Dr. Katharina Best
Sommersemester 2011
16. Juni 2011

ulm university universität uulm

Reader – Teil 9: Markov Ketten und MCMC

WiMa-Praktikum

Wir betrachten Markovketten mit dem endlichen Zustandsraum E, die *schön* sind, das heißt sie sind irreduzibel und aperiodisch, so dass sie eine stationäre Verteilung π besitzt. Markovketten dieser Art werden zur Simulation von Folgen von Zufallsvariablen mit einer gewünschten Verteilung verwendet. Diese Verteilung entspricht der stationären Verteilung der Markovkette.

1 Metropolis-Hastings-Algorithmus

Sei $(X_n)_{n\geq 0}$ eine Markovkette, die irreduzibel und aperiodisch ist, sei E der Zustandsraum und $P = (p_{xy})_{x,y\in E}$ die Übergangsmatrix, für die gilt, dass $p_{xy} > 0$ genau dann ist wenn $p_{yx} > 0$ ist. Diese wird zu einer Kette mit der stationären Verteilung π verändert.

Die Veränderung geht wie folgt von statten: Ist der Zustand der Kette zu einem Zeitpunkt n gerade x, so

- wird ein y gemäß der Verteilung $(p_{x\bullet})$ bestimmt.
- Anschließend wird das Akzeptanzverhältnis

$$A(x,y) = \frac{\pi(y)P_{yx}}{\pi(x)P_{xy}} \tag{1}$$

  berechnet.

  - Falls $A(x,y) \geq 1$ ist, setze $X_{n+1} = y$.
  - Falls $A(x,y) < 1$ ist, nehme ein $U \sim \mathcal{U}(0,1)$ und wenn
    - $A(x,y) \geq U$ ist, setze $X_{n+1} = y$,
    - sonst bei $A(x,y) < U$ setze $X_{n+1} = x$.

Damit verändert sich die Übergangsmatrix zu

$$p_{xy} \mapsto \begin{cases} p_{xy} & \text{falls } A(x,y) \geq 1 \text{ und } y \neq x, \\ p_{xy} A(x,y) & \text{falls } A(x,y) < 1, \\ p_{xy} + \sum\limits_{z:A(x,z)<1} p_{xz}(1 - A(x,z)) & \text{falls } y = x. \end{cases} \tag{2}$$

Die neue Markovkette, sagen wir (Y_n) mit der Übergangsmatrix $M = (m_{xy})_{x,y \in E}$ ist irreduzibel, aperiodisch und es gilt das detaillierte Gleichgewicht, d.h.

$$\pi(x) m_{xy} = \pi(y) m_{yx}, \tag{3}$$

und sie besitzt die stationäre Verteilung π.

Lassen wir den Algorithmus laufen, so unterscheiden wir zwei Phasen. Die erste Phase beschreibt das *Einbrennen* der Markovkette bis wir zur Zeit N bei der Kette $(Y_n)n \geq N$ ankommen. Ab da nehmen wir alle Folgenglieder, denn $Y_N, Y_{N+1}, \ldots$ sind dann gerade so bestimmt, dass ihre Verteilung π ist. In der Praxis ist es nicht immer einfach N anzugeben. An dieser Stelle wird die Gesamtabeweichung der Maße berechnet.

Die Frage, die sich noch stellt, ist die Bestimmung der benötigten Zufallszahlen. Dazu verwenden wir verschiedene Algorithmen, der wichtigste sei hier vorgestellt.

2 Linearer Kongruenzgenerator

Folgen von Zahlen, welche zufällig *aussehen*, erhalten wir, indem bei den festen Parametern Modul $m \in \{2, 3, \ldots\}$, Faktor $a \in \{1, \ldots, m-1\}$, Inkrement $c \in \{1, \ldots, m-1\}$ und Startwert $y_1 \in \{0, \ldots, m-1\}$ die Folge

$$y_i \equiv a y_{i-1} + b \pmod{m} \tag{4}$$

mit Werten in $\{0, \ldots, m-1\}$ berechnet wird. Die Güte der *Pseudo-Zufallszahlen* ist natürlich durch die Wahl der Parameter gegeben. Eine Folge gilt dann als gut, wenn sie möglichst zufallig erscheint, in anderen Worten aperiodisch ist, den ganzen Bereich $\{0, \ldots, m-1\}$ abdeckt und keine Konzentrationen aufweist. In diesem Fall haben wir mit

$$u_i = \frac{y_i}{m} \tag{5}$$

Pseudo-Zufallszahlen in $[0, 1)$.

Die maximale Periodenlänge ist m und wird dann erreicht, wenn $\mathrm{ggT}(c, m) = 1$ und für jeder Primfaktor b von m auch $b | a-1$ gilt. Ist m so, dass $4 | m$, so muss auch $4 | a-1$ gelten. Unter diesen Bedingungen, durchläuft der Generator alle Zahlen aus $\{0, \ldots, m-1\}$ einmal, bevor er wieder neu beginnt.