詳細つりあいの条件と MCMC

樋口さぶろお

龍谷大学大学院理工学研究科数理情報学専攻

理論物理学特論 L09(2014-06-13 Fri)

今日の目標

1. 詳細釣合の条件を説明できる
2. Metropolis-Hastings アルゴリズムに基づくプログラムを書ける

http://hig3.net

L08-Q1

Quiz(マルコフ過程)

次の遷移行列に従う $x = 1, 2, 3$ の 3 状態からなるマルコフ連鎖を考えよう.

$$T_1(x|x') = T_{xx'} = \begin{array}{c|ccc} x \backslash x' & 1 & 2 & 3 \\ \hline 1 & \frac{7}{10} & \frac{1}{10} & \frac{1}{30} \\ 2 & \frac{1}{5} & \frac{3}{5} & \frac{1}{5} \\ 3 & \frac{1}{10} & \frac{3}{10} & \frac{23}{30} \end{array}$$

1. 定常分布をひとつ求めよう.
2. 上の場合に, 自作のプログラムで直接に計算することにより, $P(x,t)$ を求めよう. 横軸 t, 縦軸 $P(x,t)$ で時間変化をグラフに描こう.
3. $P(1,0) = P(2,0) = P(3,0) = \frac{1}{3}$ のとき, $\vec{u}(t) = \begin{pmatrix} P(1,t) \\ P(2,t) \\ P(3,t) \end{pmatrix}$ を求めよう. 極限 $t \to \infty$ で定常分布に近づく?

L08-S1
Quiz 解答:マルコフ過程

1. 固有値 $\lambda = 1$ に対応する T の固有ベクトルで, 確率ベクトルの条件 $\sum_i u_i = 1$ より, $\vec{u}(\infty) = \frac{1}{6}\begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{pmatrix}$.
2.
3. a, b, c を初期条件から定まる定数として,

$$\vec{u}(t) = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 1 \\ -4 & 0 & 2 \\ 3 & 1 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} (\frac{2}{5})^t & & \\ & (\frac{2}{3})^t & \\ & & 1^t \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix}.$$

初期条件 $\vec{u}(0) = \frac{1}{3}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ より, $a = 0, b = -c = -\frac{1}{6}$ すなわち,

$$\vec{u}(t) = \frac{1}{6}\begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{pmatrix} - \frac{1}{6}(\frac{2}{3})^t \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}.$$

よって, $t \to \infty$ で定常状態に近づくことがわかる.

L08-Q3

Quiz(マルコフ過程)

次の遷移行列に従う $x = 1, 2$ の 2 状態からなるマルコフ連鎖を考えよう.

$$T_1(x|x') = T_{xx'} = \begin{array}{c|cc} x\backslash x' & 1 & 2 \\ \hline 1 & 0 & 1 \\ 2 & 1 & 0 \end{array}$$

1. 定常分布を求めよう.
2. 初期条件が $P(1,0) = \frac{1}{2} + q$, $P(2,0) = \frac{1}{2} - q$ で与えられるとき, $P(x,t)$ を求めよう.

L08-S3
Quiz 解答:マルコフ過程

1. 固有値 $\lambda = \pm 1$, 固有ベクトルはそれぞれ, $\boldsymbol{p} = \frac{1}{2}\binom{1}{1}, \binom{-1}{+1}$. よって, 定常状態は, $\boldsymbol{p} = \frac{1}{2}\binom{1}{1}$ のみ.
2. $T^t = \begin{pmatrix} +\frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ +\frac{1}{\sqrt{2}} & +\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} (+1)^t & 0 \\ 0 & (-1)^t \end{pmatrix} \begin{pmatrix} +\frac{1}{\sqrt{2}} & +\frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & +\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$. よって,
   $\boldsymbol{p}(t) = T^t \boldsymbol{p}(t) = \frac{1}{2}\binom{1}{1} + q(-1)^t \binom{+1}{-1}$

詳細つりあいの条件と MCMC

L09-Q1

Quiz(詳細つりあいの条件)

次の遷移行列に従う $x = 1, 2, 3$ の 3 状態からなるマルコフ連鎖を考えよう.

$$T_1(x|x') = T_{xx'} = \begin{array}{c|ccc} x\backslash x' & 1 & 2 & 3 \\ \hline 1 & \frac{7}{10} & \frac{1}{10} & \frac{1}{30} \\ 2 & \frac{1}{5} & \frac{3}{5} & \frac{1}{5} \\ 3 & \frac{1}{10} & \frac{3}{10} & \frac{23}{30} \end{array}$$

定常分布は

$$\vec{u} = \frac{1}{6}\begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{pmatrix}$$

である.

1. T は詳細つりあいの条件を満たすか考えよう.
2. 詳細つりあいの条件を満たし, 定常分布として $\vec{u}$ を持つ (別の)T をひとつ作ろう.
3. 詳細つりあいの条件を満たさず, 定常分布として $\vec{u}$ を持つ (別の)T

L09-Q2

Quiz(Metropolis-Hastings 法)

サンプルプログラムを書き替えて, Metropolis-Hastings 法で, 次の分布に従う標本を抽出してみよう. $\sim$ は比例を表す.

1. 離散 $p(x) \sim \sin\frac{x\pi}{10}$, $x = 1, \ldots, 9$.
2. 離散 $p(x) \sim x$, $x = 1, \ldots, 10$.
3. 連続 $p(x) \sim \max(0, 4 - x^2)$.
4. 連続 $p(x) \sim \mathrm{e}^{-x^2/2}$
5. 連続 $p(x) \sim \begin{cases} |x| & (|x| \le 2) \\ 0 & (|x| \ge 2) \end{cases}$