

kandi työotsikkko

Topias Karjalainen

18. maaliskuuta 2020

Sisältö

1	Johdanto	2
2	Teoriaa	3
2.1	Perusmääritelmiä	3
2.2	Markovin ketjut	4
2.2.1	Äärellinen tilajoukko	4
2.2.2	Ääretön jatkuva tilajoukko	6
3	Metropolis–Hastings algoritmi	8
4	Loppusanat	12

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 kehittäjä 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

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

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

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

2.2 Markovin ketjut

2.2.1 Äärellinen tilajoukko

Määritelmä 2.5. Jono $(X_n : n = 1, 2, 3, \dots)$ 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

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

ja *siirtymätodennäköisyyksille* on voimassa

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

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, \dots, i_n) todennäköisyys on*

$$(2.12) \quad \mathbf{P}(X_0 = i_0, \dots, X_n = i_n) = p_{i_0} p_{i_0, i_1} p_{i_1, i_2} \dots p_{i_{n-1}, i_n}$$

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

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

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

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

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

Merkintä 2.14.

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

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

Määritelmä 2.16. *Siirtymämatriisi* on matriisi

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

Lause 2.18. *Kaikilla ajanhetkillä on voimassa*

$$(2.19) \quad \mathbf{P}^{(m)} = \mathbf{P}^m$$

Todistus. Todistus on melko pitkä, joten ohitetaan se. \square

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

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

Yhtälö 2.21 voidaan kirjoittaa myös muotoon

$$(2.22) \quad \pi^T \mathbf{P} = \pi^T$$

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

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

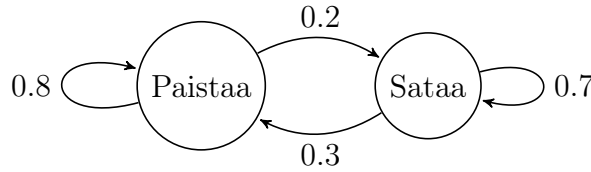
$$(2.25) \quad \lambda_i p_{ij} = \lambda_j p_{ji}, \quad \forall i, j \in S$$

Lause 2.26. Jos Markovin ketju on käänttyvä, 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 seuraavanlaisesti:



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 olekaan 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 kandidatin. Esitetään kuitenkin tarvittavat perustulokset.

Määritelmä 2.28. Kun S on rajoittamaton, siirtymämatriisi on parasta ajatella kuvauksena $T : S \times S \rightarrow [0, 1]$, 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

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

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

$$(2.32) \quad \pi(y) = \int_S \pi(x) T(x, y) dx$$

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

$$(2.34) \quad \pi(x)T(x, y) = \pi(y)T(y, x), \forall x, y \in S$$

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

$$(2.36) \quad \int_S \pi(x)T(x, y)dx = \int_S \pi(y)T(y, x)dx = \pi(y) \int_S T(y, x)dx = \pi(y)$$

□

Luku 3

Metropolis–Hastings algoritmi

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

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

Merkintä 3.1. TN-jakauma $J_n(\cdot|\cdot)$ on niin sanottu ehdotusjakauma (*proposal distribution, jumping distribution*), josta *MH-algoritmissa* arvotaan ehdotus tila.

Määritelmä 3.2. 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

$$\theta_t = \begin{cases} \theta', & \text{todennäköisyydellä } \min(r, 1) \\ \theta_{t-1}, & \text{muuten} \end{cases}$$

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

Lause 3.3. Määritelmän 3.2 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

$$(3.4) \quad T(\theta_n|\theta_{n-1})p(\theta_{n-1}|y) = T(\theta_{n-1}|\theta_n)p(\theta_n|y)$$

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 3.4 pätee tilanteessa (2).

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

$$(3.5) \quad T(\theta_n|\theta_{n-1}) = J_n(\theta_n|\theta_{n-1}) \min \left(\frac{p(\theta_n|y)J_n(\theta_{n-1}|\theta_n)}{p(\theta_{n-1}|y)J_n(\theta_n|\theta_{n-1})}, 1 \right)$$

Jota voidaan muokata helposti

$$(3.6) \quad \begin{aligned} T(\theta_n|\theta_{n-1}) &= J_n(\theta_n|\theta_{n-1}) \min \left(\frac{p(\theta_n|y)J_n(\theta_{n-1}|\theta_n)}{p(\theta_{n-1}|y)J_n(\theta_n|\theta_{n-1})}, 1 \right) \\ &= \frac{1}{p(\theta_{n-1}|y)} \min \left(p(\theta_n|y)J_n(\theta_{n-1}|\theta_n), p(\theta_{n-1}|y)J_n(\theta_n|\theta_{n-1}) \right) \end{aligned}$$

Nähdään kuitenkin, että yhtälön 3.6 alempi yhtäläisyys on symmetrinen eli

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

joten kerrotaan 3.6 termillä $p(\theta_{n-1}|y)$ ja hyödynnetään 3.7 ominaisuutta

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

Eli myös tapauksessa (1) yhtälö 3.4 pätee. □

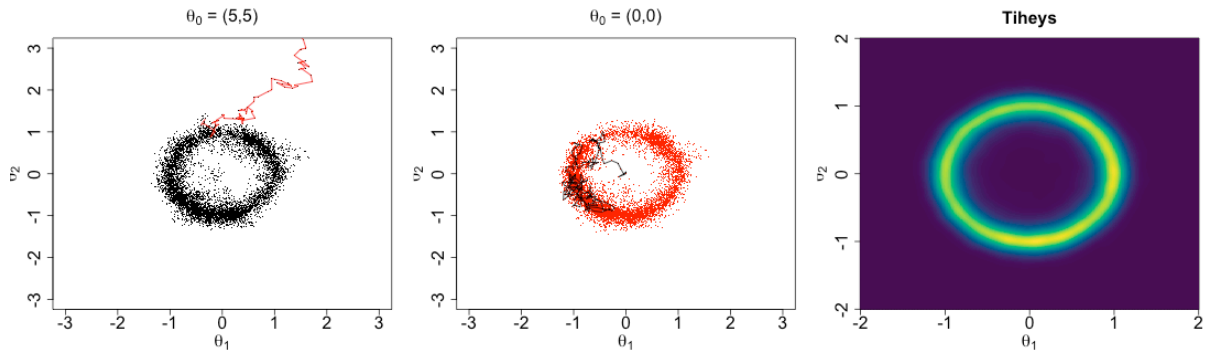
Esimerkki 3.8. Ajatellaan kuvitteellista tapausta, jossa meillä jatkuva kaksiulotteinen todennäköisyysjakauma, jonka tiheysfunktio on

$$(3.9) \quad p(\theta) \propto \exp(-5|\theta_1^2 + \theta_2^2 - 1|)$$

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

$$(3.10) \quad J_n(\theta_n|\theta_{n-1}) \sim N(\theta_{n-1}, \sigma^2 I_2)$$

jossa I_2 on 2x2 yksikkömatriisi ja olkoot $\sigma^2 = 0.01$. Nyt Metropolis Hastings algoritmin avulla voidaan simuloida jakaumaa $p(\theta)$ algoritmilla 3.2. Simuloidaan kaksi Markovin ketjua asettamalla aloitustiloiksi $(0, 0)$ ja $(5, 5)$, kummastakin 10 000 tilaa. Simuloimme



Kuva 3.1: Vasemmalla: $(5,5)$. Keskellä: $(0,0)$ Oikealla: tiheystestimaatti (huomaa eri skaalaa).

myös 200 000 pistettä aloitusarvolla $(0,0)$, joista luodaan tiheystestimaatti. 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.

Esimerkki 3.11. Otetaan toisena esimerkkinä klassinen diskreetti tapaus, jossa oletetaan, että havainnot ovat jauakautuneet *Bernoulli-jakauman* mukaan, $y_i \sim \text{Bernoulli}(\theta)$, ja että prior on tasajakauma. Tällöin tiedetään, että analyttinen posteriori on

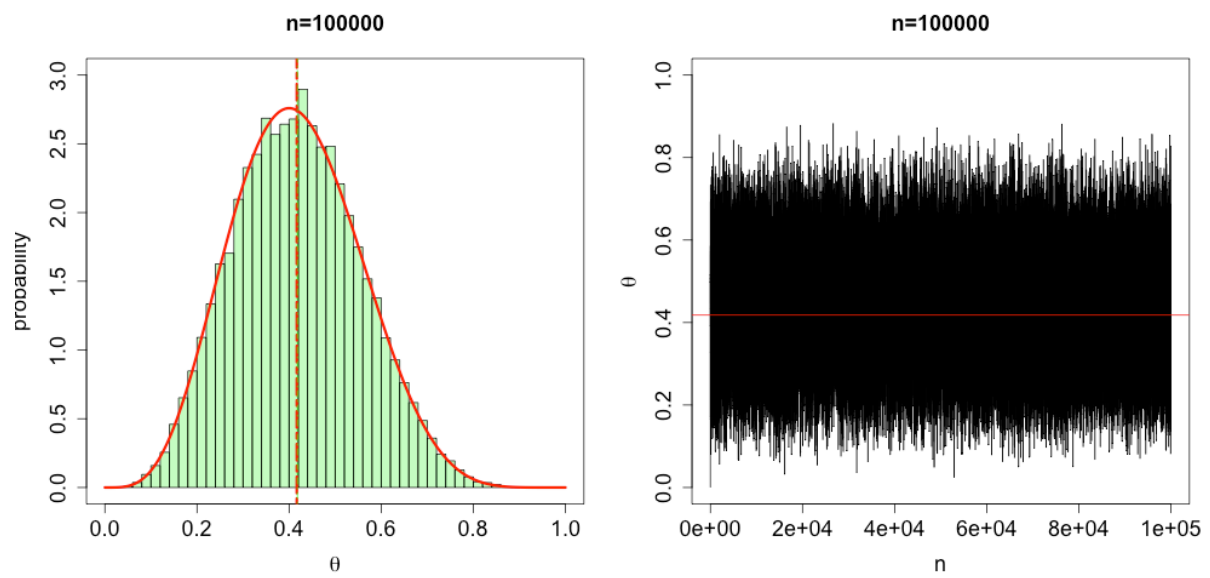
$$p(\theta|y_i) = \text{Beta}\left(\sum_{i=1}^n y_i + 1, n - \sum_{i=1}^n y_i + 1\right)$$

Valitaan hieman erikoinen ehdotusjakauma:

$$(3.12) \quad J_n(\theta_n|\theta_{n-1}) \sim \begin{cases} \text{Unif}(\theta_{n-1}, 1) & \text{kun } \theta_{n-1} < 0.5 \\ \text{Unif}(0, \theta_{n-1}) & \text{kun } \theta_{n-1} \geq 0.5 \end{cases}$$

Toisin kuin esimerkissä 3.8, nyt ehdotusjakauma ei olekaan symmetrinen.

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



Kuva 3.2: Esimerkin 3.11 tulokset

Luku 4

Loppusanat

Kirjallisuutta