Um Markov-Chain Monte-Carlo (MCMC)

Helgi Tómasson
helgito@hi.is

Túlkun niðurstaðna í bayesískum ályktunum fer fram í gegnum „a posteriori" dreifinguna,

$$\pi(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{x}) \propto l(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{x})\pi(\boldsymbol{\theta}).$$

Dreifingin $\pi(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{x})$ er yfirleitt flókin formúla. Einungis í sérstökum kennslubókardæmum eru til meðfærilegar formúlur. Rannsakendur nota hermunartækni til að gera sér mynd af eiginleikum $\pi(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{x})$. Vinsæl tækni er að hann Markov-keðju sem hefur $\pi(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{x})$ sem jafnvægisdreifingu.

Hvað er Markov-keðja

Markov-ferli eru slembiferli (stochastic-process), þ.e. safn hendinga, $X(t)$, sem raðað er í tíma. Tengsl yfir tíma eru þannig að einungis nýliðin fortíð skiptir máli.

$$P(X(t) = x(t)|X(t-1) = x(t-1), X(t-2) = x(t-2), X(t-3) = x(t-2), \ldots) = P(X(t) = x(t)|X(t-1) =$$

þ.e. skilyrtar líkur, gefin fortíðin eru einungis fall af síðasta gildi.

Einfalt dæmi

Gerum ráð fyrir að á tíma t geti hendingin $X(t)$ tekið tvö gildi 0 og 1. Til dæmis má hugsa sér að þetta séu há laun og lág laun og keðjan, $X(t)$ lýsi hreyfingu einstaklings milli launaflokka. Líkur á að hálaunaður einstaklingur haldist hálaunaður eru $P(X(t) = 1|X(t-1) = 1) = p$ og láglaunaður einstaklingur haldist láglaunaður eru $P(X(t) = 0|X(t-1) = 0) = q$. Ef líkindadreifingin á tíma $t-1$ eru $P(X(t-1) = 1) = p_{t-1}$ og þar með $P(X(t-1) = 0) = 1-p_{t-1}$ þá má fá dreifinguna á tíma t:

$$\begin{bmatrix} p_t \\ 1-p_t \end{bmatrix} = \underbrace{\begin{bmatrix} p & 1-q \\ 1-p & q \end{bmatrix}}_{T} \begin{bmatrix} p_{t-1} \\ 1-p_{t-1} \end{bmatrix}.$$

Tilfærslufylkið (transition matrix) lýsir hvernig líkindadreifingin þróast í tíma. Til er jafnvægisdreifing sem tilfærslan heldur fastri.

$$T \begin{bmatrix} \bar{p} \\ 1-\bar{p} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{p} \\ 1-\bar{p} \end{bmatrix}$$

Í þessu einfalda dæmi auðvelt að finna að jafnvægisdreifingin er Bernoulli($\bar{p}$). Þar sem

$$\bar{p} = \frac{1-q}{2-p-q}$$

Hægt er að setja ferlið upp á AR(1) (auto-regressive) formi:

$$X(t) = \mu + \phi X(t-1) + \varepsilon(t),$$
$$\mu = (1-q),$$
$$\phi = (p+q-1).$$

Sjálffylgni í AR(1) er á forminu ϕ^k. Gildin á p og q stjórna tregðu (sjálffylgni) kerfisins.

Gibbs sampler

Yfirleitt er $\boldsymbol{\theta}$ margvíður. Þ.e. $\boldsymbol{\theta} = (\theta_1, \ldots, \theta_k)'$. Í sumum tilfellum er hægt þátta „a posteriori" dreifinguna þannig að t.d.

$$\pi(\theta_1|\theta_2, \ldots, \theta_k, \boldsymbol{x})$$

er „þægileg" dreifing. Með orðinu „þægileg" er átt við að auðvelt sé að herma gildi úr henni í tölvu. Ef hægt er að hluta $\boldsymbol{\theta}$ niður í þægilegar einingar er hægt að koma við hermunarferli sem er nefnt Gibbs-sampler.

Einfalt dæmi um Gibbs sampler

Ef á að álykta um μ og σ í $X \sim N(\mu, \sigma^2)$ út frá slembiúrtaki $\boldsymbol{x} = (x_1, \ldots, x_n)'$ þá er hugsanlegt að skilgreina $\boldsymbol{\theta} = (\mu, \sigma^2)'$. Hugsanlegt er að velja „a priori" dreifingu þannig að „a posteriori" dreifingin verði þannig að:

$$\mu|sigma^2, \boldsymbol{x} \tag{1}$$

og

$$\sigma^2|\mu, \boldsymbol{x}$$

séu báðar þægilegar dreifingar. Þá er hugsanlegt að byrja t.d. með byrjunar gildi á σ^2 og herma gildi á μ, síðan að nota það gildi á μ og herma gildi á σ^2, síðan er það σ^2 notað til að fá nýtt gildi á μ. Með því að hoppa á milli (1) og (2) fæst $\boldsymbol{\theta}_t$. Hoppmynstur af þessari gerð er nefnd Gibbs-sampler. Gibbs-sampler myndar Markov-keðju og ef einfaldar forsendur eru gefnar er til jafnvægisdreifing. Hagnýt bayesísk reiknifræði gengur út á að herma Markov-keðju og vona að eftir tiltekin tíma sé jafnvægi náð. Ef ekki er í boði þægileg dreifing er stundum gripið til annarar Markov-keðju hermunar sem nefnd er Metropolis-Hastings.