kandi työotsikkko

Topias Karjalainen

11. 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**

Luku 1

Johdanto

Tilastotieteissä *frekventistinen* koulukunta oli pitkään vallitseva koulukunta. 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.

Tässä kanditutkielmassa aion selventää MCMC-menetelmien teoriaa, sekä esittää yleisimmät kaksi algoritmia: *Gibbs*- ja *Metropolis–Hastings* algoritmit.

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 $\{X_n\}_{n\in T}$

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

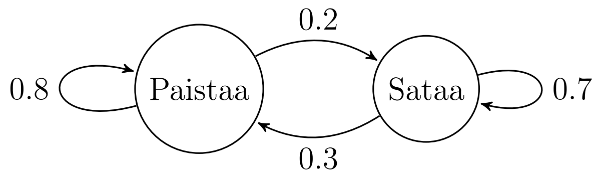
$$\lambda_i p_{ij} = \lambda_j p_{ji}, \forall i, j \in S \tag{2.25}$$

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

Esimerkki 2.27. Pohditaan lyhyttä esimerkkiä, jossa tilajoukko on $S = \{\text{"}sataa\text{"}, \text{"}paistaa\text{"}\}$. 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 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 $\mathbf{P} : S \times S \to [0, 1]$, joka kuvaa tilaparin $x, y \in S$ todennäköisyydeksi $p(x, y)$

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

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

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

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

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

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

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 $\int_S p(y,x)dx = 1$, joten

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

□

Luku 3

Metropolis–Hastings algoritmi

Kirjallisuutta