Hamiltonian MC und STAN

Volker Schmid

12. Juni 2017

Hamiltonsche Mechanik

Stochastische (Radon-Nikodým-)Dichte f entspricht physikalischer (Gibbs-)Energie ϕ:

$$p(x) \propto \exp(-\phi(x))$$

Hamiltonsche Mechanik: Die Bewegung eines Objekts durch einen Raum lässt sich durch Differentialgleichungen mit Ort x (potentielle Energie $U(x)$) und Impuls v (kinetische Energie $K(v)$) beschreiben

$$E(x, v) = U(x) + K(v)$$

Hamiltonian MC (Hybrid MC)

- Benutze Hilfsvariable v
- Zusätzliche zufällige Komponente (ansonsten bleibt $E(x, v)$ konstant): Ziehe zufällig aus der Priori von v (Normalverteilung)

Vorstellung: Bewegung eines Pucks auf der Parameter-Oberfläche, der immer wieder in zufällige Richtungen geschubst wird.

Für MCMC müssen Hamilton-Gleichungen zeitdiskretisiert werden, mit Schrittgröße ϵ (einfach: Euler-Methode, besser: Leapfrog).

Euler/Leapfrog

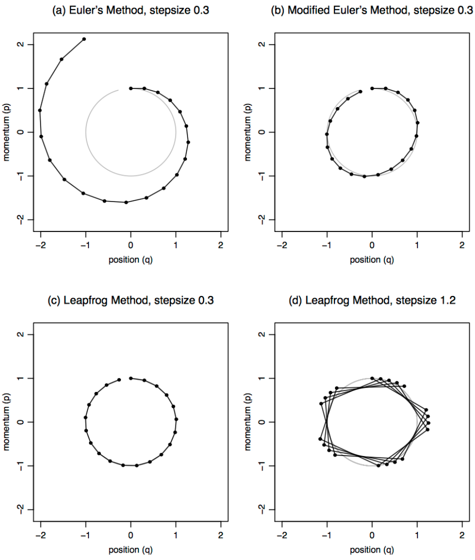


Figure 1: 20 Iterationen Euler vs. Leapfrog

Vor- und Nachteile von HMC

- Funktioniert nur bei differenzierbaren Funktionen
- Einzelne Iteration ist sehr viel aufwendiger als bei M-H oder Gibbs
- I.d.R. geringere Abhängigkeit, großer Abstand zwischen Ziehungen
- Hohe Akzeptanzrate
- Probleme bei isolierten lokalen Minima (bzw. Maxima)
- Tuning ist notwendig (ϵ)

Literatur: Radford M. Neal: MCMC using Hamiltonian dynamics, in: Steve Brooks, Andrew Gelman, Galin Jones, and Xiao-Li Meng. Handbook of Markov Chain Monte Carlo. Chapman & Hall / CRC Press, 2011

STAN (hier: RStan)

```r
#install.packages('rstan')
library(rstan)
rstan_options(auto_write = TRUE)
options(mc.cores = parallel::detectCores())
```

Beispiel Lineare Regression

$$y_i \sim N(x_i'\beta, \sigma^2)$$

$$\beta_j \sim N(0, 1000)$$

$$\sigma^2 \sim \chi^2(2)$$

STAN Modell

```
data {
  int<lower=0> N;
  int<lower=0> M;
  matrix[N, M] x;
  vector[N] y;
}
parameters {
  vector[M] beta;
  real<lower=0> sigma;
}
model {
  y ~ normal(x * beta, sigma);
  for(i in 1:M)
    beta[i] ~ normal(0, 1000);
  sigma ~ chi_square(2);
}
```

STAN Beispiel (1)

```
# Simulate some data
N <- 1000
M <- 3
x <- cbind(rep(1,N), rpois(N,5), runif(N,2,3))
truebeta <- c(-14, 0, 5)
truesigma <- 1
y <- rnorm(N, x%*%truebeta, truesigma)
```

STAN Beispiel (2)

```
stan_data <- list(N=N, M=M, y=y, x=x)
limo <- stan(file = 'limo.stan',
  model_name='LinearesModell', data=stan_data,
  iter=1000, chains=4)
```

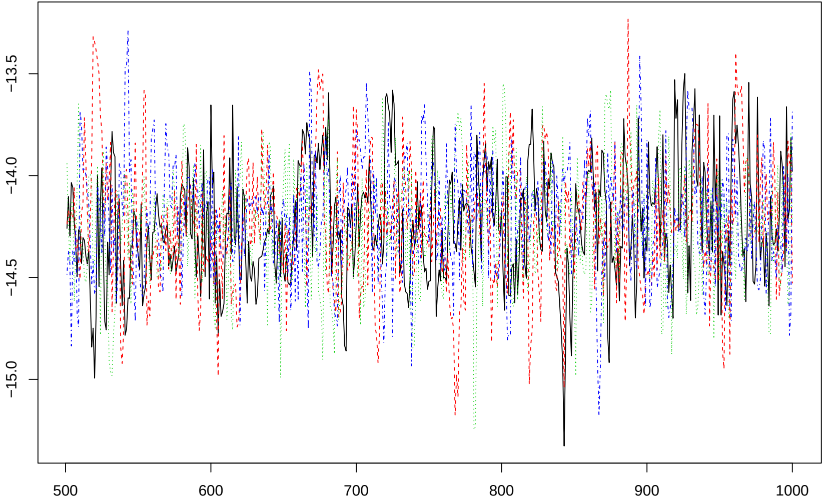
STAN Beispiel Ergebnisse

```r
print(limo)
```

```
## Inference for Stan model: LinearesModell.
## 4 chains, each with iter=1000; warmup=500; thin=1;
## post-warmup draws per chain=500, total post-warmup draws
##
##              mean se_mean   sd    2.5%     25%     50%
## beta[1]   -14.23    0.01 0.29  -14.78  -14.43  -14.24  -1
## beta[2]    -0.01    0.00 0.01   -0.04   -0.02   -0.01
## beta[3]     5.13    0.00 0.11    4.90    5.06    5.13
## sigma       1.00    0.00 0.02    0.96    0.99    1.00
## lp__     -500.24    0.05 1.39 -503.67 -500.88 -499.94 -49
##          Rhat
## beta[1]     1
## beta[2]     1
## beta[3]     1
## sigma       1
## lp__        1
```

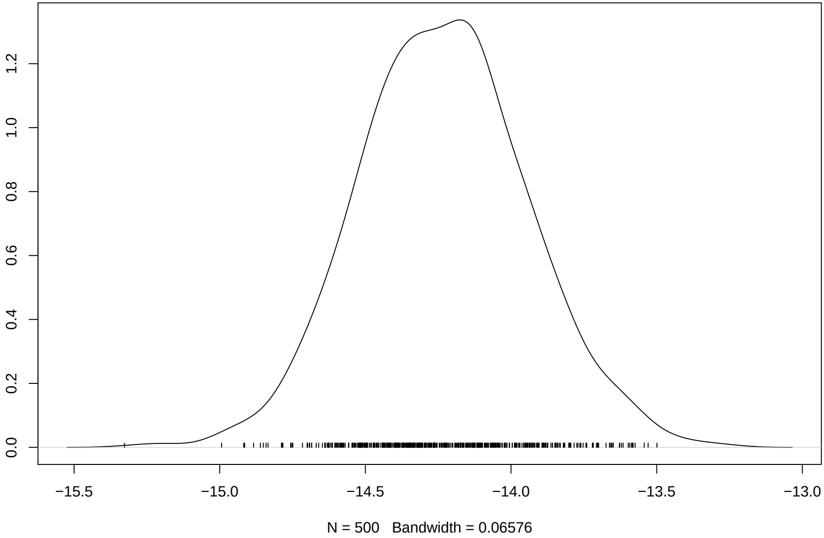
STAN Beispiel Ergebnisse

```
beta<-As.mcmc.list(limo,pars="beta")
beta0<-As.mcmc.list(limo,pars="beta[1]")
coda::traceplot(beta0)
```



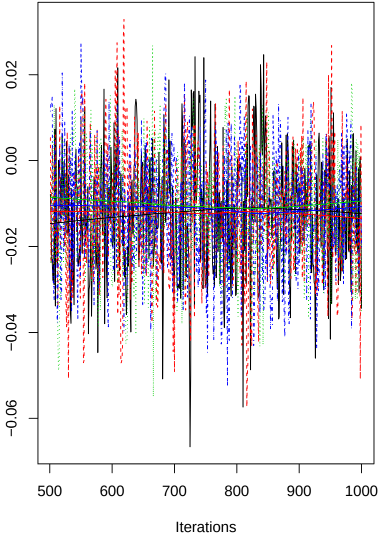
STAN Beispiel Ergebnisse

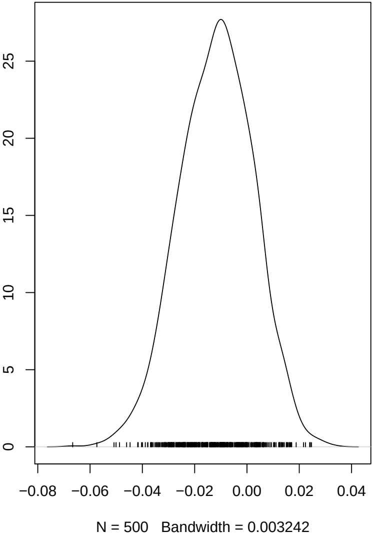
```
coda::densplot(beta0)
```



STAN Beispiel Ergebnisse

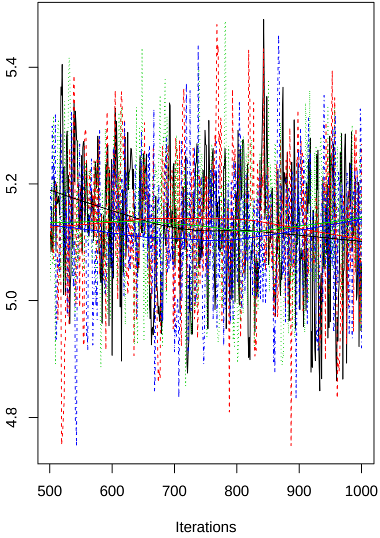
```
beta1<-As.mcmc.list(limo,pars="beta[2]")
plot(beta1)
```

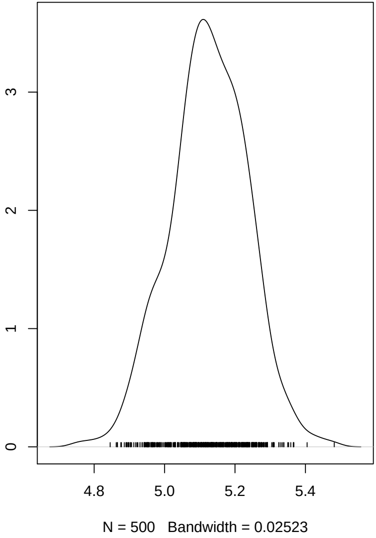




STAN Beispiel Ergebnisse

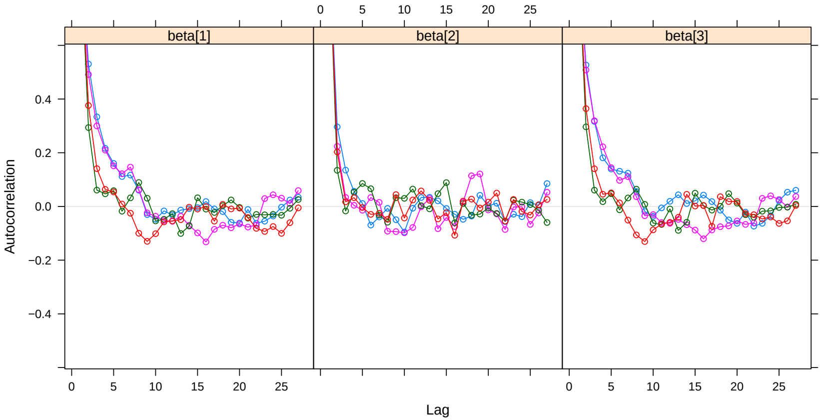
```
beta2<-As.mcmc.list(limo,pars="beta[3]")
plot(beta2)
```





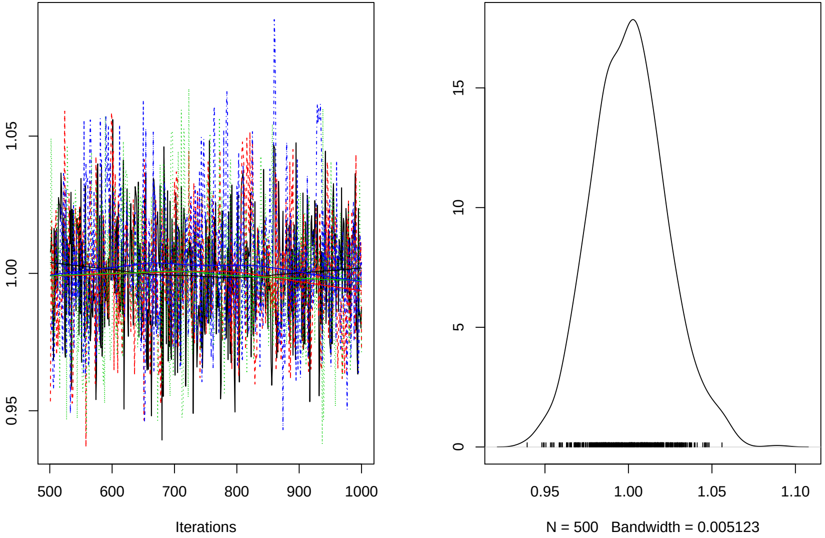
STAN Beispiel Ergebnisse

```r
coda::acfplot(beta)
```



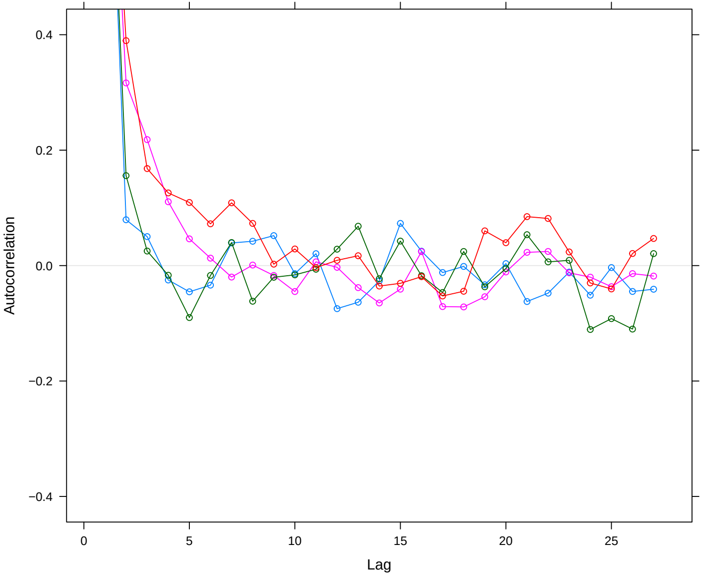
STAN Beispiel Ergebnisse

```
sigma<-As.mcmc.list(limo,pars="sigma")
plot(sigma)
```



STAN Beispiel Ergebnisse

```
coda::acfplot(sigma)
```



STAN Beispiel Ergebnisse

```r
coda::gelman.diag(As.mcmc.list(limo))
```

```
## Potential scale reduction factors:
##
##          Point est. Upper C.I.
## beta[1]        1.00       1.01
## beta[2]        1.00       1.01
## beta[3]        1.00       1.01
## sigma          1.01       1.02
## lp__           1.00       1.01
##
## Multivariate psrf
##
## 1.01
```