

1 Markov Chain Monte Carlo

Gegeben: Zufallsvariable X auf Zustandsraum $S = \{s_1, s_2, \dots, s_k\}$ und Verteilung $\pi = (\pi_1, \pi_2, \dots, \pi_k)$

Gesucht: Übergangsmatrix P mit Grenzverteilung π

- Wähle eine Übergangsmatrix R auf S
- Setze

$$P_{i,j} = \begin{cases} R_{i,j} \wedge \left(\frac{\pi_j}{\pi_i} \cdot R_{j,i}\right) & , \text{ für } i \neq j \\ 1 - \sum_{j \neq i} P_{i,j} & , \text{ für } i = j \end{cases} \quad (1)$$

Es gilt Invarianz von π bezüglich P : $\pi_i \cdot P_{i,j} = \pi_j \cdot P_{j,i}$

In der Praxis wählt man R wie folgt:

- Wähle einen nicht-orientierten Graphen G auf S , so dass $\forall i \neq j \exists n \geq 1, \{t_1, t_2, \dots, t_{n+1}\} \subset S : t_1 = s_i \wedge t_{n+1} = s_j \wedge \forall 1 \leq k \leq n : (t_k, t_{k+1}) \in G$
- Wähle R so, dass : $R_{i,j} > 0 \Leftrightarrow (s_i, s_j) \in G$

Gibbs-Sampler:

$$R_{i,j} = \begin{cases} \left(\sum_{\{l: (s_i, s_l) \in G\}} \pi_l\right)^{-1} \cdot \pi_j & , \text{ für } (s_i, s_j) \in G \\ 0 & , \text{ für } (s_i, s_j) \notin G \end{cases} \quad (2)$$

Metropolis-Algorithmus:

$$R_{i,j} = \begin{cases} (n_i)^{-1} & , \text{ für } (s_i, s_j) \in G \\ 0 & , \text{ für } (s_i, s_j) \notin G \end{cases} \quad (3)$$

mit $n_i = |\{l : (s_i, s_l) \in G\}|$

Hastings-Algorithmus:

- Für festes $X_n = s_i$ simuliere man Y_n nach $R_{i,\bullet}$
- Mit simuliertem $Y_n = s_j$ wird in einer neuen unabhängigen Simulation X_{n+1} nach

$$X_{n+1} = \begin{cases} Y_n & , \text{ mit Wahrscheinlichkeit } \frac{\pi_j \cdot R_{j,i}}{\pi_i \cdot R_{i,j}} \wedge 1 \\ X_n & , \text{ mit Wahrscheinlichkeit } 1 - \frac{\pi_j \cdot R_{j,i}}{\pi_i \cdot R_{i,j}} \wedge 1 \end{cases} \quad (4)$$

erzeugt.

2 Eine Anwendung

- Zustandsraum S der Form $S = E^\Lambda$ mit $s_i \in S$ als Zuteilung: $m \in \Lambda \mapsto s_i(m) \in E$
- zwischen den Zeitpunkten n und $n+1$ wird nur eine Komponente von X geändert, d.h.
 $\exists m \in \Lambda : X_{n+1} \stackrel{m}{\sim} X_n$
- alle anderen Komponenten bleiben unverändert:
 $\forall m' \neq m : X_{n+1}(m') = X_n(m')$
- man wählt den Graphen G so, dass
 $(s_i, s_j) \in G \Leftrightarrow s_i$ und s_j unterscheiden sich an genau einer Stelle
- Übergangsmatrix $P^{(m)}$ mit der Eigenschaft $P_{i,j}^{(m)} = 0$, wenn nicht $s_i \stackrel{m}{\sim} s_j$
- gegebene Übergangsmatrix $R^{(m)}$ mit $R_{i,j}^{(m)} \neq 0 \Leftrightarrow s_i \stackrel{m}{\sim} s_j$
- dann gilt: $\pi_i \cdot P_{i,j}^{(m)} = (\pi_i \cdot R_{i,j}^{(m)}) \wedge (\pi_j \cdot R_{j,i}^{(m)})$ und $P_{i,i}^{(m)} = 1 - \sum_{j \neq i} P_{i,j}^{(m)} \geq 0$

Hastings-Algorithmus:

- für gegebenes $X_n = s_i$ simulieren wir Y_n nach $R_{i,\bullet}^{(m)}$
- mit so simuliertem $Y_n = s_j$ wähle man X_{n+1} nach:

$$X_{n+1} = \begin{cases} Y_n & , \text{ mit Wahrscheinlichkeit } \frac{\pi_j \cdot R_{j,i}^{(m)}}{\pi_i \cdot R_{i,j}^{(m)}} \wedge 1 \\ X_n & , \text{ mit Wahrscheinlichkeit } 1 - \frac{\pi_j \cdot R_{j,i}^{(m)}}{\pi_i \cdot R_{i,j}^{(m)}} \wedge 1 \end{cases} \quad (5)$$

Gibbs-Sampler:

- $P_{i,j}^{(m)} = R_{i,j}^{(m)} = (\sum_{s_l \stackrel{m}{\sim} s_i} \pi_l)^{-1} \cdot \pi_j$, falls $s_i \stackrel{m}{\sim} s_j$
- $X_{n+1}(m)$ wird nach π unter den gegebenen anderen Komponenten gewählt

Metropolis-Algorithmus:

- $R_{i,j}^{(m)} = (|E| - 1)^{-1}$, falls $s_i \stackrel{m}{\sim} s_j$
- $P_{i,j}^{(m)} = (|E| - 1)^{-1} \cdot (\frac{\pi_j}{\pi_i} \wedge 1)$, falls $s_i \stackrel{m}{\sim} s_j$ und $s_i \neq s_j$
- man wählt zunächst gleichverteilt auf $E \setminus \{X_n(m)\}$ einen Wert $s_j^{(m)}$ am Punkt m
- dann ist $X_{n+1}(m) = s_j^{(m)}$ mit Wahrscheinlichkeit $\frac{\pi_j}{\pi_i} \wedge 1$