

kandi työotsikkko

Topias Karjalainen

7. huhtikuuta 2020

Sisältö

1	Johdanto	2
2	Teoriaa	3
2.1	Perusmääritelmiä	3
2.2	Markovin ketjut	3
2.2.1	Äärellinen tilajoukko	4
2.2.2	Ääretön jatkuva tilajoukko	6
3	Markov Chain Monte Carlo	8
3.1	Gibbsin otanta-algoritmi	8
3.2	Metropolis–Hastings algoritmi	8
3.2.1	Ehdotusjakauman valinnasta	12
3.3	Yleisiä käytäntöjä MCMC-menetelmissä	13
3.4	Konvergenssi ja Diagnostiikka	13
3.4.1	Gelmanin \hat{R}	13
3.4.2	ESS	14
4	Laajempi esimerkki	16
5	Loppusanat	20

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.

Tässä tutkielmassa tulen ensin antamaan lyhyen johdatuksen Markovin ketjuista ja selostan MCMC-menetelmien kannalta relevantin teorian. Tulen esittelemään lyhyesti kaksi algoritmia, joita käytetään MCMC-menetelmissä, *Gibbsin otanta-algoritmin* ja *Metropolis–Hastings algoritmin*. Esitän myös kaksi tärkeää diagnostiikkaa menetelmien tulosten arviointiin ja lopuksi vielä tarkastellaan hieman laajempaa käytännön esimerkkiä MCMC-algoritmista.

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 todennäköisyysavaruuksi.

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

2.2 Markovin ketjut

Esitellään ensiksi joitain perus asioita Markovin Ketjuista, sillä ne eivät kuulu sellaisenaan opetussuunnitelmaan. [6]

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 $A_n := (X_n = i_n)$. 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

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

Lause 2.18. *Kaikilla ajanhetkillä on voimassa*

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

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

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

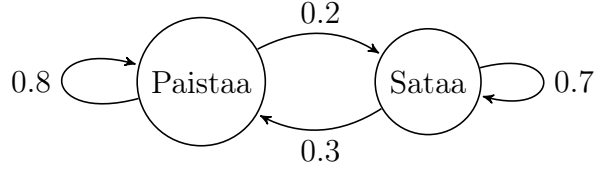
$$(2.25) \quad \lambda_i p_{ij} = \lambda_j p_{ji}, \quad \forall i, j \in S$$

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

Todistus.

$$\sum_{i \in S} \lambda_i p_{ij} = \sum_{i \in S} \lambda_j p_{ji} = \lambda_j \sum_{i \in S} p_{ij} = \lambda_j$$

□



Kuva 2.1: Esimerkki 2.27

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 normaali-jakaumasta, 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*[5]. 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. □

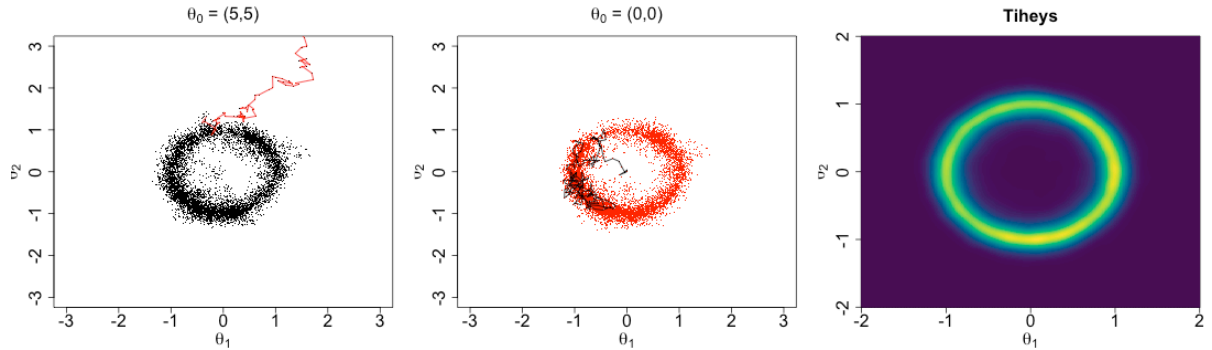
Esimerkki 3.10. Ajatellaan kuvitteellista tapausta, jossa meillä jatkuva kaksiulotteinen todennäköisyysjakauma, jonka tiheysfunktio on

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

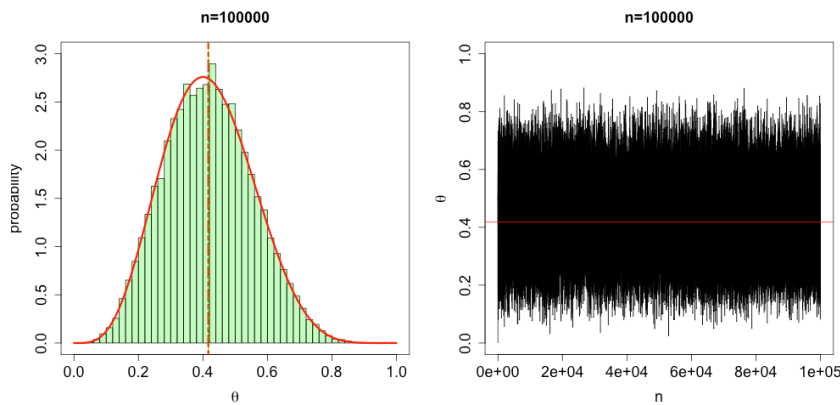
joka muodostaa regasmaisen 2-ulotteisen jakauman. Valitaan ehdotusjakaumaksi $J_n(\theta_n|\theta_{n-1})$ 2d-multinormaalijakauma

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

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 4.2. 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 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.

3.3 Yleisiä käytäntöjä MCMC-menetelmissä

Usein on tapana simuloida useampi kuin yksi ketju kustakin tapauksesta. Tällöin asetetaan näiden ketjujen aloitustilat eriäviksi, jotta saadaan vähennettyä aloitustilan vaikutusta lopputulokseen.

Toinen yleinen käytäntö on jättää ketjun alkupäästä jonkin verran tiloja huomiotta, sillä ketjun alkupäässä ei se ei välttämättä ole vielä saavuttanut tasapainojakaumaa. Tätä kutsutaan *Burn-in periodiksi*.

Joskus taas on hyvä tapa pudottaa joka n :s tila ketjusta. Tilojen tiputtaminen ei vaikuta tasapainojakaumaan, kunhan ketju vain on saavuttanut sen. Tilojen tiputtamista on hyötyä jos mallissa on paljon parametreja, jolloin tietokoneessa voi tulla ongelmia tilan kanssa.

3.4 Konvergenssi ja Diagnostiikka

Kappaleissa 3.1 ja 3.2 esitetyjen 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 4.2 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.

Toinen yleinen ongelma, joka kaipa pohdintaa on se, että ketjujen sisällä on korrelaatiota, mikä vaikeuttaa päättelyä simuloinnin tuloksista. Otannat eivät siis ole välttämättä täysin riippumattomia.

3.4.1 Gelmanin \hat{R}

Yksi yleisimmistä estimaattoreista, joita käytetään MCMC-metodeissa Markovin ketjujen konvergenssin arvioimiseen on *Andrew Gelmanin* \hat{R} [1]. Se mittaa ketjujen sisäistä sekoittumista (eng. *mixing*) ja erillisten ketjujen välistä sekoittumista.

Määritelmä 3.15. *Gelmanin* \hat{R} [2][3] lasketaan jakamalla ensin jokin määrä simuloituja ketjua erillisillä aloituspisteillä keskeltä kahtia. Olkoon nyt m ketjujen määrä jaon jälkeen ja n ketjujen pituus. Olkoot $\psi_{ij}(i = 1, \dots, n; j = 1, \dots, m)$ tila i ketjussa j . Nyt merkitään

$$(3.16a) \quad B = \frac{n}{m-1} \sum_{j=1}^m (\bar{\psi}_{\cdot j} - \bar{\psi}_{\cdot \cdot})^2, \quad \text{jossa}$$

$$(3.16b) \quad \bar{\psi}_{.j} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \psi_{ij}$$

$$(3.16c) \quad \bar{\psi}_{..} = \frac{1}{m} \sum_{j=1}^m \bar{\psi}_{.j}$$

Ja merkataan

$$(3.17) \quad W = \frac{1}{m} \sum_{j=1}^m s_j^2, \text{ jossa } s_j^2 = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (\psi_{ij} - \bar{\psi}_{.j})^2$$

Jossa siis B on ketjujen välinen varianssi (*between sequence*) ja W on ketjujen sisäinen varianssi (*within sequence*). Näiden painotettuna keskiarvona saadaan estimaattori ψ :n marginaaliselle posteriori varianssille

$$(3.18) \quad \hat{\sigma}^+(\psi|y) = \frac{n-1}{n}W + \frac{1}{n}B$$

Nyt \hat{R} voidaan määritellä

$$(3.19) \quad \hat{R} = \sqrt{\frac{\hat{\sigma}^+(\psi|y)}{W}}$$

Gelmanin \hat{R} mittaa sitä miten paljon kullakin hetkellä ψ :n jakauma voisi supistua, jos simulaatioiden annettaisiin jatkua loputtomasti. Eli siis kun $\hat{R} \approx 1$, niin voidaan sanoa, että Markovin ketju on todennäköisesti saavuttanut tasapainojakaumansa, sillä tällöin eri pisteitä aloitettujen ketjujen välinen varianssi on vakaantunut.

3.4.2 ESS

Toinen hyödyllinen diagnostiikka MCMC-menetelmissä on niin sanottu *effective sample size (ESS)*, joka mittaa sitä kuinka monta efektiivisesti riippumatonta otosta ketjussa on. Tämä tarkoittaa siis sitä, että se mittaa kuinka paljon ketjun autokorrelaatio vaikuttaa keskivirheeseen verrattuna täysin riippumattomiin otoksiin.

Määritelmä 3.20. ESS lasketaan kaavalla

$$(3.21) \quad \hat{n}_{eff} = \frac{mn}{1 + 2 \sum_{t=1}^T \hat{\rho}_t}$$

jossa

$$(3.22a) \quad \hat{\rho}_t = 1 - \frac{V_t}{2\hat{\sigma}^+}$$

$$(3.22b) \quad V_t = \frac{1}{m(n-t)} \sum_{j=1}^m \sum_{i=t+1}^n (\psi_{ij} - \psi_{i-t,j})^2$$

$\hat{\sigma}^+$ saadaan kaavasta 3.18. Termissä $\sum_{t=1}^T \hat{\rho}_t$ autokorrelaatioita summataan, kunnes kahden peräkkäisen kovariaatin summa on negatiivinen [4].

Luku 4

Laajempi esimerkki

Tarkastellaan vielä lopuksi laajempaa esimerkkiä. Tarkastellaan normaalia lineaarista regressiomallia. Käytetään R:stä löytyvää `airquality` dataa, jossa on dataa New Yorkin ilmanlaadusta. Regressoidaan datasetin muuttuja `Ozone` muuttujille `Solar.R` ja `Wind`. Sovitetaan tämä malli Gibbsin otanta-algoritmin avulla. Sitä varten meidän on ensiksi määriteltävä marginaaliset ehdolliset jakaumat parametreille.

Määritellään ensiksi malli. Merkitään $\tau = 1/\sigma^2$, $\theta = (\beta_0, \beta_1, \beta_2, \tau)$

$$\begin{aligned} y_i | \beta_0, \beta_1, \beta_2, \tau &\sim N(\beta_0 + \beta_1 x_i + \beta_2 x_i, 1/\tau) \\ \beta_0 | \mu_0, \tau_0 &\sim N(\mu_0, 1/\tau_0) \\ \beta_1 | \mu_1, \tau_1 &\sim N(\mu_1, 1/\tau_1) \\ \beta_2 | \mu_2, \tau_2 &\sim N(\mu_2, 1/\tau_2) \\ \tau | \alpha, \gamma &\sim \text{Gamma}(\alpha, \gamma) \end{aligned} \tag{4.1}$$

Muodostetaan uskottavuusfunktio

$$L(y|\theta) = \prod_{i=1}^N N(\beta_0 + \beta_1 x_i + \beta_2 x_i, 1/\tau) \tag{4.2}$$

Ja posterioiri on siten

$$p(\theta|y) \propto p(\beta_0)p(\beta_1)p(\beta_2)p(\tau) \prod_{i=1}^N N(\beta_0 + \beta_1 x_i + \beta_2 x_i, 1/\tau) \tag{4.3}$$

Tästä saadaan sitten johdettua marginaaliset jakaumat otanta-algoritmia varten

$$\begin{aligned}
(4.4) \quad & \beta_0 | \beta_1, \beta_2, \tau_0, \tau, \mu_0, x, y \sim N \left(\frac{\tau_0 \mu_0 + \tau \sum_{i=1}^N (y_i - \beta_1 x_{i1} - \beta_2 x_{i2})}{\tau_0 + \tau N}, \frac{1}{\tau_0 + \tau N} \right) \\
& \beta_1 | \beta_0, \beta_2, \tau_1, \tau, \mu_1, x, y \sim N \left(\frac{\tau_1 \mu_1 + \tau \sum_{i=1}^N (y_i - \beta_0 - \beta_2 x_{i2}) x_{i1}}{\tau_1 + \tau \sum_{i=1}^N x_{i1}^2}, \frac{1}{\tau_1 + \tau \sum_{i=1}^N x_{i1}^2} \right) \\
& \beta_2 | \beta_0, \beta_1, \tau_2, \tau, \mu_2, x, y \sim N \left(\frac{\tau_2 \mu_2 + \tau \sum_{i=1}^N (y_i - \beta_0 - \beta_1 x_{i1}) x_{i2}}{\tau_2 + \tau \sum_{i=1}^N x_{i2}^2}, \frac{1}{\tau_2 + \tau \sum_{i=1}^N x_{i2}^2} \right) \\
& \tau | \beta_0, \beta_1, \beta_2, \alpha, \gamma, x, y \sim \text{Gamma} \left(\alpha + \frac{N}{2}, \gamma + \frac{N}{2} \sum_{i=1}^N (y_i - \beta_0 - \beta_1 x_{i1} - \beta_2 x_{i2})^2 \right)
\end{aligned}$$

Asetetaan hyperparametrit $\mu_0 = 80, \mu_1 = 0, \mu_2 = -5, \tau_0 = 1/50, \tau_1 = 1/50, \tau_2 = 1/50, \alpha = 5, \gamma = 0.01$. Parametrit on valittu sen mukaan, että ne asettavat suurimman tiheyden lähelle arvioitua sijaintia ja toisaalta eivät ole kovin informatiivisia vaan leveitä. Simuloidaan nyt tästä Gibbsin otanta-algoritmillä yhtälöitä 4.4 käyttäen 8 ketjua, kunkin pituus 20 000. Burnin-periodi olkoot 10 000. Yhteensä siis meillä on 80 000 otosta.

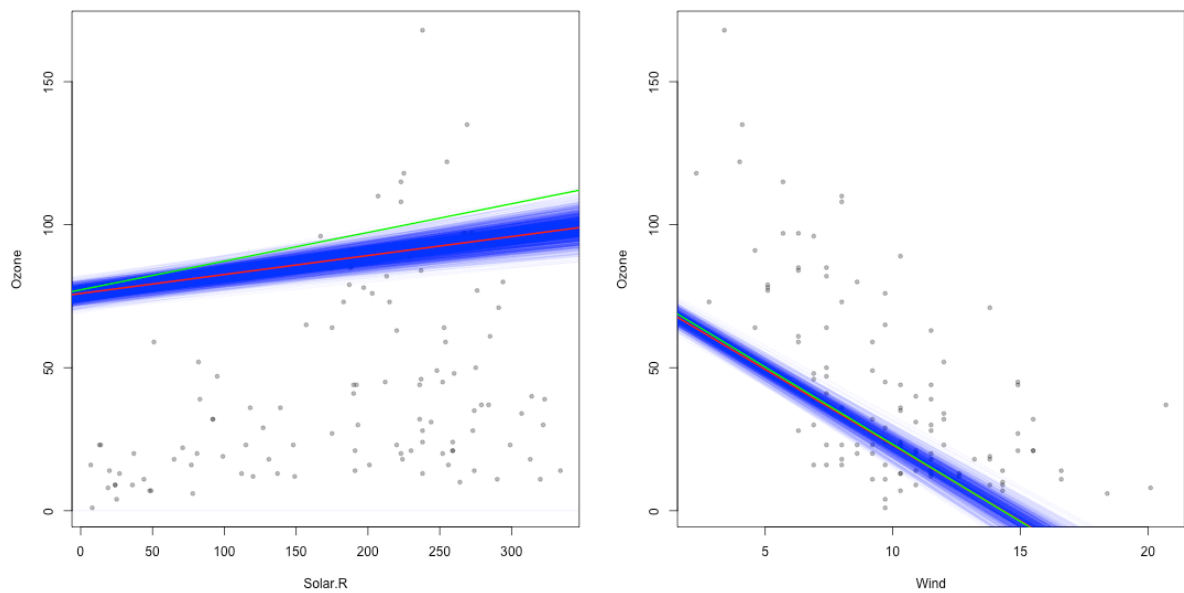
θ	Mean	SD	2.5%	25%	50%	75%	97.5%
β_0	75.95307	2.11884	72.06682	74.62170	75.95679	77.29428	79.82864
β_1	0.06646	0.01001	0.04698	0.05973	0.06645	0.07320	0.08612
β_2	-5.30405	0.20235	-5.68918	-5.43539	-5.30480	-5.17319	-4.92167
τ	0.00173	0.00022	0.00132	0.00158	0.00172	0.00188	0.00219

Taulukko 4.1: Tulokset regressiosta

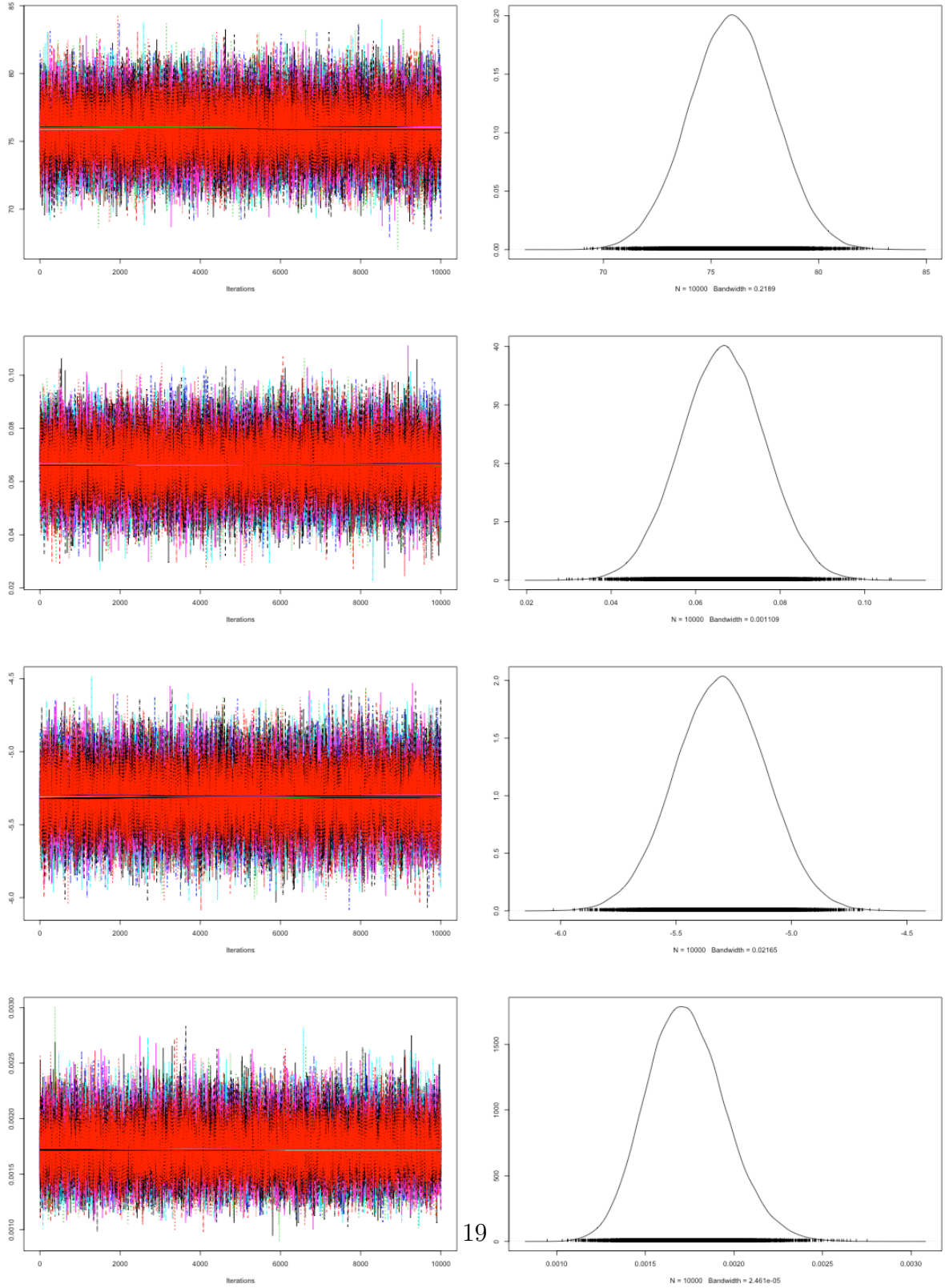
θ	\hat{R}	\hat{n}_{eff}
β_0	1	80008
β_1	1	80008
β_2	1	80008
τ	1	80008

Taulukko 4.2: Diagnostiikka

Taulukoissa 4.1 ja 4.2 nähdään tulokset ja MCMC-diagnostiikat, joista puhuttiin aiemmin. Nähdään, että ketjut näyttäisivät konvergoituneen, mikä ei sinänsä ihmetytä lainkaan, sillä simulaatio määrämme on valtava.



Kuva 4.1: Esimerkin regression tulos, vasemmalla *Solar.R* -akselilla ja oikealla *Wind*. Punainen viiva on posteriori keskiarvolla piiretty regressio viiva ja vihreä on vertailun vuoksi PNS mentelmällä sovitettu suora. Siniset ovat sovitteita parametrien eri ehdotus arvoilla.



Kuva 4.2: Esimerkin ketjut ja parametrien posteriori tiheydet

Luku 5

Loppusanat

Olemme nyt tarkastelleet perus ajatuksia MCMC-menetelmistä. Kävimme läpi hieman teoriaa, esittelimme algoritmit ja kokeilimme sellaista käytännön tilanteessa. Kuitenkin olemme vain raapaisseet pintaa. Käyttämämme algoritmit ovat monessa mielessä erittäin rajoittuneita. Gibbsin otanta-algoritmissa meidän tulee tuntea marginaalijakaumat analyttisesti, ja Metropolis–Hastings voi olla välillä hidas konvergoitumaan.

Tärkeitä laajennuksia, jotka korjaavat edellisessä kappaleessa mainitsemiani ongelmia, on myöhemmin kehitetyt tehokkaammat MCMC-metodit. Tärkeimpänä *Hamiltonian monte carlo* eli HMC. Se pyrkii vähentämään tarvittavien otosten määrää, joka tarvitaan tarpeeksi tarkan posteriori estimaatin saamiseksi.

Kirjallisuus

- [1] Andrew Gelman. *Bayesian Data Analysis*. 3. painos. ISBN: 978-1-4398-4095-5.
- [2] Donald Rubin Gelman Andrew. “Inference from Iterative Simulation using Multiple Sequences”. *Statistical Science* 7 (1992), s. 457–511.
- [3] Stephen Brooks Gelman Andrew. “General Methods for Monitoring Convergence of Iterative Simulations”. *Journal of Computational and Graphical Statistics* (joulukuu 1998). URL: <http://www.stat.columbia.edu/~gelman/research/published/brooksgelman2.pdf>.
- [4] Charles Geyer. “Practical Markov Chain Monte Carlo”. *Statistical Science* 7.4 (1992), s. 473–483.
- [5] Nicholas Metropolis. “Equation of state calculations by fast computing machines” (1953).
- [6] Petteri Piironen. *Stokastiset prosessit luentomoniste*.