マルコフ連鎖のシミュレーション

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 L11(2014-06-27 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

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. $P(1,0) = P(2,0) = P(3,0) = \frac{1}{3}$ 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?
3. プログラムを作成して, 適当な初期条件のもと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. そのデータから, 定常状態や, そこへの収束の様子 (を表す指数) を求めることができるだろうか.

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. a, b, c を初期条件から定まる定数として,

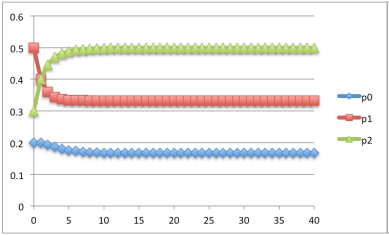
$$\vec{u}(t) = \begin{pmatrix}1 & -1 & 1\\ -4 & 0 & 2\\ 3 & 1 & 3\end{pmatrix}\begin{pmatrix}(\frac{2}{5})^t & & \\ & (\frac{2}{3})^t & \\ & & 1^t\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a\\b\\c\end{pmatrix}.$$

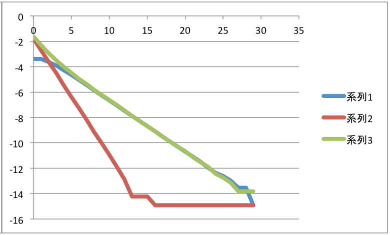
初期条件 $\vec{u}(0) = \frac{1}{3}\begin{pmatrix}1\\1\\1\end{pmatrix}$ より, $a = 0, b = -c = -\frac{1}{6}$ すなわち,

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

よって, $t \to \infty$ で定常状態に近づくことがわかる.

3.


0.6
0.5
0.4
0.3
0.2
0.1
0
0
5
10
15
20
25
30
35
40
p0
p1
p2


0
-2
-4
-6
-8
-10
-12
-14
-16
0
5
10
15
20
25
30
35
系列1
系列2
系列3

マルコフ連鎖のシミュレーション

Metropolis-Hastings

$x = 1, 2, \dots, N.$

$$T(x|x') = \begin{cases} \frac{1}{N-1} \min\left(\frac{p(x)}{p(x')}, 1\right) & (x \neq x') \\ 1 - \sum\limits_{x''(\neq x')} T(x''|x') & (x \neq x') \end{cases}$$

数式内の変数の置換 ($x \leftrightarrow x'$) 後の式

$$T(x'|x) = \begin{cases} \frac{1}{N-1} \min\left(\frac{p(x')}{p(x)}, 1\right) & (x' \neq x) \\ 1 - \sum\limits_{x''(\neq x)} T(x''|x) & (x' \neq x) \end{cases}$$

この遷移確率は詳細つりあいを満たす

Metropolis-Hastings(重み付き)

$x = 1, 2, \dots, N$.

$$T(x|x') = \begin{cases} g(x|x') \min\left(\frac{p(x)}{p(x')}\frac{g(x'|x)}{g(x|x')}, 1\right) & (x \neq x') \\ 1 - \displaystyle\sum_{x''(\neq x')} T(x''|x') & (x \neq x') \end{cases}$$

g は ‘ergodic’ な条件つき確率. $\displaystyle\sum_{x'=1}^{N} g(x'|x) = 1,\ g(x|x) = 0.$

L11-Q1

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 $p(x) \sim \sin \frac{x\pi}{10}$, $x = 1, \dots, 9$.
2. 離散 $p(x) \sim x$, $x = 1, \dots, 10$.
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 $p(x) \sim \begin{cases} |x| & (|x| \leq 2) \\ 0 & (|x| \geq 2) \end{cases}$