

Προσομοιωμένα σταθμισμένα δείγματα ως διαδικασίες με άλματα: Μία διαφορετική οπτική

Σόνια Μαλεφάκη

Διδακτορική Διατριβή

Πανεπιστήμιο Πειραιώς
Τμήμα Στατιστικής και Ασφαλιστικής Επιστήμης
Πειραιάς

Επιβλέπων: Επίκουρος Καθηγητής Γιώργος Ηλιόπουλος

(Οκτώβριος 2008)

РАНЕЕЗНАМО ПЕРПАА

Στους γονείς μου και στο Βασίλη
για τη στήριξη και την τεράστια
υπομονή τους όλα αυτά τα χρό-
νια.

Ευχαριστίες

Θα ήθελα να ευχαριστήσω θερμά το δάσκαλό μου, Επίκουρο Καθηγητή κ. Γ. Ηλιόπουλο για την ουσιαστική καθοδήγησή του και τη βοήθεια του στο να ξεπεραστούν οι ποικίλες δυσκολίες που προέκυψαν κατά τη διάρκεια της έρευνάς μου.

Δεν θα ήθελα να παραλείψω να ευχαριστήσω τον κ. Ν. Λημνιό, Καθηγητή του Laboratoire de Mathématiques Appliquées de Compiègne, Université de Technologie de Compiègne, του οποίου οι πολύτιμες συμβουλές και υποδείξεις με βοήθησαν τα μέγιστα.

Ευχαριστώ επίσης τους Καθηγητές κ.κ. Σ. Κουρούκλη και Μ. Κούτρα για τη συμμετοχή τους στην τριμελή επιτροπή μου, καθώς επίσης και τα υπόλοιπα μέλη της εξεταστικής επιτροπής μου, Καθηγητή κ. Π. Δελλαπόρτα, Αναπληρωτή Καθηγητή κ. Γ. Τσακλίδη και Επίκουρο Καθηγητή κ. Δ. Καρλή.

Επίσης, θα ήθελα να επισημάνω ότι η παρούσα διατριβή δε θα μπορούσε να εκπονηθεί χωρίς τη πολύπλευρη βοήθεια και των «δικών μου» ανθρώπων. Αισθάνομαι την ανάγκη να ευχαριστήσω θερμά τους γονείς μου, Νίκο και Αγγελική Μαλεφάκη, για τη ψυχολογική και την οικονομική στήριξή τους καθώς επίσης και το Βασίλη Γεωργίου για την τεχνική υποστήριξη που μου παρείχε όλα αυτά τα χρόνια, αλλά πάνω από όλα για τη συμπαράστασή και την υπομονή του!

Σόνια Μαλεφάκη

Αθήνα, 2008.

РАНЕЕ НЕ ПЕРПА

Περιεχόμενα

| | |
|-------------------------------------------------------------|------------|
| Ευχαριστίες | iii |
| 1 Εισαγωγή | 1 |
| 2 Αλγόριθμοι MC και MCMC | 5 |
| 2.1 Μέθοδοι MC | 5 |
| 2.1.1 Ολοκλήρωση Monte Carlo | 6 |
| 2.1.2 Μέθοδος Αντιστροφής | 8 |
| 2.1.3 Μέθοδος Αποδοχής-Απόρριψης | 9 |
| 2.1.4 Δειγματοληψία σπουδαιότητας | 12 |
| 2.1.5 Δειγματοληψία σπουδαιότητας με rejection control | 16 |
| 2.1.6 Δειγματοληψία/Επαναδειγματοληψία Σπουδαιότητας | 17 |
| 2.1.7 Προσομοίωση μέσω διακριτοποίησης | 18 |
| 2.2 Αλγόριθμοι MCMC | 21 |
| 2.2.1 Αλγόριθμος MH | 24 |
| 2.2.2 Δειγματολήπτης Gibbs | 29 |
| 2.2.3 Ανεξάρτητοι δειγματολήπτες με γεωμετρικά βάρη | 31 |
| 2.3 Άλλοι αλγόριθμοι | 33 |
| 3 Σταθμισμένα δείγματα ως ημιμαρκοβιανές διαδικασίες | 35 |
| 3.1 Εισαγωγή | 35 |
| 3.2 Βασικοί ορισμοί | 36 |
| 3.3 Στάσιμα σταθμισμένα δείγματα | 43 |
| 3.4 Η περίπτωση των εκθετικών βαρών | 45 |
| 3.5 Στάσιμες ημιμαρκοβιανές διαδικασίες | 49 |
| 3.6 Ο αλγόριθμος MH | 55 |
| 3.7 Ο ανεξάρτητος δειγματολήπτης των Sahu and Zhigljavsky | 59 |
| 3.8 Άλλοι IS εκτιμητές | 62 |
| 4 Διακριτοποίηση και Στάθμιση | 65 |
| 4.1 Εισαγωγή | 65 |
| 4.2 Περιγραφή της μεθόδου | 66 |
| 4.3 Παραδείγματα | 67 |

| | | |
|----------|-------------------------------------------------------|------------|
| 4.3.1 | Προσομοίωση από κατανομή βήτα | 67 |
| 4.3.2 | Προσομοίωση από την κατανομή Dirichlet | 69 |
| 4.3.3 | Σύνολο δεδομένων dugongs | 72 |
| 4.3.4 | Σύνολο δεδομένων Challenger | 83 |
| 5 | Ειδικά Θέματα | 91 |
| 5.1 | Βελτίωση των εκτιμητών ΜΗ | 91 |
| 5.1.1 | Υπολογισμός των βαρών του αλγορίθμου ΜΗ | 91 |
| 5.1.2 | Εκτίμηση των βαρών του αλγορίθμου ΜΗ | 96 |
| 5.2 | Προσομοίωση από την πολυωνυμική κατανομή | 106 |
| 5.2.1 | Γνωστές μέθοδοι προσομοίωσης | 106 |
| 5.2.2 | Διαδικασία δύο βημάτων | 108 |
| 5.2.3 | Εμπειρικά αποτελέσματα | 109 |
| 6 | Σύνοψη - Συμπεράσματα-Μελλοντικές κατευθύνσεις | 115 |
| A | Μαρκοβιανές και Ημιμαρκοβιανές διαδικασίες | 119 |
| A.1 | Εισαγωγή | 119 |
| A.2 | Μαρκοβιανές αλυσίδες | 120 |
| A.2.1 | Βασικοί ορισμοί | 120 |
| A.3 | Ημιμαρκοβιανές διαδικασίες | 130 |
| A.3.1 | Βασικοί ορισμοί | 130 |
| A.3.2 | Σχετικές διαδικασίες Markov | 132 |
| B | Υπολογισμός διασποράς εκτιμητή λόγου | 133 |
| | Βιβλιογραφία | 139 |

Εισαγωγή

Όταν κάποιος ανακαλύψει την αλήθεια για κάτι με μεγάλο κόπο, τότε, επιθεωρώντας πιο προσεκτικά την ανακάλυψή του, συχνά διαπιστώνει ότι αυτό που τον κούρασε πολύ για να βρεθεί θα μπορούσε να παρατηρηθεί με την μεγαλύτερη ευκολία.

—Galileo Galilei (1564-1642)

Τα σοβαρά προβλήματα που αντιμετωπίζουμε δεν μπορούν να λυθούν αν μείνουμε στο ίδιο επίπεδο σκέψης που είχαμε όταν τα δημιουργήσαμε.

—Albert Einstein (1879-1955)

Δύο από τα σημαντικότερα προβλήματα της Υπολογιστικής Στατιστικής είναι η προσομοίωση από κάποια κατανομή π και ο υπολογισμός ολοκληρωμάτων της μορφής

$$E_{\pi}(h) = \int_{\mathcal{X}} h(x)\pi(dx), \quad (1.1)$$

όπου \mathcal{X} το στήριγμα (support) της π και h μία συνάρτηση για την οποία το ολοκλήρωμα (1.1) υπάρχει και είναι πεπερασμένο. Για προφανείς λόγους, η π αναφέρεται ως *κατανομή-στόχος*.

Καθώς αυξάνεται η πολυπλοκότητα των παραπάνω προβλημάτων ή/και η διάσταση του \mathcal{X} , η αντιμετώπισή τους με «άμεσες» τεχνικές γίνεται όλο και πιο δύσκολη, αν όχι αδύνατη. Γι' αυτόν το λόγο, μία πληθώρα τεχνικών Monte Carlo (MC) και Markov Chain Monte Carlo (MCMC) έχει προταθεί στη βιβλιογραφία. Αυτές οι τεχνικές προσομοιώνουν τιμές τυχαίων μεταβλητών με χρήση ηλεκτρονικού υπολογιστή και εκτιμούν την $E_{\pi}(h)$ μέσω κατάλληλων συναρτήσεων των προσομοιωμένων τιμών. Οι τεχνικές MC παράγουν ανεξάρτητες παρατηρήσεις είτε απ' ευθείας από την κατανομή-στόχο π είτε από κάποια διαφορετική κατανο-

μή « πρότασης ». Οι τεχνικές MCMC προσομοιώνουν αλυσίδες Markov με οριακή κατανομή την π και επομένως οι παρατηρήσεις είναι εξαρτημένες.

Στην περιοχή υπάρχει εκτενής βιβλιογραφία. Για παράδειγμα, στα βιβλία των Gilks et al. (1996), Chen et al. (2000), Liu (2001), Robert and Casella (1999, 2004), Berg (2004), Gamerman and Lopes (2006) και Rubinstein (2007) γίνεται μία εμπειρισταωμένη παρουσίαση των μεθόδων MC και MCMC και εφαρμογών τους.

Στόχος και περίγραμμα της διατριβής

Στόχος της διατριβής είναι η μελέτη των κατάλληλα σταθμισμένων δειγμάτων και εφαρμογών τους σε διάφορα σχήματα MC και MCMC. Για κάθε σταθμισμένο δείγμα ορίζεται μία στοχαστική διαδικασία με άλματα (jump process) η οποία, υπό κατάλληλες συνθήκες, συγκλίνει ασθενώς στην κατανομή-στόχο. Μέσω αυτής της οπτικής διευρύνεται η χρήση ενός από τους σημαντικότερους αλγόριθμους MC, του δειγματολήπτη σπουδαιότητας (importance sampling), ο οποίος μπορεί πλέον να θεωρηθεί ως μία γενική μέθοδος προσομοίωσης από την κατανομή-στόχο και όχι απλώς ως μία τεχνική εκτίμησης ολοκληρωμάτων της μορφής (1.1). Επίσης, υπό τη νέα αυτή οπτική μπορούμε να δούμε και γνωστά σχήματα MCMC.

Τα κεφάλαια της διατριβής έχουν οργανωθεί ως εξής:

Στο Κεφάλαιο 2 γίνεται ανασκόπηση κάποιων γνωστών τεχνικών MC, όπως η μέθοδος Αποδοχής-Απόρριψης, ο δειγματολήπτης σπουδαιότητας και κάποιες παραλλαγές του καθώς και η προσομοίωση μέσω διακριτοποίησης. Στη συνέχεια περιγράφονται οι δύο βασικότεροι αλγόριθμοι MCMC, δηλαδή ο αλγόριθμος Metropolis-Hastings (MH) και ο δειγματολήπτης Gibbs.

Στο Κεφάλαιο 3 παρουσιάζονται τα σημαντικότερα αποτελέσματα της διατριβής. Θεωρώντας τα « κατάλληλα » σταθμισμένα δείγματα ως ημιμαρκοβιανές διαδικασίες, αποδεικνύεται η σύγκλιση τους στην κατανομή-στόχο. Πιο συγκεκριμένα, ορίζεται μία διαδικασία με άλματα η οποία σχετίζεται με τα κατάλληλα σταθμισμένα δείγματα και για αυτήν αποδεικνύεται η σύγκλιση στην π υπό ορισμένες συνθήκες. Έπειτα μελετούνται υπό αυτήν την οπτική γνωστοί αλγόριθμοι MC και MCMC, όπως ο δειγματολήπτης σπουδαιότητας και ο αλγόριθμος MH. Μέσω αυτής της διαδικασίας μάς δίνεται η δυνατότητα να πάρουμε εκτιμητές με μικρότερη διασπορά.

Στο τέταρτο κεφάλαιο παρουσιάζεται μία νέα τεχνική προσομοίωσης μέσω διακριτοποίησης και στάθμισης. Διακριτοποιώντας την κατανομή-στόχο π μέσω της διαμέρισης του στηρίγματός της σε έναν πεπερασμένο αριθμό υποσυνόλων και αντιμετωπίζοντάς την ως διακριτή, απλοποιείται σημαντικά το πρόβλημα της προ-

σομοίωσης, καθώς η προσομοίωση από διακριτές κατανομές είναι γενικά μία τυπική διαδικασία. Επί πλέον η προκύπτουσα ακολουθία σταθμίζεται κατάλληλα όπως στο δειγματολήπτη σπουδαιότητας. Τότε η διαδικασία με άλματα που σχετίζεται με την κατάλληλα σταθμισμένη ακολουθία αποδεικνύεται ότι συγκλίνει στην κατανομή-στόχο π . Η προτεινόμενη τεχνική μπορεί να χρησιμοποιηθεί για την απλοποίηση γνωστών αλγόριθμων MCMC. Εφαρμόζοντας αυτήν την τεχνική σε γνωστά σύνολα δεδομένων διαπιστώσαμε ότι οι αυτοσυσχετίσεις σχεδόν μηδενίζονται επιτρέποντας την εκτίμηση των τυπικών σφαλμάτων των εκτιμητών με απλές τεχνικές για ανεξάρτητα δείγματα.

Μελετώντας τα κατάλληλα σταθμισμένα δείγματα και τις εφαρμογές τους προέκυψαν διάφορα ενδιαφέροντα θέματα, κάποια από τα οποία παρουσιάζονται στο Κεφάλαιο 5. Ένα από αυτά είναι η εκτίμηση των βαρών στον αλγόριθμο MH. Στο τρίτο κεφάλαιο βλέπουμε ότι αντικαθιστώντας τα τυχαία βάρη του αλγόριθμου MH με τις μέσες τιμές τους προκύπτουν εκτιμητές με μικρότερη διασπορά. Όμως στην πράξη ο υπολογισμός αυτών των μέσων τιμών γίνεται μόνο σε πολύ απλές εφαρμογές. Μπορούμε όμως να τις εκτιμήσουμε χρησιμοποιώντας ολόκληρη την αρχική ακολουθία MH. Προσομοιώσεις μάς έδειξαν ότι όχι μόνο έχουμε μικρότερη διασπορά αντικαθιστώντας τα τυχαία βάρη του αλγορίθμου MH με τις εκτιμώμενες μέσες τιμές τους, αλλά και ότι ο νέος εκτιμητής έχει μικρότερη διασπορά και από αυτόν με τα « ακριβή » βάρη.

Επί πλέον η ανάγκη για επαναδειγματοληψία (resampling) σε μεγάλα σύνολα δεδομένων μάς οδήγησε στην ανάπτυξη μίας τεχνικής δύο βημάτων για την προσομοίωση από την πολυωνυμική κατανομή. Η νέα αυτή μέθοδος μπορεί να ενσωματωθεί σε όλες τις ήδη γνωστές μεθόδους προσομοίωσης από την πολυωνυμική κατανομή βελτιώνοντας σημαντικά το χρόνο υλοποίησης τους, ειδικά σε κάποιες γλώσσες προγραμματισμού, όπως το Matlab και το Mathematica.

Η διατριβή ολοκληρώνεται με μία σύνοψη των σημαντικότερων αποτελεσμάτων και την παράθεση κάποιων ανοικτών θεμάτων.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΠΕΡΡΑΙΑ

Αλγόριθμοι Monte Carlo και Markov Chain Monte Carlo

Η γνώση προσφέρει πολλά προβλήματα, η άγνοια όμως σίγουρα δεν τα επιλύει.

—Ανώνυμος

Σοφός είναι ο άνθρωπος που ξέρει χρήσιμα πράγματα όχι εκείνος που ξέρει πολλά.

—Αισχύλος (525-456 π.Χ.)

2.1 Μέθοδοι Monte Carlo

Οι μέθοδοι Monte Carlo (MC) αρχικά εμφανίστηκαν στη βιβλιογραφία με το πιο γενικό όνομα « Στατιστική Δειγματοληψία » (Statistical Sampling). Η συστηματική μελέτη τους ξεκινάει από τους ερευνητές Stanislaw Ulam, Enrico Fermi, John von Neumann και Nicholas Metropolis, οι οποίοι εργάζονταν κατά τη δεκαετία του '40 σε ένα πρόγραμμα για το σχεδιασμό και την ανάπτυξη πυρηνικών όπλων στο εθνικό εργαστήριο του Los Alamos. Το όνομά τους οφείλεται στο διάσημο καζίνο του Monte Carlo στην πρωτεύουσα του Μονακό.

Παρ' όλο που αυτές οι μέθοδοι είναι ευρέως διαδεδομένες, δεν υπάρχει στη βιβλιογραφία κάποιος επίσημος ορισμός για τον όρο « Μέθοδος Monte Carlo ». Αυτό οφείλεται ίσως στη φύση και την ποικιλομορφία των μεθόδων αυτών, που παράγουν ορισμούς μέσω συγκεκριμένων παραδειγμάτων. Αν θα θέλαμε να δώσουμε έναν ανεπίσημο ορισμό, θα λέγαμε ότι με τον όρο « Μέθοδος Monte Carlo » μπορούμε να αναφερόμαστε σε κάθε τεχνική η οποία προσομοιώνει παρατηρήσεις x_1, x_2, \dots, x_n από κάποια κατανομή και χρησιμοποιώντας κατάλληλους δειγματικούς μέσους ή σταθμισμένους δειγματικούς μέσους προσεγγίζει τις μαθηματικές ελπίδες που μας ενδιαφέρουν.

Σε ό,τι ακολουθεί, θα συμβολίζουμε με κεφαλαία γράμματα (X, Y, \dots) τις τυχαίες μεταβλητές και με πεζά (x, y, \dots) τις τιμές τους. Όταν όμως δε συντρέχει κάποιος λόγος να αναφερθούμε στις ίδιες τις τυχαίες μεταβλητές, θα συμβολίζουμε με κεφαλαία γράμματα και αυτές και τις προσομοιωμένες τιμές τους.

2.1.1 Ολοκλήρωση Monte Carlo

Έστω ότι θέλουμε να υπολογίσουμε το ολοκλήρωμα¹

$$I = \int_{\mathcal{X}} f(x) dx,$$

όπου $\mathcal{X} \subseteq \mathbb{R}^d$, $d \geq 1$. Γράφοντας την $f(x)$ ως γινόμενο μίας πυκνότητας πιθανότητας $\pi(\cdot)$ και μίας συνάρτησης $h(\cdot)$, δηλαδή $f(x) = h(x)\pi(x)$, έχουμε

$$I = \int_{\mathcal{X}} f(x) dx = \int_{\mathcal{X}} h(x)\pi(x) dx = E_{\pi}(h).$$

Όταν η $E_{\pi}(h)$ υπάρχει και είναι πεπερασμένη θα γράφουμε $h \in \mathcal{L}(\pi)$. Παίρνοντας ένα τυχαίο δείγμα (X_1, \dots, X_n) από την π , μπορούμε να προσεγγίσουμε την $E_{\pi}(h)$ με το δειγματικό μέσο

$$\bar{h}_n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n h(X_i). \quad (2.1)$$

Από τον Ισχυρό Νόμο των Μεγάλων Αριθμών (INMA), ο δειγματικός μέσος \bar{h}_n συγκλίνει σχεδόν βεβαίως στην $E_{\pi}(h)$ καθώς $n \uparrow \infty$. Επίσης, όταν $\sigma^2 = \text{Var}_{\pi}(h) < \infty$, ισχύει το Κεντρικό Οριακό Θεώρημα (ΚΟΘ), δηλαδή έχουμε

$$\frac{\sqrt{n} \{\bar{h}_n - E_{\pi}(h)\}}{\sigma} \xrightarrow{d} \mathcal{N}(0, 1) \quad \text{καθώς } n \uparrow \infty,$$

όπου $\mathcal{N}(\mu, \tau^2)$ συμβολίζει την κανονική κατανομή με μέση τιμή μ και διασπορά τ^2 . Στις περιπτώσεις που το σ δεν είναι γνωστό, μπορούμε να το αντικαταστήσουμε με ένα συνεπή εκτιμητή του, όπως για παράδειγμα τον

$$\hat{\sigma}_n = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \{h(X_i) - \bar{h}_n\}^2}. \quad (2.2)$$

¹Το ολοκλήρωμα I , όπως και όλα τα ολοκληρώματα που εμφανίζονται στη συνέχεια, υποτίθεται καλά ορισμένο και πεπερασμένο.

Λόγω του Θεώρηματος Slutsky, το ΚΟΘ εξακολουθεί να ισχύει, ώστε

$$\frac{\sqrt{n} \{\bar{h}_n - E_\pi(h)\}}{\hat{\sigma}_n} \xrightarrow{d} \mathcal{N}(0, 1) \quad \text{καθώς } n \uparrow \infty.$$

Επομένως, η $E_\pi(h)$ μπορεί να εκτιμηθεί με το $100(1-\alpha)\%$ διάστημα εμπιστοσύνης

$$\left[\bar{h}_n - z_{\alpha/2} \frac{\hat{\sigma}_n}{\sqrt{n}}, \bar{h}_n + z_{\alpha/2} \frac{\hat{\sigma}_n}{\sqrt{n}} \right].$$

Είναι σαφές ότι η ακρίβεια της εκτίμησης της $E_\pi(h)$ εξαρτάται από την ασυμπτωτική διασπορά σ^2 . Ως εκ τούτου, όσο μικρότερη ασυμπτωτική διασπορά έχει ένας εκτιμητής της $E_\pi(h)$ τόσο αποδοτικότερος είναι. Μερικές φορές, η εύρεση αποδοτικότερων εκτιμητών από τον απλό δειγματικό μέσο στην (2.1) μπορεί να είναι απλή διαδικασία.

Παράδειγμα 2.1. Έστω $d > 1$ και $x_i = (x_i^{(1)}, x_i^{(2)})$, με την $x_i^{(2)}$ να αποτελείται από $k < d$ συνιστώσες της x_i . Σε περίπτωση που είναι δυνατό να υπολογιστεί η δεσμευμένη μέση τιμή $E_\pi \{h(X) | X^{(2)} = x^{(2)}\}$, μία εναλλακτική προσέγγιση της $E_\pi(h)$ είναι η

$$\bar{h}_n^{RB} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n E_\pi \{h(X) | X^{(2)} = x_i^{(2)}\}.$$

Ο εκτιμητής \bar{h}_n^{RB} έχει επίσης μέση τιμή $E_\pi(h)$, αφού

$$E_\pi [E_\pi \{h(X) | X^{(2)}\}] = E_\pi [h(X)].$$

Προφανώς, ο \bar{h}_n^{RB} συγκλίνει σχεδόν βεβαίως στην $E_\pi(h)$ λόγω του ΙΝΜΑ. Επίσης, ισχύει το ΚΟΘ και για αυτόν. Η ακρίβειά του είναι μάλιστα μεγαλύτερη ή ίση της ακρίβειας του \bar{h}_n , αφού

$$\begin{aligned} \sigma^2 &= \text{Var}_\pi \{h(X)\} \\ &= \text{Var}_\pi \{E_\pi [h(X) | X^{(2)}]\} + E_\pi \{\text{Var}_\pi [h(X) | X^{(2)}]\} \\ &\geq \text{Var}_\pi \{E_\pi [h(X) | X^{(2)}]\}. \end{aligned}$$

Λόγω της ομοιότητας του εκτιμητή \bar{h}_n^{RB} με αυτόν που προκύπτει από το Θεώρημα Rao-Blackwell, στη βιβλιογραφία αναφέρεται ως Rao-Blackwellized εκτιμητής (εξ' ου και το «RB» στο συμβολισμό του). Συνεπώς σε περιπτώσεις που το υπολογιστικό κόστος δεν είναι μεγάλο, είναι προτιμότερο να χρησιμοποιείται ο \bar{h}_n^{RB} αντί του \bar{h}_n . \square

Τα τυχαία δείγματα που χρησιμοποιούνται για την προσέγγιση ποσοτήτων της μορφής $E_\pi(h)$ λαμβάνονται μέσω προσομοίωσης. Στη συνέχεια θα περιγραφούν

κάποιες βασικές μέθοδοι προσομοίωσης οι οποίες σχετίζονται άμεσα με το περιεχόμενο της διατριβής.

2.1.2 Μέθοδος Αντιστροφής

Η μέθοδος της Αντιστροφής είναι η απλούστερη μέθοδος προσομοίωσης τυχαιών μεταβλητών. Βασίζεται στην αντιστροφή της συνάρτησης κατανομής. Παρ' όλο που ως έννοια η αντιστροφή έχει νόημα μόνο στην περίπτωση όπου η συνάρτηση κατανομής είναι γνησίως αύξουσα και επομένως ένα προς ένα, στην πραγματικότητα αυτό δεν είναι απαραίτητο· αρκεί η έννοια της γενικευμένης αντίστροφης συνάρτησης.

Ορισμός 2.1. ΓΕΝΙΚΕΥΜΕΝΗ ΑΝΤΙΣΤΡΟΦΗ ΣΥΝΑΡΤΗΣΗ. Έστω $F : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ μία αύξουσα συνάρτηση. Ως γενικευμένη αντίστροφή της ορίζεται η συνάρτηση

$$F^{-}(u) = \inf \{x : F(x) \geq u\}.$$

Στην περίπτωση που η F είναι γνησίως αύξουσα, τότε μπορεί να δει κανείς εύκολα ότι η γενικευμένη αντίστροφή της συμπίπτει με την αντίστροφη συνάρτηση F^{-1} .

Λήμμα 2.1. ΛΗΜΜΑ ΑΝΤΙΣΤΡΟΦΗΣ. Έστω F μία συνάρτηση κατανομής. Αν $U \sim \mathcal{U}(0, 1)$ τότε η $X = F^{-}(U)$ έχει συνάρτηση κατανομής F .

Απόδειξη. Έστω $u \in (0, 1)$. Επειδή η $F(\cdot)$ είναι δεξιά συνεχής, ισχύει $F(F^{-}(u)) \geq u$. Επίσης, από τον ορισμό της γενικευμένης αντίστροφης συνάρτησης, για κάθε $x \in \mathbb{R}$ ισχύει $F^{-}(F(x)) \leq x$. Επομένως,

$$\{(u, x) : F^{-}(u) \leq x\} = \{(u, x) : F(x) \geq u\},$$

άρα

$$\mathbb{P}(X \leq x) = \mathbb{P}\{F^{-}(U) \leq x\} = \mathbb{P}\{U \leq F(x)\} = F(x).$$

□

Στην πράξη, προκειμένου να προσομοιώσουμε ένα τυχαίο δείγμα από κάποια κατανομή-στόχο π με συνάρτηση κατανομής F , παράγουμε ένα τυχαίο δείγμα (u_1, \dots, u_n) από την ομοιόμορφη κατανομή $\mathcal{U}(0, 1)$ και θέτουμε

$$x_i = F^{-}(u_i) \quad \text{για } i = 1, \dots, n.$$

Τότε το (x_1, \dots, x_n) είναι ένα τυχαίο δείγμα από την π .

Δυστυχώς, η αντιστροφή της συνάρτησης κατανομής είναι συχνά πολύ δύσκολη, αν όχι αδύνατη διαδικασία. Έτσι η μέθοδος της Αντιστροφής μπορεί να

εφαρμοστεί σε πολύ λίγες περιπτώσεις. Γι' αυτό καταφεύγουμε σε άλλες τεχνικές όπως αυτές που θα περιγράψουμε στις επόμενες ενότητες.

2.1.3 Μέθοδος Αποδοχής–Απόρριψης

Η μέθοδος Αποδοχής–Απόρριψης (Accept–Reject method) ή, πιο απλά, μέθοδος Απόρριψης (Rejection method), εισήχθη από τον von Neumann (1951). Είναι μία μέθοδος για την υλοποίηση της οποίας απαιτείται η γνώση μόνο της συναρτησιακής μορφής της κατανομής–στόχου π , δηλαδή χρειάζεται να γνωρίζουμε τη μορφή της εκτός ίσως από κάποια πολλαπλασιαστική σταθερά. Όπως θα δούμε και στις επόμενες ενότητες, η γνώση της κατανομής–στόχου εκτός από μία πολλαπλασιαστική σταθερά είναι ακριβώς ό,τι χρειάζονται οι περισσότερες μέθοδοι προσομοίωσης.

Η μέθοδος Αποδοχής–Απόρριψης βασίζεται στην προσομοίωση από κάποια άλλη κατανομή g , η προσομοίωση από την οποία είναι μάλλον απλούστερη διαδικασία. Οι τιμές που προσομοιώνονται από την g προτείνονται ως παρατηρήσεις από την π και γίνονται αποδεκτές με κάποια πιθανότητα διαφορετικά απορρίπτονται. (Εξ ου και «μέθοδος Αποδοχής–Απόρριψης»). Για αυτόν το λόγο, η κατανομή g αναφέρεται και ως *κατανομή πρότασης*.

Έστω ότι η κατανομή–στόχος είναι απόλυτα συνεχής ως προς το μέτρο μ με αντίστοιχη πυκνότητα πιθανότητας $\pi(x)$, $x \in \mathcal{X}$. Θεωρούμε μία άλλη κατανομή, επίσης απόλυτα συνεχή ως προς το μ , με πυκνότητα πιθανότητας $g(x)$, τέτοια ώστε

$$\pi(x) \leq Mg(x) \quad \text{για κάθε } x \in \mathcal{X}$$

για κάποιο θετικό αριθμό M . Τότε ισχύει το εξής:

Πρόταση 2.1. Έστω $Y \sim g$ και $U \sim \mathcal{U}(0, 1)$ ανεξάρτητες τυχαίες μεταβλητές. Η δεσμευμένη κατανομή της Y δοθέντος $U \leq \pi(Y)/Mg(Y)$ είναι η π .

Απόδειξη. Για κάθε μετρήσιμο σύνολο A ισχύει

$$\begin{aligned} \mathbb{P}\left(Y \in A \mid U \leq \frac{\pi(Y)}{Mg(Y)}\right) &= \frac{\mathbb{P}\left(Y \in A, U \leq \frac{\pi(Y)}{Mg(Y)}\right)}{\mathbb{P}\left(U \leq \frac{\pi(Y)}{Mg(Y)}\right)} \\ &= \frac{\int_A \int_0^{\pi(y)/Mg(y)} g(y) du \mu(dy)}{\int_{\mathcal{X}} \int_0^{\pi(y)/Mg(y)} g(y) du \mu(dy)} \\ &= \frac{\int_A \frac{\pi(y)}{Mg(y)} g(y) \mu(dy)}{\int_{\mathcal{X}} \frac{\pi(y)}{Mg(y)} g(y) \mu(dy)} \\ &= \int_A \pi(y) \mu(dy). \end{aligned}$$

□

Στην πράξη, η Πρόταση 2.1 εφαρμόζεται ως εξής. Παράγουμε ανεξάρτητες παρατηρήσεις Y_1, Y_2, \dots από την g μαζί με αντίστοιχες ανεξάρτητες παρατηρήσεις U_1, U_2, \dots από την ομοιόμορφη κατανομή $\mathcal{U}(0, 1)$. Οι Y_i για τις οποίες ισχύει $U_i \leq \pi(Y_i)/Mg(Y_i)$ γίνονται αποδεκτές ως παρατηρήσεις από την π ενώ οι υπόλοιπες απορρίπτονται.

Η διαδικασία προσομοίωσης μίας παρατήρησης από την π μέσω της μεθόδου Αποδοχής-Απόρριψης περιγράφεται στον ακόλουθο αλγόριθμο.

Αλγόριθμος 2.1. *Αλγόριθμος Αποδοχής-Απόρριψης*

1. Προσομοίωσε $Y \sim g$ και $U \sim \mathcal{U}(0, 1)$
 2. Αν $U \leq \frac{\pi(Y)}{Mg(Y)}$ επίστρεψε $Y \sim \pi$, διαφορετικά πήγαινε στο Βήμα 1.
-

Παρατηρούμε ότι αν η ανισότητα $\pi(x) \leq Mg(x)$ ισχύει για κάθε $x \in \mathcal{X}$, θα ισχύει και για οποιοδήποτε $M' > M$. Άρα η μέθοδος Αποδοχής-Απόρριψης μπορεί να εφαρμοστεί με οποιοδήποτε M' στη θέση του M , οπότε δε χρειάζεται να υπολογίσουμε το $\sup_x \pi(x)/g(x)$ αλλά αρκεί να βρούμε απλώς ένα άνω φράγμα του. Προφανώς, όσο μεγαλύτερο είναι το M τόσο περισσότερες τιμές απορρίπτονται.

Η παραπάνω διαδικασία μπορεί να εφαρμοστεί και σε περιπτώσεις που η π ή/και η g είναι γνωστές εκτός από κάποιες πολλαπλασιαστικές σταθερές. Πράγματι, έστω $\pi(x) = c_\pi \tilde{\pi}(x)$, $g(x) = c_g \tilde{g}(x)$ με τις συναρτήσεις $\tilde{\pi}$, \tilde{g} να είναι γνωστές και τις σταθερές κανονικοποίησης c_π , c_g ενδεχομένως άγνωστες. Έστω επίσης ότι ισχύει $\tilde{\pi}(x) \leq \tilde{M} \tilde{g}(x)$, $\forall x \in \mathcal{X}$, όπου \tilde{M} είναι κάποια θετική σταθερά. Εύκολα φαίνεται ότι υπάρχει θετική σταθερά $M \leq c_\pi \tilde{M}/c_g$ τέτοια ώστε $\pi(x) \leq Mg(x)$, $\forall x \in \mathcal{X}$. Επί πλέον, ισχύει $\tilde{\pi}(x)/\tilde{M} \tilde{g}(x) \leq \pi(x)/Mg(x)$, $\forall x \in \mathcal{X}$. Επομένως, ο αλγόριθμος που αποδέχεται μία $Y \sim g$ αν $U \leq \tilde{\pi}(Y)/\tilde{M} \tilde{g}(Y)$, είναι ένας αλγόριθμος Αποδοχής-Απόρριψης που προσομοιώνει παρατηρήσεις από την π . Η διαφορά του από τον Αλγόριθμο 2.1 είναι ότι αποδέχεται δυσκολότερα τις Y .

Η συνθήκη $\pi(x) \leq Mg(x)$, $\forall x \in \mathcal{X}$, ισοδυναμεί με το να είναι ο λόγος $\pi(x)/g(x)$ άνω φραγμένος στο \mathcal{X} . Στις περιπτώσεις που το \mathcal{X} είναι άπειρο σύνολο, προκειμένου να συμβαίνει αυτό θα πρέπει η g να έχει πιο βαριές ουρές από την π . Για παράδειγμα, είναι αδύνατο να χρησιμοποιήσουμε τον παραπάνω αλγόριθμο για να προσομοιώσουμε παρατηρήσεις από μία κατανομή Cauchy χρησιμοποιώντας ως κατανομή πρότασης μία κανονική κατανομή. Παρεμπιπτόντως, το αντίστροφο δουλεύει αρκετά ικανοποιητικά.

Κάποια επί πλέον χρήσιμα χαρακτηριστικά της μεθόδου είναι τα ακόλουθα.

Πρόταση 2.2. Η πιθανότητα αποδοχής της Y στον Αλγόριθμο 2.1 ισούται με $1/M$.

Απόδειξη.

$$\begin{aligned}
 P(Y \text{ γίνεται δεκτή}) &= P\left(U \leq \frac{\pi(Y)}{Mg(Y)}\right) \\
 &= \int_{\mathcal{X}} \int_0^{\pi(y)/Mg(y)} g(y) du \mu(dy) \\
 &= \int_{\mathcal{X}} \frac{\pi(y)}{Mg(y)} g(y) \mu(dy) \\
 &= \frac{1}{M} \int_{\mathcal{X}} \pi(y) \mu(dy) \\
 &= \frac{1}{M}.
 \end{aligned}$$

□

Επειδή οι Y που προτείνονται παράγονται ανεξάρτητα, για την παραγωγή μίας παρατήρησης από την π μέσω της μεθόδου Αποδοχής-Απόρριψης πραγματοποιούνται ανεξάρτητα πειράματα Bernoulli με πιθανότητα επιτυχίας $1/M$ μέχρι να εμφανιστεί η πρώτη επιτυχία. Επομένως ο αριθμός των προτεινόμενων τιμών μέχρι την πρώτη αποδοχή ακολουθεί γεωμετρική κατανομή με πιθανότητα επιτυχίας $1/M$, οπότε ο αναμενόμενος αριθμός προτάσεων μέχρι την πρώτη αποδοχή ισούται με M . Μπορούμε λοιπόν να συγκρίνουμε διάφορες κατανομές πρότασης g_1, g_2, \dots με βάση τα αντίστοιχα φράγματα M_1, M_2, \dots των λόγων $\pi(x)/g_1(x), \pi(x)/g_2(x), \dots$. Σύμφωνα λοιπόν με τα παραπάνω, καλύτερη επιλογή κατανομής πρότασης είναι εκείνη με το μικρότερο M , αφού απαιτείται μικρότερος μέσος αριθμός προτάσεων μέχρι να γίνει δεκτή μία τιμή.

Πρόταση 2.3. Η δεσμευμένη κατανομή της Y δοθέντος ότι απορρίπτεται έχει πυκνότητα

$$\frac{Mg(y) - \pi(y)}{M - 1}.$$

Απόδειξη. Κατ' αρχάς, από το Θεώρημα Ολικής Πιθανότητας παίρνουμε

$$\begin{aligned}
 P(Y \in A) &= P(Y \in A | Y \text{ γίνεται δεκτή}) P(Y \text{ γίνεται δεκτή}) + \\
 &\quad P(Y \in A | Y \text{ απορρίπτεται}) P(Y \text{ απορρίπτεται}).
 \end{aligned}$$

Επομένως,

$$\begin{aligned}
 P(Y \in A | Y \text{ απορρίπτεται}) \\
 &= \frac{P(Y \in A) - P(Y \in A | Y \text{ γίνεται δεκτή}) P(Y \text{ γίνεται δεκτή})}{P(Y \text{ απορρίπτεται})}
 \end{aligned}$$

και επειδή $Y \sim g$,

$$\begin{aligned} P(Y \in A | Y \text{ απορρίπτεται}) &= \frac{\int_A g(y)\mu(dy) - (1/M) \int_A \pi(y)\mu(dy)}{1 - 1/M} \\ &= \int_A \frac{Mg(y) - \pi(y)}{M - 1} \mu(dy). \end{aligned}$$

□

Στη βιβλιογραφία υπάρχουν αρκετές παραλλαγές της μεθόδου Αποδοχής-Απόρριψης, όπως η μέθοδος Envelop Accept-Reject, ο Adaptive Rejection Sampler και πολλές άλλες. Μια εμπειριστικώς παρουσιασμένη παρουσίαση τέτοιων μεθόδων δίνεται από τους Robert and Casella (2004).

2.1.4 Δειγματοληψία σπουδαιότητας

Η δειγματοληψία σπουδαιότητας (Importance Sampling-IS) [Marshall, (1956)] είναι μία άλλη γνωστή μέθοδος MC η οποία χρησιμοποιείται για την προσέγγιση ολοκληρωμάτων της μορφής (1.1) μέσω προσομοίωσης από κάποια διαφορετική κατανομή πρότασης g .

Έστω ότι οι π και g είναι απολύτως συνεχείς ως προς κάποιο μέτρο μ με το στήριγμα της g να περιέχει το στήριγμα της π , δηλαδή

$$\mathcal{X} = \{x : \pi(x) > 0\} \subseteq \{x : g(x) > 0\}. \quad (2.3)$$

Επειδή ενδιαφερόμαστε για την προσέγγιση της $E_\pi(h) = \int_{\mathcal{X}} h(x)\pi(x)\mu(dx)$, αυτό που στην πραγματικότητα χρειαζόμαστε είναι το στήριγμα της g να περιέχει το σύνολο στο οποίο το γινόμενο $h(x)\pi(x)$ είναι διάφορο του μηδενός. Αυτό προφανώς εξασφαλίζεται από την (2.3).

Παρατηρούμε ότι

$$\begin{aligned} E_\pi[h(X)] &= \int_{\mathcal{X}} h(x)\pi(x)\mu(dx) \\ &= \int_{\mathcal{X}} \frac{h(x)\pi(x)}{g(x)} g(x)\mu(dx) \\ &= E_g \left[\frac{h(X)\pi(X)}{g(X)} \right] \\ &= E_g[w(X)h(X)], \end{aligned}$$

όπου $w(X) = \pi(X)/g(X)$. Επομένως, αν προσομοιώσουμε ένα τυχαίο δείγμα

X_1, \dots, X_n από την g , μπορούμε να εκτιμήσουμε την $E_\pi(h)$ με την ποσότητα

$$\bar{h}_n^{IS} = \frac{\sum_{i=1}^n w(X_i)h(X_i)}{n} \quad (2.4)$$

όπου

$$w(X_i) = \pi(X_i)/g(X_i), \quad i = 1, \dots, n.$$

Τα $w(X_i)$ λέγονται *βάρη σπουδαιότητας (importance weights)* ενώ η g λέγεται είτε *κατανομή σπουδαιότητας (importance distribution)* είτε *κατανομή πρότασης (proposal distribution)* όπως και στη μέθοδο Αποδοχής-Απόρριψης.

Από τον ΙΝΜΑ έχουμε ότι

$$\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n w(X_i)h(X_i) \xrightarrow{\sigma.β.} E_g\{w(X)h(X)\} = E_\pi(h) \quad (2.5)$$

για κάθε $h \in \mathcal{L}(\pi)$. Επομένως, ο εκτιμητής \bar{h}_n^{IS} συγκλίνει ισχυρά στην $E_\pi(h)$.

Εναλλακτικά, θα μπορούσαμε να εκτιμήσουμε την $E_\pi(h)$ με τον

$$\hat{h}_n^{IS} = \frac{\sum_{i=1}^n w(X_i)h(X_i)}{\sum_{i=1}^n w(X_i)}. \quad (2.6)$$

Για να το δούμε αυτό, ας διαιρέσουμε τον αριθμητή και τον παρονομαστή του \hat{h}_n^{IS} με n :

$$\hat{h}_n^{IS} = \frac{\sum_{i=1}^n w(X_i)h(X_i)/n}{\sum_{i=1}^n w(X_i)/n}.$$

Από την (2.5) έχουμε ότι ο αριθμητής του \hat{h}_n^{IS} συγκλίνει ισχυρά στην $E_\pi(h)$, ενώ ο παρονομαστής του στη μονάδα. Επομένως, ο \hat{h}_n^{IS} συγκλίνει ισχυρά στην $E_\pi(h)$.

Ο εκτιμητής \hat{h}_n^{IS} είναι πιο γενικός από τον \bar{h}_n^{IS} γιατί μπορεί να χρησιμοποιηθεί ακόμα και στην περίπτωση που τα βάρη σπουδαιότητας είναι γνωστά εκτός από κάποια πολλαπλασιαστική σταθερά, δηλαδή $w(X_i) = c\tilde{w}(X_i)$ για κάθε i , όπου $c > 0$. Τότε ο εκτιμητής \hat{h}_n^{IS} παίρνει τη μορφή

$$\hat{h}_n^{IS} = \frac{\sum_{i=1}^n \tilde{w}(X_i)h(X_i)}{\sum_{i=1}^n \tilde{w}(X_i)} = \frac{c^{-1} \sum_{i=1}^n w(X_i)h(X_i)/n}{c^{-1} \sum_{i=1}^n w(X_i)/n}.$$

Σε αυτήν την περίπτωση το όριο του παρονομαστή του \hat{h}_n^{IS} διαφέρει από τη μονάδα αφού

$$\frac{1}{n} \sum \tilde{w}(X_i) = \frac{c^{-1}}{n} \sum w(X_i) \xrightarrow{\sigma.β.} c^{-1} E_g\{w(X)\} = c^{-1}, \quad (2.7)$$

ενώ για τον αριθμητή ισχύει

$$\frac{1}{n} \sum \tilde{w}(X_i)h(X_i) = \frac{c^{-1}}{n} \sum w(X_i)h(X_i) \xrightarrow{\text{σ.θ.}} c^{-1} \mathbb{E}_g\{w(X)h(X)\} = c^{-1} \mathbb{E}_\pi(h). \quad (2.8)$$

Επομένως, ο λόγος τους συγκλίνει και πάλι στην επιθυμητή ποσότητα $\mathbb{E}_\pi(h)$.

Στο σημείο αυτό θα πρέπει να αναφέρουμε ότι η υπόθεση της ανεξαρτησίας των X_i δεν είναι απαραίτητη, καθώς οι εκτιμητές \hat{h}_n^{IS} και \bar{h}_n^{IS} συγκλίνουν στη $\mathbb{E}_\pi(h)$ κάτω από πιο γενικές συνθήκες. Για παράδειγμα, αν τα X_i σχηματίζουν μια εργοδική αλυσίδα Markov με στάσιμη κατανομή την g , τότε από το Εργοδικό Θεώρημα τα παραπάνω όρια εξακολουθούν να ισχύουν.

Η δειγματοληψία σπουδαιότητας μπορεί να χρησιμοποιηθεί αντί της μεθόδου Αποδοχής-Απόρριψης σε περιπτώσεις που δεν είναι δυνατό να βρεθεί μία κατανομή πρότασης g και μία σταθερά M τέτοια ώστε να ισχύει $\pi(x) \leq Mg(x)$ για κάθε $x \in \mathcal{X}$ ή το M είναι πολύ μεγάλο οπότε ο μέσος αριθμός απορρίψεων μέχρι την πρώτη αποδοχή είναι πολύ μεγάλος. Επίσης, έχει αποδειχθεί (δες Liu, 1996, Robert and Casella, 2004, Tan, 2006) ότι η δειγματοληψία σπουδαιότητας είναι αποδοτικότερη από τη μέθοδο Αποδοχής-Απόρριψης. Γι' αυτό, η δειγματοληψία σπουδαιότητας έχει μεγάλο εύρος εφαρμογών και επί πλέον έχει αποδειχθεί ιδανική τεχνική για την εκτίμηση πιθανοτήτων σπάνιων ενδεχομένων.

Ιδιότητες των εκτιμητών IS

Ο \bar{h}_n^{IS} είναι αμερόληπτος εκτιμητής της $\mathbb{E}_\pi(h)$, αφού

$$\begin{aligned} \mathbb{E}_g(\bar{h}_n^{IS}) &= \mathbb{E}_g\left(\frac{\sum_{i=1}^n w(X_i)h(X_i)}{n}\right) \\ &= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \mathbb{E}_g\{w(X_i)h(X_i)\} \\ &= \mathbb{E}_g\{w(X)h(X)\} \\ &= \mathbb{E}_\pi\{h(X)\}. \end{aligned}$$

Επίσης, αφού τα (X_1, \dots, X_n) αποτελούν τυχαίο δείγμα από την g , η διασπορά του \bar{h}_n^{IS} θα ισούται με

$$\begin{aligned} \text{Var}_g(\bar{h}_n^{IS}) &= \text{Var}_g\left(\frac{\sum_{i=1}^n w(X_i)h(X_i)}{n}\right) \\ &= \frac{1}{n^2} \sum_{i=1}^n \text{Var}_g\{w(X_i)h(X_i)\} \\ &= \frac{1}{n} \text{Var}_g\{w(X)h(X)\}. \end{aligned}$$

Υπό την προϋπόθεση ότι η $\text{Var}_g \{w(X)h(X)\} = \sigma_h^2$ είναι πεπερασμένη, ισχύει το ΚΟΘ

$$\sqrt{n} \{\bar{h}_n^{IS} - E_\pi(h)\} \xrightarrow{d} \mathcal{N}(0, \sigma_h^2) \quad \text{καθώς } n \uparrow \infty.$$

Η διασπορά σ_h^2 μπορεί να εκτιμηθεί από τη δειγματική διασπορά των $w(X_i)h(X_i)$

$$\hat{\sigma}_h^2 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \{w(X_i)h(X_i) - \bar{h}_n^{IS}\}^2.$$

Παρατήρηση 2.1. Αποδεικνύεται (δες Robert and Casella, 2004) ότι αν επιλέξουμε ως κατανομή πρότασης την

$$g^*(x) = \frac{|h(x)|\pi(x)}{\int_{\mathcal{X}} |h(z)|\pi(z)\mu(dz)},$$

τότε η διασπορά του εκτιμητή (2.4) ελαχιστοποιείται. Η προσομοίωση όμως από την g^* δεν είναι εύκολη διαδικασία αφού ο παρονομαστής της ισούται με $E_\pi(|h|)$, που είναι άγνωστη ποσότητα. Για παράδειγμα, αν ισχύει $h > 0$ τότε ο παρονομαστής της ισούται με $E_\pi(h)$, δηλαδή ακριβώς την ποσότητα που θέλουμε να εκτιμήσουμε! Ως εκ τούτου, στην πράξη χρησιμοποιείται ως κατανομή πρότασης κάποια διαφορετική κατανομή. \square

Ο εκτιμητής \hat{h}_n^{IS} δεν είναι αμερόληπτος εκτιμητής της $E_\pi(h)$, συγκλίνει όμως, όπως είδαμε, ισχυρά σε αυτήν την ποσότητα. Με εφαρμογή της μεθόδου δέλτα βλέπουμε ότι για τον \hat{h}_n^{IS} ισχύει το ΚΟΘ

$$\sqrt{n}\{\hat{h}_n^{IS} - E_\pi(h)\} \xrightarrow{d} \mathcal{N}(0, \tau_h^2) \quad \text{καθώς } n \uparrow \infty,$$

όπου

$$\begin{aligned} \tau_h^2 &= E_g \{w(X)^2 h(X)^2\} - 2 E_\pi(h) E_g \{w(X)^2 h(X)\} + [E_\pi(h)]^2 E_g \{w(X)^2\} \\ &= E_\pi \{w(X)h(X)^2\} - 2 E_\pi(h) E_\pi \{w(X)h(X)\} + [E_\pi(h)]^2 E_\pi \{w(X)\}. \end{aligned}$$

Είναι εύκολο να δούμε ότι ένας συνεπής εκτιμητής της τ_h^2 είναι ο

$$\hat{\tau}_h^2 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n w(X_i)^2 h(X_i)^2 - 2 \hat{h}_n^{IS} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n w(X_i)^2 h(X_i) + (\hat{h}_n^{IS})^2 \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n w(X_i)^2,$$

ο οποίος μετά από πράξεις παίρνει τη μορφή

$$\hat{\tau}_h^2 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n w(X_i)^2 \{h(X_i) - \hat{h}_n^{IS}\}^2.$$

Στις περιπτώσεις που δε γνωρίζουμε ακριβώς τα βάρη σπουδαιότητας $w(x_i)$, δηλα-

δή γνωρίζουμε τα $\tilde{w}(X_i)$, όπου $w(X_i) = c\tilde{w}(X_i)$, $i = 1, \dots, n$, εξακολουθεί φυσικά να ισχύει το ΚΟΘ. Το μόνο που αλλάζει είναι η εκτίμηση της ασυμπτωτικής διασποράς. Σε αυτήν την περίπτωση, η ασυμπτωτική διασπορά εκτιμάται από την ποσότητα

$$\tilde{\tau}_h^2 = \frac{\sum_{i=1}^n w(X_i)^2 \{h(X_i) - \hat{h}_n^{IS}\}^2}{n\bar{w}_n^2}.$$

όπου $\bar{w}_n = \sum_{i=1}^n w(X_i)/n$.

2.1.5 Δειγματοληψία σπουδαιότητας με rejection control

Πολύ συχνά η προσομοίωση από την κατανομή πρότασης g δίνει τιμές που δεν είναι σημαντικές, με την έννοια ότι έχουν πολύ μικρό βάρος σπουδαιότητας. Προφανώς, αυτές οι τιμές δεν έχουν μεγάλη συμμετοχή στην εκτίμηση της $E_\pi(h)$ όποιον από τους εκτιμητές \bar{h}_n^{IS} , \hat{h}_n^{IS} κι αν χρησιμοποιήσουμε. Γι' αυτόν το λόγο, πολλές φορές κρίνεται απαραίτητο να «απαλλαγούμε» από τις ασήμαντες τιμές. Μία στρατηγική που μπορούμε να ακολουθήσουμε είναι η ακόλουθη: Σε περίπτωση που το βάρος σπουδαιότητας $w(x)$ μιας προσομοιωμένης τιμής x από την g είναι πολύ μικρό, αποφασίζουμε με κάποια πιθανότητα για το αν θα συμπεριλάβουμε ή όχι αυτήν την τιμή στο δείγμα μας. Επιλέγουμε μία σταθερά k και θεωρούμε ότι ένα βάρος είναι μικρό αν είναι μικρότερο από αυτήν τη σταθερά, δηλαδή αν $w(x) < k$. Τότε, μία τιμή με μικρό βάρος $w(x)$ γίνεται δεκτή με πιθανότητα $w(x)/k$, διαφορετικά απορρίπτεται. Η συγκεκριμένη τεχνική είναι προφανώς μία διαδικασία αποδοχής-απόρριψης.

Είναι σαφές ότι αυτή η διαδικασία μεταβάλλει την κατανομή πρότασης, αφού οι τιμές που γίνονται δεκτές δεν είναι πλέον παρατηρήσεις από την g . Παρ' όλο που μία X που συμπεριλαμβάνεται στο δείγμα έχει προσομοιωθεί αρχικά από την g , έχει εισέλθει σε αυτό με πιθανότητα

$$\alpha(X) = \min \left\{ 1, \frac{w(X)}{k} \right\},$$

δηλαδή με πιθανότητα ένα αν $w(X) \geq k$ και με πιθανότητα $w(X)/k$ διαφορετικά. Έτσι, μετά την προσομοίωση της X από την g , προσομοιώνουμε μία ανεξάρτητη $U \sim \mathcal{U}(0, 1)$ και αποδεχόμαστε το X αν $U \leq \alpha(X)$. Ως εκ τούτου, για μία παρατήρηση που έχει γίνει δεκτή ισχύει

$$\begin{aligned} \mathbb{P}\{X \in A | U \leq \alpha(X)\} &= \frac{\mathbb{P}\{X \in A, U \leq \alpha(X)\}}{\mathbb{P}\{U \leq \alpha(X)\}} \\ &= \frac{\int_A \int_0^{\alpha(x)} g(x) du \mu(dx)}{\int_{\mathcal{X}} \int_0^{\alpha(x)} g(x) du \mu(dx)} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{\int_A \alpha(x)g(x)\mu(dx)}{\int_{\mathcal{X}} \alpha(x)g(x)\mu(dx)} \\
&= \frac{\int_A \min\{\pi(x), kg(x)\} \mu(dx)}{\int_{\mathcal{X}} \min\{\pi(x), kg(x)\} \mu(dx)},
\end{aligned}$$

πράγμα που σημαίνει ότι στην πραγματικότητα η πυκνότητα πιθανότητας της κατανομής πρότασης είναι η

$$g_k(x) = \frac{\min\{\pi(x), kg(x)\}}{\int \min\{\pi(x), kg(x)\} \mu(dx)}.$$

Συνήθως, η σταθερά κανονικοποίησης $\int \min\{\pi(x), kg(x)\} \mu(dx)$ είναι αδύνατο να υπολογιστεί αναλυτικά. Γι' αυτό χρησιμοποιούμε αντί της g_k τη μη κανονικοποιημένη εκδοχή της

$$\tilde{g}_k(x) = \min\{\pi(x), kg(x)\}$$

προκειμένου να υπολογίσουμε τα (μη κανονικοποιημένα) βάρη $\tilde{w}_k(X_i)$.

Ο λόγος που χρησιμοποιείται η παραπάνω παραλλαγή της δειγματοληψίας σπουδαιότητας είναι διττός. Πρώτον, όπως ήδη αναφέραμε, απορρίπτονται εκ των προτέρων οι «μη σημαντικές» τιμές και δεύτερον, μπορεί να αποδειχθεί ότι η πυκνότητα $g_k(x)$ είναι (υπό μία έννοια) πιο κοντά στην κατανομή-στόχο π απ' ό,τι η αρχική κατανομή g . Μπορεί επίσης να δειχθεί ότι ισχύει $\text{Var}_{g_k}(w_k(X)) \leq \text{Var}_g(w(X))$ (δες Liu, 2001). Αξίζει τέλος να σημειωθεί ότι αν ο λόγος $w(x) = \pi(x)/g(x)$ είναι άνω φραγμένος από κάποια σταθερά w^* και επιλέξουμε $k = w^*$, τότε η παραπάνω μέθοδος συμπίπτει με τη μέθοδο Αποδοχής-Απόρριψης.

2.1.6 Δειγματοληψία/Επαναδειγματοληψία Σπουδαιότητας

Μία εναλλακτική μέθοδος για να απαλλάξουμε το δείγμα μας από τιμές με μικρά βάρη είναι η Δειγματοληψία/Επαναδειγματοληψία Σπουδαιότητας (Sampling Importance Resampling, SIR) η οποία εισήχθη από τον Rubin (1987, 1988). Η μέθοδος αυτή μπορεί επίσης να χρησιμοποιηθεί και ως εναλλακτική μέθοδος για την παραγωγή ενός τυχαίου δείγματος από την κατανομή-στόχο π . Πιο συγκεκριμένα, αρχικά ένα τυχαίο δείγμα x_1, \dots, x_n παράγεται από την g . Έπειτα, ένα δείγμα y_1, \dots, y_m , $m \leq n$, επιλέγεται από τα x_1, \dots, x_n με επανατοποθέτηση και με πιθανότητα $w(x_i)/\sum_{j=1}^n w(x_j)$ για το κάθε x_i , $i = 1, \dots, n$. Καθώς $n \uparrow \infty$, το δείγμα που παίρνουμε με τη μέθοδο αυτή είναι προσεγγιστικά ένα τυχαίο δείγμα από την κατανομή-στόχο π . Πράγματι,

$$P(Y_i \in A) = \sum_{i=1}^n \frac{w(x_i)}{\sum_{j=1}^n w(x_j)} I_A(x_i)$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{\sum_{i=1}^n w(x_i) I_A(x_i) / n}{\sum_{j=1}^n w(x_j) / n} \xrightarrow{d} \frac{E_g \{w(X) I_A(X)\}}{E_g \{w(X)\}} \\
&= \frac{\int_A w(x) g(x) \mu(dx)}{\int_{\mathcal{X}} w(x) g(x) \mu(dx)} \\
&= \pi(A),
\end{aligned}$$

όπου

$$I_A(x) = \begin{cases} 1, & \text{αν } x \in A \\ 0 & \text{αν } x \notin A. \end{cases}$$

Να σημειωθεί ότι, εφ' όσον η δειγματοληψία γίνεται με επανατοποθέτηση, η y_i είναι ανεξάρτητη από την y_j για $i \neq j$, συνεπώς θα μπορούσαμε να θεωρήσουμε τις παρατηρήσεις y_1, \dots, y_m ως τυχαίο δείγμα από την π . Οι Smith and Gelfand (1992) τεκμηρίωσαν αυτόν τον ισχυρισμό θεωρώντας την επαναδειγματοληψία ως ένα σταθμισμένο bootstrap. Δεν πρέπει φυσικά να παραβλέπουμε το γεγονός ότι όλα συμβαίνουν δοθέντος του αρχικού προσομοιωμένου δείγματος (x_1, \dots, x_n) .

Στο σημείο αυτό θα πρέπει να επισημάνουμε ότι η επαναδειγματοληψία είναι μία ιδιαίτερα χρονοβόρα διαδικασία, αφού στην πράξη τα μεγέθη των δειγμάτων n και m είναι πολύ μεγάλα. Για παράδειγμα, οι McAllister and Ianelli (1997) εφάρμοσαν ένα σχήμα SIR όπου κατά την επαναδειγματοληψία ένα δείγμα μεγέθους $m = 10^4$ επιλέγεται από ένα αρχικό δείγμα μεγέθους $n = 3 \times 10^6$. Γενικά, η επαναδειγματοληψία ισοδυναμεί με την προσομοίωση ενός τυχαίου διανύσματος από μία πολυωνυμική κατανομή. Στο Κεφάλαιο 5 της διατριβής προτείνεται μία διαδικασία δύο βημάτων η οποία βελτιώνει σημαντικά το χρόνο προσομοίωσης από την πολυωνυμική κατανομή όταν τα n και m είναι μεγάλα και, κατ' επέκταση, το χρόνο επαναδειγματοληψίας.

Θα πρέπει τέλος να αναφέρουμε ότι η επαναδειγματοληψία μπορεί να γίνει και χωρίς επανατοποθέτηση. Για παράδειγμα, οι Gelman et al. (1990) προτείνουν δειγματοληψία χωρίς επανατοποθέτηση για να αποφύγουν μεγάλο αριθμό μη σημαντικών παρατηρήσεων όταν η κατανομή πρότασης δεν είναι « κοντά » στην κατανομή-στόχο. Εν τούτοις, στη βιβλιογραφία κυριαρχεί η δειγματοληψία με επανατοποθέτηση.

2.1.7 Προσομοίωση μέσω διακριτοποίησης

Σε περίπτωση που η κατανομή-στόχος π είναι απολύτως συνεχής, μία διαφορετική μέθοδος για την προσέγγιση της μέσης τιμής $E_\pi(h)$ βασίζεται στη διακριτοποίησή της. Η διακριτοποίηση της π συνδέεται με τη διακριτοποίηση του στηρίγματος της. Με τον όρο « διακριτοποίηση » της π εννοούμε την αντικατάστασή της από μία απλή κατανομή g με το ίδιο στηρίγμα.

Ορισμός 2.2. Έστω $\mathcal{E} = (E_1, \dots, E_m)$ μία μετρήσιμη διαμέριση του συνόλου \mathcal{X} . Κάθε συνεχής κατανομή με σταθερή πυκνότητα πιθανότητας σε κάθε E_i καλείται απλή ως προς τη διαμέριση \mathcal{E} .

Ορισμός 2.3. Έστω $\mathcal{E} = (E_1, \dots, E_m)$ μία μετρήσιμη διαμέριση του στηρίγματος \mathcal{X} της π με $L(E_i) > 0$, $i = 1, \dots, m$, όπου L είναι το μέτρο Lebesgue. Για δεδομένα σημεία $\{x_1^*, \dots, x_m^*\}$ με $x_i^* \in E_i$, $i = 1, \dots, m$, η απλή κατανομή

$$g(x) \propto \sum_{i=1}^m \frac{\pi(x_i^*)}{L(E_i)} I(x \in E_i) \quad (2.9)$$

λέγεται διακριτοποίηση της π που αντιστοιχεί στο σύνολο $\{(x_i^*, E_i)\}_{i=1}^m$.

Παράδειγμα 2.2. Έστω $\mathcal{X} = (\alpha, \beta]$ όπου α και β σταθερές τέτοιες ώστε $-\infty < \alpha < \beta < \infty$. Μία διακριτοποίηση της π μπορεί να προκύψει παίρνοντας

$$E_i = \left(\alpha + \frac{i-1}{m}(\beta - \alpha), \alpha + \frac{i}{m}(\beta - \alpha) \right]$$

και

$$x_i^* = \alpha + \frac{i-1/2}{m}(\beta - \alpha),$$

δηλαδή το μέσο του διαστήματος E_i , $i = 1, \dots, m$. Τότε, η αντίστοιχη διακριτοποίηση της π έχει τη μορφή

$$g(x) \propto \sum_{i=1}^m \pi(x_i^*) I(x \in E_i), \quad (2.10)$$

καθώς $L(E_i) \equiv (\beta - \alpha)/m$ για όλα τα i . □

Οι Kozlov and Koller (1997) απέδειξαν ότι η βέλτιστη – υπό την απόκλιση Kullback–Leibler – τιμή της απλής κατανομής g στο υποσύνολο E_i ισούται με $\int_{E_i} \pi(x) dx / L(E_i)$. Στις περισσότερες όμως περιπτώσεις το παραπάνω ολοκλήρωμα είναι πολύ δύσκολος, αν όχι αδύνατο, να υπολογιστεί. Για παράδειγμα, μια τέτοια περίπτωση είναι όταν γνωρίζουμε την π εκτός από κάποια πολλαπλασιαστική σταθερά. Στην πράξη, λοιπόν, είναι πιο βολικό να κατασκευάζουμε την απλή κατανομή χρησιμοποιώντας κατάλληλα αντιπροσωπευτικά σημεία x_i^* , όπως για παράδειγμα τα μέσα των διαστημάτων ή κάποια τοπικά ακρότατα της π .

Μία διακριτοποίηση μπορεί να γίνει είτε με τυχαίο είτε με ντετερμινιστικό τρόπο. Για παράδειγμα, οι Fu and Wang (2002) προτείνουν μία τυχαία διακριτοποίηση ενός φραγμένου στηρίγματος. Πιο συγκεκριμένα, διακριτοποιούν ένα φραγμένο σύνολο της μορφής $(\alpha, \beta)^k$ σε m το πλήθος υποσύνολα ως εξής: Παράγουν ανεξάρτητες παρατηρήσεις x_1, x_2, \dots, x_{nmk} από την ομοιόμορφη κατανομή στο διάστημα (α, β) . Κάθε k διαδοχικές παρατηρήσεις λαμβάνονται ως μια

k -διάστατη παρατήρηση από την ομοιόμορφη κατανομή στο σύνολο $(\alpha, \beta)^k$, δηλαδή οι $x^{(j)} = (x_{(j-1)k+1}, x_{(j-1)k+2}, \dots, x_{jk})$, $j = 1, 2, \dots, mn$, αποτελούν ένα τυχαίο δείγμα από την ομοιόμορφη κατανομή στο $(\alpha, \beta)^k$. Έστω $x_{[j]}$, $j = 1, 2, \dots, mn$, οι διατεταγμένες παρατηρήσεις ως προς την τιμή της πυκνότητας-στόχου, δηλαδή αν $i > j$ τότε $\pi(x_{[i]}) \geq \pi(x_{[j]})$. Ακολουθώς οι « διατεταγμένες » παρατηρήσεις χωρίζονται έτσι ώστε να δημιουργηθούν m σύνολα, $E_i = \{x_{[j]} : (i-1)n < j \leq in\}$. Τότε μπορεί να οριστεί η απλή κατανομή

$$g(x) \propto \sum_{i=1}^m \alpha_i I(x \in E_i),$$

όπου

$$\alpha_i = \frac{\sum_{j=(i-1)n+1}^{in} \pi(x_{[j]})}{\sum_{j=1}^{mn} \pi(x_{[j]})}. \quad (2.11)$$

Η προσομοίωση από τη διακριτή κατανομή (2.11) είναι τυπική διαδικασία. Πρώτα επιλέγεται ένα σύνολο E_i με πιθανότητα α_i και στη συνέχεια προσομοιώνεται το x από την ομοιόμορφη κατανομή στο E_i . Τότε, αν x_1, x_2, \dots, x_N είναι ένα τυχαίο δείγμα που έχει προκύψει από αυτήν τη διαδικασία, οι Fu and Wang (2002) απέδειξαν ότι για κάθε συνάρτηση $h \in \mathcal{L}(\pi)$ ισχύει

$$\lim_{n, m \uparrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n h(x_i) \xrightarrow{p} \mathbb{E}_\pi(h) = \int_{\mathcal{X}} h(x) \pi(x) dx. \quad (2.12)$$

Καθώς το m αυξάνεται, η π προσεγγίζεται καλύτερα και οι εκτιμητές που προκύπτουν είναι πιο ακριβείς. Οι Fu and Wang (2002) υποστηρίζουν ότι μία κατάλληλη τιμή για το m είναι μεταξύ 200 και 500 για πυκνότητες διάστασης μικρότερης του πέντε ενώ μία τιμή μεταξύ 1000 και 100000 είναι κατάλληλη για πυκνότητες μεγαλύτερης διάστασης.

Οι Sainudiin and York (2005) προτείνουν ένα νεοτερμινιστικό τρόπο διακριτοποίησης του στήριγματος προκειμένου να βελτιώσουν την αποδοτικότητα μίας μεθόδου Αποδοχής-Απόρριψης. Επίσης, προτείνουν μία προσαρμοζόμενη (adaptive) εκδοχή της διακριτοποίησης για ακόμα μεγαλύτερη αποδοτικότητα του αλγορίθμου, δηλαδή για μεγαλύτερη αύξηση της πιθανότητας αποδοχής των προτεινόμενων τιμών.

Οι Liang et al. (2006) διαμερίζουν το στήριγμα \mathcal{X} σε m υποσύνολα βασιζόμενοι στη συνάρτηση ενέργειας (energy function) $U(x) = -\log[\pi(x)]$. Συγκεκριμένα, θεωρούν τα υποσύνολα

$$E_1 = \{x : U(x) \leq u_1\}, \dots, E_i = \{x : u_{i-1} < U(x) \leq u_i\}, \dots, \\ E_m = \{x : U(x) > u_{m-1}\},$$

όπου u_1, \dots, u_{m-1} προεπιλεγμένοι αριθμοί και έπειτα χρησιμοποιούν μία εκδοχή δειγματοληψίας σπουδαιότητας για να προσομοιώσουν από την κατανομή-στόχο π .

Τέλος, οι Neil et al. (2007) προτείνουν μία δυναμική διακριτοποίηση του στηρίγματος \mathcal{X} προκειμένου να προσεγγίσουν την πραγματική πυκνότητα πιθανότητας π μέσω της διακριτοποίησής της σε ένα αποδεκτό επίπεδο ακρίβειας. Κατασκευάζουν μία ακολουθία διακριτοποιήσεων του \mathcal{X} και σε κάθε βήμα ελέγχουν αν η g έχει προσεγγίσει την π εκτιμώντας ένα φράγμα της απόκλισης Kullback-Leibler. Η διαδικασία συνεχίζεται μέχρι η προσέγγιση να φτάσει σε κάποιο προεπιλεγμένο επίπεδο ακρίβειας.

2.2 Αλγόριθμοι Markov Chain Monte Carlo

Μία διαφορετική προσέγγιση στα δύο βασικά προβλήματα της Υπολογιστικής Στατιστικής, γίνεται μέσω των τεχνικών Markov chain Monte Carlo (MCMC). Οι τεχνικές αυτές προσομοιώνουν παρατηρήσεις οι οποίες ακολουθούν (συνήθως) προσεγγιστικά την κατανομή-στόχο π . Η βασική ιδέα των μεθόδων MCMC είναι η προσομοίωση μίας εργοδικής αλυσίδας Markov με στάσιμη (οριακή) κατανομή την κατανομή-στόχο π . Κάποια στοιχεία της θεωρίας των αλυσίδων Markov παρατίθενται στο Παράρτημα Α.

Ορισμός 2.4. Μέθοδος Markov chain Monte Carlo (MCMC) για την προσομοίωση παρατηρήσεων από κάποια κατανομή-στόχο π λέγεται κάθε μέθοδος προσομοίωσης η οποία παράγει μία αλυσίδα Markov με στάσιμη κατανομή την π .

Έστω X_0, X_1, X_2, \dots μία ακολουθία που προκύπτει από κάποια μέθοδο MCMC με κατανομή-στόχο π . Από τη φύση των μεθόδων MCMC προκύπτει ότι

- οι παρατηρήσεις δεν είναι ανεξάρτητες και
- οι (περιθωριακές) κατανομές τους γενικά διαφέρουν από την π .

Παρ' όλ' αυτά, υπό κατάλληλες συνθήκες το Εργοδικό Θεώρημα εξασφαλίζει την ισχυρή σύγκλιση του δειγματικού μέσου

$$\bar{h}_n = \frac{\sum_{i=0}^{n-1} h(X_i)}{n} \quad (2.13)$$

στην προς εκτίμηση ποσότητα $E_\pi(h)$ για κάθε $h \in \mathcal{L}(\pi)$. Να σημειωθεί εδώ ότι όταν αναφερόμαστε σε αλυσίδες Markov, ο όρος που χρησιμοποιείται για τον \bar{h}_n είναι *εργοδικός μέσος* (αντί για δειγματικός μέσος). Αυτόν τον όρο θα χρησιμοποιούμε και εμείς στη συνέχεια.

Έστω $\mu_0, \mu_1, \mu_2, \dots$ η ακολουθία των (περιθωριακών) κατανομών των X_0, X_1, X_2, \dots . Είναι σαφές ότι όσο πιο « κοντά » στην κατανομή-στόχο π βρίσκεται η μ_0 , τόσο καλύτερη θα είναι η προσέγγιση της $E_\pi(h)$ από τον \bar{h}_n . Από τη θεωρία των αλυσίδων Markov γνωρίζουμε ότι, υπό κατάλληλες συνθήκες, η απόσταση μεταξύ μ_k και π φθίνει ως προς k . Γι' αυτόν το λόγο, συχνά αγνοούμε τους πρώτους όρους της ακολουθίας, ας πούμε τους πρώτους m , και χρησιμοποιούμε τον εκτιμητή

$$\hat{h}_{BI} = \frac{1}{n-m} \sum_{i=m}^{n-1} h(X_i), \quad (2.14)$$

αντί του \bar{h}_n . Έτσι, ουσιαστικά αντικαθιστούμε την ακολουθία X_0, X_1, X_2, \dots με την ακολουθία $X_m, X_{m+1}, X_{m+2}, \dots$. Η αρχική κατανομή της τελευταίας είναι η μ_m η οποία βρίσκεται κοντύτερα στην π από ό,τι η μ_0 . Το χρονικό διάστημα που αντιστοιχεί στις παρατηρήσεις που αγνοούμε, δηλαδή το διάστημα μέχρι το χρόνο m , αναφέρεται ως *περίοδος burn-in* (εξ ου και το « BI » στο συμβολισμό του εκτιμητή).

Η επιλογή του μήκους της περιόδου burn-in, m , μπορεί να γίνει με διάφορους τρόπους. Για παράδειγμα, στις περιπτώσεις που είναι δυνατόν να προσδιοριστεί κάποια γνησίως φθίνουσα ακολουθία $(b_k)_{k \in \mathbb{Z}_+}$, με b_k να είναι ένα άνω φράγμα της απόστασης της μ_k από την π , θα μπορούσε να ληφθεί ως m ο πρώτος δείκτης k για τον οποίο ισχύει $b_k \leq 0.01$. Σε διαφορετική περίπτωση, θα μπορούσε ως περίοδος burn-in να ληφθεί ένα ποσοστό του συνολικού μήκους της προσομοιωμένης αλυσίδας, π.χ. το πρώτο 10%. Φυσικά, σε περίπτωση που $\mu_0 = \pi$ η αλυσίδα ξεκινάει σε στασιμότητα και δεν είναι αναγκαίος ο καθορισμός κάποιας περιόδου burn-in. Εδώ θα πρέπει να αναφέρουμε ότι η προσομοίωση μίας στάσιμης αλυσίδας Markov, δηλαδή μίας αλυσίδας Markov με αρχική κατανομή τη στάσιμη κατανομή της, αναφέρεται ως *τέλεια δειγματοληψία (perfect sampling)* και η ανάπτυξη μεθόδων που το επιτυγχάνουν αποτελεί μία ξεχωριστή ερευνητική περιοχή (δες Propp and Wilson, 1996, Robert and Casella, 2004 και τις αναφορές εκεί).

Από τη θεωρία των αλυσίδων Markov, για τον εκτιμητή (2.13) (αλλά και για τον (2.14)) ισχύει το ακόλουθο.

Θεώρημα 2.1. *Υπό κατάλληλες συνθήκες,*

$$\sqrt{n} \{ \hat{h}_n - E_\pi(h) \} \xrightarrow{d} \mathcal{N}(0, \sigma_h^2) \quad \text{καθώς } n \uparrow \infty,$$

όπου

$$\sigma_h^2 = \sigma^2 \left(1 + 2 \sum_{i=1}^{\infty} \rho_i \right),$$

με $\sigma^2 = \text{Var}_\pi \{ h(X) \}$ και $\rho_i = \text{Corr}_\pi (h(X_0), h(X_i))$, $i = 1, 2, \dots$

Η ποσότητα

$$\tau_{\text{int}}(h) = \frac{1}{2} \left(1 + 2 \sum_{i=1}^{\infty} \rho_i \right),$$

καλείται *χρόνος ολοκληρωμένης αυτοσυσχέτισης (integrated autocorrelation time)* της h (δες Liu, 2001). Εύκολα φαίνεται ότι

$$n\sigma_h^2 = 2\sigma^2\tau_{\text{int}}(h),$$

πράγμα που σημαίνει ότι η διασπορά του εκτιμητή που προκύπτει από την ακολουθία MCMC ισούται με τη διασπορά ενός εκτιμητή που προκύπτει από ένα τυχαίο δείγμα μεγέθους $n/(2\tau_{\text{int}}(h))$ από την π . Ο όρος $n/(2\tau_{\text{int}}(h))$ καλείται *αποδοτικό μέγεθος δείγματος (effective sample size, ESS)*.

Η εκτίμηση της ασυμπτωτικής διασποράς σ_h^2 δεν είναι απλή διαδικασία όπως συμβαίνει στην περίπτωση που οι παρατηρήσεις είναι ανεξάρτητες. Για αυτόν το σκοπό υπάρχουν διάφορες μέθοδοι, άλλες απλοϊκές και άλλες πιο σύνθετες (δες Geyer, 1992, Hobert et al., 2002, Rosenthal, 2007, και τις αναφορές εκεί). Για παράδειγμα, η σ_h^2 μπορεί να εκτιμηθεί από την

$$\hat{\sigma}_h^2 = \hat{\sigma}^2 \left(1 + 2 \sum_{i=1}^k r_i \right)$$

όπου $\hat{\sigma}^2$ είναι ένας εκτιμητής της διασποράς σ^2 (π.χ. η δειγματική διασπορά των προσομοιωμένων παρατηρήσεων), r_i είναι ο δειγματικός συντελεστής αυτοσυσχέτισης i υστέρησης (lag) και k ένας θετικός ακέραιος ο οποίος είναι είτε προκαθορισμένος είτε καθορίζεται από την προσομοιωμένη αλυσίδα. Συχνά, αντί ολόκληρης της προσομοιωμένης αλυσίδας, χρησιμοποιείται για την εκτίμηση της $E_{\pi}(h)$ ένας m -σκελετός της με $m > 1$. Επειδή οι αυτοσυσχετίσεις φθίνουν ως προς την υστέρηση, η ασυμπτωτική διασπορά αυτού του εκτιμητή θα επηρεάζεται λιγότερο από αυτές. Εναλλακτικά μπορούμε να προσομοιώσουμε m ανεξάρτητες αλυσίδες Markov μήκους n και να εκτιμήσουμε την σ_h^2 με τη δειγματική διασπορά των m (ανεξάρτητων) εργοδικών μέσων. (Αυτή τη διαδικασία θα χρησιμοποιήσουμε στα Κεφάλαια 4 και 5 προκειμένου να εκτιμήσουμε τα τυπικά σφάλματα των εργοδικών μέσων στα εκεί παραδείγματα.)

Η πιο « ακριβής » μέθοδος βασίζεται στον καθορισμό σημείων αναγεννήσεων της αλυσίδας. Τότε, τα τμήματα μεταξύ αυτών των σημείων είναι ανεξάρτητα τυχαία διανύσματα με συνέπεια να μπορεί να εφαρμοστεί ένα κλασικό ΚΟΘ για τον εργοδικό μέσο (δες Mykland et al., 1995, Hobert et al., 2002)

Παρ' όλο που οι πρώτοι αλγόριθμοι MCMC εμφανίστηκαν κατά τη δεκαετία του '50, η στατιστική κοινότητα τους ανακάλυψε στην πραγματικότητα 35–40 χρόνια αργότερα. Αυτή η « ανακάλυψη » έδωσε νέα ώθηση στη Μπεϋζιανή Στατιστική

η οποία βρισκόταν μέχρι τότε στη σκιά της «κλασσικής» Στατιστικής, κυρίως λόγω των δυσκολιών που προέκυπταν στην ανάλυση πολύπλοκων μοντέλων με μη συζυγείς εκ των προτέρων κατανομές. Έτσι, κατά τις δύο τελευταίες δεκαετίες οι αλγόριθμοι MCMC έχουν τραβήξει την προσοχή πολλών ερευνητών της Στατιστικής αλλά και των Πιθανοτήτων, μια που η θεωρητική μελέτη των αλυσίδων Markov που προσομοιώνονται παρουσιάζει ιδιαίτερο ενδιαφέρον.

Στη συνέχεια παρουσιάζονται οι δύο βασικότεροι αλγόριθμοι MCMC, δηλαδή ο αλγόριθμος Metropolis-Hastings και ο δειγματολήπτης Gibbs.

2.2.1 Αλγόριθμος Metropolis-Hastings

Ο αλγόριθμος Metropolis-Hastings (MH) έχει χαρακτηριστεί από τους εκδότες του περιοδικού *Computing in Science and Engineering* ως ένας από τους δέκα αλγορίθμους που επηρέασαν περισσότερο τις επιστήμες κατά τον εικοστό αιώνα. Αρχικά, μία ειδική μορφή της σημερινής του έκφρασης εισήχθη από τους Metropolis et al. (1953) ως μέθοδος βελτιστοποίησης σε ένα διακριτό χώρο καταστάσεων². Το άρθρο δημοσιεύτηκε στο περιοδικό *Journal of Chemical Physics* και απευθυνόταν κυρίως σε φυσικούς. Για δεκαετίες δεν αξιολογήθηκε από τους στατιστικούς κυρίως λόγω της οπτικής αλλά και του τρόπου παρουσίασής του. Στην αντίληψη των στατιστικών υπέπεσε για πρώτη φορά το 1964. Οι Hammersley and Handscomb (1964) τον αναφέρουν στο βιβλίο τους *Monte Carlo Methods* ως μία μέθοδο υπολογισμού ολοκληρωμάτων, όχι όμως ως γενική μέθοδο προσομοίωσης παρατηρήσεων από κάποια κατανομή-στόχο. Η μέθοδος γενικεύτηκε, βελτιώθηκε και γράφτηκε υπό μία νέα, περισσότερο «στατιστική» οπτική από τον Hastings (1970). Ο Hastings παρουσίασε επίσης τον αλγόριθμο ως έναν τρόπο προσομοίωσης από κάποια πολυδιάστατη κατανομή-στόχο. Παρ' όλ' αυτά, ο αλγόριθμος MH δεν ήταν ευρέως διαδεδομένος μέχρι τη δεκαετία του '90. Τότε, το άρθρο των Gelfand and Smith (1990) αλλά και η παρουσίαση του Luke Tierney σε συνέδριο στο Ohio State University το 1991 (όπως αναφέρει ο Kass, 1997) σε συνδυασμό με τη διαρκώς αυξανόμενη υπολογιστική ισχύ, έδωσαν ώθηση έτσι ώστε σήμερα ο αλγόριθμος MH να θεωρείται ένα από τα σημαντικότερα εργαλεία της Υπολογιστικής Στατιστικής. Για περισσότερες πληροφορίες για την ιστορία του αλγορίθμου MH και των δημιουργών του δεξ Hitchcock (2003) και τις αναφορές εκεί.

Περιγραφή του αλγορίθμου MH

Έστω π η κατανομή-στόχος και \mathcal{X} το στήριγμά της. Ξεκινάμε από κάποια κατάσταση $y_0 \in \mathcal{X}$ με $\pi(y_0) > 0$, που μπορεί είτε να έχει προκύψει από προσομοίωση

²Ο Metropolis θεωρείται ο πατέρας των μεθόδων Monte Carlo, όχι μόνο γιατί επινόησε το όνομά τους αλλά επειδή ήταν ο πρώτος που υλοποίησε ένα πείραμα Monte Carlo στον υπολογιστή MANIAC (Mathematical Analyzer, Numerical Integrator and Computer) το 1948.

είτε να έχει επιλεχθεί αυθαίρετα. Τη χρονική στιγμή t , δεδομένου ότι βρισκόμαστε στην κατάσταση $Y_t = y_t$, παράγουμε μία « υποψήφια » τιμή z για την επόμενη κατάσταση Y_{t+1} από κάποια κατανομή πρότασης $q(y_t, z) \equiv q(z|y_t)$ η οποία είναι δυνατόν να εξαρτάται από την τρέχουσα κατάσταση y_t . Η υποψήφια τιμή z γίνεται αποδεκτή με πιθανότητα

$$a(y_t, z) = \min \left\{ 1, \frac{\pi(z)q(z, y_t)}{\pi(y_t)q(y_t, z)} \right\}.$$

Αν η υποψήφια τιμή γίνει αποδεκτή τότε θέτουμε $Y_{t+1} = z$, διαφορετικά θέτουμε $Y_{t+1} = y_t$. Η πιθανότητα $a(y, z)$ ονομάζεται πιθανότητα αποδοχής (acceptance probability).

Αλγόριθμος 2.2. Αλγόριθμος MH

0. Θέσε $Y_0 = y_0$ τέτοιο ώστε $\pi(y_0) > 0$ και $t = 0$.

1. Στο χρόνο $t + 1$, δοθέντος $Y_t = y_t$:

- Προσομοίωσε $Z \sim q(y_t, z)$ και $U \sim \mathcal{U}(0, 1)$
- Αν $U \leq a(y_t, z)$ θέσε $Y_{t+1} = z$ διαφορετικά θέσε $Y_{t+1} = y_t$.

2. Θέσε $t = t + 1$ και πήγαινε στο Βήμα 1.

Προφανώς, η πιθανότητα αποδοχής $a(y_t, z)$ ορίζεται μόνο όταν $\pi(y_t) > 0$. Όμως, δεδομένου του ότι $\pi(y_0) > 0$, αυτό ισχύει για κάθε $t \in \mathbb{N}$ μια και για υποψήφιες τιμές z με $\pi(z) = 0$ η πιθανότητα αποδοχής μηδενίζεται και αυτές απορρίπτονται αμέσως.

Δεδομένου ότι η τιμή που παίρνει τελικά η Y_{t+1} εξαρτάται μόνον από την τιμή y_t της Y_t και όχι από τις προηγούμενες τιμές y_{t-1}, y_{t-2}, \dots , είναι φανερό ότι η ακολουθία που προκύπτει από τον αλγόριθμο MH είναι προσομοίωση μίας αλυσίδας Markov. Ο πυρήνας μετάβασης της αλυσίδας είναι

$$K(y, dz) = \alpha(y, z)q(y, dz) + \{1 - R(y)\} \delta_y(dz),$$

όπου δ_y η σημειακή μάζα στο y (point mass) και $R(y) = \int \alpha(y, z)q(y, z)\mu(dz)$, ο οποίος ικανοποιεί τη λεπτομερή συνθήκη ισορροπίας

$$\pi(y)K(y, z) = \pi(z)K(z, y), \quad \forall y, z \in \mathcal{X}.$$

Πράγματι,

$$\begin{aligned} \pi(y)K(y, z) &= \pi(y) \{ \alpha(y, z)q(y, z) + \{1 - R(y)\} \delta_y(z) \} \\ &= \pi(y)q(y, z) \min \left\{ 1, \frac{\pi(z)q(z, y)}{\pi(y)q(y, z)} \right\} + \pi(y)\delta_y(z) (1 - R(y)) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \min\{\pi(y)q(y, z), \pi(z)q(z, y)\} + \pi(z)\delta_z(y) (1 - R(z)) \\
&= \pi(z)q(z, y) \min\left\{1, \frac{\pi(y)q(y, z)}{\pi(z)q(z, y)}\right\} + \pi(z)\delta_z(y) (1 - R(z)) \\
&= \pi(z)K(z, y), \quad y, z \in \mathcal{X}.
\end{aligned}$$

Επομένως η αλυσίδα Markov που παράγεται από την παραπάνω διαδικασία είναι αντιστρέψιμη και έχει την π ως στάσιμη (οριακή) κατανομή. Προφανώς, αν $Y_t \sim \pi$, τότε και $Y_{t+1} \sim \pi$. Συνεπώς, αν καταφέρουμε να προσομοιώσουμε μία παρατήρηση από τη στάσιμη κατανομή π , όλες οι υπόλοιπες τιμές θα προέρχονται επίσης από την ίδια κατανομή.

Καθώς η αλυσίδα MH έχει εκ κατασκευής την π ως στάσιμη κατανομή, εάν επί πλέον είναι Harris επαναληπτική και απεριοδική, μπορεί να εφαρμοστεί το Εργοδικό Θεώρημα και να εξασφαλίσει τη σύγκλιση κάθε εργοδικού μέσου στην αντίστοιχη μέση τιμή. Μία ικανή συνθήκη για να είναι η αλυσίδα MH απεριοδική είναι τα ενδεχόμενα της μορφής $\{Y_{t+1} = Y_t\}$ να έχουν θετική πιθανότητα ή, ισοδύναμα, να ισχύει

$$\mathbb{P}\{\pi(Y_t)q(Y_t, Y_{t+1}) \leq \pi(Y_{t+1})q(Y_{t+1}, Y_t)\} < 1. \quad (2.15)$$

Για να είναι Harris επαναληπτική, θα πρέπει να είναι π -μη διαχωρίσιμη. Μία ικανή συνθήκη για αυτό είναι

$$q(y, z) > 0 \quad \text{για κάθε } (y, z) \in \mathcal{X} \times \mathcal{X}. \quad (2.16)$$

Πιο συγκεκριμένα, ισχύει το επόμενο θεώρημα:

Θεώρημα 2.2. *Εφ' όσον ικανοποιούνται οι (2.15) και (2.16) ισχύουν τα εξής:*

(α) *Αν $h \in \mathcal{L}(\pi)$, τότε*

$$\frac{1}{n} \sum_{t=0}^{n-1} h(Y_t) \xrightarrow{\text{σ.β.}} \int_{\mathcal{X}} h(y)\pi(dy).$$

(β) *Εαν επί πλέον η $(Y_t)_{t \geq 0}$ είναι απεριοδική, τότε*

$$\lim_{n \uparrow \infty} \|\mathbb{P}(Y_n \in \cdot) - \pi(\cdot)\| = 0.$$

Ένα από τα σημαντικότερα πλεονεκτήματα του αλγορίθμου MH είναι ότι εξασφαλίζει υπό ελάχιστες συνθήκες τη σύγκλιση της ακολουθίας που προσομοιώνεται στην κατανομή-στόχο π . Επίσης, ένα άλλο σημαντικό πλεονέκτημά του είναι ότι για την υλοποίησή του χρειαζόμαστε μόνο τη συναρτησιακή μορφή των π και q . Σε περιπτώσεις δε που η q είναι συμμετρική, ούτε η συναρτησιακή μορφή της μας είναι απαραίτητη.

Ειδικές μορφές του αλγορίθμου Metropolis–Hastings

Η επιλογή της κατανομής πρότασης στον αλγόριθμο MH δεν είναι εξέχουσας σημασίας για τη σύγκλιση της αλυσίδας Markov στην κατανομή-στόχο π . Όπως είπαμε προηγουμένως, η κατανομή πρότασης επιλέγεται αυθαίρετα και μπορεί να έχει οποιαδήποτε μορφή, αρκεί να εξασφαλίζονται οι συνθήκες σύγκλισης στην κατανομή-στόχο. Από την άλλη μεριά όμως, η κατανομή πρότασης επηρεάζει σημαντικά την ταχύτητα σύγκλισης της αλυσίδας στην οριακή κατανομή της. Όσο πιο « κοντά » είναι η κατανομή πρότασης στην κατανομή-στόχο, τόσο πιο γρήγορα επιτυγχάνεται η επιθυμητή σύγκλιση. Επίσης, η q θα πρέπει να είναι τέτοια ώστε η προσομοίωση από αυτήν να είναι εύκολη και γρήγορη διαδικασία.

Ανάλογα με τη μορφή της κατανομής πρότασης, ο αλγόριθμος MH παίρνει διαφορετικές εκφράσεις. Δύο από τις σημαντικότερες είναι οι ακόλουθες.

Ανεξάρτητος δειγματολήπτης MH (Independent Sampler MH). Εάν η κατανομή πρότασης είναι της μορφής

$$q(y, z) = q(z),$$

είναι δηλαδή ανεξάρτητη από την τρέχουσα κατάσταση, τότε έχουμε έναν ανεξάρτητο δειγματολήπτη MH. Σε αυτήν την περίπτωση, η πιθανότητα αποδοχής παίρνει τη μορφή

$$a(y, z) = \min \left\{ 1, \frac{r(z)}{r(y)} \right\}$$

όπου $r(x) = \pi(x)/q(x)$.

Παρ' όλο που τα z παράγονται ανεξάρτητα, η προκύπτουσα ακολουθία δεν αποτελείται από ανεξάρτητες παρατηρήσεις αφού η πιθανότητα αποδοχής της z εξαρτάται και από την τιμή της Y_t . Εξαιρείται η τετριμμένη περίπτωση $\pi \equiv q$, όπου τότε παίρνουμε πραγματικά ένα τυχαίο δείγμα από την κατανομή-στόχο π .

Ο ανεξάρτητος δειγματολήπτης μπορεί είτε να συγκλίνει πολύ γρήγορα είτε να οδηγήσει σε αλυσίδες με υπερβολικά αργή σύγκλιση. Αν η q είναι μία καλή προσέγγιση της π με πιο βαριές ουρές από αυτή, τότε ο αλγόριθμος δεν παραμένει για μεγάλα διαστήματα στις ουρές της κατανομής πρότασης κάτι που έχει ως αποτέλεσμα τη γρήγορη σύγκλισή του. Οι Mengersen and Tweedie (1996) απέδειξαν ότι αν

$$r^* = \sup_x \frac{\pi(x)}{q(x)} < \infty,$$

τότε η αλυσίδα που προσομοιώνεται είναι ομοιόμορφα εργοδική με

$$\|P(Y_t \in \cdot) - \pi\| \leq (1 - 1/r^*)^t, \quad t \in \mathbb{Z}_+.$$

Γενικά, για την Y_t ισχύουν οι ιδιότητες του Θεωρήματος 2.2 αν και μόνο αν η q

είναι παντού θετική στο στήριγμα της π .

Ο Liu (1996) συνέκρινε τον ανεξάρτητο δειγματολήπτη MH με τον αλγόριθμο Αποδοχής-Απόρριψης και τη δειγματοληψία σπουδαιότητας. Έδειξε ότι η ασυμπτωτική διασπορά του αλγορίθμου Αποδοχής-Απόρριψης είναι μικρότερη από αυτήν του ανεξάρτητου δειγματολήπτη MH αλλά είναι ασυμπτωτικά συγκρίσιμες. Αποδεικνύει επίσης ότι η δειγματοληψία σπουδαιότητας κυριαρχεί έναντι των άλλων δύο τεχνικών.

Τυχαίος Περίπατος MH (Random Walk MH). Στην περίπτωση που η κατανομή πρότασης ικανοποιεί τη σχέση

$$q(y - z) = q(z - y)$$

έχουμε έναν τυχαίο περίπατο MH. Στον τυχαίο περίπατο MH, ως κατανομές πρότασης χρησιμοποιούνται συμμετρικές κατανομές με κέντρο κάθε φορά την προηγούμενη κατάσταση. Για παράδειγμα, τέτοιες κατανομές πρότασης είναι η $q(x, \cdot) \sim \mathcal{N}(x, \sigma^2)$, η $q(x, \cdot) \sim \mathcal{U}(x - \sigma, x + \sigma)$ και άλλες. Σε αυτές τις περιπτώσεις, η παράμετρος κλίμακας πρέπει να επιλεγθεί με ιδιαίτερη προσοχή. Αν η παράμετρος κλίμακας της κατανομής πρότασης έχει μεγάλη τιμή, οδηγούμαστε σε αλγορίθμους με υψηλά ποσοστά αποδοχής αλλά αργή σύγκλιση ενώ αν έχει μικρή τιμή έχουμε χαμηλά ποσοστά αποδοχής με γρηγορότερη σύγκλιση. Διάφορες τεχνικές ευρέσεως του βέλτιστου ποσοστού αποδοχής είχαν προταθεί στη βιβλιογραφία (Besag and Green, 1993, Besag et al. 1995), αλλά πρώτοι οι Roberts et al. (1997) δημοσίευσαν θεωρητικά αποτελέσματα για τη βέλτιστη τιμή της παραμέτρου κλίμακας για τον αλγόριθμο MH με κατανομή πρότασης την κανονική. Απέδειξαν ότι για πολυδιάστατες κατανομές-στόχους που αποτελούνται από ανεξάρτητες και ισόνομες συνιστώσες, ο ρυθμός αποδοχής που βελτιστοποιεί την αποτελεσματικότητα του αλγορίθμου είναι 0.234. Ακολούθως διάφοροι συγγραφείς μελέτησαν το ρυθμό αποδοχής σε πιο γενικές περιπτώσεις και κατέληξαν σε αντίστοιχα αποτελέσματα με αυτά των Roberts et al. (1997) (δες Breyer and Roberts, 2000, Roberts and Rosenthal, 2001, Neal and Roberts, 2006, Bédard, 2006). Το πρώτο άρθρο στη βιβλιογραφία που δίνει διαφορετικά αποτελέσματα από αυτά των Roberts et al. (1997), είναι των Bédard and Rosenthal (2007) το οποίο περιγράφει συνθήκες κάτω από τις οποίες ο βέλτιστος ρυθμός αποδοχής είναι διαφορετικός από το 0.234 ακόμα και στην περίπτωση που η κατανομή-στόχος αποτελείται από ανεξάρτητες και ισόνομες συνιστώσες (δες επίσης Bédard, 2008, και τις αναφορές εκεί).

Ο τυχαίος περίπατος MH είναι ειδική περίπτωση του συμμετρικού MH όπου η κατανομή πρότασης είναι συμμετρική, δηλαδή ισχύει $q(y, z) = q(z, y)$. Σε αυτήν την περίπτωση, η πιθανότητα αποδοχής παίρνει τη μορφή

$$a(y, z) = \min \left\{ 1, \frac{\pi(z)}{\pi(y)} \right\}.$$

Να σημειωθεί ότι σε αυτήν τη μορφή διατυπώθηκε ο αλγόριθμος για πρώτη φορά από τους Metropolis et al. (1953).

2.2.2 Δειγματολήπτης Gibbs

Ο δειγματολήπτης Gibbs εισήχθη από τους Geman and Geman (1984). Σε εκείνο το άρθρο, η μέθοδος εφαρμόστηκε για τη μπεύζιανή μελέτη τυχαίων πεδίων Gibbs (Gibbs random fields) σε ένα διακριτό πρόβλημα επεξεργασίας εικόνας χωρίς όμως να ολοκληρωθεί. Το άρθρο βασίστηκε σε εκείνα των Metropolis et al. (1953), Hastings (1970) και Peskun (1973). Οι Gelfand and Smith (1990) με τη σειρά τους, χρησιμοποίησαν το δειγματολήπτη Gibbs δίνοντας νέα ώθηση στις μπεύζιανές μεθόδους. Στο σημείο αυτό θα πρέπει να αναφέρουμε ότι και παλαιότερα άρθρα, όπως αυτά των Besag (1974, 1986), Tanner and Wong (1987), Besag and Clifford (1989) και Qian and Titterton (1990) είχαν προτείνει παρόμοιες λύσεις, αλλά δεν είχαν βρει αντίστοιχη ανταπόκριση στη στατιστική κοινότητα.

Περιγραφή του αλγορίθμου

Έστω ότι η κατανομή-στόχος π είναι p -διάστατη με $p \geq 2$. Για ένα τυχαίο διάνυσμα $\mathbf{X} = (X_1, \dots, X_p) \sim \pi$ έστω π_i η δεσμευμένη κατανομή της X_i δοθεισών όλων των υπολοίπων, δηλαδή

$$X_i | X_1 = x_1, \dots, X_{i-1} = x_{i-1}, X_{i+1} = x_{i+1}, \dots, X_p = x_p \sim \pi_i(x_i | x_1, \dots, x_{i-1}, x_{i+1}, \dots, x_p), \quad i = 1, \dots, p.$$

Οι π_1, \dots, π_p καλούνται *πλήρεις δεσμευμένες κατανομές (full conditional distributions)*. Ο δειγματολήπτης Gibbs προσομοιώνει διαδοχικά τις X_1, \dots, X_p ως εξής:

Αλγόριθμος 2.3. Δειγματολήπτης Gibbs

0. Θέσε $X^0 = (x_1^0, \dots, x_p^0)$
 1. Στο χρόνο t δοθέντος $X^{t-1} = (x_1^{t-1}, \dots, x_p^{t-1})$ προσομοίωσε

$$X_1^t \sim \pi_1(x_1 | x_2^{t-1}, x_3^{t-1}, \dots, x_p^{t-1})$$

$$X_2^t \sim \pi_2(x_2 | x_1^t, x_3^{t-1}, \dots, x_p^{t-1})$$

$$\vdots$$

$$X_p^t \sim \pi_p(x_p | x_1^t, x_2^t, \dots, x_{p-1}^t)$$
 2. Θέσε $t = t + 1$ και πήγαινε στο Βήμα 1.
-

Η ακολουθία που προκύπτει είναι προσομοίωση μίας αλυσίδας Markov. Πράγματι, για την προσομοίωση του $\mathbf{X}^t = (X_1^t, \dots, X_p^t)$ έχουν χρησιμοποιηθεί μόνο οι τιμές του $\mathbf{X}^{t-1} = (X_1^{t-1}, \dots, X_p^{t-1})$, επομένως η κατάσταση \mathbf{X}^t εξαρτάται μόνο από την \mathbf{X}^{t-1} και όχι από τις προηγούμενες καταστάσεις της ακολουθίας. Η πυκνότητα πιθανότητας μετάβασης της αλυσίδας είναι

$$K((x_1^{t-1}, x_2^{t-1}, \dots, x_p^{t-1}), (x_1^t, x_2^t, \dots, x_p^t)) = \pi_1(x_1^t | x_2^{t-1}, x_3^{t-1}, \dots, x_p^{t-1}) \times \pi_2(x_2^t | x_1^t, x_3^{t-1}, \dots, x_p^{t-1}) \times \dots \times \pi_p(x_p^t | x_1^t, x_2^t, \dots, x_{p-1}^t). \quad (2.17)$$

Η στάσιμη κατανομή της αλυσίδας Markov με πυρήνα μετάβασης (2.17) είναι η π . Για να το δούμε αυτό, ας υποθέσουμε ότι $\mathbf{X}^{t-1} \sim \pi$. Τότε,

$$\begin{aligned} (X_1^t, X_2^{t-1}, \dots, X_p^{t-1}) &\sim \int_{x_1^{t-1}} \pi_1(x_1^t | x_2^{t-1}, \dots, x_p^{t-1}) \pi(x_1^{t-1}, x_2^{t-1}, \dots, x_p^{t-1}) dx_1^{t-1} \\ &= \pi_1(x_1^t | x_2^{t-1}, \dots, x_p^{t-1}) \pi(x_2^{t-1}, \dots, x_p^{t-1}) \\ &= \pi(x_1^t, x_2^{t-1}, \dots, x_p^{t-1}), \end{aligned}$$

όπου $\pi(x_2^{t-1}, \dots, x_p^{t-1})$ συμβολίζει την πυκνότητα της περιθωριακής κατανομής των $X_2^{t-1}, \dots, X_p^{t-1}$. Επομένως, το τυχαίο διάνυσμα $(X_1^t, X_2^{t-1}, \dots, X_p^{t-1})$ ακολουθεί την κατανομή π . Συνεχίζοντας έτσι, μπορούμε να διαπιστώσουμε ότι

$$(X_1^t, \dots, X_i^t, X_{i+1}^{t-1}, \dots, X_p^{t-1}) \sim \pi \quad \text{για κάθε } i = 1, \dots, p-1.$$

Ολοκληρώνοντας τέλος και ως προς x_p^{t-1} , καταλήγουμε στο ότι $\mathbf{X}^t = (X_1^t, \dots, X_p^t) \sim \pi$, πράγμα που σημαίνει ότι η π είναι η στάσιμη κατανομή της αλυσίδας.

Βλέπουμε ότι ο δειγματολήπτης Gibbs χρησιμοποιεί μόνο τις πλήρεις δεσμευμένες κατανομές προκειμένου να προσομοιώσει μία ακολουθία Markov με οριακή κατανομή την κατανομή-στόχο. Επομένως, ακόμη και σε προβλήματα μεγάλης διάστασης, όλες οι προσομοιώσεις είναι δυνατόν να γίνουν από μονοδιάστατες κατανομές, κάτι που είναι ένα σημαντικό πλεονέκτημα. Σε πολλά όμως προβλήματα οι πλήρεις δεσμευμένες κατανομές δεν είναι διαθέσιμες σε κλειστή μορφή, γι' αυτό καταφεύγουμε σε *υβριδικές μορφές* του δειγματολήπτη Gibbs.

Ορισμός 2.5. Ένας υβριδικός δειγματολήπτης Gibbs είναι ένας δειγματολήπτης Gibbs όπου τουλάχιστον μία προσομοίωση από την αντίστοιχη πλήρη δεσμευμένη κατανομή έχει αντικατασταθεί από ένα βήμα MH.

Η γενική μορφή του υβριδικού δειγματολήπτη Gibbs είναι η εξής:

Αλγόριθμος 2.4. Υβριδικός δειγματολήπτης Gibbs

0. Θέσε $X^0 = (x_1^0, \dots, x_p^0)$.

1. Στο χρόνο t δοθέντος $X^{t-1} = (x_1^{t-1}, \dots, x_p^{t-1})$, για $i = 1, 2, \dots, p$

- Προσομοίωσε $z_i \sim q_i(z_i | x_1^t, \dots, x_{i-1}^t, x_i^{t-1}, x_{i+1}^{t-1}, \dots, x_p^{t-1})$.

- Θέσε $x_i^t = z_i$ με πιθανότητα

$$\alpha(x_i^{t-1}, z_i) = \min \left\{ 1, \frac{\pi_i(z_i | x_1^t, \dots, x_{i-1}^t, x_{i+1}^{t-1}, \dots, x_p^{t-1})}{\pi_i(x_i^{t-1} | x_1^t, \dots, x_{i-1}^t, x_{i+1}^{t-1}, \dots, x_p^{t-1})} \times \frac{q_i(x_i^{t-1} | x_1^t, \dots, x_{i-1}^t, z_i, x_{i+1}^{t-1}, \dots, x_p^{t-1})}{q_i(z_i | x_1^t, \dots, x_{i-1}^t, x_i^{t-1}, x_{i+1}^{t-1}, \dots, x_p^{t-1})} \right\}$$

διαφορετικά θέσε $x_i^t = x_i^{t-1}$.

2. Θέσε $t = t + 1$ και πήγαινε στο Βήμα 1.

Να σημειωθεί ότι στην ειδική περίπτωση όπου

$$q_i(z_i | x_1^t, \dots, x_{i-1}^t, x_i^{t-1}, x_{i+1}^{t-1}, \dots, x_p^{t-1}) = \pi_i(z_i | x_1^t, \dots, x_{i-1}^t, x_{i+1}^{t-1}, \dots, x_p^{t-1})$$

για κάποιο i , τότε η προτεινόμενη τιμή z_i γίνεται αποδεκτή με πιθανότητα ένα. (Αυτό θα είναι ένα βήμα του τυπικού δειγματολήπτη Gibbs.)

Μπορεί ναδειχτεί ότι η αλυσίδα Markov που προκύπτει από έναν υβριδικό δειγματολήπτη Gibbs έχει την κατανομή-στόχο ως οριακή κατανομή. Παρ' όλο που η απόδειξη δεν είναι δύσκολη, είναι κουραστικό να την παρακολουθήσει κανείς λόγω των πολλών δεικτών στους συμβολισμούς και γι' αυτόν το λόγο παραλείπεται.

2.2.3 Ανεξάρτητοι δειγματολήπτες με γεωμετρικά βάρη

Με τον όρο *ανεξάρτητοι δειγματολήπτες* αναφερόμαστε σε σχήματα προσομοίωσης όπου οι παραγόμενες τυχαίες μεταβλητές είναι ανεξάρτητες. Σε κάθε παραγόμενη τυχαία μεταβλητή αντιστοιχεί ένα βάρη το οποίο ισούται με το πλήθος των διαδοχικών επαναλήψεων της στην τελική ακολουθία. Οι Sahu and Zhigljavsky (2003) και ο Gåsemyr (2002) κατασκευάζουν ανεξάρτητους δειγματολήπτες με γεωμετρικά βάρη με αποτέλεσμα οι προκύπτουσες ακολουθίες να είναι αλυσίδες Markov.

Ο ανεξάρτητος δειγματολήπτης των Sahu and Zhigljavsky (2003) μπορεί να περιγραφεί ως εξής. Έστω $Z = (Z_n)_{n \in \mathbb{N}}$ μία ακολουθία που αποτελείται από ανεξάρτητες και ισόνομες τυχαίες μεταβλητές από κάποια κατανομή πρότασης

\tilde{g} . Στο Z_n αντιστοιχίζεται ένα τυχαίο βάρος ξ_n το οποίο ακολουθεί γεωμετρική κατανομή με συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας

$$P(\xi_n = m | Z_n = z) = \frac{1}{1 + \kappa \tilde{w}(z)} \left\{ \frac{\kappa \tilde{w}(z)}{1 + \kappa \tilde{w}(z)} \right\}^m, \quad m = 0, 1, 2, \dots,$$

όπου $\tilde{w}(z) = \pi(z)/\tilde{g}(z)$. Να σημειωθεί ότι αν $\xi_n = 0$ τότε το αντίστοιχο Z_n δε συμμετέχει καθόλου στην ακολουθία, με άλλα λόγια απορρίπτεται.

Αλγόριθμος 2.5. Ανεξάρτητος δειγματολήπτης Sahu and Zhigljavsky

- 0 Θέσε $n = 1, m = 0$
- 1 Προσομοίωσε $Z_n \sim \tilde{g}(\cdot)$
- 2 Προσομοίωσε $\xi_n \sim \mathcal{G}e(\{1 + \kappa \tilde{w}(Z_n)\}^{-1})$ και αν $\xi_n > 0$ θέσε $X_{m+1}, \dots, X_{m+\xi_n} = Z_n$ και $m = m + \xi_n$
- 3 Αν $n = N$ τότε σταμάτα, διαφορετικά θέσε $n = n + 1$ και πήγαινε στο Βήμα 1

Η ακολουθία $(X_n)_{n \in \mathbb{N}}$ που προκύπτει είναι μία αλυσίδα Markov με πυκνότητα μετάβασης

$$K(x_{n-1}, x_n) = \{1 - \alpha(x_{n-1})\} \delta_{x_{n-1}}(x_n) + \alpha(x_{n-1}) \frac{\tilde{g}(x_n) \{1 - \alpha(x_n)\}}{\int \{1 - \alpha(z)\} \tilde{g}(z) \mu(dz)}$$

όπου $\alpha(x) = \{1 + \kappa \tilde{w}(x)\}^{-1}$. Επί πλέον, αν

$$\tilde{w}^* = \sup_x \pi(x)/\tilde{g}(x) < \infty,$$

τότε

$$\|P(Y_t \in \cdot) - \pi\| \leq (1 + \kappa \tilde{w}^*)^{-t}, \quad t = 1, 2, \dots$$

Ο Gåsemyr (2002) γενίκευσε τον παραπάνω δειγματολήπτη τροποποιώντας τον κανόνα απόρριψης. Συγκεκριμένα, μετά την παραγωγή της $Z_n \sim \tilde{g}$, ο Gåsemyr αποδέχεται ή απορρίπτει αυτή την τιμή ανάλογα με το αποτέλεσμα μίας δοκιμής Bernoulli με πιθανότητα επιτυχίας $q(z_n)$. Αν η Z_n γίνει δεκτή τότε σταθμίζεται με ένα βάρος το οποίο ακολουθεί γεωμετρική κατανομή με συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας

$$P(\xi_n = m | Z_n = z) = a(z) \{1 - a(z)\}^{m-1}, \quad m = 1, 2, \dots,$$

όπου $a(z) \propto q(z)/\tilde{w}(z)$. Θέτοντας $a(z) = \{1 + \kappa \tilde{w}(z)\}^{-1}$ και $q(z) = \kappa \tilde{w}(z) \{1 +$

$\kappa\tilde{w}(z)\}^{-1}$ ο δειγματολήπτης του Gåsemyr συμπίπτει με αυτόν των Sahu and Zhigljavsky (2003). Ο Gåsemyr (2002) έδειξε ότι οι $q(z) = \min\{1, \kappa\tilde{w}(z)\}$ και $a(z) = \min\{1, 1/\kappa\tilde{w}(z)\}$ είναι βέλτιστες επιλογές, καθώς ελαχιστοποιούν την ασυμπτωτική διασπορά των εκτιμητών. Αν επί πλέον $\tilde{w}^* < \infty$, η αλυσίδα Markov είναι ομοιόμορφα εργοδική. Όταν $\kappa > 1/\tilde{w}^*$,

$$\|P(Y_t \in \cdot) - \pi\| \leq (1 - 1/\kappa\tilde{w}^*)^t, \quad t = 1, 2, \dots$$

Η περίπτωση $\kappa \leq 1/\tilde{w}^*$ αντιστοιχεί στο δειγματολήπτη απόρριψης οπότε έχουμε $Y_t \sim \pi, \forall t \in \mathbb{Z}_+$.

2.3 Άλλοι αλγόριθμοι

Εκτός από τους βασικούς αλγορίθμους MC και MCMC που αναφέρθηκαν στις προηγούμενες ενότητες υπάρχει πληθώρα άλλων σύνθετων τεχνικών για την προσομοίωση από κάποια κατανομή-στόχο π και την εκτίμηση μέσω τιμών της μορφής $E_\pi [h(X)]$.

Η μέθοδος Population Monte Carlo (PMC) που επινοήθηκε από τους Carré et al. (2004) είναι ένας συνδυασμός τεχνικών. Συγκεκριμένα, ο αλγόριθμος PMC δανείζεται από τους αλγορίθμους MCMC τον τρόπο κατασκευής της κατανομής πρότασης, από τον αλγόριθμο SIR τη στάθμιση και τη βελτίωση του δείγματος και από τη δειγματοληψία σπουδαιότητας την κατασκευή των εκτιμητών. Θα μπορούσαμε να πούμε ότι ο αλγόριθμος PMC είναι κατ' ουσίαν μία επαναληπτική δειγματοληψία σπουδαιότητας που σε κάθε επανάληψη αναπροσαρμόζει την κατανομή πρότασης και παράγει ένα δείγμα προσεγγιστικά κατανομημένο από την κατανομή-στόχο. Το δείγμα που παράγεται σε κάθε επανάληψη από τον αλγόριθμο PMC μπορεί να θεωρηθεί ως ένα τυπικό δείγμα δειγματοληψίας σπουδαιότητας. Ως εκ τούτου, η διαδικασία μπορεί να σταματήσει χωρίς να είναι απαραίτητος ο προσδιορισμός κάποιας περιόδου burn-in· τη χρονική στιγμή που η κατανομή πρότασης είναι μία καλή προσέγγιση της κατανομής-στόχου ο αλγόριθμος μπορεί να σταματήσει.

Υπάρχουν κάποιες ομοιότητες του αλγορίθμου PMC με προηγούμενες προτάσεις στη βιβλιογραφία και ειδικότερα με αυτές των Berzuini et al. (1997) και Gilks and Berzuini (2001). Αυτοί προτείνουν επίσης επαναληπτικές διαδικασίες με ένα βήμα επαναδειγματοληψίας βασισμένο στα βάρη σπουδαιότητας. Η βασική διαφορά τους με τον αλγόριθμο PMC είναι ότι χρησιμοποιούν ένα βήμα επαναδειγματοληψίας πριν την πρόταση της καινούργιας τιμής, με αποτέλεσμα να παραμένουν στο πλαίσιο των αλγορίθμων MCMC και να πρέπει να χρησιμοποιούν πυρήνα μετάβασης με στάσιμη κατανομή την κατανομή-στόχο. Επίσης

θα μπορούσαμε να πούμε ότι η προσέγγιση του Chorin (2002) είναι μία ειδική περίπτωση του αλγορίθμου PMC σε ένα μπεϋζιανό πλαίσιο, όπου η κατανομή πρότασης σε κάθε επανάληψη είναι η εκ των υστέρων κατανομή που συνδέεται με ένα μέρος των παρατηρηθέντων δεδομένων.

Μία γενικότερη κατηγορία τεχνικών είναι οι αλγόριθμοι Sequential Monte Carlo (SMC). Οι αλγόριθμοι SMC προσομοιώνουν ένα δείγμα από μία p -διάστατη ($p \geq 2$) κατανομή ακολουθιακά. Σε κάθε βήμα του αλγορίθμου προσομοιώνεται μία συνιστώσα της κατανομής-στόχου δεσμεύοντας στις ήδη προσομοιωμένες συνιστώσες. Αυτό γίνεται μέσω ενός πυρήνα μετάβασης για κάθε συνιστώσα ο οποίος έχει στάσιμη κατανομή την περιθωριακή κατανομή της. Στο προσομοιωμένο δείγμα γίνεται επαναδειγματοληψία πριν προχωρήσουμε στην επόμενη συνιστώσα, έτσι ώστε να εξασφαλίσουμε «καλές» τιμές για τη συνέχεια.

Ένα κοινό χαρακτηριστικό των δύο παραπάνω τεχνικών είναι η επαναδειγματοληψία. Η επαναδειγματοληψία είναι μια ιδιαίτερα χρονοβόρα διαδικασία και ισοδυναμεί με την προσομοίωση ενός τυχαίου διανύσματος από την πολυωνυμική κατανομή με πλήθος κατηγοριών ίσο με το μέγεθος του αρχικού δείγματος και πλήθος δοκιμών ίσο με τον αριθμό των παρατηρήσεων που θα έχουμε μετά την επαναδειγματοληψία. Για την προσομοίωση από την πολυωνυμική κατανομή έχει προταθεί στη βιβλιογραφία ένα μεγάλο πλήθος τεχνικών. Ο υπολογιστικός χρόνος για κάθε μία από αυτές τις τεχνικές εξαρτάται από το πλήθος των κατηγοριών ή/και το πλήθος των δοκιμών της πολυωνυμικής κατανομής με αποτέλεσμα οι αλγόριθμοι PMC και SMC να γίνονται υπολογιστικά «ασύμφοροι». Στο Κεφάλαιο 5 προτείνεται μία τεχνική δύο βημάτων η οποία μπορεί να προσαρμοστεί σε όλες τις ήδη γνωστές τεχνικές προσομοίωσης από την πολυωνυμική κατανομή και να βελτιώσει σημαντικά τον υπολογιστικό χρόνο και κατ' επέκταση το χρόνο υλοποίησης των παραπάνω τεχνικών.

Σταθμισμένα δείγματα ως ημιμαρκοδιανές διαδικασίες

Από τις διαφορές γεννιέται η πιο όμορφη αρμονία.

—*Ηράκλειτος (544-483 π.Χ)*

Τα μαθηματικά είναι η τέχνη να δίνεις το ίδιο όνομα σε διαφορετικά πράγματα.

—*Henri Poincaré (1854-1912)*

3.1 Εισαγωγή

Όπως έχουμε ήδη αναφέρει, εκτός από τον υπολογισμό ολοκληρωμάτων, ένας άλλος στόχος των μεθόδων προσομοίωσης είναι να παράγουν παρατηρήσεις από κάποια κατανομή-στόχο π . Ο λόγος γι' αυτό είναι ότι συχνά χρειάζεται να εκτιμηθούν χαρακτηριστικά της κατανομής-στόχου τα οποία δε μπορούν να εκφραστούν ως μέσες τιμές, για παράδειγμα να υπολογιστούν ποσοστημόρια, να βρεθεί ο αριθμός των κορυφών της ή να κατασκευαστεί ένα ιστόγραμμα της. Η δειγματοληψία σπουδαιότητας με μία πρώτη ματιά δεν πετυχαίνει αυτόν το στόχο, αφού παράγει όλες τις παρατηρήσεις από την κατανομή πρότασης g . Και όπως επισημαίνεται από τον Liu (1996),

“The distribution of samples obtained from importance sampling is, however, always biased from the target, and the distribution of that obtained from Metropolisized independent sampling ... practically differs from the target distribution.”

Μία μέθοδος που προσπαθεί να ξεπεράσει αυτό το μειονέκτημα είναι η μέθοδος SIR, την οποία παρουσιάσαμε στην Ενότητα 2.1.6. Καθώς $n \uparrow \infty$, η SIR παράγει ένα δείγμα προσεγγιστικά κατανεμημένο από την π .

Σε αυτήν την ενότητα θα αποδείξουμε ότι το παραγόμενο δείγμα από τη g συγκλίνει υπό μία έννοια στην κατανομή-στόχο π . Πιο συγκεκριμένα, θα ορίσουμε μία διαδικασία με άλματα (jump process) η οποία σχετίζεται με τη σταθμισμένη ακολουθία που προκύπτει και θα αποδείξουμε ότι αυτή συγκλίνει στην κατανομή-στόχο π .

Υπό αυτήν την οπτική, η δειγματοληψία σπουδαιότητας δε διαφέρει σημαντικά από τις τεχνικές MCMC. Θα δούμε μάλιστα ότι κάποιες από αυτές είναι ειδικές περιπτώσεις της διαδικασίας με άλματα που σχετίζεται με κάποια σταθμισμένη ακολουθία (για παράδειγμα ο αλγόριθμος MH, δες Ενότητα 3.3). Ως εκ τούτου, προκειμένου να προσομοιώσουμε ένα δείγμα προσεγγιστικά κατανομημένο από την π , η επαναδειγματοληψία δεν κρίνεται αναγκαία. Έτσι έχουμε σημαντική μείωση του υπολογιστικού χρόνου που χρειάζεται για την παραγωγή ενός δείγματος από την π , αφού η επαναδειγματοληψία είναι μία χρονοβόρα διαδικασία. Επίσης, υπό αυτήν την οπτική, η δειγματοληψία σπουδαιότητας μπορεί να θεωρηθεί ως μία γενική τεχνική προσομοίωσης και όχι μόνο ως μία μέθοδος εκτίμησης ολοκληρωμάτων.

3.2 Βασικοί ορισμοί

Μία από τις βασικές έννοιες στις οποίες στηριζόμαστε είναι αυτή των κατάλληλα σταθμισμένων δειγμάτων (properly weighted samples), η οποία εισήχθη αρχικά από τους Liu and Chen (1998) (δες επίσης Liu, 2001) ως γενίκευση της δειγματοληψίας σπουδαιότητας.

Ορισμός 3.1. Ένα σύνολο σταθμισμένων παρατηρήσεων $\{(X_i, \xi_i)\}_{i=1}^n$ λέγεται κατάλληλα σταθμισμένο ως προς μία κατανομή π αν για κάθε ολοκληρώσιμη συνάρτηση h , ισχύει

$$E\{\xi_i h(X_i)\} = \kappa E_\pi\{h(X_i)\}, \quad \text{για } i = 1, \dots, n, \quad (3.1)$$

όπου κ κάποια θετική σταθερά.

Ο Liu (2001) δίνει και τον ακόλουθο ισοδύναμο ορισμό.

Ορισμός 3.2. Ένα σύνολο σταθμισμένων παρατηρήσεων $\{(X_i, \xi_i)\}_{i=1}^n$ λέγεται κατάλληλα σταθμισμένο ως προς μία κατανομή π αν

$$E\{\xi_i | X_i = x\} = \kappa \pi(x)/g(x), \quad \text{για } i = 1, \dots, n, \quad (3.2)$$

όπου $X_i \sim g$ και κ κάποια θετική σταθερά.

Παρατήρηση 3.1. Έστω X_1, X_2, \dots η ακολουθία που προκύπτει από τη δειγματοληψία σπουδαιότητας με κατανομή-στόχο π και κατανομή πρότασης g . Σταθμίζοντας το κάθε X_i με το αντίστοιχο βάρος σπουδαιότητας $w(X_i) = \pi(X_i)/g(X_i)$,

βλέπουμε αμέσως ότι η ακολουθία $(X_n, w(X_n))_{n \geq 1}$ είναι κατάλληλα σταθμισμένη ως προς την π , αφού

$$E\{w(X_i)|X_i = x\} = w(x), \quad \text{για } i = 1, \dots, n.$$

□

Γενικά ισχύει το ακόλουθο:

Πρόταση 3.1. Αν $\{(X_i, \xi_i)\}_{i=1}^n$ είναι ένα κατάλληλα σταθμισμένο τυχαίο δείγμα, τότε

$$E(\xi_i) = \kappa$$

και

$$\text{Var}(\xi_i) = \kappa^2 \{E_\pi [(w(X_i)) - 1] + E_g \{\text{Var}(\xi_i|X_i)\}.$$

Απόδειξη. Χρησιμοποιώντας τις ιδιότητες των δεσμευμένων μέσων τιμών παίρνουμε

$$\begin{aligned} E(\xi_i) &= E_g \{E(\xi_i|X_i)\} \\ &= E_g \{\kappa w(X_i)\} \\ &= \int \kappa w(x_i) g(x_i) \mu(dx_i) \\ &= \kappa \end{aligned}$$

και

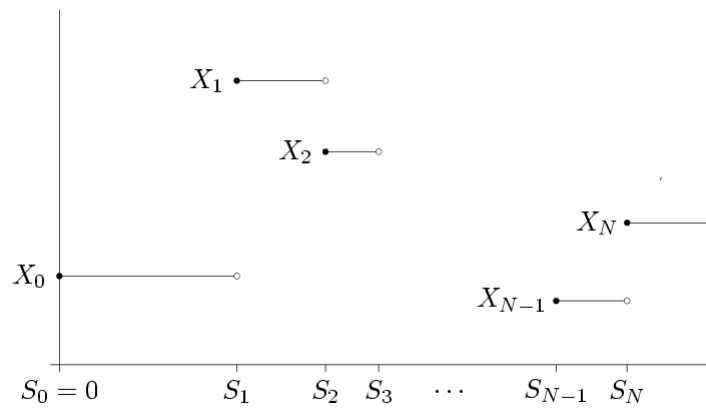
$$\begin{aligned} \text{Var}(\xi_i) &= \text{Var}_g \{E(\xi_i|X_i)\} + E_g \{\text{Var}(\xi_i|X_i)\} \\ &= \text{Var}_g \{\kappa w(X_i)\} + E_g \{\text{Var}(\xi_i|X_i)\} \\ &= E_g \{\kappa^2 w^2(X_i)\} - (E_g \{\kappa w(X_i)\})^2 + E_g \{\text{Var}(\xi_i|X_i)\} \\ &= \kappa^2 (E_\pi \{w(X_i)\} - 1) + E_g \{\text{Var}(\xi_i|X_i)\} \end{aligned}$$

για και $E_g \{w^2(X_i)\} = E_\pi \{w(X_i)\}$. □

Στη συνέχεια θα δώσουμε τον ορισμό-κλειδί αυτού του κεφαλαίου. Θα ορίσουμε τη διαδικασία με άλματα (jump process) που σχετίζεται με τις κατάλληλα σταθμισμένες ακολουθίες.

Ορισμός 3.3. Ας θεωρήσουμε μία σταθμισμένη ακολουθία $(X_n, \xi_n)_{n \in \mathbb{Z}_+} = ((X_0, \xi_0), (X_1, \xi_1), \dots)$ όπου τα ξ_i είναι θετικά βάρη. Έστω

$$S_0 = 0, \quad S_n = \sum_{i=0}^{n-1} \xi_i, \quad n \geq 1,$$



Σχήμα 3.1: Η διαδικασία με άλματα που σχετίζεται με τη σταθμισμένη ακολουθία $(X_n, \xi_n)_{n \in \mathbb{Z}_+}$.

και

$$N_t = \sup\{n : S_n \leq t\}, \quad t \geq 0. \quad (3.3)$$

Τότε η στοχαστική διαδικασία $Y = (Y_t)_{t \geq 0}$ που ορίζεται από τη σχέση

$$Y_t = X_{N_t}, \quad t \geq 0,$$

θα λέγεται διαδικασία με άλματα που σχετίζεται με τη σταθμισμένη ακολουθία $(X_n, \xi_n)_{n \in \mathbb{Z}_+}$.

Η διαδικασία $(S_n)_{n \in \mathbb{Z}_+}$ έχει τη μορφή ανανεωτικής διαδικασίας. Στην ειδική περίπτωση όπου τα ξ_i είναι ανεξάρτητες τυχαίες μεταβλητές, η $(S_n)_{n \in \mathbb{Z}_+}$ είναι μία καθαρή ανανεωτική διαδικασία. Η $(N_t)_{t \geq 0}$ είναι η αντίστοιχη διαδικασία απαρίθμησης η οποία μετράει τον αριθμό των αλμάτων της διαδικασίας $(Y_t)_{t \geq 0}$ στο χρονικό διάστημα $[0, t]$.

Στο Σχήμα 3.1 απεικονίζεται η διαδικασία με άλματα που σχετίζεται με τη σταθμισμένη ακολουθία $(X_n, \xi_n)_{n \in \mathbb{Z}_+}$. Σύμφωνα με τον Ορισμό 3.3, το βάρος ξ_i παριστάνει τώρα το χρόνο παραμονής της διαδικασίας $(Y_t)_{t \geq 0}$ στην κατάσταση X_i .

Πρόταση 3.2. Έστω $X = (X_n)_{n \in \mathbb{Z}_+}$ μία Harris εργοδική αλυσίδα Markov με χώρο καταστάσεων $(\mathcal{X}, \mathcal{B}(\mathcal{X}))$ και στάσιμη κατανομή g . Έστω επίσης ότι το ξ_n εξαρτάται μόνο από το X_n και ισχύει

$$\mathbb{E}(\xi_n | X_n = x) = \kappa w(x) = \kappa \pi(x) / g(x)$$

για κάποια θετική σταθερά κ . Τότε η διαδικασία με άλματα $(Y_t)_{t \geq 0}$ που σχετίζεται με

τη σταθμισμένη ακολουθία $(X_n, \xi_n)_{n \in \mathbb{Z}_+}$ συγκλίνει ασθενώς στην π , δηλαδή ισχύει

$$\lim_{t \uparrow \infty} \mathbb{P}(Y_t \in A) = \pi(A), \quad \forall A \in \mathcal{B}(\mathcal{X}). \quad (3.4)$$

Απόδειξη. Η απόδειξη προκύπτει από τη θεωρία των ημιμαρκοβιανών διαδικασιών (δες Παράρτημα Α και Limnios and Orrişan, 2000). Υπό αυτές τις συνθήκες, η Y είναι μία ημιμαρκοβιανή διαδικασία με εμφυτευμένη αλυσίδα Markov $(X_n)_{n \in \mathbb{Z}_+}$ και χρόνους παραμονής $(\xi_n)_{n \in \mathbb{Z}_+}$. Επομένως, για κάθε $A \in \mathcal{B}(\mathcal{X})$,

$$\begin{aligned} \lim_{t \uparrow \infty} \mathbb{P}(Y_t \in A) &= \frac{\int_A \mathbb{E}(\xi|x)g(x)\mu(dx)}{\int_{\mathcal{X}} \mathbb{E}(\xi|x)g(x)\mu(dx)} \\ &= \frac{\int_A \kappa w(x)g(x)\mu(dx)}{\int_{\mathcal{X}} \kappa w(x)g(x)\mu(dx)} \\ &= \frac{\int_A \pi(x)\mu(dx)}{\int_{\mathcal{X}} \pi(x)\mu(dx)} \\ &= \pi(A). \end{aligned}$$

□

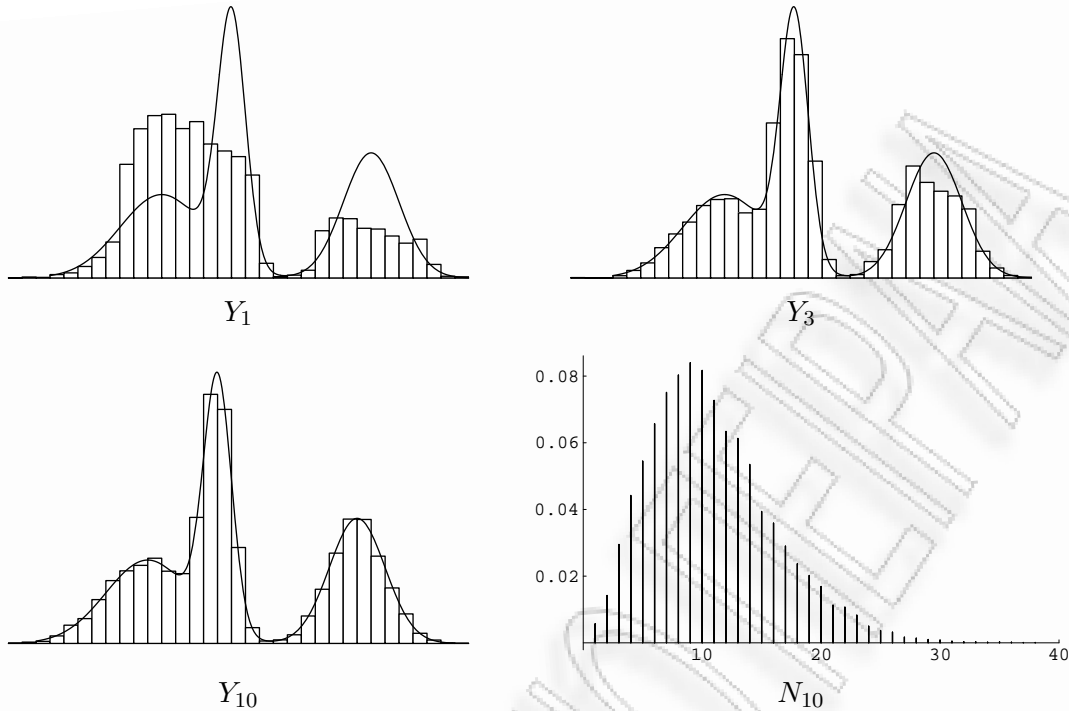
Μία ειδική περίπτωση που έχει ιδιαίτερο ενδιαφέρον προκύπτει όταν $\xi_n \equiv \kappa w(X_n)$ για κάποια σταθερά $\kappa > 0$. Τότε ισχύει το ακόλουθο:

Πόρισμα 3.1. *Αν $(X_n)_{n \in \mathbb{Z}_+}$ είναι μία Harris εργοδική αλυσίδα Markov με στάσιμη κατανομή την g , τότε η διαδικασία με άλματα που σχετίζεται με τη σταθμισμένη ακολουθία $(X_n, \kappa w(X_n))_{n \in \mathbb{Z}_+}$ έχει την π ως οριακή κατανομή.*

Το Πόρισμα 3.1 ουσιαστικά αποδεικνύει τη σύγκλιση της σταθμισμένης ακολουθίας που προκύπτει από την κλασική δειγματοληψία σπουδαιότητας στην κατανομή-στόχο π , αφού κάθε ακολουθία ανεξάρτητων τυχαίων μεταβλητών από την g σχηματίζει τετριμμένα μία αλυσίδα Markov με στάσιμη κατανομή την g . Στην πραγματικότητα, η σύγκλιση στην κατανομή-στόχο ισχύει για τη διαδικασία με άλματα $(Y_t)_{t \geq 0}$ που σχετίζεται με την κατάλληλα σταθμισμένη ακολουθία $(X_n, w(X_n))_{n \in \mathbb{Z}_+}$. Επί πλέον, από τα παραπάνω συνάγεται ότι η σύγκλιση ισχύει και στη γενικότερη περίπτωση κατά την οποία η ακολουθία $(X_n)_{n \in \mathbb{Z}_+}$ αποτελεί μία Harris εργοδική αλυσίδα Markov.

Παράδειγμα 3.1. Έστω ότι η κατανομή-στόχος είναι η μείξη κανονικών κατανομών

$$\pi \sim \frac{1}{3} \mathcal{N}(0, 9) + \frac{1}{3} \mathcal{N}(5, 1) + \frac{1}{3} \mathcal{N}(15, 4)$$



Σχήμα 3.2: Ιστογράμματα των τιμών Y_1 , Y_3 , Y_{10} και N_{10} από $m = 10000$ ανεξάρτητες δειγματοληψίες σπουδαιότητας με κατανομή στόχο $\pi \sim \frac{1}{3}\mathcal{N}(0, 9) + \frac{1}{3}\mathcal{N}(5, 1) + \frac{1}{3}\mathcal{N}(15, 4)$ και κατανομή πρότασης $g \sim \mathcal{C}(0, 10)$.

ενώ η κατανομή πρότασης g είναι η κατανομή Cauchy $\mathcal{C}(0, 10)$, δηλαδή αυτή που έχει παράμετρο θέσης 0 και παράμετρο κλίμακας 10. Έχουμε τρέξει $m = 10000$ ανεξάρτητους δειγματοληψίες σπουδαιότητας και για κάθε έναν από αυτούς έχουμε καταγράψει τις τιμές Y_1 , Y_3 και Y_{10} της διαδικασίας με άλματα που σχετίζεται με τις σταθμισμένες ακολουθίες τους. Συγκεκριμένα, έχουμε ορίσει

$$Y_t = \begin{cases} X_1 & \text{αν } 0 \leq t < w(X_1) \\ X_2 & \text{αν } w(X_1) \leq t < w(X_1) + w(X_2) \\ \vdots & \vdots \\ X_n & \text{αν } \sum_{j=1}^{n-1} w(X_j) \leq t < \sum_{j=1}^n w(X_j) \\ \vdots & \vdots \end{cases}$$

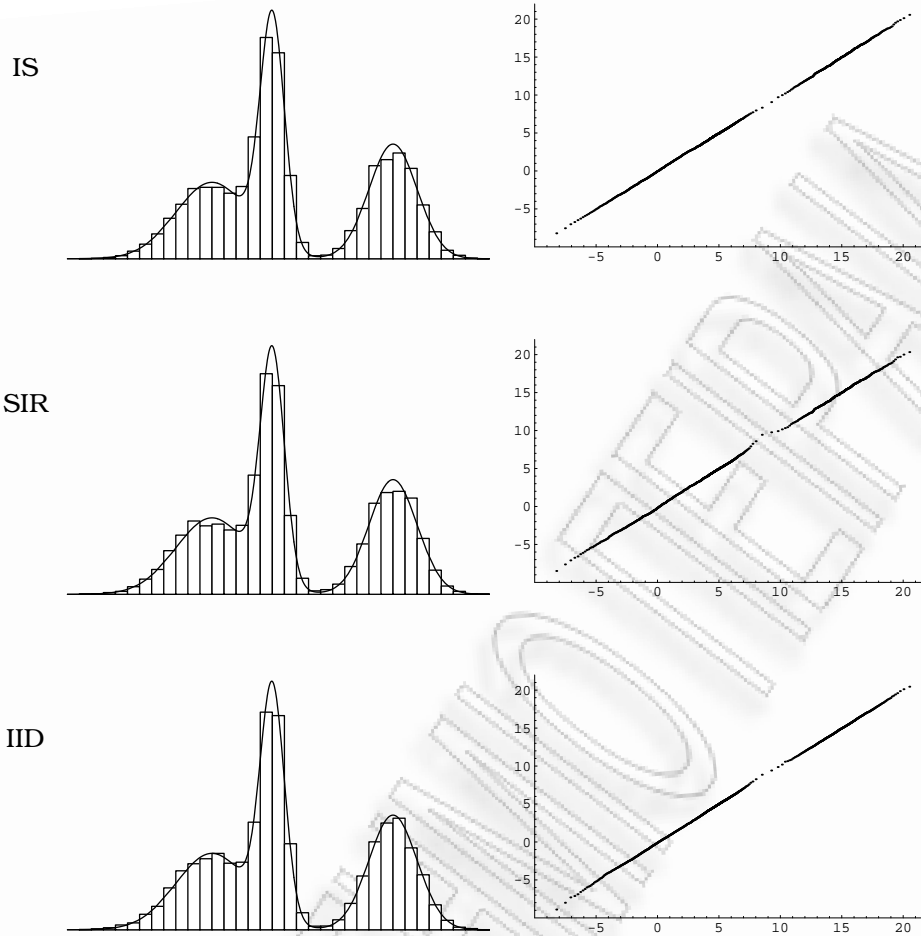
(Να σημειωθεί ότι σε σχέση με τον Ορισμό 3.3, η ακολουθία ξεκινάει από το X_1 αντί για το X_0 .) Επίσης, προκειμένου να σχηματίσουμε μία ιδέα για το πλήθος των ανεξάρτητων προσομοιώσεων από την κατανομή πρότασης που απαιτούνται ώστε να πάρουμε την παρατήρηση Y_{10} , έχουμε καταγράψει την τιμή N_{10} για κάθε έναν ανεξάρτητο δειγματοληψία.

Στο Σχήμα 3.2 βλέπουμε τα αντίστοιχα ιστογράμματα. Παρατηρούμε ότι η Y συγκλίνει πολύ γρήγορα στην π , αφού ήδη το ιστογράμμα της Y_{10} δε διαφέ-

ρει σημαντικά από την κατανομή-στόχο. Επίσης, η εκτίμηση Monte Carlo της ποσότητας $E(N_{10})$ είναι 11.8 με 95% διάστημα εμπιστοσύνης [11.7, 11.9]. Αυτό υποδεικνύει ότι κατά μέσο όρο απαιτείται ιδιαίτερα μικρό δείγμα (κατά μέσο όρο δώδεκα προσομοιώσεις) από την κατανομή πρότασης προκειμένου να επιτευχθεί σύγκλιση στην κατανομή-στόχο. \square

Όπως έχουμε ήδη αναφέρει, μία εναλλακτική μέθοδος για την προσομοίωση ενός προσεγγιστικά π -κατανεμημένου δείγματος μέσω κατάλληλα σταθμισμένων δειγμάτων είναι η SIR. Μέσω αυτής της τεχνικής οι μη σημαντικές παρατηρήσεις της αρχικής ακολουθίας απορρίπτονται ενώ οι σημαντικές επαναλαμβάνονται κάποιες φορές. Έτσι, η διαδικασία SIR δίνει στις αρχικές παρατηρήσεις νέα (ακέραια) βάρη. Οι δεσμευμένες μέσες τιμές των καινούργιων βαρών δοθείσης όλης της αρχικής ακολουθίας είναι ανάλογες των αντίστοιχων αρχικών βαρών διαιρεμένων με το άθροισμά τους. Αυτό είναι συνέπεια του ότι τα νέα βάρη προκύπτουν από την πολυωνυμική κατανομή με πιθανότητες $w(X_i) / \sum_j w(X_j)$, $i = 1, \dots, n$, οπότε η δεσμευμένη μέση τιμή τους θα είναι ανάλογη αυτής της ποσότητας. Επομένως, υπό τον όρο ότι το αρχικό δείγμα είναι μεγάλο, ο SIR παράγει ένα προσεγγιστικά κατάλληλα σταθμισμένο δείγμα ως προς την κατανομή-στόχο. Ωστόσο είναι προφανές ότι αν το αρχικό δείγμα δεν περιλαμβάνει «καλές» τιμές, η επαναδειγματοληψία δε θα συνεισφέρει σημαντικά. Από την άλλη πλευρά, αν το σταθμισμένο δείγμα δίνει μία καλή προσέγγιση της κατανομής-στόχου, το ίδιο θα ισχύει και για την ακολουθία που προκύπτει από τον αλγόριθμο SIR. Γενικά λοιπόν, η ποιότητα των παραγόμενων δειγμάτων και από τις δύο παραπάνω τεχνικές αναμένεται να είναι παρόμοια. Γι' αυτό, αν ο σκοπός της προσομοίωσης είναι η διερεύνηση της κατανομής-στόχου και όχι η αποθήκευση «καλών» τιμών της, ο αλγόριθμος SIR δεν προσφέρει τίποτα περισσότερο από την (απλή) δειγματοληψία σπουδαιότητας.

Παράδειγμα 3.2. Προκειμένου να πάρουμε μία ιδέα για την ποιότητα του σταθμισμένου δείγματος που παράγεται από τη δειγματοληψία σπουδαιότητας και του (μη σταθμισμένου) δείγματος που προκύπτει από τον αλγόριθμο SIR, θεωρούμε ξανά τις κατανομές του Παραδείγματος 3.1. Ένα τυχαίο δείγμα μεγέθους 10000 παρατηρήσεων από την κατανομή Cauchy $\mathcal{C}(0, 10)$ σταθμίστηκε κατάλληλα ως προς την κατανομή-στόχο. Επίσης, 10000 παρατηρήσεις επελέγησαν έπειτα από επαναδειγματοληψία με επανατοποθέτηση από το αρχικό δείγμα με πιθανότητες ανάλογες των βαρών τους. Στο Σχήμα 3.3 βλέπουμε το ιστόγραμμα του δείγματος μετά την επαναδειγματοληψία και το ιστόγραμμα του σταθμισμένου δείγματος που αντιστοιχεί στο ίδιο εύρος. Αυτό είναι το εύρος που αντιστοιχεί στο 64% του σταθμισμένου δείγματος, με τη συνολική μάζα πιθανότητας που δεν εμφανίζεται στο ιστόγραμμα να είναι περίπου 5×10^{-5} . Δεξιά από κάθε ιστόγραμμα απεικονίζεται το αντίστοιχο QQ-plot. Επί πλέον, στο Σχήμα 3.3 περιλαμβάνονται για



Σχήμα 3.3: Τα ιστογράμματα και τα QQ-plots των δειγμάτων τα οποία προσομοιώθηκαν από μία δειγματοληψία σπουδαιότητας (IS) και από έναν SIR με κατανομή-στόχο και κατανομή πρότασης αυτές του Παραδείγματος 3.1. Το τρίτο ιστογράμμο και QQ-plot (IID) αντιστοιχεί σε ένα τυχαίο δείγμα από την κατανομή-στόχο.

λόγους σύγκρισης το ιστογράμμο και το QQ-plot ενός τυχαίου δείγματος από την κατανομή-στόχο. Είναι σαφές ότι τα τρία σχήματα δεν παρουσιάζουν καμμιά σημαντική διαφορά. \square

Υπό τις υποθέσεις της Πρότασης 3.1, ο σταθμισμένος μέσος

$$\hat{h}_n = \frac{\sum_{i=0}^{n-1} \xi_i h(X_i)}{\sum_{i=0}^{n-1} \xi_i} \quad (3.5)$$

συγκλίνει σχεδόν βεβαίως στην $E_\pi(h)$ για κάθε $h \in \mathcal{L}(\pi)$. Επίσης, σύμφωνα με τον Ορισμό 3.3, ο εκτιμητής (3.5) μπορεί να γραφεί στη μορφή

$$\hat{h}_n = \frac{1}{S_n} \int_0^{S_n} h(Y_s) \nu(ds),$$

όπου ν είναι είτε το μέτρο Lebesgue είτε το μέτρο απαρίθμησης ανάλογα με το αν τα βάρη είναι συνεχή ή διακριτά. Μπορούμε να παρατηρήσουμε ότι στην περίπτωση του κλασσικού εκτιμητή IS (δηλαδή όταν $\xi_n \equiv \kappa w(X_n)$), αυτό δικαιολογεί περισσότερο τη χρήση του εκτιμητή \hat{h}_n^{IS} στη (2.6) αντί του \bar{h}_n^{IS} στη (2.4).

Σε περιπτώσεις που ισχύει το Κεντρικό Οριακό Θεώρημα, η ασυμπτωτική διασπορά του σταθμισμένου μέσου (3.5) είναι

$$\sigma^2(h) = \sigma_{IS}^2(h) + \frac{1}{\kappa^2} E_g[\text{Var}\{\xi|X\}\{h(X) - E_\pi(h)\}^2], \quad (3.6)$$

όπου $\sigma_{IS}^2(h)$ η ασυμπτωτική διασπορά του εκτιμητή IS

$$\hat{h}_n^{IS} = \frac{\sum_{i=0}^{n-1} w(X_i)h(X_i)}{\sum_{i=0}^{n-1} w(X_i)}.$$

Αυτό προκύπτει από τη μέθοδο δέλτα (δες Παράρτημα Β). Επειδή

$$E_g[\text{Var}\{\xi|X\}\{h(X) - E_\pi(h)\}^2] \geq 0,$$

με την ισότητα να ισχύει αν και μόνο αν $P\{\text{Var}(\xi|X) = 0\} = 1$, η τυχαιοποίηση των βαρών αυξάνει τη διασπορά ενός εκτιμητή (εξαιρείται η τετριμμένη περίπτωση όπου η h είναι σταθερή συνάρτηση). Επομένως, ο εκτιμητής που προκύπτει από τη δειγματοληψία σπουδαιότητας είναι πάντοτε πιο ακριβής. Γενικά, όσο μικρότερη είναι η διασπορά των βαρών τόσο πιο ακριβής είναι ο εκτιμητής.

Η Πρόταση 3.2 μας δίνει ένα ισχυρότερο αποτέλεσμα από αυτό της σύγκλισης των μέσων Cesàro

$$\hat{h}_t = t^{-1} \int_0^t h(Y_s) \nu(ds)$$

στην $E_\pi(h)$. Εξασφαλίζει τη σύγκλιση κατά κατανομή της παραγόμενης ακολουθίας κατά τρόπο αντίστοιχο με των μεθόδων MCMC. Καθώς η σχεδόν βέβαιη σύγκλιση του \hat{h}_t (και του \hat{h}_n) στην $E_\pi(h)$ είναι συνέπεια αυτής της ιδιότητας, η Πρόταση 3.2 περιγράφει τον πραγματικό τρόπο σύγκλισης του σταθμισμένου δείγματος στην κατανομή-στόχο. Ως εκ τούτου, κάθε κατάλληλα σταθμισμένο δείγμα, όπως για παράδειγμα αυτό που προκύπτει από την κλασσική δειγματοληψία σπουδαιότητας, μπορεί να θεωρηθεί αντάξιος ανταγωνιστής αυτών που προκύπτουν από τις τεχνικές MCMC.

3.3 Στάσιμα σταθμισμένα δείγματα

Έστω $p(v|x)\nu(dv)$ η δεσμευμένη κατανομή του ξ_i δοθέντος $X_i = x$, όπου ν είναι το μέτρο Lebesgue αν έχουμε απολύτως συνεχή βάρη ή το μέτρο απαρίθμησης αν

έχουμε διακριτά βάρη. Έστω επίσης

$$\bar{P}(u|x) = \int_{[u,\infty)} p(v|x)\nu(dv) = P(\xi \geq u|x).$$

Σε αυτήν την ενότητα θα συζητήσουμε μία τροποποίηση της συνηθισμένης μεθόδου στάθμισης κάτω από την οποία είναι δυνατόν να πάρουμε στάσιμα σταθμισμένα δείγματα από την κατανομή-στόχο π . Με τον όρο *στάσιμα σταθμισμένα δείγματα* εννοούμε σταθμισμένα δείγματα για τα οποία η διαδικασία με άλματα $(Y_t)_{t \geq 0}$ που σχετίζεται με αυτά βρίσκεται από κάποια στιγμή $t_0 \geq 0$ και έπειτα σε στασιμότητα, δηλαδή ισχύει

$$Y_t \sim \pi \quad \text{για κάθε } t \geq t_0.$$

Έστω $(Y_t)_{t \geq 0}$ μία ημιμαρκοβιανή αλυσίδα με εμφυτευμένη αλυσίδα Markov $(X_n)_{n \in \mathbb{Z}_+}$ και χρόνους παραμονής $(\xi_n)_{n \in \mathbb{Z}_+}$. Έστω επίσης S_n , N_t και $(V_t)_{t \geq 0}$ η ανανεωτική διαδικασία, η διαδικασία απαρίθμησης και ο υπολειπόμενος χρόνος μέχρι την επόμενη ανανέωση αντίστοιχα. Τότε, η $(Y_t, V_t)_{t \geq 0}$ είναι μία διαδικασία Markov με στάσιμη κατανομή $\pi(y)p_e(v|y)$, όπου

$$p_e(v|y) = \frac{\bar{P}(v|y)}{\kappa w(y)}$$

(δες Παράρτημα Α).

Έστω ότι μπορούμε να παράγουμε $X_0 \sim \pi$. Τότε αν το X_0 σταθμιστεί από κάποιο ξ_0 το οποίο έχει παραχθεί από την $p_e(\cdot|x_0)$ (αντί από την $p(\cdot|x_0)$), η διαδικασία $(Y_t, V_t)_{t \geq 0}$ ξεκινάει σε στασιμότητα οπότε $Y_t \sim \pi$, $\forall t \geq 0$. Τότε, ο εκτιμητής

$$\hat{h}_t = t^{-1} \int_0^t h(Y_s)\nu(ds) = t^{-1} \left\{ \sum_{j=0}^{N_t-1} \xi_j h(X_j) + (t - S_{N_t})h(X_{N_t}) \right\}$$

είναι αμερόληπτος εκτιμητής της $E_\pi(h)$ για κάθε (σταθερό) χρόνο $t > 0$. Αυτό προκύπτει από το ότι

$$E \left(\int_0^t h(Y_s)\nu(ds) \right) = \int_0^t E[h(Y_s)]\nu(ds) = \int_0^t E_\pi(h)\nu(ds) = tE_\pi(h)$$

Στην ειδική περίπτωση της δειγματοληψίας σπουδαιότητας όπου $\xi_i = \kappa w(X_i)$, ισχύει

$$p_e(v|y) \sim \mathcal{U}(0, \kappa w(y)),$$

αφού

$$p_e(v|y) = \frac{\bar{P}(v|y)}{\kappa w(y)} = \frac{P(\kappa w(y) \geq v|y)}{\kappa w(y)} = \begin{cases} \frac{1}{\kappa w(y)}, & \text{αν } 0 \leq v \leq \kappa w(y), \\ 0, & \text{διαφορετικά.} \end{cases}$$

Επομένως, αν $X_0 \sim \pi$, $U \sim \mathcal{U}(0, 1)$ και X_1, X_2, \dots είναι ακολουθία ανεξάρτητων τυχαίων μεταβλητών από την g (ή μία εργοδική αλυσίδα Markov με στάσιμη κατανομή την g), ο εκτιμητής \hat{h}_t γίνεται

$$\hat{h}_t = t^{-1} \left\{ U \kappa w(X_0) h(X_0) + \sum_{j=1}^{N_t-1} \kappa w(X_j) h(X_j) + (t - S_{N_t}) h(X_{N_t}) \right\}.$$

Γενικά, η προσομοίωση από την $p_e(v|y)$ μπορεί να γίνει σε δύο στάδια. Αρχικά παράγουμε μία παρατήρηση

$$T \sim q(t|y) \propto tp(t|y)$$

και έπειτα παράγουμε V από την ομοιόμορφη κατανομή στο $(0, T)$ (συνεχής περίπτωση) ή στο $\{1, \dots, T\}$ (διακριτή περίπτωση). Αυτό επιβεβαιώνεται από το ακόλουθο:

Λήμμα 3.1. Η κατανομή της V δοθέντος $Y = y$ είναι η $p_e(v|y)$.

Απόδειξη. Η από κοινού κατανομή των V, T δοθέντος $Y = y$ είναι

$$V, T|Y = y \sim \frac{1}{t} \times \frac{tp(t|y)}{E(t|y)} \mathbf{I}(0 < v \leq t)$$

οπότε ολοκληρώνοντας ως προς t έχουμε

$$V|Y = y \sim \int_{[v, \infty)} \frac{p(t|y)}{E(T|y)} v(dt) = \frac{\bar{P}(v|y)}{E(T|y)}.$$

□

Παράδειγμα 3.3. (α) Αν η p είναι μία κατανομή γάμμα με παράμετρο μορφής α , τότε και η q θα είναι επίσης γάμμα με παράμετρο μορφής $\alpha + 1$.

(β) Αν η p είναι κατανομή Poisson τότε η q θα είναι περικεκομμένη (truncated) κατανομή Poisson με την ίδια παράμετρο.

3.4 Η περίπτωση των εκθετικών βαρών

Σε αυτήν την ενότητα θα θεωρήσουμε την περίπτωση όπου δεσμεύοντας στο $X_n = x$, το ξ_n ακολουθεί εκθετική κατανομή με μέση τιμή $\kappa w(x)$. Τότε, η διαδικασία με άλματα $(Y_t)_{t \geq 0}$ που σχετίζεται με την κατάλληλα σταθμισμένη ακολουθία

$(X_n, \xi_n)_{n \geq 0}$ είναι μία διαδικασία Markov συνεχούς χρόνου. Μία ειδική περίπτωση ενός τέτοιου δειγματοληπτικού σχήματος είναι ο αλγόριθμος MCMC γεννήσεων-θανάτων (birth and death MCMC algorithm: δες Stephens, 2000, Cappé et al., 2003).

Πιο συγκεκριμένα, έστω ότι θέλουμε ένα δείγμα συνολικού μήκους N και η κατανομή πρότασης είναι η $g(\cdot|\cdot)$ με στάσιμη κατανομή την g . Τότε ο αλγόριθμος θα πάρει την ακόλουθη γενική μορφή:

Αλγόριθμος 3.1.

- 0 Θέσε $n = 1$ και $t_0 = 0$
 - 1 Προσομοιώσε $Z_n \sim g(\cdot|Z_{n-1})$
 - 2 Προσομοιώσε $\xi_n \sim \mathcal{E}(\kappa w(Z_n))$, θέσε $t_n = t_{n-1} + \xi_n$ και $X_t = Z_n, t \in [t_{n-1}, \min\{t_n, N\})$.
 - 3 Αν $t_n \geq N$ τότε σταμάτησε διαφορετικά θέσε $n = n + 1$ και επίστρεψε στο Βήμα 1
-

Στο ακόλουθο θεώρημα, το οποίο έχει ενδιαφέρον και πέρα από το πλαίσιο της προσομοίωσης, αποδεικνύεται ότι αν μία μαρκοβιανή αλυσίδα $(X_n)_{n \in \mathbb{Z}_+}$ είναι ομοιόμορφα εργοδική και επί πλέον η συνάρτηση $w(x)$ είναι άνω φραγμένη, τότε η αντίστοιχη μαρκοβιανή διαδικασία με άλματα είναι επίσης ομοιόμορφα εργοδική.

Θεώρημα 3.1. Έστω $(X_n, \xi_n)_{n \in \mathbb{Z}_+}$ μία σταθμισμένη ακολουθία η οποία ικανοποιεί τις παρακάτω δύο συνθήκες:

1. Η ακολουθία $X = (X_n)_{n \in \mathbb{Z}_+}$ είναι μία εργοδική αλυσίδα Markov με στάσιμη κατανομή την g και κατανομή μετάδοσης την $g(\cdot|\cdot)$ και ικανοποιεί την ακόλουθη συνθήκη Doeblin. Υπάρχει μία πυκνότητα πιθανότητας g_0 και μία μη αρνητική σταθερά $\beta \in (0, 1)$ τέτοια ώστε

$$g(z|y) \geq \beta g_0(z), \quad \forall z, y \in \mathcal{X}. \quad (3.7)$$

2. Η δεσμευμένη κατανομή του ξ_n δοθέντος $X_n = x$ είναι εκδεικτική με μέση τιμή $\kappa w(x) = \kappa \pi(x)/g(x)$, όπου π είναι μία πυκνότητα πιθανότητας και $w^* = \sup_{x \in \mathcal{X}} w(x) < \infty$.

Τότε, για τη διαδικασία Markov $Y = (Y_t)_{t \geq 0}$ που σχετίζεται με τη σταθμισμένη ακολουθία $(X_n, \xi_n)_{n \in \mathbb{Z}_+}$ ισχύει

$$\|P(Y_t \in \cdot) - \pi\| \leq \exp\{-\beta t/\kappa w^*\}, \quad t \geq 0. \quad (3.8)$$

Προκειμένου να αποδείξουμε το Θεώρημα 3.1 θα χρειαστούμε το ακόλουθο Λήμμα.

Λήμμα 3.2. Υπό τις συνθήκες του Θεωρήματος 3.1 ισχύει

$$\lim_{t \downarrow 0} \left\{ 1 - \beta(1 - e^{-t/\kappa w^*}) \int_{\mathcal{X}} e^{-t/\kappa w(z)} g_0(z) \mu(dz) \right\}^{1/t} = \exp\{-\beta/\kappa w^*\}. \quad (3.9)$$

Απόδειξη. Έστω

$$a(t) = 1 - \beta(1 - e^{-t/\kappa w^*}) \int_{\mathcal{X}} e^{-t/\kappa w(z)} g_0(z) \mu(dz).$$

Δεδομένου ότι

$$\int_{\mathcal{X}} g_0(z) \mu(dz) = 1,$$

προσθαφαιρώντας την ποσότητα $\beta(1 - e^{-t/\kappa w^*})$ καταλήγουμε στο ότι

$$a(t) = 1 - \beta(1 - e^{-t/\kappa w^*}) + \beta(1 - e^{-t/\kappa w^*}) \int_{\mathcal{X}} (1 - e^{-t/\kappa w(z)}) g_0(z) \mu(dz).$$

Παρατηρούμε ότι η συνθήκη (3.7) υποδηλώνει ότι

$$g(z) \geq \beta g_0(z), \quad \forall z \in \mathcal{X},$$

αφού

$$g(z) = \int_{y \in \mathcal{X}} g(z|y) g(y) \mu(dy) \geq \int_{y \in \mathcal{X}} \beta g_0(z) g(y) \mu(dy) = \beta g_0(z), \quad \forall z.$$

Επομένως,

$$\beta \int_{\mathcal{X}} (1 - e^{-t/\kappa w(z)}) g_0(z) \mu(dz) \leq \int_{\mathcal{X}} (1 - e^{-t/\kappa w(z)}) g(z) \mu(dz) = P_g(\xi_0 \leq t).$$

Για $t \downarrow 0$, ισχύει $P_g(\xi_0 \leq t) \downarrow 0$, άρα

$$\beta \int_{\mathcal{X}} (1 - e^{-t/\kappa w(z)}) g_0(z) \mu(dz) = o(1).$$

Επίσης ισχύει $1 - e^{-t/\kappa w^*} = O(t)$, αφού

$$\lim_{t \downarrow 0} \frac{1 - e^{-t/\kappa w^*}}{t} = \frac{1}{\kappa w^*}.$$

Επομένως,

$$\beta(1 - e^{-t/\kappa w^*}) \int_{\mathcal{X}} (1 - e^{-t/\kappa w(z)}) g_0(z) \mu(dz) = o(t)$$

και συνεπώς,

$$1 - \beta(1 - e^{-t/\kappa w^*}) \leq a(t) \leq 1 - \beta(1 - e^{-t/\kappa w^*}) + o(t).$$

Υψώνοντας στην $1/t$ και παίρνοντας τα όρια για $t \downarrow 0$ προκύπτει το επιθυμητό αποτέλεσμα. \square

Είμαστε πλέον έτοιμοι να αποδείξουμε το Θεώρημα 3.1.

Απόδειξη του Θεωρήματος 3.1. Έστω $\delta > 0$. Αφού η $(Y_t)_{t \geq 0}$ είναι μία διαδικασία Markov, ο αντίστοιχος δ -σκελετός της, δηλαδή η ακολουθία $(Y_{n\delta})_{n \in \mathbb{Z}_+}$, σχηματίζει μία αλυσίδα Markov με πυρήνα μετάβασης

$$P^\delta(y, A) = P\{Y_\delta \in A | Y_0 = y\}$$

(δες Παράρτημα A). Είναι

$$\begin{aligned} P^\delta(y, A) &= P\{\xi_0 > \delta, y \in A | X_0 = y\} + \\ &\quad \sum_{m=1}^{\infty} P\{S_m \leq \delta < S_{m+1}, X_m \in A | X_0 = y\} \\ &\geq P\{\xi_0 \leq \delta, \xi_1 > \delta, X_1 \in A | X_0 = y\} \\ &= P\{\xi_0 \leq \delta | X_0 = y\} P\{\xi_1 > \delta, X_1 \in A | X_0 = y\} \\ &= \{1 - e^{-\delta/\kappa w(y)}\} \int_A e^{-\delta/\kappa w(z)} g(z|y) \mu(dz) \\ &\geq \{1 - e^{-\delta/\kappa w^*}\} \int_A e^{-\delta/\kappa w(z)} \beta g_0(z) \mu(dz) \\ &= \varepsilon_\delta Q_\delta(A), \quad \forall y \in \mathcal{X}, \end{aligned}$$

όπου

$$\varepsilon_\delta = \beta \{1 - e^{-\delta/\kappa w^*}\} \int_{\mathcal{X}} e^{-\delta/\kappa w(z)} g_0(z) \mu(dz)$$

και

$$Q_\delta(A) = \frac{\int_A e^{-\delta/\kappa w(z)} g_0(z) \mu(dz)}{\int_{\mathcal{X}} e^{-\delta/\kappa w(z)} g_0(z) \mu(dz)}.$$

Βλέπουμε λοιπόν ότι η αλυσίδα $(Y_{n\delta})_{n \in \mathbb{Z}_+}$ ικανοποιεί τη συνθήκη Doeblin. Αυτό συνεπάγεται ότι

$$\|P(Y_{n\delta} \in \cdot) - \pi\| \leq (1 - \varepsilon_\delta)^n, \quad \forall n \in \mathbb{Z}_+,$$

(δες Παράρτημα A). Θέτοντας τώρα $t = n\delta$ παίρνουμε

$$\|P(Y_t \in \cdot) - \pi\| \leq \{(1 - \varepsilon_{t/n})^{n/t}\}^t, \quad \forall n \in \mathbb{Z}_+.$$

Τέλος, επειδή

$$\lim_{n \uparrow \infty} (1 - \varepsilon_{t/n})^{n/t} = \lim_{t \downarrow 0} (1 - \varepsilon_t)^{1/t}$$

το αποτέλεσμα προκύπτει από το Λήμμα 3.2. \square

Παρατήρηση 3.2. Στην ειδική περίπτωση που η $(X_n)_{n \in \mathbb{Z}_+}$ είναι ακολουθία ανεξάρτητων g -κατανομημένων τυχαίων μεταβλητών, η συνθήκη (3.7) ισχύει για $\beta = 1$ και $g_0 = g$. Τότε η νόρμα ολικής μεταβολής δεν είναι μεγαλύτερη από $\exp\{-t/\kappa w^*\}$, δηλαδή ισχύει

$$\|\mathbb{P}(Y_t \in \cdot) - \pi\| \leq \exp\{-t/\kappa w^*\}, \quad t \geq 0. \quad (3.10)$$

\square

Παράδειγμα 3.4. Ας θεωρήσουμε πάλι τις κατανομές του Παραδείγματος 3.1 για τις οποίες μπορούμε να υπολογίσουμε αριθμητικά ότι $w^* \approx 6.905$. Έστω $X = (X_n)_{n \in \mathbb{Z}_+}$ η ακολουθία ανεξάρτητων τυχαίων μεταβλητών που ακολουθούν την κατανομή Cauchy $\mathcal{C}(0, 10)$ και η δεσμευμένη κατανομή του ξ_n δοθέντος του $X_n = x_n$ είναι εκθετική με μέση τιμή $w(x_n)$. Τότε από την Πρόταση 3.1 έχουμε ότι για τη διαδικασία με άλματα $(Y_t)_{t \geq 0}$ που σχετίζεται με αυτήν τη σταθμισμένη ακολουθία ισχύει

$$\|\mathbb{P}(Y_t \in \cdot) - \pi\| \leq \exp\{-t/6.905\}, \quad t \geq 0.$$

Για παράδειγμα, για $t \geq 31.8$ η νόρμα ολικής μεταβολής είναι μικρότερη από 0.01, πράγμα που σημαίνει ότι η κατανομή της Y_t έχει πλησιάσει πολύ κοντά στην οριακή κατανομή π .

3.5 Στάσιμες ημιμαρκοβιανές διαδικασίες

Αν η $(X_n)_{n \in \mathbb{Z}_+}$ είναι μία ακολουθία ανεξάρτητων και ισόνομων τυχαίων μεταβλητών με κατανομή g και ο ρυθμός κινδύνου (hazard rate) $p(v|y)/\bar{P}(v|y)$ του ξ είναι ομοιόμορφα φραγμένος μακριά από το μηδέν, δηλαδή αν

$$\varepsilon_* = \inf_{v,y} \frac{p(v|y)}{\bar{P}(v|y)} > 0, \quad (3.11)$$

τότε η μέθοδος Αποδοχής-Απόρριψης μπορεί να δώσει μία στάσιμη ημιμαρκοβιανή διαδικασία (δες Παράρτημα Α). Πράγματι, θέτοντας

$$p_e(v|y) = \frac{\bar{P}(v|y)}{\kappa w(y)},$$

έχουμε ότι αν (x, ξ) είναι μία παρατήρηση από την $g(x)p(\xi|x)$ τότε

$$\frac{\pi(x)p_e(\xi|x)}{g(x)p(\xi|x)} = \frac{\bar{P}(\xi|x)}{\kappa p(\xi|x)} \leq \frac{1}{\kappa \varepsilon_*}.$$

Επομένως μπορούμε να εφαρμόσουμε τη μέθοδο Αποδοχής-Απόρριψης με κατανομή-στόχο την $\pi(x)p_e(\xi|x)$ και κατανομή πρότασης την $g(x)p(\xi|x)$. Μετά την προσομοίωση της (x, ξ) από την κατανομή πρότασης, παράγουμε $U \sim \mathcal{U}(0, 1)$ και αν ισχύει

$$U \leq \varepsilon_* \bar{P}(\xi|x)/p(\xi|x)$$

τότε η (x, ξ) μπορεί να θεωρηθεί ως παρατήρηση από την $\pi(x)p_e(\xi|x)$.

Αν ισχύουν οι προϋποθέσεις για την υλοποίηση της παραπάνω μεθόδου Αποδοχής-Απόρριψης, μπορούμε να αποδείξουμε το ακόλουθο.

Λήμμα 3.3. Αν η (3.11) ισχύει, τότε

- (i) $w^* = \sup_{x \in \mathcal{X}} w(x) < \infty$ και
- (ii) υπάρχει $a > 1$ τέτοιο ώστε

$$E_g\{a^\xi\} = \iint a^v g(y)p(v|y)\nu(dv)\mu(dy) < \infty.$$

Απόδειξη. (i) Έχουμε ότι

$$\frac{p(v|y)}{\bar{P}(v|y)} \geq \varepsilon_*, \quad \forall v, y. \quad (3.12)$$

Άρα

$$\begin{aligned} p(v|y) &\geq \varepsilon_* \bar{P}(v|y), \quad \forall v, y \\ \Rightarrow \int p(v|y)\nu(dv) &\geq \varepsilon_* \int \bar{P}(v|y)\nu(dv), \quad \forall y \\ \Leftrightarrow 1 &\geq \varepsilon_* \int \kappa w(y)p_e(v|y)\nu(dv), \quad \forall y \\ \Leftrightarrow 1 &\geq \varepsilon_* \kappa w(y), \quad \forall y \\ \Leftrightarrow w(y) &\leq 1/\kappa \varepsilon_*, \quad \forall y, \end{aligned}$$

οπότε $w^* = \sup_y w(y) \leq 1/\kappa \varepsilon_* < \infty$.

(ii) Αρχικά θα αποδείξουμε μέσω επαγωγής ότι

$$E\{\xi^m|y\} \leq m!/\varepsilon_*^m, \quad m \geq 1. \quad (3.13)$$

Από το (i) έχουμε ότι η (3.13) ισχύει για $m = 1$. Έστω ότι ισχύει για κάποιο m . Θα δείξουμε ότι ισχύει και για $m + 1$. Πράγματι,

$$\begin{aligned}
E\{\xi^m|y\} &= \int v^m p(v|y) \nu(dv) \\
&\geq \varepsilon_* \int v^m \bar{P}(v|y) \nu(dv) \quad (\text{από την (3.12)}) \\
&= \varepsilon_* \int v^m \left(\int_{[v,\infty)} p(u|y) \nu(du) \right) \nu(dv) \\
&= \varepsilon_* \int \left(\int_{[0,u]} v^m \nu(dv) \right) p(u|y) \nu(du) \\
&\geq \varepsilon_* \int \left(\int_{v=0}^u v^m dv \right) p(u|y) \nu(du) \quad (\text{γιατί } \int_{[0,u]} v^m \nu(dv) \geq \int_0^u v^m dv) \\
&= \varepsilon_* \int \frac{u^{m+1}}{m+1} p(u|y) \nu(du) \\
&= \frac{\varepsilon_*}{m+1} E\{\xi^{m+1}|y\}, \quad \forall y,
\end{aligned}$$

οπότε

$$E\{\xi^{m+1}|y\} \leq (m+1)!/\varepsilon_*^{m+1},$$

άρα ισχύει και για $m+1$. Τώρα,

$$\begin{aligned}
E\{a^\xi|y\} &= E\{e^{\xi \log a}|y\} \\
&= E\left\{ \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(\log a)^m \xi^m}{m!} |y \right\} \\
&= \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(\log a)^m}{m!} E\{\xi^m|y\} \\
&\leq \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(\log a)^m}{m!} \frac{m!}{\varepsilon_*^m} \\
&= \frac{1}{1 - \log a/\varepsilon_*} \\
&< \infty
\end{aligned}$$

για κάθε $a \in [1, \exp\{\varepsilon_*\})$. Προφανώς, το ίδιο ισχύει και για την

$$E_g\{a^\xi\} = E_g[E\{a^\xi|Y\}],$$

πράγμα που αποδεικνύει τον ισχυρισμό. \square

Σύμφωνα με το Λήμμα 3.2(i), αν μπορεί να εφαρμοστεί η μέθοδος Αποδοχής-Απόρριψης για το (x, ξ) με κατανομή-στόχο $\pi(x)p_e(\xi|x)$ και κατανομή πρότασης την $g(x)p(\xi|x)$, θα μπορεί να εφαρμοστεί και για το x , πράγμα που σημαίνει ότι δεν κερδίζουμε κάτι παραπάνω προσομοιώνοντας το ζευγάρι (x, ξ) . Όμως, το

Λήμμα 3.2(ii) μπορεί να χρησιμοποιηθεί για τον υπολογισμό ενός φράγματος της νόρμας ολικής μεταβολής μεταξύ της Y_t και της στάσιμης κατανομής π .

Θεώρημα 3.2. Έστω $(X_n)_{n \in \mathbb{Z}_+}$ μία ακολουθία ανεξάρτητων και ισόνομων τυχαίων μεταβλητών με κατανομή g και έστω ότι ισχύει η (3.11). Τότε για τη διαδικασία με άλματα $Y = (Y_t)_{t \geq 0}$ που σχετίζεται με την κατάλληλα σταθμισμένη ακολουθία $(X_n, \xi_n)_{n \in \mathbb{Z}_+}$, ισχύουν τα εξής:

(i) Υπάρχει ένας σχεδόν βεβαίως πεπερασμένος χρόνος $\tau \geq 0$, τέτοιος ώστε

$$Y_t \sim \pi \quad \text{για } t \geq \tau.$$

(ii) Η νόρμα ολικής μεταβολής μεταξύ της κατανομής της Y_t και της π συγκλίνει εκθετικά στο μηδέν ως προς το t , δηλαδή υπάρχει ένα $\rho > 1$ τέτοιο ώστε

$$\|P(Y_t \in \cdot) - \pi\| = O(\rho^{-t}).$$

Απόδειξη. (i) Σε κάθε βήμα, μετά την παρατήρηση του (X_n, ξ_n) , παράγουμε μία ανεξάρτητη τυχαία μεταβλητή $U_n \sim \mathcal{U}(0, 1)$. Έστω N το πρώτο $n \in \mathbb{Z}_+$ για το οποίο ισχύει

$$U_n \leq \varepsilon_* \bar{P}(\xi_n | x_n) / p(\xi_n | x_n).$$

Τότε, από τη μέθοδο Αποδοχής-Απόρριψης έχουμε

$$(Y_{S_N}, V_{S_N}) = (X_N, \xi_N) \sim \pi(\cdot) p_e(\cdot | \cdot).$$

Καθώς η τελευταία είναι η στάσιμη κατανομή της αλυσίδας Markov $(Y_t, V_t)_{t \geq 0}$, θα ισχύει

$$Y_t \sim \pi \quad \text{για κάθε } t \geq \tau = S_N.$$

Θα αποδείξουμε τώρα ότι ο χρόνος τ είναι πεπερασμένος με πιθανότητα ένα. Από τη μέθοδο Αποδοχής-Απόρριψης έχουμε ότι $N + 1 \sim \mathcal{G}(\kappa \varepsilon_*)$. Επί πλέον, από την Πρόταση 2.3 τα (X, ξ) τα οποία έχουν απορριφθεί έχουν δεσμευμένη πυκνότητα

$$r(x, v) = \frac{g(x)p(v|x) - \kappa \varepsilon_* \pi(x)p_e(v|x)}{1 - \kappa \varepsilon_*} = g(x) \frac{p(v|x) - \varepsilon_* \bar{P}(v|x)}{1 - \kappa \varepsilon_*}.$$

Να σημειωθεί ότι για κάθε a για το οποίο $\varphi_g(a) = E_g\{a^\xi\} < \infty$, ισχύει επίσης $\varphi_r(a) = E_r\{a^\xi\} < \infty$, αφού $r(x, v) \leq g(x)p(v|x)/(1 - \kappa \varepsilon_*)$ για όλα τα x, v . Επειδή η συνάρτηση $\varphi_r(a)$ είναι συνεχής και αύξουσα για $a \geq 1$ με $\varphi_r(1) = 1$, θα υπάρχει $\rho > 1$ τέτοιο ώστε $\varphi_r(\rho)(1 - \kappa \varepsilon_*) < 1$. Τότε,

$$\begin{aligned}
P(\tau > t) &= P(S_N > t) \\
&\leq \rho^{-t} E\{\rho^{S_N}\} \\
&= \rho^{-t} E\{E(\rho^{\sum_{i=1}^N \xi_i} | N)\} \\
&= \rho^{-t} E\{\prod_{i=1}^N E(\rho^{\xi_i} | N)\} \\
&= \rho^{-t} E\{\varphi_r(\rho)^N\} \\
&= \frac{\kappa \varepsilon_* \rho^{-t}}{1 - \varphi_r(\rho) + \kappa \varepsilon_* \varphi_r(\rho)} \tag{3.14}
\end{aligned}$$

το οποίο συγκλίνει στο μηδέν καθώς $t \uparrow \infty$. Αυτό συνεπάγεται

$$P(\tau < \infty) = 1.$$

(ii) Έστω A ένα μετρήσιμο σύνολο. Τότε, εφαρμόζοντας το Θεώρημα Ολικής Πιθανότητας παίρνουμε

$$\begin{aligned}
|P(Y_t \in A) - \pi(A)| &= |P(Y_t \in A | \tau > t)P(\tau > t) + \\
&\quad P(Y_t \in A | \tau \leq t)P(\tau \leq t) - \pi(A)|. \tag{3.15}
\end{aligned}$$

Από το (i) έχουμε ότι

$$P(Y_t \in A | \tau \leq t) = \pi(A)$$

οπότε η (3.15) γίνεται

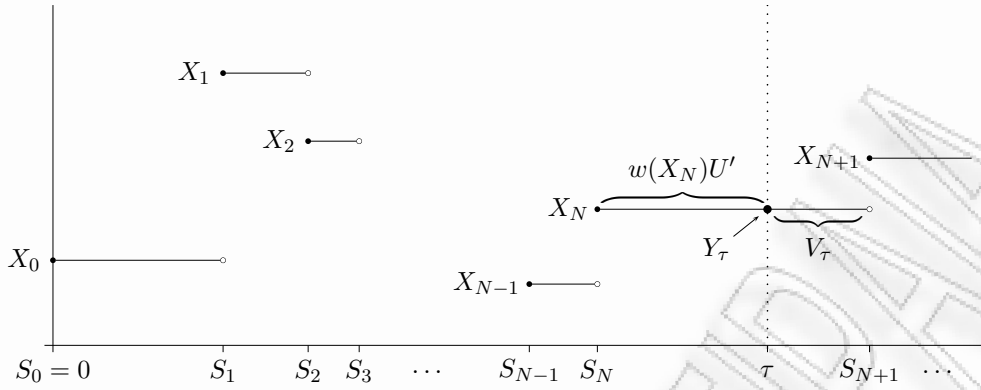
$$\begin{aligned}
|P(Y_t \in A) - \pi(A)| &= |P(Y_t \in A | \tau > t)P(\tau > t) + \pi(A)P(\tau \leq t) - \pi(A)| \\
&= |P(Y_t \in A | \tau > t)P(\tau > t) - \pi(A)(1 - P(\tau \leq t))| \\
&= |P(Y_t \in A | \tau > t)P(\tau > t) - \pi(A)P(\tau > t)| \\
&= |P(\tau > t) [P(Y_t \in A | \tau > t) - \pi(A)]| \\
&= P(\tau > t) |P(Y_t \in A | \tau > t) - \pi(A)| \\
&\leq P(\tau > t),
\end{aligned}$$

με την τελευταία ανισότητα να ισχύει λόγω του ότι $|P(Y_t \in A | \tau > t) - \pi(A)| \leq 1$. Τότε,

$$\|P(Y_t \in \cdot) - \pi\| = \sup_{A \in \mathcal{B}(\mathcal{X})} |P(Y_t \in A) - \pi(A)| \leq P(\tau > t) = O(\rho^{-t})$$

λόγω της (3.14). □

Το Θεώρημα 3.2 δεν καλύπτει την περίπτωση του δειγματολήπτη σπουδαιό-



Σχήμα 3.4: Προσδιορισμός του χρόνου τ για την ακολουθία των βαρών σπουδαιότητας.

τητας, αφού τότε $p(v|x) \sim \delta_{\kappa w(x)}(v)$ καθώς $p_e(v|x) \sim \mathcal{U}(0, \kappa w(x))$. Παρ' όλ' αυτά, μπορούμε να διατυπώσουμε ένα αντίστοιχο αποτέλεσμα για τον κλασικό δειγματολήπτη σπουδαιότητας.

Θεώρημα 3.3. Έστω $(X_n)_{n \in \mathbb{Z}_+}$ μία ακολουθία ανεξάρτητων και ισόνομων τυχαίων μεταβλητών με κατανομή g σταθμισμένη με $\xi_i = w(x_i) = \pi(x_i)/g(x_i)$, $i = 1, \dots, n$. Αν $w^* = \sup_x w(x) < \infty$, τότε για τη διαδικασία με άλματα $Y = (Y_t)_{t \geq 0}$ ισχύει $\|\mathbb{P}(Y_t \in \cdot) - \pi\| \rightarrow 0$ με εκθετική ταχύτητα.

Απόδειξη. Όπως και στην απόδειξη του Θεωρήματος 3.2, αφού παραχθεί το X_n , παράγουμε επί πλέον μία ανεξάρτητη τυχαία μεταβλητή $U_n \sim \mathcal{U}(0, 1)$ και συμβολίζουμε με N την πρώτη φορά που συμβαίνει $U_n \leq w(X_n)/w^*$. Τη χρονική στιγμή N παράγουμε ακόμα μία ανεξάρτητη $U' \sim \mathcal{U}(0, 1)$ και θέτουμε $\tau = S_N + w(X_N)U'$. Τότε $Y_\tau = X_N \sim \pi$ (από τη μέθοδο Αποδοχής-Απόρριψης) και $V_\tau = w(X_N)(1-U')$. Η τελευταία, δοθέντος $Y_\tau = y$, είναι ομοιόμορφα κατανομημένη στο $(0, w(y))$. Έτσι, η (Y_τ, V_τ) έχει τη στάσιμη κατανομή της διαδικασίας Markov $(Y_t, V_t)_{t \geq 0}$ και κατά συνέπεια $Y_t \sim \pi$ για $t \geq \tau$ από την ισχυρή ιδιότητα Markov (δες και Σχήμα 3.4).

Παρατηρούμε τώρα ότι, δεσμεύοντας στο N , το $S_N + w(X_N)U'$ είναι στοχαστικά μικρότερο από το $w^* \sum_{j=0}^N U_j$, όπου U_0, U_1, \dots, U_N είναι ανεξάρτητες τυχαίες μεταβλητές από την $\mathcal{U}(0, 1)$. Αυτό είναι ξεκάθαρο για $n = 0$. Για να το δούμε και για $n \geq 1$ αρκεί να παρατηρήσουμε ότι τα πρώτα $n - 1$ X_i έχουν «απορριφθεί» και αυτό συνεπάγεται ότι μπορούμε να θεωρήσουμε ότι

$$U_j > w(X_j)/w^*, \quad j = 0, 1, \dots, n - 1.$$

Έτσι,

$$\begin{aligned} P(\tau > t) &= P\{S_N + w(X_N)U' > t\} \\ &\leq P(w^* \sum_{j=0}^N U_j > t) \\ &= P(\sum_{j=0}^N U_j > t/w^*). \end{aligned}$$

Αλλά για σταθερό $n \geq 0$ και $0 \leq x \leq n$ ισχύει

$$P(\sum_{j=0}^n U_j > x) = 1 - \frac{1}{(n+1)!} \sum_{m=0}^{\lfloor x \rfloor} (-1)^m \binom{n+1}{m} (x-m)^{n+1},$$

όπου $\lfloor x \rfloor$ συμβολίζει το ακέραιο μέρος του x (δες Feller, 1971, σελ.27). Έτσι,

$$\begin{aligned} P(\sum_{j=0}^N U_j > t/w^*) &= 1 - \frac{1}{w^*} \sum_{n=0}^{\infty} \left(1 - \frac{1}{w^*}\right)^n \frac{1}{(n+1)!} \times \\ &\quad \sum_{m=0}^{\lfloor t/w^* \rfloor} (-1)^m \binom{n+1}{m} (t/w^* - m)^{n+1}. \quad (3.16) \end{aligned}$$

Η παραπάνω ποσότητα είναι ένα άνω φράγμα της νόρμας ολικής μεταβολής της κατανομής της διδιάστατης διαδικασίας $(Y_t, V_t)_{t \geq 0}$ από τη στάσιμη κατανομή της καθώς είναι μικρότερη ή ίσο από το $P(\tau > t)$. Αυτό ισχύει και για το $\|P(Y_t \in \cdot) - \pi\|$. Τελικά, από την προφανή ανισότητα $\sum_{j=0}^N U_j \leq N + 1$,

$$P\{\sum_{j=0}^N U_j > t/w^*\} \leq P\{N > t/w^* - 1\} \leq P\{N > \lfloor t/w^* \rfloor\} = \left(1 - \frac{1}{w^*}\right)^{\lfloor t/w^* \rfloor},$$

η οποία δηλώνει ότι η ποσότητα στην (3.16) συγκλίνει στο μηδέν τουλάχιστον εκθετικά ως προς το t . \square

3.6 Ο αλγόριθμος ΜΗ

Σε αυτήν την ενότητα θα μελετήσουμε τον αλγόριθμο ΜΗ υπό την οπτική των κατάλληλα σταθμισμένων δειγμάτων.

Ας θεωρήσουμε έναν αλγόριθμο ΜΗ με κατανομή-στόχο π και κατανομή πρότασης $q(\cdot|\cdot)$ και ας θυμηθούμε ότι τη χρονική στιγμή $t + 1$, δοθέντος $Y_t = y$, παράγουμε $Z \sim q(z|y)$ και θέτουμε $Y_{t+1} = z$ με πιθανότητα

$$a(y, z) = \min \left\{ 1, \frac{\pi(z)q(y|z)}{\pi(y)q(z|y)} \right\}$$

ή $Y_{t+1} = y$ με πιθανότητα $1 - a(y, z)$. Όπως είδαμε στην Ενότητα 2.3.1 ο αλ-

γόριθμος προσομοιώνει μία αντιστρέψιμη αλυσίδα Markov με στάσιμη κατανομή την π . Το ακόλουθο θεώρημα περιγράφει τη δομή της λεπτομερέστερα.

Θεώρημα 3.4. Έστω $X = (X_n)_{n \in \mathbb{Z}_+}$ η ακολουθία των παρατηρήσεων που γίνονται δεκτές σε έναν αλγόριθμο MH με κατανομή-στόχο π και κατανομή πρότασης $q(\cdot|\cdot)$. Έστω επίσης ξ_n ο αριθμός επαναλήψεων της κατάστασης x_n μέχρι την αποδοχή της επόμενης κατάστασης x_{n+1} . Τότε ισχύουν τα εξής:

(α) Η δεσμευμένη κατανομή του ξ_n δοθέντος $X_n = x_n$ είναι γεωμετρική με πιθανότητα επιτυχίας $\int a(x_n, z)q(z|x_n)\mu(dz)$, δηλαδή έχει συνάρτηση μάζας πιθανότητας

$$p(\xi|x_n) = \left\{ \int a(x_n, z)q(z|x_n)\mu(dz) \right\} \left\{ 1 - \int a(x_n, z)q(z|x_n)\mu(dz) \right\}^{\xi-1},$$

$$\xi = 1, 2, \dots$$

(β) Η X είναι αλυσίδα Markov με πυκνότητα μετάβασης

$$\begin{aligned} g(x_n|x_{n-1}) &= \frac{a(x_{n-1}, x_n)q(x_n|x_{n-1})}{\int a(x_{n-1}, z)q(z|x_{n-1})\mu(dz)} \\ &= \frac{\min\{\pi(x_{n-1})q(x_n|x_{n-1}), \pi(x_n)q(x_{n-1}|x_n)\}}{\int \min\{\pi(x_{n-1})q(z|x_{n-1}), \pi(z)q(x_{n-1}|z)\}\mu(dz)}. \end{aligned} \quad (3.17)$$

(γ) Η $X = (X_n)_{n \in \mathbb{Z}_+}$ είναι αντιστρέψιμη με στάσιμη κατανομή

$$g(x) \propto \int \min\{\pi(x)q(z|x), \pi(z)q(x|z)\}\mu(dz). \quad (3.18)$$

(δ) Η ακολουθία $(X_n, \xi_n)_{n \in \mathbb{Z}_+}$ είναι κατάλληλα σταθμισμένη ως προς την π .

Απόδειξη. (α) Δοθέντος $X_n = x_n$, η πιθανότητα μία προτεινόμενη κατάσταση Z να γίνει δεκτή ισούται με

$$\begin{aligned} P(Z \text{ γίνεται δεκτή} | X_n = x_n) &= P(U \leq a(x_n, Z) | X_n = x_n) \\ &= \int_{\mathcal{X}} \int_0^{a(x_n, z)} q(z|x_n) du \mu(dz) \\ &= \int_{\mathcal{X}} a(x_n, z)q(z|x_n)\mu(dz). \end{aligned}$$

Επομένως, μέχρι την αποδοχή της επόμενης κατάστασης πραγματοποιούνται ανεξάρτητα πειράματα Bernoulli με πιθανότητα επιτυχίας $\int a(x_n, z)q(z|x_n)\mu(dz)$ μέχρι να εμφανιστεί η πρώτη επιτυχία. Είναι λοιπόν προφανές ότι

$$\xi_n | X_n = x_n \sim \mathcal{G}e \left(\int a(x_n, z)q(z|x_n)\mu(dz) \right).$$

(β) Η ακολουθία $(X_n)_{n \in \mathbb{Z}_+}$ είναι προφανώς μία αλυσίδα Markov μια που η κατανομή των προτεινόμενων για την κατάσταση X_{n+1} τιμών εξαρτάται μόνο από την τιμή της X_n και όχι από τις προηγούμενες καταστάσεις. Ο πυρήνας μετάβασης της αλυσίδας είναι

$$\begin{aligned}
P(X_{n+1} \in A | X_n = x) &= \\
&= \sum_{k=1}^{\infty} P(Z_k \in A \text{ και γίνεται δεκτό} | X_n = x) \times \\
&\quad P(Z_1, \dots, Z_{k-1} \text{ έχουν απορριφθεί} | X_n = x) \\
&= \sum_{k=1}^{\infty} \int_A q(z|x) a(x, z) \mu(dz) \times \\
&\quad P(Z_1, \dots, Z_{k-1} \text{ έχουν απορριφθεί} | X_n = x) \\
&= \int_A a(x, z) q(z|x) \mu(dz) \times \\
&\quad \sum_{k=1}^{\infty} P(Z_1, \dots, Z_{k-1} \text{ έχουν απορριφθεί} | X_n = x) \\
&= \int_A a(x, z) q(z|x) \mu(dz) \sum_{k=1}^{\infty} \left(\int_{\mathcal{X}} [1 - a(x, z) q(z|x)] \mu(dz) \right)^{k-1} \\
&= \int_A a(x, z) q(z|x) \mu(dz) \frac{1}{1 - \left(\int_{\mathcal{X}} [1 - a(x, z)] q(z|x) \mu(dz) \right)} \\
&= \int_A a(x, z) q(z|x) \mu(dz) \frac{1}{1 - 1 + \int_{\mathcal{X}} a(x, z) q(z|x) \mu(dz)} \\
&= \frac{\int_A a(x, z) q(z|x) \mu(dz)}{\int_{\mathcal{X}} a(x, z) q(z|x) \mu(dz)}.
\end{aligned}$$

Άρα η X έχει πυκνότητα μετάβασης

$$g(x_n | x_{n-1}) = \frac{a(x_{n-1}, x_n) q(x_n | x_{n-1})}{\int_{\mathcal{X}} a(x_{n-1}, z) q(z | x_{n-1}) \mu(dz)}.$$

(γ) Η $g(x_n | x_{n-1})$ ικανοποιεί τη λεπτομερή συνθήκη ισοροπίας

$$g(x_{n-1}) g(x_n | x_{n-1}) = g(x_n) g(x_{n-1} | x_n),$$

αφού

$$\begin{aligned}
g(x_{n-1}) g(x_n | x_{n-1}) &= \int \min\{\pi(x_{n-1}) q(z | x_{n-1}), \pi(z) q(x_{n-1} | z)\} \mu(dz) \times \\
&\quad \frac{\min\{\pi(x_{n-1}) q(x_n | x_{n-1}), \pi(x_n) q(x_{n-1} | x_n)\}}{\int \min\{\pi(x_{n-1}) q(z | x_{n-1}), \pi(z) q(x_{n-1} | z)\} \mu(dz)}
\end{aligned}$$

$$= \min\{\pi(x_{n-1})q(x_n|x_{n-1}), \pi(x_n)q(x_{n-1}|x_n)\}$$

Πολλαπλασιάζοντας και διαιρώντας με την ποσότητα

$$\int \min\{\pi(x_n)q(z|x_n), \pi(z)q(x_n|z)\}\mu(dz)$$

έχουμε

$$\begin{aligned} g(x_{n-1})g(x_n|x_{n-1}) &= \int \min\{\pi(x_n)q(z|x_n), \pi(z)q(x_n|z)\}\mu(dz) \times \\ &\quad \frac{\min\{\pi(x_{n-1})q(x_n|x_{n-1}), \pi(x_n)q(x_{n-1}|x_n)\}}{\int \min\{\pi(x_n)q(z|x_n), \pi(z)q(x_n|z)\}\mu(dz)} \\ &= g(x_n)g(x_{n-1}|x_n). \end{aligned}$$

Η συνάρτηση $g(x)$ όταν κανονικοποιηθεί είναι συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας, αφού

$$\int g(x)\mu(dx) \leq \iint \pi(x)q(z|x)\mu(dz)\mu(dx) = 1,$$

επομένως είναι η στάσιμη κατανομή της αλυσίδας Markov X .

(δ) Η δεσμευμένη μέση τιμή του ξ_n είναι

$$\begin{aligned} E\{\xi_n | X_n = x_n\} &= \left\{ \int a(x_n, z)q(z|x_n)\mu(dz) \right\}^{-1} \\ &= \left\{ \int \min \left\{ 1, \frac{\pi(z)q(x_n|z)}{\pi(x_n)q(z|x_n)} \right\} q(z|x_n)\mu(dz) \right\}^{-1} \\ &= \frac{\pi(x_n)}{\int \min \{ \pi(z)q(x_n|z), \pi(x_n)q(z|x_n) \} \mu(dz)} \\ &\propto \pi(x_n)/g(x_n), \end{aligned}$$

άρα η ακολουθία $(X_n, \xi_n)_{n \in \mathbb{Z}_+}$ είναι κατάλληλα σταθμισμένη ως προς την π . \square

Σύμφωνα με την Πρόταση 3.2, η διαδικασία με άλματα $(Y_t)_{t \geq 0}$ που σχετίζεται με την κατάλληλα σταθμισμένη ακολουθία $(X_n, \xi_n)_{n \in \mathbb{Z}_+}$ είναι μία ημιμαρκοβιανή διαδικασία. Λόγω όμως της έλλειψης μνήμης της γεωμετρικής κατανομής, η $(Y_t)_{t \geq 0}$ είναι απλά μία αλυσίδα Markov. Είναι φανερό ότι συμπίπτει με την αρχική ακολουθία ΜΗ.

Παρ' όλο που η $(Y_t)_{t \geq 0}$ είναι ακριβώς η αρχική ακολουθία ΜΗ, είμαστε τώρα σε θέση να κάνουμε κάποιες ενδιαφέρουσες παρατηρήσεις για τους εκτιμητές που

προκύπτουν από αυτήν. Έστω

$$\hat{h}_n = \frac{\sum_{i=0}^{n-1} \xi_i h(X_i)}{\sum_{i=0}^{n-1} \xi_i}$$

ο εκτιμητής της $E_\pi(h)$ που προκύπτει από τη σταθμισμένη ακολουθία $(X_n, \xi_n)_{n \in \mathbb{Z}_+}$. Προφανώς, $\hat{h}_n \equiv \bar{h}_{S_n}$, όπου

$$\bar{h}_n = \frac{1}{n} \sum_{i=0}^{n-1} h(Y_i)$$

ο εκτιμητής της $E_\pi(h)$ που προκύπτει από την αρχική ακολουθία ΜΗ και $S_n = \sum_{i=0}^{n-1} \xi_i$. Η ασυμπτωτική διασπορά του \hat{h}_n δίνεται από τη σχέση (3.6). Επομένως, αν στη θέση των γεωμετρικών χρόνων παραμονής ξ_n χρησιμοποιηθούν άλλοι χρόνοι ξ'_n με

$$E(\xi'_n | X_n = x) = E(\xi_n | X_n = x) \quad \text{και} \quad \text{Var}(\xi'_n | X_n = x) \leq \text{Var}(\xi_n | X_n = x),$$

με την ανισότητα να είναι αυστηρή για $x \in A$ με $g(A) > 0$, τότε ο εκτιμητής που θα προκύψει θα είναι ασυμπτωτικά αποδοτικότερος από τον \hat{h}_n . Βέβαια, η διαδικασία με άλματα που σχετίζεται με τη νέα σταθμισμένη ακολουθία δεν θα είναι μαρκοβιανή αλλά ημιμαρκοβιανή. Όμως η Πρόταση 3.2 εξασφαλίζει τη σύγκλιση της στην π . Σε αυτήν την περίπτωση δεν θα έχουμε μία μέθοδο MCMC, αλλά μία μέθοδο Semi-Markov Chain Monte Carlo.

Είναι σαφές ότι η καλύτερη επιλογή για τους χρόνους παραμονής είναι ακριβώς τα βάρη σπουδαιότητας $w(x_i) \propto \pi(x_i)/g(x_i)$. Στις περιπτώσεις λοιπόν που οι ποσότητες $w(x_i)$ μπορούν να υπολογιστούν (εκτός ίσως από κάποια πολλαπλασιαστική σταθερά), δεν υπάρχει λόγος για τη χρήση τυχαίων βαρών.

3.7 Ο ανεξάρτητος δειγματολήπτης των Sahu and Zhigljavsky

Σε αυτήν την ενότητα θα παρουσιάσουμε τον ανεξάρτητο δειγματολήπτη των Sahu and Zhigljavsky (2003) υπό την οπτική των κατάλληλα σταθμισμένων δειγμάτων.

Υπενθυμίζουμε ότι ο ανεξάρτητος δειγματολήπτης των Sahu and Zhigljavsky (2003) παράγει μία ακολουθία $Z = (Z_n)_{n \in \mathbb{N}}$ από ανεξάρτητες και ισόνομες τυχαίες μεταβλητές από κάποια κατανομή πρότασης \tilde{g} και σε κάθε ένα Z_n αντιστοιχίζει ένα βάρος ξ_n το οποίο ακολουθεί γεωμετρική κατανομή με πιθανότητα επιτυχίας

$$\alpha(z) = \frac{1}{1 + \kappa \tilde{w}(z)}$$

όπου $\tilde{w}(x) = \pi(x)/\tilde{g}(x)$. Όταν $\xi_n = 0$ τότε το αντίστοιχο Z_n απορρίπτεται.

Έστω τώρα $X = (X_n)_{n \in \mathbb{N}}$ η ακολουθία των καταστάσεων που έχουν γίνει αποδεκτές από τη $(Z_n)_{n \in \mathbb{N}}$, δηλαδή αυτές που έχουν βάρος $\xi_n > 0$. Είναι ξεκάθαρο ότι η X αποτελείται από ανεξάρτητες και ισόνομες παρατηρήσεις από την κατανομή

$$g(x) = \frac{\tilde{g}(x)\mathbb{P}(\xi > 0|x)}{\int_{\mathcal{X}} \tilde{g}(z)\mathbb{P}(\xi > 0|z)\mu(dz)} = \frac{\pi(x)/[1 + \kappa\tilde{w}(x)]}{\int_{\mathcal{X}} \pi(z)/[1 + \kappa\tilde{w}(z)]\mu(dz)},$$

αφού

$$\mathbb{P}(\xi > 0|x) = 1 - \mathbb{P}(\xi = 0|x) = 1 - \frac{1}{1 + \kappa\tilde{w}(x)} = \frac{\kappa\tilde{w}(x)}{1 + \kappa\tilde{w}(x)}.$$

Επί πλέον, η X_n σταθμίζεται με το βάρος ξ_n το οποίο ακολουθεί γεωμετρική κατανομή με συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας

$$\mathbb{P}(\xi_n = m|X_n = x) = \frac{1}{1 + \kappa\tilde{w}(x)} \left\{ \frac{\kappa\tilde{w}(x)}{1 + \kappa\tilde{w}(x)} \right\}^{m-1}, \quad m = 1, 2, \dots$$

Καθώς

$$\begin{aligned} \mathbb{E}(\xi_n|X_n = x) &= 1 + \kappa\tilde{w}(x) \\ &\propto \left\{ \int_{\mathcal{X}} \frac{\pi(z)}{1 + \kappa\tilde{w}(z)} \mu(dz) \right\} \{1 + \kappa\tilde{w}(x)\} \\ &= \frac{\pi(x)}{g(x)} \\ &= w(x), \end{aligned}$$

η ακολουθία $(X_n, \xi_n)_{n \in \mathbb{N}}$ είναι κατάλληλα σταθμισμένη ως προς την π και η διαδικασία με άλματα $Y = (Y_t)_{t \in \mathbb{Z}_+}$ που σχετίζεται με αυτήν είναι μία αλυσίδα Markov με οριακή κατανομή π .

Η νέα αυτή οπτική μάς επιτρέπει τη χρήση οποιασδήποτε κατανομής για τα βάρη, εκτός από τη γεωμετρική, αρκεί $\mathbb{E}(\xi_i|X_i) = \kappa w(X_i)$ για κάθε i . Αν για παράδειγμα δοθέντος $X_i = x_i$, το ξ_i ακολουθεί κατανομή Poisson $\mathcal{P}(\kappa w(x_i))$, τότε η διασπορά του $\xi_i|X_i = x_i$ είναι μικρότερη από αυτήν του αρχικού αλγορίθμου των Sahu and Zhigljavsky (2003), αφού

$$\text{Var}_{\text{Poi}}(\xi_i|X_i = x_i) = \kappa w(x_i) < \kappa w(x_i)(1 + \kappa w(x_i)) = \text{Var}_{\text{Ge}}(\xi_i|X_i = x_i).$$

Χρησιμοποιώντας την κατανομή Poisson για τα βάρη, υπάρχει μείωση στον αριθμό των παρατηρήσεων X , οι οποίες απορρίπτονται. Πιο συγκεκριμένα, χρησιμοποιώντας την κατανομή Poisson έχουμε

$$\mathbb{P}_{\text{Poi}}(\xi = 0) = \mathbb{E}_{\text{Poi}}[\mathbb{I}(\xi = 0)] = \mathbb{E}_g(\mathbb{E}_{\text{Poi}}[\mathbb{I}(\xi = 0)|X]) = \mathbb{E}_g[e^{-\kappa w(X)}],$$

ενώ χρησιμοποιώντας τη γεωμετρική κατανομή ισχύει

$$P_{Ge}(\xi = 0) = E_{Ge} [I(\xi = 0)] = E_g (E_{Ge} [I(\xi = 0)|X]) = E_g \left[(1 + \kappa w(X))^{-1} \right].$$

Επειδή όμως $e^t - t - 1 \geq 0$, $\forall t \in \mathbb{R}$, με την ισότητα να ισχύει αν και μόνο αν $t = 0$, έχουμε

$$e^{-\kappa w(x)} < [1 + \kappa w(x)]^{-1}$$

άρα

$$P_{Poi}(\xi = 0) < P_{Ge}(\xi = 0).$$

Επίσης, έχει ενδιαφέρον να παρατηρηθεί ότι η Ραο-Μπλακγουελοποιημένη εκδοχή του εκτιμητή \hat{h}_n όταν τα βάρη ακολουθούν την κατανομή Poisson ταυτίζεται με τον εκτιμητή IS.

Πρόταση 3.3. *Αν $\xi|X = x \sim \mathcal{P}(\kappa w(x))$, τότε η Ραο-Μπλακγουελοποιημένη έκφραση του εκτιμητή \hat{h}_n ,*

$$\hat{h}_n^{RB} = E \left\{ \hat{h}_n | X_1, \dots, X_n, \sum \xi_j \right\}$$

ταυτίζεται με τον εκτιμητή IS

$$\hat{h}_n^{IS} = \frac{\sum_{i=1}^n w(X_i) h(X_i)}{\sum_{i=1}^n w(X_i)}.$$

Απόδειξη. Δεσμεύοντας στα X_1, \dots, X_n , τα ξ_i είναι ανεξάρτητες τυχαίες μεταβλητές με κατανομές Poisson. Έτσι, η δεσμευμένη κατανομή τους δοθέντος και του $\sum \xi_j$ είναι πολυωνυμική. Άρα

$$\begin{aligned} E [\xi_i | X_1, \dots, X_n, \sum \xi_j] &= \sum_{j=1}^n \xi_j \frac{\kappa w(X_i)}{\sum \kappa w(X_j)} \\ &= \frac{w(X_i) \sum_{j=1}^n \xi_j}{\sum_{j=1}^n w(X_j)} \end{aligned}$$

και συνεπώς

$$\begin{aligned} \hat{h}_n^{RB} &= E \left\{ \frac{\sum_{i=1}^n \xi_i h(X_i)}{\sum_{i=1}^n \xi_i} \middle| X_1, \dots, X_n, \sum \xi_j \right\} \\ &= \frac{\sum_{i=1}^n E [\xi_i | X_1, \dots, X_n, \sum \xi_j] h(X_i)}{\sum_{i=1}^n \xi_i} \\ &= \frac{1}{\sum \xi_j} \sum_{i=1}^n \frac{w(X_i) \sum \xi_j}{\sum_{j=1}^n w(X_j)} h(x_i) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{\sum_{i=1}^n w(X_i)h(X_i)}{\sum_{i=1}^n w(X_i)} \\
&= \hat{h}_n^{IS}.
\end{aligned}$$

□

3.8 Άλλοι IS εκτιμητές

Έστω y_0, y_1, y_2, \dots οι προσομοιωμένες τιμές από κάποια μέθοδο MCMC με κατανομή-στόχο την π και κατανομή πρότασης την $\pi(y_n|y_{n-1})$. Μία απλοϊκή μέθοδος για τη διάγνωση της σύγκλισης αυτής της αλυσίδας στην κατανομή-στόχο είναι ο έλεγχος της σύγκλισης διάφορων εκτιμητών στις αντίστοιχες ποσότητες $E_\pi(h)$ που μας ενδιαφέρουν (δες Robert and Casella, 1999, σελ.382).

Ένας τέτοιος εκτιμητής είναι ο

$$\tilde{h}_n = \frac{\sum_{i=1}^n \frac{\pi(y_i)}{\pi(y_i|y_{i-1})} h(y_i)}{\sum_{i=1}^n \frac{\pi(y_i)}{\pi(y_i|y_{i-1})}}$$

με την προϋπόθεση ότι ο λόγος $\pi(y_i)/\pi(y_i|y_{i-1})$ μπορεί να υπολογιστεί εκτός από κάποια πολλαπλασιαστική σταθερά. Ορίζοντας $\xi_i = \pi(y_i)/\pi(y_i|y_{i-1})$, μπορεί να δειχτεί ότι η διαδικασία με άλματα που σχετίζεται με τη σταθμισμένη ακολουθία $(y_i, \xi_i)_{i \in \mathbb{N}}$ συγκλίνει στην π . Πράγματι, έστω $x_i = (x_i^{(1)}, x_i^{(2)}) = (y_{i-1}, y_i)$. Τότε, η ακολουθία $(x_n)_{n \in \mathbb{N}}$ είναι μία αλυσίδα Markov με πυρήνα μετάβασης

$$g(x_i|x_{i-1}) = \delta_{x_{i-1}^{(2)}}(x_i^{(1)})\pi(x_i^{(2)}|x_i^{(1)}),$$

όπου $\delta_x(\cdot)$ είναι το μέτρο Dirac στο x . Η οριακή κατανομή της έχει πυκνότητα

$$g(x) = \pi(x^{(1)})\pi(x^{(2)}|x^{(1)}).$$

Θέτοντας

$$\xi_i = \frac{\pi(x_i^{(1)})\pi(x_i^{(2)})}{\pi(x_i^{(1)})\pi(x_i^{(2)}|x_i^{(1)})} = \frac{\pi(y_i)}{\pi(y_i|y_{i-1})}, \quad i = 1, 2, \dots,$$

οδηγούμεστε στην ακολουθία $(x_i, \xi_i)_{i \in \mathbb{N}}$ η οποία είναι κατάλληλα σταθμισμένη ως προς το γινόμενο $\pi(x^{(1)})\pi(x^{(2)})$. Έτσι, η διαδικασία με άλματα που σχετίζεται με την περιθωριακή ακολουθία $(x_i^{(2)}, \xi_i)_{i \in \mathbb{N}} = (y_i, \xi_i)_{i \in \mathbb{N}}$ έχει την π ως οριακή κατανομή.

Οι Robert and Casella (1999) παρουσιάζουν και έναν εναλλακτικό εκτιμητή για τη διάγνωση της σύγκλισης στην περίπτωση του αλγορίθμου MH. Ας θεωρήσουμε πάλι τον αλγόριθμο MH με κατανομή-στόχο π και κατανομή πρότασης $q(\cdot|\cdot)$. Ας συμβολίσουμε τώρα με y_0, y_1, \dots, y_M όλη την προσομοιωμένη ακολουθία (η οποία συμπεριλαμβάνει επίσης και τις καταστάσεις που έχουν απορριφθεί) και με $y_0, y_{\sigma_1}, \dots, y_{\sigma_n}$ τις καταστάσεις που έχουν γίνει δεκτές. Ορίζοντας $\tau_i = \sup\{\sigma_j : \sigma_j < i\}$, η y_{τ_i} είναι η τελευταία κατάσταση που έγινε δεκτή πριν από τη χρονική στιγμή i . Αυτό σημαίνει ότι το y_i έχει παραχθεί από την $q(\cdot|y_{\tau_i})$. Ο εκτιμητής IS της $E_\pi(h)$ που χρησιμοποιείται σε αυτήν την περίπτωση έχει τη μορφή

$$\tilde{h}_n = \frac{\sum_{i=1}^M \frac{\pi(y_i)}{q(y_i|y_{\tau_i})} h(y_i)}{\sum_{i=1}^M \frac{\pi(y_i)}{q(y_i|y_{\tau_i})}}.$$

Ορίζοντας τώρα $\xi_i = \pi(y_i)/q(y_i|y_{\tau_i})$, μπορεί να δειχτεί ότι η διαδικασία με άλματα που σχετίζεται με τη σταθμισμένη ακολουθία $(y_i, \xi_i)_{i \in \mathbb{N}}$ συγκλίνει στην π . Για να το δείξουμε αυτό, ορίζουμε $x_i = (x_i^{(1)}, x_i^{(2)}) = (y_{\tau_i}, y_i)$. Σε περίπτωση που $\tau_i < i - 1$, θα ισχύει $\tau_i = \tau_{i-1}$ και έτσι $x_i^{(1)} = x_{i-1}^{(1)}$. Από την άλλη πλευρά, εάν $\tau_i = i - 1$ τότε $x_i^{(1)} = x_{i-1}^{(2)}$. Το τελευταίο συμβαίνει με πιθανότητα $a(x_{i-1}^{(1)}, x_{i-1}^{(2)})$ (δες (3.6)), ενώ το πρώτο συμβαίνει με πιθανότητα $1 - a(x_{i-1}^{(1)}, x_{i-1}^{(2)})$. Έτσι, η ακολουθία x_1, x_2, \dots είναι μία αλυσίδα Markov με πυκνότητα μετάβασης

$$g(x_i|x_{i-1}) = \left\{ [1 - a(x_{i-1}^{(1)}, x_{i-1}^{(2)})] \delta_{x_{i-1}^{(1)}}(x_i^{(1)}) + a(x_{i-1}^{(1)}, x_{i-1}^{(2)}) \delta_{x_{i-1}^{(2)}}(x_i^{(1)}) \right\} q(x_i^{(2)}|x_i^{(1)}).$$

Η στάσιμη κατανομή αυτής της αλυσίδας είναι η $\pi(x^{(1)})q(x^{(2)}|x^{(1)})$ καθώς η $y_0, y_{\tau_1}, y_{\tau_2}, \dots$ είναι η πραγματική ακολουθία MH. Σταθμίζοντας τώρα κάθε x_i με

$$\xi_i = \frac{\pi(x_i^{(2)})\pi(x_i^{(1)})}{\pi(x_i^{(1)})q(x_i^{(2)}|x_i^{(1)})} = \frac{\pi(y_i)}{q(y_i|y_{\tau_i})}$$

παίρνουμε το επιθυμητό αποτέλεσμα για την περιθωριακή ακολουθία $(x_i^{(2)}, \xi_i)_{i \in \mathbb{N}} = (y_i, \xi_i)_{i \in \mathbb{N}}$.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΠΕΡΡΑΙΑ

Προσομοίωση από την κατανομή-στόχο μέσω διακριτοποίησης και στάθμισης

Εάν μπόρεσα να δω πιο μακριά, είναι γιατί στεκόμουν πάνω σε ώμους γιγάντων.

—*Isaac Newton (1642-1727)*

Όλοι οι άνθρωποι από τη φύση τους επιθυμούν την γνώση.

—*Αριστοτέλης (384-322 π.Χ.)*

4.1 Εισαγωγή

Όπως έχουμε ήδη αναφέρει στην Ενότητα 2.1.7, η διακριτοποίηση του χώρου καταστάσεων \mathcal{X} μίας πυκνότητας πιθανότητας π είναι μία απλή προσέγγιση για την αντιμετώπιση προβλημάτων, όπως η προσομοίωση από «προβληματικές» κατανομές. Σε αυτήν την ενότητα θα παρουσιάσουμε μία τεχνική η οποία συνδυάζει τη διακριτοποίηση της κατανομής-στόχου π και την κατάλληλη στάθμιση της προκύπτουσας ακολουθίας. Πιο συγκεκριμένα:

1. Διαμερίζουμε το στήριγμα \mathcal{X} (ή κάποια/ες από τις διαστάσεις του) με ντετερμινιστικό τρόπο σε έναν προκαθορισμένο πεπερασμένο αριθμό υποσυνόλων.
2. Προσομοιώνουμε παρατηρήσεις είτε από την αντίστοιχη διακριτοποίηση g της κατανομής-στόχου π είτε από μία αλυσίδα Markov με στάσιμη κατανομή την g .
3. Σταθμίζουμε τις προσομοιωμένες παρατηρήσεις με τα αντίστοιχα βάρη σπουδαιότητας $w = \pi/g$.

Σύμφωνα με το Πόρισμα 3.1, η διαδικασία με άλματα που σχετίζεται με την προκύπτουσα κατάλληλα σταθμισμένη ακολουθία είναι μία ημιμαρκοβιανή διαδικασία η οποία συγκλίνει ασθενώς στην κατανομή-στόχο π . Γι' αυτό, σε αντίθεση με τη μέθοδο των Fu and Wang (2002) η οποία βασίζεται στο γεγονός ότι η g είναι μία καλή προσέγγιση της π , η μέθοδος που προτείνεται εδώ απαιτεί σημαντικά μικρότερο αριθμό υποσυνόλων προκειμένου να δώσει ικανοποιητικά αποτελέσματα.

Για την υλοποίηση της εν λόγω τεχνικής απαιτείται η γνώση μόνο της συναρτησιακής μορφής της κατανομής-στόχου π , όπως και στις περισσότερες MC και MCMC τεχνικές. Αυτό είναι ένα σημαντικό πλεονέκτημα, καθώς σε πολλά πραγματικά προβλήματα και ειδικά στις περιπτώσεις μπεϋζιανής μοντελοποίησης με μη συζυγείς εκ των προτέρων κατανομές, η σταθερά κανονικοποίησης είναι δύσκολο να υπολογιστεί.

Η παραπάνω προσέγγιση μπορεί να χρησιμοποιηθεί για να απλοποιηθούν γνωστές MC και MCMC τεχνικές. Επίσης, έπειτα από προσομοιώσεις διαπιστώθηκε ότι, με κατάλληλη επιλογή της διακριτοποίησης, οι αυτοσυσχετίσεις των σταθμισμένων δειγμάτων σχεδόν μηδενίζονται. Αυτό επιτρέπει την εκτίμηση των τυπικών σφαλμάτων Monte Carlo μέσω διαδικασιών για ανεξάρτητα δείγματα και όχι άλλων περισσότερο περίπλοκων τεχνικών που εφαρμόζονται στις περιπτώσεις που υπάρχουν αυτοσυσχετίσεις.

Στις επόμενες ενότητες περιγράψουμε αναλυτικά τη μέθοδο και παρουσιάζουμε τα πλεονεκτήματά της μέσω μίας σειράς παραδειγμάτων. Αρχικά παραθέτουμε μία σειρά απλών εφαρμογών για να δούμε πώς μπορούν να τροποποιηθούν γνωστοί αλγόριθμοι MC και MCMC χρησιμοποιώντας την προτεινόμενη μέθοδο. Επίσης, η μέθοδος εφαρμόζεται σε πραγματικά σύνολα δεδομένων που συχνά χρησιμοποιούνται ως σημεία αναφοράς στην Υπολογιστική Μπεϋζιανή Στατιστική.

4.2 Περιγραφή της μεθόδου

Έστω π μία συνεχής κατανομή-στόχος με στήριγμα \mathcal{X} η οποία είναι γνωστή εκτός από κάποια πολλαπλασιαστική σταθερά. Χωρίς βλάβη της γενικότητας θα υποθέσουμε ότι το \mathcal{X} είναι φραγμένο σύνολο. Σε διαφορετική περίπτωση, μπορούμε να τροποποιήσουμε το πρόβλημα κάνοντας κατάλληλους μετασχηματισμούς. Για παράδειγμα, αν $\mathcal{X} = \mathbb{R}$ τότε αντί της $X \sim \pi$ μπορούμε να θέσουμε ως στόχο την προσομοίωση της $Y = e^X / (1 + e^X)$ που έχει στήριγμα το $(0, 1)$.

Το πρώτο βήμα της προτεινόμενης διαδικασίας είναι η διαμέριση του \mathcal{X} (ή κάποιας/ων εκ των διαστάσεων του) με ντετερμινιστικό τρόπο σε ένα προκαθορισμένο αριθμό υποσυνόλων m . Έστω $\mathcal{E} = (E_1, \dots, E_m)$ μία τέτοια διαμέριση

και

$$g(x) \propto \sum_{i=1}^m \frac{\pi(x_i^*)}{L(E_i)} \mathbf{I}(x \in E_i),$$

η αντίστοιχη διακριτοποίηση της π , όπου $x_i^* \in E_i$ και $0 < L(E_i) < \infty$ για όλα τα $i = 1, \dots, m$ (δες Ενότητα 2.1.7).

Κατ' αντιστοιχία με τη δειγματοληψία σπουδαιότητας, η g χρησιμοποιείται ως κατανομή πρότασης. Προκειμένου να προσομοιώσουμε από αυτήν, επιλέγουμε το σύνολο E_i με πιθανότητα ανάλογη του $\pi(x_i^*)/L(E_i)$ και έπειτα το X_i προσομοιώνεται ομοιόμορφα σε αυτό το υποσύνολο. Στο X_i αντιστοιχίζεται το βάρος σπουδαιότητας $w(X_i) = \pi(X_i)/g(X_i)$, οπότε προκύπτει η κατάλληλα σταθμισμένη ως προς την π ακολουθία $(X_n, w(X_n))_{n \geq 1}$. Η διαδικασία με άλματα $(Y_t)_{t \geq 0}$ που συνδέεται με αυτή την κατάλληλα σταθμισμένη ακολουθία συγκλίνει στην κατανομή-στόχο π (δες Πρόρισμα 3.1), οπότε το παραγόμενο δείγμα μπορεί να χρησιμοποιηθεί όχι μόνο για την εκτίμηση μέσων τιμών της μορφής $E_\pi(h)$, αλλά και χαρακτηριστικών της π που δεν εκφράζονται ως ολοκληρώματα.

4.3 Παραδείγματα

4.3.1 Προσομοίωση από κατανομή βήτα

Θεωρούμε την κατανομή βήτα $Beta(2, 2)$,

$$\pi(x) \propto x(1-x), \quad 0 \leq x \leq 1.$$

Διακριτοποιούμε το διάστημα $[0, 1]$ σε $m = 10$ ισομήκη υποδιαστήματα και επιλέγουμε ως νέα κατανομή-στόχο τη διακριτοποίηση της π ,

$$g(x) \propto x_{[m]}(1-x_{[m]}), \quad 0 \leq x \leq 1,$$

όπου $x_{[m]} = (2 \lfloor mx \rfloor + 1)/2m$.

Για να προσομοιώσουμε από την g , αρχικά επιλέγουμε ένα υποσύνολο από τη διακριτή κατανομή

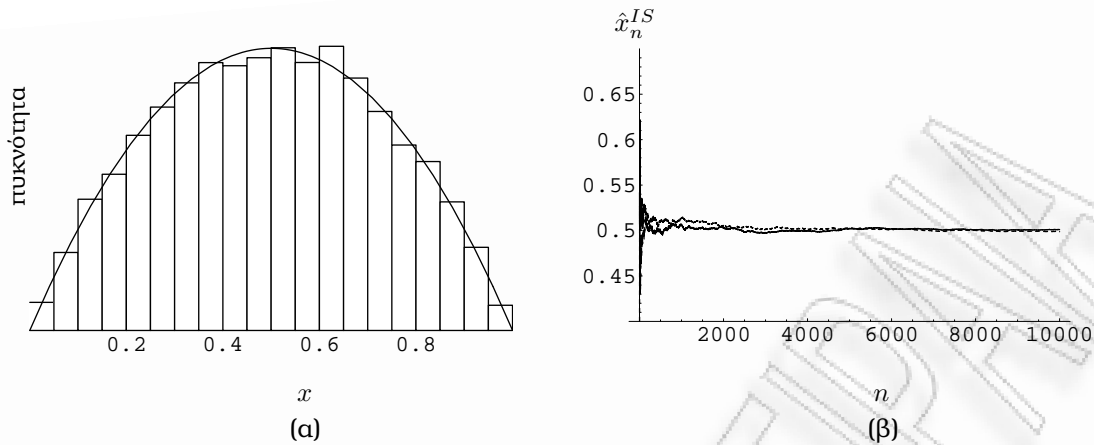
$$p(i) \propto \binom{2i-1}{2m} \left(1 - \frac{2i-1}{2m}\right), \quad i = 1, \dots, m,$$

και έπειτα παράγουμε $u \sim \mathcal{U}(0, 1)$ και θέτουμε $x = (u + i - 1)/m$.

Έστω

$$w(x) = \frac{\pi(x)}{g(x)} \propto \frac{x(1-x)}{x_{[m]}(1-x_{[m]})}$$

το βάρος σπουδαιότητας που αντιστοιχίζεται στο x . Η σταθμισμένη ακολουθία



Σχήμα 4.1: Ιστόγραμμα του σταθμισμένου δείγματος $(x_i, w(x_i))_{1 \leq i \leq 10000}$ και σύγκλιση του σταθμισμένου μέσου $\hat{x}_n^{IS} = \sum w(x_i)x_i / \sum w(x_i)$ για $m = 10$ (συνεχής γραμμή) και του δειγματικού μέσου προσομοιωμένων παρατηρήσεων από την κατανομή-στόχο (διακεκομμένη γραμμή).

$(x_n, w(x_n))_{n \geq 1}$ είναι κατάλληλα σταθμισμένη ως προς την π , οπότε από την Πρόταση 3.2, η διαδικασία με άλματα που σχετίζεται με αυτήν συγκλίνει στην π . Στο Σχήμα 4.1(α) μπορούμε να δούμε το ιστόγραμμα του σταθμισμένου δείγματος $(x_i, w(x_i))_{1 \leq i \leq 10000}$ μαζί με την καμπύλη της κατανομής βήτα (της κατανομής-στόχου).

| p | πραγματικό εκατοστημόριο | Εκτιμηθέν εκατοστημόριο |
|------|-----------------------------|----------------------------|
| 0.05 | 0.13535 | 0.13174 |
| 0.10 | 0.19580 | 0.19317 |
| 0.25 | 0.32635 | 0.32832 |
| 0.50 | 0.50000 | 0.50221 |
| 0.75 | 0.67365 | 0.67860 |
| 0.90 | 0.80420 | 0.80312 |
| 0.95 | 0.86465 | 0.86412 |

Πίνακας 4.1: Εκατοστημόρια κατανομής $Beta(2, 2)$.

Επίσης, στον Πίνακα 4.1 βλέπουμε τις εκτιμήσεις επιλεγμένων ποσοστιαίων σημείων της κατανομής $Beta(2, 2)$ μαζί με τις αντίστοιχες πραγματικές τιμές. Παρατηρούμε ότι οι εκτιμήσεις που παίρνουμε μέσω της προτεινόμενης μεθόδου είναι πολύ κοντά στις πραγματικές τιμές.

Στο σημείο αυτό θα πρέπει να επισημάνουμε ότι η προτεινόμενη μέθοδος, στο συγκεκριμένο παράδειγμα, δεν απαιτεί μεγάλο m προκειμένου να επιτευχθεί σύγκλιση. Για παράδειγμα, στο Σχήμα 4.1(β) μπορούμε να δούμε τη γρήγορη σύγκλιση του σταθμισμένου μέσου $\hat{x}_n^{IS} = \sum w(x_i)x_i / \sum w(x_i)$ στη μέση τιμή της

κατανομής-στόχου. Επίσης στο ίδιο σχήμα φαίνεται και η σύγκλιση της ακολουθίας των μέσων ενός προσομοιωμένου τυχαίου δείγματος για λόγους σύγκρισης. Παρατηρούμε ότι ο \hat{x}_n^{IS} (συνεχής γραμμή) δε συμπεριφέρεται πολύ διαφορετικά ως προς τη σύγκλιση από το δειγματικό μέσο των προσομοιωμένων παρατηρήσεων από την κατανομή-στόχο (διακεκομμένη γραμμή).

4.3.2 Προσομοίωση από την κατανομή Dirichlet

Έστω ότι η κατανομή-στόχος είναι μία διδιάστατη κατανομή Dirichlet $\mathcal{D}(\alpha, \beta; \gamma)$ με συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας

$$\pi(x) \equiv \pi(x_1, x_2) \propto x_1^{\alpha-1} x_2^{\beta-1} (1 - x_1 - x_2)^{\gamma-1}, \quad 0 \leq x_1, x_2, x_1 + x_2 \leq 1.$$

όπου $\alpha, \beta, \gamma > 0$. Εδώ το στήριγμα \mathcal{X} είναι ένα ορθογώνιο τρίγωνο με κορυφές την αρχή των αξόνων και τα σημεία $(0, 1)$ και $(1, 0)$.

Μία διακριτοποίηση του \mathcal{X} θα μπορούσε να είναι η ακόλουθη. Αρχικά μπορούμε να χωρίσουμε το ορθογώνιο τρίγωνο σε $M = m^2$ μικρότερα τρίγωνα με εμβαδόν ίσο με $1/(2m^2)$ το κάθε ένα ως εξής: Χωρίζουμε κάθε άξονα σε m ισομήκη διαστήματα και φέρουμε από κάθε άκρο των διαστημάτων αυτών μία ευθεία παράλληλη στους άξονες. Έπειτα σχεδιάζουμε τις ευθείες που ενώνουν τα σημεία $(i/m, 0)$ και $(0, i/m)$, $i = 1, \dots, m-1$ (δες Σχήμα 4.2(a)). Για αυτήν τη διακριτοποίηση επιλέγουμε ως αντιπροσωπευτικά σημεία τα

$$x_{[m1],i} = \frac{2i-1}{2m}, \quad x_{[m2],jk} = \frac{j+3(k-1)}{3m},$$

για $i = 1, \dots, m$, $j = 1, 2$ και $k = 1, \dots, m-i-j+2$. Τότε η αντίστοιχη απλή κατανομή παίρνει τη μορφή

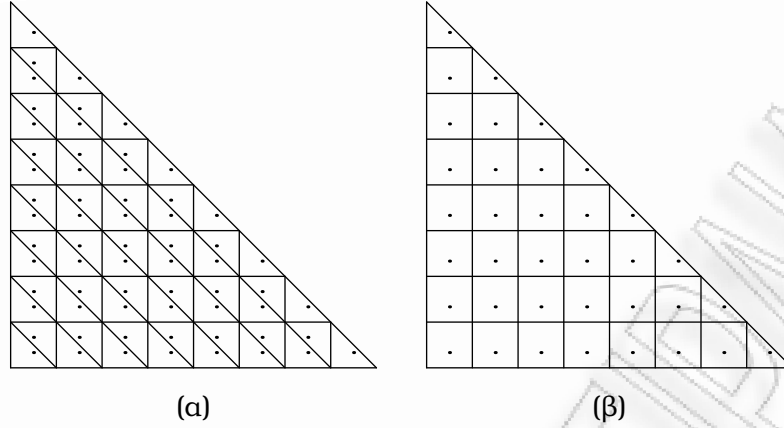
$$g(x) \propto \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^2 \sum_{k=1}^{m-i-j+2} x_{[m1],i}^{\alpha-1} x_{[m2],jk}^{\beta-1} (1 - x_{[m1],i} - x_{[m2],jk})^{\gamma-1} \mathbf{I}(x \in E_{ijk}),$$

όπου E_{ijk} είναι το τρίγωνο που περιέχει το σημείο $(x_{[m1],i}, x_{[m2],jk})$. Για να προσομοιώσουμε από την g , ένα από τα τρίγωνα επιλέγεται με πιθανότητα

$$p(i, j, k) \propto x_{[m1],i}^{\alpha-1} x_{[m2],jk}^{\beta-1} (1 - x_{[m1],i} - x_{[m2],jk})^{\gamma-1}$$

και έπειτα το (x_1, x_2) παράγεται από την ομοιόμορφη κατανομή στο E_{ijk} (για την προσομοίωση από την ομοιόμορφη κατανομή στο E_{ijk} χρησιμοποιείται η μέθοδος Αποδοχής-Απόρριψης).

Μία εναλλακτική διακριτοποίηση προκύπτει αν χωρίσουμε το αρχικό τρίγωνο σε m τρίγωνα όπως και προηγουμένως και σε $m(m-1)/2$ τετράγωνα τα οποία



Σχήμα 4.2: Οι δυο εναλλακτικές διακριτοποιήσεις του χώρου καταστάσεων της διδιάστατης κατανομής Dirichlet, με $m = 8$. Με τις τελείες σημειώνονται τα αντίστοιχα αντιπροσωπευτικά σημεία.

έχουν διπλάσιο εμβαδόν από τα τρίγωνα (δες Σχήμα 4.2(β)). Σε αυτήν την περίπτωση, επιλέγουμε ως αντιπροσωπευτικά σημεία τα

$$x_{[m1],i} = \frac{2i-1}{2m}, \quad x_{[m2],j} = \frac{3(j-1)+1}{3m},$$

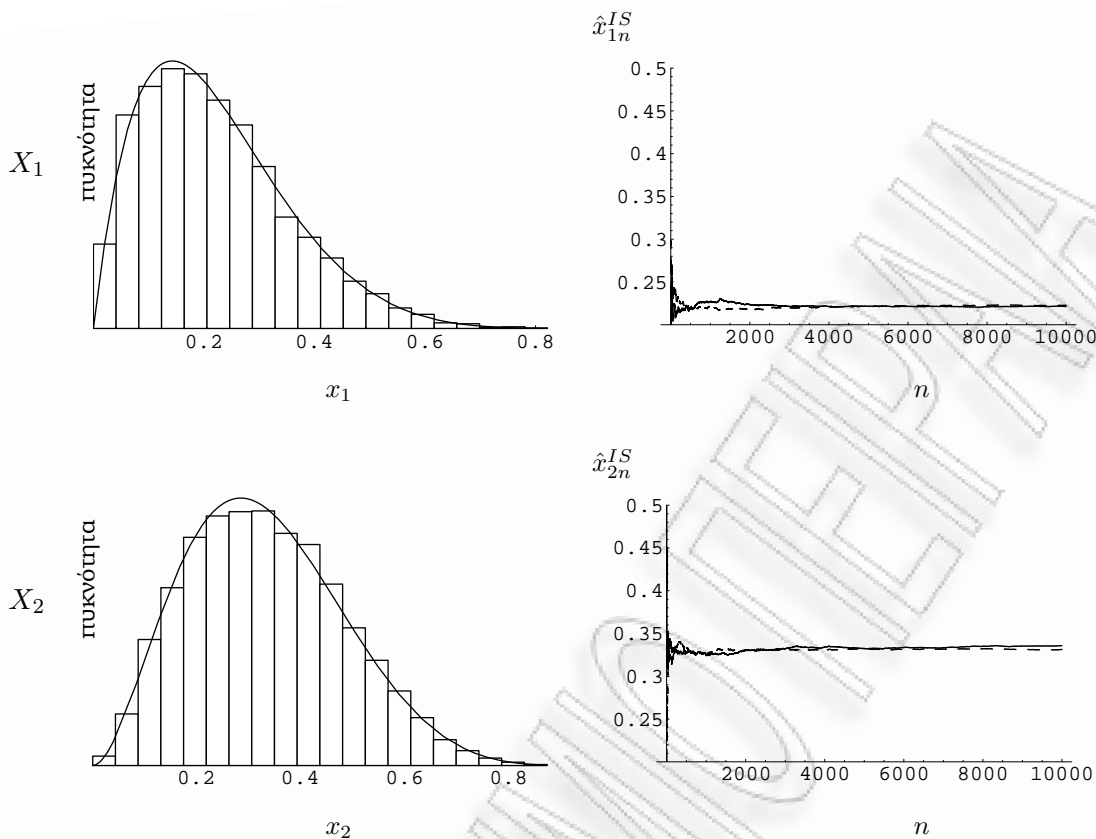
για $i = 1, \dots, m$ και $j = 1, \dots, m-i+1$. Φυσικά, τα εμβαδά των τριγώνων και των τετραγώνων διαφέρουν μεταξύ τους οπότε η αντίστοιχη απλή κατανομή g θα έχει τη μορφή

$$g(x) \propto \sum_{i,j} \mathbf{L}(E_{ij})^{-1} x_{[m1],i}^{\alpha-1} x_{[m2],j}^{\beta-1} (1 - x_{[m1],i} - x_{[m2],j})^{\gamma-1} \mathbf{I}(x \in E_{ij})$$

όπου

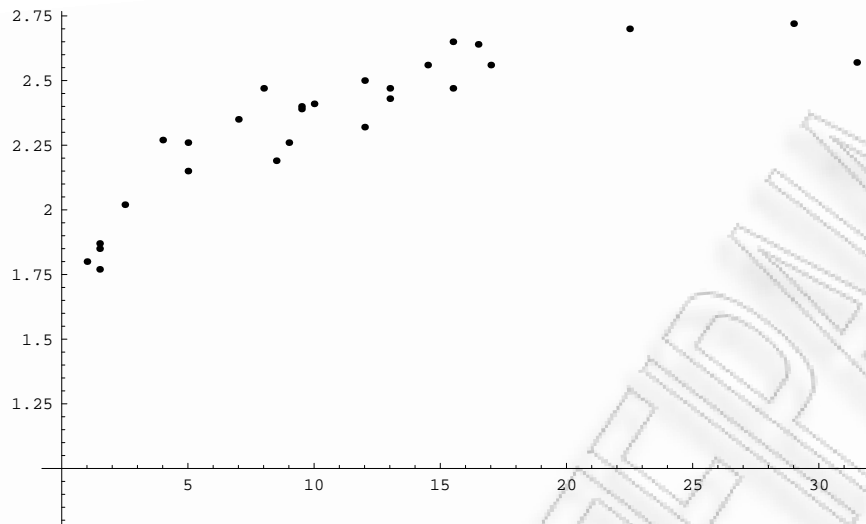
$$\mathbf{L}(E_{ij}) = \begin{cases} 1/m^2, & i+j \leq m, \\ 1/(2m^2), & i+j = m+1. \end{cases}$$

Τα αποτελέσματα που παίρνουμε δεν εξαρτώνται από τη μέθοδο που επιλέγεται για τη διακριτοποίηση. Στο Σχήμα 4.3 απεικονίζονται τα ιστογράμματα των σταθμισμένων δειγμάτων $(x_{1,i}, w(x_{1,i}))_{1 \leq i \leq n}$ και $(x_{2,i}, w(x_{2,i}))_{1 \leq i \leq n}$ μαζί με τις αντίστοιχες καμπύλες των περιθωριακών πυκνοτήτων των X_1 και X_2 , όπου $(X_1, X_2) \sim \mathcal{D}(3, 4, 5)$, $n = 10000$ και $m = 15$, χρησιμοποιώντας την πρώτη διακριτοποίηση. Μπορούμε να επισημάνουμε τη σύγκλιση της διαδικασίας με άλματα που σχετίζεται με το σταθμισμένο δείγμα στην κατανομή-στόχο. Επί πλέον, το δεξί γράφημα δείχνει την πολύ γρήγορη σύγκλιση των σταθμισμένων μέσων $\hat{x}_{1n}^{IS} = \sum w(x_{1,i})x_{1,i} / \sum w(x_{1,i})$ και $\hat{x}_{2n}^{IS} = \sum w(x_{2,i})x_{2,i} / \sum w(x_{2,i})$ στις αντίστοιχες μέσες τιμές της κατανομής-στόχου.



Σχήμα 4.3: Ιστογράμματα των σταθμισμένων δειγμάτων $(x_{1,i}, w(x_{1,i}))_{1 \leq i \leq 10000}$ και $(x_{2,i}, w(x_{2,i}))_{1 \leq i \leq 10000}$ για $m = 15$ και η σύγκλιση των $\hat{x}_{1n}^{IS} = \sum w(x_{1,i})x_{1,i} / \sum w(x_{1,i})$ και $\hat{x}_{2n}^{IS} = \sum w(x_{2,i})x_{2,i} / \sum w(x_{2,i})$ (συνεχής γραμμή) και των δειγματικών μέσων ενός τυχαίου δείγματος από την κατανομή στόχο (διακεκομμένη γραμμή).

Μπορούμε να εργαστούμε με αντίστοιχο τρόπο και σε περισσότερες διαστάσεις. Για παράδειγμα, αν έχουμε μία τριδιάστατη κατανομή Dirichlet $(X_1, X_2, X_3) \sim \mathcal{D}(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3; \alpha_4)$, ο χώρος καταστάσεων είναι μία πυραμίδα με κορυφές την αρχή των αξόνων και τα σημεία $(1, 0, 0)$, $(0, 1, 0)$, $(0, 0, 1)$. Σε αυτήν την περίπτωση, διακριτοποιώντας το χώρο καταστάσεων προκύπτουν $m(m+1)/2$ πυραμίδες, $m(m-1)/2$ κύβοι χωρίς μία μικρή πυραμίδα και $m(m-1)(m-2)/6$ κύβοι. Επιλέγοντας αντιπροσωπευτικά σημεία που ανήκουν σε κάθε ένα από αυτά τα τριδιάστατα σχήματα, μπορούμε εύκολα να προσομοιώσουμε από την g , όπου σε αυτήν την περίπτωση το $L(E_i)$ είναι ο όγκος του σχήματος E_i , $i = 1, \dots, M$, και $M = \{m(m+1)(m+2)\}/6$. Βέβαια, όσο αυξάνει η διάσταση του χώρου καταστάσεων \mathcal{X} , τόσο πιο περίπλοκη γίνεται η διακριτοποίησή του και τόσο πιο αργός ο αλγόριθμος.



Σχήμα 4.4: Διάγραμμα διασποράς του συνόλου δεδομένων dugongs.

4.3.3 Σύνολο δεδομένων dugongs

Το σύνολο δεδομένων dugongs αναλύθηκε αρχικά από τον Ratkowsky (1983) και έκτοτε έχει χρησιμοποιηθεί από πολλούς ερευνητές προκειμένου να εφαρμόσουν ή να συγκρίνουν διάφορες υπολογιστικές τεχνικές (Carlin and Gelfand, 1991, Gilks et al., 1998, Zahu and Zhigljavsky, 2003, Petris and Tardella, 2003, Brockwell and Kadane, 2005). Τα δεδομένα αποτελούνται από μετρήσεις του μήκους (y) και της ηλικίας (x) $n = 27$ θαλάσσιων ελεφάντων (dugongs), οι οποίοι είχαν συλλεχθεί κοντά στο Townsville του Queensland (δες Πίνακα 4.2). Στο Σχήμα 4.4 απεικονίζεται το διάγραμμα διασποράς αυτών των δεδομένων.

| | | | | | | | | | |
|------------------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|
| Ηλικία (x_i) | 1.0 | 1.5 | 1.5 | 1.5 | 2.5 | 4.0 | 5.0 | 5.0 | 7.0 |
| Μήκος (y_i) | 1.80 | 1.85 | 1.87 | 1.77 | 2.02 | 2.27 | 2.15 | 2.26 | 2.35 |
| Ηλικία (x_i) | 8.0 | 8.5 | 9.0 | 9.5 | 9.5 | 10.0 | 12.0 | 12.0 | 13.0 |
| Μήκος (y_i) | 2.47 | 2.19 | 2.26 | 2.40 | 2.39 | 2.41 | 2.50 | 2.32 | 2.43 |
| Ηλικία (x_i) | 13.0 | 14.5 | 15.5 | 15.5 | 16.5 | 17.0 | 22.5 | 29.0 | 31.5 |
| Μήκος (y_i) | 2.47 | 2.56 | 2.65 | 2.47 | 2.64 | 2.56 | 2.70 | 2.72 | 2.57 |

Πίνακας 4.2: Το σύνολο δεδομένων dugongs.

Οι Carlin & Gelfand (1991) μοντελοποίησαν τα δεδομένα χρησιμοποιώντας μία μη γραμμική συνάρτηση χωρίς σημείο καμψής και μία ασύμπτωτη καθώς το x τείνει στο άπειρο. Συγκεκριμένα, υπέθεσαν ότι

$$y_i \sim \mathcal{N}(\alpha - \beta\gamma^{x_i}, \tau^{-1}), \quad i = 1, \dots, n,$$

όπου $\alpha, \beta, \tau > 0$ και $0 < \gamma < 1$. Ως εκ των προτέρων κατανομή των παραμέτρων

του μοντέλου θεώρησαν την

$$q(\alpha, \beta, \gamma, \tau) \propto \alpha^{-1} \tau^{1/2}, \quad \alpha > 0, \beta > 0, 0 < \gamma < 1, \tau > 0.$$

Αυτό σημαίνει ότι θεώρησαν τις παραμέτρους του μοντέλου ανεξάρτητες με $\gamma \sim \mathcal{U}(0, 1)$, και α, β, τ να έχουν κάποιες καταχρηστικές (γενικευμένες) εκ των προτέρων κατανομές. Εμείς εδώ θα θεωρήσουμε επίσης ότι οι παράμετροι είναι εκ των προτέρων ανεξάρτητες αλλά ότι ακολουθούν τις σχετικά ασαφείς κατανομές

$$\alpha \sim \mathcal{N}(0, \tau_\alpha^{-1}) I(\alpha > 0),$$

$$\beta \sim \mathcal{N}(0, \tau_\beta^{-1}) I(\beta > 0),$$

$$\gamma \sim \mathcal{U}(0, 1),$$

$$\tau \sim \mathcal{G}(k, k),$$

με $\tau_\alpha = \tau_\beta = 10^{-4}$ και $k = 10^{-3}$. Το γεγονός ότι οι παραπάνω κατανομές είναι καθαρές κατανομές πιθανότητας εξασφαλίζει ότι το ίδιο θα ισχύει και για την εκ των υστέρων κατανομή. Να σημειωθεί ότι τις ίδιες εκ των προτέρων κατανομές θεώρησαν και οι Sahu and Zhigljavsky (2003) αλλά χωρίς τον περιορισμό του παραμετρικού χώρου, πιθανόν για λόγους απλότητας.

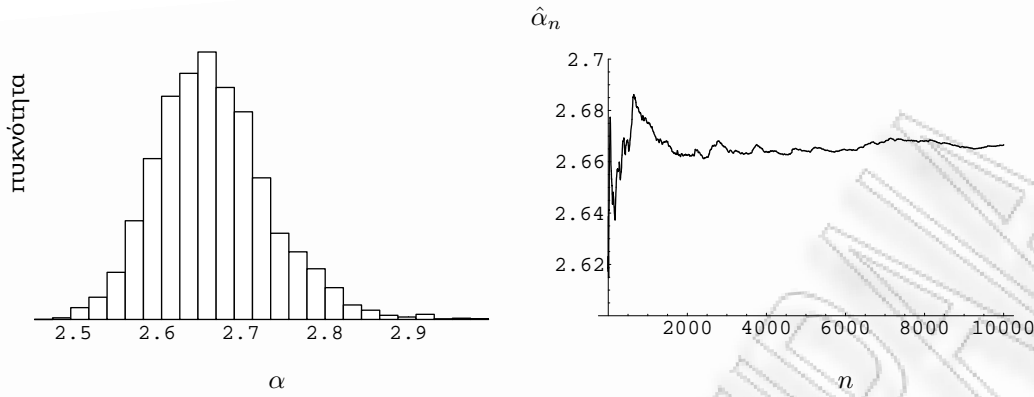
Η εκ των υστέρων κατανομή του $\theta = (\alpha, \beta, \gamma, \tau)$ είναι η

$$\begin{aligned} \pi(\theta|\text{data}) &\propto f(\text{data}|\theta) f(\alpha) f(\beta) f(\gamma) f(\tau) \\ &\propto \tau^{n/2+k-1} \exp \left\{ -\frac{\tau}{2} \sum_{i=1}^n (y_i - \alpha + \beta \gamma^{x_i})^2 \right\} \times \\ &\quad \exp \left\{ -\tau k - \frac{\tau_\alpha \alpha^2}{2} - \frac{\tau_\beta \beta^2}{2} \right\}, \end{aligned}$$

$$\alpha > 0, \beta > 0, \tau > 0, 0 < \gamma < 1.$$

Για την παραγωγή παρατηρήσεων από την $\pi(\theta|\text{data})$ μπορεί να χρησιμοποιηθεί ο δειγματολήπτης Gibbs ενσωματώνοντας ένα βήμα Metropolis για το γ , αφού η πλήρης δεσμευμένη κατανομή του γ δεν είναι κάποια «γνωστή» κατανομή, αντίθετα με τις πλήρεις δεσμευμένες κατανομές των α, β (περικεκομμένες κανονικές) και τ (γάμμα). Αντί αυτού, εδώ προτείνεται η ακόλουθη διαδικασία. Διαμερίζουμε το χώρο καταστάσεων $(0, 1)$ του γ σε m ισομήκη διαστήματα και επιλέγουμε ως κατανομή-στόχο τη διακριτοποίηση της π

$$g(\theta|\text{data}) \propto f(\text{data}|\alpha, \beta, \gamma_{[m]}, \tau) f(\alpha) f(\beta) f(\gamma) f(\tau)$$



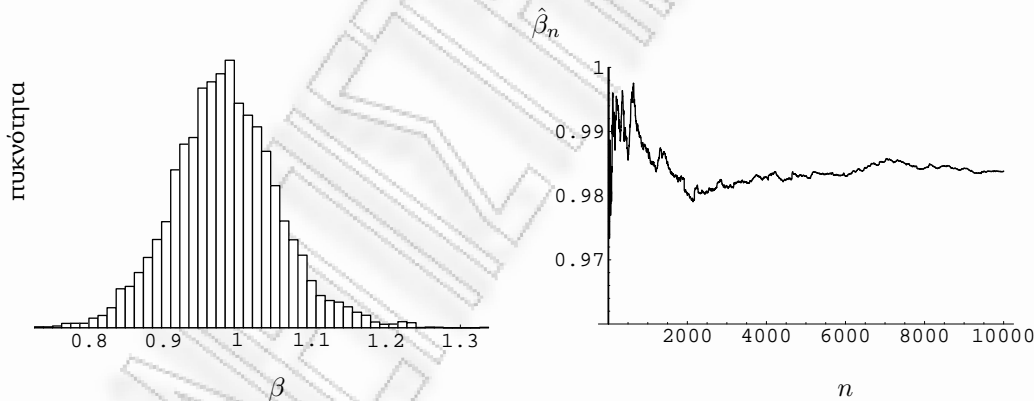
Σχήμα 4.5: Ιστόγραμμα του σταθμισμένου δείγματος $(\alpha_i, w(\theta_i))_{1 \leq i \leq 10000}$ και σύγκλιση του $\hat{\alpha}_n$ επιλέγοντας ως $\gamma_{[m]}$ το κέντρο κάθε υποδιαστήματος με $m = 50$.

$$\propto \tau^{n/2+k-1} \exp \left\{ -\frac{\tau}{2} \sum (y_i - \alpha + \beta \gamma_{[m]}^{x_i})^2 \right\} \times$$

$$\exp \left\{ -\tau k - \frac{\tau \alpha^2}{2} - \frac{\tau \beta^2}{2} \right\},$$

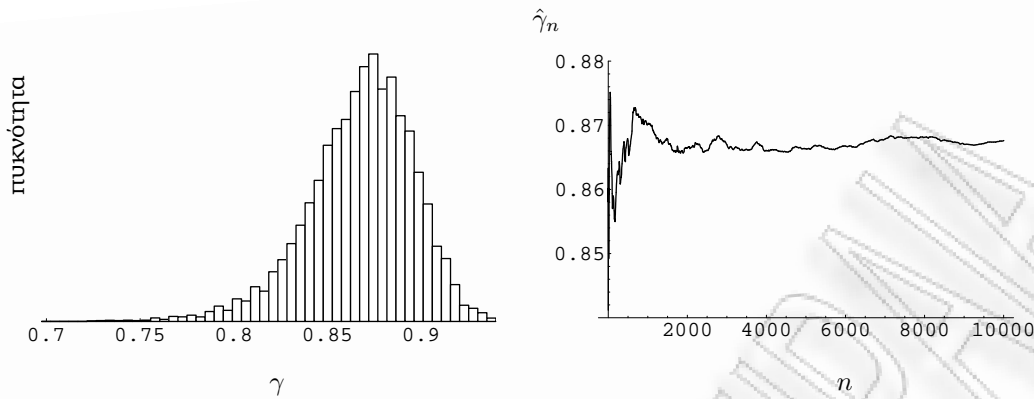
$$\alpha > 0, \beta > 0, \tau > 0, 0 < \gamma < 1.$$

όπου το $\gamma_{[m]}$ μπορεί να είναι οποιοδήποτε σημείο μέσα σε κάθε υποδιάστημα.



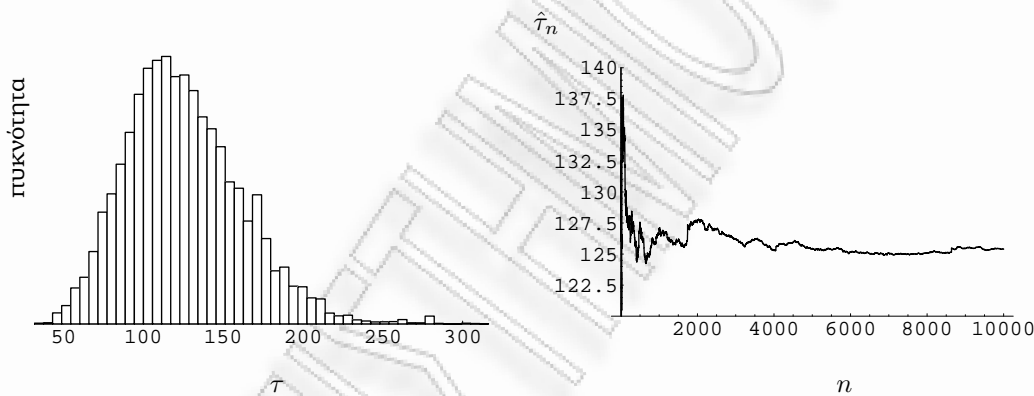
Σχήμα 4.6: Ιστόγραμμα του σταθμισμένου δείγματος $(\beta_i, w(\theta_i))_{1 \leq i \leq 10000}$ και σύγκλιση του $\hat{\beta}_n$ επιλέγοντας ως $\gamma_{[m]}$ το κέντρο κάθε υποδιαστήματος με $m = 50$.

Λόγω του ότι η πλήρης δεσμευμένη κατανομή του γ είναι τώρα μία απλή κατανομή, η προσομοίωση από αυτήν είναι εύκολη διαδικασία. Ως αντιπροσωπευτικό σημείο κάθε υποδιαστήματος θα μπορούσε να επιλεγεί το μέσο του. (Για τη σύγκλιση των σταθμισμένων εκτιμητών με $\gamma_{[m]}$ το μέσο του κάθε υποδιαστήματος και $m = 50$, δες Σχήματα 4.5–4.8. Επίσης στα ίδια σχήματα απεικονίζονται και τα ιστογράμματα των αντίστοιχων σταθμισμένων δειγμάτων.) Προκειμένου όμως να



Σχήμα 4.7: Ιστόγραμμα του σταθμισμένου δείγματος $(\gamma_i, w(\theta_i))_{1 \leq i \leq 10000}$ και σύγκλιση του $\hat{\gamma}_n$ επιλέγοντας ως $\gamma_{[m]}$ το κέντρο κάθε υποδιαστήματος με $m = 50$.

εξασφαλίσουμε ότι οι εργοδικοί μέσοι μπορεί να έχουν πεπερασμένη διασπορά, είναι απαραίτητο να επιλέξουμε πολύ συγκεκριμένα σημεία.



Σχήμα 4.8: Ιστόγραμμα του σταθμισμένου δείγματος $(\tau_i, w(\theta_i))_{1 \leq i \leq 10000}$ και σύγκλιση του $\hat{\tau}_n$ επιλέγοντας ως $\gamma_{[m]}$ το κέντρο κάθε υποδιαστήματος με $m = 50$.

Λήμμα 4.1. Αν $\gamma_{[m]}$ είναι το σημείο που μεγιστοποιεί την $\pi(\theta|data)$ ως προς γ μέσα σε κάθε ένα από τα m υποδιαστήματα του $(0, 1)$, τότε η διασπορά των βαρών σπουδαιότητας είναι πεπερασμένη.

Απόδειξη. Η δεύτερη ροπή των βαρών ισούται με

$$\int_{\theta} w^2(\theta) g(\theta) d\theta = \int_{\theta} w(\theta) \pi(\theta) d\theta = \int_{\alpha, \beta, \gamma, \tau} \exp \left\{ -\frac{\tau}{2} \left[\sum_i^n (y_i - \alpha + \beta \gamma^{x_i})^2 - \sum_i^n (y_i - \alpha + \beta \gamma_{[m]}^{x_i})^2 \right] \right\} \times \tau^{n/2+k-1} \exp \left\{ \sum_i^n (y_i - \alpha + \beta \gamma^{x_i})^2 - \tau k - \frac{\tau \alpha^2}{2} - \frac{\tau \beta^2}{2} \right\} d\alpha d\beta d\gamma d\tau =$$

$$\int_{\alpha, \beta, \gamma, \tau} \tau^{n/2+k-1} \exp \left\{ -\tau \left[\sum_i^n (y_i - \alpha + \beta \gamma^{x_i})^2 - \frac{1}{2} \sum_i^n (y_i - \alpha + \beta \gamma_{[m]}^{x_i})^2 + k \right] \right\} \times \\ \exp \left(-\frac{\tau \alpha^2}{2} - \frac{\tau \beta^2}{2} \right) d\alpha d\beta d\gamma d\tau.$$

Προκειμένου το ολοκλήρωμα ως προς τ να είναι πεπερασμένο, θα πρέπει να εξασφαλίσουμε ότι η ποσότητα $\sum (y_i - \alpha + \beta \gamma^{x_i})^2 - \frac{1}{2} \sum (y_i - \alpha + \beta \gamma_{[m]}^{x_i})^2 + k$ είναι θετική για κάθε α, β και γ . Αυτό απαιτεί να επιλέξουμε ως $\gamma_{[m]}$ το μέγιστο της π ως προς γ σε κάθε διάστημα. Ολοκληρώνοντας τότε ως προς τ θα έχουμε

$$\int_{\theta} w^2(\theta) g(\theta) d\theta = \\ = \int_{\alpha, \beta, \gamma} \frac{\Gamma(n/2 + k) \exp \left(-\frac{\tau \alpha^2}{2} - \frac{\tau \beta^2}{2} \right)}{\left\{ \sum_i^n (y_i - \alpha + \beta \gamma^{x_i})^2 - \frac{1}{2} \sum_i^n (y_i - \alpha + \beta \gamma_{[m]}^{x_i})^2 + k \right\}^{n/2+k}} d\alpha d\beta d\gamma \\ \leq \Gamma(n/2 + k) k^{-n/2-k} \int_{\alpha, \beta} \exp \left(-\frac{\tau \alpha^2}{2} - \frac{\tau \beta^2}{2} \right) d\alpha d\beta < \infty.$$

□

Δουλεύοντας με αντίστοιχο τρόπο, μπορούμε να δείξουμε εύκολα ότι και τα

$$\int_{\theta} \alpha^2 w^2(\theta) d(\alpha), \quad \int_{\theta} \beta^2 w^2(\theta) d(\beta) \quad \text{και} \quad \int_{\theta} \tau^2 w^2(\theta) d(\tau)$$

είναι πεπερασμένα. (Το γ είναι φραγμένο επομένως δεν τίθεται θέμα μη ύπαρξης των ροπών του.) Πιο συγκεκριμένα:

$$E(\alpha^2 | \beta, \gamma, \tau) = \int_{\theta} \alpha^2 w^2(\theta) g(\theta) d\theta = \\ \int_{\alpha, \beta, \gamma, \tau} \alpha^2 \exp \left\{ -\frac{\tau}{2} \left[\sum_i^n (y_i - \alpha + \beta \gamma^{x_i})^2 - \sum_i^n (y_i - \alpha + \beta \gamma_{[m]}^{x_i})^2 \right] \right\} \times \\ \tau^{n/2+k-1} \exp \left\{ \sum_i^n (y_i - \alpha + \beta \gamma^{x_i})^2 - \tau k - \frac{\tau \alpha^2}{2} - \frac{\tau \beta^2}{2} \right\} d\alpha d\beta d\gamma d\tau = \\ \int_{\alpha, \beta, \gamma} \frac{\alpha^2 \Gamma(n/2 + k) \exp \left(-\frac{\tau \alpha^2}{2} - \frac{\tau \beta^2}{2} \right)}{\left\{ \sum_i^n (y_i - \alpha + \beta \gamma^{x_i})^2 - \frac{1}{2} \sum_i^n (y_i - \alpha + \beta \gamma_{[m]}^{x_i})^2 + k \right\}^{n/2+k}} d\alpha d\beta d\gamma \leq \\ \Gamma(n/2 + k) k^{-n/2-k} \int_{\alpha, \beta} \alpha^2 \exp \left(-\frac{\tau \alpha^2}{2} - \frac{\tau \beta^2}{2} \right) d\alpha d\beta < \infty.$$

Η απόδειξη για την $E(\beta^2 | \alpha, \gamma, \tau)$ είναι σχεδόν ίδια και γι' αυτό παραλείπεται.

Τέλος,

$$\begin{aligned}
E(\tau^2|\alpha, \beta, \gamma) &= \int_{\theta} \tau^2 w^2(\theta) g(\theta) d\theta = \\
&\int_{\alpha, \beta, \gamma, \tau} \tau^2 \exp \left\{ -\frac{\tau}{2} \left[\sum_i^n (y_i - \alpha + \beta \gamma^{x_i})^2 - \sum_i^n (y_i - \alpha + \beta \gamma_{[m]}^{x_i})^2 \right] \right\} \times \\
&\quad \tau^{n/2+k-1} \exp \left\{ \sum_i^n (y_i - \alpha + \beta \gamma^{x_i})^2 - \tau k - \frac{\tau \alpha^2}{2} - \frac{\tau \beta^2}{2} \right\} d\alpha d\beta d\gamma d\tau = \\
&\int_{\alpha, \beta, \gamma} \frac{\Gamma(n/2 + k + 2) \exp \left(-\frac{\tau \alpha^2}{2} - \frac{\tau \beta^2}{2} \right)}{\left\{ \sum_i^n (y_i - \alpha + \beta \gamma^{x_i})^2 - \frac{1}{2} \sum_i^n (y_i - \alpha + \beta \gamma_{[m]}^{x_i})^2 + k \right\}^{n/2+k+2}} d\alpha d\beta d\gamma \leq \\
&\quad \Gamma(n/2 + k + 2) k^{-n/2-k-2} \int_{\alpha, \beta} \exp \left(-\frac{\tau \alpha^2}{2} - \frac{\tau \beta^2}{2} \right) d\alpha d\beta < \infty.
\end{aligned}$$

Η προσομοίωση από την πλήρη δεσμευμένη κατανομή του γ είναι πλέον μία τυπική διαδικασία και γίνεται σε δύο στάδια. Αρχικά επιλέγουμε με πιθανότητα

$$p(j|\alpha, \beta, \tau, \text{data}) \propto g(\alpha, \beta, \gamma_{[m]}, \tau|\text{data}), \quad j = 1, \dots, m,$$

ένα από τα m διαστήματα και έπειτα παράγουμε $u \sim \mathcal{U}(0, 1)$ και θέτουμε $\gamma = (j+u-1)/m$. Σε κάθε επανάληψη του αλγορίθμου, στο διάνυσμα των παραμέτρων θ αντιστοιχίζεται βάρος

$$w(\theta) \propto \frac{\pi(\theta|\text{data})}{g(\theta|\text{data})} = \frac{f(\text{data}|\alpha, \beta, \gamma, \tau)}{f(\text{data}|\alpha, \beta, \gamma_{[m]}, \tau)},$$

οπότε, σύμφωνα με την Πρόταση 3.2, η διαδικασία με άλματα που σχετίζεται με αυτήν τη σταθμισμένη ακολουθία συγκλίνει στην π .

Επιλέγοντας τώρα ως $\gamma_{[m]}$ το μέγιστο κάθε υποδιαστήματος υλοποιήσαμε τον προτεινόμενο αλγόριθμο για $m = 20$. Στα Σχήματα 4.9–4.12 βλέπουμε τα ιστογράμματα και τις συγκλίσεις των σταθμισμένων μέσων $\hat{\alpha}_n^{IS} = \sum_{i=1}^n w(\theta_i) \alpha_i / \sum_{i=1}^n w(\theta_i)$, $\hat{\beta}_n^{IS} = \sum_{i=1}^n w(\theta_i) \beta_i / \sum_{i=1}^n w(\theta_i)$, $\hat{\gamma}_n^{IS} = \sum_{i=1}^n w(\theta_i) \gamma_i / \sum_{i=1}^n w(\theta_i)$ και $\hat{\tau}_n^{IS} = \sum_{i=1}^n w(\theta_i) \tau_i / \sum_{i=1}^n w(\theta_i)$ στις εκ των υστέρων μέσες τιμές $E\{\alpha|\text{data}\}$, $E\{\beta|\text{data}\}$, $E\{\gamma|\text{data}\}$ και $E\{\tau|\text{data}\}$ αντίστοιχα. Οι παραπάνω μέσες τιμές είναι υπολογισμένες από ένα δείγμα μεγέθους 10000 παρατηρήσεων μετά από μία περίοδο burn-in 1000 επαναλήψεων, με $m = 20$.

Εκτός από τη γρήγορη σύγκλιση, κάτι άλλο που παρατηρούμε στα Σχήματα 4.9–4.12 είναι η σημαντική μείωση των αυτοσυσχετίσεων των γινομένων $(\alpha_i w(\theta_i))_{i \geq 1}$, $(\beta_i w(\theta_i))_{i \geq 1}$, $(\gamma_i w(\theta_i))_{i \geq 1}$ και $(\tau_i w(\theta_i))_{i \geq 1}$ σε σχέση με αυτές των $(\alpha_i)_{i \geq 1}$, $(\beta_i)_{i \geq 1}$, $(\gamma_i)_{i \geq 1}$ και $(\tau_i)_{i \geq 1}$. Οι αυτοσυσχετίσεις όλων των ακολουθιών των γινομένων μπορεί να θεωρηθεί ότι σχεδόν μηδενίζονται (δες Σχήματα 4.9–4.12).

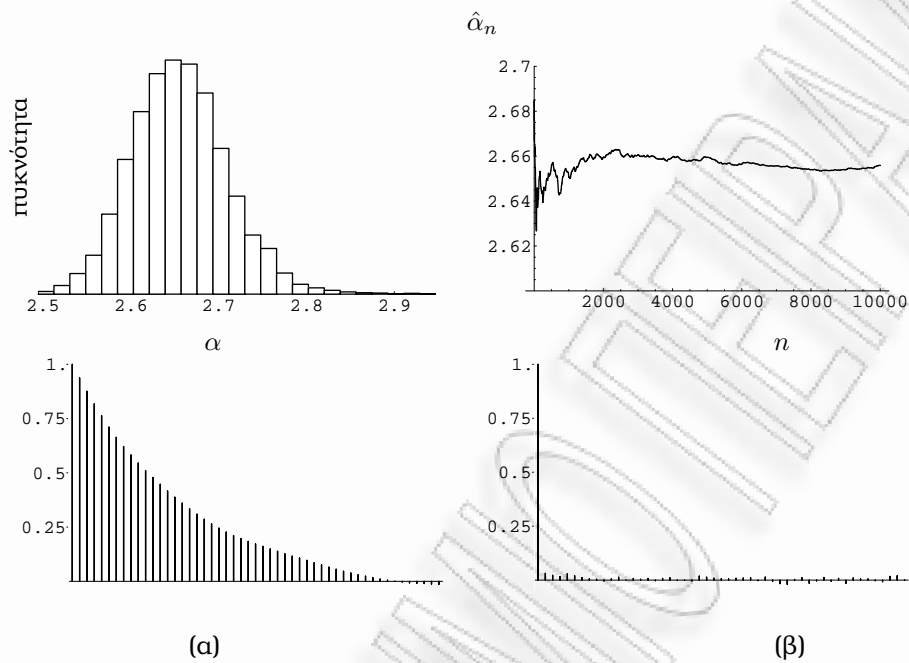
Αυτό είναι ένα ιδιαίτερα σημαντικό χαρακτηριστικό της προτεινόμενης τεχνικής αφού λόγω αυτού επιτρέπεται η χρήση απλών τεχνικών για ανεξάρτητα δείγματα για τον υπολογισμό των διασπορών των εκτιμητών λόγου (ratio estimator) αντί σύνθετων τεχνικών που εφαρμόζονται σε μεθόδους MCMC.

Προκειμένου να συγκρίνουμε την προτεινόμενη μέθοδο με τη μέθοδο που χρησιμοποιεί το WinBugs για το συγκεκριμένο σύνολο δεδομένων, υλοποιήσαμε τις δύο τεχνικές χρησιμοποιώντας τις ίδιες εκ των προτέρων κατανομές και τις ίδιες αρχικές τιμές. Στο Σχήμα 4.13 απεικονίζονται οι συγκλίσεις των εκτιμητών και οι αντίστοιχες αυτοσυσχετίσεις για τις δύο μεθόδους. Όπως μπορούμε να δούμε, η σύγκλιση στις εκ των υστέρων μέσες τιμές για όλες τις παραμέτρους είναι σχεδόν ίδια για τις δύο μεθόδους. Χρησιμοποιώντας όμως την προτεινόμενη μέθοδο έχουμε σημαντική μείωση των αυτοσυσχετίσεων με αποτέλεσμα να παίρνουμε εκτιμητές με μικρότερες διασπορές που υπολογίζονται εύκολα χρησιμοποιώντας απλές τεχνικές για τυχαία δείγματα.

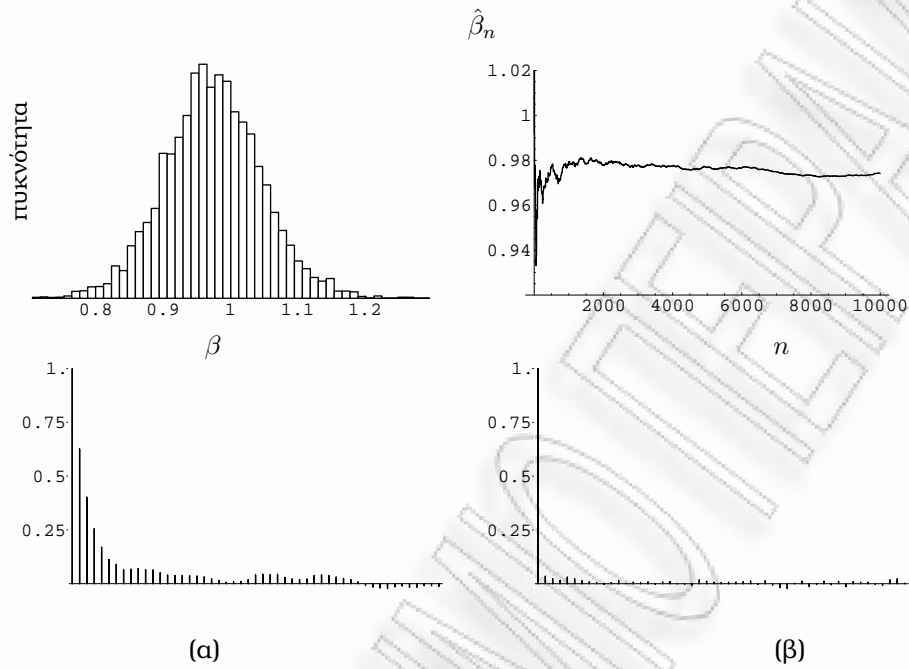
Στον Πίνακα 4.3 παρουσιάζονται οι εκτιμήσεις και τα αντίστοιχα τυπικά σφάλματα από τις δύο μεθόδους (οι οποίες υπολογίστηκαν από 100 ανεξάρτητες αλυσίδες).

| Παράμετροι | Εκτιμήσεις Πρ. Μεθόδου | Εκτιμήσεις WinBugs |
|------------|---------------------------|-----------------------|
| α | 2.660 (0.055) | 2.650 (0.073) |
| β | 0.975 (0.069) | 0.973 (0.077) |
| γ | 0.867 (0.023) | 0.861 (0.034) |

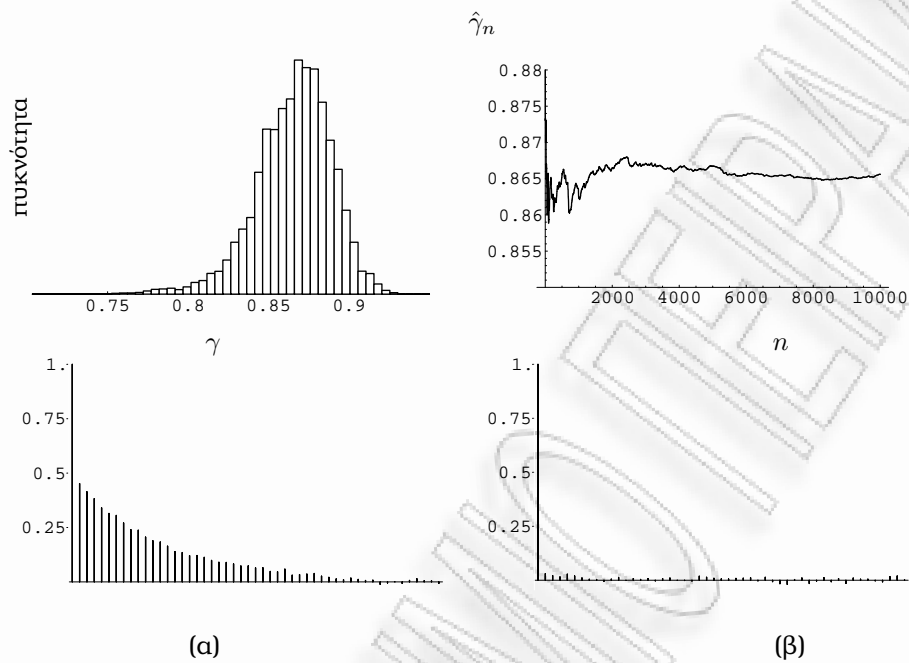
Πίνακας 4.3: Οι εκτιμήσεις των παραμέτρων του μοντέλου (και τα αντίστοιχα τυπικά σφάλματα) υπολογισμένες σε ένα δείγμα μεγέθους 10000 μετά από μία περίοδο burn-in 1000 επαναλήψεων, χρησιμοποιώντας την προτεινόμενη μέθοδο με $m = 20$ και την αντίστοιχη μέθοδο του Winbugs.



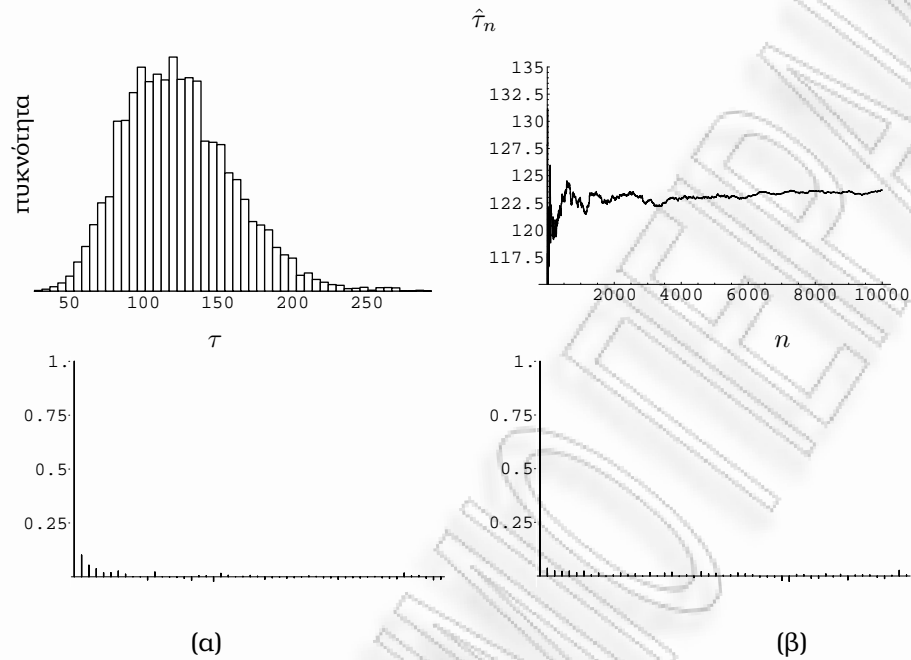
Σχήμα 4.9: Ιστογράμμο του σταθμισμένου δείγματος $(\alpha_i, w(\theta_i))_{1 \leq i \leq 10000}$, σύγκλιση του $\hat{\alpha}_n$ και διαγράμματα αυτοσυσχετίσεων για τα $(\alpha_i)_{1 \leq i \leq 10000}$ (α) και τα $(\alpha_i w(\theta_i))_{1 \leq i \leq 10000}$ (β) επιλέγοντας ως $\gamma_{[m]}$ το μέγιστο κάθε υποδιαστήματος με $m = 20$.



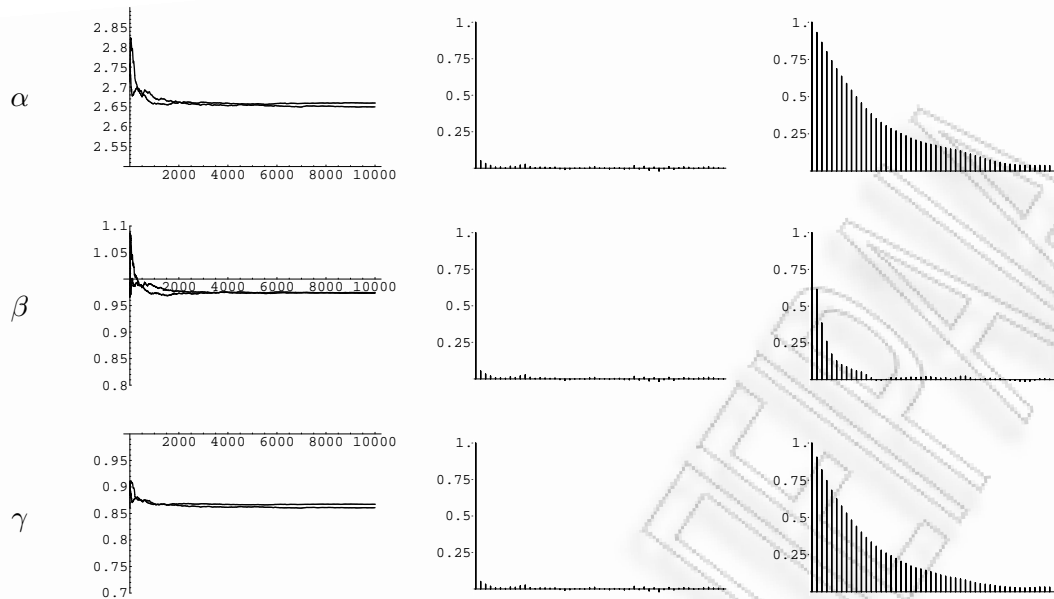
Σχήμα 4.10: Ιστογράμμο του σταθμισμένου δείγματος $(\beta_i, w(\theta_i))_{1 \leq i \leq 10000}$, σύγκλιση του $\hat{\beta}_n$ και διαγράμματα αυτοσυσχετίσεων για τα $(\beta_i)_{1 \leq i \leq 10000}$ (α) και τα $(\beta_i w(\theta_i))_{1 \leq i \leq 10000}$ (β) επιλέγοντας ως $\gamma_{[m]}$ το μέγιστο κάθε υποδιαστήματος με $m = 20$.



Σχήμα 4.11: Ιστόγραμμα του σταθμισμένου δείγματος $(\gamma_i, w(\theta_i))_{1 \leq i \leq 10000}$, σύγκλιση του $\hat{\gamma}_n$ και διαγράμματα αυτοσυσχετίσεων για τα $(\gamma_i)_{1 \leq i \leq 10000}$ (α) και τα $(\gamma_i w(\theta_i))_{1 \leq i \leq 10000}$ (β) επιλέγοντας ως $\gamma_{[m]}$ το μέγιστο κάθε υποδιαστήματος με $m = 20$.



Σχήμα 4.12: Ιστόγραμμα του σταθμισμένου δείγματος $(\tau_i, w(\theta_i))_{1 \leq i \leq 10000}$, σύγκλιση του $\hat{\tau}_n$ και διαγράμματα αυτοσυσχετίσεων για τα $(\tau_i)_{1 \leq i \leq 10000}$ (α) και τα $(\tau_i w(\theta_i))_{1 \leq i \leq 10000}$ (β) επιλέγοντας ως $\tau_{[m]}$ το μέγιστο κάθε υποδιαστήματος με $m = 20$.



Σχήμα 4.13: Σύγκλιση των εκτιμητών των παραμέτρων του μοντέλου και οι αυτοσυσχετίσεις των γινομένων $(\alpha_i w(\theta_i))_{1 \leq i \leq 10000}$, $(\beta_i w(\theta_i))_{1 \leq i \leq 10000}$ ($\gamma_i w(\theta_i)_{1 \leq i \leq 10000}$ (δεύτερη στήλη) και των αντίστοιχων δειγμάτων που έχουμε πάρει από το WinBugs.

4.3.4 Σύνολο δεδομένων Challenger

Το διαστημικό λεωφορείο Challenger εξερράγη κατά τη διάρκεια της απογείωσής του το 1986. Η έκρηξη προκλήθηκε από βλάβη ενός Ο-δακτυλίου. Οι Ο-δακτύλιοι είναι ελαστικοί δακτύλιοι οι οποίοι σφραγίζουν κυκλικά κάποια διάκενα στην επιφάνεια του σκάφους. Πιστεύεται ότι το ατύχημα οφείλεται στην ασυνήθιστα χαμηλή θερμοκρασία του περιβάλλοντος κατά την ώρα της εκτόξευσης, καθώς η πιθανότητα βλάβης των Ο-δακτυλίων αυξάνεται όταν η θερμοκρασία μειώνεται (Dalal et al., 1989). Αυτό το συμπέρασμα διατυπώθηκε έπειτα από διεξοδική ανάλυση δεδομένων από προηγούμενες εκτοξεύσεις διαστημικών λεωφορείων και βλαβών στους Ο-δακτυλίους.

| | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
|-------|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|
| x_i | 53 | 57 | 58 | 63 | 66 | 67 | 67 | 67 | 67 | 68 | 69 | 70 | 70 | 70 | 70 | 72 | 73 | 75 | 75 | 76 | 76 | 78 | 79 | 81 |
| y_i | 1 | 1 | 1 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 1 | 1 | 0 | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |

Πίνακας 4.4: Το σύνολο δεδομένων Challenger: $y_i = 1$ σημαίνει βλάβη στον i Ο-δακτύλιο.

Έστω y_i η μεταβλητή που δείχνει την κατάσταση του Ο-δακτυλίου με $y_i = 1$ αν παρουσιάζεται βλάβη και 0 για κανονική λειτουργία του i δακτυλίου και x_i η θερμοκρασία (σε βαθμούς Fahrenheit) κατά την ώρα της απογείωσης, $i =$

1, ..., 23 (δες Πίνακα 4.4). Ένα λογικό μοντέλο για να περιγραφούν τα δεδομένα είναι το μοντέλο λογιστικής παλινδρόμησης. Σύμφωνα με αυτό,

$$P(Y = 1|x) = p(x) = \frac{\exp(\alpha + \beta x)}{1 + \exp(\alpha + \beta x)},$$

δηλαδή η $p(x)$ παριστάνει την πιθανότητα βλάβης ενός 0-δακτυλίου στη θερμοκρασία x .

Θεωρούμε τις ίδιες εκ των προτέρων κατανομές για τις παραμέτρους του μοντέλου με αυτές που χρησιμοποιούν οι Robert and Casella (1999). Τα α , β είναι εκ των προτέρων ανεξάρτητα με e^α να ακολουθεί εκθετική κατανομή και το β να έχει μία ομοιόμορφη (καταχρηστική) κατανομή στο \mathbb{R} :

$$\pi(\alpha, \beta) = \pi_\alpha(\alpha)\pi_\beta(\beta) = e^{\alpha - e^\alpha/b}, \quad \alpha \in \mathbb{R}, \beta \in \mathbb{R},$$

όπου b μια θετική σταθερά. Έστω $\hat{\alpha} = 15.043$ η εκτίμηση μέγιστης πιθανοφάνειας του α . Ακολουθώντας τους Robert and Casella (1999), θέτουμε $b = e^{\hat{\alpha} + \gamma}$, όπου $\gamma = 0.577216$ είναι η σταθερά του Euler. Η επιλογή αυτή γίνεται έτσι ώστε το b να είναι η τιμή για την οποία ισχύει $E(\alpha) = \hat{\alpha}$, αφού

$$E(\alpha) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{b} e^\alpha e^{-e^\alpha/b} d\alpha = \int_0^{\infty} \log w \frac{1}{b} e^{-w/b} dw = \log b - \gamma.$$

Έτσι, η εκ των υστέρων κατανομή των παραμέτρων του μοντέλου θα είναι

$$\begin{aligned} \pi(\alpha, \beta | \text{data}) &\propto f(\text{data} | \alpha, \beta) \pi_\alpha(\alpha) \pi_\beta(\beta) \\ &\propto \prod_{i=1}^{23} \left\{ \frac{\exp(\alpha + \beta x_i)}{1 + \exp(\alpha + \beta x_i)} \right\}^{y_i} \left\{ \frac{1}{1 + \exp(\alpha + \beta x_i)} \right\}^{1-y_i} e^{\alpha - e^\alpha/b}, \\ &\alpha \in \mathbb{R}, \beta \in \mathbb{R}. \end{aligned}$$

Για να υλοποιήσουμε το δειγματολήπτη Gibbs χρειάζονται οι πλήρεις δεσμευμένες κατανομές των α και β . Όμως αυτές δεν είναι δυνατόν να βρεθούν σε κλειστή μορφή. Προκειμένου να αντιμετωπίσουμε το πρόβλημα μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε την προτεινόμενη μέθοδο, δηλαδή να διακριτοποιήσουμε το χώρο καταστάσεων και έπειτα να σταθμίσουμε κατάλληλα το δείγμα που έχει παραχθεί. Ο χώρος καταστάσεων του (α, β) είναι το \mathbb{R}^2 που είναι μη φραγμένο σύνολο. Για να υλοποιήσουμε την προτεινόμενη μέθοδο είναι απαραίτητος ένας μετασχηματισμός έτσι ώστε ο νέος χώρος να προκύψει φραγμένος. Θέτοντας

$$\theta = \frac{\exp\{(\alpha - \hat{\alpha})/\lambda_1\}}{1 + \exp\{(\alpha - \hat{\alpha})/\lambda_1\}} \quad \text{και} \quad \eta = \frac{\exp\{(\beta - \hat{\beta})/\lambda_2\}}{1 + \exp\{(\beta - \hat{\beta})/\lambda_2\}},$$

όπου λ_1 και λ_2 θετικές σταθερές και $\hat{\alpha}$, $\hat{\beta}$ οι εκτιμήσεις μέγιστης πιθανοφάνειας των α , β , ο χώρος καταστάσεων του (θ, η) είναι το φραγμένο σύνολο $(0, 1)^2$.

Η εκ των υστέρων κατανομή του (θ, η) είναι

$$\pi(\theta, \eta | \text{data}) \propto \frac{f(\text{data} | \theta, \eta) \pi_\alpha(\hat{\alpha} + \lambda_1 \text{logit}(\theta)) \pi_\beta(\hat{\beta} + \lambda_2 \text{logit}(\eta))}{\theta(1-\theta)\eta(1-\eta)},$$

$$(\theta, \eta) \in (0, 1)^2,$$

όπου $\text{logit}(x) = \log\left(\frac{x}{1-x}\right)$. Επιλέγουμε ως νέα κατανομή-στόχο την

$$g(\theta, \eta | \text{data}) \propto \frac{f(\text{data} | \theta_{[m_1]}, \eta_{[m_2]}) \pi_\alpha(\hat{\alpha} + \lambda_1 \text{logit}(\theta_{[m_1]})) \pi_\beta(\hat{\beta} + \lambda_2 \text{logit}(\eta_{[m_2]}))}{\theta_{[m_1]}(1-\theta_{[m_1]}) \eta_{[m_2]}(1-\eta_{[m_2]})},$$

$$(\theta, \eta) \in (0, 1)^2,$$

όπου m_1, m_2 τα πλήθη των υποσυνόλων στα οποία έχουν διαμεριστεί οι χώροι καταστάσεων των θ και η αντίστοιχα και $\theta_{[m_1]} = (2[m_1\theta] + 1)/2m_1$, $\eta_{[m_2]} = (2[m_2\eta] + 1)/2m_2$ τα μέσα των υποδιαστημάτων. Η εφαρμογή του δειγματολήπτη Gibbs χρησιμοποιώντας ως κατανομή-στόχο τη g είναι πλέον μια εύκολη διαδικασία. Σε κάθε επανάληψη σταθμίζουμε το (θ, η) με το $w(\theta, \eta) = \pi(\theta, \eta | \text{data})/g(\theta, \eta | \text{data})$.

Λήμμα 4.2. Για κατάλληλες τιμές των λ_1 και λ_2 , η διασπορά των βαρών σπουδαιότητας είναι πεπερασμένη.

Απόδειξη. Η δεύτερη ροπή των βαρών ισούται με

$$\begin{aligned} \iint w^2(\theta, \eta) g(\theta, \eta) d\theta d\eta &= \iint w(\theta, \eta) \pi(\theta, \eta) d\theta d\eta \\ &= \sum_{j=1}^{m_1} \sum_{k=1}^{m_2} \int_{\theta=(j-1)/m_1}^{j/m_1} \int_{\eta=(k-1)/m_2}^{k/m_2} w(\theta, \eta) \pi(\theta, \eta) d\theta d\eta \\ &= \sum_{j=1}^{m_1} \sum_{k=1}^{m_2} C_{jk} \times \\ &\quad \int_{\theta=(j-1)/m_1}^{j/m_1} \int_{\eta=(k-1)/m_2}^{k/m_2} \frac{\exp\{2\hat{\alpha} + 2\lambda_1 \text{logit}(\theta) - 2 \exp[\hat{\alpha} + \lambda_1 \text{logit}(\theta)]/b\}}{\theta^2(1-\theta)^2 \eta^2(1-\eta)^2} \times \\ &\quad \prod_{i=1}^n \frac{\exp\{2y_i[\hat{\alpha} + \lambda_1 \text{logit}(\theta) + \hat{\beta}x_i + \lambda_2 x_i \text{logit}(\eta)]\}}{\{1 + \exp[\hat{\alpha} + \lambda_1 \text{logit}(\theta) + \hat{\beta}x_i + \lambda_2 x_i \text{logit}(\eta)]\}^2} d\theta d\eta, \end{aligned}$$

όπου C_{jk}^{-1} ισούται με την τιμή της προς ολοκλήρωση συνάρτησης υπολογισμένης στα σημεία $\theta_{[m_1]}, \eta_{[m_2]}$, δηλαδή στα μέσα των διαστημάτων $[(j-1)/m_1, j/m_1]$, $[(k-1)/m_2, k/m_2]$, αντίστοιχα. Ορίζοντας τώρα $C^* = \max C_{jk} < \infty$, ισχύει η ανισότητα

$$\iint w(\theta, \eta)^2 g(\theta, \eta) d\theta d\eta \leq$$

$$C^* \int_{\theta=0}^1 \int_{\eta=0}^1 \frac{\exp \{2\hat{\alpha} + 2\lambda_1 \text{logit}(\theta) - 2 \exp [\hat{\alpha} + \lambda_1 \text{logit}(\theta)] / b\}}{\theta^2(1-\theta)^2\eta^2(1-\eta)^2} \times \\ \prod_{i=1}^n \frac{\exp \{2y_i [\hat{\alpha} + \lambda_1 \text{logit}(\theta) + \hat{\beta}x_i + \lambda_2x_i \text{logit}(\eta)]\}}{\{1 + \exp [\hat{\alpha} + \lambda_1 \text{logit}(\theta) + \hat{\beta}x_i + \lambda_2x_i \text{logit}(\eta)]\}^2} d\theta d\eta = \\ C^{**} \int_{\theta=0}^1 \int_{\eta=0}^1 \frac{\exp \{2\lambda_1 \text{logit}(\theta) - 2 \exp [\lambda_1 \text{logit}(\theta)] / b\}}{\theta^2(1-\theta)^2\eta^2(1-\eta)^2} \times \\ \frac{\exp \{2\lambda_1 \text{logit}(\theta) \sum y_i + 2\lambda_2 \text{logit}(\eta) \sum x_i y_i\}}{\prod_{i=1}^n \{1 + C_1 \exp [\lambda_1 \text{logit}(\theta) + \hat{\beta}x_i + \lambda_2x_i \text{logit}(\eta)]\}^2},$$

όπου $C^{**} = C^* \exp\{2\hat{\alpha}(2 \sum y_i + 1) + 2\hat{\beta} \sum x_i y_i - 2 \exp(\hat{\alpha})/b\}$ και $C_1 = \exp(\hat{\alpha})$.
Θέτοντας $s_y = \sum y_i$, $s_x = \sum x_i$, $s_{xy} = \sum x_i y_i$, το τελευταίο ολοκλήρωμα γίνεται

$$\int_{\theta=0}^1 \int_{\eta=0}^1 \frac{\left(\frac{\theta}{1-\theta}\right)^{2\lambda_1(s_y+1)} \left(\frac{\eta}{1-\eta}\right)^{2\lambda_2 s_{xy}} \exp \left\{ -2b^{-1} \left(\frac{\theta}{1-\theta}\right)^{\lambda_1} \right\}}{\theta^2(1-\theta)^2\eta^2(1-\eta)^2 \prod_{i=1}^n \left\{ 1 + C_1 \exp(\hat{\beta}x_i) \left(\frac{\theta}{1-\theta}\right)^{\lambda_1} \left(\frac{\eta}{1-\eta}\right)^{\lambda_2 x_i} \right\}^2} d\theta d\eta.$$

Κάνοντας τώρα την αλλαγή μεταβλητών $v = \frac{\theta}{1-\theta}$ και $u = \frac{\eta}{1-\eta}$, το ολοκλήρωμα παίρνει τη μορφή

$$I = \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{v^{2\lambda_1(s_y+1)} u^{2\lambda_2 s_{xy}}}{\prod_{i=1}^n \{1 + C_1 \exp(\hat{\beta}x_i) v^{\lambda_1} u^{\lambda_2 x_i}\}^2} \left(1 + \frac{1}{u}\right)^2 \left(1 + \frac{1}{v}\right)^2 e^{-2v^{\lambda_1}/b} dudv.$$

Ας θεωρήσουμε αρχικά το ολοκλήρωμα ως προς u ,

$$I_v \equiv \int_0^\infty \frac{u^{2\lambda_2 s_{xy}}}{\prod_{i=1}^n \{1 + C_1 \exp(\hat{\beta}x_i) v^{\lambda_1} u^{\lambda_2 x_i}\}^2} \left(1 + \frac{1}{u}\right)^2 du.$$

Ισχύει $\prod_{i=1}^n \{1 + C_1 \exp(\hat{\beta}x_i) v^{\lambda_1} u^{\lambda_2 x_i}\} > 1 + C_1 \exp(\hat{\beta}s_x) v^{n\lambda_1} u^{\lambda_2 s_x}$, οπότε

$$I_v \leq \int_0^\infty \frac{u^{2\lambda_2 s_{xy}}}{\{1 + C_2 v^{n\lambda_1} u^{\lambda_2 s_x}\}^2} \left(1 + \frac{1}{u}\right)^2 du \equiv I_v^*,$$

όπου $C_2 = C_1 \exp(\hat{\beta}s_x)$. Κάνοντας την αλλαγή μεταβλητής $t = C_2 v^{n\lambda_1} u^{\lambda_2 s_x}$ και θέτοντας $C_3 = C_2^{1/\lambda_2 s_x}$, $C_4 = \lambda_2 s_x C_3 C_2^{2s_{xy}/s_x}$, έχουμε

$$I_v^* = \frac{1}{C_4 v^{\lambda_1(2s_{xy} + \lambda_2^{-1})/\bar{x}}} \int_0^\infty \frac{t^{(2s_{xy} + \lambda_2^{-1})/s_x - 1}}{(1+t)^2} \left(1 + \frac{C_3 v^{\lambda_1/\lambda_2 \bar{x}}}{t^{1/\lambda_2 s_x}}\right)^2 dt \\ = \frac{1}{C_4 v^{\lambda_1(2s_{xy} + \lambda_2^{-1})/\bar{x}}} \left\{ \int_0^\infty \frac{t^{(2s_{xy} + 1/\lambda_2)/s_x - 1}}{(1+t)^2} dt + \right.$$

$$2C_3 v^{\lambda_1/\lambda_2 \bar{x}} \int_0^\infty \frac{t^{2s_{xy}/s_x - 1}}{(1+t)^2} dt + C_3^2 v^{2\lambda_1/\lambda_2 \bar{x}} \int_0^\infty \frac{t^{(2s_{xy}-1/\lambda_2)/s_x - 1}}{(1+t)^2} dt \Big\}.$$

Για κάθε λ_2 τέτοιο ώστε

$$(2s_{xy} + 1/\lambda_2)/s_x < 2, \quad (4.1)$$

όλα τα παραπάνω ολοκληρώματα είναι πεπερασμένα.

Το I θα είναι πεπερασμένο αν

$$I_j \equiv \int_0^\infty v^{2\lambda_1(s_y+1) - \{2\lambda_1 s_{xy} + (1-j)\lambda_1/\lambda_2\}/\bar{x} - 2} (1+v)^2 e^{-2v/b} dv < \infty, \quad \text{για } j = 0, 1, 2.$$

Αυτό θα ισχύει αν

$$2\lambda_1(s_y + 1) - (2\lambda_1 s_{xy} + \lambda_1/\lambda_2)/\bar{x} - 1 > 0. \quad (4.2)$$

Υπό τις συνθήκες (4.1) και (4.2) η διασπορά των βαρών είναι πεπερασμένη¹. \square

Στο Σχήμα 4.14 βλέπουμε το ιστόγραμμα, τις αυτοσυσχετίσεις και τη σύγκλιση των σταθμισμένων μέσων $\hat{\alpha}_n^{IS} = \sum_{i=1}^n w(\theta_i, \eta_i) \alpha_i / \sum_{i=1}^n w(\theta_i, \eta_i)$ και $\hat{\beta}_n^{IS} = \sum_{i=1}^n w(\theta_i, \eta_i) \beta_i / \sum_{i=1}^n w(\theta_i, \eta_i)$ στις εκ των υστέρων μέσες τιμές $E\{\alpha|\text{data}\}$ και $E\{\beta|\text{data}\}$ αντίστοιχα με $m_\alpha = 250$, $m_\beta = 200$, $\lambda_1 = 0.5$ και $\lambda_2 = 1$, υπολογισμένα από ένα προσομοιωμένο δείγμα μήκους 50000 μετά από μία περίοδο burn-in μήκους 5000 επαναλήψεων. Να σημειωθεί ότι για αυτές τις τιμές των λ_1 και λ_2 ικανοποιούνται οι συνθήκες (4.1) και (4.2) αφού

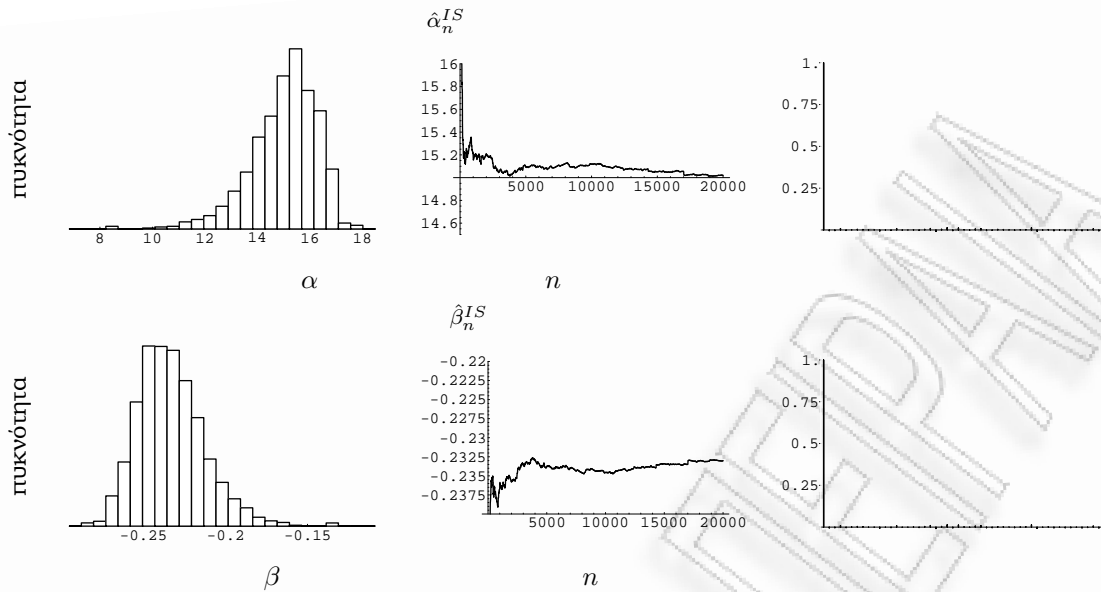
$$(2s_{xy} + 1)/s_x = 893/1600 < 2$$

και

$$2s_y - (2s_{xy} + 1)/\bar{x} = 1861/1600 > 0.$$

Μπορούμε να παρατηρήσουμε (Σχήμα 4.14) ότι οι αυτοσυσχετίσεις των γινομένων $(\alpha_i w(\theta_i, \eta_i))_{1 \leq i \leq 50000}$ και $(\beta_i w(\theta_i, \eta_i))_{1 \leq i \leq 50000}$ σχεδόν μηδενίζονται, με αποτέλεσμα να μας επιτρέπεται να εκτιμήσουμε τα τυπικά σφάλματα Monte Carlo χρησιμοποιώντας τεχνικές για τυχαία δείγματα. Για να το επιβεβαιώσουμε αυτό, τρέξαμε 100 ανεξάρτητες αλυσίδες συνολικού μήκους 55000 η κάθε μια. Μετά από μία περίοδο burn-in μήκους 5000 επαναλήψεων, υπολογίζονται κατ' αρχάς για κάθε αλυσίδα τα τυπικά σφάλματα των $\hat{\alpha}_n^{IS}$ και $\hat{\beta}_n^{IS}$ χρησιμοποιώντας τον τύπο για τον εκτιμητή λόγου για ανεξάρτητα δείγματα. Έπειτα υπολογίζεται το μέσο τυπικό σφάλμα στις 100 αλυσίδες το οποίο ισούται με 0.0307 για το $\hat{\alpha}_n^{IS}$ και 5.37×10^{-4} για το $\hat{\beta}_n^{IS}$. Από την άλλη πλευρά έστω $(\hat{\alpha}_{n,1}^{IS}, \dots, \hat{\alpha}_{n,100}^{IS})$ και

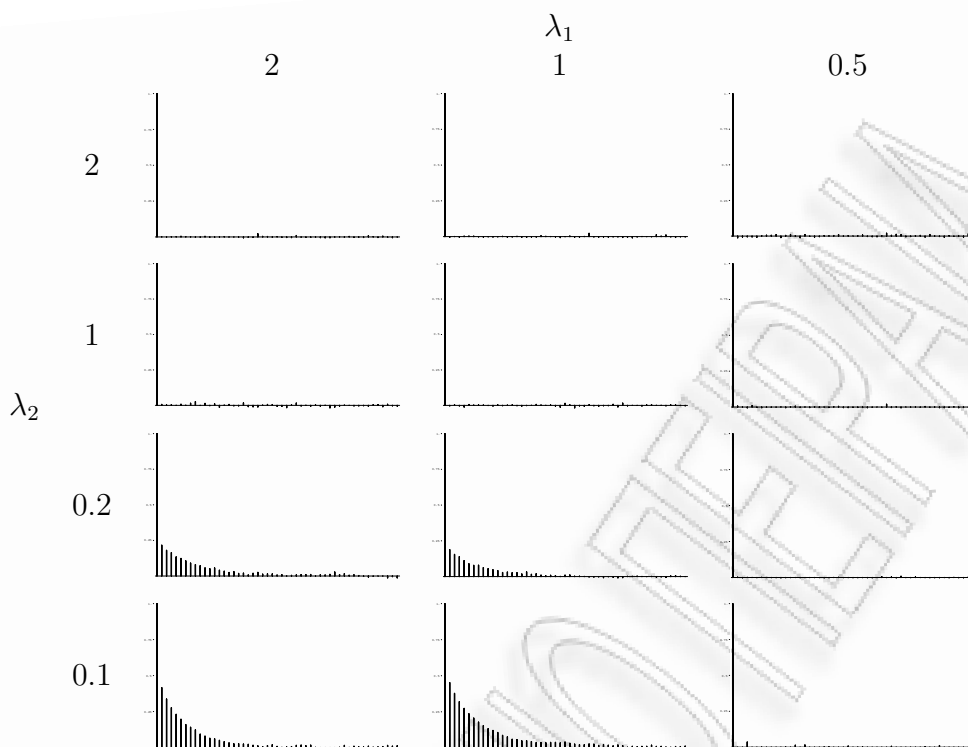
¹Οι συνθήκες (4.1) και (4.2) δεν είναι καθόλου περιοριστικές, αφού η συνθήκη (4.1) ικανοποιείται για κάθε $\lambda_2 > 1/2308$ ενώ η συνθήκη (4.2) ικανοποιείται για κάθε $\lambda_1 > 1600\lambda_2/(2408\lambda_2 - 23)$.



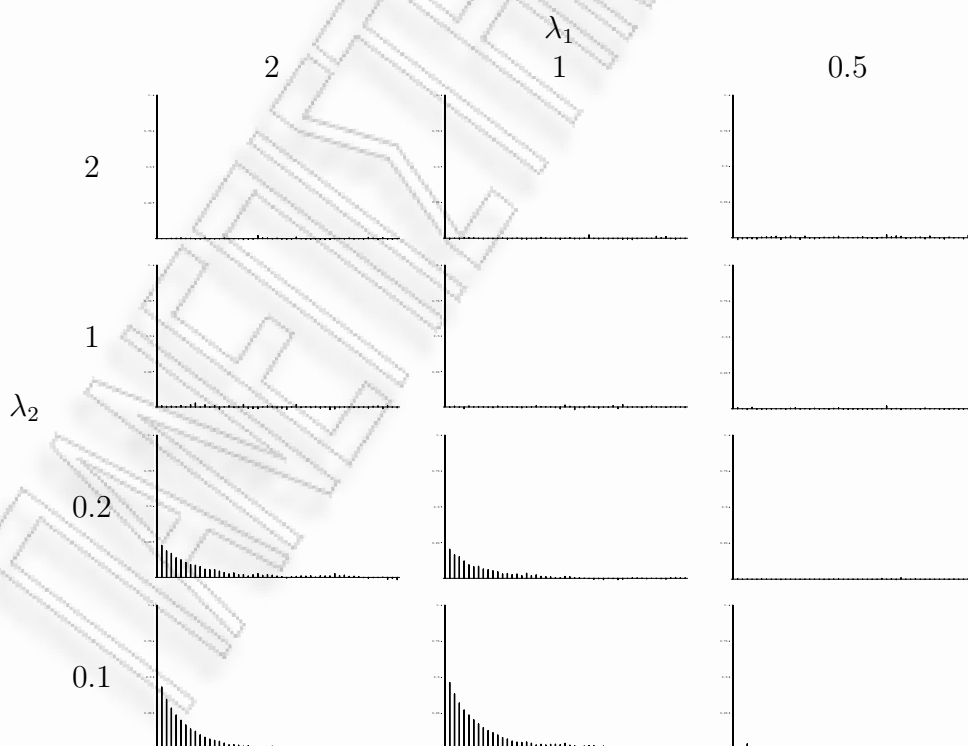
Σχήμα 4.14: Ιστογράμματα και αυτοσυσχετίσεις των γινομένων $(\alpha_i w(\theta_i, \eta_i))_{1 \leq i \leq 50000}$ και $(\beta_i w(\theta_i, \eta_i))_{1 \leq i \leq 50000}$ και σύγκλιση των σταθμισμένων μέσων $\hat{\alpha}_n^{IS}$ και $\hat{\beta}_n^{IS}$ όπου $m_\alpha = 250$ και $m_\beta = 200$ για το σύνολο δεδομένων Challenger.

$(\hat{\beta}_{n,1}^{IS}, \dots, \hat{\beta}_{n,100}^{IS})$ οι εκτιμητές των $E(\alpha|\text{data})$ και $E(\beta|\text{data})$ για κάθε μία από τις 100 ανεξάρτητες αλυσίδες. Χρησιμοποιώντας τα τυχαία δείγματα $(\hat{\alpha}_{n,i}^{IS})_{(1 \leq i \leq 100)}$ και $(\hat{\beta}_{n,i}^{IS})_{(1 \leq i \leq 100)}$ των εργοδικών μέσων, τα εκτιμώμενα τυπικά σφάλματα είναι 0.0354 και 5.45×10^{-4} αντίστοιχα. Παρατηρούμε ότι είναι πολύ κοντά στις αντίστοιχες εκτιμήσεις που παίρνουμε χρησιμοποιώντας τους τύπους για ανεξάρτητα δείγματα.

Τέλος θα πρέπει να σημειωθεί ότι οι σταθερές λ_1 και λ_2 επηρεάζουν σημαντικά τις αυτοσυσχετίσεις των ακολουθιών των γινομένων $(\alpha_i w(\theta_i, \eta_i))_{i \geq 1}$ και $(\beta_i w(\theta_i, \eta_i))_{i \geq 1}$ όπως φαίνεται και στα Σχήματα 4.15–4.16 όποτε η επιλογή τους θα πρέπει να γίνεται με τέτοιο τρόπο ώστε οι αυτοσυσχετίσεις να ελαχιστοποιούνται. Αυτό που επηρεάζει περισσότερο τις αυτοσυσχετίσεις των γινομένων των ακολουθιών των αw και βw είναι η τιμή του λ_2 : όσο μικρότερη τιμή παίρνει τόσο αυξάνονται οι αυτοσυσχετίσεις.



Σχήμα 4.15: Διάγραμμα αυτοσυσχετίσεων της ακολουθίας των γινομένων $(\alpha_i w(\theta_i, \eta_i))_{i \geq 1}$ για διάφορες τιμές των λ_1 και λ_2 .



Σχήμα 4.16: Διάγραμμα αυτοσυσχετίσεων της ακολουθίας των γινομένων $(\beta_i w(\theta_i, \eta_i))_{i \geq 1}$ για διάφορες τιμές των λ_1 και λ_2 .

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΠΕΡΑΙΑ

Ειδικά Θέματα

Μη μόνον όσα βλέπετε πιστεύετε.

—Κωνσταντίνος Καβάφης (1863- 1933)

Κατά τη μελέτη των κατάλληλα σταθμισμένων δειγμάτων προέκυψαν διάφορα άλλα ενδιαφέροντα θέματα. Στο παρόν κεφάλαιο θα παρουσιάσουμε δύο από αυτά. Το πρώτο αφορά στη βελτίωση των εκτιμητών ΜΗ ως προς την ασυμπτωτική διασπορά και το δεύτερο στην προσομοίωση από την πολυωνυμική κατανομή.

5.1 Βελτίωση των εκτιμητών ΜΗ

Όπως αποδείχτηκε στην Ενότητα 3.3, αν τα φυσικά τυχαία βάρη των παρατηρήσεων που προκύπτουν από τον αλγόριθμο ΜΗ αντικατασταθούν από τις μέσες τιμές τους, τότε παίρνουμε εκτιμητές με μικρότερη ασυμπτωτική διασπορά. Ένα εύλογο ερώτημα που προκύπτει είναι γιατί να μη χρησιμοποιούνται αυτές οι μέσες τιμές ως βάρη σε κάθε περίπτωση. Η απάντηση είναι μάλλον αποθαρρυντική, αφού ο υπολογισμός τους μπορεί να γίνει μόνο σε πολύ απλές περιπτώσεις όπως των παραδειγμάτων που θα παρουσιάσουμε στη συνέχεια. Μπορούμε όμως, όπως θα δούμε στην επόμενη ενότητα, να καταφύγουμε στην εκτίμηση αυτών των « βέλτιστων » βαρών χρησιμοποιώντας ολόκληρη την ακολουθία ΜΗ. Μάλιστα, οι εκτιμητές που προκύπτουν αντικαθιστώντας τα « βέλτιστα » βάρη με τις εκτιμήσεις τους, φαίνεται να έχουν μικρότερη διασπορά και από τους εκτιμητές με τα « βέλτιστα » βάρη.

5.1.1 Υπολογισμός των βαρών του αλγορίθμου ΜΗ

Ο ακριβής υπολογισμός των βαρών ενός αλγορίθμου ΜΗ γίνεται μόνο σε πολύ απλές περιπτώσεις όπως αυτές που θα αναφέρουμε στη συνέχεια.

Παράδειγμα 5.1. Ας θεωρήσουμε έναν ανεξάρτητο δειγματολήπτη ΜΗ με κατανομή-στόχο

$$\pi(x) = p^x(1-p)^{1-x}, \quad x \in \{0, 1\},$$

όπου $p < 1/2$ και κατανομή-πρότασης $q(0) = q(1) = 1/2$.

Έστω $X = (X_n)_{n \in \mathbb{Z}_+}$ η ακολουθία των καταστάσεων που γίνονται αποδεκτές από τον παραπάνω αλγόριθμο ΜΗ. Η $(X_n)_{n \in \mathbb{Z}_+}$ είναι μία αλυσίδα Markov με πυκνότητα μετάβασης

$$g(x_i | x_{i-1}) = \frac{\min \{\pi(x_{i-1}), \pi(x_i)\}}{\sum_z \min \{\pi(x_{i-1}), \pi(z)\}}$$

και στάσιμη κατανομή

$$\begin{aligned} g(x) &\propto \frac{1}{2} \sum_z \min \{\pi(x), \pi(z)\} \\ &\propto \frac{1}{2} (\min \{\pi(x), \pi(0)\} + \min \{\pi(x), \pi(1)\}), \end{aligned}$$

(δες Ενότητα 3.3). Υπολογίζουμε εύκολα

$$\begin{aligned} g(0) &\propto \frac{1}{2} (\min \{\pi(0), \pi(0)\} + \min \{\pi(0), \pi(1)\}) \\ &\propto \frac{1}{2} (\pi(0) + \pi(1)) \\ &= \frac{1}{2} (1-p+p) \\ &= \frac{1}{2} \end{aligned}$$

και

$$\begin{aligned} g(1) &\propto \frac{1}{2} (\min \{\pi(0), \pi(1)\} + \min \{\pi(1), \pi(1)\}) \\ &\propto \frac{1}{2} (\pi(1) + \pi(1)) \\ &= \frac{1}{2} (p+p) \\ &= p. \end{aligned}$$

Αν σταθμίζουμε το κάθε x_i με το βάρος $w(x_i) \propto \pi(x_i)/g(x_i)$, όπου

$$w(x) = \frac{\pi(x)}{g(x)} \propto \frac{\pi(x)}{\frac{1}{2} (\min \{\pi(x), \pi(0)\} + \min \{\pi(x), \pi(1)\})},$$

δηλαδή

$$w(0) = \frac{\pi(0)}{g(0)} \propto \frac{\pi(0)}{\frac{1}{2}(\min\{\pi(0), \pi(0)\} + \min\{\pi(0), \pi(1)\})} = 2(1-p)$$

και

$$w(1) = \frac{\pi(1)}{g(1)} \propto \frac{\pi(1)}{\frac{1}{2}(\min\{\pi(1), \pi(0)\} + \min\{\pi(1), \pi(1)\})} = 1,$$

τότε η ακολουθία $(x_n, w(x_n))_{n \in \mathbb{Z}_+}$ είναι κατάλληλα σταθμισμένη ως προς την π και η διαδικασία με άλματα που σχετίζεται με αυτή θα έχει την π ως οριακή κατανομή. Επομένως, ο «εκτιμητής» της $E_\pi(h)$

$$\begin{aligned} \hat{h}_w &= \frac{\sum_{i=1}^n w(x_i)h(x_i)}{\sum_{i=1}^n w(x_i)} \\ &= \frac{2(1-p) \sum_{i=1}^n h(x_i)I(x_i=0) + \sum_{i=1}^n h(x_i)I(x_i=1)}{2(1-p) \sum_{i=1}^n I(x_i=0) + \sum_{i=1}^n I(x_i=1)} \\ &= \frac{2(1-p)h(0)(n - \sum_{i=1}^n x_i) + h(1) \sum_{i=1}^n x_i}{2(1-p)(n - \sum_{i=1}^n x_i) + \sum_{i=1}^n x_i} \\ &= \frac{2(1-p)h(0)(1 - \bar{x}) + h(1)\bar{x}}{2(1-p)(1 - \bar{x}) + \bar{x}} \end{aligned}$$

έχει μικρότερη ασυμπτωτική διασπορά από τον αρχικό εκτιμητή ΜΗ.

Παράδειγμα 5.2. Έστω ότι κατανομή-στόχος είναι η εκθετική με μέση τιμή 1,

$$\pi(x) = e^{-x}I(x > 0)$$

και κατανομή πρότασης η εκθετική με μέση τιμή θ ,

$$q(z|x) \equiv q(z) = \theta e^{-\theta z}I(z > 0),$$

όπου $\theta < 1$ (η επιλογή του θ γίνεται με τέτοιο τρόπο ώστε να εξασφαλίζεται ότι οι διασπορές των εκτιμητών ΜΗ είναι πεπερασμένες). Έστω $X = (X_n)_{n \in \mathbb{Z}_+}$ η ακολουθία των καταστάσεων που έχουν γίνει δεκτές από τον αντίστοιχο αλγόριθμο ΜΗ. Η $(X_n)_{n \in \mathbb{Z}_+}$ είναι αλυσίδα Markov με στάσιμη κατανομή την

$$\begin{aligned} g(x) &\propto \int \min\{\pi(x)q(z), \pi(z)q(x)\}dz \\ &= \int_0^\infty \min\{\theta e^{-(x+\theta z)}, \theta e^{-(z+\theta x)}\}dz. \end{aligned}$$

Επειδή $\theta e^{-(x+\theta z)} < \theta e^{-(z+\theta x)}$ αν και μόνο αν $z < x$, έχουμε

$$\begin{aligned} g(x) &\propto \int_0^x \theta e^{-(x+\theta z)} dz + \int_x^\infty \theta e^{-(z+\theta x)} dz \\ &= e^{-x} \int_0^x \theta e^{-\theta z} dz + \theta e^{-\theta x} \int_x^\infty e^{-z} dz \\ &= e^{-x} (-e^{-\theta x} + 1) + \theta e^{-\theta x} e^{-x} \\ &= e^{-x(\theta+1)} (\theta - 1 + e^{x\theta}). \end{aligned}$$

Για κάθε κατάσταση x_i που έχουμε αποδεχθεί μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε ως βάρος το $w(x_i) = \pi(x_i)/g(x_i)$, όπου

$$w(x) \propto \{e^{-x\theta} (\theta - 1 + e^{x\theta})\}^{-1},$$

αντί του βάρους που προκύπτει φυσικά από τον αλγόριθμο ΜΗ. Έτσι, έχουμε μείωση της διασποράς οποιουδήποτε εργοδικού μέσου. Επί πλέον, η συνεχής διαδικασία με άλματα που σχετίζεται με τη σταθμισμένη ακολουθία $(x_n, w(x_n))_{n \in \mathbb{Z}_+}$ έχει την π ως οριακή κατανομή.

Παράδειγμα 5.3. Θεωρούμε τον αλγόριθμο ΜΗ με κατανομή-στόχο την τυπική κανονική κατανομή,

$$\pi(x) \propto e^{-x^2/2}, \quad x \in \mathbb{R},$$

και κατανομή πρότασης

$$q(x) \propto e^{-x^2/2\sigma^2}, \quad x \in \mathbb{R},$$

με $\sigma^2 > 1$. (Όπως και στο Παράδειγμα 5.2, η επιλογή του σ^2 γίνεται με τέτοιο τρόπο ώστε να εξασφαλίζεται ότι οι διασπορές των εκτιμητών ΜΗ είναι πεπερασμένες.)

Η οριακή κατανομή της ακολουθίας $X = (X_n)_{n \in \mathbb{Z}_+}$ των καταστάσεων που έχουν γίνει αποδεκτές είναι

$$\begin{aligned} g(x) &\propto \int \min \{ \pi(x)q(z), \pi(z)q(x) \} dz \\ &\propto \int \min \left\{ e^{-x^2/2 - z^2/2\sigma^2}, e^{-x^2/2\sigma^2 - x^2/2} \right\} dz. \end{aligned}$$

Για να ισχύει

$$e^{-x^2/2 - z^2/2\sigma^2} < e^{-x^2/2\sigma^2 - x^2/2}$$

θα πρέπει $-x < z < x$. Άρα

$$\begin{aligned}
 g(x) &\propto \int_{-\infty}^{-x} e^{-z^2/2-x^2/2\sigma^2} dz + \int_{-x}^x e^{-x^2/2-z^2/2\sigma^2} dz + \int_x^{\infty} e^{-z^2/2-x^2/2\sigma^2} dz \\
 &\propto e^{-x^2/2\sigma^2} \int_{-\infty}^{-x} e^{-z^2/2} dz + e^{-x^2/2} \int_{-x}^x e^{-z^2/2\sigma^2} dz + e^{-x^2/2\sigma^2} \int_x^{\infty} e^{-z^2/2} dz \\
 &= e^{-x^2/2} \int_{-x}^x e^{-z^2/2\sigma^2} dz + 2e^{-x^2/2\sigma^2} \int_{-\infty}^{-x} e^{-z^2/2} dz \\
 &\propto \sigma e^{-x^2/2} \mathbf{P}(-|x|/\sigma < Z < |x|/\sigma) + 2e^{-x^2/2\sigma^2} \mathbf{P}(Z < -|x|) \\
 &\propto \sigma e^{-x^2/2} \{2\Phi(|x|/\sigma) - 1\} + 2e^{-x^2/2\sigma^2} \Phi(-|x|)
 \end{aligned}$$

και τα βάρη σπουδαιότητας θα ισούνται με

$$\begin{aligned}
 w(x) &= \frac{\pi(x)}{g(x)} \\
 &\propto \frac{e^{-x^2/2}}{\sigma e^{-x^2/2} (2\Phi(|x|/\sigma) - 1) + 2e^{-x^2/2\sigma^2} \Phi(-|x|)} \\
 &\propto [\sigma \{2\Phi(|x|/\sigma) - 1\} + 2 \exp\{(1 - 1/\sigma^2)x^2/2\} \Phi(-|x|)]^{-1}
 \end{aligned}$$

Η διαδικασία με άλματα που σχετίζεται με τη σταθμισμένη ακολουθία $(x_n, w(x_n))_{n \in \mathbb{Z}_+}$ έχει την π ως οριακή κατανομή και ο αντίστοιχος εκτιμητής \hat{h}_w έχει μικρότερη διασπορά από τον αρχικό εκτιμητή ΜΗ.

Παράδειγμα 5.4. (ΤΥΧΑΙΟΣ ΠΕΡΙΠΑΤΟΣ ΜΗ) Ας θεωρήσουμε πάλι ως κατανομή-στόχο την τυπική κανονική κατανομή

$$\pi(x) \propto e^{-x^2/2}, \quad x \in \mathbb{R},$$

και κατανομή πρότασης την

$$q(z|x) \propto e^{-(z-x)^2/2\sigma^2}, \quad x \in \mathbb{R},$$

με $\sigma^2 > 1$. Σε αυτήν την περίπτωση έχουμε ένα τυχαίο περίπατο ΜΗ.

Η ακολουθία $X = (X_n)_{n \in \mathbb{Z}_+}$ των καταστάσεων που έχουν γίνει δεκτές έχει ως στάσιμη κατανομή την

$$\begin{aligned}
 g(x) &\propto \int \min \{ \pi(x)g(z|x), \pi(z)g(x|z) \} dz \\
 &\propto \int \min \left\{ e^{-\frac{x^2}{2} - \frac{(z-x)^2}{2\sigma^2}}, e^{-\frac{z^2}{2} - \frac{(x-z)^2}{2\sigma^2}} \right\} dz \\
 &\propto \int e^{-\frac{(x-z)^2}{2\sigma^2}} \min \left\{ e^{-\frac{x^2}{2}}, e^{-\frac{z^2}{2}} \right\} dz.
 \end{aligned}$$

Για να ισχύει $e^{-x^2/2} < e^{-z^2/2}$ θα πρέπει $-x < z < x$. Άρα

$$\begin{aligned}
 g(x) &\propto \int_{-x}^x e^{-\frac{x^2}{2} - \frac{(x-z)^2}{2\sigma^2}} dz + \int_{-\infty}^{-x} e^{-\frac{z^2}{2} - \frac{(x-z)^2}{2\sigma^2}} dz + \int_x^{\infty} e^{-\frac{z^2}{2} - \frac{(x-z)^2}{2\sigma^2}} dz \\
 &\propto e^{-\frac{x^2}{2}} \int_{-x}^x e^{-\frac{(x-z)^2}{2\sigma^2}} dz + e^{-\frac{x^2}{2(1+\sigma^2)}} \int_{-\infty}^{-x} e^{-\frac{1+\sigma^2}{2\sigma^2} \left(z - \frac{x}{1+\sigma^2}\right)^2} dz + \\
 &\quad e^{-\frac{x^2}{2(1+\sigma^2)}} \int_x^{\infty} e^{-\frac{1+\sigma^2}{2\sigma^2} \left(z - \frac{x}{1+\sigma^2}\right)^2} dz \\
 &\propto \sigma e^{-\frac{x^2}{2}} \mathbb{P} \left(\frac{-|x| - x}{\sigma} < Z < \frac{|x| - x}{\sigma} \right) + e^{-\frac{x^2}{2(1+\sigma^2)}} \frac{\sigma}{\sqrt{1+\sigma^2}} \times \\
 &\quad \left\{ \mathbb{P} \left(Z > \frac{|x|(\sigma^2+1) - x}{\sigma\sqrt{1+\sigma^2}} \right) + \mathbb{P} \left(Z < \frac{-|x|(\sigma^2+1) - x}{\sigma\sqrt{1+\sigma^2}} \right) \right\}
 \end{aligned}$$

Τα βάρη σπουδαιότητας θα είναι ίσα με

$$\begin{aligned}
 w(x) &= \frac{\pi(x)}{g(x)} \\
 &\propto \left\{ \sigma \mathbb{P} \left(\frac{-|x| - x}{\sigma} < Z < \frac{|x| - x}{\sigma} \right) \right\}^{-1} + \\
 &\quad \frac{e^{-\frac{x^2\sigma^2}{2(1+\sigma^2)}}}{\frac{\sigma}{\sqrt{1+\sigma^2}} \left\{ \mathbb{P} \left(Z < \frac{-|x|(\sigma^2+1) - x}{\sigma\sqrt{1+\sigma^2}} \right) + \mathbb{P} \left(Z > \frac{|x|(1+\sigma^2) - x}{\sigma\sqrt{1+\sigma^2}} \right) \right\}}.
 \end{aligned}$$

Η συνεχής διαδικασία με άλματα που σχετίζεται με τη σταθμισμένη ακολουθία $(x_n, w(x_n))_{n \in \mathbb{Z}_+}$ έχει την π ως οριακή κατανομή και ο σταθμισμένος εκτιμητής \hat{h}_w έχει μικρότερη διασπορά από τον εκτιμητή ΜΗ.

5.1.2 Εκτίμηση των βαρών του αλγορίθμου ΜΗ

Παρ' όλο που τα βάρη σπουδαιότητας γενικά δεν είναι δυνατόν να υπολογιστούν, έχουμε τη δυνατότητα να τα εκτιμήσουμε χρησιμοποιώντας την ίδια την ακολουθία ΜΗ. Στην Ενότητα 3.3 δείξαμε ότι

$$\begin{aligned}
 w(x)^{-1} &\propto \int a(x, z) q(z|x) \mu(dz) \\
 &= \int \min \left\{ \frac{q(z|x)}{\pi(z)}, \frac{q(x|z)}{\pi(x)} \right\} \pi(z) \mu(dz) \\
 &= \mathbb{E}_\pi \left[\min \left\{ \frac{q(Z|x)}{\pi(Z)}, \frac{q(x|Z)}{\pi(x)} \right\} \right],
 \end{aligned}$$

συνεπώς το βάρος είναι το αντίστροφο μίας μέσης τιμής ως προς την κατανομή-στόχο π . Είναι ξεκάθαρο ότι αυτή η μέση τιμή μπορεί να εκτιμηθεί συνεπώς από

την ποσότητα

$$\hat{w}(x)^{-1} = \sum_{j=1}^n \xi_j \min \left\{ \frac{q(x_j|x_i)}{\pi(x_j)}, \frac{q(x_i|x_j)}{\pi(x_i)} \right\} / \sum_{j=1}^n \xi_j. \quad (5.1)$$

Αν ορίσουμε

$$A_x := \{z : \pi(x)q(z|x) \leq \pi(z)q(x|z)\},$$

το $w(x_i)$ εκτιμάται με το

$$\hat{w}(x_i) = \sum_{j=1}^n \xi_j / \left\{ \sum_{j=1}^n \xi_j \frac{q(x_j|x_i)}{\pi(x_j)} I(x_j \in A_{x_i}) + \frac{1}{\pi(x_i)} \sum_{j=1}^n \xi_j q(x_i|x_j) I(x_j \in A_{x_i}^c) \right\}.$$

Στην πραγματικότητα, το $\hat{w}(x_i)$ εκτιμά μια ποσότητα *ανάλογη* του $w(x_i)$, αλλά αυτό είναι το μόνο που χρειαζόμαστε (δες Ενότητα 2.1.4).

Στην περίπτωση που η κατανομή πρότασης είναι συμμετρική, δηλαδή

$$q(z|x) = q(x|z) \quad \text{για όλα τα } x, z,$$

τότε το $w(x_i)^{-1}$ δίνεται από τη σχέση

$$w(x_i)^{-1} = \int a(x, z) q(z|x) \mu(dz) = \int_{A_x} q(z|x) \mu(dz) + \frac{1}{\pi(x)} \int_{A_x^c} q(x|z) \pi(z) \mu(dz).$$

Αν επί πλέον η $q(z|x)$ είναι τέτοια ώστε το A_x να δίνεται σε κλειστή μορφή (όπως π.χ. αν είναι κανονική κατανομή), το πρώτο ολοκλήρωμα μπορεί να υπολογιστεί αναλυτικά. Σε τέτοια περίπτωση, το $w(x_i)$ μπορεί να εκτιμηθεί από την ποσότητα

$$\hat{w}(x_i) = \left\{ \int_{A_x} q(z|x) \mu(dz) + \frac{\sum_{j=1}^n \xi_j q(x_i|x_j) I(x_j \in A_{x_i}^c)}{\pi(x_i) \sum_{j=1}^n \xi_j} \right\}^{-1}.$$

Παράδειγμα 5.1 (συνέχεια). Ας επιστρέψουμε στο παράδειγμα του ανεξάρτητου δειγματολήπτη ΜΗ με κατανομή-στόχο π την κατανομή Bernoulli με πιθανότητα επιτυχίας $p < 1/2$ και κατανομή πρότασης την $g(0) = g(1) = 1/2$. Προκειμένου να εκτιμήσουμε τα βάρη σπουδαιότητας σε αυτό το παράδειγμα θα χρησιμοποιήσουμε την αρχική ακολουθία ΜΗ, οπότε θα έχουμε

$$\hat{w}(x_i) = \frac{\sum_{j=1}^n \xi_j}{\sum_{j=1}^n \xi_j \min \left\{ \frac{q(x_j)}{\pi(x_j)}, \frac{q(x_i)}{\pi(x_i)} \right\}} = \frac{2 \sum_{j=1}^n \xi_j}{\sum_{j=1}^n \xi_j \min \left\{ \frac{1}{\pi(x_j)}, \frac{1}{\pi(x_i)} \right\}}.$$

Για $x_i = 0$ παίρνουμε

$$\begin{aligned}\hat{w}(0) &= \frac{2 \sum_{j=1}^n \xi_j}{\sum_{j=1}^n \xi_j \min \left\{ \frac{1}{\pi(x_j)}, \frac{1}{\pi(0)} \right\}} \\ &= \frac{2 \sum_{j=1}^n \xi_j}{\sum_{j=1}^n \xi_j \min \left\{ \frac{1}{\pi(x_j)}, \frac{1}{1-p} \right\}} \\ &= \frac{2 \sum_{j=1}^n \xi_j}{\frac{1}{1-p} \sum_{j=1}^n \xi_j} \\ &= 2(1-p).\end{aligned}$$

Παρατηρούμε ότι σε αυτήν την περίπτωση το « εκτιμώμενο » βάρος ισούται με την ακριβή τιμή του $w(0)$. Επίσης,

$$\begin{aligned}\hat{w}(1) &= \frac{2 \sum_{j=1}^n \xi_j}{\sum_{j=1}^n \xi_j \min \left\{ \frac{1}{\pi(x_j)}, \frac{1}{\pi(1)} \right\}} \\ &= \frac{2 \sum_{j=1}^n \xi_j}{\sum_{j=1}^n \xi_j \min \left\{ \frac{1}{\pi(x_j)}, \frac{1}{p} \right\}} \\ &= \frac{2 \sum_{j=1}^n \xi_j}{\frac{1}{p} \sum_{j=1}^n \xi_j I(x_j = 1) + \frac{1}{1-p} \sum_{j=1}^n \xi_j I(x_j = 0)}.\end{aligned}$$

Προκειμένου να εκτιμήσουμε τις διασπορές των εκτιμητών $\hat{h}_{MH} = \sum \xi_i x_i / \sum \xi_i$, $\hat{h}_w = \sum w(x_i) x_i / \sum w(x_i)$ και $\hat{h}_{\hat{w}} = \sum \hat{w}(x_i) x_i / \sum \hat{w}(x_i)$, της μέσης τιμής της κατανομής Βερνουίλι με πιθανότητα επιτυχίας p , τρέξαμε 50 ανεξάρτητες αλυσίδες Μάρκον (μήκους 10000 παρατηρήσεων η κάθε μία) για διάφορες τιμές του p . Στον Πίνακα 5.1 βλέπουμε τις εκτιμήσεις της μέσης τιμής μαζί με τις εκτιμήσεις των τυπικών σφαλμάτων τους (μέσα σε παρενθέσεις). Βλέπουμε ότι ο εκτιμητής \hat{h}_w έχει μικρότερη διασπορά από τον \hat{h}_{MH} για κάθε τιμή του p , όπως και αναμενόταν. Αυτό που έχει ιδιαίτερο ενδιαφέρον είναι ότι ο εκτιμητής $\hat{h}_{\hat{w}}$ έχει τη μικρότερη διασπορά από όλους για κάθε τιμή του p . Ειδικότερα, για μικρές τιμές του p , το τυπικό σφάλμα του $\hat{h}_{\hat{w}}$ είναι περίπου δύο φορές μικρότερο από αυτά των \hat{h}_{MH} και \hat{h}_w . Από την άλλη πλευρά, όσο αυξάνεται η τιμή του p τόσο μικραίνει η διαφορά των εκτιμήσεων των τυπικών σφαλμάτων του $\hat{h}_{\hat{w}}$ από τους άλλους δύο. Μάλιστα, για $p = 0.49$, θα λέγαμε ότι οι τρεις εκτιμητές ταυτίζονται (δίνουν ακριβώς την ίδια εκτίμηση για τη μέση τιμή και τα τυπικά σφάλματά τους (βλέπε Πίνακα 5.1).

Επίσης θα πρέπει να επισημάνουμε ότι ο υπολογισμός του εκτιμητή $\hat{h}_{\hat{w}}$ απαι-

| p | ΜΗ | w | \hat{w} |
|------|----------------|----------------|----------------|
| 0.05 | 0.0506(0.0038) | 0.0506(0.0036) | 0.0501(0.0020) |
| 0.10 | 0.0994(0.0045) | 0.0993(0.0043) | 0.0995(0.0026) |
| 0.15 | 0.1512(0.0058) | 0.1514(0.0055) | 0.1509(0.0036) |
| 0.20 | 0.2022(0.0063) | 0.2024(0.0061) | 0.2018(0.0042) |
| 0.25 | 0.2512(0.0056) | 0.2511(0.0055) | 0.2508(0.0042) |
| 0.30 | 0.3015(0.0059) | 0.3010(0.0057) | 0.3007(0.0046) |
| 0.35 | 0.3473(0.0064) | 0.3473(0.0060) | 0.3489(0.0051) |
| 0.40 | 0.4005(0.0063) | 0.4005(0.0059) | 0.4008(0.0053) |
| 0.45 | 0.4584(0.0056) | 0.4502(0.0055) | 0.4502(0.0053) |
| 0.49 | 0.4960(0.0054) | 0.4960(0.0054) | 0.4960(0.0054) |

Πίνακας 5.1: « Εκτιμήσεις » της μέσης τιμής p της κατανομής Bernoulli για διάφορες τιμές του p . Σε παρενθέσεις παρατίθενται τα αντίστοιχα τυπικά σφάλματα.

τεί πρόσθετο υπολογιστικό κόστος, αφού για να υπολογίσουμε το κάθε βάρος \hat{w}_i χρησιμοποιούμε ολόκληρη την αρχική ακολουθία ΜΗ. Το υπολογιστικό κόστος εξαρτάται από την απόσταση της κατανομής πρότασης από την κατανομή-στόχο. Όσο πιο « μακριά » είναι η κατανομή πρότασης από την κατανομή-στόχο, τόσο λιγότερο πρόσθετο υπολογιστικό χρόνο χρειαζόμαστε για τον υπολογισμό των \hat{w}_i (δες Πίνακα 5.2). Σύμφωνα, λοιπόν, με τις παραπάνω προσομοιώσεις όσο μεγαλύτερη είναι η απόσταση της κατανομής πρότασης από την κατανομή-στόχο, τόσο μικρότερη είναι η διασπορά του εκτιμητή $\hat{h}_{\hat{w}}$ από αυτήν των \hat{h}_{MH} και \hat{h}_w και τόσο λιγότερο χρόνο χρειαζόμαστε για τον υπολογισμό των \hat{w}_i . Άρα λοιπόν, σε τέτοιες περιπτώσεις ο $\hat{h}_{\hat{w}}$ θα μπορούσε να θεωρηθεί καταλληλότερος.

| p | 0.05 | 0.10 | 0.15 | 0.20 | 0.25 | 0.30 | 0.35 | 0.40 | 0.45 | 0.49 |
|--------------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|
| Μέσος χρόνος | 0.06 | 0.12 | 0.21 | 0.31 | 0.43 | 0.59 | 0.75 | 0.95 | 1.09 | 1.31 |

Πίνακας 5.2: Μέσος πρόσθετος χρόνος (sec) για τον υπολογισμό του $\hat{h}_{\hat{w}}$

□

Παράδειγμα 5.2 (συνέχεια). Σε αυτό το παράδειγμα η κατανομή-στόχος ήταν η $\pi(x) = e^{-x}I(x > 0)$ ενώ κατανομή πρότασης η $q(x) = \theta e^{-\theta x}I(x > 0)$ με $\theta < 1$, οπότε $A_x = (0, x]$. Η εκτίμηση του $w(x_i)$ τότε θα ισούται με

$$\hat{w}(x_i) = \sum_{j=1}^n \xi_j / \left\{ \sum_{j=1}^n \xi_j e^{(1-\theta)x_j} I(x_j \leq x_i) + e^{(1-\theta)x_i} \sum_{j=1}^n \xi_j I(x_j > x_i) \right\},$$

για $i = 1, \dots, n$.

Υλοποιήσαμε τον παραπάνω αλγόριθμο ΜΗ για $\theta = 1/2$ και προσομοιώσαμε μία αλυσίδα Markov συνολικού μήκους $n = 10000$ παρατηρήσεων. Τα εκτιμώμενα βάρη σε αυτήν την περίπτωση ισούνται με

$$\hat{w}(x_i) = \sum_{j=1}^n \xi_j / \left\{ \sum_{j=1}^n \xi_j e^{x_j/2} \mathbf{I}(x_j \leq x_i) + e^{x_i/2} \sum_{j=1}^n \xi_j \mathbf{I}(x_j > x_i) \right\},$$

για $i = 1, \dots, n$.

Στο Σχήμα 5.2 βλέπουμε τη σύγκλιση των εκτιμητών $\sum_{i=1}^n \xi_i x_i^2 / \sum_{i=1}^n \xi_i$ και $\sum_{i=1}^n \hat{w}(x_i) x_i^2 / \sum_{i=1}^n \hat{w}(x_i)$ στη δεύτερη ροπή της κατανομής-στόχου. Δεν έχουμε συμπεριλάβει σε αυτό το γράφημα τη σύγκλιση του εκτιμητή που προκύπτει χρησιμοποιώντας τα ακριβή βάρη καθώς δε διακρινόταν από τον αντίστοιχο εκτιμητή με τα εκτιμηθέντα βάρη. Το ισόγραμμα του σταθμισμένου δείγματος $(x_i, \hat{w}(x_i))$ δείχνει μία αρκετά καλή προσαρμογή στην κατανομή-στόχο. Επί πλέον, τρέξαμε 50 ανεξάρτητες αλυσίδες ΜΗ προκειμένου να εκτιμήσουμε τη διασπορά των αντίστοιχων εκτιμητών. Οι εκτιμήσεις της πρώτης και της δεύτερης ροπής καθώς επίσης και οι εκτιμήσεις των τυπικών σφαλμάτων τους παρουσιάζονται στον Πίνακα 5.3.

Όπως αναμενόταν, ο εκτιμητής που προκύπτει χρησιμοποιώντας τα ακριβή βάρη έχει μικρότερο τυπικό σφάλμα από τον αρχικό εκτιμητή ΜΗ. Όμως και σε αυτό το παράδειγμα, ο εκτιμητής με τα εκτιμηθέντα βάρη έχει μικρότερο τυπικό σφάλμα και από αυτόν με τα ακριβή βάρη.

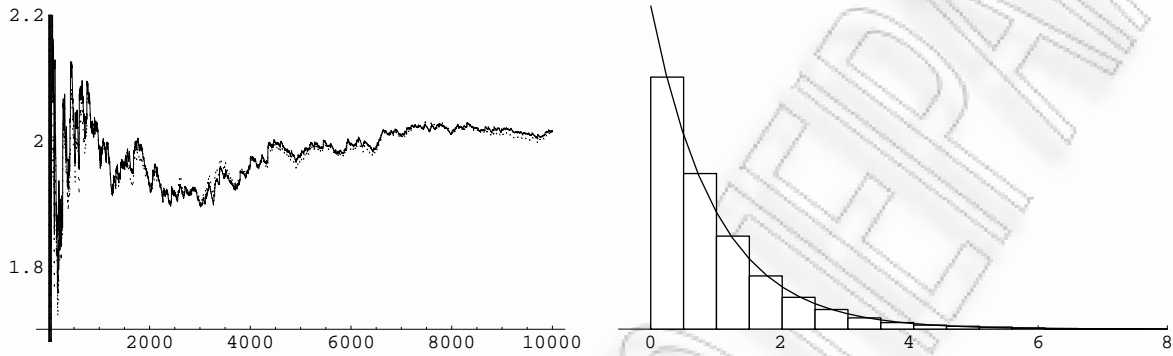
| | ΜΗ | w | \hat{w} |
|----------|----------------------|----------------------|----------------------|
| $E(X)$ | 1.002966 (0.0144) | 1.002820 (0.0136) | 1.002231 (0.0116) |
| $E(X^2)$ | 2.010166 (0.0539) | 2.010080 (0.0459) | 2.007799 (0.0426) |

Πίνακας 5.3: Εκτιμήσεις της πρώτης και της δεύτερης ροπής της κατανομής-στόχου $\pi(x) = e^{-x} \mathbf{I}(x > 0)$. Σε παρενθέσεις παρατίθενται τα αντίστοιχα εκτιμηθέντα τυπικά σφάλματα.

Στον Πίνακα 5.4 παρουσιάζεται ο μέσος πρόσθετος χρόνος που χρειάζεται ο εκτιμητής $\hat{h}_{\hat{w}}$ για να υπολογιστεί για διάφορες τιμές της παραμέτρου θ . Και σε αυτήν την περίπτωση καταλήγουμε στο συμπέρασμα ότι ο εκτιμητής $\hat{h}_{\hat{w}}$ μπορεί να θεωρηθεί καταλληλότερος σε περιπτώσεις που η κατανομή πρότασης δεν είναι « κοντά » στην κατανομή-στόχο.

| θ | 0.10 | 0.20 | 0.30 | 0.40 | 0.50 | 0.60 | 0.70 | 0.80 | 0.90 |
|-----------------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|
| Μέσος χρόνος | 0.09 | 0.28 | 0.57 | 0.88 | 1.20 | 1.49 | 1.75 | 1.96 | 2.05 |

Πίνακας 5.4: Μέσος πρόσθετος χρόνος (sec) για τον υπολογισμό του $\hat{h}_{\hat{w}}$



Σχήμα 5.1: Αριστερά βλέπουμε τη σύγκλιση του σταθμισμένου εκτιμητή $\sum_{i=1}^n \xi_i x_i^2 / \sum_{i=1}^n \xi_i$ (διακεκομμένη γραμμή) και του $\sum_{i=1}^n \hat{w}(x_i) x_i^2 / \sum_{i=1}^n \hat{w}(x_i)$ (συνεχής γραμμή) στη δεύτερη ροπή της κατανομής-στόχου $\pi(x) = e^{-x} \mathbf{I}(x > 0)$. Δεξιά βλέπουμε το ιστόγραμμα του σταθμισμένου δείγματος $(x_i, \hat{w}(x_i))_{1 \leq i \leq 10000}$ μαζί με την $\pi(x)$.

□

Παράδειγμα 5.3 (συνέχεια). Σε αυτό το παράδειγμα όπου $\pi(x) \propto \exp(-x^2/2)$, $x \in \mathbb{R}$ και $q(x) \propto \exp(-x^2/2\sigma^2)$, $x \in \mathbb{R}$, με $\sigma^2 > 1$ έχουμε ότι

$$A_x = \{z : |z| \leq |x|\}$$

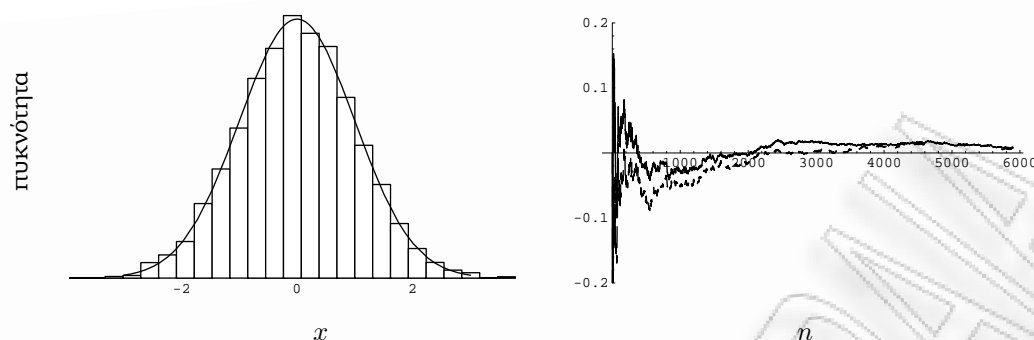
οπότε οι εκτιμήσεις των $w(x_i)$ ισούνται με

$$\hat{w}(x_i) = \frac{\sigma \sum_{j=1}^n \xi_j}{d_w(x_i)}$$

όπου

$$d_w(x_i) = \sum_{j=1}^n \xi_j \exp \left\{ (1 - 1/\sigma^2) x_j^2 / 2 \right\} \mathbf{I}(|x_j| \leq |x_i|) + \exp \left\{ (1 - 1/\sigma^2) x_i^2 / 2 \right\} \sum_{j=1}^n \xi_j \mathbf{I}(|x_j| > |x_i|).$$

Τρέξαμε 50 ανεξάρτητες αλυσίδες ΜΗ με κατανομή πρότασης $q(x) \propto e^{-x^2/2\sigma^2}$, για



Σχήμα 5.2: Αριστερά βλέπουμε το ιστόγραμμα του σταθμισμένου δείγματος $(x_i, w(x_i))$ μαζί με την καμπύλη της τυπικής κανονικής κατανομής. Δεξιά βλέπουμε τη σύγκλιση των σταθμισμένων μέσων $\sum w(x_i)x_i / \sum w(x_i)$ (συνεχής γραμμή) και $\sum \xi_i x_i / \sum \xi_i$ (διακεκομμένη γραμμή).

δύο διαφορετικές τιμές του $\sigma^2 = 2^2$ και 5^2 προκειμένου να εκτιμήσουμε τα τυπικά σφάλματα των αντίστοιχων εκτιμητών. Οι εκτιμήσεις της πρώτης και της δεύτερης ροπής καθώς επίσης και τα αντίστοιχα τυπικά τους σφάλματα παρουσιάζονται στον Πίνακα 5.5.

| | $\sigma^2 = 2^2$ | | | Χρόνος |
|----------|----------------------|----------------------|----------------------|--------|
| | MH | \hat{W} | \hat{W} | (sec) |
| $E(X^2)$ | 0.999556 (0.0086) | 0.999012 (0.0077) | 0.999033 (0.0063) | 56.83 |
| | $\sigma^2 = 5^2$ | | | |
| | MH | \hat{W} | \hat{W} | |
| $E(X^2)$ | 1.003964 (0.0164) | 1.003440 (0.0126) | 1.002014 (0.0096) | 10.45 |

Πίνακας 5.5: Εκτιμήσεις της δεύτερης ροπής της κατανομής-στόχου $\pi(x) \propto e^{-x^2/2}$, χρησιμοποιώντας ως κατανομή πρότασης την $q(x) \propto e^{-x^2/2\sigma^2}$, με $\sigma^2 = 2^2$ και 5^2 . Σε παρενθέσεις παρατίθενται τα αντίστοιχα εκτιμηθέντα τυπικά σφάλματα. Μέσος πρόσθετος χρόνος για τον υπολογισμό του εκτιμητή $\hat{h}_{\hat{w}}$.

Τα αποτελέσματα που παίρνουμε είναι αντίστοιχα με αυτά του προηγούμενου παραδείγματος. Ο εκτιμητής με τα βάρη σπουδαιότητας έχει μικρότερη διασπορά από τον κλασικό εκτιμητή MH ενώ αυτός με τα εκτιμώμενα βάρη έχει τη μικρότερη διασπορά από όλους τους υπόλοιπους.

Επίσης στο Σχήμα 5.2 απεικονίζεται το ιστόγραμμα του σταθμισμένου δείγματος $(x_i, w(x_i))_{i \geq 0}$ μαζί με την καμπύλη της τυπικής κανονικής κατανομής (της κατανομής-στόχου) και η σύγκλιση των σταθμισμένων μέσων $\sum w(x_i)x_i / \sum w(x_i)$ (συνεχής γραμμή) και $\sum \xi_i x_i / \sum \xi_i$ (διακεκομμένη γραμμή), όπου ξ_i τα βάρη του

αλγορίθμου ΜΗ, με $\sum \xi_i = 10000$. \square

Παράδειγμα 5.4 (συνέχεια). Σε αυτό το παράδειγμα όπου $\pi(x) \propto e^{-x^2/2}$ και $q(z|x) \propto e^{-(z-x)^2/2\sigma^2}$ με $\sigma^2 > 1$, τρέξαμε 50 ανεξάρτητες αλυσίδες ΜΗ με $\sigma^2 = 2^2$ και 5^2 , προκειμένου να εκτιμήσουμε τη διασπορά των αντίστοιχων εκτιμητών. Οι εκτιμήσεις της πρώτης και της δεύτερης ροπής καθώς επίσης και οι εκτιμήσεις των τυπικών σφαλμάτων τους παρουσιάζονται στους Πίνακες 5.6–5.7. Επίσης, στα Σχήματα 5.3–5.4 φαίνονται οι τιμές των εκτιμητών της πρώτης και της δεύτερης ροπής της κατανομής-στόχου $\pi(x) \propto e^{-x^2/2}$ των σταθμισμένων εκτιμητών $\sum_{i=1}^n \hat{w}(x_i)x_i^2 / \sum_{i=1}^n \hat{w}(x_i)$ (συνεχής γραμμή), $\sum_{i=1}^n w(x_i)x_i^2 / \sum_{i=1}^n w(x_i)$ (διακεκομμένη γραμμή) και $\sum_{i=1}^n \xi_i x_i^2 / \sum_{i=1}^n \xi_i$ (κουκκίδες), για κάθε μία από τις 50 ανεξάρτητες αλυσίδες. Εύκολα διακρίνουμε ότι ο εκτιμητής $\sum_{i=1}^n \hat{w}(x_i)x_i^2 / \sum_{i=1}^n \hat{w}(x_i)$ έχει τη μικρότερη μεταβλητότητα μεταξύ των εκτιμητών που παίρνουμε από τις 50 προσομοιωμένες αλυσίδες.

| | ΜΗ | w | \hat{w} |
|----------|----------------------|----------------------|----------------------|
| $E(X)$ | 0.002074 (0.0224) | 0.001411 (0.0195) | 0.000645 (0.0137) |
| $E(X^2)$ | 0.997682 (0.0250) | 0.996682 (0.0244) | 0.994579 (0.0174) |

Πίνακας 5.6: Εκτιμήσεις της δεύτερης ροπής της κατανομής-στόχου $\pi(x) \propto e^{-x^2/2}$, χρησιμοποιώντας ως κατανομή πρότασης τη $q(z|x) \propto e^{-(z-x)^2/2\sigma^2}$ με $\sigma^2 = 2^2$. Σε παρενθέσεις παρατίθενται τα αντίστοιχα εκτιμηθέντα τυπικά σφάλματα.

| | ΜΗ | w | \hat{w} |
|----------|-----------------------|----------------------|----------------------|
| $E(X)$ | -0.001334 (0.0240) | 0.000755 (0.0211) | 0.001125 (0.0199) |
| $E(X^2)$ | 1.006340 (0.0460) | 1.003072 (0.0385) | 0.999312 (0.0274) |

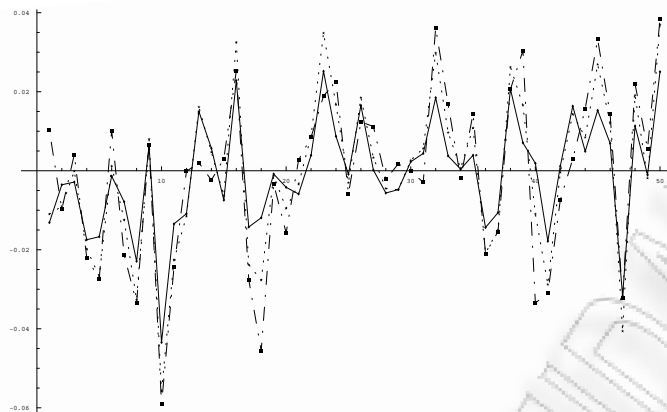
Πίνακας 5.7: Εκτιμήσεις της δεύτερης ροπής της κατανομής-στόχου $\pi(x) \propto e^{-x^2/2}$, χρησιμοποιώντας ως κατανομή πρότασης τη $q(z|x) \propto e^{-(z-x)^2/2\sigma^2}$, με $\sigma^2 = 5^2$. Σε παρενθέσεις παρατίθενται τα αντίστοιχα εκτιμηθέντα τυπικά σφάλματα.

\square

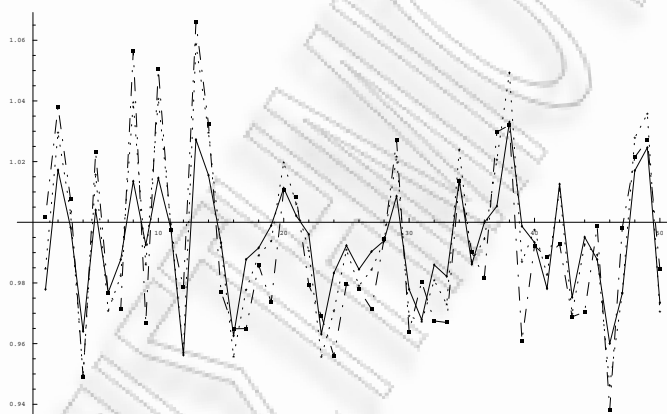
Ένα εύλογο ερώτημα που προκύπτει από την παραπάνω ανάλυση είναι αν θα μπορούσε να συνεχιστεί αυτή η διαδικασία και να χρησιμοποιηθούν τα $\hat{w}(x_i)$, έτσι ώστε να πάρουμε νέες εκτιμήσεις των βαρών, $\hat{w}(x_i)$, και έναν νέο εκτιμητή $\hat{h}_{\hat{w}} = \sum \hat{w}(x_i)h(x_i) / \sum \hat{w}(x_i)$. Προκειμένου να ελέγξουμε τις ιδιότητες του εκτιμητή

$\hat{h}_{\hat{\omega}}$ τρέξαμε 50 ανεξάρτητους τυχαίους περιπάτους ΜΗ (όπως στο Παράδειγμα 4.4) και εκτιμήσαμε το τυπικό σφάλμα του νέου εκτιμητή. Η εκτίμηση ήταν 0.0212. Ο εκτιμητής $\hat{h}_{\hat{\omega}}$ έχει σαφώς μικρότερο τυπικό σφάλμα από τον εκτιμητή ΜΗ και από αυτόν με τα γνωστά βάρη, έχει όμως μεγαλύτερο τυπικό σφάλμα από αυτό του εκτιμητή με τα αρχικά εκτιμώμενα βάρη. Συμπεραίνουμε ότι μία τέτοια διαδικασία μάλλον δεν θα είχε νόημα να συνεχιστεί αφού αφ' ενός μεν η υλοποίησή της χρειάζεται περισσότερο χρόνο, αφ' ετέρου δε οι εκτιμητές που προκύπτουν δεν έχουν μικρότερη διασπορά.

Συνοψίζοντας, θα πρέπει να πούμε ότι βλέποντας τον αλγόριθμο ΜΗ υπό την οπτική των κατάλληλα σταθμισμένων δειγμάτων, μάς δίνεται η δυνατότητα να πάρουμε εκτιμητές με μικρότερη διασπορά επιλέγοντας για βάρη ποσότητες ανάλογες των $w(x_i)$. Στην πράξη όμως ο υπολογισμός της ποσότητας $w(x_i)$ μπορεί να γίνει μόνο σε πολύ απλά παραδείγματα γι' αυτό προτείνεται η εκτίμηση των βαρών χρησιμοποιώντας ολόκληρη την ακολουθία ΜΗ. Τα αποτελέσματα από τις προσομοιώσεις σε απλά παραδείγματα είναι ιδιαίτερα ενθαρρυντικά προς αυτή την κατεύθυνση. Εμπειρικά είδαμε ότι οι εκτιμητές αυτοί έχουν ακόμα μικρότερη διασπορά και από τους εκτιμητές με τα ακριβή βάρη. Οι ασυμπτωτικές ιδιότητες των προτεινόμενων εκτιμητών δεν έχουν ακόμα διερευνηθεί, είναι όμως ενδιαφέρον αντικείμενο για περαιτέρω έρευνα.



Σχήμα 5.3: Οι εκτιμήσεις της πρώτης ροπής της κατανομής-στόχου $\pi(x) \propto e^{-x^2/2}$ των σταθμισμένων εκτιμητών $\sum_{i=1}^n \hat{w}(x_i)x_i / \sum_{i=1}^n \hat{w}(x_i)$ (συνεχής γραμμή), $\sum_{i=1}^n w(x_i)x_i / \sum_{i=1}^n w(x_i)$ (διακεκομμένη γραμμή) και $\sum_{i=1}^n \xi_i x_i / \sum_{i=1}^n \xi_i$ (κουκκίδες), για κάθε μία από τις 50 ανεξάρτητες αλυσίδες.



Σχήμα 5.4: Οι εκτιμήσεις της δεύτερης ροπής της κατανομής-στόχου $\pi(x) \propto e^{-x^2/2}$ των σταθμισμένων εκτιμητών $\sum_{i=1}^n \hat{w}(x_i)x_i^2 / \sum_{i=1}^n \hat{w}(x_i)$ (συνεχής γραμμή), $\sum_{i=1}^n w(x_i)x_i^2 / \sum_{i=1}^n w(x_i)$ (διακεκομμένη γραμμή) και $\sum_{i=1}^n \xi_i x_i^2 / \sum_{i=1}^n \xi_i$ (κουκκίδες), για κάθε μία από τις 50 ανεξάρτητες αλυσίδες.

5.2 Προσομοίωση από την πολυωνυμική κατανομή

Όπως αναφέρθηκε στην Ενότητα 2.1.6, στους αλγορίθμους SIR, PMC και σε όλες τις τεχνικές SMC, εφαρμόζεται επαναδειγματοληψία σε κάθε επανάληψη ή κάθε κάποιο αριθμό επαναλήψεων. Ουσιαστικά, από ένα σύνολο n παρατηρήσεων επιλέγονται με επανατοποθέτηση T παρατηρήσεις με αντίστοιχες πιθανότητες w_i , όπου $\sum_{i=1}^n w_i = 1$. Αυτή η διαδικασία είναι ισοδύναμη με την προσομοίωση από την πολυωνυμική κατανομή $\mathcal{M}_n(T, \mathbf{w})$, όπου $\mathbf{w} = (w_1, \dots, w_n)$.

Σε αυτές τις εφαρμογές τα n και T έχουν τυπικά ιδιαίτερα μεγάλες τιμές. Είναι προφανές λοιπόν ότι ο υπολογιστικός χρόνος για μία τέτοια διαδικασία είναι εξαιρετικά μεγάλος, ειδικότερα όταν επαναλαμβάνεται σε κάθε βήμα. Σε μία προσπάθεια υπολογιστικής οικονομίας, αναπτύξαμε μία τεχνική δύο βημάτων για την προσομοίωση από μία πολυωνυμική κατανομή $\mathcal{M}_n(T, \mathbf{w})$ με μεγάλα T και n . Η τεχνική προσαρμόζεται σε όλες τις ήδη γνωστές μεθόδους και μειώνει σημαντικά τον απαιτούμενο υπολογιστικό χρόνο.

Πριν προχωρήσουμε, ας δώσουμε κάποιους συμβολισμούς. Έστω $\mathbf{p} = (p_1, \dots, p_n)$ ένα διάνυσμα πιθανοτήτων με $p_i > 0$, $i = 1, \dots, n$, και $\sum_{i=1}^n p_i = 1$. Ένα τυχαίο διάνυσμα $\mathbf{X} = (X_1, \dots, X_n)$ ακολουθεί την πολυωνυμική κατανομή $\mathcal{M}_n(T; \mathbf{p})$ αν έχει συνάρτηση μάζας πιθανότητας

$$P(\mathbf{X} = \mathbf{x}) = P(X_1 = x_1, \dots, X_n = x_n) = \frac{T!}{\prod_{i=1}^n x_i!} \prod_{i=1}^n p_i^{x_i}, \quad (5.2)$$

για ακεραίους $0 \leq x_i \leq T$, $i = 1, \dots, n$, και $\sum_{i=1}^n x_i = T$.

Λόγω της ευρείας χρήσης της πολυωνυμικής κατανομής (δες McCulloch and Rossi, 1994, Imai and Van Dyk, 2005, Song et al., 2007, Johnson et al., 1996, και τις αναφορές εκεί) έχουν προταθεί στη βιβλιογραφία αρκετές τεχνικές για την προσομοίωση από αυτήν. Η τροποποίηση που προτείνεται εδώ μπορεί να ενσωματωθεί σε κάθε ήδη γνωστή τεχνική, επιφέροντας μείωση του χρόνου προσομοίωσης ενός δείγματος, ειδικά σε περιπτώσεις όπου τα πλήθη των κατηγοριών n και των δοκιμών T είναι μεγάλα. Η μείωση του χρόνου επιβεβαιώνεται μέσω προσομοιώσεων που υλοποιήθηκαν σε διάφορες γλώσσες προγραμματισμού όπως η Fortran, η R, το Matlab και Mathematica.

5.2.1 Γνωστές μέθοδοι προσομοίωσης

Ο πιο άμεσος τρόπος για να παράγουμε ένα τυχαίο δείγμα από την πολυωνυμική κατανομή $\mathcal{M}_n(T; \mathbf{p})$ είναι η «ακολουθιακή αναζήτηση» (sequential search, δες Devroye, 1986), η οποία επίσης λέγεται και «άμεση μέθοδος» (direct method) και βασίζεται στο Λήμμα Αντιστροφής. Έστω $P_i = \sum_{j=1}^i p_j$, $i = 1, \dots, n$, οι αθροί-

στικές πιθανότητες του \mathbf{p} . Η μέθοδος αρχικοποιεί το διάνυσμα \mathbf{X} θέτοντας μηδέν σε κάθε θέση του και παράγει ανεξάρτητες τυχαίες μεταβλητές U_1, \dots, U_T από την ομοιόμορφη κατανομή $\mathcal{U}(0, 1)$. Τότε, η i -ιοστή συνιστώσα του \mathbf{X} αυξάνεται κατά ένα αν ικανοποιείται η σχέση

$$P_{i-1} < U_j \leq P_i, \quad \text{για } j = 1, 2, \dots, T.$$

Μία εναλλακτική μέθοδος για την προσομοίωση από την πολυωνυμική κατανομή βασίζεται στην ακόλουθη γνωστή ιδιότητά της: Αν $\mathbf{X} \sim \mathcal{M}_n(T, \mathbf{p})$ τότε η X_1 ακολουθεί τη διωνυμική κατανομή $\mathcal{B}(T; p_1)$ και

$$X_i | \sum_{j=1}^{i-1} X_j = t_{i-1} \sim \mathcal{B}(T - t_{i-1}; p_i / (1 - P_{i-1})), \quad \text{για } i = 2, \dots, n.$$

Σύμφωνα με αυτή την ιδιότητα, το τυχαίο διάνυσμα (X_1, \dots, X_n) μπορεί να προσομοιωθεί ακολουθιακά από τις αντίστοιχες διωνυμικές κατανομές. Για την προσομοίωση τυχαίων μεταβλητών από τη διωνυμική κατανομή έχουν προταθεί διάφοροι αλγόριθμοι όπως αυτοί των Ahrens and Dieter (1980), Kachivichyanukul (1982) και Kemp (1986). Αυτή η μέθοδος καλείται συνήθως « δεσμευμένη μέθοδος » (conditional method).

Μία άλλη μέθοδος είναι αυτή των Brown and Bromberg (1984). Πρόκειται για μία τεχνική δύο επιπέδων η οποία βασίζεται στην ιδιότητα ότι η δεσμευμένη κατανομή ανεξάρτητων τυχαίων μεταβλητών Poisson δοθέντος του αθροίσματός τους είναι πολυωνυμική. Τέλος, μία πιο γενική μέθοδος που θα μπορούσε να χρησιμοποιηθεί για την προσομοίωση παρατηρήσεων από την πολυωνυμική κατανομή είναι η μέθοδος alias η οποία έχει προταθεί από τον Walker (1977) και είναι μία γενική μέθοδος προσομοίωσης διακριτών τυχαίων μεταβλητών με πεπερασμένο στήριγμα.

Μία σύγκριση των παραπάνω μεθόδων γίνεται από τον Davis (1993) ο οποίος καταλήγει στο ότι η δεσμευμένη μέθοδος σε συνδυασμό με τον αλγόριθμο του Kemp για την προσομοίωση από τη διωνυμική κατανομή

“...is a good all-purpose algorithm for multinomial random variate generation, since it provides a nice balance between the competing criteria of execution speed and simplicity”.

Στη συνέχεια θα παρουσιάσουμε μια παραλλαγή δύο βημάτων για τη προσομοίωση από την πολυωνυμική κατανομή.

5.2.2 Διαδικασία δύο βημάτων

Έστω $A = \{1, \dots, n\}$ και $\mathcal{B} = \{B_1, \dots, B_m\}$ μια αυθαίρετη διαμέριση του A η οποία αποτελείται από μη κενά σύνολα. Έστω n_j ο πληθάρθμος του συνόλου B_j . Προφανώς, $\sum_{j=1}^m n_j = n$. Έστω επίσης $\mathbf{X} = (X_1, \dots, X_n) \equiv (X_i; i \in A)$ ένα τυχαίο διάνυσμα και $\mathbf{p} = (p_i; i \in A)$ ένα διάνυσμα πιθανοτήτων. Για $j = 1, \dots, m$, έστω $\mathbf{X}^{(j)} = (X_i; i \in B_j)$, $\mathbf{p}^{(j)} = (p_i; i \in B_j)$ και $q_j = \sum_{i \in B_j} p_i$. Τότε ισχύει το ακόλουθο:

Λήμμα 5.1. Αν $\mathbf{K} = (K_1, \dots, K_m) \sim \mathcal{M}_m(T; \mathbf{q})$ και οι τυχαίες μεταβλητές $\mathbf{X}^{(1)}, \dots, \mathbf{X}^{(m)}$ είναι ανεξάρτητες δοθέντος $\mathbf{K} = \mathbf{k} = (k_1, \dots, k_m)$ με

$$\mathbf{X}^{(j)} | \mathbf{K} = \mathbf{k} \sim \mathcal{M}_{n_j}(k_j; \mathbf{p}^{(j)}/q_j), \quad j = 1, \dots, m,$$

τότε

$$\mathbf{X} \sim \mathcal{M}_n(T; \mathbf{p}).$$

Απόδειξη. Δεσμεύοντας στο $\mathbf{K} = \mathbf{k}$ παίρνουμε

$$\begin{aligned} P(\mathbf{X} = \mathbf{x} | \mathbf{K} = \mathbf{k}) &= \prod_{j=1}^m P(\mathbf{X}^{(j)} = \mathbf{x}^{(j)} | \mathbf{K} = \mathbf{k}) \\ &= \prod_{j=1}^m \frac{k_j! \prod_{i \in B_j} p_i^{x_i}}{q_j^{k_j} \prod_{i \in B_j} x_i!} I(\sum_{i \in B_j} x_i = k_j) \end{aligned}$$

και αθροίζοντας ως προς όλες τις δυνατές διαμερίσεις μήκους m του T έχουμε

$$\begin{aligned} P(\mathbf{X} = \mathbf{x}) &= \sum_{(k_1, \dots, k_m)} P(\mathbf{X} = \mathbf{x} | \mathbf{K} = \mathbf{k}) P(\mathbf{K} = \mathbf{k}) \\ &= \left\{ \prod_{j=1}^m \frac{k_j! \prod_{i \in B_j} p_i^{x_i}}{q_j^{k_j} \prod_{i \in B_j} x_i!} I(\sum_{i \in B_j} x_i = k_j) \right\} \frac{T! \prod_{j=1}^m q_j^{k_j}}{\prod_{j=1}^m k_j!} I(\sum_{j=1}^m k_j = T) \\ &= \frac{T!}{\prod_{i=1}^n x_i!} \prod_{i=1}^n p_i^{x_i} I(\sum_{i=1}^n x_i = T). \end{aligned}$$

Η δεύτερη ισότητα ισχύει καθώς $k_j = \sum_{i \in B_j} x_i$ και έτσι σε κάθε $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_n)$ αντιστοιχεί μία μοναδική διαμέριση (k_1, \dots, k_m) . \square

Βάσει του Λήμματος 5.1, προκειμένου να προσομοιώσουμε από την πολυ-

νυμική κατανομή $\mathcal{M}_n(T; \mathbf{p})$ μπορούμε να ακολουθήσουμε την εξής διαδικασία:

- Βήμα 0.* Διαμερίζουμε το σύνολο των κατηγοριών σε m το πλήθος υποσύνολα τα οποία περιέχουν n_1, \dots, n_m κατηγορίες αντίστοιχα.
- Βήμα 1.* Προσομοιώνουμε τους αριθμούς των παρατηρήσεων K_1, \dots, K_m που αντιστοιχούν σε κάθε ένα από τα m υποσύνολα.
- Βήμα 2.* Προσομοιώνουμε K_j το πλήθος παρατηρήσεις για το j υποσύνολο, για $j = 1, \dots, m$.

Ας υποθέσουμε για λόγους ευκολίας ότι $n = km$. Μία δυνατή επιλογή για το j -οστό σύνολο είναι να περιέχει τις κατηγορίες από $(j-1)k+1$ μέχρι jk . Σε αυτήν την περίπτωση, $q_j = \sum_{i=(j-1)k+1}^{jk} p_i$, $j = 1, \dots, m$. Να σημειωθεί ότι πριν προχωρήσουμε στην κατασκευή των υποσυνόλων, είναι προτιμότερο να διατάξουμε τις κατηγορίες σύμφωνα με τις πιθανότητές τους σε φθίνουσα σειρά, αφού με αυτόν τον τρόπο έχουμε μείωση του απαιτούμενου χρόνου προσομοίωσης ανεξάρτητα από τη μέθοδο που χρησιμοποιείται.

Θεωρητικά, η προσομοίωση παρατηρήσεων χρησιμοποιώντας την προτεινόμενη διαδικασία σε συνδυασμό με οποιαδήποτε υπάρχουσα τεχνική έχει τον ίδιο ακριβώς αναμενόμενο χρόνο με την αρχική μέθοδο. Στην πράξη όμως, η τεχνική αυτή οδηγεί σε πολύ πιο γρήγορους αλγορίθμους. Τα εμπειρικά αποτελέσματα που παρουσιάζονται στην επόμενη ενότητα επιβεβαιώνουν τη χρησιμότητα ενσωμάτωσης της προτεινόμενης διαδικασίας, ειδικά όταν τα T και n είναι μεγάλα.

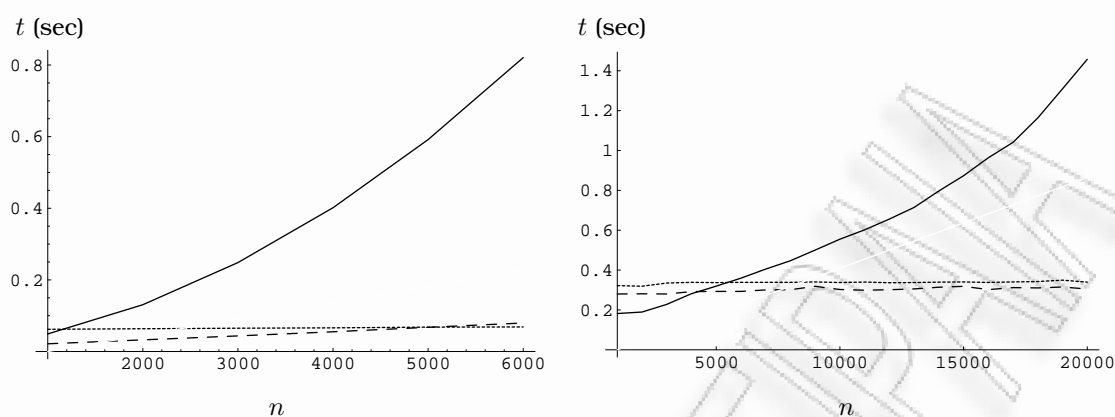
5.2.3 Εμπειρικά αποτελέσματα

Προκειμένου να συγκρίνουμε τον υπολογιστικό χρόνο που χρειάζεται η προτεινόμενη μέθοδος για την προσομοίωση ενός τυχαίου διανύσματος από την πολυωνυμική κατανομή σε σχέση με τις κλασσικές μεθόδους, θεωρήσαμε την πολυωνυμική κατανομή $\mathcal{M}_n(T; \mathbf{p} = (p_1, \dots, p_n))$ με $p_1 = \dots = p_n = 1/n$ για διάφορες τιμές των n και T . Οι γλώσσες προγραμματισμού που χρησιμοποιήθηκαν είναι οι Matlab, Mathematica, R και Fortran και καταγράφηκαν οι αντίστοιχοι υπολογιστικοί χρόνοι (χρόνοι CPU). Στις περιπτώσεις που ήταν διαθέσιμες, χρησιμοποιήθηκαν οι εσωτερικές υπορουτίνες για την προσομοίωση από την πολυωνυμική κατανομή. Οι R και Fortran έχουν ενσωματωμένες υπορουτίνες για την προσομοίωση από την πολυωνυμική κατανομή οι οποίες χρησιμοποιούν τη δεσμευμένη μέθοδο σε συνδυασμό με τον αλγόριθμο του Kachitvichyanukal (1982) για την προσομοίωση από τη διωνυμική κατανομή. Το Mathematica χρησιμοποιεί επίσης τη δεσμευμένη μέθοδο αλλά το δείγμα από τη διωνυμική κατανομή παράγεται αθροίζοντας ανεξάρτητες τυχαίες μεταβλητές Bernoulli. Από την άλλη πλευρά, στο Matlab δεν υπάρχει εσωτερική συνάρτηση

για την προσομοίωση από την πολυωνυμική κατανομή γι' αυτό χρησιμοποιήσαμε δύο ρουτίνες η οποίες είναι διαθέσιμες στο "Matlab central file exchange" (<http://www.mathworks.com/matlabcentral/fileexchange>) και στο "Lightspeed Matlab toolbox" (<http://research.microsoft.com/~minka/software/lightspeed>). Η πρώτη ρουτίνα είναι γραμμένη από τους Trujillo-Ortiz et al. και χρησιμοποιεί την άμεση μέθοδο και η δεύτερη ρουτίνα από τον Minka και χρησιμοποιεί τη δεσμευμένη μέθοδο για την πολυωνυμική κατανομή σε συνδυασμό είτε με την ακολουθιακή διερεύνηση είτε τη μέθοδο του Kemp για τη διωνυμική κατανομή ανάλογα με τη μέση τιμή της τελευταίας.

Τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων παρουσιάζονται στον Πίνακα 5.6. Στο Mathematica και στην R, η μείωση του χρόνου CPU είναι πολύ σημαντική σε όλες σχεδόν τις περιπτώσεις, ειδικά για μεγάλες τιμές των T και n . Για παράδειγμα, στο Mathematica η προτεινόμενη μέθοδος μπορεί να γίνει πάνω από 50 φορές ταχύτερη από την κλασσική διαδικασία ($T = 10^4, n = 10^5, m = 10^3$). Στην R, οι ρουτίνες μπορούν να γίνουν μέχρι και 25 φορές γρηγορότερες αλλά μόνο στις περιπτώσεις όπου το n είναι αρκετά μεγάλο. Η μείωση του χρόνου υλοποίησης της προσομοίωσης στο Matlab εξαρτάται από το ποια από τις δύο ρουτίνες θα χρησιμοποιηθεί. Για τη συνάρτηση που χρησιμοποιεί την άμεση μέθοδο, τα αποτελέσματα είναι αντίστοιχα με αυτά των R και Mathematica. Σε αυτήν την περίπτωση, η μέγιστη μείωση επιτυγχάνεται για $T = 100, n = 10^5$ και $m = 1000$ όπου η προτεινόμενη διαδικασία είναι 1000 φορές γρηγορότερη από την αντίστοιχη τυπική διαδικασία. Από την άλλη πλευρά, όταν χρησιμοποιείται η ρουτίνα του Minka, σημαντική βελτίωση στο χρόνο επιτυγχάνεται κυρίως όταν $T \ll n$. Στο σημείο αυτό, θα πρέπει να επισημάνουμε ότι χρησιμοποιώντας την πρώτη συνάρτηση του Matlab σε συνδυασμό με την προτεινόμενη παραλλαγή με κατάλληλο m , οδηγούμαστε σε πολύ γρηγορότερη διαδικασία από αυτήν του Minka ανεξάρτητα από το αν στη δεύτερη ενσωματώνουμε την τροποποίηση ή όχι. Στο Σχήμα 5.5 απεικονίζονται οι μέσοι χρόνοι που χρειάζονται στο Matlab (αριστερά) και στην R (δεξιά) για την προσομοίωση ενός τυχαίου διανύσματος χρησιμοποιώντας την τυπική διαδικασία (συνεχής γραμμή) και την προτεινόμενη διαδικασία δύο βημάτων με $m = 100$ (διακεκομμένη γραμμή) και $m = 1000$ (κουκκίδες) για $T = 100$ και για διάφορες τιμές του n . Η υπεροχή της προτεινόμενης διαδικασίας είναι φανερή ειδικά για μεγάλες τιμές του n .

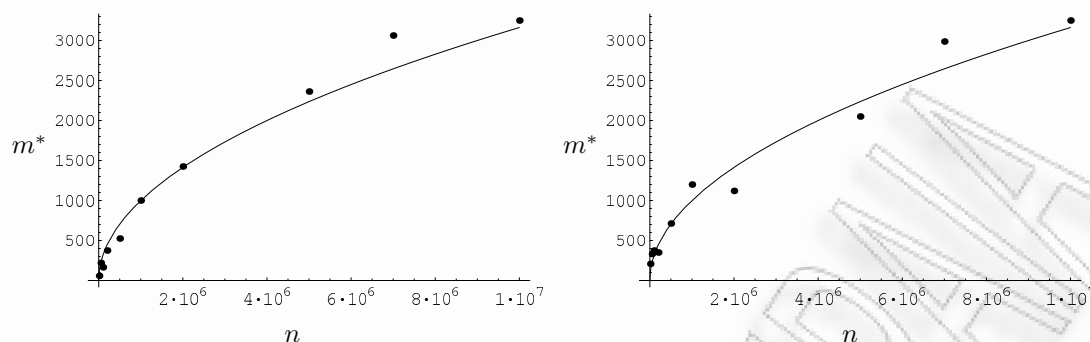
Η μείωση του χρόνου CPU στην Fortran δεν είναι τόσο σημαντική όσο στις υπόλοιπες γλώσσες προγραμματισμού και επιτυγχάνεται κυρίως όταν $T \ll n$. Από την άλλη πλευρά, όταν το T είναι της ίδιας τάξης με το n , η μείωση είναι αμελητέα. Αυτή η συμπεριφορά είναι πιθανόν συνέπεια του γεγονότος ότι η Fortran, σε αντίθεση με όλες τις άλλες γλώσσες προγραμματισμού που δοκιμάστηκαν, υπόκειται σε μεταγλώττιση (compilation) και είναι σχεδιασμένη να



Σχήμα 5.5: Ο μέσος χρόνος που χρειάζεται ο κλασικός αλγόριθμος (συνεχής γραμμή) και η παραλλαγή δυο βημάτων με $m = 100$ (διακεκομμένη γραμμή) και με $m = 1000$ (κουκκίδες) για την προσομοίωση μιας παρατήρησης από την πολυωνυμική κατανομή $\mathcal{M}_n(T = 100; \mathbf{p} = (1/n, \dots, 1/n))$ στο Matlab (αριστερά) και στην R (δεξιά) για διάφορες τιμές του n .

κατασκευάζει γρήγορους εκτελέσιμους κώδικες για επιστημονικό προγραμματισμό. Εικάζεται λοιπόν ότι η Fortran παρουσιάζει τη μικρότερη μείωση στον υπολογιστικό χρόνο που χρειάζεται για την προσομοίωση παρατηρήσεων από την πολυωνυμική κατανομή σε σχέση με όλες τις άλλες γλώσσες προγραμματισμού που χρησιμοποιήθηκαν για δύο κυρίως λόγους. Πρώτον, γιατί ο αρχικός χρόνος που χρειάζεται η Fortran για να προσομοιώσει ένα τυχαίο διάνυσμα από την πολυωνυμική κατανομή είναι πολλές τάξεις μεγέθους μικρότερος από τον αντίστοιχο χρόνο σε όλες τις άλλες γλώσσες προγραμματισμού. Δεύτερον, η μεταγλώττιση παράγει ένα εκτελέσιμο πρόγραμμα το οποίο είναι ουσιαστικά ανεπηρέαστο από τις επαναλήψεις (loops) που απαιτεί η προσομοίωση. Από την άλλη πλευρά, το Mathematica, το Matlab και η R είναι γλώσσες προγραμματισμού με ενσωματωμένο μεταφραστή (interpreted languages), οπότε ο υπολογιστικός χρόνος που χρειάζονται αυξάνεται με τον αριθμό των επαναλήψεων. Καταλήγοντας, συμπεραίνουμε ότι δεν υπάρχει ουσιαστικός λόγος για τη χρήση της προτεινόμενης μεθόδου στην Fortran.

Η όλη διαδικασία υλοποιήθηκε και για πολυωνυμικές κατανομές με διαφορετικά διανύσματα πιθανοτήτων. Πιο συγκεκριμένα, προσομοιώθηκαν ανεξάρτητες τυχαίες μεταβλητές U_1, \dots, U_n από την ομοιόμορφη $\mathcal{U}(0, 1)$ και ορίστηκε $p_i = U_i / \sum_{j=1}^n U_j$ για $i = 1, \dots, n$. Τα αποτελέσματα αυτών των προσομοιώσεων δε διαφέρουν από αυτά που παρουσιάζονται στον Πίνακα 5.8. Ακολούθως, προκειμένου να διαπιστώσουμε την επίδραση της διάταξης του διανύσματος των πιθανοτήτων στον υπολογιστικό χρόνο σε σχέση με την προτεινόμενη διαδικα-



Σχήμα 5.6: Βέλτιστο m (m^*) στο R όταν $T = 1000$ (αριστερά) και $T = 10000$ (δεξιά). Η συνεχής γραμμή απεικονίζει το \sqrt{n} .

σία, προσομοιώθηκε ένα τυχαίο διάνυσμα από την $\mathcal{M}_n(T, \mathbf{p}^{(1)})$ και ένα από την $\mathcal{M}_n(T, \mathbf{p}^{(2)})$, όπου $p_i^{(1)} = 2i/\{n(n+1)\}$ και $p_i^{(2)} = p_{n-i+1}^{(1)}$, $i = 1, \dots, n$. Προφανώς, ο υπολογιστικός χρόνος που χρειαζόμαστε για την προσομοίωση από τη δεύτερη πολυωνυμική κατανομή είναι μικρότερος από ό,τι από την πρώτη χρησιμοποιώντας τις κλασσικές μεθόδους. Η μείωση του χρόνου που επιτυγχάνεται με τη χρήση της προτεινόμενης διαδικασίας είναι παρόμοια και για τις δυο περιπτώσεις.

Όσον αφορά στην επιλογή του αριθμού των υποσυνόλων m , εκτεταμένες μελέτες προσομοίωσης έδειξαν ότι η βέλτιστη τιμή του m , έστω m^* , δεν εξαρτάται από το διάνυσμα των πιθανοτήτων \mathbf{p} . Στην R και στο Matlab, το m^* είναι της τάξης του \sqrt{n} ενώ στο Mathematica μοιάζει να είναι γραμμικό ως προς το n . Επί πλέον, στην R το m^* δεν εξαρτάται από τον αριθμό των δοκιμών T . Σε αυτήν την περίπτωση, επιλέγοντας το m είτε ίσο με \sqrt{n} είτε με ένα διαιρέτη του n κοντά στο \sqrt{n} , έχουμε μία καλή επιλογή για τον αριθμό των υποσυνόλων της διαμέρισης των κατηγοριών της πολυωνυμικής κατανομής (δες Σχήμα 5.6). Από την άλλη πλευρά, στο Matlab, η εξάρτηση του m^* από το T είναι της τάξης του $\log(T)$, οπότε το m^* μπορεί να δοθεί ως ένας διαιρέτης του n ο οποίος είναι κοντά στο $\log(T)\sqrt{n}$. Στο Mathematica, μία απλή γραμμική παλινδρόμηση του m^* στο n ταιριάζει σχεδόν τέλεια ($R^2 > 0.95$ για όλα τα T). Ο αριθμός των δοκιμών επηρεάζει μόνο το σταθερό όρο της παλινδρόμησης, ο οποίος όμως στις περισσότερες περιπτώσεις δεν είναι στατιστικά σημαντικός. Επί πλέον, για όλα τα T η κλίση της ευθείας παλινδρόμησης εκτιμάται με .004. Τελικά, θα μπορούσαμε να πούμε ότι για το Mathematica, η τιμή $.004n$ (ή ένας διαιρέτης του n κοντά σε αυτήν την τιμή) είναι μία αρκετά ικανοποιητική επιλογή για το m . Πάντως, η διαφορά στον υπολογιστικό χρόνο είναι πολύ μικρή όταν το m είναι ίσο με κάποιο διαιρέτη του n κοντά στις βέλτιστες επιλογές για κάθε γλώσσα προγραμματισμού, οπότε

δεν κρίνεται μεγάλης σπουδαιότητας η χρήση του βέλτιστου m κάθε φορά.

Ολοκληρώνοντας, θα πρέπει να επισημάνουμε τα εξής: Παρ' όλο που ο αναμενόμενος υπολογιστικός χρόνος της προτεινόμενης παραλλαγής για την προσομοίωση από την πολυωνυμική κατανομή είναι ο ίδιος με τους αντίστοιχους χρόνους των κλασικών μεθόδων και επί πλέον αντί για την προσομοίωση από μία μόνο πολυωνυμική κατανομή χρειάζεται να προσομοιώσουμε από $m + 1$ πολυωνυμικές κατανομές, στις περισσότερες περιπτώσεις η μέθοδος δύο βημάτων επιφέρει σημαντική μείωση στον υπολογιστικό χρόνο. Επομένως είναι εξαιρετικά χρήσιμη, αν όχι απαραίτητη, όταν τα T και n είναι πολύ μεγάλα, δηλαδή σε περιπτώσεις όπως αυτές των αλγορίθμων SIR και PMC.

| T | n | m | Matlab | | | | Mathematica | | R | | Fortran | |
|--------|--------|--------|--------|-------|------|------|-------------|-------|--------|-------|---------|------|
| | | | TO | | M | | Κ | Π | Κ | Π | Κ | Π |
| | | | Κ | Π | Κ | Π | | | | | | |
| 10^2 | 10^3 | 10 | .06 | .03 | .07 | .06 | .13 | .05 | .16 | .25 | .07 | .06 |
| | | 10^2 | | .02 | | .05 | | .09 | | .28 | | .04 |
| | 10^4 | 10 | 2.17 | .42 | .62 | .52 | 2.64 | .71 | .51 | .30 | .58 | .56 |
| | | 10^2 | | .13 | | .33 | | .57 | | .28 | | .25 |
| | | 10^3 | | .04 | | .12 | | .84 | | .34 | | .11 |
| | 10^5 | 10 | 267.36 | 20.31 | 6.14 | 5.31 | 192.33 | 20.47 | 7.61 | .65 | 5.78 | 6.91 |
| | | 10^2 | | 2.28 | | 3.03 | | 7.37 | | .33 | | 2.49 |
| | | 10^3 | | .25 | | .57 | | 5.42 | | .34 | | .46 |
| | | 10^4 | | 2.21 | | .71 | | 9.98 | | .71 | | .67 |
| 10^3 | 10^3 | 10 | .15 | .06 | .07 | .07 | .46 | .09 | 1.55 | 2.38 | .08 | .07 |
| | | 10^2 | | .05 | | .07 | | .13 | | 2.40 | | .07 |
| | 10^4 | 10 | 2.96 | .49 | .64 | .61 | 6.04 | 1.02 | 4.88 | 2.65 | .64 | .63 |
| | | 10^2 | | .26 | | .54 | | .63 | | 2.49 | | .57 |
| | | 10^3 | | .31 | | .42 | | 1.21 | | 3.01 | | .37 |
| | 10^5 | 10 | 278.19 | 24.31 | 6.22 | 6.04 | 228.12 | 24.03 | 74.89 | 5.99 | 6.17 | 6.76 |
| | | 10^2 | | 4.30 | | 5.23 | | 7.78 | | 2.87 | | 5.66 |
| | | 10^3 | | 1.43 | | 3.24 | | 5.93 | | 3.10 | | 2.62 |
| | | 10^4 | | 3.41 | | 1.19 | | 14.14 | | 6.34 | | 1.10 |
| 10^4 | 10^3 | 10 | 1.08 | .12 | .09 | .09 | 3.74 | .45 | 15.5 | 23.46 | .12 | .12 |
| | | 10^2 | | .15 | | .10 | | .51 | | 23.85 | | .12 |
| | 10^4 | 10 | 12.52 | 1.31 | .64 | .65 | 41.08 | 4.30 | 49.39 | 26.83 | .76 | .78 |
| | | 10^2 | | .45 | | .64 | | 1.35 | | 24.58 | | .73 |
| | | 10^3 | | 1.38 | | .65 | | 4.59 | | 27.15 | | .78 |
| | 10^5 | 10 | 375.01 | 29.48 | 6.22 | 6.18 | 567.98 | 57.25 | 772.81 | 59.20 | 6.70 | 7.31 |
| | | 10^2 | | 5.04 | | 6.08 | | 11.77 | | 27.90 | | 6.48 |
| | | 10^3 | | 3.56 | | 5.41 | | 10.18 | | 28.15 | | 6.04 |
| | | 10^4 | | 14.32 | | 4.19 | | 47.21 | | 61.66 | | 3.81 |

Πίνακας 5.8: Υπολογιστικός χρόνος (sec) που χρειάζεται για την παραγωγή ενός τυχαίου δείγματος από την πολυωνυμική κατανομή $\mathcal{M}_n(T; \mathbf{p} = (1/n, \dots, 1/n))$ σε διάφορες γλώσσες προγραμματισμού και για διάφορες τιμές των T , n και m χρησιμοποιώντας την προτεινόμενη (Π) και την κλασσική (Κ) μέθοδο. Οι στήλες με τίτλο TO και M παρουσιάζουν τα αποτελέσματα χρησιμοποιώντας τη συνάρτηση των Trujillo-Ortiz et al. και του Minka αντίστοιχα στο Matlab. Επίσης, ο υπολογιστικός χρόνος στη Fortran είναι πολλαπλασιασμένος με το 100.

Σύνοψη - Συμπεράσματα–Μελλοντικές κατευθύνσεις

Η τέχνη να γράφεις είναι η τέχνη να συντομεύεις.

—Anton Tchekhov (1860 - 1904)

Δεν μπορούμε να τα πούμε όλα σ' ένα έργο κάτι πρέπει ν' αφήσουμε.

—Γιώργος Σεφέρης (1900-1971)

Σύνοψη–Συμπεράσματα

Στα πλαίσια της διδακτορικής διατριβής ασχολήθηκα με τα κατάλληλα σταθμισμένα δείγματα και εφαρμογές τους. Θεώρησα τα κατάλληλα σταθμισμένα δείγματα ως προς κάποια κατανομή–στόχο π από μία διαφορετική οπτική. Ουσιαστικά, θεωρώντας τα βάρη ως χρόνους παραμονής στην αντίστοιχη κατάσταση μέχρι το επόμενο άλμα, όρισα κατάλληλες διαδικασίες με άλματα (Ορισμός 3.3). Όταν η αρχική ακολουθία σχηματίζει μία εργοδική αλυσίδα Markov, η διαδικασία με άλματα που σχετίζεται με αυτήν είναι ημιμαρκοβιανή διαδικασία με οριακή κατανομή την π (Πρόταση 3.1). Υπό αυτήν την οπτική τα κατάλληλα σταθμισμένα δείγματα συμπεριφέρονται με αντίστοιχο τρόπο όπως και οι κλασσικοί αλγόριθμοι MCMC.

Μέσω αυτής της οπτικής ο δειγματολήπτης σπουδαιότητας μπορεί να χρησιμοποιηθεί ως μία γενική τεχνική προσομοίωσης και όχι απλά ως μία μέθοδος εκτίμησης ολοκληρωμάτων της μορφής (1.1), όπως θεωρείτο μέχρι τώρα. Επί πλέον κάποιες κλασσικές τεχνικές MCMC (όπως ο αλγόριθμος MH) μπορούν να μελετηθούν υπό την οπτική των κατάλληλα σταθμισμένων δειγμάτων, δίνοντάς

μας τη δυνατότητα να πάρουμε εκτιμητές με μικρότερη διασπορά (δες Ενότητα 3.3).

Όταν τα δείγματα είναι ανεξάρτητα και το μέσο βάρος τους είναι φραγμένο προτείνεται μία τροποποίηση της συνηθισμένης στάθμισης η οποία οδηγεί σε στάσιμα σταθμισμένα δείγματα από την κατανομή-στόχο π (δες Ενότητα 3.2.1). Επί πλέον για κάποιες ειδικές περιπτώσεις, συμπεριλαμβανομένου και του δειγματολήπτη σπουδαιότητας, υπολογίστηκε η ταχύτητα σύγκλισης στην οριακή κατανομή (δες Ενότητα 3.5). Στο Θεώρημα 3.1 αποδεικνύεται υπό συνθήκες η ομοιόμορφη σύγκλιση της διαδικασίας με άλματα. Επίσης μέσω της μεθόδου Αποδοχής-Απόρριψης μπορούμε να προσομοιώσουμε μία στάσιμη ημιμαρκοβιανή διαδικασία.

Στο Κεφάλαιο 4 προτείνεται μία νέα μέθοδος προσομοίωσης από κάποια κατανομή-στόχο π , η οποία συνδυάζει τη διακριτοποίηση της π με την κατάλληλη στάθμιση της προκύπτουσας ακολουθίας. Η μέθοδος αυτή μπορεί να χρησιμοποιηθεί για να τροποποιηθούν γνωστοί αλγόριθμοι MCMC με σκοπό την ευκολότερη υλοποίησή τους. Όσον αφορά στις αυτοσυσχετίσεις της ακολουθίας του γινομένου των συνιστωσών του σταθμισμένου δείγματος που προκύπτει μέσω της νέας τεχνικής, φαίνεται ότι υπάρχει σημαντική μείωση σε σχέση με τους κλασσικούς αλγόριθμους, τουλάχιστον στα παραδείγματα που έχουμε εξετάσει. Αυτό μπορεί να διευκολύνει την εκτίμηση των τυπικών σφαλμάτων των εργοδικών μέσων.

Μελλοντικές κατευθύνσεις

Μελετώντας τα κατάλληλα σταθμισμένα δείγματα και τις εφαρμογές τους προέκυψαν διάφορα ενδιαφέροντα θέματα κάποια από τα οποία αντιμετωπίστηκαν ενώ κάποια άλλα αποτελούν αντικείμενα για περαιτέρω έρευνα.

Ένα από τα σημαντικότερα θέματα που θα μας απασχολήσουν στο μέλλον είναι η διερεύνηση των ασυμπτωτικών ιδιοτήτων των εκτιμητών που προκύπτουν αντικαθιστώντας τα κλασσικά βάρη του αλγορίθμου MH με τις εκτιμήσεις των μέσων τιμών τους οι οποίες υπολογίζονται χρησιμοποιώντας την αρχική ακολουθία MH. Προσομοιωμένα αποτελέσματα μας υποδεικνύουν ότι ο εκτιμητής με τα εκτιμώμενα βάρη έχει μικρότερη διασπορά ακόμα κι από τον εκτιμητή που χρησιμοποιεί ως βάρη τις πραγματικές μέσες τιμές.

Επίσης ενδιαφέρον παρουσιάζει και η μελέτη εκτιμητών που προκύπτουν αντικαθιστώντας τα κλασσικά βάρη του υβριδικού δειγματολήπτη Gibbs με τις αντίστοιχες εκτιμήσεις των μέσων τιμών τους. Για παράδειγμα, αν $(X, Y) \sim \pi$ θεωρούμε έναν υβριδικό δειγματολήπτη Gibbs, όπου η ακολουθία $(X_t)_{t \geq 0}$ παράγεται από την πλήρως δεσμευμένη κατανομή $\pi_{X|Y}(\cdot|y)$, ενώ η $(Y_t)_{t \geq 0}$ από ένα βήμα MH με κατανομή-στόχο την $\pi_{Y|X}(\cdot|x)$ και κατανομή πρότασης $q(\cdot|y, x)$. Τότε, τα Y_i

που γίνονται δεκτά, επαναλαμβάνονται στο δείγμα κάποιον (θετικό) αριθμό φορών ξ_i ο οποίος ακολουθεί γεωμετρική κατανομή με πιθανότητα επιτυχίας

$$\alpha_{MH}^*(y_i) = \int a^*(y_i, z, x)q(z|y_i, x)\mu(dz),$$

όπου

$$\alpha^*(y_i, z) = \min \left\{ 1, \frac{\pi_{Y|X}(z|x)q(y_i|z, x)}{\pi_{Y|X}(y_i|x)q(z|y_i, x)} \right\}.$$

Αυτό συνεπάγεται ότι

$$E\{\xi|y_i\} = \left\{ \int a^*(y_i, z)q(z|y_i, x)\mu(dz) \right\}^{-1}. \quad (6.1)$$

Το ολοκλήρωμα (6.1) μπορεί να εκφραστεί ως μία μέση τιμή και ενδεχομένως να εκτιμηθεί χρησιμοποιώντας την αρχική ακολουθία ΜΗ. Επομένως, και στην περίπτωση του υβριδικού δειγματολήπτη Gibbs έχουμε τη δυνατότητα να χρησιμοποιήσουμε αντί για τα τυχαία βάρη που προκύπτουν φυσικά από το βήμα ΜΗ, εκτιμώμενα βάρη και πιθανόν να πάρουμε και εδώ εκτιμητές με μικρότερες διασπορές.

Ένα ακόμα ανοιχτό θέμα είναι η περαιτέρω διερεύνηση ιδιοτήτων της προτεινόμενης μεθόδου για την προσομοίωση παρατηρήσεων από κάποια κατανομή-στόχο π μέσω διακριτοποίησης και στάθμισης.

Τέλος, εξαιρετικό ενδιαφέρον θα είχε να υπολογιστούν οι ταχύτητες σύγκλισης της διαδικασίας με άλματα που σχετίζεται με τα κατάλληλα σταθμισμένα δείγματα σε πιο γενικές περιπτώσεις.

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΠΕΡΑΙΑ

Μαρκοβιανές και Ημιμαρκοβιανές διαδικασίες

Τίποτα δεν είναι τόσο
πρακτικό όσο η Θεωρία.

—*J. Robert Oppenheimer (1904-1967)*

Η μνήμη όπου και να την αγγίζεις πονεί

—*Γιώργος Σεφέρης (1900-1971)*

A.1 Εισαγωγή

Σε αυτό το κεφάλαιο έχουμε συγκεντρώσει βασικές έννοιες και αποτελέσματα σχετικά με τις μαρκοβιανές αλυσίδες και τις ημιμαρκοβιανές διαδικασίες, τα οποία είναι αναγκαία για την κατανόηση και την απόδειξη βασικών ιδιοτήτων των μεθόδων προσομοίωσης που αναπτύσσονται στα προηγούμενα κεφάλαια¹.

Έπειτα από τις πρωτοποριακές μελέτες των W. Doeblin, J.L. Doob, T. Harris και S. Orey, στις αλυσίδες Markov είναι αφιερωμένη μία πληθώρα συγγραμμάτων (π.χ. Feller, 1970, 1971, Revuz, 1975, Nummelin, 1984, Meyn and Tweedie, 1993, Norris, 1997, Tierney, 1994, Nummelin, 2002), τα οποία καλύπτουν μία ευρεία περιοχή της θεωρίας και των εφαρμογών τους.

Για τις ημιμαρκοβιανές διαδικασίες (semi-Markov processes), η βιβλιογραφία είναι επίσης μεγάλη. Από το 1954 που εισήχθησαν ανεξάρτητα από τρεις συγγραφείς, τους Lévy (1954), Smith (1954) και Takács (1954) η βιβλιογραφία αυξάνεται

¹Οι αποδείξεις των θεωρημάτων και των προτάσεων αυτού του κεφαλαίου αναφέρονται μόνο όπου κρίνεται απαραίτητο, διαφορετικά ο ενδιαφερόμενος αναγνώστης παραπέμπεται στην αντίστοιχη βιβλιογραφία.

ραγδαία. Ήδη το άρθρο επισκόπησης του Teugels (1976) περιλαμβάνει περίπου 1000 αναφορές από πάνω από 800 συγγραφείς. Μια εκτεταμένη παρουσίαση των ημιμαρκοβιανών διαδικασιών και των βασικών εφαρμογών τους γίνεται στα βιβλία των Janssen and Limnios (1999), Limnios and Oprisan (2001) και Janssen and Raimondo (2006).

A.2 Μαρκοβιανές αλυσίδες

Η θεωρία των μαρκοβιανών διαδικασιών έχει ως αντικείμενο τη μελέτη οικογενειών τυχαίων μεταβλητών $(X_t)_{t \in T}$ όπου t είναι μία παράμετρος με τιμές σε ένα διατεταγμένο σύνολο T , ενώ οι τιμές των τυχαίων μεταβλητών X_t ανήκουν σε ένα σύνολο \mathcal{X} και έχουν τη μαρκοβιανή ιδιότητα, δηλαδή όλο το παρελθόν της ακολουθίας ανάγεται στην κατάσταση της τελευταίας χρονικής στιγμής που παρατηρήθηκε.

Κατ' αρχάς, δύο βασικά στοιχεία μίας μαρκοβιανής διαδικασίας $(X_t)_{t \in T}$ είναι:

- Το σύνολο \mathcal{X} των τιμών των τυχαίων μεταβλητών $(X_t)_{t \in T}$ το οποίο συνήθως καλείται *χώρος καταστάσεων*. Όταν το \mathcal{X} έχει πεπερασμένο ή αριθμήσιμο πλήθος στοιχείων τότε η διαδικασία καλείται διαδικασία με διακριτό χώρο καταστάσεων ενώ σε διαφορετική περίπτωση έχουμε μία διαδικασία με γενικό χώρο καταστάσεων.
- Το σύνολο T των τιμών της παραμέτρου t , το οποίο συνήθως είναι ένα υποσύνολο του \mathbb{R} . Οι πιο συνηθισμένες περιπτώσεις είναι $T = \mathbb{Z}_+ = \{0, 1, 2, \dots\}$ και $[0, \infty)$. Γενικά, όταν το T είναι ένα αριθμήσιμο σύνολο η διαδικασία $(X_t)_{t \in T}$ καλείται διαδικασία Μαρκον διακριτού χρόνου ή πιο απλά αλυσίδα Μαρκον και θα γράφουμε $(X_n)_{n \in \mathbb{Z}_+}$. Αν το T είναι συνεχές σύνολο τότε η $(X_t)_{t \in T}$ καλείται διαδικασία Μαρκον συνεχούς χρόνου.

Σε αυτό το κεφάλαιο θα ασχοληθούμε κατά κύριο λόγο με αλυσίδες Μαρκον με γενικό χώρο καταστάσεων.

A.2.1 Βασικοί ορισμοί

Ορισμός A.1. Έστω $(\mathcal{X}, \mathcal{B}(\mathcal{X}))$ ένας μετρήσιμος χώρος και $(\Omega, \mathcal{F}, \mathbb{P})$ ένας χώρος πιθανότητας. Έστω επίσης $(X_n)_{n \in \mathbb{Z}_+}$ μία ακολουθία τυχαίων μεταβλητών με τιμές στον $(\Omega, \mathcal{F}, \mathbb{P})$. Η $(X_n)_{n \in \mathbb{Z}_+}$ θα καλείται αλυσίδα Μαρκον αν

$$\mathbb{P}(X_{n+1} \in B | X_n = x_n, \dots, X_0 = x_0) = \mathbb{P}(X_{n+1} \in B | X_n = x_n), \quad (\text{A.1})$$

$$\forall B \in \mathcal{B}(\mathcal{X}), n = 0, 1, \dots, \text{ και } x_n, x_{n-1}, \dots, x_0 \in \mathcal{X}.$$

Η πρώτη άμεση συνέπεια της (A.1) είναι ότι για κάθε $s > 0$ ισχύει

$$P(X_{n+s} \in B | X_n = x_n, \dots, X_0 = x_0) = P(X_{n+s} \in B | X_n = x_n). \quad (\text{A.2})$$

Ορισμός A.2. Μία αλυσίδα Μαρkov λέγεται ομογενής (homogeneous) αν η δεσμευμένη κατανομή του X_{n+1} δοθέντος $X_n = x$ δεν εξαρτάται από το n για κάθε $x \in \mathcal{X}$.

Ορισμός A.3. Ένας πυρήνας μετάβασης είναι μία συνάρτηση K η οποία ορίζεται στο σύνολο $\mathcal{X} \times \mathcal{B}(\mathcal{X})$ και είναι τέτοια ώστε

- (α) για κάθε $x \in \mathcal{X}$, το $K(x, \cdot)$ είναι ένα μέτρο πιθανότητας και
- (β) για κάθε $A \in \mathcal{B}(\mathcal{X})$, η $K(\cdot, A)$ είναι μία μετρήσιμη συνάρτηση.

Κάθε πυρήνας μετάβασης ορίζει μία αλυσίδα Μαρkov και αντίστροφα, κάθε ομογενής αλυσίδα Μαρkov ορίζει ένα πυρήνα μετάβασης

$$K(x, A) \equiv P(X_1 \in A | X_0 = x), \quad x \in \mathcal{X}, A \in \mathcal{B}(\mathcal{X}).$$

Να σημειωθεί ότι στην περίπτωση που ο χώρος καταστάσεων \mathcal{X} είναι διακριτός, τότε ο πυρήνας μετάβασης K μετατρέπεται σε πίνακα (μετάβασης) με στοιχεία

$$K_{ij} = P(X_1 = j | X_0 = i), \quad i, j \in \mathcal{X}.$$

Μία μαρκοβιανή αλυσίδα καθορίζεται πλήρως από την κατανομή της X_0 η οποία καλείται αρχική κατανομή και από τον πυρήνα μετάβασης της. Πιο συγκεκριμένα, η αρχική κατάσταση X_0 επιλέγεται σύμφωνα με κάποια αρχική κατανομή μ_0 . Έπειτα, η κατάσταση X_1 επιλέγεται τυχαία από τη δεσμευμένη κατανομή

$$P(X_1 \in B | X_0 = x_0), \quad B \in \mathcal{B}(\mathcal{X}),$$

και αυτή η διαδικασία συνεχίζεται. Γενικά ισχύει ότι

$$\begin{aligned} P(X_1 \in A_1 | X_0 = x) &= K(x, A_1) \\ P((X_1, X_2) \in A_1 \times A_2 | X_0 = x) &= \int_{A_1} K(y_1, A_2) K(x, dy_1) \\ &\vdots \\ P((X_1, \dots, X_n) \in A_1 \times \dots \times A_n | X_0 = x) &= \int_{A_1} \dots \int_{A_{n-1}} K(y_{n-1}, A_n) \\ &\quad \times K(y_{n-2}, dy_{n-1}) \times \dots \times K(x, dy_1). \end{aligned}$$

Ορισμός A.4. Η συνάρτηση

$$K^n(x, B) = P(X_n \in B | X_0 = x_0) \quad (\text{A.3})$$

λέγεται πυρήνας μετάβασης n τάξης.

Για τον πυρήνα μετάβασης n τάξης ισχύει

$$K^n(x, B) = \int_{\mathcal{X}} K^{n-1}(y, B)K(x, dy) = \int_{\mathcal{X}} K(y, B)K^{n-1}(x, dy)$$

για όλα τα $B \in \mathcal{B}(\mathcal{X})$, $x \in \mathcal{X}$, $n = 1, 2, \dots$. Για $n = 0$ θέτουμε

$$K^0(x, \cdot) = \delta_x(\cdot),$$

όπου $\delta_x(\cdot)$ το μέτρο Dirac στο $x \in \mathcal{X}$,

$$\delta_x(A) = \begin{cases} 1, & x \in A, \\ 0, & x \notin A. \end{cases}$$

Στην πραγματικότητα η $K^n(\cdot, \cdot)$, $n \geq 1$, είναι πυρήνας μετάβασης για την ακολουθία X_0, X_n, X_{2n}, \dots που είναι επίσης αλυσίδα Markov.

Ορισμός A.5. Η αλυσίδα Markov $X^n = (X_{nk})_{k \in \mathbb{Z}_+}$ που έχει πυρήνα μετάβασης του (A.3) καλείται n -σκελετός (n -skeleton) της αλυσίδας X .

Ορισμός A.6. Έστω $(\mathcal{X}, \mathcal{B}(\mathcal{X}))$ ένας μετρήσιμος χώρος και (Ω, \mathcal{F}, P) ένας χώρος πιθανότητας. Έστω $(X_t)_{t \geq 0}$ μία στοχαστική διαδικασία συνεχούς χρόνου με τιμές στον (Ω, \mathcal{F}, P) . Η $(X_t)_{t \geq 0}$ καλείται διαδικασία Markov συνεχούς χρόνου αν

$$P(X_{t+s} \in B | X_u = x_u, u \leq s) = P(X_{t+s} \in B | X_s = x_s). \quad (\text{A.4})$$

Θα συμβολίζουμε με $P_{s,t}(x, A)$ την πιθανότητα $P(X_t \in A | X_s = x)$. Η πιθανότητα $P_{s,t}(x, A)$ καλείται πιθανότητα μετάβασης της $(X_t)_{t \in \mathbb{R}_+}$. Από τον ορισμό προκύπτει ότι

$$P_{s,s^+}(x, A) = I_A(x).$$

Ορισμός A.7. Μια διαδικασία Markov συνεχούς χρόνου $(X_t)_{t \geq 0}$ λέγεται ομογενής αν η $P_{s,t}(x, A)$ εξαρτάται μόνο από τη διαφορά $t - s$, δηλαδή αν

$$P_{s,t}(x, A) = P_{0,t-s}(x, A),$$

για όλα τα $x \in \mathcal{X}$, $A \in \mathcal{B}(\mathcal{X})$ και $(t, s) \in \mathbb{R}_+^2$, $s < t$.

Πρόταση A.1. Έστω $(X_t)_{t \geq 0}$ μια διαδικασία Markov συνεχούς χρόνου και $\delta > 0$. Η $X^\delta = (X_{n\delta})_{n \in \mathbb{Z}_+}$, είναι μία αλυσίδα Markov.

Λήμμα A.1. ΕΞΙΣΩΣΕΙΣ CHAPMAN-KOLMOGOROV. Για κάθε $(m, n) \in \mathbb{N}^2$, $x \in \mathcal{X}$ και $A \in \mathcal{B}(\mathcal{X})$ ισχύει

$$K^{m+n}(x, A) = \int_{\mathcal{X}} K^n(y, A)K^m(x, dy)$$

Ορισμός A.8. Αν υπάρχει ένα μέτρο πιθανότητας π που να ικανοποιεί την εξίσωση

$$\pi(A) = \int \pi(dx)K(x, A)$$

τότε λέμε ότι αποτελεί μία στάσιμη κατανομή της αλυσίδας.

Ο όρος «στάσιμη κατανομή» δικαιολογείται από το ότι αν η αρχική κατανομή είναι η π τότε η κατανομή όλων των X_i είναι η π . Έστω E_μ η μέση τιμή ως προς την κατανομή P_μ , όπου μ ένα αρχικό μέτρο. Στην περίπτωση όπου το μ είναι το μέτρο Dirac στο $x \in \mathcal{X}$ τότε θα γράφουμε E_x .

Πρόταση A.2. ΑΣΘΕΝΗΣ ΜΑΡΚΟΒΙΑΝΗ ΙΔΙΟΤΗΤΑ. Για κάθε αρχική κατανομή μ και για κάθε συνάρτηση h ισχύει

$$E_\mu [h(X_{n+1}, X_{n+2}, \dots) | x_0, \dots, x_n] = E_{x_n} [h(X_{n+1}, X_{n+2}, \dots)]$$

με την προϋπόθεση ότι υπάρχει η μέση τιμή.

Η ασθενής Μαρκοβιανή ιδιότητα ουσιαστικά δεν είναι τίποτα άλλο παρά μία αναδιατύπωση της ιδιότητας έλλειψης μνήμης των Μαρκοβιανών αλυσίδων. Αν h είναι η δείκτρια συνάρτηση του συνόλου A , τότε η παραπάνω πρόταση ανάγεται στον Ορισμό A.2.

Ορισμός A.9. Για κάθε $A \in \mathcal{B}(\mathcal{X})$ η τυχαία μεταβλητή

$$\tau_A = \begin{cases} \min \{n \geq 1 : X_n \in A\}, & \text{αν } X_n \in A \text{ για κάποιο } n < \infty, \\ \infty, & \text{αν } X_n \notin A \text{ για κάθε } n, \end{cases}$$

καλείται χρόνος πρώτης επιστροφής στο A .

Είναι εύκολο να δειχτεί ότι για κάθε $A \in \mathcal{B}(\mathcal{X})$ το τ_A είναι ένας χρόνος τερματισμού (stopping time), δηλαδή το ενδεχόμενο $\{\tau_A > n\}$ περιέχεται στη σ -άλγεβρα που επάγεται από τις (X_0, \dots, X_n) .

Ορισμός A.10. Για κάθε σύνολο $A \in \mathcal{B}(\mathcal{X})$ η τυχαία μεταβλητή

$$\eta_A = \sum_{n=1}^{\infty} I_A(X_n) \tag{A.5}$$

καλείται χρόνος κατοχής του A .

Πρόταση A.3. ΙΣΧΥΡΗ ΜΑΡΚΟΒΙΑΝΗ ΙΔΙΟΤΗΤΑ. Για κάθε αρχική κατανομή μ και για κάθε χρόνο τερματισμού τ ο οποίος είναι σχεδόν βεβαίως πεπερασμένος, ισχύει

$$E_\mu [h(X_{\tau+1}, X_{\tau+2}, \dots) | x_1, \dots, x_\tau] = E_{x_\tau} [h(X_1, X_2, \dots)]$$

με την προϋπόθεση ότι αυτές οι μέσες τιμές υπάρχουν.

Μη διαχωρισιμότητα (Irreducibility)

Ορισμός A.11. Έστω ένα μέτρο ϕ ορισμένο στη σ -άλγεβρα $\mathcal{B}(\mathcal{X})$. Αν για κάθε $x \in \mathcal{X}$ και $A \in \mathcal{B}(\mathcal{X})$ με $\phi(A) > 0$ υπάρχει ένα $n \geq 1$ τέτοιο ώστε

$$K^n(x, A) > 0 \quad \text{για όλα τα } x \in \mathcal{X},$$

ή, ισοδύναμα, αν

$$P(\tau_A < \infty | X_0 = x) > 0 \quad \text{για όλα τα } x \in \mathcal{X},$$

τότε η αλυσίδα Markov $(X_n)_{n \in \mathbb{Z}_+}$ λέγεται ϕ -μη διαχωρίσιμη. Μια αλυσίδα λέγεται ισχυρά ϕ -μη διαχωρίσιμη αν $n = 1$ για όλα τα μετρήσιμα σύνολα A .

Με απλά λόγια, ο Ορισμός A.11. λέει το εξής: Αν το A είναι μη μηδενικό σύνολο ως προς το μέτρο ϕ , τότε, από οποιοδήποτε σημείο $x \in \mathcal{X}$ κι αν ξεκινήσει η αλυσίδα, η πιθανότητα να περάσει κάποτε από το A είναι θετική. Συνεπώς, η αλυσίδα είναι ϕ -μη διαχωρίσιμη αν από οπουδήποτε κι αν ξεκινήσει, η πιθανότητα να περάσει από όλα τα ϕ -θετικά σύνολα είναι θετική. Όταν ο χώρος καταστάσεων της αλυσίδας Markov είναι διακριτός, τότε η αλυσίδα είναι μη διαχωρίσιμη αν όλες οι καταστάσεις της επικοινωνούν μεταξύ τους.

Θεώρημα A.1. Αν η αλυσίδα είναι ϕ -μη διαχωρίσιμη για κάποιο μέτρο ϕ , τότε υπάρχει ένα μέγιστο (maximal) μέτρο ψ τέτοιο ώστε

1. η αλυσίδα είναι ψ -μη διαχωρίσιμη,
2. κάθε μέτρο ϕ' για το οποίο η αλυσίδα είναι ϕ' -μη διαχωρίσιμη είναι απολύτως συνεχές ως προς το ψ , δηλαδή για κάθε $A \in \mathcal{B}(\mathcal{X})$ με $\psi(A) = 0$ ισχύει $\phi'(A) = 0$ και
3. αν $\psi(A) = 0$ τότε $\psi(\{x : P^n(x, A) > 0 \text{ για κάποιο } n \geq 1\}) = 0$.

Με απλά λόγια: Αν η αλυσίδα είναι ϕ -μη διαχωρίσιμη για κάποιο μέτρο ϕ τότε υπάρχει κάποιο μέτρο ψ το οποίο καθορίζει όλα τα σύνολα στα οποία μπορεί αυτή να βρεθεί με θετική πιθανότητα. Γενικά, η ϕ -μη διαχωρισιμότητα δεν καθορίζει όλα παρά μόνο κάποια από αυτά τα σύνολα, αυτά με $\phi(A) > 0$. Δεν εξασφαλίζει ότι αν $\phi(A) = 0$ τότε η αλυσίδα έχει μηδενική πιθανότητα να επισκεφθεί το A . Αντιθέτως, από την τρίτη ιδιότητα, βλέπουμε ότι για το μέγιστο μέτρο ψ , αν κάποιο σύνολο A είναι ψ -μηδενικό τότε το σύνολο των $x \in \mathcal{X}$ από τα οποία αν ξεκινήσει η αλυσίδα θα βρεθεί κάποτε στο A με θετική πιθανότητα είναι επίσης ψ -μηδενικό.

Απεριοδικότητα (Aperiodicity)

Ορισμός A.12. Η αλυσίδα λέγεται περιοδική αν υπάρχει μία διαμέριση $A_1, \dots, A_d \in \mathcal{B}(\mathcal{X})$ τού \mathcal{X} τέτοια ώστε

$$P(x, A_{j+1}) = 1, \quad \forall x \in A_j \quad (\text{με } A_{d+1} \equiv A_1).$$

Αν δε συμβαίνει κάτι τέτοιο η αλυσίδα λέγεται απεριοδική.

Για παράδειγμα, έστω ότι η αλυσίδα είναι περιοδική με $d = 2$ και $X_0 \in A_1$. Τότε υποχρεωτικά $X_1 \in A_2, X_2 \in A_1, X_3 \in A_2, X_4 \in A_1$ κλπ. Δηλαδή, η αλυσίδα πηδάει σε κάθε βήμα από το ένα σύνολο στο άλλο. Αυτό έχει ως συνέπεια το εξής: Εάν ξέρουμε από ποιο από τα δύο σύνολα ξεκινάει η αλυσίδα, γνωρίζουμε σε οποιαδήποτε χρονική στιγμή σε ποιο από τα δύο σύνολα θα βρεθεί.

Μεταβατικότητα και Επαναληπτικότητα (Transience and Recurrence)

Ορισμός A.13. Ένα σύνολο $A \in \mathcal{B}(\mathcal{X})$ ονομάζεται ομοιόμορφα μεταβατικό (uniformly transient) αν υπάρχει μία σταθερά $M < \infty$ τέτοια ώστε

$$E_x(\eta_A) \leq M \quad \text{για κάθε } x \in A.$$

Ορισμός A.14. Ένα σύνολο $A \in \mathcal{B}(\mathcal{X})$ λέγεται επαναληπτικό αν

$$E_x(\eta_A) = \infty \quad \text{για κάθε } x \in A.$$

Με απλά λόγια: Ένα σύνολο A λέγεται επαναληπτικό αν, δεδομένου του ότι η αλυσίδα ξεκινάει από κάποιο σημείο του, αναμένουμε άπειρες επιστροφές σε αυτό.

Ορισμός A.15. Μία αλυσίδα λέγεται επαναληπτική αν κάθε σύνολο το οποίο αυτή μπορεί να επισκεφθεί με θετική πιθανότητα είναι επαναληπτικό.

Ο Harris (1956) εισήγαγε μία ισχυρότερη ιδιότητα από την επαναληπτικότητα, η οποία πήρε και το όνομά του.

Ορισμός A.16. Ένα σύνολο $A \in \mathcal{B}(\mathcal{X})$ θα λέγεται Harris επαναληπτικό αν

$$P(\eta_A = \infty | X_0 = x) = 1 \quad \text{για κάθε } x \in A.$$

Αν η αλυσίδα είναι ψ -μη διαχωρίσιμη (με ψ μέγιστο) και κάθε ψ -θετικό σύνολο είναι Harris επαναληπτικό τότε η αλυσίδα λέγεται Harris επαναληπτική. Αποδεικνύεται ότι αν μία αλυσίδα είναι Harris επαναληπτική, τότε

$$P(\eta_A = \infty | X_0 = x) = 1 \quad \text{για κάθε } x \in \mathcal{X}.$$

Με απλά λόγια: Ένα σύνολο A λέγεται Harris επαναληπτικό αν η αλυσίδα επιστρέφει σε αυτό άπειρες φορές με πιθανότητα ένα. (Αυτό προφανώς είναι πολύ ισχυρότερο από το να απειρίζεται ο αναμενόμενος αριθμός επιστροφών στο σύνολο.) Μία Harris επαναληπτική αλυσίδα επισκέπτεται κάθε μη μηδενικό σύνολο άπειρες φορές με πιθανότητα ένα από όποιο σημείο κι αν ξεκινήσει.

Πρόταση A.4. Αν για κάθε $A \in \mathcal{B}(\mathcal{X})$ ισχύει

$$P(\tau_A < \infty | X_0 = x) = 1 \quad \text{για κάθε } x \in A$$

τότε

$$P(\eta_A = \infty | X_0 = x) = 1 \quad \text{για κάθε } x \in A$$

και η $(X_n)_{n \in \mathbb{Z}_+}$ είναι Harris επαναληπτική αλυσίδα.

Στην περίπτωση διακριτού χώρου καταστάσεων η επαναληπτικότητα και η Harris επαναληπτικότητα είναι ισοδύναμες έννοιες.

Οι Tierney (1994) και Chan and Geyer (1994) αναλύουν το ρόλο της Harris επαναληπτικότητας στους αλγόριθμους MCMC και επισημαίνουν ότι η Harris επαναληπτικότητα ισχύει για τους περισσότερους από αυτούς.

Ορισμός A.17. Αν μία ψ -μη διαχωρίσιμη αλυσίδα έχει μία στάσιμη κατανομή π τότε λέγεται θετική.

Ορισμός A.18. Αν μία αλυσίδα είναι Harris επαναληπτική και θετική τότε λέγεται θετική Harris.

Θεώρημα A.2. Αν η αλυσίδα είναι μη διαχωρίσιμη και έχει μία στάσιμη κατανομή π , τότε αυτή είναι μοναδική.

Θεώρημα A.3. Αν μία αλυσίδα $(X_n)_{n \in \mathbb{Z}_+}$ είναι θετική, τότε είναι και επαναληπτική.

Θεώρημα A.4. Αν η $(X_n)_{n \in \mathbb{Z}_+}$ είναι μία επαναληπτική αλυσίδα και έχει την π ως στάσιμη κατανομή, τότε αυτή είναι μοναδική.

Αντιστρεψιμότητα (Reversibility)

Μια άλλη ιδιότητα που μπορεί να έχει μία αλυσίδα Markov είναι η αντιστρεψιμότητα. Η ιδιότητα της αντιστρεψιμότητας μας λέει ότι η κατεύθυνση του χρόνου δεν επηρεάζει τη δυναμική της αλυσίδας.

Ορισμός A.19. Μία αλυσίδα Markov με χώρο καταστάσεων \mathcal{X} και πυρήνα μεταβάσεως K λέγεται αντιστρέψιμη ως προς μία κατανομή π ορισμένη στο \mathcal{X} , αν

$$\int_A \int_B \pi(dx) K(x, dy) = \int_B \int_A \pi(dy) K(y, dx), \quad \forall A, B \in \mathcal{B}(\mathcal{X}). \quad (\text{A.6})$$

Αποδεικνύεται εύκολα ότι σε αυτήν την περίπτωση η π είναι η στάσιμη κατανομή της αλυσίδας.

Ορισμός A.20. Μία αλυσίδα Μαρκου με χώρο καταστάσεων \mathcal{X} και πυρήνα μετάβασης K ικανοποιεί τη λεπτομερή συνθήκη ισορροπίας (detailed balance condition) αν ικανοποιεί τη Σχέση (A.6).

Η αλυσίδα είναι αντιστρέψιμη ως προς την π αν και μόνον αν, υπό στασιμότητα (δηλαδή αν $X_n \sim \pi$),

$$\begin{aligned} P\{X_n \in A, X_{n+1} \in B\} &= \int_{x \in A} \int_{y \in B} \pi(dx) K(x, dy) \\ &= \int_{x \in A} \int_{y \in B} \pi(dy) K(y, dx) \\ &= P\{X_n \in B, X_{n+1} \in A\}. \end{aligned}$$

Εργοδικότητα (Ergodicity)

Συνήθως, η απόσταση δύο μέτρων μ, ν ορισμένων πάνω σε μία σ -άλγεβρα \mathcal{B} μετριέται βάσει της νόρμας ολικής μεταβολής (total variation norm)

$$\|\mu - \nu\| = \sup_{A \in \mathcal{B}} |\mu(A) - \nu(A)|.$$

Θεώρημα A.5. Αν υπάρχει μία κατανομή πιθανότητας π και για κάθε αρχική κατάσταση $x \in \mathcal{X}$ ισχύει

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \|P^n(x, \cdot) - \pi\| = 0,$$

η αλυσίδα λέγεται εργοδική και η π είναι η στάσιμη κατανομή της.

Θεώρημα A.6. Αν η $(X_n)_{n \in \mathbb{Z}_+}$ είναι μία Harris θετική και απεριοδική αλυσίδα Μαρκου με στάσιμη κατανομή π , τότε

$$\lim_{n \uparrow \infty} \|P_\mu(X_n \in \cdot) - \pi\| = 0$$

για οποιαδήποτε αρχική κατανομή μ .

Θεώρημα A.7. Αν μία αλυσίδα είναι Harris θετική και απεριοδική με στάσιμη κατανομή π , τότε είναι εργοδική και για οποιαδήποτε αρχική κατανομή μ_0

- η $\|\mu_n - \pi\|$ είναι φθίνουσα ως προς n και
- $\lim_{n \uparrow \infty} \|\mu_n - \pi\| = 0$,

όπου μ_n είναι η κατανομή της X_n .

Το παραπάνω σημαίνει ότι οποιαδήποτε και αν είναι η αρχική κατανομή, η κατανομή της X_n πλησιάζει όλο και περισσότερο τη στάσιμη κατανομή π καθώς μεγαλώνει το n .

Θεώρημα A.8. ΕΡΓΟΔΙΚΟ ΘΕΩΡΗΜΑ. Αν X_0, X_1, X_2, \dots μία Harris θετική αλυσίδα Markov με στάσιμη κατανομή π και $h \in \mathcal{L}(\pi)$, δηλαδή $E_\pi(|h|) < \infty$, τότε

$$\frac{1}{n} \sum_{i=0}^{n-1} h(X_i) \xrightarrow{\text{σ.β.}} E_\pi(h) \quad \text{καθώς } n \uparrow \infty.$$

Σημαντικό ρόλο στη μελέτη των αλυσίδων Markov παίζει και η ταχύτητα σύγκλισης του μ_n στην π αφού εκτός των άλλων μία ελάχιστη ταχύτητα σύγκλισης απαιτείται για την ισχύ του Κεντρικού Οριακού Θεωρήματος. Επίσης, ο υπολογισμός της ταχύτητας σύγκλισης είναι εξέχουσας σπουδαιότητας για τους αλγορίθμους MCMC, αφού η ταχύτητα σύγκλισης συνδέεται άμεσα με τα κριτήρια τερματισμού αυτών των αλγορίθμων.

Ορισμός A.21. Μια αλυσίδα Markov $(X_n)_{n \in \mathbb{Z}_+}$ είναι γεωμετρικά εργοδική αν είναι Harris θετική με κάποια στάσιμη κατανομή π και υπάρχει ένα $r > 1$ τέτοιο ώστε

$$\sum_{n=1}^{\infty} r^n \|\mu_n - \pi\| < \infty, \quad \forall x \in \mathcal{X}.$$

Ο Ορισμός A.21 συνεπάγεται ότι η $K^n(x, \cdot)$ συγκλίνει στην π με τουλάχιστον εκθετική ταχύτητα, αφού

$$\|K^n(x, \cdot) - \pi\| \leq C(x)r^{-n}, \quad n = 1, 2, \dots, \forall x \in \mathcal{X}, \quad (\text{A.7})$$

όπου

$$C(x) = \sum_{n=1}^{\infty} r^n \|K^n(x, \cdot) - \pi\|.$$

Αν το \mathcal{X} είναι πεπερασμένο τότε όλες οι μη-διαχωρίσιμες και απεριοδικές αλυσίδες Markov είναι γεωμετρικά εργοδικές. Όμως, στη γενική περίπτωση τα πράγματα είναι διαφορετικά. Για παράδειγμα, οι Mengersen and Tweedie (1996) έδειξαν ότι ένας συμμετρικός τυχαίος περίπατος MH είναι γεωμετρικά εργοδικός αν και μόνο αν η π έχει πεπερασμένες εκθετικές ροπές (δες επίσης Roberts and Tweedie, 1996).

Ορισμός A.22. Μία αλυσίδα $(X_n)_{n \in \mathbb{Z}_+}$ είναι ομοιόμορφα εργοδική αν

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \sup_{x \in \mathcal{X}} \|K^n(x, \cdot) - \pi\| = 0.$$

Θεώρημα A.9. Οι παρακάτω συνθήκες είναι ισοδύναμες:

1. Η αλυσίδα $(X_n)_{n \in \mathbb{Z}_+}$ είναι ομοιόμορφα εργοδική.
2. Υπάρχουν $R < \infty$ και $r > 1$ τέτοια ώστε

$$\|K^n(x, \cdot) - \pi\| < R r^{-n}, \quad n = 1, 2, \dots, \forall x \in \mathcal{X}.$$

Ορισμός A.23. ΣΥΝΘΗΚΗ DOEBLIN Η αλυσίδα Markov $(X_n)_{n \in \mathbb{Z}_+}$ ικανοποιεί τη συνθήκη Doeblin αν υπάρχουν ένα μέτρο πιθανότητας ν , $\epsilon < 1$ και $\delta > 0$ τέτοια ώστε για κάποιο m να ισχύει

$$\nu(A) > \epsilon \implies P(X_m \in A | X_0 = x) \geq \delta, \quad \forall x \in \mathcal{X}.$$

Θεώρημα A.10. Μία απεριοδική ψ -μη διαχωρίσιμη αλυσίδα Markov $(X_n)_{n \in \mathbb{Z}_+}$ ικανοποιεί τη συνθήκη Doeblin αν και μόνο αν είναι ομοιόμορφα εργοδική.

Θεώρημα A.11. Αν υπάρχει $\beta \in (0, 1)$ και κάποιο μέτρο πιθανότητας μ τέτοιο ώστε

$$K(x, A) \geq \beta \mu(A), \quad \forall x \in \mathcal{X}, A \in \mathcal{B}(\mathcal{X}),$$

τότε

$$\|P(X_n \in A | X_0 = x) - \pi\| < (1 - \beta)^n, \quad n = 1, 2, \dots$$

Θεώρημα A.12. Αν η αλυσίδα Markov $(X_n)_{n \in \mathbb{Z}_+}$ έχει μία στάσιμη κατανομή π , οι παρακάτω δυο προτάσεις είναι ισοδύναμες:

1. Αν $h \in \mathcal{L}(\pi)$ τότε ισχύει

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\sum_{i=1}^n h(X_i)}{n} = \int h(x) \pi(dx).$$

2. Η αλυσίδα Markov $(X_n)_{n \in \mathbb{Z}_+}$ είναι Harris επαναληπτική.

Για την απόδειξη δεξ Robert and Casella (2004) σελ. 242.

Κεντρικά Οριακά Θεωρήματα

Θεώρημα A.13. Αν η αλυσίδα Markov $(X_n)_{n \in \mathbb{Z}_+}$ είναι απεριοδική, μη διαχωρίσιμη και αντιστρέψιμη με στάσιμη κατανομή π και

$$0 < \gamma_h^2 = \text{Var}_\pi [h^2(X_0)] + 2 \sum_{k=1}^{\infty} \text{Cov}_\pi [h(X_0)h(X_k)] < \infty \quad (\text{A.8})$$

τότε ισχύει το Κεντρικό Οριακό Θεώρημα, δηλαδή

$$\sqrt{n} \{\hat{h}_n - E_\pi(h)\} \xrightarrow{d} \mathcal{N}(0, \gamma_h^2).$$

Αν η αλυσίδα Markov δεν είναι αντιστρέψιμη τότε δεν αρκεί να είναι πεπερασμένη μόνο η δεύτερη ροπή για να ισχύει το ΚΟΘ, αλλά χρειάζεται και κάτι παραπάνω.

Θεώρημα A.14. Αν η $(X_n)_{n \in \mathbb{Z}_+}$ είναι μία απεριοδική, μη διαχωρίσιμη, θετικά Harris επαναληπτική, με στάσιμη κατανομή την π και γεωμετρικά εργοδική και αν επί πλέον ισχύει

$$E_\pi [|h(X)|^{2+\epsilon}] < \infty \quad (\text{A.9})$$

για κάποιο $\epsilon > 0$, τότε

$$\sqrt{n} \{ \hat{h}_n - E_\pi(h) \} \xrightarrow{d} \mathcal{N}(0, \gamma_h^2).$$

όπου η γ_h^2 δίνεται από την (A.8).

Μία άλλη προσέγγιση του ΚΟΘ για τις αλυσίδες Markov δίνεται από τους Hobert et al. (2002). Επίσης, ΚΟΘ για τις αλυσίδες Markov ισχύουν και κάτω από πιο γενικές συνθήκες (δες Rosenthal, 2007, και τις αναφορές εκεί).

A.3 Ημιμαρκοβιανές διαδικασίες

A.3.1 Βασικοί ορισμοί

Ορισμός A.24. Έστω $Y = (Y_t)_{t \geq 0}$ μία στοχαστική διαδικασία με τιμές στο $(\mathcal{X}, \mathcal{B}(\mathcal{X}))$. Η Y είναι μία διαδικασία με άλματα (jump process) αν για κάθε t υπάρχει ένα $\delta = \delta(t)$ τέτοιο ώστε

$$Y_{t+h} = Y_t \quad \text{για κάθε } h \in [0, \delta).$$

Ορισμός A.25. Έστω $X = (X_n)_{n \in \mathbb{Z}_+}$ μία αλυσίδα Markov και $\xi = (\xi_n)_{n \in \mathbb{Z}_+}$ μία ακολουθία θετικών τυχαίων μεταβλητών για την οποία ισχύει το εξής: Δοδείσης της X οι ξ_0, ξ_1, \dots είναι ανεξάρτητες και η δεσμευμένη κατανομή της ξ_n εξαρτάται μόνο από τις X_n και X_{n+1} . Αν $S_0 = 0$, $S_n = \sum_{j=0}^{n-1} \xi_j$, $n = 1, 2, \dots$, τότε η διαδικασία με άλματα $Y = (Y_t)_{t \geq 0}$ με

$$Y_t = X_n \quad \text{αν } S_n \leq t < S_{n+1}$$

καλείται ημιμαρκοβιανή διαδικασία με εμφυτευμένη αλυσίδα Markov X και χρόνους παραμονής ξ .

Με απλά λόγια: Μία ημιμαρκοβιανή διαδικασία παράγεται από μία αλυσίδα Markov που ο χρόνος παραμονής σε κάθε κατάσταση της είναι τυχαία μεταβλητή και εξαρτάται από τη συγκεκριμένη κατάσταση και από την κατάσταση στην οποία θα μεταβεί ακολούθως η αλυσίδα. Φυσικά, οι χρόνοι παραμονής θα μπορούσαν να είναι μία ντετερμινιστική συνάρτηση των X_n, X_{n+1} .

Μία ειδική περίπτωση ημιμαρκοβιανής διαδικασίας προκύπτει αν στον Ορισμό A.25 η δεσμευμένη κατανομή του ξ_n εξαρτάται μόνο από την X_n (και όχι και από την X_{n+1}). Στην πραγματικότητα, κάθε ημιμαρκοβιανή διαδικασία μπορεί να αναχθεί σε αυτήν την ειδική περίπτωση. Για να το δούμε αυτό, ας θεωρήσουμε την ακολουθία $\check{X} = (\check{X}_n)_{n \in \mathbb{Z}_+}$ όπου $\check{X}_n = (X_n, X_{n+1})$, $n = 0, 1, \dots$. Η \check{X} είναι προφανώς μία (διδιάστατη) αλυσίδα Markov. Χρησιμοποιώντας τους χρόνους παραμονής ξ , μπορούμε να ορίσουμε μία (διδιάστατη) ημιμαρκοβιανή διαδικασία $\check{Y} = (\check{Y}_t)_{t \geq 0}$ όπου $\check{Y}_t = \check{X}_n$ αν $S_n \leq t < S_{n+1}$. Τότε, δοθείσης της \check{X} , η δεσμευμένη κατανομή της ξ_n εξαρτάται μόνο από την \check{X}_n (που αποτελείται από τις X_n και X_{n+1}) και η αρχική ημιμαρκοβιανή διαδικασία Y είναι η μία συνιστώσα της \check{Y} . Ως εκ τούτου, χωρίς βλάβη της γενικότητας, θα θεωρούμε στη συνέχεια ότι ο χρόνος παραμονής στην κατάσταση X_n εξαρτάται μόνον από αυτήν.

Στην περίπτωση που οι δεσμευμένες κατανομές των χρόνων παραμονής είναι εκθετικές, η Y είναι μία μαρκοβιανή διαδικασία με άλματα (Markov jump process) λόγω της έλλειψης μνήμης της εκθετικής κατανομής. Το ίδιο συμβαίνει στην περίπτωση που οι χρόνοι παραμονής είναι διακριτοί και οι δεσμευμένες κατανομές τους είναι γεωμετρικές. Τότε, η διαδικασία διακριτού χρόνου είναι μία αλυσίδα Markov.

Όπως κάθε ομογενής αλυσίδα Markov καθορίζεται πλήρως από την αρχική κατανομή και τον πυρήνα μετάβασης, το ίδιο συμβαίνει και για τις ημιμαρκοβιανές διαδικασίες.

Ορισμός A.26. Έστω $Y = (Y_t)_{t \geq 0}$ μία ημιμαρκοβιανή διαδικασία με εμφυτευμένη αλυσίδα Markov X και χρόνους παραμονής ξ . Ως ημιμαρκοβιανός πυρήνας μετάβασης της διαδικασίας ορίζεται η συνάρτηση $Q : \mathcal{X} \times \mathcal{B}(\mathcal{X}) \times [0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}$ με

$$Q(x, A, t) = P(X_{n+1} \in A, \xi_n \leq t | X_n = x).$$

Αν $K(\cdot, \cdot)$ είναι ο πυρήνας μετάβασης της εμφυτευμένης αλυσίδας Markov τότε ισχύει

$$K(x, A) = Q(x, A, \infty) \quad \forall x \in \mathcal{X}, A \in \mathcal{B}(\mathcal{X}).$$

Στην περίπτωση που ο χρόνος παραμονής σε κάθε κατάσταση εξαρτάται μόνο από αυτήν και όχι και από την επόμενη, ο ημιμαρκοβιανός πυρήνας παίρνει τη μορφή $Q(x, A, t) = K(x, A)P(t|x)$, όπου $P(t|x)$ είναι η συνάρτηση κατανομής της δεσμευμένης κατανομής της ξ_n δοθέντος $X_n = x$. Χωρίς βλάβη της γενικότητας, θα θεωρούμε στη συνέχεια ότι ο χρόνος παραμονής στην κατάσταση X_n εξαρτάται μόνον από αυτήν.

Μία ημιμαρκοβιανή διαδικασία κληρονομεί ιδιότητες της εμφυτευμένης αλυσίδας Markov. Έτσι, μία ημιμαρκοβιανή διαδικασία λέγεται ϕ -μη διαχωρίσιμη, επαναληπτική κλπ. αν αυτό συμβαίνει για την εμφυτευμένη αλυσίδα Markov.

A.3.2 Σχετικές διαδικασίες Μαρκον

Έστω $Y = (Y_t)_{t \geq 0}$ μία ημιμαρκοβιανή διαδικασία με χρόνους παραμονής $\xi = (\xi_n)_{n \in \mathbb{Z}_+}$ και $S_0 = 0$, $S_n = \sum_{j=0}^{n-1} \xi_j$. Θεωρούμε τη στοχαστική διαδικασία $(N_t)_{t \geq 0}$ με

$$N_t = \sup\{n : S_n \leq t\}$$

που απαριθμεί τον αριθμό των αλμάτων που έχουν συμβεί μέχρι το χρόνο t .

Ορισμός A.27. Οι στοχαστικές διαδικασίες $U = (U_t)_{t \geq 0}$, $V = (V_t)_{t \geq 0}$ όπου

$$U_t = t - S_{N_t} \quad \text{και} \quad V_t = S_{N_t+1} - t,$$

λέγονται παρελθών χρόνος από την τελευταία ανανέωση (*backward recurrence time*) και υπολειπόμενος χρόνος μέχρι την επόμενη ανανέωση (*forward recurrence time*) αντίστοιχα.

Θεώρημα A.15. Οι διδιάστατες στοχαστικές διαδικασίες $(Y_t, U_t)_{t \geq 0}$ και $(Y_t, V_t)_{t \geq 0}$ είναι μαρκοβιανές.

Θεώρημα A.16. Εάν η εμφυτευμένη αλυσίδα Μαρκον είναι Harris εργοδική με στάσιμη κατανομή g και ισχύει $E(\xi_n | X_n = x) < \infty$ για κάθε x , τότε οι διδιάστατες μαρκοβιανές διαδικασίες $(Y_t, U_t)_{t \geq 0}$ και $(Y_t, V_t)_{t \geq 0}$ έχουν (την ίδια) στάσιμη κατανομή

$$g(y) \bar{P}(v|y), \tag{A.10}$$

όπου $\bar{P}(v|x) = P(\xi_n \geq v | X_n = x)$.

Ολοκληρώνοντας την A.10 ως προς v παίρνουμε το ακόλουθο:

Θεώρημα A.17. Υπό τις συνθήκες του Θεωρήματος A.16, η ημιμαρκοβιανή διαδικασία έχει οριακή κατανομή $\pi(y) = g(y)E(\xi_n | X_n = y)$.

Επομένως ισχύει το ακόλουθο:

Πόρισμα A.1. Αν η εμφυτευμένη αλυσίδα Μαρκον είναι Harris εργοδική και ισχύει $E(\xi_n | X_n = x) < \infty$ για κάθε x , τότε για κάθε $A \in \mathcal{B}(\mathcal{X})$ ισχύει

$$\lim_{t \uparrow \infty} P(Y_t \in A) = \pi(A).$$

Ορισμός A.28. Μία ημιμαρκοβιανή διαδικασία $(Y_t)_{t \geq 0}$ θα λέγεται στάσιμη αν είναι στάσιμη η διδιάστατη μαρκοβιανή διαδικασία $(Y_t, V_t)_{t \geq 0}$.

Προφανώς, αν η $(Y_t)_{t \geq 0}$ είναι στάσιμη τότε $Y_t \sim \pi$ για κάθε $t \geq 0$.

Υπολογισμός διασποράς εκτιμητή λόγου

Έστω $(X_i)_{i \geq 1}$ μια ακολουθία ανεξάρτητων και ισόνομων τυχαίων μεταβλητών από την g ή μια αλυσίδα Markov με στάσιμη κατανομή την g . Έστω επίσης $(X_i, \xi_i)_{i \geq 1}$ ένα κατάλληλο σταθμισμένο δείγμα ως προς την π . Σε αυτό το κεφάλαιο θα υπολογίσουμε την ασυμπτωτική διασπορά του εκτιμητή λόγου

$$\hat{h}_n = \frac{\sum_{i=1}^n \xi_i h(X_i)}{\sum_{i=1}^n \xi_i} \quad (\text{B.1})$$

χρησιμοποιώντας τη μέθοδο δέλτα. Στην ειδική περίπτωση όπου $\xi_i = w(x_i) = \pi(x_i)/g(x_i)$ παίρνουμε τον εκτιμητή IS.

ΜΕΘΟΔΟΣ ΔΕΛΤΑ. Αν για την ακολουθία των p -διάστατων τυχαίων διανυσμάτων $\mathbf{X}_1, \mathbf{X}_2, \dots$ ισχύει

$$\sqrt{n}(\mathbf{X}_n - \boldsymbol{\mu}) \xrightarrow{d} \mathcal{N}_p(\mathbf{0}, \boldsymbol{\Sigma}) \quad \text{καθώς } n \uparrow \infty$$

και η $g(\mathbf{x}) = g(x_1, \dots, x_p)$ είναι μία παραγωγίσιμη συνάρτηση p μεταβλητών με

$$\nabla g(\mathbf{x}) = \left(\frac{\partial}{\partial x_1} g(\mathbf{x}), \dots, \frac{\partial}{\partial x_p} g(\mathbf{x}) \right)' \quad \text{και} \quad \nabla g(\boldsymbol{\mu}) \neq 0,$$

τότε

$$\sqrt{n}(g(\mathbf{X}_n) - g(\boldsymbol{\mu})) \xrightarrow{d} \mathcal{N}(0, \nabla g(\boldsymbol{\mu})' \boldsymbol{\Sigma} \nabla g(\boldsymbol{\mu})).$$

Αν $(X_1, Y_1), (X_2, Y_2), \dots$ είναι μία ακολουθία ανεξάρτητων και ισόνομων διδιάστατων τυχαίων διανυσμάτων με $E(X_i) = \mu_X$, $E(Y_i) = \mu_Y \neq 0$, $\text{Var}(X_i) = \sigma_X^2$, $\text{Var}(Y_i) = \sigma_Y^2$, $\text{Cov}(X_i, Y_i) = \sigma_{XY}$, γνωρίζουμε ότι

$$\sqrt{n} \left\{ \begin{pmatrix} \bar{X}_n \\ \bar{Y}_n \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \mu_X \\ \mu_Y \end{pmatrix} \right\} \xrightarrow{d} \mathcal{N}_2 \left[\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \sigma_X^2 & \sigma_{XY} \\ \sigma_{XY} & \sigma_Y^2 \end{pmatrix} \right].$$

Για $g(x, y) = x/y$ έχουμε $\nabla g(x, y) = (1/y, -x/y^2)'$ οπότε εφαρμόζοντας την μέ-

Θοδο δέλτα παίρνουμε

$$\sqrt{n} \left(\frac{\bar{X}_n}{\bar{Y}_n} - \frac{\mu_X}{\mu_Y} \right) \xrightarrow{d} \mathcal{N} \left[0, \frac{1}{\mu_Y^2} \left(\sigma_X^2 - 2 \frac{\mu_X}{\mu_Y} \sigma_{XY} + \frac{\mu_X^2}{\mu_Y^2} \sigma_Y^2 \right) \right].$$

Εφαρμόζοντας το παραπάνω με $w(X_i)h(X_i)$ στην θέση του X_i και $w(X_i)$ στην θέση του Y_i παίρνουμε

$$\mu_X = E_g [w(X_i)h(X_i)] = E_\pi [h(X_i)] \quad (\text{B.2})$$

$$\mu_Y = E_g [w(X_i)] = 1 \quad (\text{B.3})$$

$$\sigma_X^2 = \text{Var} [w(X_i)h(X_i)] \quad (\text{B.4})$$

$$\sigma_Y^2 = \text{Var} [w(X_i)] \quad (\text{B.5})$$

$$\begin{aligned} \sigma_{XY} &= \text{Cov} [w(X_i)h(X_i), w(X_i)] \\ &= E_g [w^2(X_i)h(X_i)] - E_g [w(X_i)] E_g [w(X_i)h(X_i)] \\ &= E_\pi [w(X_i)h(X_i)] - E_\pi [h(X_i)] \end{aligned} \quad (\text{B.6})$$

οπότε η διασπορά του εκτιμητή IS θα ισούται με

$$\begin{aligned} \sigma_{IS}^2 &= \text{Var} [w(X_i)h(X_i)] + E_\pi^2 [h(X_i)] (2 + \text{Var} [w(X_i)]) - \\ &\quad 2 E_\pi [h(X_i)] E_\pi [w(X_i)h(X_i)]. \end{aligned} \quad (\text{B.7})$$

Ισχύει επίσης το ΚΟΘ, δηλαδή

$$\sqrt{n} \{ \hat{h}_n - E_\pi(h) \} \xrightarrow{d} \mathcal{N}(0, \sigma_{IS}^2).$$

Ένας συνεπής εκτιμητής τής σ_{IS}^2 είναι ο

$$\hat{\sigma}_{IS}^2 = \frac{n \sum_{i=1}^n w(X_i)^2 \{h(X_i) - \hat{h}_n\}^2}{\left\{ \sum_{i=1}^n w(X_i) \right\}^2}.$$

Συνεπώς, μπορούμε να υπολογίσουμε $100(1 - \alpha)\%$ προσεγγιστικά διαστήματα εμπιστοσύνης για την $E_\pi(h)$,

$$\left[\hat{h}_n - z_{\alpha/2} \hat{\sigma}_{IS} / \sqrt{n}, \hat{h}_n + z_{\alpha/2} \hat{\sigma}_{IS} / \sqrt{n} \right].$$

Εφαρμόζοντας τώρα το παραπάνω στη γενικότερη περίπτωση, με $\xi_i h(X_i)$ στην θέση του X_i και ξ_i στην θέση του Y_i παίρνουμε

$$\begin{aligned} \mu_X &= E_g [\xi_i h(X_i)] = E_g (E [\xi_i h(X_i) | X_i]) \\ &= E_g (\kappa w(X_i) h(X_i)) = \kappa E_\pi [h(X_i)] \end{aligned} \quad (\text{B.8})$$

$$\mu_Y = E_g(E[\xi_i|X_i]) = E_g(\kappa w(X_i)) = \kappa \quad (\text{B.9})$$

$$\begin{aligned} \sigma_X^2 &= \text{Var}[\xi_i h(X_i)] \\ &= \text{Var}(E[\xi_i h(X_i)|X_i]) + E(\text{Var}[\xi_i h(X_i)|X_i]) \\ &= \text{Var}(h(X_i)E[\xi_i|X_i]) + E(h^2(X_i)\text{Var}[\xi_i h|X_i]) \\ &= \text{Var}(h(X_i)\kappa w(X_i)) + E(h^2(X_i)\text{Var}[\xi_i h|X_i]) \\ &= \kappa^2 \text{Var}(h(X_i)w(X_i)) + E(h^2(X_i)\text{Var}[\xi_i h|X_i]) \end{aligned} \quad (\text{B.10})$$

$$\begin{aligned} \sigma_Y^2 &= \text{Var}[\xi_i] \\ &= \text{Var}(E[\xi_i|X_i]) + E(\text{Var}[\xi_i h|X_i]) \\ &= \kappa^2 \text{Var}[w(X_i)] + E(\text{Var}[\xi_i|X_i]) \end{aligned} \quad (\text{B.11})$$

$$\begin{aligned} \sigma_{XY} &= \text{Cov}[\xi_i h(X_i), \xi_i] \\ &= E_g[\xi_i^2 h(X_i)] - E_g[\xi_i] E_g[\xi_i h(X_i)] \\ &= E_g(h(X_i)E[\xi_i^2|X_i]) - \kappa^2 E_\pi[h(X_i)] \\ &= E_g(h(X_i)\{\text{Var}[\xi_i|X_i] + (E[\xi_i|X_i])^2\}) - \kappa^2 E_\pi[h(X_i)] \\ &= E_g(h(X_i)\{\text{Var}[\xi_i|X_i] + \kappa^2 w^2(X_i)\}) - \kappa^2 E_\pi[h(X_i)] \\ &= E_g(h(X_i)\text{Var}[\xi_i|X_i]) + \kappa^2 E_g(h(X_i)w^2(X_i)) - \\ &\quad \kappa^2 E_\pi[h(X_i)] \end{aligned} \quad (\text{B.12})$$

οπότε

$$\begin{aligned} \sigma^2 &= \frac{1}{\kappa^2} \left\{ \kappa^2 \text{Var}(h(X_i)w(X_i)) + E(h^2(X_i)\text{Var}[\xi_i h|X_i]) - 2 \frac{\kappa E_\pi[h(X_i)]}{\kappa} \times \right. \\ &\quad \left. [E_g(h(X_i)\text{Var}[\xi_i|X_i]) + \kappa^2 E_g(h(X_i)w^2(X_i)) - \kappa^2 E_\pi[h(X_i)]] + \right. \\ &\quad \left. \frac{\kappa^2 (E_\pi[h(X_i)])^2}{\kappa^2} [\kappa^2 \text{Var}[w(X_i)] + E(\text{Var}[\xi_i|X_i])] \right\} \\ &= \text{Var}[h(X_i)w(X_i)] - 2E[h(X_i)w^2(X_i)] E_\pi[h(X_i)] + 2(E_\pi[h(X_i)])^2 + \\ &\quad E_\pi[h(X_i)]^2 \text{Var}[w(X_i)] + \frac{1}{\kappa^2} \left\{ E(h^2(X_i)\text{Var}[\xi_i h|X_i]) - \right. \\ &\quad \left. 2E(\text{Var}[\xi_i|X_i]) E_\pi[h(X_i)] + \text{Var}[\xi_i|X_i] (E_\pi[h(X_i)])^2 \right\} \\ &= \sigma_{IS}^2 + \frac{1}{\kappa^2} \left\{ E(h^2(X_i)\text{Var}[\xi_i h|X_i]) - \right. \\ &\quad \left. 2E(\text{Var}[\xi_i|X_i]) E_\pi[h(X_i)] + \text{Var}[\xi_i|X_i] (E_\pi[h(X_i)])^2 \right\} \\ &= \sigma_{IS}^2 + \frac{1}{\kappa^2} E_g \left\{ \text{Var}[\xi_i h(X_i)|X_i] (h(X_i) - E_\pi[h(X_i)])^2 \right\} \end{aligned}$$

Στην περίπτωση που η ακολουθία $(X_i)_{i \geq 1}$ είναι μια αλυσίδα Μαρκοβ, αυτό που αλλάζει στον υπολογισμό της διασποράς των εκτιμητών λόγου είναι ότι πρέπει να συνυπολογιστούν και οι αυτοσυσχετίσεις.

Πιο συγκεκριμένα, οι Σχέσεις (B.4)–(B.5) και (B.10)–(B.11) θα πάρουν τη

μορφή

$$\sigma_X^2 = \text{Var} [w(X_1)h(X_1)] + 2 \sum_{j=2}^{\infty} \text{Cov} [w(X_1)h(X_1), w(X_j)h(X_j)] \quad (\text{B.13})$$

$$\sigma_{X'}^2 = \text{Var} [\xi_1 h(X_1)] + 2 \sum_{j=2}^{\infty} \text{Cov} [\xi_1 h(X_1), \xi_j h(X_j)] \quad (\text{B.14})$$

$$\sigma_Y^2 = \text{Var} [w(X_1)] + 2 \sum_{j=2}^{\infty} \text{Cov} [w(X_1), w(X_j)] \quad (\text{B.15})$$

$$\sigma_{Y'}^2 = \text{Var} [\xi_1] + 2 \sum_{j=2}^{\infty} \text{Cov} [\xi_1, \xi_j] \quad (\text{B.16})$$

όπου

$$\begin{aligned} \text{Cov} [\xi_1 h(X_1), \xi_j h(X_j)] &= \text{E} [\xi_1 h(X_1) \xi_j h(X_j)] - \text{E} [\xi_1 h(X_1)] \text{E} [\xi_j h(X_j)] \\ &= \text{E} \{ \text{E} [\xi_1 h(X_1) \xi_j h(X_j) | X_1, X_j] \} - \\ &\quad \text{E} \{ \text{E} [\xi_1 h(X_1) | X_1] \text{E} \{ \text{E} [\xi_j h(X_j) | X_j] \} \} \\ &= \kappa^2 \left\{ \text{E} [w(X_1)h(X_1)w(X_j)h(X_j)] - \right. \\ &\quad \left. \text{E}_\pi [h(X_1)] \text{E}_\pi [h(X_j)] \right\} \\ &= \kappa^2 \text{Cov} [w(X_1)h(X_1), w(X_j)h(X_j)]. \end{aligned} \quad (\text{B.17})$$

Αντίστοιχα έχουμε

$$\text{Cov} [\xi_1, \xi_j] = \kappa^2 \text{Cov} [w(X_1), w(X_j)]. \quad (\text{B.18})$$

Επομένως και στην περίπτωση των αλυσίδων Markov η σχέση που συνδέει τη διασπορά του IS εκτιμητή με τον γενικό εκτιμητή λόγου είναι

$$\sigma^2 = \sigma_{IS}^2 + \frac{1}{\kappa^2} \text{E}_g \{ \text{Var} [\xi_i h(X_i) | X_i] (h(X_i) - \text{E}_\pi [h(X_i)])^2 \}.$$

Λήμμα B.1. Ισχύει

$$\text{E}_g \{ \xi_i h(X_i) \xi_j f(X_j) \} = \begin{cases} \kappa^2 \text{E}_g \{ w(X_i)^2 h(X_i) f(X_j) \} + \text{E}_g \{ \text{Var}(\xi_i | X_i) h(X_i) f(X_i) \}, & i = j, \\ \kappa^2 \text{E}_g \{ w(X_i) h(X_i) w(X_j) f(X_j) \}, & i \neq j. \end{cases}$$

Απόδειξη. Δεσμεύοντας στα X_i, X_j παίρνουμε

$$\begin{aligned} \text{E}_g \{ \xi_i h(X_i) \xi_j f(X_j) \} &= \text{E} [\text{E} \{ \xi_i h(X_i) \xi_j f(X_j) \} | X_i, X_j] \\ &= \text{E} [h(X_i) f(X_j) \text{E} (\xi_i \xi_j | X_i, X_j)]. \end{aligned}$$

Επομένως, για $i \neq j$,

$$\begin{aligned} E_g \{ \xi_i h(X_i) \xi_j f(X_j) \} &= E_g [h(X_i) f(X_j) E(\xi_i \xi_j | X_i, X_j)] \\ &= E_g [h(X_i) f(X_j) E(\xi_i | X_i) E(\xi_j | X_j)] \\ &= E_g [h(X_i) f(X_j) \kappa w(X_i) \kappa w(X_j)] \\ &= \kappa^2 E_g [h(X_i) f(X_j) w(X_i) w(X_j)] \end{aligned}$$

ενώ για $i = j$,

$$\begin{aligned} E_g \{ \xi_i^2 h(X_i) f(X_i) \} &= E_g [h(X_i) f(X_i) E(\xi_i^2 | X_i)] \\ &= E_g \left[h(X_i) f(X_i) \left\{ \text{Var}(\xi_i | X_i) + (E(\xi_i | X_i))^2 \right\} \right] \\ &= E_g [h(X_i) f(X_i) \text{Var}(\xi_i | X_i)] + E_g [h(X_i) f(X_i) \kappa^2 w^2(X_i)] \\ &= E_g [h(X_i) f(X_i) \text{Var}(\xi_i | X_i)] + \kappa^2 E_g [h(X_i) f(X_i) w^2(X_i)]. \end{aligned}$$

□

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΠΕΡΡΑΙΑ

Βιβλιογραφία

- [1] J.H. Ahrens and U. Dieter, "Sampling from Binomial and Poisson distributions: A method with bounded computation times", *Computing*, vol. 25, 193-208, 1980.
- [2] M. Bédard, "Efficient sampling using Metropolis algorithms: Applications of optimal scaling results", *Journal of Computational and Graphical Statistics*, vol. 17, 312-332, 2008.
- [3] M. Bédard, "Optimal acceptance rates for Metropolis algorithms: Moving beyond 0.234", *Stochastic Processes and their Applications*, vol. 118, 2198-2222, 2008.
- [4] B.A. Berg, "Markov Chain Monte Carlo Simulations and Their Statistical Analysis", World Scientific Publishing, 2004.
- [5] C. Berzuini, N.G. Best, W.R. Gilks, and C. Larizza, "Dynamical conditional independence models and Markov chain Monte Carlo", *Journal of the American Statistical Association*, vol. 92, 590-599, 1997.
- [6] J. Besag, "Spatial interaction and the statistical analysis of lattice systems (with discussion)", *Journal of the Royal Statistical Society, Series B*, vol. 36, 192-236, 1974.
- [7] J. Besag, "On the statistical analysis of dirty pictures", *Journal of the Royal Statistical Society, Series B*, vol. 48, 259-279, 1986.
- [8] J. Besag and P. Clifford, "Generalized Monte Carlo significance tests", *Biometrika*, vol. 76, 633-642, 1989.
- [9] J. Besag and P.J. Green, "Spatial statistics and Bayesian computation", *Journal of the Royal Statistical Society, Series B*, vol. 55, 25-37, 1993.
- [10] J. Besag, P.J. Green, D. Higdon, and K. Mengersen, "Bayesian computation and stochastic systems", *Statistical Science*, vol. 10, 3-66, 1995.
- [11] L. Breyer and G.O. Roberts, "From metropolis to diffusions: Gibbs states and optimal scaling", *Stochastic Processes and their Applications*, vol. 90, 181-206, 2000.

- [12] A.E. Brockwell and J.B. Kadane, "Identification of regeneration times in MCMC simulation, with application to adaptive schemes", *Journal of Computational and Graphical Statistics*, vol. 14, 436-458, 2005.
- [13] M.B. Brown and J. Bromberg, "An efficient two-stage algorithm procedure for generating random variates from the multinomial distribution", *The American Statistician*, vol. 38, 216-219, 1984.
- [14] O. Cappé, A. Guillin, J.M. Martin, and C.P. Robert, "Population Monte Carlo", *Journal of Computational and Graphical Statistics*, vol. 13, 907-929, 2004.
- [15] O. Cappé, C.P. Robert, and T. Rydén, "Reversible jump, birth-and-death and more general continuous time Markov chain Monte Carlo samplers", *Journal of the Royal Statistical Society, Series B*, vol. 65, 679-700, 2003.
- [16] B.P. Carlin and A.E. Gelfand, "An iterative Monte Carlo method for nonconjugate Bayesian analysis", *Statistics & Computing*, vol. 5, 119-128, 1991.
- [17] K.S. Chan and C.J. Geyer, "Comment on "Markov chains for exploring posterior distributions",", *The Annals of Statistics*, vol. 22, 1747-1758, 1994.
- [18] M. Chen, Q. Shao, and J.G. Ibrahim, "Monte Carlo Methods in Bayesian Computation", Springer-Verlag, 2000.
- [19] N. Chopin, "A sequential particle filter method for static models", *Biometrika*, vol. 89, 539-552, 2002.
- [20] S.R. Dalal, E.B. Fowlkes, and B. Hoadley, "Risk analysis of the space shuttle", *Journal of the American Statistical Association*, vol. 84, 945-957, 1989.
- [21] C.S. Davis, "The computer generation of the multinomial random variates", *Computational Statistics & Data Analysis*, vol. 16, 205-217, 1993.
- [22] L. Devroye, "Non-uniform random variate generation", Springer-Verlag, New York, 1st ed., 1986.
- [23] J. Dongarra and F. Sullivan, "The top 10 algorithms", *Computing in Science and Engineering*, vol. 6, 22-23, 2000.
- [24] W. Feller, "An introduction to probability theory and its applications, volume 1", John Wiley, New York, 1970.
- [25] W. Feller, "An introduction to probability theory and its applications, volume 2", John Wiley, New York, 1971.

- [26] J.C. Fu and L. Wang, “A random–discretization based Monte Carlo sampling method with its applications”, *Methodology and Computing in Applied Probability*, vol. 4, 5–25, 2002.
- [27] D. Gamerman and H.F. Lopes, “Markov Chain Monte Carlo: Stochastic Simulation for Bayesian”, Chapman & Hall, 2006.
- [28] A.E. Gelfand and A.F.M. Smith, “Sampling based approaches to calculating marginal densities”, *Journal of the American Statistical Association*, vol. 85, 398–409, 1990.
- [29] A. Gelman, J.B. Carlin, H.S. Stern, and D.B. Rubin, “Bayesian data analysis”, Chapman & Hall, London, 1995.
- [30] S. Geman and D. Geman, “Stochastic relaxation, Gibbs distributions and the Bayesian restoration of images”, *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, vol. 6, 721–741, 1984.
- [31] C.J. Geyer, “Practical Markov chain Monte Carlo”, *Statistical Science*, vol. 7, 473–483, 1992.
- [32] W.R. Gilks and C. Berzuini, “Following a moving target Monte Carlo inference for dynamic Bayesian models”, *Journal of the Royal Statistical Society, Series B*, vol. 63, 127–146, 2001.
- [33] W.R. Gilks, S. Richardson, and D.J. Spiegelhalter, “Markov chain Monte Carlo in practice”, Chapman and Hall, 1st ed., 1996.
- [34] W.R. Gilks, G.O. Roberts, and S.K. Sahu, “Adaptive Markov chain Monte Carlo through regeneration”, *Journal of the American Statistical Association*, vol. 93, 1045–1054, 1998.
- [35] J. Gåsemyr, “On an adaptive version of the Metropolis–Hastings algorithm with independent proposal distribution”, *Scandinavian Journal of Statistics*, vol. 30, 159–173, 2002.
- [36] J.M. Hammersley and D.C. Handscomb, “Monte Carlo methods”, Chapman and Hall, 1964.
- [37] T.E. Harris, “The existence of stationary measures for certain Markov processes”, In the proceedings of the Third Berkeley Symposium on Mathematical Statistics and Probability, University of California Press, Berkeley and Los Angeles, 113–124, 1956.
- [38] W.K. Hastings, “Monte Carlo sampling methods using Markov chains and their applications”, *Biometrika*, vol. 57, 97–109, 1970.
- [39] D.B. Hitchcock, “A history of the Metropolis–Hastings algorithm”, *The American Statistician*, vol. 57, 254–257, 2003.

- [40] J.P. Hobert, G.L. Jones, B. Presnell, and J.S. Rosenthal, “On the applicability of regenerative simulation in Markov chain Monte Carlo”, *Biometrika*, vol. 89, 731–743, 2002.
- [41] K. Imai and D.A. Van Dyk, “A Bayesian analysis of the multinomial probit model using marginal data augmentation”, *Journal of Econometrics*, vol. 124, 311–334, 2005.
- [42] J. Janssen and N. Limnios, “Semi-Markov models and applications”, Kluwer Academic Publishers, 1999.
- [43] J. Janssen and M. Raimondo, “Applied Semi-Markov processes”, Springer, 2006.
- [44] N.L. Johnson, S. Kotz, and N. Balakrishnan, “Discrete multivariate distributions”, John Wiley & Sons, 1st ed., 1996.
- [45] V. Kachitvichyanukul, “Computer generation of Poisson, binomial and hypergeometric random variates”, Ph.D. dissertation, Purdue University, 1st ed., 1982.
- [46] R. Kass, “Review of Markov chain Monte Carlo in practice by W.R. Gilks, S. Richardson and D.J. Spiegelhalter”, *Journal of the American Statistical Association*, vol. 92, 1645–1646, 1997.
- [47] A.W. Kemp, “A modal method for generating binomial variables”, *Communications in Statistics - Theory and Methods*, vol. 15, 805–813, 1986.
- [48] A.V. Kozlov and D. Koller, “Nonuniform dynamic discretization in hybrid networks”, In the proceedings of the *Thirteenth Conference on Uncertainty in Artificial Intelligence*, 314–325, 1997.
- [49] P. Lévy, “Systèmes semi-markoviens à au plus une infinité décombrable d'états possibles”, *Proc. Int. Congr. Math. Amsterdam*, vol. 2, 294, 1954.
- [50] F. Liang, C. Liu, and R.J. Carroll, “Stochastic approximation in Monte Carlo computation”, *Journal of the American Statistical Association*, vol. 102, 293–305, 2007.
- [51] N. Limnios and G. Oprişan, “Semi-Markov Processes and Reliability”, Birkhäuser, Boston, 2001.
- [52] J.S. Liu, “Metropolized independent sampling with comparisons to rejection sampling and importance sampling”, *Statistics and Computing*, vol. 6, 113–119, 1996.
- [53] J.S. Liu, “Monte Carlo strategies in scientific computing”, Springer, New York, 2001.

- [54] S. Malefaki and G. Iliopoulos, "Simulating from a multinomial distribution with large number of categories", *Computational Statistics & Data Analysis*, vol. 51, 5471–5476, 2007.
- [55] S. Malefaki and G. Iliopoulos, "On convergence of properly weighted samples to the target distribution", *Journal of Statistical Planning and Inference*, vol. 138, 1210–1225, 2008.
- [56] S. Malefaki and G. Iliopoulos, "Simulation from a target distribution based on discretization and weighting", (*submitted for publication*), 2008.
- [57] A.W. Marshall, "The use of multi-stage sampling schemes in Monte Carlo computations", In *Symposium on Monte Carlo methods*, edited by M. Meyer, Wiley, New York, 123–140, 1956.
- [58] M.K. McAllister and J.N. Ianelli, "Bayesian stock assessment using catch-age data and the sampling: importance resampling algorithm", *Canadian Journal of Fisheries and Aquatic Sciences*, vol. 54, 284–300, 1997.
- [59] R. McCulloch and P.E. Rossi, "An exact likelihood of the multinomial probit model", *Journal of Econometrics*, vol. 64, 207–240, 1994.
- [60] D McDonald, "On Semi-Markov and Semiregenerative processes II", *The Annals of Probability*, vol. 6, 995–1014, 1978.
- [61] K.L. Mengersen and R.L. Tweedie, "Rates of convergence of the Hastings and Metropolis algorithms", *The Annals of Statistics*, vol. 24, 101–121, 1996.
- [62] N. Metropolis, A.W. Rosenbluth, M.N. Rosenbluth, A.H. Teller, and E. Teller, "Equations of state calculations by fast computing machines", *Journal of Chemical Physics*, vol. 21, 1087–1092, 1953.
- [63] S.P. Meyn and R.L. Tweedie, "Markov chains and stochastic stability", Springer Verlag, New York, 1993.
- [64] P. Mykland, L. Tierney, B. Yu, "Regeneration in Markov Chain Samplers", *Journal of the American Statistical Association*, vol. 90, 233–246, 1995.
- [65] M. Neil, M. Tailor, and D. Marquez, "Inference in hybrid Bayesian networks using dynamic discretization", *Statistics and Computing*, vol. 17, 219–233, 2007.
- [66] P. Neal and G.O. Roberts, "Optimal scaling for partially updating MCMC algorithms", *The Annals of Applied Probability*, vol. 16, 475–515, 2006.
- [67] J. Norris, "Markov chains", Cambridge University Press, Cambridge, 1997.
- [68] E. Nummelin, "General irreducible Markov chains and non-negative operators", Cambridge University Press, Cambridge, 1984.

- [69] E. Nummelin, “MC’s for MCMC’ists”, *International Statistical Review*, vol. 70, 309–318, 2002.
- [70] P. Peskun, “Optimum Monte Carlo sampling using Markov chains”, *Biometrika*, vol. 60, 607–612, 1973.
- [71] G. Petris and L. Tardella, “A geometric approach to transdimensional Markov chain Monte Carlo”, *The Canadian Journal of Statistics*, vol. 31, 469–482, 2003.
- [72] J.G Propp and D.B. Wilson, “Exact sampling with coupled Markov chains and applications to statistical mechanics”, *Random Structures and Algorithms*, vol. 9, 223–252, 1996.
- [73] W. Qian and D. Titterington, “Parameter estimation for hidden Gibbs chains”, *Statistics and Probability Letters*, vol. 10, 49–58, 1990.
- [74] D. Ratkowsky, “Nonlinear regression modeling”, Marcel Dekker, New York, 1983.
- [75] D. Revuz, “Markov chains”, Amsterdam, North-Holland, 1975.
- [76] C.P. Robert and G. Casella, “Monte Carlo statistical methods”, Springer Verlag, New York, 1st ed., 1999.
- [77] C.P. Robert and G. Casella, “Monte Carlo statistical methods”, Springer Verlag, New York, 2nd ed., 2004.
- [78] G.O. Roberts, A. Gelman, and W.R. Gilks, “Weak convergence and optimal scaling of random walk Metropolis algorithms”, *The Annals of Applied Probability*, vol. 7, 110–120, 1997.
- [79] G.O. Roberts and R.L. Tweedie, “Geometric convergence and central limit theorems for multidimensional Hastings and Metropolis algorithms”, *Biometrika*, vol. 83, 95–110, 1996.
- [80] G.O. Roberts and J.S. Rosenthal, “Optimal scaling for various Metropolis-Hastings algorithms”, *Statistical Science*, vol. 16, 351–367, 2001.
- [81] J.S. Rosenthal, “On variance conditions for Markov Chain CLTs”, *Electronic Communications in Probability*, vol. 12, 454–464, 2007.
- [82] D.B. Rubin, “The calculation of posterior distribution by Data Augmentation: A Noniterative Sampling/Importance Resampling alternative to the Data Augmentation algorithm for greating a few imputations when fractions of missing information are modest: The SIR algorithm”, *Journal of the American Statistical Association*, vol. 82, 543–546, 1987.

- [83] D.B. Rubin, "Using the SIR algorithm to simulate posterior distributions", In *Bayesian Statistics 3*, edited by J. Bernardo, M. DeGroot, D. Lindley, and A. Smith, Oxford University Press Inc., Oxford, 1988.
- [84] R.Y. Rubinstein, "Simulation and the Monte Carlo Method", Wiley-Interscience, 2007.
- [85] S.K. Sahu and A.A. Zhigljavsky, "Self-regenerative Markov Chain Monte Carlo with adaptation", *Bernoulli*, vol. 9, 395-422, 2003.
- [86] R. Sainudiin and Th. York, "An auto-validating rejection sampler", *BSCB Dept. Technical Report BU-1661-M, arXiv/math.ST/0611479*, 2005.
- [87] A.F.M. Smith and A.E. Gelfand, "Bayesian Statistics without tears: A Sampling-Resampling Perspective", *The American Statistician*, vol. 46, 84-88, 1992.
- [88] W.L. Smith, "Regenerative stochastic processes", *Proc. Int. Congr. Math. Amsterdam*, vol. 2, 304-305, 1954.
- [89] X. Song, S. Lee, M.C.Y. Ng, W. So, and J.C.N. Chan, "Bayesian analysis of structural equation models with multinomial variables and an application to type 2 diabetic nephropathy." *Statistics in Medicine*, vol. 26, 2348-2369, 2007.
- [90] M. Stephens, "Bayesian analysis of mixture models with an unknown number of components - an alternative to reversible jump methods", *Annals of Statistics*, vol. 28, 40-74, 2000.
- [91] L. Takáos, "Some investigations concerning recurrent stochastic processes of a certain type", *Magyar Tud. Akad. Mat. Kutató Int. Közl.*, vol. 3, 115-128, 1954.
- [92] Z. Tan, "Monte Carlo integration with acceptance-rejection", *Journal of Computational and Graphical Statistics*, vol. 15, 735-752, 2006.
- [93] M. Tanner and W. Wong, "The calculation of posterior distributions by data augmentation", *Journal of the American Statistical Association*, vol. 82, 528-550, 1987.
- [94] J. Teugels, "A bibliography on semi-Markov processes", *Journal of Computational and Applied Mathematics*, vol. 2, 528-550, 1976.
- [95] L. Tierney, "Markov chains for exploring posterior distributions", *The Annals of Statistics*, vol. 22, 1701-1728, 1994.
- [96] L. Tierney, "Markov chains for exploring posterior distributions", *The Annals of Statistics*, vol. 22, 1701-1728, 1994.

- [97] J.von Neumann, “Various techniques used in connection with random digits. Monte Carlo methods”, *National Bureau of Standards Applied Mathematics Series*, vol. 12, 36-38, 1951.
- [98] A.J. Walker, “An efficient method for generating discrete random variables with general distributions”, *ACM Transactions on Mathematical Software*, vol. 3, 253-256, 1977.