

Методы Монте Карло по схеме марковской цепи (Markov Chain Monte Carlo, МСМС)

Идея МСМС

Рассмотрим вероятностное распределение $p(T)$. Методы Монте Карло (методы статистических испытаний) предполагают генерацию выборки из этого распределения:

$$T_1, \dots, T_N \sim p(T).$$

Данная выборка может быть использована для оценки вероятностных интегралов вида

$$\mathbb{E}_T f(T) = \int f(T)p(T)dT \simeq \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N f(T_n). \quad (1)$$

Кроме того, данная выборка может быть использована для оценки моды распределения $p(T)$:

$$\max_T p(T) \simeq \max_n p(T_n),$$

т.к. появление точек выборки наиболее вероятно в областях больших значений плотности.

В методах Монте Карло по схеме марковской цепи (МСМС) вводится некоторая марковская цепь с априорным распределением $p_0(T)$ и вероятностями перехода в момент времени n $q_n(T_{n+1}|T_n)$, а генерация выборки происходит следующим образом:

$$\begin{aligned} T_1 &\sim p_0(T), \\ T_2 &\sim q_1(T_2|T_1), \\ &\vdots \\ T_N &\sim q_{N-1}(T_N|T_{N-1}). \end{aligned} \quad (2)$$

Заметим, что при таком подходе генерируемая выборка не является набором независимых случайных величин. Однако, она подходит для оценки вероятностных интегралов вида (1) или оценки моды распределения. В том случае, если необходимо получить набор независимых величин, достаточно проредить полученный набор T_1, \dots, T_N , взяв каждый m -ый отсчет, где m достаточно велико.

Основной вопрос, раскрываемый в дальнейшем, состоит в том, как выбрать вероятности перехода $q_n(T_{n+1}|T_n)$ таким образом, чтобы выборка, генерируемая по схеме (2), была бы выборкой из интересующего нас распределения $p(T)$.

Теоретические свойства марковских цепей

Марковская цепь называется *однородной*, если вероятность перехода $q_n(T_{n+1}|T_n)$ не зависит от момента времени n , т.е. $q_n(T_{n+1}|T_n) = q(T_{n+1}|T_n)$. В дальнейшем будем рассматривать только однородные марковские цепи. Рассмотрим маргинальное распределение точек выборки в момент времени $n - 1$, генерируемой с помощью однородной марковской цепи, и обозначим его через $p_{n-1}(T_{n-1})$. Тогда маргинальное распределение точек выборки в момент времени n можно вычислить следующим образом:

$$p_n(T_n) = \int q(T_n|T_{n-1})p_{n-1}(T_{n-1})dT_{n-1}.$$

Распределение $\pi(T)$ называется *инвариантным относительно марковской цепи* с вероятностью перехода q , если

$$\pi(T) = \int q(T|S)\pi(S)dS, \quad (3)$$

Очевидно, что для генерации выборки из распределения $p(T)$ по схеме марковской цепи необходимо потребовать, чтобы распределение $p(T)$ было инвариантным относительно этой марковской цепи. Достаточным условием инвариантности распределения $\pi(T)$ является выполнимость *уравнения детального баланса*:

$$\pi(S)q(T|S) = \pi(T)q(S|T).$$

Действительно,

$$\begin{aligned} \int q(T|S)\pi(S)dS &= \{\text{ур-е детального баланса}\} = \int q(S|T)\pi(T)dS = \\ &= \pi(T) \underbrace{\int q(S|T)dS}_{=1} = \pi(T). \end{aligned}$$

Марковская цепь может иметь более одного инвариантного распределения. Пусть $\pi(T)$ – ее инвариантное распределение. Тогда марковская цепь называется *эргодичной*, если

$$\forall p_0(T) \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} \pi(T).$$

Здесь $p_0(T)$ – начальное (априорное) распределение. Очевидно, что эргодичная марковская цепь имеет только одно инвариантное распределение. Достаточным условием эргодичности однородной марковской цепи является следующее свойство:

$$\forall S, \forall T : \pi(T) \neq 0 : q(T|S) > 0.$$

Теперь для генерации выборки из интересующего нас распределения $p(T)$ по схеме (2) достаточно потребовать, чтобы наша марковская цепь был однородной и эргодичной, а распределение $p(T)$ было инвариантным относительно нашей марковской цепи. Тогда, вне зависимости от начального распределения $p_0(T)$, начиная с некоторого момента времени n выборка, генерируемая по схеме (2), будет выборкой из распределения $p(T)$.

Схема Метрополиса-Хастингса

Пусть необходимо сгенерировать выборку из распределения $p(T)$, известного с точностью до нормировочной константы:

$$p(T) = \frac{1}{Z} \tilde{p}(T).$$

Рассмотрим шаг генерации по схеме Метрополиса-Хастингса. Пусть на шаге n сгенерирована конфигурация T_n . Тогда на шаге $n + 1$ сначала генерируется конфигурация T_* из некоторого предложного распределения $r(T|T_n)$. Затем вычисляется величина

$$A(T_*, T_n) = \min \left(1, \frac{\tilde{p}(T_*)r(T_n|T_*)}{\tilde{p}(T_n)r(T_*|T_n)} \right)$$

и точка T_* принимается в качестве следующей точки T_{n+1} с вероятностью $A(T_*, T_n)$. В противном случае, $T_{n+1} = T_n$. Таким образом, мы ввели марковскую цепь с вероятностью перехода

$$q(T_{n+1}|T_n) = \begin{cases} r(T_{n+1}|T_n)A(T_{n+1}, T_n), & \text{если } T_{n+1} \neq T_n, \\ 1 - r(T_{n+1}|T_n)A(T_{n+1}, T_n), & \text{если } T_{n+1} = T_n. \end{cases}$$

Покажем, что распределение $p(T)$ является инвариантным относительно введенной марковской цепочки. Если $T_{n+1} = T_n$, то инвариантность сохраняется, т.к. значение T_n не изменяется. Для случая $T_{n+1} \neq T_n$ проверим выполнимость уравнения детального баланса:

$$p(T_n)q(T|T_n) = \min(p(T_n)r(T|T_n), p(T)r(T_n|T)) = \min(p(T)r(T_n|T), p(T_n)r(T|T_n)) = p(T)q(T_n|T).$$

Для эргодичности введенной марковской цепи достаточно потребовать выполнение $r(T|S) > 0, \forall T, S$.

В том случае, если предложное распределение является симметричным, т.е. $r(T|S) = r(S|T), \forall S, T$, то схема Метрополиса-Хастингса переходит в классическую схему Метрополиса. Согласно этой схеме, если значение плотности в новой точке T_* оказалось выше, чем значение плотности в предыдущей точке T_n , то эта точка гарантированно принимается в качестве следующей точки выборки. Если плотность в новой точке оказалась меньше, то такая точка тоже может быть принята, но с вероятностью, пропорциональной величине уменьшения плотности.

Рассмотрим модельный пример применения схемы Метрополиса (см. рис. 1). Пусть нам необходимо сгенерировать выборку из двумерного нормального распределения с недиагональной матрицей ковариации. Возьмем в качестве предложного распределения двумерное нормальное распределение с матрицей ковариации, пропорциональной единичной: $r(T|S) = \mathcal{N}(T|S, \sigma I)$. Это распределение, очевидно, является симметричным.

Значение параметра σ в значительной степени определяет эффективность процесса генерации выборки. Если значение σ слишком велико, то большинство новых точек будет

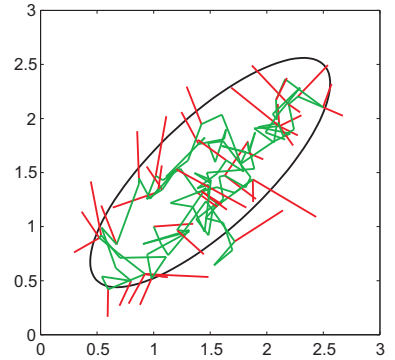


Рис. 1: Иллюстрация генерации выборки из двумерного нормального распределения по схеме Метрополиса. Красные — отвергаемые шаги, зеленые — принимаемые шаги.

отвергаться. Если значение σ слишком мало, то шаги в пространстве будут также маленькими, и понадобится очень много времени, чтобы покрыть область больших значений плотности распределения.

Схема Гиббса

Пусть необходимо сгенерировать выборку из многомерного распределения $p(T)$, где $T = \{t_1, \dots, t_P\}$. Рассмотрим шаг генерации по схеме Гиббса. Пусть на шаге n сгенерирована конфигурация $T^n = \{t_1^n, \dots, t_P^n\}$. Тогда генерация следующей точки выборки T^{n+1} происходит следующим образом:

$$\begin{aligned} t_1^{n+1} &\sim p(t_1|t_2^n, t_3^n, \dots, t_P^n), \\ t_2^{n+1} &\sim p(t_2|t_1^{n+1}, t_3^n, t_4^n, \dots, t_P^n), \\ t_3^{n+1} &\sim p(t_3|t_1^{n+1}, t_2^{n+1}, t_4^n, \dots, t_P^n), \\ &\dots \\ t_P^{n+1} &\sim p(t_P|t_1^{n+1}, t_2^{n+1}, \dots, t_{P-1}^{n+1}). \end{aligned} \quad (4)$$

Здесь через $p(t_i|T_{\setminus i})$ обозначено маргинальное одномерное распределение значений i -ой компоненты при условии всех остальных. Таким образом, согласно схеме Гиббса генерация выборки из многомерного распределения заменяется на итерационную генерацию точек из одномерных распределений. По аналогии с методами одномерной оптимизации генерация выборки из одномерного распределения является существенно более простой задачей, чем генерация выборки из многомерного распределения.

Докажем, что распределение $p(T)$ является инвариантным относительно введенной марковской цепи. Рассмотрим один шаг генерации очередной компоненты $t_p \sim p(t_p|T_{\setminus p})$. По предположению индукции $T_{\setminus p} \sim p(T_{\setminus p})$. Тогда совместная конфигурация $(t_p, T_{\setminus p}) \sim p(t_p|T_{\setminus p})p(T_{\setminus p}) = p(T)$. Отсюда, совместное распределение является инвариантным относительно одного шага процесса генерации (4). Следовательно, оно является инвариантным и относительно всего процесса (4).

При реализации схемы Гиббса на практике часто допускается следующая ошибка: вместо шага

$$t_p^{n+1} \sim p(t_p|t_1^{n+1}, \dots, t_{p-1}^{n+1}, t_{p+1}^n, \dots, t_P^n)$$

делается шаг

$$t_p^{n+1} \sim p(t_p|t_1^n, \dots, t_{p-1}^n, t_{p+1}^n, \dots, t_P^n),$$

т.е. в условие подставляются значения компонент только с предыдущей итерации. При таком подходе вероятность перехода в марковской цепи определяется как

$$q(T|T^n) = \prod_{p=1}^P p(t_p|T_{\setminus p}^n). \quad (5)$$

Распределение $p(T)$ не является инвариантным относительно данной марковской цепи! Эту ситуацию легко исправить, если взять схему Метрополиса-Хастингса, где в качестве предложного распределения фигурирует распределение (5). Заметим, что в отличие от схемы Гиббса, схема Метрополиса-Хастингса с предложным распределением (5) легко распараллеливается и на практике в некоторых ситуациях может работать быстрее, чем схема Гиббса.

Применение схемы Гиббса для дискретной марковской сети

Рассмотрим марковскую сеть с графом-решеткой с K -значными переменными. Распределение вероятности для конфигурации T этой марковской сети может быть записано как

$$p(T) = \frac{1}{Z} \exp \left[- \sum_{p=1}^P h_p(t_p) - \sum_{(i,j) \in \mathcal{E}} f_{ij}(t_i, t_j) \right], \quad t_p \in \{1, \dots, K\}.$$

Здесь Z — нормировочная константа распределения. Для применения схемы Гиббса необходимо уметь генерировать выборку из всех одномерных маргинальных распределений вида $p(t_p | T_{\setminus p}^n)$. Это распределение легко найти по следующей формуле:

$$p(t_p | T_{\setminus p}^n) \propto \exp \left[-h_p(t_p) - \sum_{i:(p,i) \in \mathcal{E}} f_{pi}(t_p, t_i^n) \right].$$

При этом константа данного распределения легко считается путем суммирования K величин. Это распределение является дискретным, и, следовательно, выборку из него легко получить путем генерации равномерно распределенной случайной величины.

Данную схему Гиббса можно усовершенствовать путем генерации точек t_1, \dots, t_P по строчкам (столбцам, произвольным деревьям) марковской решетки. Для этого достаточно для каждой строчки запустить проход «вперед-назад» алгоритма передачи сообщений SUM-PRODUCT и получить все одномерные и двухмерные распределения вида $p(t_p)$ и $p(t_p | t_{p-1})$ для переменных данной строки. Затем можно точно генерировать очередную конфигурацию для полученной байесовской сети, соответствующей одной строке в марковской решетке.

Заметим, что подобный процесс генерации по строчкам можно чередовать с генерацией по столбцам. При этом, однако, надо иметь ввиду, что предлагаемая марковская цепь генерации должна быть однородной (для однородной цепи легко доказывается эргодичность). Для данного примера со строками и столбцами это означает, что сначала нужно сгенерировать все точки по строкам, затем по столбцам, и только затем принять очередную конфигурацию в качестве новой конфигурации в выборке T_1, \dots, T_N .

Фильтр частиц

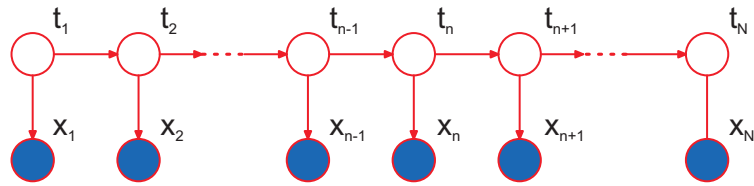


Рис. 2: Графическая модель для линейной динамической системы.

Рассмотрим линейную динамическую систему. Она представляет собой байесовскую сеть с графом, показанным на рис. 2, в которой переменные $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N \in \mathbb{R}^d$ являются наблюдаемыми, переменные $\mathbf{t}_1, \dots, \mathbf{t}_N \in \mathbb{R}^D$ подлежат оценке, а вероятности определяются следующим образом:

$$\begin{aligned} p(\mathbf{t}_1) &= \mathcal{N}(\mathbf{t}_1 | \boldsymbol{\mu}_0, V_0), \\ p(\mathbf{t}_n | \mathbf{t}_{n-1}) &= \mathcal{N}(\mathbf{t}_n | A\mathbf{t}_{n-1}, \Gamma), \\ p(\mathbf{x}_n | \mathbf{t}_n) &= \mathcal{N}(\mathbf{x}_n | C\mathbf{t}_n, \Sigma). \end{aligned}$$

Для этой модели фильтрация в режиме реального времени, т.е. вычисление распределений вида $p(\mathbf{t}_n | \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n)$, может быть проведена точно с помощью фильтра Калмана. Рассмотрим расширение данной модели, в которой шумы по-прежнему являются нормальными, а математические ожидания при переходе определяются известными нелинейными вектор-функциями \mathbf{f} и \mathbf{g} :

$$\begin{aligned} p(\mathbf{t}_1) &= \mathcal{N}(\mathbf{t}_1 | \boldsymbol{\mu}_0, V_0), \\ p(\mathbf{t}_n | \mathbf{t}_{n-1}) &= \mathcal{N}(\mathbf{t}_n | \mathbf{f}(\mathbf{t}_{n-1}), \Gamma), \\ p(\mathbf{x}_n | \mathbf{t}_n) &= \mathcal{N}(\mathbf{x}_n | \mathbf{g}(\mathbf{t}_n), \Sigma). \end{aligned}$$

Тогда фильтрацию в режиме реального времени в такой модели можно проводить с высокой степенью точности с помощью расширенного фильтра Калмана. В том случае, если шумы не являются нормальными (например, соответствующие распределения являются многомодальными), то тогда для решения задачи приближенной фильтрации в режиме реального времени можно применять т.н. *фильтр частиц*. Для этого достаточно уметь эффективно генерировать выборку произвольного объема из априорного распределения $p(\mathbf{t}_1)$ и распределений вида $p(\mathbf{t}_n | \mathbf{t}_{n-1})$.

Рассмотрим формулу Байеса в следующем виде:

$$p(\mathbf{t} | \mathbf{x}) = \frac{p(\mathbf{x} | \mathbf{t})p(\mathbf{t})}{\int p(\mathbf{x} | \mathbf{t}')p(\mathbf{t}')d\mathbf{t}'}$$

Предположим, что мы умеем генерировать выборку из априорного распределения $p(\mathbf{t})$:

$$\mathbf{t}^1, \dots, \mathbf{t}^L \sim p(\mathbf{t}).$$

Тогда генерацию выборки из апостериорного распределения $p(\mathbf{t} | \mathbf{x})$ можно проводить следующим образом. Вычислим веса для каждого элемента выборки \mathbf{t}^l по формуле

$$w^l = \frac{p(\mathbf{x} | \mathbf{t}^l)}{\sum_{m=1}^L p(\mathbf{x} | \mathbf{t}^m)}.$$

Затем сгенерируем выборку с возвращением из множества $\{\mathbf{t}^1, \dots, \mathbf{t}^L\}$, где элемент l выбирается с вероятностью w^l . Полученную таким образом выборку можно приближенно считать выборкой из распределения $p(\mathbf{t} | \mathbf{x})$. При этом статистики данного распределения можно оценить как

$$\mathbb{E}_{\mathbf{t} | \mathbf{x}} f(\mathbf{t}) \approx \sum_{l=1}^L w^l f(\mathbf{t}^l). \quad (6)$$

Воспользуемся данным алгоритмом для приближенного решения задачи онлайн-фильтрации для графической модели, показанной на рис. 2. Схема фильтрации в такой модели состоит из двух шагов: прогноз (вычисление $p(\mathbf{t}_n | X_{n-1})$) и коррекция (вычисление $p(\mathbf{t}_n | X_n)$). Здесь под X_n понимается предыстория до момента времени n : $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n$. Легко показать, что

$$p(\mathbf{t}_n | X_{n-1}) = \int p(\mathbf{t}_n, \mathbf{t}_{n-1} | X_{n-1}) d\mathbf{t}_{n-1} = \int p(\mathbf{t}_n | \mathbf{t}_{n-1}) p(\mathbf{t}_{n-1} | X_{n-1}) d\mathbf{t}_{n-1} = \mathbb{E}_{\mathbf{t}_{n-1} | X_{n-1}} p(\mathbf{t}_n | \mathbf{t}_{n-1}), \quad (7)$$

$$p(\mathbf{t}_n | X_n) \propto p(\mathbf{x}_n | \mathbf{t}_n) p(\mathbf{t}_n | X_{n-1}). \quad (8)$$

Алгоритм 1 Фильтр частиц

Вход: Объем выборки L .

Выход: Значения статистик распределений $p(\mathbf{t}_n|X_n)$, $n = 1, \dots, N$.

- 1: Сгенерировать выборку $\mathbf{t}_0^1, \dots, \mathbf{t}_0^L$ из априорного распределения $p(\mathbf{t}_1)$.
 - 2: Вычислить веса $w_0^l = \frac{p(\mathbf{x}_1|\mathbf{t}_0^l)}{\sum_{m=1}^L p(\mathbf{x}_1|\mathbf{t}_0^m)}$, $l = 1, \dots, L$.
 - 3: для $n = 1, \dots, N - 1$
 - 4: Сгенерировать выборку $\mathbf{t}_n^1, \dots, \mathbf{t}_n^L$ из вероятностной смеси $\sum_{l=1}^L w_{n-1}^l p(\mathbf{t}_n|\mathbf{t}_{n-1}^l)$.
 - 5: Вычислить веса $w_n^l = \frac{p(\mathbf{x}_{n+1}|\mathbf{t}_n^l)}{\sum_{m=1}^L p(\mathbf{x}_{n+1}|\mathbf{t}_n^m)}$, $l = 1, \dots, L$.
 - 6: Вычислить необходимые статистики (например, мат.ожидания) распределений $p(\mathbf{t}_n|X_n)$ по формуле $\mathbb{E}_{\mathbf{t}_n|X_n} f(\mathbf{t}_n) = \sum_{l=1}^L w_{n-1}^l f(\mathbf{t}_{n-1}^l)$.
-

Пусть на шаге $n - 1$ получена выборка $\mathbf{t}_{n-1}^1, \dots, \mathbf{t}_{n-1}^L$ объема L и веса $w_{n-1}^1, \dots, w_{n-1}^L$, по которым можно оценивать статистики распределения $p(\mathbf{t}_{n-1}|X_{n-1})$ по формуле (6). Тогда с учетом (7) верно:

$$p(\mathbf{t}_n|X_{n-1}) = \mathbb{E}_{\mathbf{t}_{n-1}|X_{n-1}} p(\mathbf{t}_n|\mathbf{t}_{n-1}) \approx \sum_{l=1}^L w_{n-1}^l p(\mathbf{t}_n|\mathbf{t}_{n-1}^l).$$

Это означает, что распределение $p(\mathbf{t}_n|X_{n-1})$ приближенно является вероятностной смесью из L компонент вида $p(\mathbf{t}_n|\mathbf{t}_{n-1}^l)$ с весами w_{n-1}^l . Следовательно, генерацию точек выборки из распределения $p(\mathbf{t}_n|X_{n-1})$ можно проводить в два шага: сначала с вероятностями, пропорциональными w_{n-1}^l , выбирается номер компоненты смеси, а затем очередная точка генерируется из выбранной компоненты. Обозначим полученную таким образом выборку через $\mathbf{t}_n^1, \dots, \mathbf{t}_n^L$. Теперь с учетом (8) выборку из распределения $p(\mathbf{t}_n|X_n)$ можно найти по описанной выше схеме, где в качестве априорного распределения выступает $p(\mathbf{t}_n|X_{n-1})$, выборку из которого мы только что сгенерировали. Итоговая схема фильтра частиц представлена в алгоритме 1. Фильтр частиц является очень быстрой процедурой, т.к. требует всего лишь N раз сгенерировать выборку объема L из вероятностной смеси L компонент. Заметим, что в том случае, если на выходе фильтра частиц нас интересует только набор статистик распределений $p(\mathbf{t}_n|X_n)$, то генерацию выборки с возвращением нигде проводить не нужно.