ΤΕΧΝΙΚΕΣ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗΣ

Επικ. Καθ. Στέλιος Ζήμερας

Τμήμα Μαθηματικών

Κατεύθυνση Στατιστικής και Αναλογιστικών – Χρηματοοικονομικών Μαθηματικών

2017

Monte Carlo Markov Chains

Με βάση την χρήση της μεθόδου Important Sampling

το δείγμα μας ήταν ανεξάρτητο και ισόνομο.

Αυτό όμως δεν είναι πάντα εφικτό. Για τον σκοπό αυτό χρησιμοποιούμε Αλυσίδες Μαρκον.

Αρχικά δημιουργούμε έναν Markov Chain αλγόριθμο από κατάλληλη **εργοδική Μαρκοβιανή αλυσίδα**.

Monte Carlo Markov Chains

Εργοδικό θεώρημα

Έστω $\{X_i\}$, i=1,2,… , μια αδιαχώριστη και απεριοδική Μαρκοβιανή αλυσίδα μεκατανομή ισορροπίας π.

Τότε η $\{X_i\}$ συγκλίνει κατά νόμο στην π και για κάθε

συνάρτηση h ισχύει ότι

$$\frac{1}{n}\sum_{t=1}^{n} h(X_t) \xrightarrow[n\to\infty]{\sigma.\beta} E_\pi\{h(X)\}$$

όταν $E_\pi\{|\mathrm{h}(\mathrm{X})|\} < \infty$

Monte Carlo Markov Chains

Αφού τον τρέξουμε για αρκετό χρόνο, ώστε να περάσει η burn–in περίοδος, δηλαδή η αρχική περίοδος κατά την οποία είμαστε ακόμαμακριά από την επιθυμητή κατανομή, παίρνουμε έναν αριθμό επαναλήψεων του n .

Τότε αυτές είναι ένα εξαρτημένο δείγμα από την ζητούμενη κατανομή.

Έστω λοιπόν το $\{X_1, X_2, \ldots, X_n\}$ δείγμα που προέκυψε από την παραπάνω διαδικασία. Από το εργοδικό θεώρημα έχουμε

$$\hat{\mu}_n = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} g(X_i) \to E_\pi(g(x))$$

με πιθανότητα 1

Monte Carlo Markov Chains

Η burn – in περίοδος είναι ένας αριθμός επαναλήψεων (βημάτων) του MCMC αλγόριθμου, του οποίου το εξαγόμενο δεν έχει απομακρυνθεί ικανοποιητικά από τις αρχικές τιμές ή δεν έχει προσεγγίσει την κατανομή στόχο.

Συνεπώς, θεωρείται ότι το εξαγόμενο δεν προέρχεται από την κατανομή ισορροπίας και δεν χρησιμοποιείται. Το εύρος της burn – in περιόδου εξαρτάται από την επιλογή των αρχικών τιμών και την κατανομή ισορροπίας που θέλουμε να προσεγγίσουμε.

Δειγματολήπτης του Gibbs

Ο δειγματολήπτης του Gibbs είναι από τις πιο απλές Markov Chain μεθόδους δειγματοληψίας

Ένα μεγάλο πλεονέκτημα του δειγματολήπτη του Gibbs είναι ότι μπορούμε να πάρουμε δείγμα από μια κατανομή και να εκτιμήσουμε ικανοποιητικά κάποια μέτρα αυτής, όπως η μέση τιμή και η διασπορά, χωρίς να την γνωρίζουμε.

Μπορούμε να πάρουμε δείγμα X_1, X_2,…., X_n από την κατανομή στόχο p(x) χωρίς να την ξέρουμε παίρνοντας δείγμα από τις δεσμευμένες κατανομές $p(x|x_i)$.

Δειγματολήπτης του Gibbs

Ας υποθέσουμε ότι θέλουμε να πάρουμε δείγμα από την κατανομή στόχο $p(\mathbf{x})$, με $\mathbf{x} = (x_1, x_2, ..., x_k)$. Ο δειγματολήπτης Gibbs αντικαθιστά κάθε συνιστώσα του $\mathbf{x}$ με μια τιμή που προκύπτει από την πλήρως δεσμευμένη εκ των υστέρων κατανομή της υπό αντικατάσταση συνιστώσας, δεδομένων όλων των υπολοίπων συνιστωσών. Δηλαδή για τον υπολογισμό της συνιστώσας x_i του $\mathbf{x}$ επιλέγει σαν κατανομή εισήγησης την $g_i\left(x_i^* / x_{t,i}, \mathbf{x}_t(i), \mathbf{x}_t\right) = p\left(x_i^* / \mathbf{x}_t(i), \mathbf{x}_t\right)$. Από τη μορφή που έχει η κατανομή εισήγησης προκύπτει πιθανότητα αποδοχής πάντα 1, δηλαδή όλες οι κινήσεις του αλγόριθμου γίνονται δεκτές. Πιο συγκεκριμένα για να κατασκευάσουμε μια Μαρκοβιανή αλυσίδα με κατανομή ισορροπίας $p(\mathbf{x})$, δεδομένου ότι ξεκινήσαμε τον αλγόριθμο τη στιγμή $t = 0$ από το σημείο $\mathbf{x} = \mathbf{x}_0 = (x_{0,1}, x_{0,2}, ..., x_{0,k})$ και τη στιγμή t έχει επιλεγεί $\mathbf{x} = \mathbf{x}_t = (x_{t,1}, x_{t,2}, ..., x_{t,k})$ έχουμε :

Δειγματολήπτης του Gibbs

<u>Επανάληψη</u> $t+1$

- Βήμα 1^{o} : Επιλέγουμε τυχαία $x^{*}_{t+1,1}$ από την $p\left(x_{t,1} / x_{t,2}, x_{t,3}, x_{t,4}, \ldots, x_{t,k}\right)$
- Βήμα 2^{o} : Επιλέγουμε τυχαία $x^{*}_{t+1,2}$ από την $p\left(x_{t,2} / x^{*}_{t+1,1}, x_{t,3}, x_{t,4}, \ldots, x_{t,k}\right)$
- Βήμα 3^{o} : Επιλέγουμε τυχαία $x^{*}_{t+1,3}$ από την $p\left(x_{t,3} / x^{*}_{t+1,1}, x^{*}_{t+1,2}, x_{t,4}, \ldots, x_{t,k}\right)$
- ……… ………. ………… …………
- ……… ………. ………… …………
- Βήμα k^{o} :Επιλέγουμε τυχαία $x^{*}_{t+1,k}$ από την $p\left(x_{t,k} / x^{*}_{t+1,1}, x^{*}_{t+1,2}, x^{*}_{t+1,3}, \ldots, x^{*}_{t+1,k-1}\right)$.

Δειγματολήπτης του Gibbs

Έτσι ολοκληρώνεται η $t+1$ επανάληψη και έχουμε πλέον το σημείο

$$\mathbf{x} = \mathbf{x}_{t+1} = \left(x^{*}_{t+1,1}, x^{*}_{t+1,2}, \ldots, x^{*}_{t+1,k} \right).$$

Ο αλγόριθμος τερματίζει όταν ολοκληρωθεί ο αριθμός των επαναλήψεων που έχουμε ορίσει.

Αλγόριθμος Metropolis– Hastings

Στόχος μας είναι η κατασκευή Μαρκοβιανής αλυσίδας με κατανομή ισορροπίας $p(\mathbf{x}):\mathbb{R}^n \to A \subseteq \mathbb{R}^n$, όπου $\mathbf{x}=(x_1,x_2,\ldots,x_n)$ και η εξαγωγή δείγματος από αυτή. Επιλέγουμε αρχικά μια κατανομή εισήγησης $g(\mathbf{x}):\mathbb{R}^n \to A \subseteq \mathbb{R}^n$ η οποία εξαρτάται από την παράμετρο $\boldsymbol{\theta}$. Επιλέγουμε τυχαία ένα αρχικό σημείο $\mathbf{x}_0$ από την κατανομή εισήγησης. Από αυτό προκύπτει και η παράμετρος $\boldsymbol{\theta}=\boldsymbol{\theta}_0$. Πρέπει επίσης $g(\mathbf{x}_0)>0$. Έστω ότι μετά από t επαναλήψεις βρισκόμαστε στο σημείο $\mathbf{x}_t$ με παράμετρο $\boldsymbol{\theta}_t$ και $g(\mathbf{x}_t)>0$.

Αλγόριθμος Metropolis– Hastings

Βήμα 1$^{\text{ο}}$

Επιλέγουμε να είναι το $\mathbf{x}^*$ το υποψήφιο σημείο στο οποίο θα μεταβεί ο αλγόριθμος τη στιγμή $t+1$. Η επιλογή του εξαρτάται από το σημείο $\mathbf{x}_t$, την παράμετρο $\boldsymbol{\theta}_t$ και γίνεται με την κατανομή εισήγησης.

Βήμα 2$^{\text{ο}}$

Υπολογίζουμε την πιθανότητα αποδοχής

$$a_t\left(\mathbf{x}^* / \mathbf{x}_t\right) = \min\left\{1, \frac{\pi\left(\mathbf{x}^*\right) \cdot g_t\left(\mathbf{x}_t / \mathbf{x}^*\right)}{\pi\left(\mathbf{x}_t\right) \cdot g_t\left(\mathbf{x}^* / \mathbf{x}_t\right)}\right\}.$$

Αλγόριθμος Metropolis– Hastings

Βήμα 3^{o}

Παίρνουμε τυχαία έναν αριθμό k από ομοιόμορφη κατανομή στο $(0,1)$, $k \sim U(0,1)$.

Εάν $k \leq a_t\left(\mathbf{x}^*/\mathbf{x}_t\right)$, τότε $\mathbf{x}^* = \mathbf{x}_{t+1}$ και $\boldsymbol{\theta}^* = \boldsymbol{\theta}_{t+1}$.

Αλλιώς $\mathbf{x}_{t+1} = \mathbf{x}_t$ και $\boldsymbol{\theta}_{t+1} = \boldsymbol{\theta}_t$ και επιστρέφουμε στο βήμα 1.

Αλγόριθμος Metropolis– Hastings

- Η πιθανότητα αποδοχής που ορίστηκε παραπάνω εξασφαλίζει ότι η στάσιμη κατανομή είναι η εκ των υστέρων κατανομή, χωρίς να μας βεβαιώνει ότι η αλυσίδα που δημιουργείται συγκλίνει σε στάσιμη κατανομή. Όταν η αλυσίδα όμως είναι αδιαχώριστη και απεριοδική η στάσιμη κατανομή της είναι η κατανομή στόχος
- Ο πυρήνας μετάβασης της αλυσίδας είναι δομημένος έτσι ώστε να ισχύει η αντιστρεψιμότητα της αλυσίδας.

Αλγόριθμος Metropolis– Hastings

- Θεωρητικά για να πάρουμε δείγμα από την κατανομή στόχο μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε οποιαδήποτε κατανομή εισήγησης μας επιτρέπει ο αλγόριθμος, και εφ' όσον δημιουργεί μέσω των επαναλήψεών του αλυσίδα με τις επιθυμητές ιδιότητες (εργοδική).
- Στην πράξη όμως η επιλογή της g είναι δύσκολη αφού η μορφή της επηρεάζει την ταχύτητα σύγκλισης του αλγορίθμου και την μίξη της αλυσίδας.