11-5-2023

Markov Chain Monte Carlo (MCMC Methods)

Έστω $\{X_n,\ n=0,1,2,\dots\}$, $X_n \in S$

$$S \subseteq \mathbb{N}_0$$

$$P_{ij} = P(X_{n+1}=j \mid X_n = i)$$

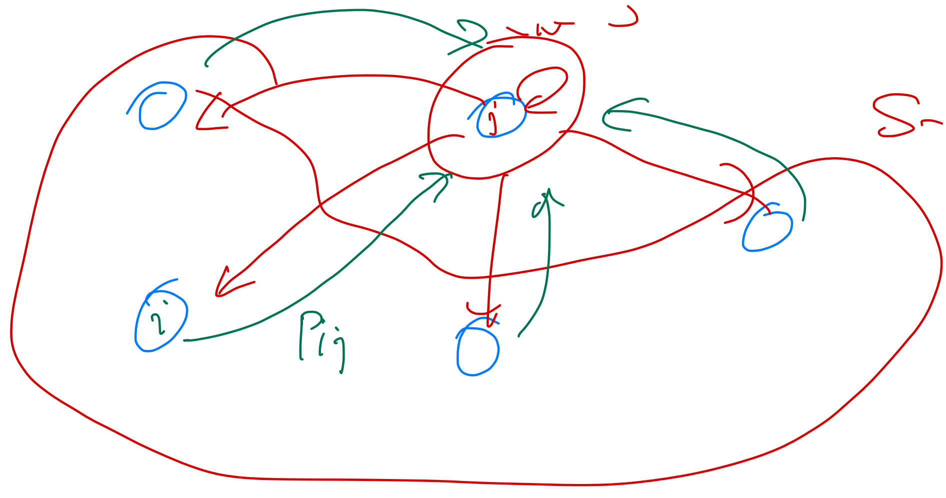
αδιαχώριστη
θετικά επαναληπτική
$\Rightarrow \exists\ \pi$ στάσιμη
$\pi_j > 0$

$$\pi_j(1-P_{jj}) = \sum_{i\neq j} \pi_i P_{ij}$$

$$\iff \pi_j \cdot 1 = \sum_{i\in S} \pi_i P_{ij} \iff \begin{cases} \pi = \pi P \\ \pi^T 1 = 1 \end{cases}$$

global balance

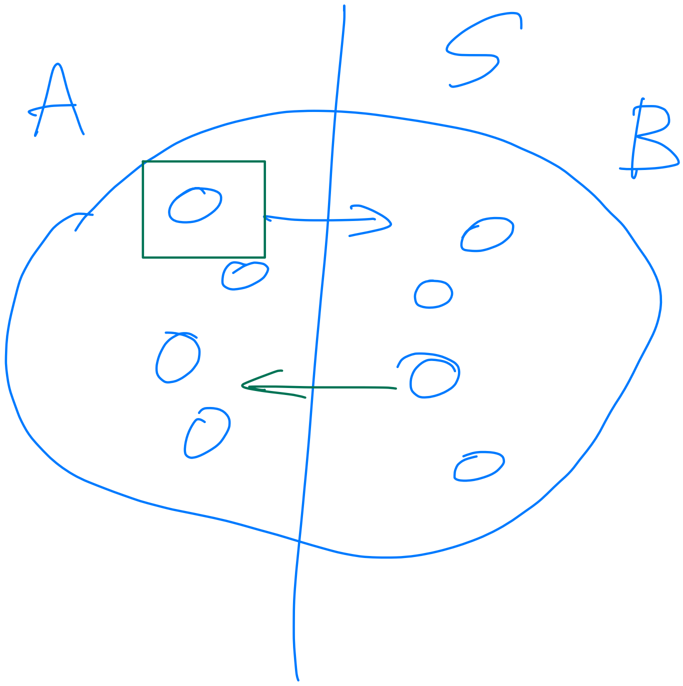
$$\sum \pi_j = 1$$



$S - \{j\}$

$\pi_i P_{ij}$ = ρυθμός μεταβάσεων $i \to j$

(% περιόδων που παρατηρούμε $i \to j$)



$A \to B$ $\qquad\qquad$ $B \to A$

$$\sum_{i\in A}\sum_{j\in B}\pi_i P_{ij} = \sum_{i\in B}\sum_{j\in A}\pi_i P_{ij}$$

Χρονικά αντιστρέψιμη ΜΑ $\iff$ Local Balance

$$\boxed{\pi_i P_{ij} = \pi_j P_{ji} \qquad \forall i, \forall j \quad i \neq j}$$

Χρονικά αντεστραμμένη διαδικασία με "αρχική" κατανομή π έχει νέα μετάβαση

$$\tilde{P}_{ij} = \frac{\pi_j P_{ji}}{\pi_i} \qquad \text{(από Bayes)}$$

Αν ισχύει η local balance $\Rightarrow$ $\tilde{P}_{ij} = P_{ij}$

Θεώρημα

$$\left\{ \exists \ \pi \ : \ \pi_i P_{ij} = \pi_j P_{ji} \ \forall i,j \quad \text{κ'} \ \sum \pi_i = 1, \quad \pi_i \geq 0 \right\}$$

$\iff$ $\left\{ \eta \ \delta. \text{ χρον. αντιστρέψιμη} \ \text{κ'} \ \pi \ : \text{ στάσιμη κατανομή} \right\}$

Simulation $X \sim \pi$, σύνορα $= S$

$S \subseteq \mathbb{N}_0$.

$P(X=j) = \pi_j = C \cdot b_j$

b_j γνωστή συνάρτηση
$C > 0$ σταθερά
(δεν χρειάζεται να είναι γνωστή)

$\pi \sim b$

$C = \left(\sum_j b_j\right)^{-1}$

Ερώτημα 1 $\exists$ $P = (p_{ij})_{i,j \in S}$ στοχ. πίνακας

: $\{X_n, n \geq 0\}$ Θ ετ. έναν στάσιμη κατανομή π ;

(ΝΑΙ θα δούμε).

Έστω ότι βρίσκουμε ένα τέτοιον πίνακα, P

Πώς μας βοηθάει στην προσομοίωση;

Αν προσομοιώσουμε μια υλοποίηση με αρχική $p^{(0)}$

$(X_0, X_1, \ldots, X_n)$ διάρκειας $n+1$

τότε η X_n έχει κατανομή

$$P(X_n = j) = \sum_{i \in S} p_i(0) \cdot P_{ij}^{(n)}$$

$$\text{ΘΕ} \Rightarrow \lim_{n \to \infty} P(X_n = j) = \pi_j \quad \forall\, p(0)$$

"Μειονέκτημα": Για να πάρουμε μια παρατήρηση προσεγγιστικά από π πρέπει να προσομοιώσουμε μια υλοποίηση με $n \to \infty$.

Έστω $\underline{\theta = E(h(X)) = \sum_{i \in S} \pi_j h(j)}$

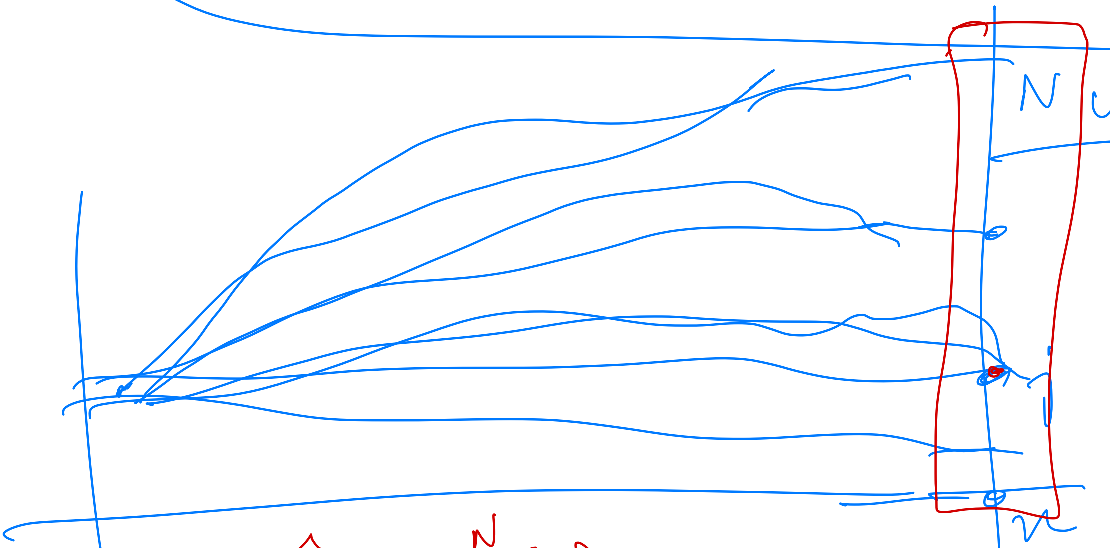
Αφού η π είναι η στάσιμη (οριακή κατανομή) μιας ΜΑ $\{Y_n,\ n=0,1,2,\dots\}$

τότε $\lim_{n\to\infty} P(Y_n=j)=\pi_j$

εργοδικότητα

με πιθ. 1

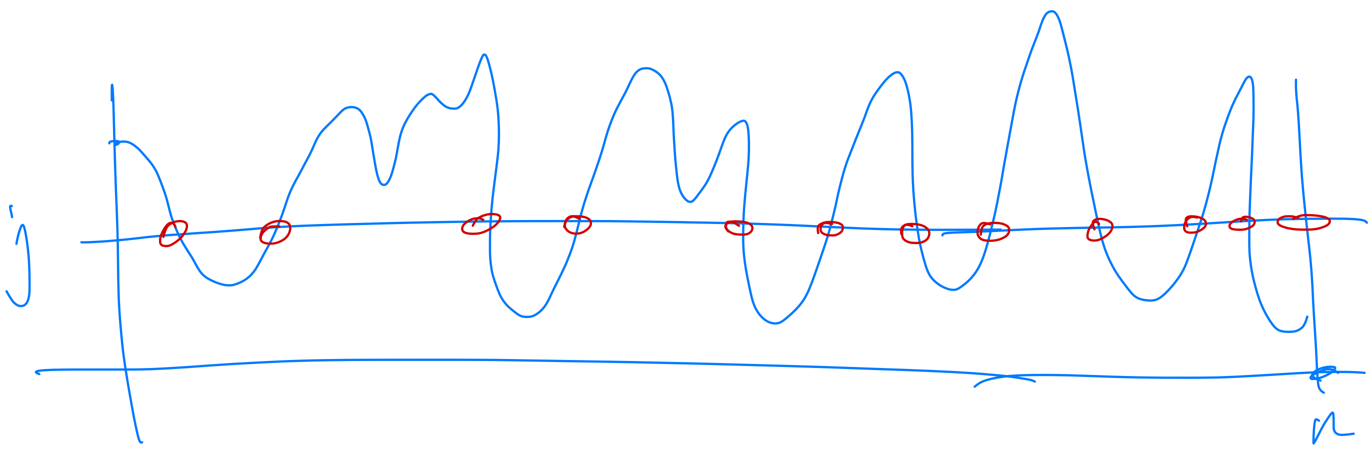
επίσης $\lim_{n\to\infty}\frac{1}{n}\sum_{t=0}^{n-1} 1(Y_t=j)$ = % χρ. σε περιόδους όπου $Y_t=j$ $=\pi_j$



$\hat{\pi}_j=\frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N} 1(Y_{n_k}=j)$

(οριακή)

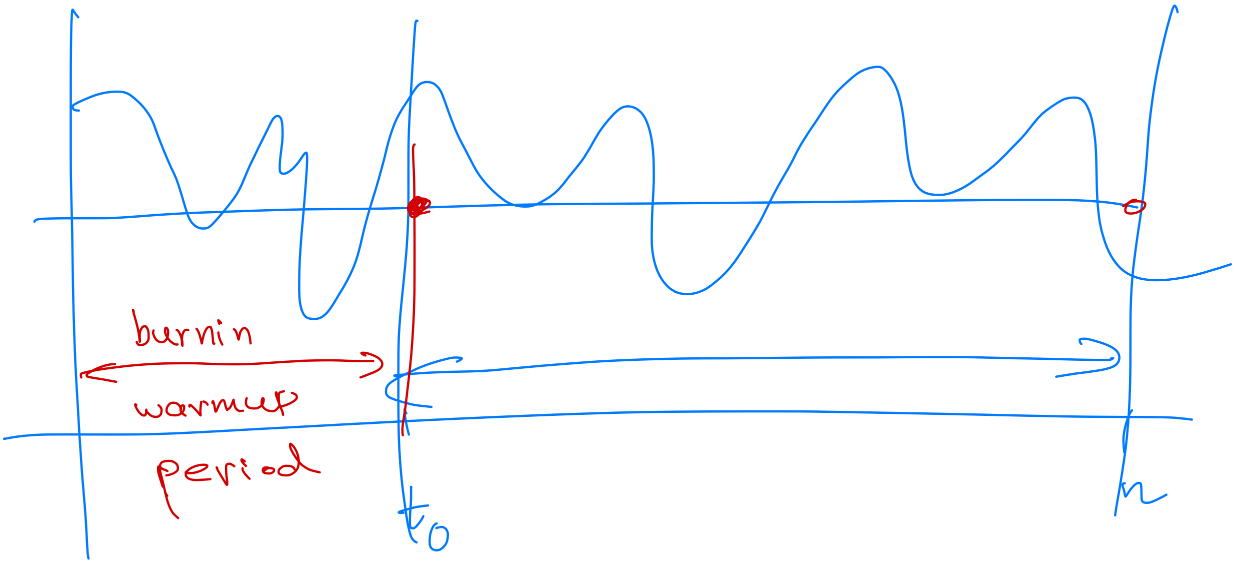
$\hat{\theta}=\frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N} h(Y_{n_k})$



$\hat{\pi}_j=\frac{1}{n}\sum_{t=0}^{n-1} 1(Y_t=j) \to \pi_j$ με πιθ. 1

Επομένως $\theta = E_{\pi}\, h(X)$ $\qquad \hat{\theta}=\frac{1}{n}\sum_{t=0}^{n-1} h(Y_t)$

$\to \sum \pi_j h(j)$



$$\hat{\theta} = \frac{1}{n-t_0+1} \cdot \sum_{t_0}^{n} h(Y_t)$$

<u>Ερώτημα 2</u> $\exists$ <u>αντιστρέψιμη</u> ΜΑ με οριακή κατανομή π?

Θέλουμε $P = (p_{ij})$ στοχαστικό πίνακα στο S.

: $\pi_i p_{ij} = \pi_j p_{ji} \quad \forall i,j$

$$\iff \boxed{b_i p_{ij} = b_j p_{ji} \quad \forall i,j \in S, \; i \neq j.}$$

Algorithm Metropolis-Hastings

Έστω οποιοσδήποτε στοχ. πίνακας $Q=(q_{ij})$, $i,j\in S$.
δεν επαναληπτικός.

Γενικά η στάσιμη κατανομή του $Q \neq \pi$

Διόρθωση μέσω accept reject.

Έστω $\{X_n,\ n=0,1,2,\dots\}$ που ορίζεται ως εξής

$P=?$

Αν $X_n=i \Rightarrow$ (1) Δημιουργούμε μια $Y=j$ από την $\{q_{ij},\ j\in S\}$

(2) Την $Y=j$ την δεχόμαστε τότε $X_{n+1}=j$ με πιθ. αποδοχής α_{ij}

ή την απορ. με πιθ. $1-\alpha_{ij}$ κ' τότε $X_{n+1}=i$

Ποια πρέπει να είναι η α_{ij}?

Τέτοια ώστε η στάσιμη κατανομή $=\pi$

$$P_{ij} = P(X_{n+1} = j \mid X_n = i) \quad \left(\begin{array}{l} Y = j \\ \text{is accepted} \end{array} \right)$$

$j \neq i$ $\qquad$ $P_{ij} = q_{ij}\, a_{ij}$

$j = i$ $\qquad$ $P_{ii} = 1 - \sum_{j \neq i} q_{ij} \alpha_{ij}$

$$= q_{ii} + \sum_{j \neq i} q_{ij}(1 - \alpha_{ij})$$

Metropolis : $\quad a_{ij}$: $\quad \pi_i P_{ij} = \pi_j P_{ji} \quad \forall i \neq j$

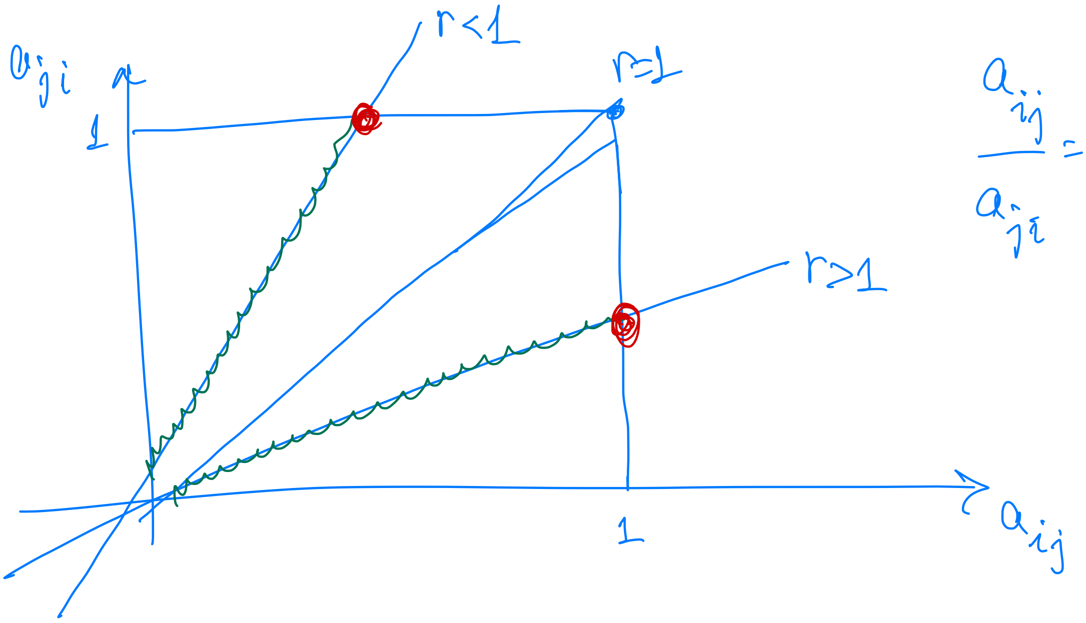
$$\Leftrightarrow \quad \boxed{b_i q_{ij} \alpha_{ij} = b_j q_{ji} \alpha_{ji}}$$

$\forall i \neq j$,

$\alpha_{ij} \in [0,1]$

$$\frac{\alpha_{ij}}{\alpha_{ji}} = \frac{b_j q_{ji}}{b_i q_{ij}} = r \quad \forall i, j \quad i \neq j.$$

$\alpha_{ij} \in (0,1)$



$$\frac{a_{ij}}{a_{ji}} = r \quad \text{(fijado)}$$

$r<1$: $a_{ji} = 1$, $a_{ij} = r$

$r>1$ $a_{ij} = 1$ $a_{ji} = 1/r$

$\Rightarrow$ $a_{ij} = \min(r, 1)$

$a_{ji} = \min\left(\frac{1}{r}, 1\right)$

Opues $r = \dfrac{b_j q_{ji}}{b_i q_{ij}}$

$$\Rightarrow \quad \boxed{a_{ij} = \min\left\{\frac{b_j q_{ji}}{b_i q_{ij}}, 1\right\}} \quad \forall i \neq j$$

$$a_{ji} = \min\left\{\frac{b_i q_{ij}}{b_j q_{ji}}, 1\right\}$$