서울대학교 통계학과 **이재용 교수**

10강

베이지안 통계학

메트로폴리스 -헤이트팅스 알고리듬

한국방송통신대학교
Korea National Open University

목차

한국방송통신대학교
Korea National Open University

01 메트로폴리스-헤이스팅스 알고리듬

메트로폴리스-헤이스팅스 알고리듬의 유도

◻ 목표

주어진 목표 분포 $\pi(x)$를 정상분포(stationary distribution)으로 갖는 마르코프체인의 커널 $K(x,dy)$를 구하고자 한다.

◻ 상세평행조건(Detailed balance condition)

상세평행조건

$$\pi(dx)K(x,dy)=\pi(dy)K(y,dx),\ \forall x,y\in S$$

을 만족하면 π 가 커널 K(x, dy)의 정상분포가 된다.

문제

$q(x,y)$가 주어진 임의의 커널이라고 하자. $q(x,y)$로부터 상세평형조건을 만족하는 커널 $K(x,y)$를 구할 수 있나?

메트로폴리스-헤이스팅스 알고리듬의 유도

- $\pi(x)q(x,y) > \pi(y)q(y,x)$이라고 가정하자. $\alpha(x,y)=\frac{\pi(y)q(y,x)}{\pi(x)q(x,y)}$라고 하면,
$$\pi(x)q(x,y)\alpha(x,y)=\pi(y)q(y,x)$$
가 만족한다.
- 위의 식을 이용해서 커널을 구할 수 있다.
상세평형조건이 성립하지 않게 하는 확률만큼 자기 자신으로 되돌린다.
- 메트로폴리스-헤이스팅스(Metropolis-Hastings) 커널은
$$K(x,dy)=\alpha(x,y)q(x,y)dy+(1-\alpha(x))\delta_x(dy)$$
와 같이 정의된다. 여기서,
$$\alpha(x,y) = \min\{1, \frac{\pi(y)q(y,x)}{\pi(x)q(x,y)}\}$$
$$\alpha(x) = \int \alpha(x,y)q(x,y)dy.$$
- 위의 식에서 $\pi(x)$는 밀도함수의 상수배이어도 된다.

메트로폴리스-헤이스팅스 알고리듬

단계1 (초기화) $x^{(0)}$를 정한다.

단계2 (메트로폴리스 - 헤이스팅스 반복)

$t=1,2\ldots,\mathrm{m}$에 대해서 다음을 수행한다.

(i) (후보값과 균등확률변수 추출) 서로 독립이 되도록 x, u를 추출한다.

$$x \sim q(x^{(t-1)}, \cdot),$$
$$u \sim Unif(0.1).$$

(ii) (합격확률의 계산)

$$\alpha(x^{(t-1)}, x) = \min\{1, \frac{\pi(x)q(x,x^{(t-1)})}{\pi(x^{(t-1)})q(x^{(t-1)},x)}\}$$

를 계산한다.

(iii) $x^{(t)}$값의 결정 $x^{(t)} = \begin{pmatrix} x, & if\ u \le \alpha(x^{(t-1)}, x) \\ x^{(t-1)}, & if\ u > \alpha(x^{(t-1)}, x) \end{pmatrix}$

* 정리

메트로폴리스-헤이스팅스 알고리듬은 상세평형조건을 만족한다. 즉,

$$\pi(x)dxK(x,dy)=\pi(y)dyK(y,dx), \forall x,y \in S.$$

메트로폴리스-알고리듬의 예

□ 임의보행 메트로폴리스-헤이스팅스(random-walk MH)

0에 대해 대칭인 분포 g에 대해, 제안 커널이 $q\,(x^{(t-1)},\cdot) = g(\cdot - x^{(t-1)})$의 형태를 가지면, 이를 통해 생성되는 MH커널을 임의보행 메트로폴리스 커널이라고 한다.

* 예) 많이 쓰는 예는 $q\,(x^{(t-1)}, x) = Unif\left(x^{(t-1)} - d, x^{(t-1)} + d\right)$와 $N\left(x^{(t-1)}, d^2\right)$가 있다.
여기서 $d > 0$ 이다.

□ 독립 메트로폴리스-헤이스팅스(independent MH)

어떤 분포 g에 대해, 제안 커널 $q\,(x^{(t-1)},\cdot) = g\,(\cdot)$와 같아서,
체인의 이전 값 $x^{(t-1)}$에 의존하지 않을 때,
이로부터 생성되는 MH 커널을 독립 MH
커널이라고 한다. 이 경우, $g\,(\cdot) \approx \pi\,(\cdot)$인 것이 좋다.

02 실습: 코쉬 모형

문제: 코쉬 모형

$$X_1, \ldots X_n | \mu, \sigma \sim Cauchy(\mu, \sigma),\ \mu \in \mathbb{R},\ \sigma > 0$$

$$\pi(\mu, \sigma)\, d\mu d\sigma = \frac{1}{\sigma} d\mu d\sigma$$

이 모형과 사전분포에 대해서 정규커널을 이용한 임의보행 MH 알고리듬을 구현하시오.

1. 위의 모형에 대해 정규커널을 이용한 임의보행 MH알고리듬을 구성하시오.
2. 위의 알고리듬을 구현하여 사후표본을 구하시오.
3. 수렴진단
   1) θ와 σ의 시계열그림을 그리시오.
   2) θ와 σ의 자기상관계수 그림을 그리시오.
   3) 로그가능도와 로그 사후밀도함의 시계열 그림을 그리시오.
4. θ와 σ의 사후밀도함수 그림을 그리시오.
5. θ와 σ의 요약통계량을 구하시오.

코쉬 모형: 사후분포의 유도

- 코쉬분포의 밀도함수는

$$f(x|\mu,\sigma) \propto \frac{1}{\sigma}\frac{1}{1+\left(\frac{x-\mu}{\sigma}\right)^2}, x \in \mathbb{R}$$

이다.

- 사전분포는 부적절 사전분포이므로, 사후분포가 적절 분포임을 보여야 한다. 여기서는 적절 분포라는 것을 가정하고 시작한다.

- 사후분포

$\pi(\mu, \sigma|x) = \pi_n(\mu, \sigma)$

$$\propto \frac{1}{\sigma}\prod_{i=1}^{n}\frac{1}{\sigma}\frac{1}{1+\left(\frac{x_i-\mu}{\sigma}\right)^2}$$

$$\propto \frac{1}{\sigma^{n+1}}\prod_{i=1}^{n}\frac{1}{1+\left(\frac{x_i-\mu}{\sigma}\right)^2}$$

- 변수의 변환 $\xi = \log\sigma$로 변수를 변환한다.

$$d\xi = \frac{1}{\sigma}d\sigma,\ \sigma = e^{\xi},\ d\sigma = \sigma d\xi = e^{\xi}d\xi$$

임을 이용한다. 사후분포를 π_n으로 표시하자.

$\pi_n(\mu,\sigma)d\mu d\sigma$

$$= \frac{1}{\sigma^{n+1}}\prod_{i=1}^{n}\frac{1}{1+\left(\frac{x_i-\mu}{\sigma}\right)^2}d\mu d\sigma$$

$\sigma = e^{\xi}, d\sigma = e^{\xi}d\xi$로 대치한다.

$$= e^{-(n+1)\xi}\prod_{i=1}^{n}\frac{1}{1+e^{-2\xi}(x_i-\mu)^2}d\mu e^{\xi}d\xi$$

$$= e^{-n\xi}\prod_{i=1}^{n}\frac{1}{1+e^{-2\xi}(x_i-\mu)^2}d\mu d\xi$$

이다. 따라서,

$$\pi_n(\mu,\xi) = e^{-n\xi}\prod_{i=1}^{n}\frac{1}{1+e^{-2\xi}(x_i-\mu)^2}$$

이다. 이를 이용해 사후표본을 추출한다.

코쉬 모형: 임의보행 알고리듬

μ의 추출을 위한 제안커널과 합격확률

$\mu^{(t-1)}$이 주어져 있을 때,μ의 제안커널로 $N(\mu^{(t-1)}, b^2)$, $b>0$을 쓰기로 한다. μ의 합격확률을 계산해보자.

$$\alpha\left(\mu^{(t-1)},\mu\right) = \min\left\{1, \frac{\prod_{i=1}^{n}\frac{1}{1+e^{-2\xi}(x_i-\mu)^2}\ \frac{1}{b\sqrt{2\pi}}e^{-\frac{1}{2b^2}\left(\mu^{(t-1)}-\mu\right)^2}}{\prod_{i=1}^{n}\frac{1}{1+e^{-2\xi}(x_i-\mu^{(t-1)})^2}\ \frac{1}{b\sqrt{2\pi}}e^{-\frac{1}{2b^2}\left(\mu-\mu^{(t-1)}\right)^2}}\right\}$$

$$= \min\left\{1, \prod_{i=1}^{n}\frac{1+e^{-2\xi}(x_i-\mu^{(t-1)})^2}{1+e^{-2\xi}(x_i-\mu)^2}\right\}$$

ξ의 추출을 위한 제안커널과 합격확률

$\xi^{(t-1)}$이 주어져 있을 때, ξ의 제안커널로 $N\left(\xi^{(t-1)}, d^2\right)$, $d>0$을 쓰기로 한다. ξ의 합격확률을 계산해보자.

$$\alpha\left(\xi^{(t-1)},\xi\right) = \min\left\{1, \frac{e^{-n\xi}\prod_{i=1}^{n}\frac{1}{1+e^{-2\xi}(x_i-\mu)^2}}{e^{-n\xi^{(t-1)}},\prod_{i=1}^{n}\frac{1}{1+e^{-2\xi^{(t-1)}}(x_i-\mu)^2}}\right\}$$

$$= \min\left\{1, e^{n(\xi^{(t-1)}}\prod_{i=1}^{n}\frac{1+e^{-2\xi^{(t-1)}}(x_i-\mu)^2}{1+e^{-2\xi}(x_i-\mu)^2}\right\}$$

코쉬 모형: 임의보행 알고리듬

단계 1. (초기화) $\mu^{(0)} = \bar{x}, \xi^{(0)} = \log s$로 정한다.

단계 2. (MH단계) $t=1,2,\ldots,m$에 대해 다음을 수행한다.

(i) ($\mu^{(t)}$의 추출)

1. 아래의 분포에서 μ, U를 추출한다.

$$\mu \sim N(\mu^{(t-1)}, b^2)$$
$$U \sim Unif(0,1)$$

2. $\alpha(\mu^{(t-1)}, \mu)$ 를 계산한다.

3. $U \leq \alpha(\mu^{(t-1)}, \mu)$이면, $\mu^{(t)} = \mu$;
그렇지 않으면, $\mu^{(t)} = \mu^{(t-1)}$로 놓는다.

(ii) ($\xi^{(t)}$의 추출)

1. 아래의 분포에서 ξ, U를 추출한다.

$$\xi \sim N(\xi^{(t-1)}, d^2)$$
$$U \sim Unif(0,1)$$

2. $\alpha(\xi^{(t-1)}, \xi)$를 계산한다.

3. $U \leq \alpha(\xi^{(t-1)}, \xi)$이면, $\xi^{(t)} = \xi$;
그렇지 않으면, $\xi^{(t)} = \xi^{(t-1)}$로 놓는다.

코쉬 모형: 임의보행 알고리듬

자료

```
x = rcauchy(10, location=1, scale = 2)
n=length(x)
```

MH 샘플러의 초기화.

```
m = 5000
mu.jump = 2
xi.jump = 2

po.mu = NULL
po.xi = NULL
mu = median(x)
sig = mad(x)
xi = log(sig)
```

사후표본의 요약

```
library(dplyr)
library(coda)
library(ggmcmc)
post.df %>% as.mcmc %>% summary
post.df %>% as.mcmc %>% ggs %>% ggs_density
post.df %>% as.mcmc %>% ggs %>% ggs_traceplot
post.df %>% as.mcmc %>% ggs %>% ggs_autocorrelation
```

사후표본 추출

```
for(j in 1:m) {
  muc = rnorm(1, mu, mu.jump)
  u = runif(1, 0,1)
  log.accept.mu = sum(log((1+exp(-2*xi)*(x-mu)^2)/(1+exp(-2*xi)*(x-muc)^2)))
  if(u < exp(log.accept.mu)) mu = muc

  xic = rnorm(1, xi, xi.jump)
  u = runif(1, 0, 1)
  log.accept.xi = n*(xi-xic)+sum(log((1+exp(-2*xi)*(x-mu)^2)/(1+exp(-2*xic)*(x-mu)^2)))
  if(u < exp(log.accept.xi)) xi = xic

  po.mu = c(po.mu, mu)
  po.xi = c(po.xi, xi)
}
po.sig = exp(po.xi)

post.df = data.frame(mu = po.mu, sig=po.sig, xi=po.xi)
```

참고문헌

1. Hoff, P. D. (2009). A first course in Bayesian statistical methods의 6장. Springer Science & Business Media.

수고하셨습니다.

감사합니다.