同的MCMC法主要的區別在於建構Markov Chain的方法。

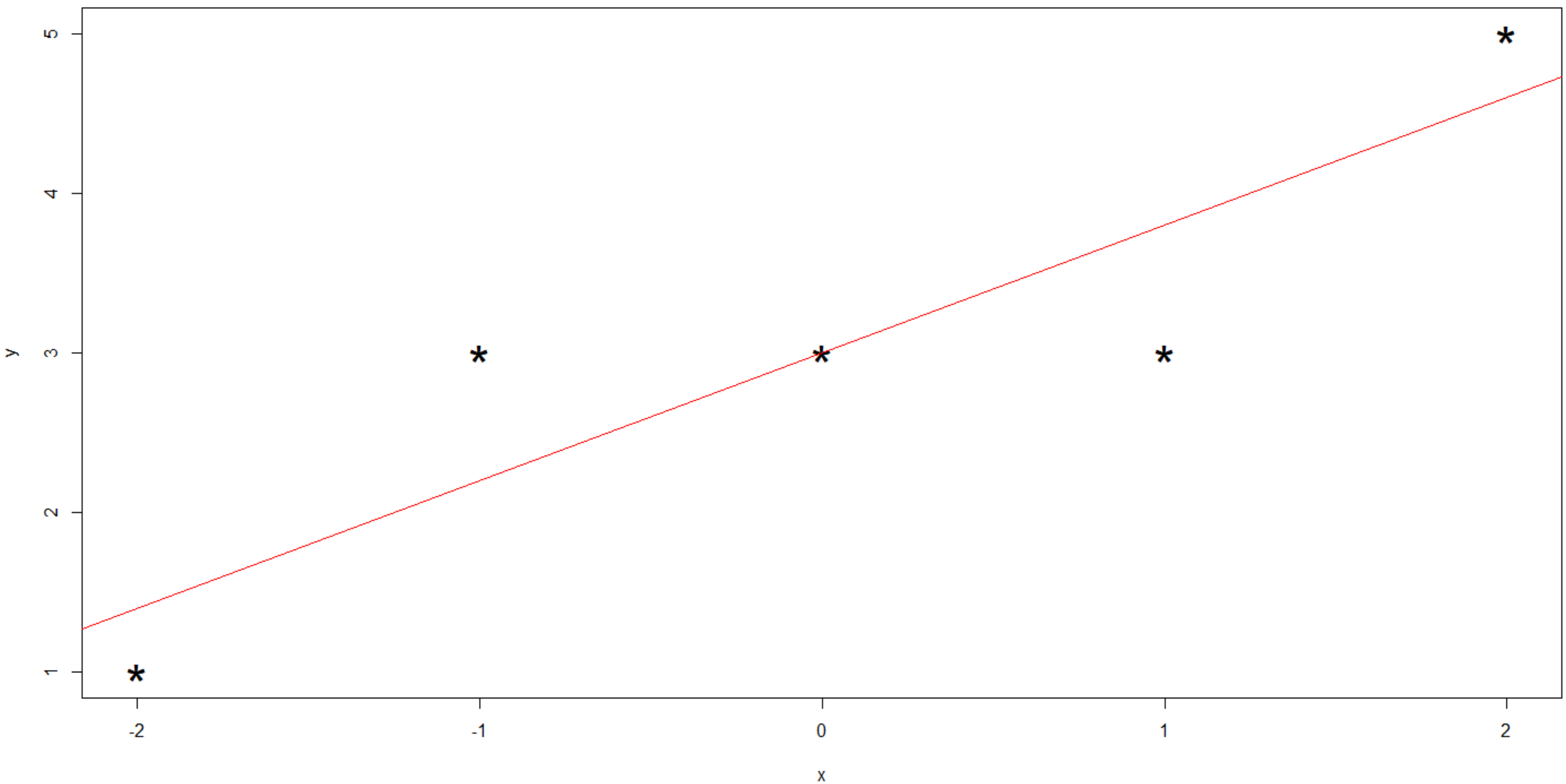


An Example MCMC – Simple Linear Regression

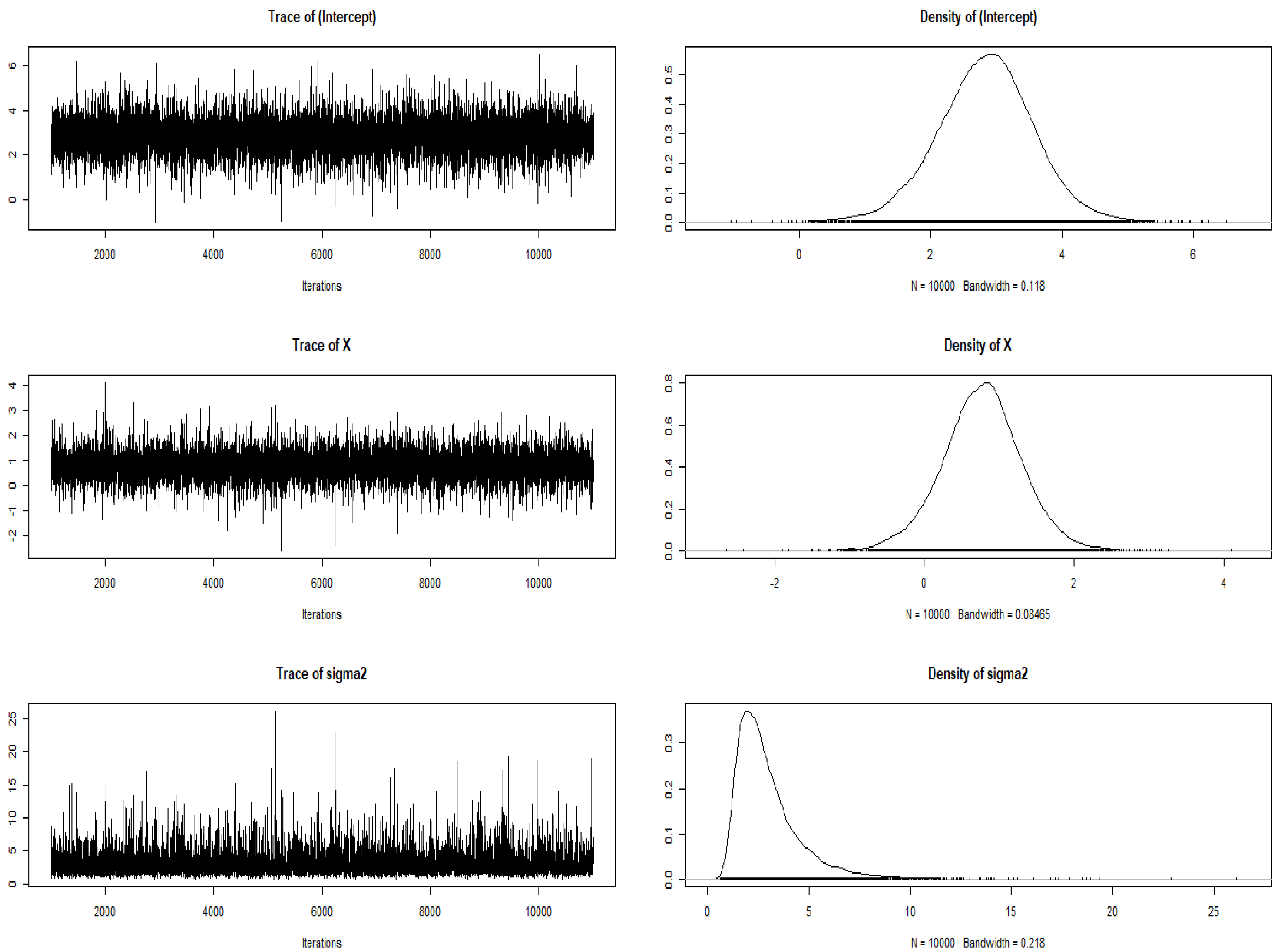
範例一：簡單線性迴歸

- X與Y似乎存有線性關係

→由散佈圖判斷X與Y呈現線性關係。



```
   library(devtools)
   library(ggplot2)
   library(HDInterval)
   library(MCMCpack)
   library(mcmc)
   library(mcmcse)
   library(Rcpp)
   library(RcppArmadillo)
   library(stableGR)
#
     line  = list(X = c(-2,-1,0,1,2), Y = c(1,3,3,3,5))
     posterior  = MCMCregress(Y~X, b0=0, B0 = 0.1,
                    sigma.mu = 5, sigma.var = 25, data=line, verbose=1000)
     plot(posterior)
     raftery.diag(posterior)
     summary(posterior)
#                          2.5%     25%      50%      75%      97.5%
#    Intercept = 3        1.3085   2.3765   2.8594   3.3180   3.3290
#    Slope = 0.8         -0.3465   0.4353   0.7788   1.1100   1.8460
#    Sigma = 0.7303       1.1552   1,8859   2.5745   3.6240   7.8270
```


Trace of (Intercept)
Iterations
Density of (Intercept)
N = 10000   Bandwidth = 0.118
Trace of X
Iterations
Density of X
N = 10000   Bandwidth = 0.08465
Trace of sigma2
Iterations
Density of sigma2
N = 10000   Bandwidth = 0.218

範例二：簡單線性迴歸「bikes.csv」

- 報名腳踏車比賽人數(Y)、體感溫度(X)

→由散佈圖判斷，兩者呈現線性關係，可透過一般簡單線型迴歸、或是貝氏估計求取Y與X的關係。

→一般線性迴歸結果：

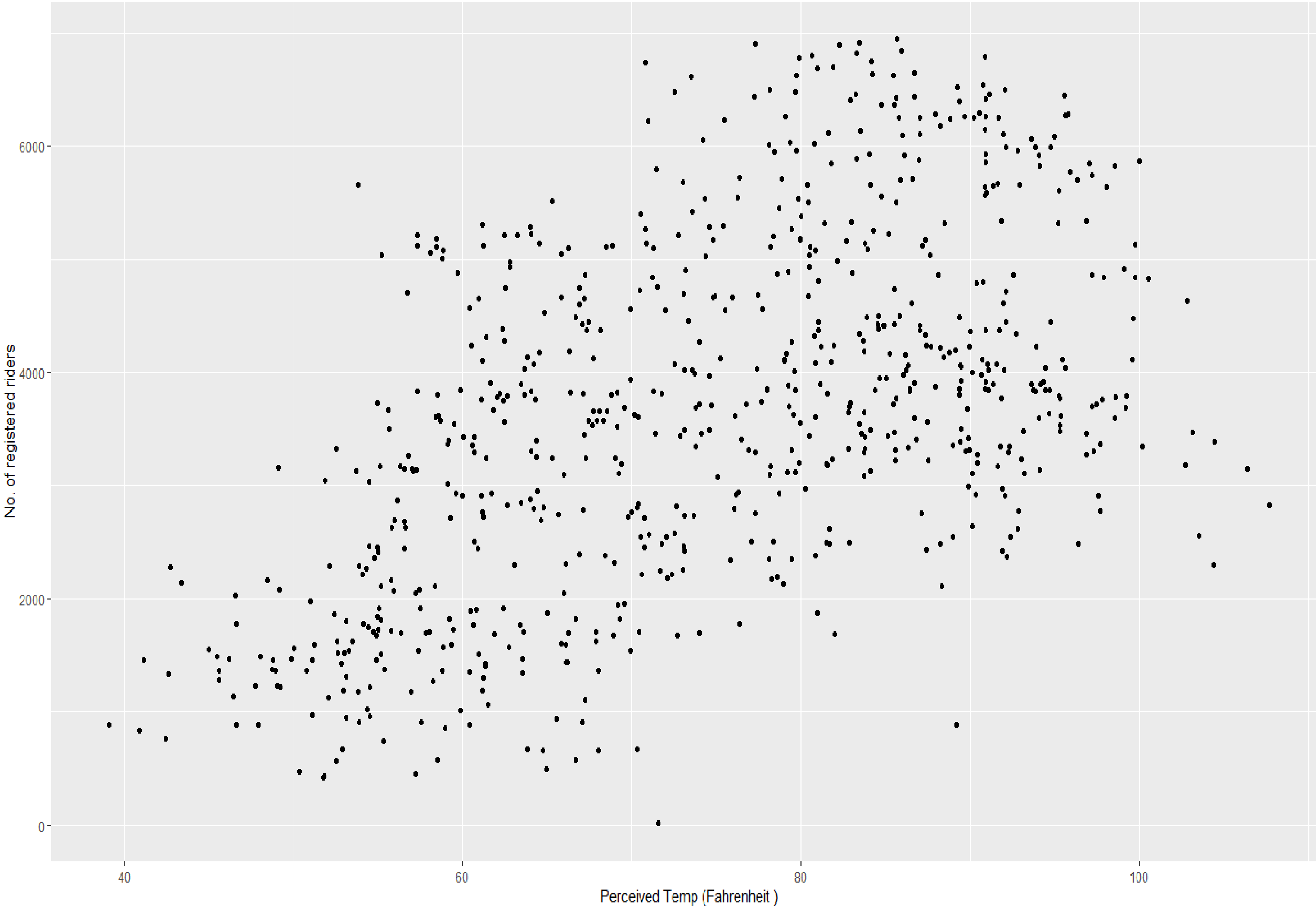
	Estimate	Std. Error	t value	Pr(>|t|)	
(Intercept)	-667.916	251.608	-2.655	0.00811	**
temp_feel	57.892	3.306	17.514	< 2e-16	***

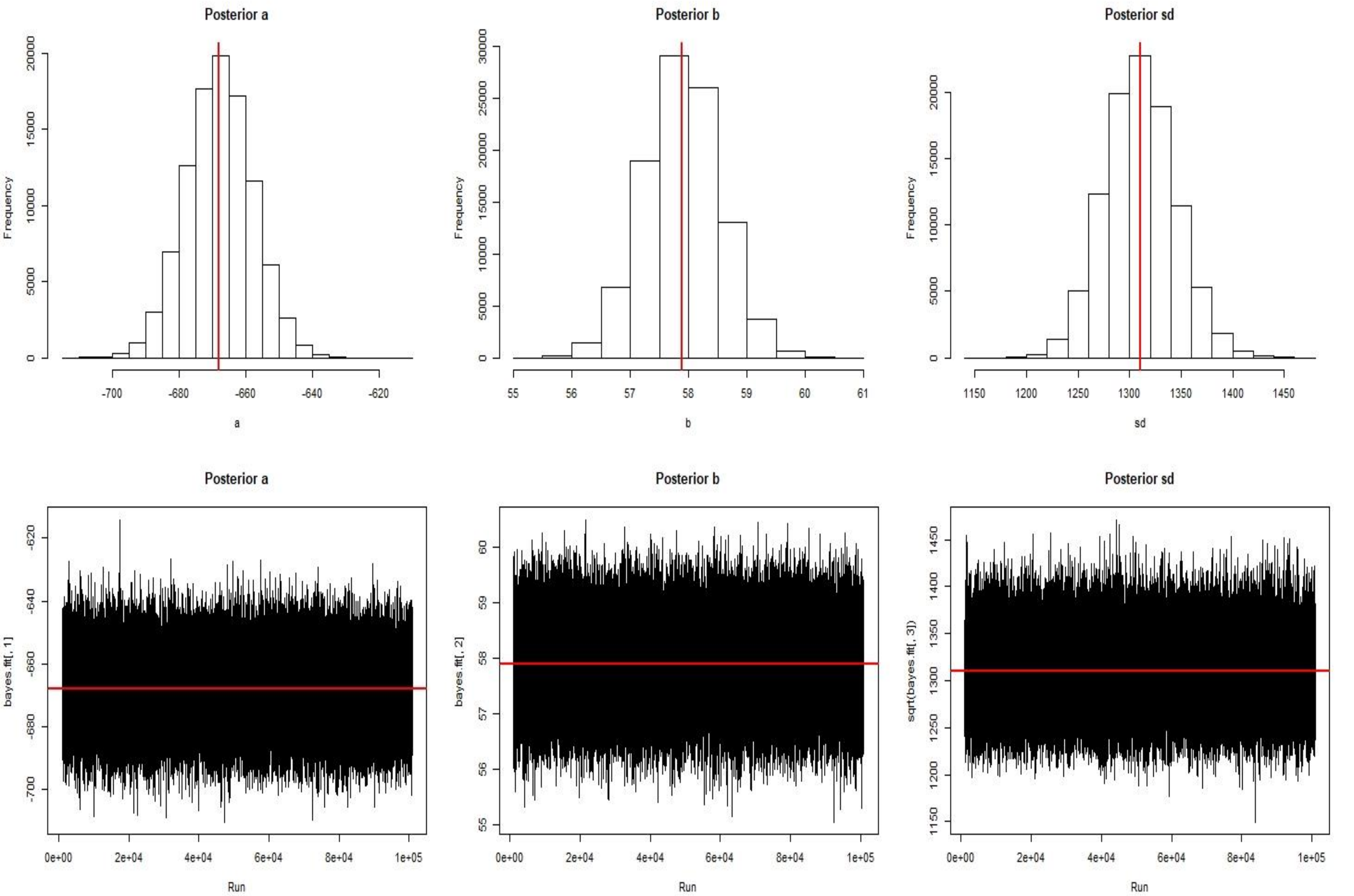
Residual standard error: 1310 on 729 degrees of freedom

Multiple R-squared: 0.2961,   Adjusted R-squared: 0.2952

F-statistic: 306.7 on 1 and 729 DF, p-value: < 2.2e-16

報名腳踏車比賽人數(Y)、體感溫度(X)



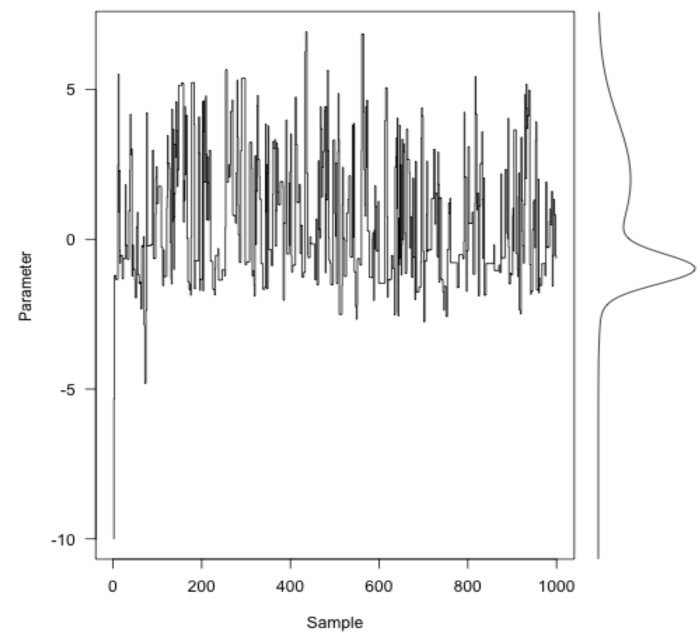


MCMC Estimates of Bikes Data (Simple Linear Regression)

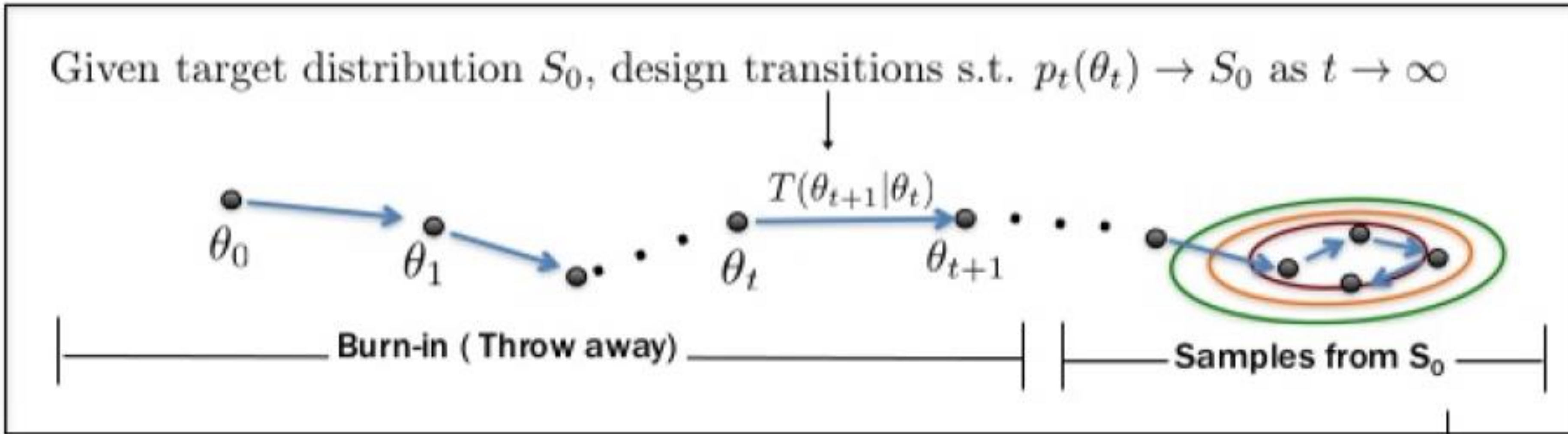
MCMC方法簡介(續)

- MCMC的關鍵之一在於如何透過馬可夫鏈，遞迴產生近似驗後分配的觀察值。

→為了確保MCMC產生的亂數是否平穩，通常捨棄較前面的觀察值(Burn-in sample)。例如：從5萬個MCMC樣本刪除前面2萬個，以之後的3萬個觀察值估計參數，也可建立Credible Set、類似信賴區間的區間估計值。



MCMC─以馬可夫鏈遞迴式的產生亂數



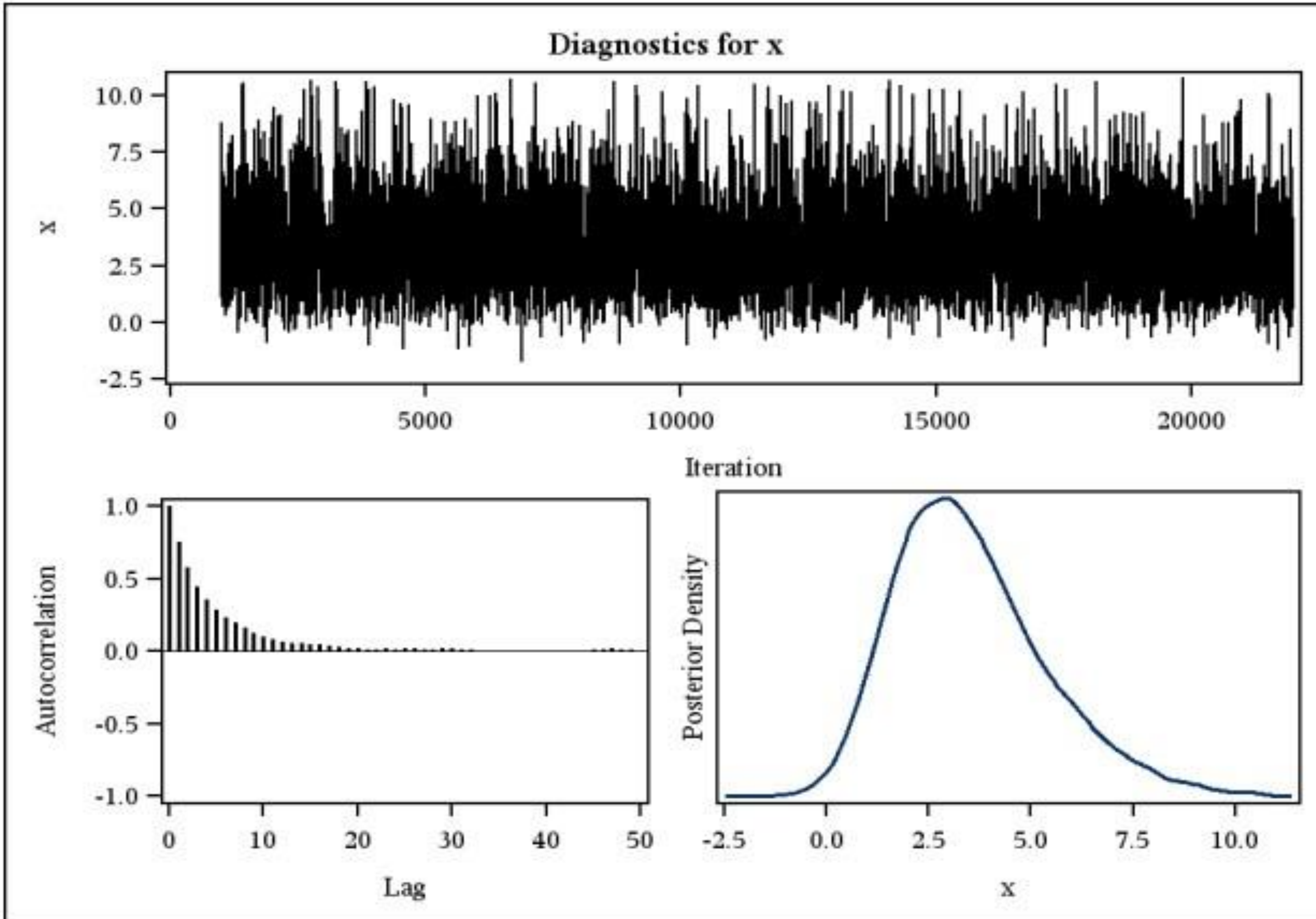
$$I = \langle f \rangle_{S_0} \approx \hat{I} = \frac{1}{T}\sum_{t=1}^{T} f(\theta_t)$$

$$\text{Bias}(\hat{I}) = \mathbb{E}[\hat{I} - I] = 0$$

$$\text{Var}(\hat{I}) = \tau \frac{\text{Var}(f)}{T}$$

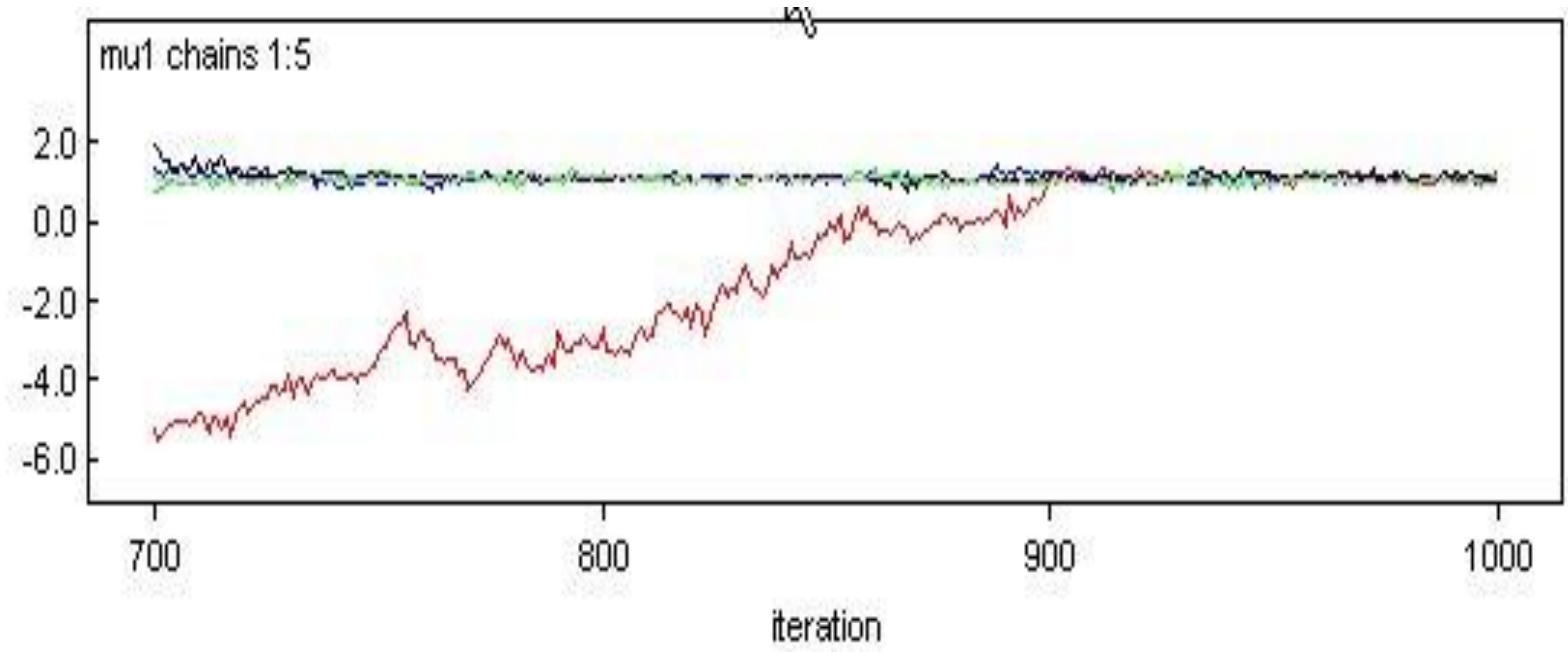
Auto correlation time

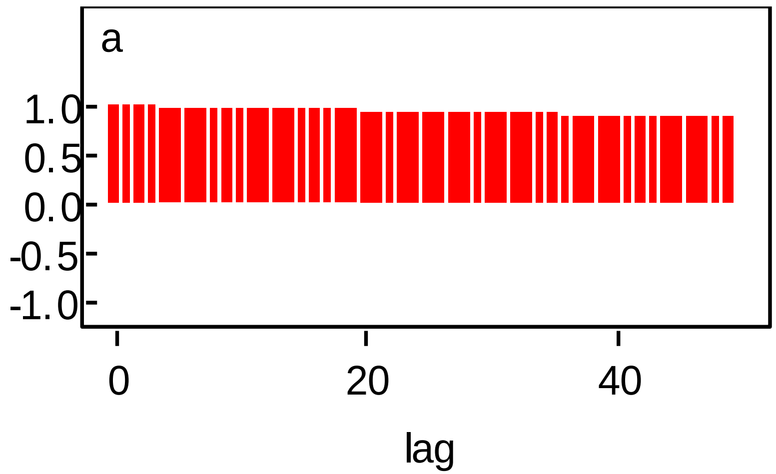
Q：如何檢查MCMC
樣本的平穩性？

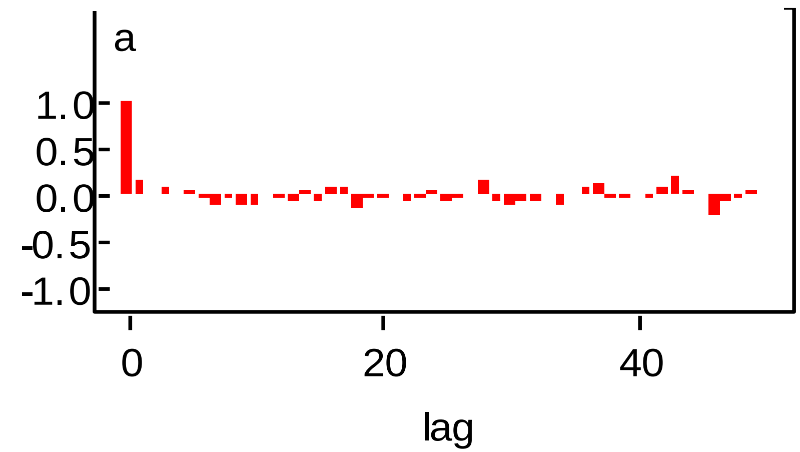


MCMC樣本平穩性–需符合亂數(Randomness)特性

關於Burn-in Sample 。。。







貝氏修勻的使用建議

- 貝氏修勻可以結合過去經驗與觀察值，同時也可將限制式。

→根據經驗值、觀察值的樣本人數決定共變異數矩陣，以Kimeldorf-Jones法修勻。

→如果過去資訊不足，或是確定資料與常態分配差異很大時，或可使用MCMC電腦模擬，但建議模擬次數較長(至少去掉一萬個Burn-in Sample)。