ΕΛΛΗΝΙΚΗ ΔΗΜΟΚΡΑΤΙΑ
ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΚΡΗΤΗΣ

Εισαγωγή σε μεθόδους Monte Carlo

Ενότητα 6: Διάγνωση σύγκλισης

Βαγγέλης Χαρμανδάρης

Τμήμα Μαθηματικών και Εφαρμοσμένων Μαθηματικών

Diagnosing Convergence

❑ **Convergence Criteria:**

- There are three (increasingly stringent) types of convergence
  - Convergence to the Stationary Distribution
  - Convergence of Averages
  - Convergence to iid Sampling

Convergence to the Stationary Distribution

- Minimal requirement
- Theoretically, stationarity is only achieved asymptotically
- Not the major issue. Rather,
  - Speed of exploration of the support of f
  - Degree of correlation between the $\theta^{(t)}$'s.

Diagnosing Convergence

Convergence of Averages

- Convergence of the empirical average

$$\frac{1}{T}\sum_{t=1}^{T} h(\theta^{(t)}) \rightarrow \mathrm{E}_f[h(\theta)]$$

  for an arbitrary function h.

- Most relevant in the implementation of MCMC
  - Convergence related to the *mixing* speed (Brooks and Roberts)

Convergence to iid Sampling

- How close a sample $(\theta_1^{(t)}, \ldots, \theta_n^{(t)})$ is to being iid.
- Can use *subsampling*(or *batch sampling*) to reduce correlation between the successive points of the Markov chain.

Diagnosing Convergence: Be Careful

Overall Cautions

- It is somewhat of an illusion to think we can control the flow of a Markov chain and assess its convergence behavior from a few realizations of this chain.
- The heart of the difficulty is the key problem of statistics, where the uncertainty due to the observations prohibits categorical conclusions and final statements.
- But...We do out best!

Monitoring Convergence

- **Example: Beta Generator**

- The Markov chain $(X^{(t)})$

$$X^{(t+1)} = \begin{cases} Y \sim \mathcal{B}e(\alpha+1, 1) & \text{with probability } x^{(t)} \\ x^{(t)} & \text{otherwise} \end{cases}$$

  has stationary distribution

$$f(x) = \alpha x^{\alpha-1} \ ,$$

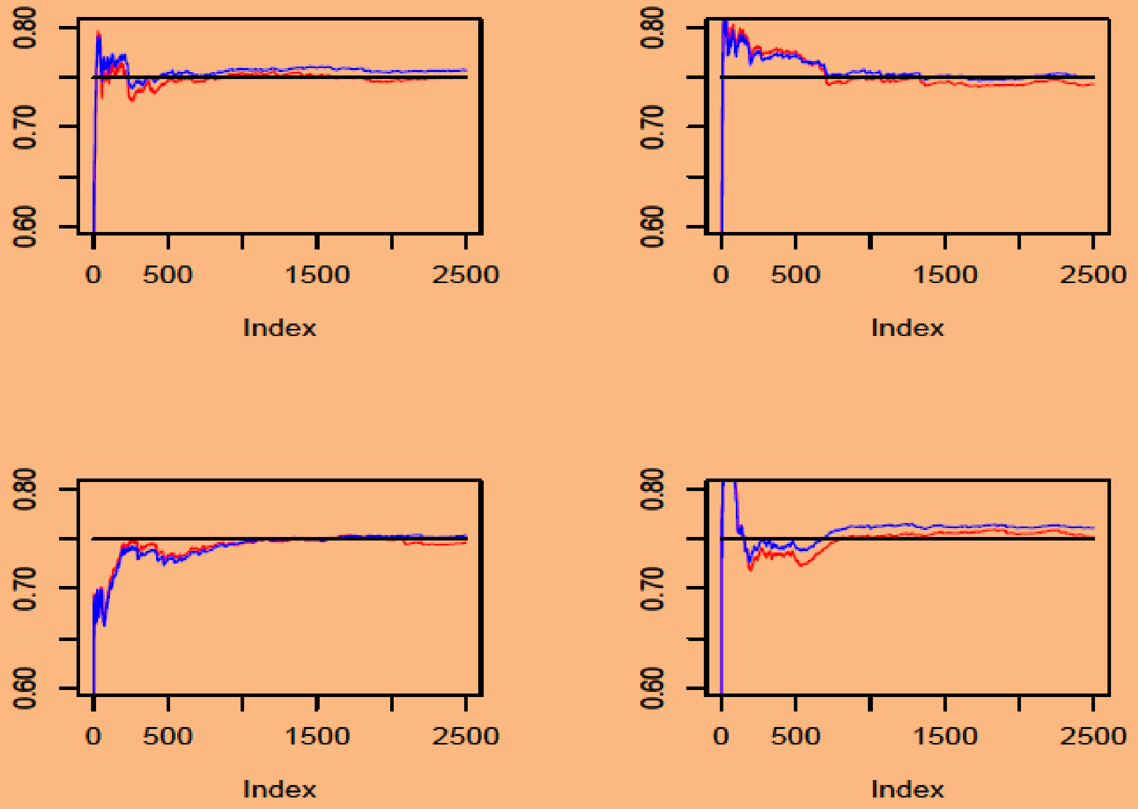
  - Can generate directly
  - Can also use Metropolis, which accepts y with probability $x^{(t)}/y$

- Note $\mathrm{E}_f(X) = \frac{\alpha}{\alpha+1}$

Monitoring Convergence: Example

Beta Generator

- This is a very bad chain
- CLT doesn't hold
- Metropolis and Direct



Monitoring Convergence

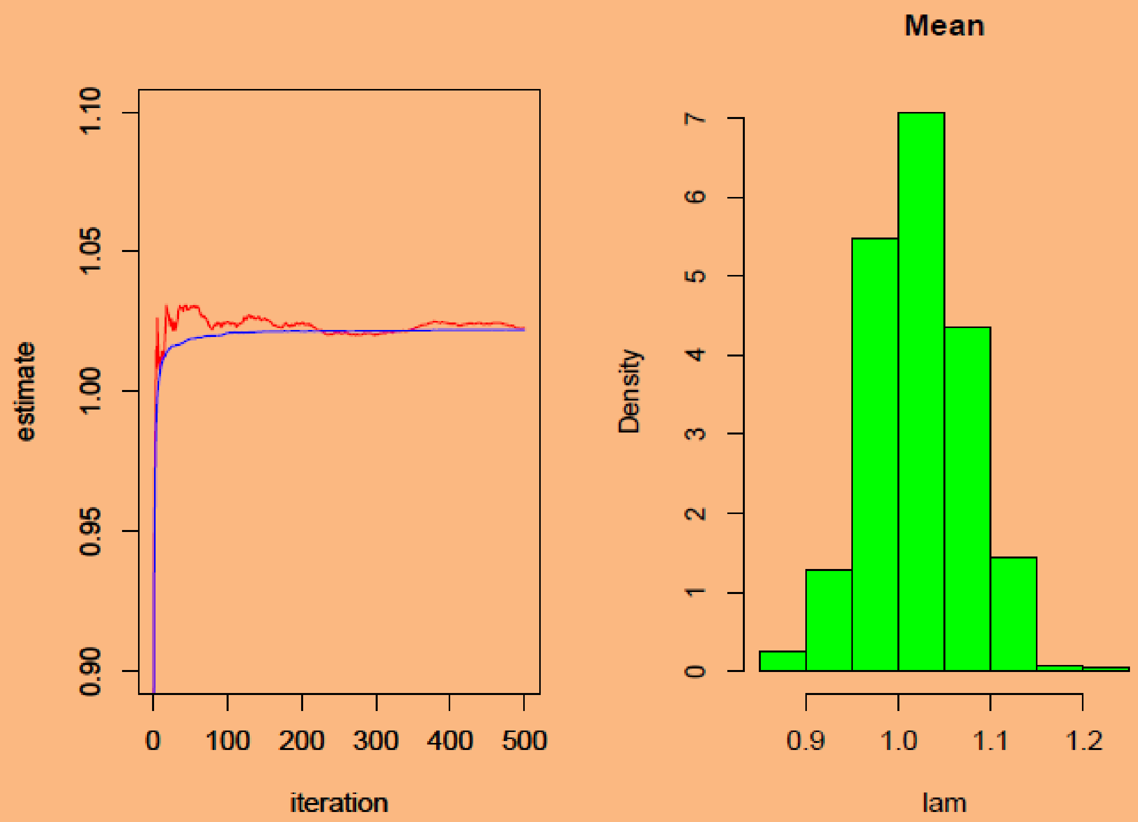
Multiple Estimates

- In most cases, the graph of the raw sequence doesn't help in the detection of stationarity or convergence.
- A more helpful indicator is the behavior of the averages in terms of T.
- Can use several convergent estimators of $\mathrm{E}_f[h(\theta)]$ based on the same chain
- Monitor until all estimators coincide

Monitoring Convergence

Monitoring Convergence of Averages -Poisson/Gibbs Example

- Two Estimators of Lambda
- Empirical Average or the Conditional Expectation
- Convergence Diagnostic $\longrightarrow$ Both estimators converge



Monitoring Convergence

❑ **Common Estimates:**

- The empirical average S_T
- The *conditional* (or Rao–Blackwellized) version of this average

$$S_T^C = \frac{1}{T} \sum_{t=1}^{T} \mathrm{E}[h(\theta) | \eta^{(t)}] ,$$

- Importance sampling:

$$S_T^P = \sum_{t=1}^{T} w_t \, h(\theta^{(t)}) ,$$

where $w_t \propto f(\theta^{(t)})/g_t(\theta^{(t)})$ and g_t is the true density used for the simulation. $\theta^{(t)}$.

Analyzing Outputs

❑ **Check Statistical Efficiency**

✓ **Assume: $x^{(i)}$, i = 1, …, m sample from π(x). $x^{(0)} \sim \pi(x)$**

❑ **Calculate Variance of Estimator:**

$$m\,\mathrm{var}\left\{\frac{h(\mathbf{x}^{(1)}) + \cdots + h(\mathbf{x}^{(m)})}{m}\right\} = \sigma^2\left[1 + 2\sum_{j=1}^{m-1}\left(1 - \frac{j}{m}\right)\rho_j\right]$$

$$\approx \sigma^2\left[1 + 2\sum_{j=1}^{\infty}\rho_j\right] \qquad (5.13)$$

$$\sigma^2 = \mathrm{var}[h(\mathbf{x})] \text{ and } \rho_j = \mathrm{corr}\{h(\mathbf{x}^{(1)}), h(\mathbf{x}^{(j+1)})\}.$$

Analyzing Outputs

- Define **integrated autocorrelation time**: $\tau_{\text{int}}(h) = \frac{1}{2} + \sum_{j=1}^{\infty} \rho_j.$

$$m \text{var}(\hat{h}) = 2\tau_{\text{int}}(h)\sigma^2.$$

- It is often observed that ρ_j decays exponentially: $|\rho_j| \sim \exp\left\{-\frac{j}{\tau_{\exp}(h)}\right\},$

- Define **exponential autocorrelation time**:

$$\tau_{\exp}(h) = \limsup_{j\to\infty} \frac{j}{-\log|\rho_j|},$$

Analyzing Outputs

- **Large time:**

$$\tau_{\text{int}}(h) \approx \sum_{j=0}^{\infty} e^{-j/\tau_{\text{exp}}(h)} - \frac{1}{2} = \frac{1}{1 - e{-1/\tau_{\text{exp}}(h)}} - \frac{1}{2} \approx \tau_{\text{exp}}(h).$$

- Define **relaxation time**:

$$\tau_{\text{exp}} = \sup_{h \in L^2(\pi)} \tau_{\text{exp}}(h).$$

Analyzing Outputs - Convergence

❑ Concepts of autocorrelation and relaxation time are also related to the convergence rater of the algorithm.

❑ If h is an eigenfunction that corresponds to the λ eigenvalue of the transition matrix then we have:

$$\rho_j(h) = \lambda^j$$

$$\tau_{\text{int}}(h) = \frac{1+\lambda}{2(1-\lambda)}, \quad \tau_{\exp}(h) = -\frac{1}{\log|\lambda|},$$

❑ **Relaxation time:**

$$\tau_{\exp} = -\frac{1}{\log|\lambda_2|},$$

Bibliography

- *Monte Carlo Strategies in Scientific Computing*, J. Liu, Springer, New York, 2001.
- *Monte Carlo Statistical Methods*, C. Robert, G. Casella, Springer, New York, 2004.

Τέλος Ενότητας

Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Χρηματοδότηση

- Το παρόν εκπαιδευτικό υλικό έχει αναπτυχθεί στα πλαίσια του εκπαιδευτικού έργου του διδάσκοντα.
- Το έργο «**Ανοικτά Ακαδημαϊκά Μαθήματα στο Πανεπιστήμιο Κρήτης**» έχει χρηματοδοτήσει μόνο τη αναδιαμόρφωση του εκπαιδευτικού υλικού.
- Το έργο υλοποιείται στο πλαίσιο του Επιχειρησιακού Προγράμματος «Εκπαίδευση και Δια Βίου Μάθηση» και συγχρηματοδοτείται από την Ευρωπαϊκή Ένωση (Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο) και από εθνικούς πόρους.

Σημειώματα

Σημείωμα αδειοδότησης

.

Σημείωμα Αναφοράς

Copyright Πανεπιστήμιο Κρήτης, Βαγγέλης Χαρμανδάρης 2015. «Εισαγωγή σε μεθόδους Monte Carlo. Ενότητα 6: Διάγνωση σύγκλισης». Έκδοση: 1.0. Ηράκλειο 2015. Διαθέσιμο από τη δικτυακή διεύθυνση: https://opencourses.uoc.gr/courses/course/view.php?id=228.

Διατήρηση Σημειωμάτων

Οποιαδήποτε αναπαραγωγή ή διασκευή του υλικού θα πρέπει να συμπεριλαμβάνει:

- το Σημείωμα Αναφοράς
- το Σημείωμα Αδειοδότησης
- τη δήλωση Διατήρησης Σημειωμάτων
- το Σημείωμα Χρήσης Έργων Τρίτων (εφόσον υπάρχει)

μαζί με τους συνοδευόμενους υπερσυνδέσμους.