

kandi työotsikkko

Topias Karjalainen

20. maaliskuuta 2020

Sisältö

1	Johdanto	3
2	Teoriaa	4
2.1	Perusmääritelmiä	4
2.2	Markovin ketjut	5
2.2.1	Äärellinen tilajoukko	5
2.2.2	Ääretön jatkuva tilajoukko	7
3	Markov Chain Monte Carlo	9
3.1	Gibbsin otanta-algoritmi	9
3.2	Metropolis–Hastings algoritmi	9
3.2.1	Ehdotusjakauman valinnasta	13
3.3	Konvergenssi	14
4	Loppusanat	15

Kuvat

2.1	Yksinkertainen esimerkki Markovin ketjusta	7
3.1	Kaksiulotteinen Metropolis–Hastings esimerkki	12
3.2	Yksiulotteinen Metropolis–Hastings esimerkki	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

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

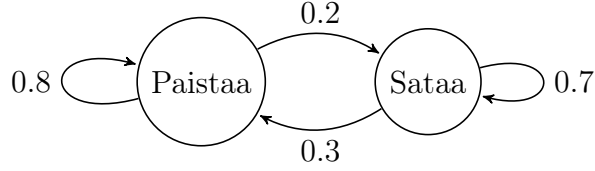
Yhtälö 2.21 voidaan kirjoittaa myös muotoon

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

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

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



Kuva 2.1: Esimerkki 2.27

Lause 2.26. Jos Markovin ketju on kääntävä, 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 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 kandidaton. 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

Markov Chain Monte Carlo

3.1 Gibbsin otanta-algoritmi

Gibbsin otanta-algoritmi on tapa simuloida Bayesiläistä moniulotteista posteriorijakautta (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 $\theta = (\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_d)$. 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 $\theta = (\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_d)$ jakaumista

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

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

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

3.2 Metropolis–Hastings algoritmi

Metropolis–Hastings algoritmi on kehittäjiöidensä *Nicholas Metropolisksen* (1915-1999) ja *Wilfred Keith Hastings*:n (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

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

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

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

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

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 3.6 pätee tilanteessa (2).

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

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

Jota voidaan muokata helposti

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

Nähdään kuitenkin, että yhtälön 3.8 alempi yhtäläisyys on symmetrinen eli

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

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

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

Eli myös tapauksessa (1) yhtälö 3.6 pätee. □

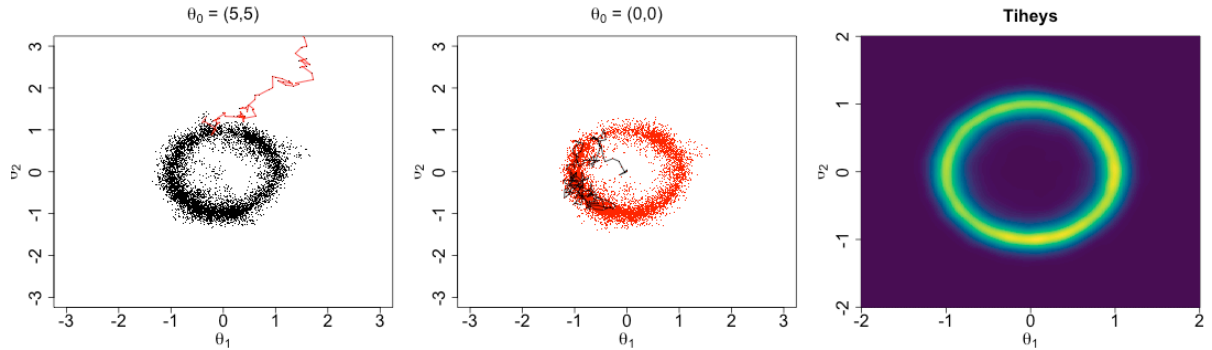
Esimerkki 3.10. Ajatellaan kuvitteellista tapausta, jossa meillä jatkuva kaksiulotteinen todennäköisyysjakauma, jonka tiheysfunktio on

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

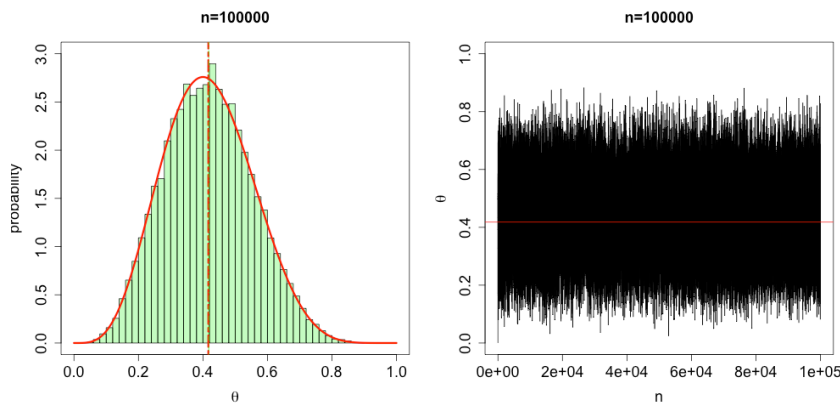
joka muodostaa regasmaisen 2-ulotteisen jakauman. Valitaan ehdotusjakaumaksi $J_n(\theta_n|\theta_{n-1})$ 2d-multinormaalijakauma

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

jossa I_2 on 2x2 yksikkömatriisi ja olkoot $\sigma^2 = 0.01$. Nyt Metropolis Hastings algoritmin avulla voidaan simuloida jakaumaa $p(\theta)$ algoritmilla 3.4. Simuloidaan kaksi Markovin ketjua asettamalla 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: tiheystestimaatti (huomaa eri skaalaa).



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, $y_i \sim \text{Bernoulli}(\theta)$, 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 eksoottinen ehdotusjakauma esimerkin vuoksi:

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

Toisin kuin esimerkissä 3.10, nyt ehdotusjakauma ei olekkaan 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.

Kuvasta 3.2 nähdään esimerkin tulokset. Huomataan, että vaikka ehdotusjakauma on melko kummallinen, niin kuitenkin tarpeeksi monella iteraatiolla saavutetaan tasapainojakauma. Huomaa, että vasemmassa kuvaajassa on vihreällä simulaatio keskiarvo, ja punaisella analyttinen 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 tarpeeksi 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

3.3 Konvergenssi

Kappaleissa 3.1 ja 3.2 esiteltujen algoritmien kohdalla voi herätä kysymys, että mikä on riittävä määrä iteraatioita, jotta Markovin ketju on saavuttanut tasapainojakaumansa ja otanta on riittävän hyvä aproksimaatio posteriorijaukaumasta. Esimerkiksi kun katsotaan kuvan 3.1 vasemman puolen kuvan punaista polkua, niin voimme sanoa, että se ei ole vielä saavuttanut tasapainojakaumaa sillä tunnemme melko hyvin halutun jakauman, mutta yleensä emme välttämättä osaa sanoa tätä suoraan.

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).