Méthode de Lissage Bayésienne Tempérée Pour Estimer les Paramètres d'un Modèle d'Equation Différentielle

David Campbell, Russell Steele

Méthode de Lissage Bayésienne Tempérée Pour Estimer les Paramètres d'un Modèle d'Equation Différentielle.

David Campbell[1] & Russell Steele[2]

1 - *Department of Statistics and Actuarial Science, Simon Fraser University, Surrey BC, Canada, V3T 0A3 (dac5@sfu.ca)*

2 - *Department of Mathematics and Statistics, McGill University, Montréal PQ, Canada, H3A 2K6 (steele@math.mcgill.ca)*

RÉSUMÉ

L'utilisation répandue des modèles d'équations différentielles ordinaires (EDO) a depuis longtemps été sous-représentée dans la littérature statistique. Les méthodes les plus communes pour estimer les paramètres des modèles d'EDO sont les moindres carrés non-linéaires [1] et une méthode basée sur les MCMC [2]. Ces méthodes dépendent d'une vraisemblance basée sur la solution numérique de l'EDO. Le défi relevé par ces méthodes est que les espaces de paramètres sont difficiles à naviguer, aggravé par la grande variété de formes fonctionnelles qu'un modèle d'EDO peut produire avec des petits changements de valeurs des paramètres. Bien que certains progrès récents ont été accomplis dans la littérature fréquentiste grâce a l'utilisation du lissage (par example [3],[4]), les méthodes bayésiennes n'ont pas suivi.

Ce travail décrit la méthode de lissage bayésienne tempérée (LBT). Ce méthode emploient une expansion de bases pour approximer la solution d'EDO dans la vraisemblance, où la forme de l'expansion est guidée par le modèle d'EDO. Cette approximation de l'EDO lisse la surface de vraisemblance, réduisant ainsi les restrictions de mouvement des paramètres.

La méthode de LBT utilise une suite de densités postérieures basée sur des approximations lisses à la solution d'EDO. Le niveau de l'approximation est déterminé par la valeur du paramètre de lissage qui contrôle le niveau de rugosité dans la surface de vraisemblance. Dans un algorithme semblable au tempérant parallèle, des chaînes MCMC parallèles sont utilisées pour échantillonner de la suite de densités postérieures, tout en permettant aux paramètres d'EDO de permuter entre les chaînes. La combinaison de méthodes bayésienne et de méthodes pour les données fonctionelle améliiore la convergence, tout en permettant l'inférence sur des vraisemblances même que les modèles utiliser par les moindres carrés non-linéaires et une méthode basée sur les MCMC traditionnels.

Mots-clés: Données Fonctionelle, Méthodes bayésiennes, Modèles semi et non paramétriques, Lissage

ABSTRACT

The widespread use of ordinary differential equation (ODE) models has long been under-represented in the statistical literature. The most common methods for estimating parameters from ODE models are nonlinear least squares [1] and an MCMC based method [2]. Both of these methods depend on a likelihood involving the numerical solution to the ODE. The challenge faced by these methods is parameter spaces that are difficult to navigate, exacerbated by the wide variety of behaviours that a single ODE model can produce with respect to small changes in parameter values. While frequentist literature has seen some recent improvements in methodology thanks to the incorporation of smoothing methods (for example [3],[4]), Bayesian methods have not yet followed.

This work describes a new Bayesian method, Smooth Functional Tempering, using a basis expansion to approximate the ODE solution in the likelihood, where the shape of the basis expansion, or data smooth, is guided by the ODE model. This approximation to the ODE, smooths out the likelihood surface, reducing restrictions on parameter movement.

Smooth Functional Tempering, uses a sequence of posterior densities with smooth approximations to the ODE solution. The level of the approximation is determined by the value of the smoothing parameter, which also determines the level of smoothness in the likelihood surface. In an algorithm similar to parallel tempering, parallel MCMC chains are run to sample from the sequence of posterior densities, while allowing ODE parameters to swap between chains. The incorporation of smoothing methods improves convergence while ultimately enabling inference on the same likelihoods as are used in traditional MCMC methods. This method is introduced and tested against a variety of alternative Bayesian models, in terms of posterior variance and rate of convergence.

Key Words: Functional Data, Bayesian Methods, Semi-parameteric modelling, Smoothing

Bibliographie

[1] Bates, D. M., and Watts, D. B. (1988), "Nonlinear Regression Analysis and Its Applications", Wiley books, New York.

[2] Gelman, A., Bois, F. Y., and Jiang, J. (1996), "Physiological Pharmacokinetic Analysis Using Population Modeling and Informative Prior Distributions," Journal of the American Statistical Association, 91, 1400–1412.

[3] Liang, H., and Wu, H. (2008), "Parameter Estimation for Differential Equation Models Using a Framework of Measurement Error in Regression Models," Journal of the American Statistical Association, 103, 1570-1583.

[4] Ramsay, J. O., Hooker, G., Campbell, D., and Cao, J. (2007), "Parameter Estimation for Differential Equations:A Generalized Smoothing Approach (with Discussion)," Journal of the Royal Statistical Society Series B, 69, 741-796.