kandi työotsikkko

Topias Karjalainen

19. maaliskuuta 2020

Sisältö

Kuvat

Luku 1

Johdanto

Tilastotieteissä *frekventistinen* koulukunta oli pitkään vallitseva koulukunta. Viimeaikoina kuitenkin suosiotaan on kasvattanut Bayesilainen koulukunta. Aiemmin Bayesiläinen päättely ei päässyt leviämään, sillä toisin kuin frekventistinen koulukunta, Bayesiläisyys ei tarjonnut suurinpaan osaan kysymyksiä analyyttisiä ratkaisuja. Vasta tietokoneiden aikakautena *Markovin ketju Monte Carlo -menetelmät* (MCMC-menetelmät) ovat antaneet mahdollisuuden ratkaista *posteriori*-jakaumat monimutkaisemmilta malleilta.

Monte Carlo menetelmän kehitteli 50-luvulla *Los Alamosissa* työskennelleet *Nicholas Metropolis*, *Stanislav Ulam* ja yleisnero *John von Neumann*. Yleinen määritelmä Monte Carlo menetelmälle on toistuva satunnainen arvojen arpominen. Yksinkertainen esimerkki Monte Carlo simuloinnista on esimerkiksi π:n arvon estimointi arpomalla sattumanvaraisesti pisteitä tasosta, ja laskemalla kuinka moni niistä on ympyrän säteen sisällä.

Markovin ketjut ovat *stokastisia prosesseja*, jotka on nimetty venäläisen matemaatikon *Andrey Markov*'n mukaan.

MCMC-menetelmiä käytetään nykyään enimmäkseen tilastotieteessä laaja-alaisesti perinteisestä parametriestimoinnista aina vaalitulosten ennustukseen. Niillä on myös sovelluksia biologiassa, fysiikassa ja kielitieteissä.

Luku 2

Teoriaa

2.1 Perusmääritelmiä

Määritellään ensiksi todennäköisyys.

Määritelmä 2.1. *σ-algebra.* Olkoot Ω mielivaltainen epätyhjä joukko. Sigma-algebra perusjoukolla Ω on sen osajoukkojen joukkoperhe $\mathcal{F}$, joka toteuttaa ehdot:

1. $\emptyset \in \mathcal{F}$
2. jos $A \in \mathcal{F},$ *niin* $A^c \in \mathcal{F}$
3. jos jos $A_k \in \mathcal{F},$ *kaikilla* $k \in K$, missä K on numeroituva joukko, niin $\bigcup_{k \in K} A_k \in \mathcal{F}$

Määritelmä 2.2. Kuvaus $\mathbf{P}$ liittää kuhunkin tapahtumaan A *todennäköisyyden*, joka on luku suljetulla välillä [0,1] ja sille pätee:

1. $\mathbf{P}(\Omega) = 1$
2. Jos A on tapahtuma, niin sen komplementtitapahtuman A^c todennäköisyys on $\mathbf{P}(A^c) = 1 - \mathbf{P}(A)$
3. Jos $(A_k)_{k \in \mathbb{N}}$ ovat erillisiä tapahtumia, niin

$$\mathbf{P}(\bigcup_{k \in \mathbb{N}} A_k) = \sum_{k \in \mathbb{N}} \mathbf{P}(A_k)$$

Määritelmä 2.3. Kolmikkoa $(\Omega, \mathcal{F}, \mathbf{P})$ kutsutaan *todennäköisyysavaruudeksi.*

Määritelmä 2.4. *Satunnaismuuttuja* X on (lähes) mielivaltainen kuvaus $X : \Omega \to S$, jossa S on *tilajoukko.*

2.2 Markovin ketjut

2.2.1 Äärellinen tilajoukko

Määritelmä 2.5. Jono $(X_n : n = 1, 2, 3, ...)$ satunnaismuuttujia on diskreettiaikainen *stokastinen prosessi.*

Merkintä 2.6. Merkitään stokastista prosessia merkinnällä $\{X_n\}$

Määritelmä 2.7. Stokastinen prosessi $\{X_n\}$ on *Markovin ketju*, jos kaikilla alkuhetkillä m, n ja tiloilla $i, j \in S$ on voimassa

$$\begin{aligned} &\mathbf{P}(X_{n+1} = j | X_0 = i_0, X_1 = i_1, ..., X_{n-1} = i_{n-1}, X_n = i) \\ &= \mathbf{P}(X_{n+1} = j | X_n = i) \end{aligned} \tag{2.8}$$

ja *siirtymätodennäköisyyksille* on voimassa

$$p_{ij} = \mathbf{P}(X_{n+1} = j | X_n = i) = \mathbf{P}(X_{m+1} = j | X_m = i) \tag{2.9}$$

Yhtälöä 2.8 kutsutaan *Markovin-ehdoksi* ja yhtälöä 2.9 taas kutsutaan *stationarisuusehdoksi*, mikä tarkoittaa, että siirtymätodennäköisyys tilojen i ja j välillä ei riipu ajasta m ja n, vaan pelkästään tiloista i ja j.

Määritelmä 2.10. Satunnaismuuttujan X_0 jakaumaa kutsutaan *alkujakaumaksi.*

Lause 2.11. *Ajanhetkellä $n \geq 1$ polun $(i_0, ...i_n)$ todennäköisyys on*

$$\boldsymbol{P}(X_0 = i_0, ..., X_n = i_n) = p_{i_0} p_{i_0,i_1} p_{i_1,i_2} ... p_{i_{n-1},i_n} \tag{2.12}$$

Todistus. Käyttäen ehdollisen todennäköisyyden kaavaa, saadaan 2:lle tapahtumalle

$$\mathbf{P}(A_0, A_1) = \mathbf{P}(A_0)\mathbf{P}(A_1 | A_0)$$

Jos tapahtumia on kolme, saadaan

$$\mathbf{P}(A_0, A_1, A_2) = \mathbf{P}(A_0)\mathbf{P}(A_1 | A_0)\mathbf{P}(A_2 | A_1, A_0)$$

neljä

$$\mathbf{P}(A_0, A_1, A_2, A_3) = \mathbf{P}(A_0)\mathbf{P}(A_1 | A_0)\mathbf{P}(A_2 | A_1, A_0)\mathbf{P}(A_3 | A_2, A_1, A_0)$$

ja n

$$\mathbf{P}(A_0, ..., A_n) = \mathbf{P}(A_0)\mathbf{P}(A_1 | A_0) ... \mathbf{P}(A_n | A_{n-1}, ... A_0) \tag{2.13}$$

Tämä on yleinen ehdollinen todennäköisyys. Merkataan $A_n := (X_i = i_n)$. Koska käsittelemme Markovin ketjua, niin yhtälö 2.8 pätee, jolloin yhtälöstä 2.13 saadaan

$$\mathbf{P}(X_0 = i_0, ..., X_n = i_n) = \mathbf{P}(X_0 = i_0)\mathbf{P}(X_1 = i_1|X_0 = i_0)...\mathbf{P}(X_n = i_n|X_{n-1} = i_{n-1})$$

jossa $\forall n = 0, 1, 2, ..., n : \mathbf{P}(X_n = i_n|X_{n-1} = i_{n-1})$ on siirtymätödennäköisyys p_{i_{n-1},i_n} jolloin tulos seuraa substituoimalla termit. □

Merkintä 2.14.

$$p_{ij}^{(m)} := \mathbf{P}(X_m = j|X_0 = i),\ i, j \in S, m \in T \tag{2.15}$$

on siirtymätodennäköisyys tilasta i tilaan j, kun aikaa kuluu m yksikköä.

Määritelmä 2.16. *Siirtymämatriisi* on matriisi

$$\mathbf{P}^{(m)} := (p_{ij}^{(m)})_{i,j} = \begin{pmatrix} p_{00}^{(m)} & p_{01}^{(m)} & \cdots & p_{0n}^{(m)} \\ p_{10}^{(m)} & p_{11}^{(m)} & \cdots & p_{1n}^{(m)} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ p_{n0}^{(m)} & p_{n1}^{(m)} & \cdots & p_{nn}^{(m)} \end{pmatrix} \tag{2.17}$$

Lause 2.18. *Kaikilla ajanhetkillä on voimassa*

$$\boldsymbol{P}^{(m)} = \boldsymbol{P}^m \tag{2.19}$$

Todistus. Todistus on melko pitkä, joten ohitetaan se. □

Määritelmä 2.20. Todennäköisyysjakauma $\pi = (\pi)_{i \in S}$ on Markovin ketjun $\{X_n\}$ tasapainojakauma, jos

$$\sum_{i \in S} \pi_i p_{ij} = \pi_j, \forall j \in S \tag{2.21}$$

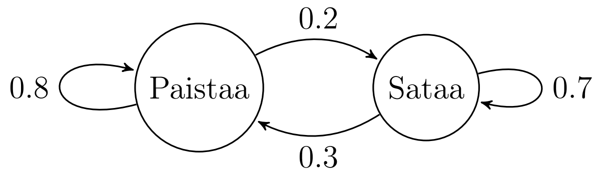
Yhtälö 2.21 voidaan kirjoittaa myös muotoon

$$\pi^T \mathbf{P} = \pi^T \tag{2.22}$$

Lause 2.23. *Äärellisellä Markovin ketjulla on aina jokin tasapainojakauma π.*

Määritelmä 2.24. Markovin ketju on *kääntyvä*, jos löytyy sellainen TN-jakauma $\lambda = (\lambda_i)_{i \in S}$, että

$$\lambda_i p_{ij} = \lambda_j p_{ji}, \forall i, j \in S \tag{2.25}$$



Kuva 2.1: Esimerkki 2.27

Lause 2.26. *Jos Markovin ketju on kääntyvä, niin $\lambda = \pi$ on sen tasapainojakauma.*

Esimerkki 2.27. Pohditaan lyhyttä esimerkkiä, jossa tilajoukko on $S = \{"sataa", "paistaa"\}$. Määritellään siirtymätodennäköisyydet siirtymämatriisilla

$$\mathbf{P}^{(1)} = \begin{pmatrix} 0.7 & 0.3 \\ 0.2 & 0.8 \end{pmatrix}$$

Tämä voidaan visualisoida kuvan 2.27 mukaisesti. Ketju on äärellinen, joten sillä on tasapainojakauma. Yhtälö 2.22 implikoi, että jakauma π on siirtymämatriisin $\mathbf{P}$ vasen ominaisvektori ($\pi^T \mathbf{P} = \lambda \pi^T$, jossa $\lambda = 1$). Tämä voidaan ratkaista numeerisesti, ja ratkaisu on $\pi^T = (0.4, 0.6)$. Helposti nyt nähdään, että 2.22 pätee.

2.2.2 Ääretön jatkuva tilajoukko

Kun Markovin ketjun tilajoukko S ei olekkaan rajattu (esimerkiksi, jos halutaan simuloida normaalijakaumasta, joka voi saada minkä vain arvon väliltä $(-\infty, \infty)$), niin teoria muuttuu hieman. Suurin osa tuloksista pätee pienin muutoksin, mutta niiden todistaminen on hankalaa ja ylittää kanditason. Esitetään kuitenkin tarvittavat perustulokset.

Määritelmä 2.28. Kun S on rajoittamaton, siirtymämatriisi on parasta ajatella kuvauksena $T : S \times S \to [0, 1]$, joka kuvaa tilaparin $x, y \in S$ todennäköisyydeksi $T(x, y)$

Määritelmä 2.29. Iistymätodennäköisyys $p_{ij}^{(n)}$ voidaan kirjoittaa *siirtymätiheytenä* $T^{(n)}(x, y)$, jolle pätee

$$\int_S T(x,y)dy = 1 \qquad \text{ja} \qquad \int_S T^{(n)}(x,y)dy = 1, \forall n \geq 1 \tag{2.30}$$

Määritelmä 2.31. Jakauma π on Markovin ketjun $\{X_n\}$ kun S on jatkuva, tasapainojakauma jos

$$\pi(y) = \int_S \pi(x) T(x,y) dx \tag{2.32}$$

Määritelmä 2.33. Markovin ketju jatkuvassa S:ssä on kääntyvä, jos on olemassa

$$\pi(x)T(x,y) = \pi(y)T(y,x), \forall x, y \in S \tag{2.34}$$

Lause 2.35. *Jos Markovin ketju $\{X_n\}$ on kääntyvä ja tilajoukko S on jatkuva, niin π on sen tasapainojakauma.*

Todistus. Yhtälön 2.30 mukaan $\int_S T(y,x)dx = 1$, joten

$$\int_S \pi(x)T(x,y)dx = \int_S \pi(y)T(y,x)dx = \pi(y)\int_S T(y,x)dx = \pi(y) \tag{2.36}$$

□

Luku 3

Markov Chain Monte Carlo

3.1 Gibbsin otanta-algoritmi

Gibbsin otanta-algoritmi on tapa simuloida Bayesiläistä moniulotteista posteriorijakaumaa (eli ulottuvuuksia vähintään 2), kun suora otanta on hankalaa. Algoritmi on nimetty amerikkalaisen fyysikon, *Josiah Willard Gibbs*'n (1839-1903) mukaan, mutta sen todellinen kehittäjä on veljekset *Donald Geman* (1943-) ja *Stuart Geman* (1949-) vuonna 1984 artikkelissa *Stochastic Relaxation, Gibbs Distributions, and the Bayesian Restoration of Images*

Määritelmä 3.1. Olkoot θ parametrivektori, joka jaetaan d:hen osaan tai osavektoriin, eli $\theta = (\theta_1, \theta_2, ..., \theta_d)$. Gibbsin otanta-algoritmi määritellään seuraavanlaisesti:

1. Valitaan θ:n osavektoreille järjestys.

2. Arvotaan uusi tila jokaiselle osavektorille θ_j ehdollistamalla se jokaiselle muulle parametrille, eli vedetään arvot $\theta = (\theta_1, \theta_2, ..., \theta_d)$ jakaumista

$$p(\theta_j | \theta_{-j,n-1}, y) \tag{3.2}$$

   missä $\theta_{-j,n-1}$ on kaikki muut θ:n komponentit paitsi js komponentti, näiden tämänhetkisillä arvoilla eli

$$\theta_{-j,n-1} = (\theta_{1,n}, ..., \theta_{j-1,n}, \theta_{j+1,n-1}, ..., \theta_{d,n-1})$$

3.2 Metropolis–Hastings algoritmi

Metropolis–Hastings algoritmi on kehittelijöidenssä *Nicholas Metropolisksen* (1915-1999) ja *Wilfred Keith Hastings*:n (1930-2016) mukaan nimetty MCMC-menetelmä, jolla voidaan simuloida Bayesiläisessä analyysissa käytettäviä posteriori jakaumia myös silloin kun tiheys on mahdotonta määrittää analyyttisesti.

Algoritmin pohjan kehitti *Stanislav Ulam* ja *Metropolis* työskennellessään *Los Alamosissa* ja myöhemmin *Metropolis* kehitteli nykyään *Metropolis-algoritmina* tunnettua algoritmiä ja esittelivät sen artikkelissa *Equation of state calculations by fast computing machines*[2]. Tämä versio algoritmista vaati, että pian esiteltävä *ehdotusjakauma* on symmetrinen. Myöhemmin *Hastings* laajenti algoritmin koskemaan myös epäsymmetrisiä ehdotusjakaumia artikkelissa *Monte Carlo Sampling Methods Using Markov Chains and Their Applications*

Merkintä 3.3. TN-jakauma $J_n(\cdot|\cdot)$ on niin sanottu *ehdotusjakauma* (*proposal distribution, jumping distribution*), josta *MH-algoritmissa* arvotaan ehdotus tila.

Määritelmä 3.4. Metropolis–Hastings algoritmi on seuraavanlainen

1. Valitaan aloitus tila θ_0 ja asetetaan $n = 0$
2. Generoidaan kandidaatti tila θ' satunnaisesti jakaumasta $J_n(\theta'|\theta_{n-1})$
3. Lasketaan tiheyksien tai todennäköisyyksien suhde
$$r = \frac{p(\theta'|y)/J_n(\theta'|\theta_{n-1})}{p(\theta_{n-1}|y)/J_n(\theta_{n-1}|\theta')}$$
4. Asetetaan
$$\theta_t = \begin{cases} \theta', \text{todennäköisyydellä} \quad \min(r, 1) \\ \theta_{t-1}, \text{muuten} \end{cases}$$

Jossa $J_t(\theta'|\theta^{t-1})$ on ns. ehdotusjakauma (eng. proposal distribution).

Lause 3.5. *Määritelmän 3.4 algoritmi tuottaa Markovin ketjun jolla on uniikki tasapainojakauma, ja jonka tasapainojakauma on posteriorijakauma $p(\theta|y)$, jossa y on data.*

Todistus. Ohitamme todistuksen, että kyseessä Markovin ketju jolla yksi tasapainojakauma, mutta todistamme toisen osan, eli että tasapainojakauma on haluttu $p(\theta|y)$ eli posteriori jakauma. Todistus nojautuu Markovin ketjun kääntyvyysominaisuuteen (2.24 ja 2.33), eli

$$T(\theta_n|\theta_{n-1})p(\theta_{n-1}|y) = T(\theta_{n-1}|\theta_n)p(\theta_n|y) \tag{3.6}$$

joka on siis riittävä ehto tasapainojakauman olemassaololle. Mietitään kahta tapausta: (1) $\theta_n \neq \theta_{n-1}$ ja (2) $\theta_n = \theta_{n-1}$. Tapauksen (2) siirtymä voi tapahtua kahdella tavalla. Joko kohdassa 4. ehdotus θ' hylätään, tai se hyväksytään, mutta osutaan sattumanvaraisesti takaisin samaan kohtaan. Kuitenkin selvästi nähdään, että ehto 3.6 pätee tilanteessa (2).

Tilanteessa (1)Siirtymätodennäköisyys pisteestä θ_{n-1} pisteeseen θ_n on

$$T(\theta_n|\theta_{n-1}) = J_n(\theta_n|\theta_{n-1}) \min\Big(\frac{p(\theta_n|y)J_n(\theta_{n-1}|\theta_n)}{p(\theta_{n-1}|y)J_n(\theta_n|\theta_{n-1})}, 1\Big) \tag{3.7}$$

Jota voidaan muokata helposti

$$
\begin{aligned}
T(\theta_n|\theta_{n-1}) &= J_n(\theta_n|\theta_{n-1}) \min\Big(\frac{p(\theta_n|y)J_n(\theta_{n-1}|\theta_n)}{p(\theta_{n-1}|y)J_n(\theta_n|\theta_{n-1})}, 1\Big) \\
&= \frac{1}{p(\theta_{n-1}|y)} \min\Big(p(\theta_n|y)J_n(\theta_{n-1}|\theta_n), p(\theta_{n-1}|y)J_n(\theta_n|\theta_{n-1})\Big)
\end{aligned} \tag{3.8}
$$

Nähdään kuitenkin, että yhtälön 3.8 alempi yhtäläisyys on symmetrinen eli

$$
T(\theta_{n-1}|\theta_n) = \frac{1}{p(\theta_n|y)} \min\Big(p(\theta_{n-1}|y)J_n(\theta_n|\theta_{n-1}), p(\theta_n|y)J_n(\theta_{n-1}|\theta_n)\Big) \tag{3.9}
$$

joten kerrotaan 3.8 termillä $p(\theta_{n-1}|y)$ ja hyödynnetään 3.9 ominaisuutta

$$
\begin{aligned}
T(\theta_n|\theta_{n-1})p(\theta_{n-1}|y) &= \frac{1}{p(\theta_{n-1}|y)} \min\Big(p(\theta_n|y)J_n(\theta_{n-1}|\theta_n), p(\theta_{n-1}|y)J_n(\theta_n|\theta_{n-1})\Big)p(\theta_{n-1}|y) \\
&= \frac{1}{p(\theta_n|y)} \min\Big(p(\theta_{n-1}|y)J_n(\theta_n|\theta_{n-1}), p(\theta_n|y)J_n(\theta_{n-1}|\theta_n)\Big)p(\theta_n|y) \\
&= T(\theta_{n-1}|\theta_n)p(\theta_n|y)
\end{aligned}
$$

Eli myös tapauksessa (1) yhtälö 3.6 pätee. □

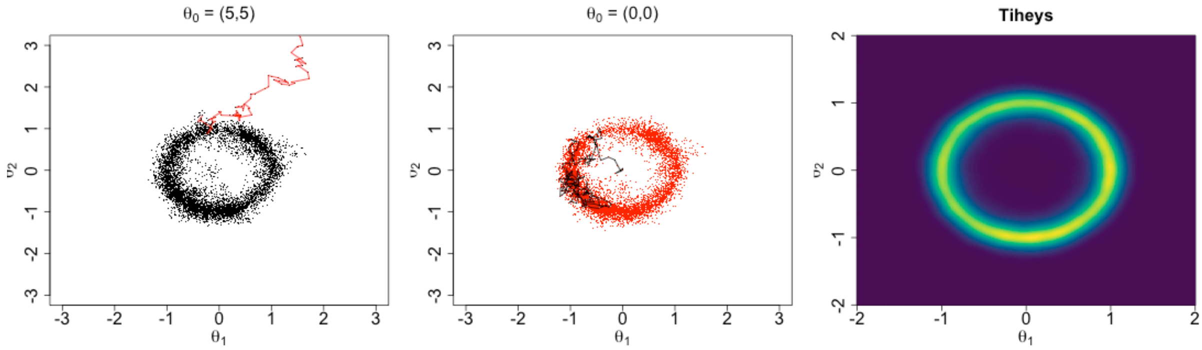
Esimerkki 3.10. Ajatellaan kuvitteellista tapausta, jossa meillä jatkuva kaksiulotteinen todennäköisyysjakauma, jonka tiheysfunktio on

$$
p(\theta) \propto \exp(-5|\theta_1^2 + \theta_2^2 - 1|) \tag{3.11}
$$

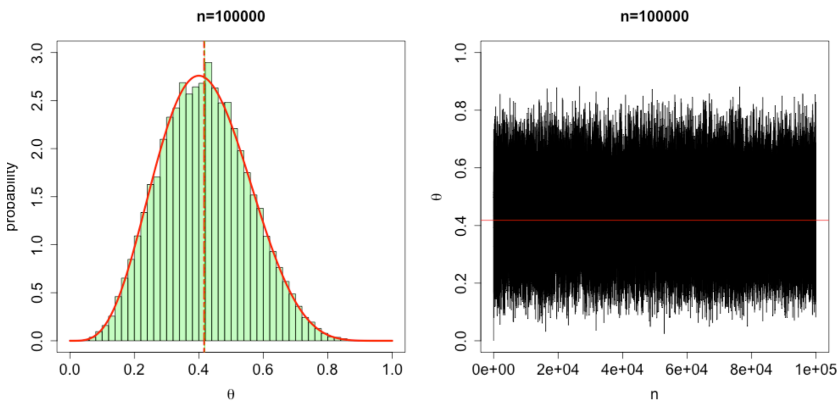
joka muodostaa regasmaisen 2-ulotteisen jakauman. Valitaan ehdotusjakaumaksi $J_n(\theta_n|\theta_{n-1})$ 2d-multinormaalijakauma

$$
J_n(\theta_n|\theta_{n-1}) \sim N(\theta_{n-1}, \sigma^2 I_2) \tag{3.12}
$$

jossa I_2 on 2x2 yksikkömatriisi ja olkoot $\sigma^2 = 0.01$. Nyt Metropolis Hastings algoritmin avulla voidaan simuloida jakaumaa $p(\theta)$ algoritmilla 3.4. Simuloidaan kaksi Markovin ketjua asettemalla aloitustiloiksi $(0, 0)$ ja $(5, 5)$, kummastakin 10 000 tilaa. Simuloimme myös 200 000 pistettä aloitusarvolla (0,0), joista luodaan tiheysestimaatti. Tulokset löytyy kuvasta 3.1. Kahdessa ekassa kuvassa viiva on ensimmäisen 250 pisteen polku. Selvästi nähdään, että aloituspisteellä ei ole väliä. Markovin ketjun tasapainojakauma on sama huolimatta aloituspisteestä.



Kuva 3.1: *Vasemmalla: (5,5). Keskellä: (0,0) Oikealla: tiheysestimaatti (huomaa eri skaala).*



Kuva 3.2: Esimerkin 3.13 tulokset

Esimerkki 3.13. Otetaan toisena esimerkkinä klassinen diskreetti tapaus, jossa oletetaan, että havainnot ovat jauakautuneet *Bernoulli-jakauman* mukaan, $y_i \sim Bernoulli(\theta)$, ja että priori on tasajakauma. Tällöin tiedetään, että analyyttinen posteriori on

$$p(\theta|y_i) = Beta(\sum_{i=1}^{n} y_i + 1, n - \sum_{i=1}^{n} y_i + 1)$$

Valitaan hieman eksoottinen ehdotusjakauma esimerkin vuoksi:

$$J_n(\theta_n|\theta_{n-1}) \sim \begin{cases} Unif(\theta_{n-1}, 1) & \text{kun } \theta_{n-1} < 0.5 \\ Unif(0, \theta_{n-1}) & \text{kun } \theta_{n-1} \geq 0.5 \end{cases} \tag{3.14}$$

Toisin kuin esimerkissä 3.10, nyt ehdotusjakauma ei olekkaan symmetrinen.

Oletetaan että, meillä on havainnot $(1, 1, 1, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 0)$ ja tarkastellaan sekä analyyttistä että MH-algoritmin tuottamaa jakaumaa ja niiden eroja.

Kuvasta 3.2 nähdään esimerkin tulokset. Huomataan, että vaikka ehdotusjakauma on melko kummallinen, niin kuitenkin tarpeaksi monella iteraatiolla saavutetaan tasapainojakauma. Huomaa, että vasemmassa kuvaajassa on vihreällä simulaatio keskiarvo, ja punaisella analyyttinen keskiarvo, mutta nämä arvot ovat niin lähellä toisiaan, että viivat ovat päällekkäin.

3.2.1 Ehdotusjakauman valinnasta

Kummassakin kappaleen 3.2 esimerkissä valitsimme ehdotusjakauman melko satunnaisesti. Varsinkin esimerkissä 3.13 se on erittäin epätavallinen, mistä syystä hyvän approksimaation saavuttaminen vie todella monta iteraatiota. Yleensä jos haluamme oikeasti tehokkaasti ja ekonomisesti simuloida jakaumia esitetyllä algoritmilla, haluamme valita ehdotusjakauman jollakin järkevällä, systemaattisella tavalla, joka minimoisi tarvittavien iteraatioiden määrän.

Yleisesti ottaen hyvällä ehdotusjakaumalla on muutama ominaisuus[1]

1. Kaikilla θ:n arvoilla on helppo arpoa arvo $J(\theta'|\theta)$
2. Suhde r on helppo laskea
3. Siirtymät ovat tarpeaksi pitkiä. Muuten Markovin Ketju etenee liian hitaasti ja hyvän estimaatin saaminen kestää liian pitkään.
4. Siirtymiä ei hylätä liian usein. Muuten Markovin Ketju ei etene vaan seisoo paikallaan.

Lisäksi simulointia voidaan nopeuttaa mm. käyttämällä adaptiivista ehdotusjakaumaa, eli toisinsanoen ehdotusjakaumaa muunnellaan riippuen ketjun liikkeistä. Esimerkiksi jos ehdotusjakauman ydin on samaa muotoa ku

Luku 4

Loppusanat

Kirjallisuus

[1] Andrew Gelman. *Bayesian Data Analysis*. 3. painos. ISBN: 978-1-4398-4095-5.

[2] Nicholas Metropolis. “Equation of state calculations by fast computing machines” (1953).