Statistical Computing
Chap. 4.1: More MCMCs

LIU, Ran

Department of Statistics,
Beijing Normal University

May 5, 2024

Reversible-jump MCMC (RJMCMC)

Hamiltonian Monte Carlo (HMC)

No-U-Turn Sampler (NUTS)

Langevin Monte Carlo

Reversible-jump MCMC (RJMCMC)

是 MH 算法的一种扩展，在模型参数的数量发生改变时，我们应考虑使用 RJMCMC，如贝叶斯框架下的变量筛选。主要思想是在 MH 算法接受率的计算中，加入了一个 Jacobian 行列式的计算，类似在密度函数变量替换之后的 Jacobian 行列式。

$$\alpha\left(x, x'\right)=\min \left\{1, \frac{\pi\left(x'\right) g'\left(u'\right)}{\pi(x) g(u)}\left|\frac{\partial\left(x', u'\right)}{\partial(x, u)}\right|\right\}$$

Ref:

- Stochastic Computation Research Triangle @ University of Bristol https://people.maths.bris.ac.uk/ mapjg/slides/tdtut4.pdf
- Reversible Jump MCMC (RJMCMC) @ University of Colorado Boulder https://www.colorado.edu/amath/sites/default/files/attached-files/rjmcmc.pdf

Summary

Reversible-jump MCMC (RJMCMC)

Hamiltonian Monte Carlo (HMC)

No-U-Turn Sampler (NUTS)

Langevin Monte Carlo

Hamiltonian Monte Carlo

HMC 通过在参数空间中模拟哈密顿动力学，生成一条马尔可夫链。它需要计算目标分布的梯度信息，因此对于具有可导概率密度函数的模型特别有效。HMC 通过使用梯度信息来指导采样过程，减少了无效的随机步骤，从而提高了采样效率。

引入一个辅助变量 M(momentum)，模拟粒子的运动来定义提案分布.

注意，HMC 无法处理含有离散变量的模型。(pyro 使用的时候，将离散变量积分掉了，使用的时候要小心。)

* 参考 [B 站]：哈密顿力学初步

* 参考 [B 站]：The intuition behind the Hamiltonian Monte Carlo algorithm

* 参考：STAT 535: Statistical Machine Learning (UW)

Summary

Reversible-jump MCMC (RJMCMC)

Hamiltonian Monte Carlo (HMC)

No-U-Turn Sampler (NUTS)

Langevin Monte Carlo

No-U-Turn Sampler (NUTS)

NUTS 是 HMC 的一种延申，它通过禁止粒子构成 U-turn，来限制 HMC 中的一个 tuning parameter L.

不允许掉头的部分是如何生成提案的：HMC（哈密尔顿蒙特卡罗）生成一个假设的物理系统：想象一个具有一定动能的球，在由你想要采样的后验分布定义的山谷和山丘（当维度超过 2 维时，这个类比就不再适用）的地形上滚动。每次你想要进行新的 MCMC 采样时，随机选择动能并从当前位置开始让球滚动。

你以离散时间步长进行模拟，并为了确保适当地探索参数空间，模拟向一个方向进行步长，然后再在另一个方向进行两倍的步长，再转向等等。在某个时刻，你会想要停止这个过程，一个很好的方法是当你完成了一个掉头。

* 参考 [B 站]：NUTS 算法介绍

Summary

Reversible-jump MCMC (RJMCMC)

Hamiltonian Monte Carlo (HMC)

No-U-Turn Sampler (NUTS)

Langevin Monte Carlo

Langevin Monte Carlo (LMC)

朗之万方程 ($U(x) = -\log \pi(x)$):

$$dX(t) = -\nabla U(X(t))dt + \sqrt{2}\sigma dB_t \tag{1}$$

布朗运动的增量:

$$dB_t \sim \mathcal{N}(0, dt \cdot I) \tag{2}$$

考虑 $X(t)$ 的一个小增量:

$$x' - x = -dt\nabla U(x) + \mathcal{N}(0, 2\sigma^2 dt) \tag{3}$$

$$x' \sim \mathcal{N}\left(x - \nabla U(x)dt, 2\sigma^2 dt\right) \tag{4}$$

然后再算 x' 的接受率。

可视化 MCMC 各种采样算法:

- MCMC Implementation (Github)