Markov Chain Monte Carlo (MCMC)

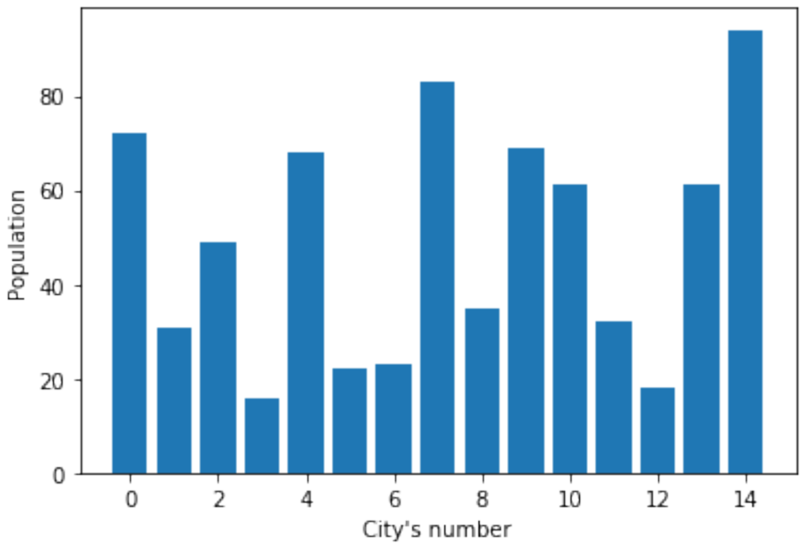
Мотивирующий пример: кандидат в губернаторы объезжает города своего края с целью а
следующего города он случайным образом намечает один из городов, соседних к текущ
городе больше, чем в текущем, кандидат перемещается в намеченный город. В противно
намеченный город с вероятностью, равной отношению числа жителей этого города к чи
текущем еще на один день. Проведя достаточно долгую агитационную кампанию выясн
каждом городе, пропорциональна числу жителей этого города. Убедимся в этом:

Задаем популяцию 15 городов случайными числами от 10 до 100:

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt

cities = np.random.randint(10, 100, 15)

plt.bar(np.arange(len(cities)), cities)
plt.xlabel('City\'s number')
plt.ylabel('Population')
plt.show()
```



Задаем функцию, которая определяет номер следующего города, куда отправляется кан
городе):

```
def step(current, cities):
    direction = np.random.choice([-1, 1])
    target = (current + direction) % len(cities)
    ratio = cities[target] / cities[current]
    return target if np.random.rand() < ratio else current
```

Моделируем перемещения кандитата за период 10000 дней:

```
walk = []
current = 1
for i in range(10000):
    current = step(current, cities)
    walk.append(current)
```

Рисуем гистограмму распределения доли времени, проведенного в каждом городе:

```
plt.hist(walk, bins=np.arange(len(cities) + 1) - 0.5, rwidth=0.8, density=True)
plt.xlabel('City\'s number')
plt.ylabel('Population')
plt.show()
```

Вывод: мы смогли достаточно точно оценить распределение числа жителей по городам, использована как выборка из этого распределения!

Общая идея MCMC:

- построить эргодическую цепь Маркова, для которой стационарное распределение распределение
- инициировать блуждание по цепи Маркова из некоторого начального состояния и , стационарному. С этого момента состояния цепи Маркова можно считать выборко

Алгоритм Metropolis sampling:

- пусть π - заданное распределение (не обязательно нормированное к 1) на множест
- пусть $Q = (q_{i,j})$ - матрица переходных вероятностей произвольной эргодической ц
- выберем произвольное X_0 из Ω
- для текущего X_n смоделируем значение Z_{n+1} из распределения $q_{X_n,\cdot}$.
- смоделируем случайную величину α из распределения Бернулли с вероятностью у

$$p = \min(1, \frac{\pi_i q_{i,j}}{\pi_j q_{j,i}})$$

- если α = 1, то $X_{n+1} = Z_{n+1}$, иначе $X_{n+1} = X_n$.

```
def metroplis(start, value, proposal, niter, nburn=0, **kwargs):
    '''Generic Metropolis scheme.
    Parameters
    ---
    start : misc
        Initial guess.
    value : callable
        Function to calculate density (unnormalized) at given point.
    proposal : callable
        Function to get suggestion on a new point based on a current one.
    niter : int
        Number of iterations.
    nburn : int
        Number of initial samples to be skipped.
    kwargs : dict
        Keywords to be passed in value and proposal.

    Return
    ---
    post : list
        List of samples obtained.
    '''
    current = start
    post = [current]
    for i in range(niter):
        proposed = proposal(current, **kwargs)
        p = value(proposed, **kwargs) / value(current, **kwargs)
        if np.random.rand() < p:
            current = proposed
        post.append(current)
    return post[nburn:]
```

Прложение к предыдущей задаче:

```
value = lambda x: cities[x]
proposal = lambda x: (x + np.random.choice([-1, 1])) % len(cities)
post = metroplis(1, value, proposal, 10000)

plt.hist(post, bins=np.arange(len(cities) + 1) - 0.5, rwidth=0.8, density=True)
plt.xlabel('City\'s number')
plt.ylabel('Population')
plt.show()
```

MCMC в задаче байесовской оценки параметров

Оценка параметров при данном наблюдении X выводится из известной формулы

$$p(\theta \mid X) = \frac{p(X \mid \theta)p(\theta)}{\int p(X \mid \theta)p(\theta)\mathrm{d}\theta}$$

Здесь

- $p(\theta)$ - prior
- $p(X \mid \theta)$ - likelihood
- $p(\theta \mid X)$ - posterior
- $p(X) = \int p(X \mid \theta)p(\theta)\mathrm{d}\theta$ - evidence or marginal likelihood

Разберем простейший пример, в котором оценка выводится аналитически, и сопоставим

Как всегда, подбрасываем монету, θ - неизвестный параметр успеха (выроятность выпа
распределения выберем бета-распределение $Beta(a, b)$. Напомним формулу для плотно

$$p(\theta) = \frac{1}{B(a,b)}\theta^{a-1}(1-\theta)^{b-1}.$$

Функция правдоподобия в нашем случае:

$$p(X \mid \theta) = C_N^X \theta^X (1-\theta)^{N-X}.$$

Нетрудно убедиться, что $p(\theta \mid X) = Beta(X + a, N - X + b)$.

Построим графики априорного, апостериорного распределения и оценку θ по методу ма
(MAP) в предположении, что эксперимент с подбрасывание монеты N=100 раз завершил
график правдоподобия и соответствующую оценку максимального правдоподобия (MLE

```
from scipy import stats

a, b = 10, 10

N = 100
X = 61

prior = stats.beta(a, b)
post = stats.beta(X+a, N-X+b)
likelihood = lambda thetas: stats.binom(N, thetas).pmf(X)

thetas = np.linspace(0, 1, 200)
plt.plot(thetas, prior.pdf(thetas), label='Prior', c='blue')
plt.plot(thetas, post.pdf(thetas), label='Posterior', c='red')
plt.axvline((X + a - 1)/(N + a + b - 2), c='red', linestyle='dashed', alpha=0.4,
plt.plot(thetas, N*likelihood(thetas), label='Likelihood', c='green')
plt.axvline(X/N, c='green', linestyle='dashed', alpha=0.4, label='MLE')
plt.xlabel(r'$\theta$')
plt.ylabel('Density')
plt.legend(loc='upper left')
plt.show()
```

Размерность пространства параметров небольшая, поэтому в качестве численного эксп
распределения, явно перебрав возможные значения θ и вычислив нормировочный инте

```
thetas = np.linspace(0, 1, 200)

post = prior.pdf(thetas) * stats.binom(N, thetas).pmf(X)
post /= (post.sum() / len(thetas))

plt.plot(thetas, prior.pdf(thetas), label='Prior', c='blue')
plt.plot(thetas, N*likelihood(thetas), label='Likelihood', c='green')
plt.plot(thetas, post, label='Posterior numerical', c='red')
plt.xlabel(r'$\theta$')
plt.ylabel('Density')
plt.legend()
plt.show()
```

У нас все получилось, поскольку перебрать возможные значения θ и вычислить интегра
В пространстве параметров большей размерности перебор станет проблемой. На помош

Metropolis sampler

```
def value(theta, **kwargs):
    _ = kwargs
    if theta < 0 or theta > 1:
        return 0
    else:
        return likelihood(theta) * prior.pdf(theta)
```

```
def proposal(current, sigma, **kwargs):
    _ = kwargs
    current = np.asarray(current)
    sigma = np.asarray(sigma)
    return current + sigma * np.random.randn(*current.shape)


sigma = 0.3

post = metroplis(0.2, value, proposal, 3000, sigma=0.1)


plt.hist(post, bins=50, density=True, label='MCMC posterior')
plt.plot(thetas, stats.beta(X+a, N-X+b).pdf(np.linspace(0, 1, 200)),
         label='True posterior', c='red')
plt.show()
```

Траектория блуждания:

```
plt.plot(post)
plt.show()
```

Выбор ширины шага

```
for sigma in [0.001, 0.01, 0.1, 1]:
    post = metroplis(0.2, value, proposal, 1000, sigma=sigma)
    plt.plot(post, label=sigma)
plt.legend()
plt.show()
```

Вывод: шаг sigma=0.1 (зеленая траектория) оказался удачным выбором.

Выбор начального приближения

```
for start in np.linspace(0.05, 0.95, 5):
    post = metroplis(start, value, proposal, 1000, sigma=0.01)
    plt.plot(post)
plt.show()
```

Вывод: нужно отбрасывать первые nbirn элементов выборки.

Анализ корреляций

```
from statsmodels.tsa import stattools

post = metroplis(0.2, value, proposal, 1000, sigma=0.1)

autocorr = stattools.acf(post[100:], fft=False)

plt.plot(autocorr)
plt.show()
```

Вывод: есть смысл прореживать выборку и брать элементы с шагом, например, 5.

Проверка стационарности

Gewerke test:

Разбиваем выборку на начальный и конечный куски x_s, x_e и вычисляем статистику t-кр

```
def g_test(x, start=0.1, end=0.5):
    return stats.ttest_ind(x[:int(len(x) * start)], x[-int(len(x) * end):], equa
```

Проверим для sigma=0.1:

```
post = metroplis(0.2, value, proposal, 3000, sigma=0.1)
plt.plot(post)
plt.show()

g_test(post[100:])
```

Вывод: гипотезу стацинарности не отвергаем.

Проверим для sigma=0.01:

```
post = metroplis(0.2, value, proposal, 3000, sigma=0.01)
plt.plot(post)
plt.show()

g_test(post)
```

```
g_test(post[1000:])
```

Вывод: стационарность не подтверждается.

Gibbs sampler

Для оценки набора парамеров $\theta = (\theta_1, \theta_2, \ldots, \theta_m)$ используем схему:
$\theta_i^{(t)} \sim p(\theta_i^{(t)} \mid \theta_1 = \theta_1^t, \ldots, \theta_{i-1} = \theta_{i-1}^t, \theta_{i+1} = \theta_{i+1}^{t-1}, \theta_m = \theta_m^{t-1})$.

Пример: подбрасываем две монеты с параметрами θ_1, θ_2 и наблюдаем за числом успех

Зададим правдоподобия для одной монеты и для пары:

```
def bern(theta, z, N):
    """Bernoulli likelihood with N trials and z successes for a single coin."""
    return theta**z * (1 - theta)**(N - z)

def bern2(theta1, theta2, z1, z2, N1, N2):
    """Bernoulli likelihood with N trials and z successes for two coins."""
    return bern(theta1, z1, N1) * bern(theta2, z2, N2)
```

Вспомогательные методы для рисования графиков:

```
def make_plots(X, Y, prior, likelihood, posterior):
    fig, ax = plt.subplots(1, 3, figsize=(12, 3))
    ax[0].contour(X, Y, prior, cmap=plt.cm.jet)
    ax[1].contour(X, Y, likelihood, cmap=plt.cm.jet)
    ax[2].contour(X, Y, posterior, cmap=plt.cm.jet)
    ax[0].set_title('Prior')
    ax[1].set_title('Likelihood')
    ax[2].set_title('Posteior')
    plt.show()

thetas1 = np.linspace(0.05, 0.95, 100)
thetas2 = np.linspace(0.05, 0.95, 100)
X, Y = np.meshgrid(thetas1, thetas2)
```

Аналитические графики априорного распределение, правдоподобия и апостериорного р

```
a = 2
b = 3

z1 = 11
N1 = 14
z2 = 7
N2 = 14

prior = lambda theta1, theta2: stats.beta(a, b).pdf(theta1) * stats.beta(a, b).p
likelihood = lambda theta1, theta2: bern2(theta1, theta2, z1=z1, z2=z2, N1=N1, N
posterior = stats.beta(a + z1, b + N1 - z1).pdf(X) * stats.beta(a + z2, b + N2 -

make_plots(X, Y, prior(X, Y), likelihood(X, Y), posterior)
```

Metropolis scheme:

```
def value(theta, **kwargs):
    _ = kwargs
    theta1, theta2 = theta
    if theta1 < 0 or theta1 > 1:
        return 0
    if theta2 < 0 or theta2 > 1:
        return 0
    return likelihood(theta1, theta2) * prior(theta1, theta2)


def proposal(current, sigma, **kwargs):
    _ = kwargs
    current = np.asarray(current)
    sigma = np.asarray(sigma)
    return current + sigma * np.random.randn(*current.shape)

theta = np.array([0.2, 0.1])
niters = 5000
nburn = 200
sigma = np.diag([0.2, 0.2])

post = metroplis(theta, value, proposal, niter=niters,
                 nburn=0, sigma=np.array([0.1, 0.1]))


kde = stats.gaussian_kde(np.array(post[nburn:]).T)
XY = np.vstack([X.ravel(), Y.ravel()])
posterior_metroplis = kde(XY).reshape(X.shape)

make_plots(X, Y, prior(X, Y), likelihood(X, Y), posterior_metroplis)
```

Траектория блуждания на начальном этапе:

```
plt.plot(*np.array(post[:100]).T)
plt.show()
```

Gibbs scheme:

```
theta = np.array([0.2, 0.1])

post = [theta]
for i in range(niters):
    theta = [stats.beta(a + z1, b + N1 - z1).rvs(), theta[1]]
    theta = [theta[0], stats.beta(a + z2, b + N2 - z2).rvs()]
    post.append(theta)


kde = stats.gaussian_kde(np.array(post[nburn:]).T)
XY = np.vstack([X.ravel(), Y.ravel()])
posterior_gibbs = kde(XY).reshape(X.shape)

make_plots(X, Y, prior(X, Y), likelihood(X, Y), posterior_gibbs)
```

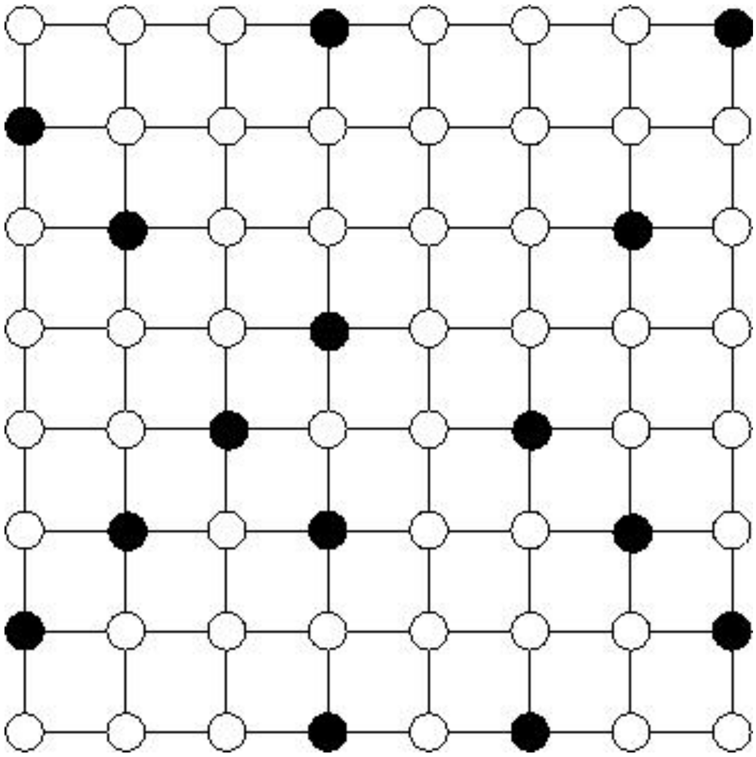
Траектория блуждания на начальном этапе:

```
plt.plot(*np.array(post[:100]).T)
plt.show()
```

Done!

Домашнее задание

Рассмотрим граф $G = (V, E)$, вершинам которого случайным образом приписаны знач могут одновременно иметь значение 1. Пример расстановки значений по вершинам гра вершины имеют значение 1, белые - 0):



Как оценить, сколько в среднем закрашенных вершин будет иметь такой граф?

Сформулируем задачу в математических терминах.

Пусть $\xi \in \{0, 1\}^V$ обозначает конфигурацию графа (расстановку 0 и 1 по вершинам). На
вершины, соединенные ребрами, не имеют одновременно значения 1. Пусть Z_G - общее
Зададим распределение на множестве всех конфигураций:

$$\mu(\xi) = \begin{cases} \frac{1}{Z_G}, & \xi \text{ - допустимая конфигура} \\ 0, & \text{иначе.} \end{cases}$$

Обозначим $n(\xi)$ - число закрашенных вершин в конфигурации ξ. Тогда

$$\mathrm{E}n(\xi) = \sum_{x \in \{0,1\}^V} n(x)\mu(x) = \frac{1}{Z_G} \sum_{x \in \{0,1\}^V} n(x)\mathrm{I}_{\{x-\text{д}}$$

Явно перебирать все $x \in \{0, 1\}^V$ не представляется возможным. Мы могли бы попроб
больших чилел:

$$\mathrm{E}n(\xi) \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} n(\xi), \text{где } \xi \sim \mu$$

Но есть проблема: как смоделировать случайную величину из распределения μ?

В этом нам поможет метод MCMC.

Задание

- Оценить $\mathrm{E}n(\xi)$ с помощью MCMC для графа 8x8
- Обосновать численно и графически стационарность
- Построить график распределеиня $n(\xi)$

Вспомогательная функция для раскраски вершин графа в соответствии с переданной ма

```
import matplotlib.pyplot as plt
import numpy as np

def plot_grid(narr):
    '''Plots 2d lattice with vertices colored in black and red according to give
    Vertice is colored black if narr[i, j] == True and red otherwise.

    Parameters
    ----------
    narr : 2d boolean ndarray
        Mask for vertices colors
    '''

    if narr.dtype != 'bool':
        raise ValueError('narr should be a boolean ndarray')
    colors = np.empty(narr.shape, dtype='U5')
    colors[:] = 'red'
    colors[narr] = 'black'
    x, y = np.indices((narr.shape))
    plt.scatter(x, y, c=colors.ravel())
    plt.show()
```

```
size = 8
narr = np.random.choice([0, 1], size=size**2).reshape((size, size)).astype('bool

plot_grid(narr)
```

Литература

- http://probability.ca/jeff/ftpdir/johannes.pdf
- http://nitro.biosci.arizona.edu/courses/EEB596/handouts/Gibbs.pdf