

2 Aprendizado por Métodos Bayesianos

O reverendo Thomas Bayes nasceu provavelmente entre Julho de 1701 e Abril de 1702 na cidade de Londres, Inglaterra. Após finalizar o ensino básico, ingressou na universidade de Edimburgo em 1720, onde estudou Matemática e paralelamente Divindade com o propósito de se converter em ministro da igreja Anglicana. Após sua formatura, retornou a Londres onde começou sua carreira de ministro presbiteriano. Em 1731, Bayes publicou seu primeiro trabalho no plano teológico intitulado “*Divine Benevolence*” onde tentava responder à pergunta sobre os propósitos das ações de Deus para o mundo. Bayes dedicou sua vida ao estudo dos fatos procurando estabelecer uma causa fundamental das coisas. Desta forma, Bayes colocou as bases para o estudo da probabilidade das causas desconhecidas a partir de acontecimentos observados, ou seja, sobre a probabilidade condicional. Este trabalho intitulado “*Essay towards solving a problem of the doctrine of chances*”, foi publicado postumamente em 1763 na *Philosophical Transactions of the Royal Society of London*. Bayes morreu em 7 de Abril de 1761 na cidade de Tunbridge Wells, Kent.

Em termos atuais, o trabalho de Bayes poderia ser expresso da seguinte forma [12]: sejam **A** e **B** eventos definidos num espaço amostral **S**. Então a probabilidade condicional do evento **A**, dado o evento **B**, é obtida por:

$$p(\mathbf{A} | \mathbf{B}) = \frac{p(\mathbf{A} \cap \mathbf{B})}{p(\mathbf{B})} \quad (5)$$

Analogamente, a probabilidade condicional do evento **B**, dado o evento **A**, é obtida por:

$$p(\mathbf{B} | \mathbf{A}) = \frac{p(\mathbf{B} \cap \mathbf{A})}{p(\mathbf{A})} \quad (6)$$

Usando a teoria de conjuntos pode-se afirmar que $\mathbf{A} \cap \mathbf{B} = \mathbf{B} \cap \mathbf{A}$, logo ao substituir a equação (6) em (5), obtém-se o célebre teorema de Bayes

$$p(\mathbf{A} | \mathbf{B}) = \frac{p(\mathbf{B} | \mathbf{A})p(\mathbf{A})}{p(\mathbf{B})} \quad (7)$$

Embora este teorema tenha sido formulado dentro da teoria de conjuntos e em espaços amostrais discretos, ele possui extrema generalidade pois é possível aplicá-lo em espaços amostrais abstratos. As seguintes seções tratam da aplicação do teorema de Bayes como estratégia ou paradigma de aprendizado em modelos adaptativos.

2.1. A Estratégia Bayesiana de Aprendizado

A estratégia ou paradigma Bayesiano usa o conhecimento prévio disponível sobre o fenômeno para formular uma densidade de probabilidade *a priori*, $p(\Theta_{0:t})$, sobre os estados do MEE e para formular uma função de verossimilhança, $p(\mathbf{Y}_{1:t} | \Theta_{0:t})$, que relaciona os estados com as observações do fenômeno. Neste contexto, o cálculo dos estados é feito em função da densidade de probabilidade *a posteriori*, $p(\Theta_{0:t} | \mathbf{Y}_{1:t})$, que é obtida através do teorema de Bayes, aplicado sob o espaço crescente dos estados $\Theta_{0:t} = \{\theta_0, \theta_1, \dots, \theta_t\}$, e sobre o espaço crescente das observações do fenômeno $\mathbf{Y}_{1:t} = \{\mathbf{y}_1, \mathbf{y}_2, \dots, \mathbf{y}_t\}$, com $\theta_i \in \mathcal{R}^n$ e $\mathbf{y}_i \in \mathcal{R}^m$, considerados como variáveis aleatórias contínuas e multidimensionais. Assim:

$$p(\Theta_{0:t} | \mathbf{Y}_{1:t}) = \frac{p(\mathbf{Y}_{1:t} | \Theta_{0:t})}{p(\mathbf{Y}_{1:t})} p(\Theta_{0:t}) \quad (8)$$

Tipicamente, as densidades de probabilidade envolvidas na equação (8) são conhecidas como [14]:

$$Posteriori = \frac{Verossimilhança}{Preditiva} Priori$$

Sendo que a densidade de probabilidade *preditiva* um fator de normalização que garante que a integral $\int p(\Theta_{0:t} | \mathbf{Y}_{1:t}) d\Theta_{0:t}$ seja igual à unidade. Assim:

$$p(\mathbf{Y}_{1:t}) = \int p(\mathbf{Y}_{1:t} | \Theta_{0:t}) p(\Theta_{0:t}) d\Theta_{0:t} \quad (9)$$

Embora $p(\Theta_{0:t} | \mathbf{Y}_{1:t})$ constitua a inferência completa dos estados do MEE, um dos objetivos da estratégia Bayesiana é calcular para cada instante de tempo t sua correspondente densidade marginal $p(\theta_t | \mathbf{Y}_{1:t})$ denominada também como

densidade de filtragem. Uma forma eficiente de calcular a densidade a *posteriori* $p(\Theta_{0:t} | \mathbf{Y}_{1:t})$ é através da seguinte recursão [15]:

$$p(\Theta_{0:t+1} | \mathbf{Y}_{1:t+1}) = p(\Theta_{0:t} | \mathbf{Y}_{1:t}) \frac{p(\mathbf{y}_{t+1} | \Theta_{t+1})p(\Theta_{t+1} | \Theta_t)}{p(\mathbf{y}_{t+1} | \mathbf{Y}_{1:t})} \quad (10)$$

Entretanto, a *densidade de filtragem* $p(\Theta_t | \mathbf{Y}_{1:t})$ também pode ser calculada recursivamente através da execução das equações de “previsão” e “atualização” mostradas a seguir [16-18].

$$p(\Theta_t | \mathbf{Y}_{1:t-1}) = \int p(\Theta_t | \Theta_{t-1})p(\Theta_{t-1} | \mathbf{Y}_{1:t-1})d\Theta_{t-1} \quad (11)$$

$$p(\Theta_t | \mathbf{Y}_{1:t}) = \frac{p(\mathbf{y}_t | \Theta_t)}{p(\mathbf{Y}_{1:t})} p(\Theta_t | \mathbf{Y}_{1:t-1}) \quad (12)$$

Após do cálculo da densidade a *posteriori* $p(\Theta_{0:t} | \mathbf{Y}_{1:t})$, procede-se ao cálculo da *esperança matemática* $\mathbf{E}[\mathbf{f}_t(\Theta_{0:t})]$ de alguma função de interesse $\mathbf{f}_t(\Theta_{0:t})$ que seja integrável com relação a $p(\Theta_{0:t} | \mathbf{Y}_{1:t})$. Esta *esperança matemática* é definida como:

$$\mathbf{E}[\mathbf{f}_t(\Theta_{0:t})] = \int \mathbf{f}_t(\Theta_{0:t})p(\Theta_{0:t} | \mathbf{Y}_{1:t})d\Theta_{0:t} \quad (13)$$

Tipicamente, as funções de interesse são a média, neste caso $\mathbf{f}_t(\Theta_{0:t}) = \Theta_{0:t}$, e a variância condicional de $\Theta_{0:t}$, onde $\mathbf{f}_t(\Theta_{0:t}) = \Theta_{0:t}\Theta_{0:t}^T - \mathbf{E}[\Theta_{0:t}]\mathbf{E}^T[\Theta_{0:t}]$. Infelizmente, o cálculo desta *esperança matemática* nem sempre é possível de se realizar analiticamente, uma vez que $p(\Theta_{0:t} | \mathbf{Y}_{1:t})$ também não admite um tratamento analítico exato, especialmente quando o MEE possui características não-lineares, não-gaussianas e não-estacionárias. Recentemente, o avanço tecnológico quanto à capacidade de processamento de dados permitiu solucionar este problema numericamente através de métodos baseados em simulações estocásticas.

Basicamente estes métodos simulam a trajetória de N amostras ou partículas aleatórias $\{\Theta_{0:t}^{(i)}; i = 1, \dots, N\}$, as quais estão identicamente distribuídas (i.i.d.) de acordo com $p(\Theta_{0:t} | \mathbf{Y}_{1:t})$. Desta forma, uma estimativa empírica de $p(\Theta_{0:t} | \mathbf{Y}_{1:t})$ é dada por:

$$\hat{p}(\Theta_{0:t} | \mathbf{Y}_{1:t}) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \delta_{\Theta_{0:t}^{(i)}}(\Theta_{0:t}) \quad (14)$$

onde $\delta_{\Theta_{0:t}^{(i)}}(\Theta_{0:t})$ denota a massa do delta-Dirac localizado em $\Theta_{0:t}^{(i)}$. Logo, substituindo a equação (14) em (13) obtém-se a conhecida aproximação de Monte Carlo:

$$\mathbf{E}[\mathbf{f}_t(\Theta_{0:t})] \cong \int \mathbf{f}_t(\Theta_{0:t}) \hat{p}(\Theta_{0:t} | \mathbf{Y}_{1:t}) d\Theta_{0:t} \cong \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \mathbf{f}_t(\Theta_{0:t}^{(i)}) \quad (15)$$

Entretanto, a amostragem direta da densidade a *posteriori* $p(\Theta_{0:t} | \mathbf{Y}_{1:t})$ nem sempre é possível, razão pela qual costuma-se usar métodos indiretos de amostragem, dentro dos quais destacam-se a *amostragem por importância* [19]. Basicamente, este método propõe uma densidade auxiliar $\pi(\Theta_{0:t} | \mathbf{Y}_{1:t})$, denominando também como *densidade de importância*, para a qual seja fácil simular amostras e com a condição de que o suporte de $\pi(\Theta_{0:t} | \mathbf{Y}_{1:t})$, inclua o suporte de $p(\Theta_{0:t} | \mathbf{Y}_{1:t})$. Logo, a equação (13) pode ser expressa por:

$$\begin{aligned} \mathbf{E}[\mathbf{f}_t(\Theta_{0:t})] &= \int \mathbf{f}_t(\Theta_{0:t}) \frac{p(\Theta_{0:t} | \mathbf{Y}_{1:t})}{\pi(\Theta_{0:t} | \mathbf{Y}_{1:t})} \pi(\Theta_{0:t} | \mathbf{Y}_{1:t}) d\Theta_{0:t} \\ &= \frac{\int \mathbf{f}_t(\Theta_{0:t}) \omega(\Theta_{0:t}) \pi(\Theta_{0:t} | \mathbf{Y}_{1:t}) d\Theta_{0:t}}{\int \omega(\Theta_{0:t}) \pi(\Theta_{0:t} | \mathbf{Y}_{1:t}) d\Theta_{0:t}} \end{aligned} \quad (16)$$

onde $\omega(\Theta_{0:t})$ é conhecido como o *peso de importância*,

$$\omega(\Theta_{0:t}) = \frac{p(\Theta_{0:t} | \mathbf{Y}_{1:t})}{\pi(\Theta_{0:t} | \mathbf{Y}_{1:t})} \quad (17)$$

Conseqüentemente, após a simulação de N amostras $\{\Theta_{0:t}^{(i)}; i = 1, \dots, N\}$ i.i.d. de acordo com $\pi(\Theta_{0:t} | \mathbf{Y}_{1:t})$, a aproximação de Monte Carlo da equação (16) resulta:

$$\mathbf{E}[\mathbf{f}_t(\Theta_{0:t})] \cong \frac{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \mathbf{f}_t(\Theta_{0:t}^{(i)}) \omega(\Theta_{0:t}^{(i)})}{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \omega(\Theta_{0:t}^{(i)})} \cong \sum_{i=1}^N \mathbf{f}_t(\Theta_{0:t}^{(i)}) \tilde{\omega}_t^{(i)} \quad (18)$$

onde o *peso de importância normalizado* $\tilde{\omega}_t^{(i)}$ é definido por:

$$\tilde{\omega}_t^{(i)} = \frac{\omega(\Theta_{0:t}^{(i)})}{\sum_{j=1}^N \omega(\Theta_{0:t}^{(j)})} \quad (19)$$

Contudo, uma forma eficiente de estimar $\tilde{\omega}_t^{(i)}$ seria através de uma recursão.

Para isto, precisa-se primeiro expressar $\omega(\Theta_{0:t})$ num formato recursivo, onde

$$\omega(\Theta_{0:t}) = \frac{p(\Theta_{0:t} | \mathbf{Y}_{1:t})}{\pi(\Theta_{0:t} | \mathbf{Y}_{1:t})} = \omega(\Theta_{0:t-1}) \frac{p(\Theta_{0:t} | \mathbf{Y}_{1:t})}{\pi(\Theta_{0:t} | \mathbf{Y}_{1:t})} \frac{\pi(\Theta_{0:t-1} | \mathbf{Y}_{1:t-1})}{p(\Theta_{0:t-1} | \mathbf{Y}_{1:t-1})} \quad (20)$$

Aplicando o teorema de Bayes em $p(\Theta_{0:t} | \mathbf{Y}_{1:t})$ e $p(\Theta_{0:t-1} | \mathbf{Y}_{1:t-1})$ obtém-se:

$$\omega(\Theta_{0:t}) = \omega(\Theta_{0:t-1}) \frac{p(\mathbf{Y}_{1:t} | \Theta_{0:t})}{p(\mathbf{Y}_{1:t-1} | \Theta_{0:t-1})} \frac{p(\Theta_{0:t})}{p(\Theta_{0:t-1})} \frac{p(\mathbf{Y}_{1:t-1})}{p(\mathbf{Y}_{1:t})} \frac{\pi(\Theta_{0:t-1} | \mathbf{Y}_{1:t-1})}{\pi(\Theta_{0:t} | \mathbf{Y}_{1:t})} \quad (21)$$

Neste ponto precisa-se relembrar que os estados seguem um processo Markoviano, assim:

$$p(\Theta_{0:t}) = p(\theta_0) \prod_{i=1}^t p(\theta_i | \theta_{i-1}) \quad (22)$$

Além disso, as observações são condicionalmente independentes dos estados, em consequência:

$$p(\mathbf{Y}_{1:t} | \Theta_{0:t}) = \prod_{i=1}^t p(y_i | \theta_i) \quad (23)$$

Todavia, a fim de aproveitar a simulação das trajetórias $\{\Theta_{0:t-1}^{(i)}; i = 1, \dots, N\}$ de $\hat{p}(\Theta_{0:t-1} | \mathbf{Y}_{1:t-1})$, no tempo $t-1$, para o cálculo de $\hat{p}(\Theta_{0:t} | \mathbf{Y}_{1:t})$, no tempo t , é necessário que a *densidade de importância*, $\pi(\Theta_{0:t} | \mathbf{Y}_{1:t})$, no tempo t , admita como densidade marginal no tempo $t-1$ a expressão $\pi(\Theta_{0:t-1} | \mathbf{Y}_{1:t-1})$, ou seja:

$$\pi(\Theta_{0:t} | \mathbf{Y}_{1:t}) = \pi(\Theta_{0:t-1} | \mathbf{Y}_{1:t-1}) \pi(\theta_t | \Theta_{0:t-1}, \mathbf{Y}_{1:t}) \quad (24)$$

Substituindo-se adequadamente as equações (22), (23) e (24) na equação (21) obtém-se:

$$\omega(\Theta_{0:t}) = \omega(\Theta_{0:t-1}) \frac{p(y_t | \theta_t) p(\theta_t | \theta_{t-1})}{\pi(\theta_t | \Theta_{0:t-1}, \mathbf{Y}_{1:t})} \frac{p(\mathbf{Y}_{1:t-1})}{p(\mathbf{Y}_{1:t})} \quad (25)$$

Conseqüentemente, substituindo a equação (25) na equação (19) obtém-se:

$$\tilde{\omega}_t^{(i)} \propto \tilde{\omega}_{t-1}^{(i)} \frac{p(y_t | \theta_t^{(i)}) p(\theta_t^{(i)} | \theta_{t-1}^{(i)})}{\pi(\theta_t^{(i)} | \Theta_{0:t-1}^{(i)}, \mathbf{Y}_{1:t})} \quad (26)$$

A seguir mostra-se uma implementação computacional das equações desenvolvidas nesta seção.

2.2. O Filtro Bootstrap

Um caso particular da análise da seção anterior é quando se adota a densidade *a priori* $p(\Theta_{0:t})$ como a *densidade de importância* $\pi(\Theta_{0:t} | \mathbf{Y}_{1:t})$, isto é:

$$\pi(\Theta_{0:t} | \mathbf{Y}_{1:t}) = p(\Theta_{0:t}) = p(\theta_0) \prod_{k=1}^t p(\theta_k | \theta_{k-1}) \quad (27)$$

Neste caso, o *peso de importância normalizado* satisfaz

$$\tilde{\omega}_t^{(i)} \propto \tilde{\omega}_{t-1}^{(i)} p(\mathbf{y}_t | \theta_t^{(i)}) \quad (28)$$

Entretanto, as evidências experimentais mostram que esta simplificação causa uma aproximação ineficiente da densidade a *posteriori* $p(\Theta_{0:t} | \mathbf{Y}_{1:t})$, uma vez que o suporte da distribuição de $\tilde{\omega}_t^{(i)}$ estreita-se com o decorrer do tempo até tornar-se um ponto. A fim de evitar esta degeneração, foi introduzido um estágio de seleção [20] que tem por objetivo eliminar as partículas que possuem *pesos de importância* baixos e multiplicar as partículas que possuem *pesos de importância* altos. A seguir mostra-se a descrição computacional do algoritmo denominado *Filtro de Partículas Bootstrap* (FPB) [15,21,22].

Filtro de Partículas Bootstrap

1. Inicialização, $t = 0$.

Para $i = 1, \dots, N$, amostras $\theta_0^{*(i)} \sim \pi(\theta_0)$ e fixar $t = 1$.

2. Passo de amostragem por importância

Para $i = 1, \dots, N$, amostras $\theta_t^{*(i)} \sim p(\theta_t | \theta_{t-1}^{(i)})$ e fixar $\Theta_{0:t}^{*(i)} = \{\Theta_{0:t}^{(i)}, \theta_t^{*(i)}\}$.

Para $i = 1, \dots, N$, avaliar o *peso de importância normalizado*.

$$\tilde{\omega}_t^{(i)} = \frac{p(\mathbf{y}_t | \theta_t^{*(i)})}{\sum_{j=1}^N p(\mathbf{y}_t | \theta_t^{*(j)})} \quad (29)$$

3. Passo de seleção

Reamostrar com substituição N partículas $\{\Theta_{0:t}^{(i)}; i = 1, \dots, N\}$ do conjunto $\{\Theta_{0:t}^{*(i)}; i = 1, \dots, N\}$ de acordo com seu peso de importância.

Fixar $t \leftarrow t + 1$ e voltar ao passo 2.

Note que na equação (29), não aparece $\tilde{\omega}_{t-1}^{(i)}$ uma vez que as partículas a serem propagadas $\{\Theta_{0:t-1}^{(i)}; i = 1, \dots, N\}$ possuem pesos uniformes após do passo de reamostragem, no tempo $t - 1$. Além disso, não é necessário armazenar todas as

trajetórias das partículas desde o tempo 0 até o tempo t , uma vez que a cada instante de tempo está-se interessado em estimar $p(\boldsymbol{\theta}_t | \mathbf{Y}_{1:t})$.

A figura 1⁺ mostra uma representação gráfica do algoritmo, considerando a trajetória de $N = 10$ partículas. Neste exemplo o FPB começa no tempo $t - 1$ com as partículas $\{\boldsymbol{\theta}_{t-1}^{*(i)}, N^{-1}\}$ com pesos uniformes, que representam uma aproximação de $p(\boldsymbol{\theta}_{t-1} | \mathbf{Y}_{1:t-2})$. Em seguida, o *peso de importância* de cada partícula é avaliada usando a informação no tempo $t - 1$. Como resultado obtém-se partículas $\{\boldsymbol{\theta}_{t-1}^{*(i)}, \tilde{\omega}_{t-1}^{(i)}\}$ ponderadas, que representam uma aproximação de $p(\boldsymbol{\theta}_{t-1} | \mathbf{Y}_{1:t-1})$. Posteriormente, o passo de reamostragem, seleciona as partículas com maior aptidão, obtendo novamente partículas $\{\boldsymbol{\theta}_{t-1}^{(i)}, N^{-1}\}$ com pesos uniformes, que ainda fornecem uma aproximação de $p(\boldsymbol{\theta}_{t-1} | \mathbf{Y}_{1:t-1})$. Finalmente, no passo de amostragem por importância, as partículas são evoluídas no tempo através da equação de estado e avaliadas usando a informação no tempo t , obtendo-se como resultado partículas $\{\boldsymbol{\theta}_t^{*(i)}, \tilde{\omega}_t^{(i)}\}$ ponderadas, que representam uma aproximação de $p(\boldsymbol{\theta}_t | \mathbf{Y}_{1:t})$.

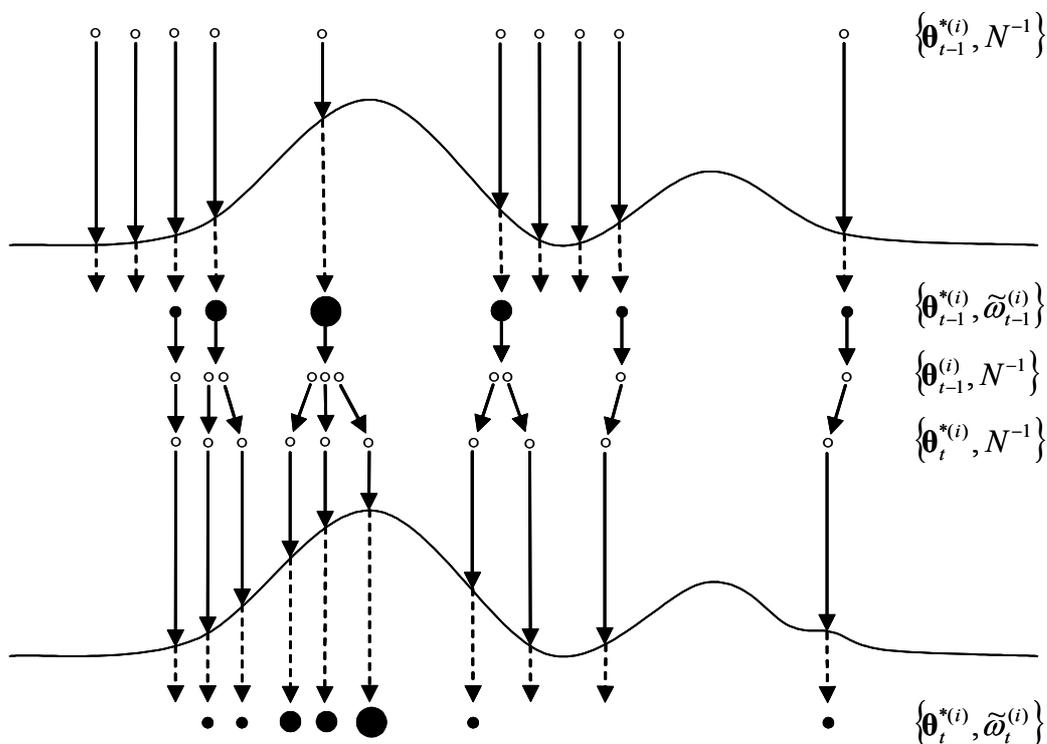


Figura 1 - Representação gráfica do algoritmo do FPB

⁺ Figura extraída de [15] (com permissão do autor Arnaud Doucet).

O FPB possui diversas propriedades atrativas. Em primeiro lugar, o FPB é rápido e fácil de implementar. Em segundo lugar, o FPB é modular, isto é, para um problema diferente, somente é necessário atualizar apropriadamente no código as expressões para a *densidade de importância* e o *peso de importância*. Em terceiro lugar, o FPB é fácil de ser implementado para funcionar num computador paralelo. Finalmente, o passo de reamostragem é uma caixa preta, uma vez que esta rotina somente requer como entradas os índices das partículas e seus correspondentes *pesos de importância*. Em conseqüência o custo computacional do passo de seleção do FPB não depende da complexidade do modelo.

Por outro lado, o FPB representa uma espécie de generalização do algoritmo denominado como filtro de Kalman [23,24] pois, além de ser aplicado a modelos lineares e gaussianos, pode também ser aplicado a sistemas não-lineares, não-gaussianos e não-estacionários. Mesmo assim, o FPB possui algumas deficiências, principalmente quando as observações do fenômeno apresentam *outliers*. Para estes casos, foram desenvolvidas diversas variações e extensões do FPB, tais como o *Filtro de Partículas Auxiliares* (FPA) [25] ou a estratégia de incluir um estágio MCCM após o passo de seleção [26], entre outros. Na seção seguinte comenta-se brevemente outro método de simulação estocástica que implementam a estratégia Bayesiana, como é o caso do método MCCM.

2.3. O Algoritmo MCCM

O método MCCM [27,28] representa uma abordagem popular de amostragem de distribuições complexas. Entretanto, este método “iterativos” é computacionalmente caro [15] para problemas de “estimação seqüencial”, devido a que este método necessita um numero grande de “iterações” para aproximar numericamente a *densidade de filtragem* $p(\boldsymbol{\theta}_t | \mathbf{Y}_{1:t})$ a cada instante de tempo t .

O método MCCM considera cada *densidade de filtragem* $p(\boldsymbol{\theta}_t | \mathbf{Y}_{1:t})$ como uma *densidade objetivo* $p(\boldsymbol{\theta})$ a qual precisa ser aproximado numericamente. Sem perda de generalidade esta *densidade objetivo* $p(\boldsymbol{\theta})$ pode ser expressa num formato exponencial [29], do tipo:

$$p(\boldsymbol{\theta}) = \frac{\exp\{-\mathbf{h}(\boldsymbol{\theta})\}}{\int \exp\{-\mathbf{h}(\boldsymbol{\theta})\} d\boldsymbol{\theta}} \quad (30)$$

onde $\mathbf{h}(\boldsymbol{\theta}) \geq 0, \forall \boldsymbol{\theta} \in \mathcal{R}^n$ é uma função real positiva. Logo, o processo de amostragem de $p(\boldsymbol{\theta})$ pode ser realizado simulando a evolução de um processo Markoviano $\pi(\boldsymbol{\theta}_t | \boldsymbol{\theta}_{t-1})$ num tempo “fictício” t . Note que o símbolo t para o método MCCM representa “iteração” e não o tempo propriamente dito.

A fim de garantir a convergência de $\pi(\boldsymbol{\theta}_t | \boldsymbol{\theta}_{t-1})$ para $p(\boldsymbol{\theta})$ é necessário [27] que $\pi(\boldsymbol{\theta}_t | \boldsymbol{\theta}_{t-1})$ seja uma cadeia *irredutível*, *aperiódico* e satisfaça a propriedade de *reversibilidade*, definida por:

$$p(\boldsymbol{\theta}_t) \pi(\boldsymbol{\theta}_t | \boldsymbol{\theta}_{t-1}) = p(\boldsymbol{\theta}_{t-1}) \pi(\boldsymbol{\theta}_{t-1} | \boldsymbol{\theta}_t) \quad (31)$$

Com isto, se cumpre que:

$$\int p(\boldsymbol{\theta}_t) \pi(\boldsymbol{\theta}_t | \boldsymbol{\theta}_{t-1}) d\boldsymbol{\theta}_t = \int p(\boldsymbol{\theta}_{t-1}) \pi(\boldsymbol{\theta}_{t-1} | \boldsymbol{\theta}_t) d\boldsymbol{\theta}_t = \pi(\boldsymbol{\theta}_{t-1}) \quad (32)$$

mostrando que o processo Markoviano $\pi(\boldsymbol{\theta}_t | \boldsymbol{\theta}_{t-1})$ possui $p(\boldsymbol{\theta})$ como sua *densidade estacionária*, garantindo assim a convergência de $\pi(\boldsymbol{\theta}_t | \boldsymbol{\theta}_{t-1})$ a $p(\boldsymbol{\theta})$. Sem perda de generalidade, $\pi(\boldsymbol{\theta}_t | \boldsymbol{\theta}_{t-1})$ é constituído por 2 elementos [27]: (a) um *núcleo de transição* $g(\boldsymbol{\theta}_t | \boldsymbol{\theta}_{t-1})$ e (b) uma *densidade de probabilidade* $\alpha(\boldsymbol{\theta}_t | \boldsymbol{\theta}_{t-1})$, de forma que:

$$\pi(\boldsymbol{\theta}_t | \boldsymbol{\theta}_{t-1}) = g(\boldsymbol{\theta}_t | \boldsymbol{\theta}_{t-1}) \alpha(\boldsymbol{\theta}_t | \boldsymbol{\theta}_{t-1}) \quad (33)$$

Basicamente, a função do *núcleo de transição* é gerar um conjunto de N amostras candidatas $\{\boldsymbol{\theta}_t^{*(1)}, \boldsymbol{\theta}_t^{*(2)}, \dots, \boldsymbol{\theta}_t^{*(N)}\}$ a partir do conjunto $\{\boldsymbol{\theta}_{t-1}^{(1)}, \boldsymbol{\theta}_{t-1}^{(2)}, \dots, \boldsymbol{\theta}_{t-1}^{(N)}\}$. E a função da *probabilidade de aceitação* é aceitar as amostras candidatas $\boldsymbol{\theta}_t^{*(i)}$ ou rejeitá-las, que equivale a preservar as amostras $\boldsymbol{\theta}_{t-1}^{(i)}$ da iteração anterior. Assim, o conjunto de amostras aceitas $\{\boldsymbol{\theta}_t^{(1)}, \boldsymbol{\theta}_t^{(2)}, \dots, \boldsymbol{\theta}_t^{(N)}\}$ se tornam distribuídas de acordo com $p(\boldsymbol{\theta})$. Entretanto, esta aproximação pode resultar deficiente, razão pela qual é necessário executar iterativamente a equação (33) com o objetivo de deslocar as amostras para regiões de alta probabilidade de $p(\boldsymbol{\theta})$, obtendo desta forma uma aproximação eficiente de $p(\boldsymbol{\theta})$.

A expressão comumente citada para o *núcleo de transição* é o processo estocástico denominado de “passeio aleatório”, definido como:

$$\boldsymbol{\theta}_t = \boldsymbol{\theta}_{t-1} + \boldsymbol{\varepsilon} \quad (34)$$

onde $\boldsymbol{\varepsilon}$ é um ruído branco. Entretanto, a expressão comumente citada para a *probabilidade de aceitação* é a expressão proposta por Metropolis *et al.* [30] e Hastings[31]:

$$\alpha(\boldsymbol{\theta}_t | \boldsymbol{\theta}_{t-1}) = \min \left\{ 1, \frac{p(\boldsymbol{\theta}_{t-1}) \pi_g(\boldsymbol{\theta}_{t-1} | \boldsymbol{\theta}_t)}{p(\boldsymbol{\theta}_t) \pi_g(\boldsymbol{\theta}_t | \boldsymbol{\theta}_{t-1})} \right\} \quad (35)$$

onde $\pi_g(\boldsymbol{\theta}_t | \boldsymbol{\theta}_{t-1})$ é a densidade definida por $g(\boldsymbol{\theta}_t | \boldsymbol{\theta}_{t-1})$. Na prática a aplicação da equação (34) e (35) seria da seguinte forma: primeiramente é formado o conjunto de amostras candidatas $\{\boldsymbol{\theta}_t^{*(1)}, \boldsymbol{\theta}_t^{*(2)}, \dots, \boldsymbol{\theta}_t^{*(N)}\}$ executando a equação (34) no conjunto de amostras $\{\boldsymbol{\theta}_{t-1}^{(1)}, \boldsymbol{\theta}_{t-1}^{(2)}, \dots, \boldsymbol{\theta}_{t-1}^{(N)}\}$ da iteração anterior. Ou seja:

$$\boldsymbol{\theta}_t^{*(i)} = \boldsymbol{\theta}_{t-1}^{(i)} + \boldsymbol{\varepsilon} \quad (36)$$

Depois, cada amostra candidata $\boldsymbol{\theta}_t^{*(i)}$ é aceita ou rejeitada, que equivale a preservar a amostras $\boldsymbol{\theta}_{t-1}^{(i)}$ da iteração anterior, de acordo com a equação (35). Ou seja:

$$\boldsymbol{\theta}_t^{(i)} = \begin{cases} \boldsymbol{\theta}_t^{*(i)} & \text{se } u \leq \rho \\ \boldsymbol{\theta}_{t-1}^{(i)} & \text{caso contrário} \end{cases} \quad (37)$$

Com $u \sim \mathbf{U}(0,1)$ e

$$\rho = \frac{p(\boldsymbol{\theta}_{t-1}^{(i)}) \pi_g(\boldsymbol{\theta}_{t-1}^{(i)} | \boldsymbol{\theta}_t^{*(i)})}{p(\boldsymbol{\theta}_t^{*(i)}) \pi_g(\boldsymbol{\theta}_t^{*(i)} | \boldsymbol{\theta}_{t-1}^{(i)})} \quad (38)$$

Assim, o conjunto de indivíduos aceitos $\{\boldsymbol{\theta}_t^{(1)}, \boldsymbol{\theta}_t^{(2)}, \dots, \boldsymbol{\theta}_t^{(N)}\}$ se tornam distribuídas de acordo com $p(\boldsymbol{\theta})$. Após várias iterações executando as equações (36)-(38), é esperado que as amostras resultantes $\{\boldsymbol{\theta}_t^{(1)}, \boldsymbol{\theta}_t^{(2)}, \dots, \boldsymbol{\theta}_t^{(N)}\}$ se localizem em regiões de alta probabilidade $p(\boldsymbol{\theta})$, obtendo desta forma uma aproximação eficiente de $p(\boldsymbol{\theta})$. É desta forma, que o método MCCM aproxima numericamente qualquer *densidade objetivo* $p(\boldsymbol{\theta})$, procedendo finalmente a realizar quaisquer estatísticas de interesse, tal como a média, a moda, etc. Entretanto, no caso em que o interesse esteja centralizado somente na estimação da máxima moda $\boldsymbol{\theta}^{MM}$ de $p(\boldsymbol{\theta})$, então pode ser explorado o fato de que os valores extremos de $p(\boldsymbol{\theta})$ são preservados sob a forma de transformações monotônicas. Assim, pode ser mostrado [32,33] que a seguinte *densidade assintótica* de $p(\boldsymbol{\theta})$:

$$\bar{p}(\boldsymbol{\theta}) = \frac{[p(\boldsymbol{\theta})]^\gamma}{\int [p(\boldsymbol{\theta})]^\gamma d\boldsymbol{\theta}} \quad (39)$$

possui a mesma moda global $\boldsymbol{\theta}^{MM}$ que $p(\boldsymbol{\theta})$, para qualquer valor real e positivo de γ . Conseqüentemente, ao substituir $p(\boldsymbol{\theta})$ por sua densidade assintótica $\bar{p}(\boldsymbol{\theta})$ na equação (35), pode ser mostrado [32,33] que o processo Markoviano converge para $\boldsymbol{\theta}^{MM}$. Note que, se $\mathbf{T} = \gamma^{-1}$, com $0 < \gamma \leq 1$, então $\bar{p}(\boldsymbol{\theta}) = \mathbf{Z}^{-1} \exp\{-\mathbf{h}(\boldsymbol{\theta})/\mathbf{T}\}$ com $\mathbf{Z} = \int \exp\{-\mathbf{h}(\boldsymbol{\theta})/\mathbf{T}\} d\boldsymbol{\theta}$. Este caso é conhecido na literatura como *Têmpera Simulada* [34], onde o parâmetro \mathbf{T} é denominado de temperatura, o qual é diminuído ao longo do tempo simulando o processo de resfriamento dos metais.

Uma outra forma de estimar a moda global $\boldsymbol{\theta}^{MM}$ de $p(\boldsymbol{\theta})$ é através de um processo de otimização [35], a qual pode ser expresso num contexto de maximização ou minimização, expressos pelas seguintes equações respectivamente:

$$\boldsymbol{\theta}^{MM} = \arg \max_{\boldsymbol{\theta}} \{p(\boldsymbol{\theta})\} \quad (40)$$

$$\boldsymbol{\theta}^{\min} = \arg \min_{\boldsymbol{\theta}} \{\mathbf{h}(\boldsymbol{\theta})\} \quad (41)$$

em ambos os casos a transformação monotônica $\mathbf{h}(\boldsymbol{\theta}) = -\ln[p(\boldsymbol{\theta})]$ garante que a solução da equação (40) ou da equação (41) seja a mesma, $\boldsymbol{\theta}^{\min} \equiv \boldsymbol{\theta}^{MM}$.

2.4. Resumo

Este capítulo teve como objetivo apresentar o estado da arte da estratégia Bayesiana de aprendizado dos estados do MEE. Sob esta perspectiva os estados são calculados geralmente como a média ou a moda da densidade *a posteriori* dos estados. Infelizmente, nem sempre é possível se obter a densidade *a posteriori* de forma analítica. Assim, o processo de aprendizado dos estados reduz-se a um problema de aproximação numérica da densidade *a posteriori*, o qual pode ser resolvido usando-se métodos de simulação estocásticas tais como os métodos MCS e MCCM. Entretanto, no caso em que os estados são calculados como a moda da densidade *a posteriori*, então o processo de aprendizado reduz-se a um problema de otimização. Neste contexto, estuda-se no próximo capítulo a solução deste problema de otimização usando a tecnologia de algoritmos genéticos.