Pythonで体験するベイズ推論

3.2~3.4

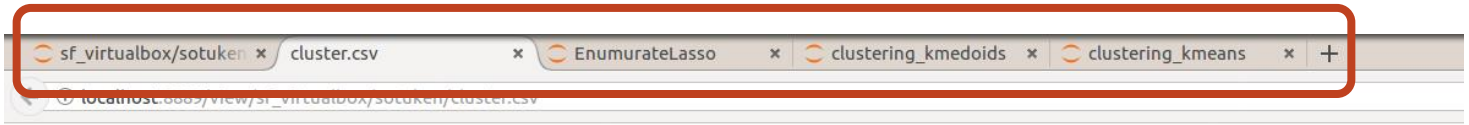
秋山研 B4　　多治見 隆志

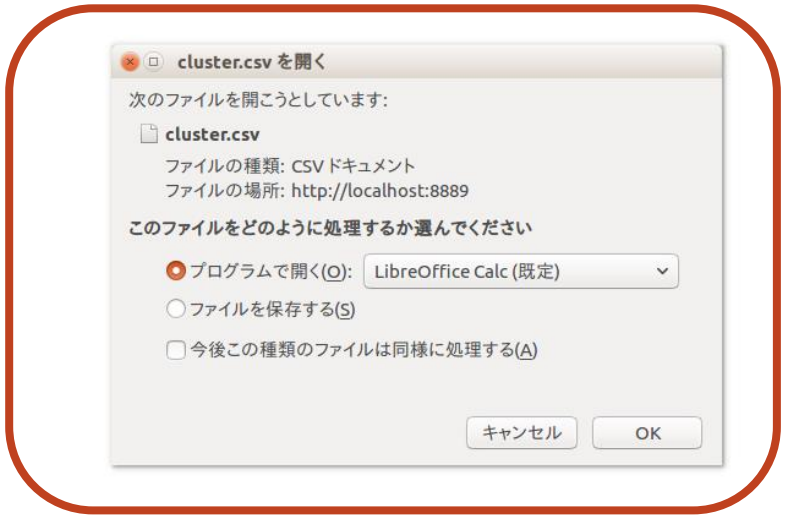
その前に…

jupyterlabのススメ

jupyter notebookを使うと…

ブラウザのタブがめっちゃ増える…

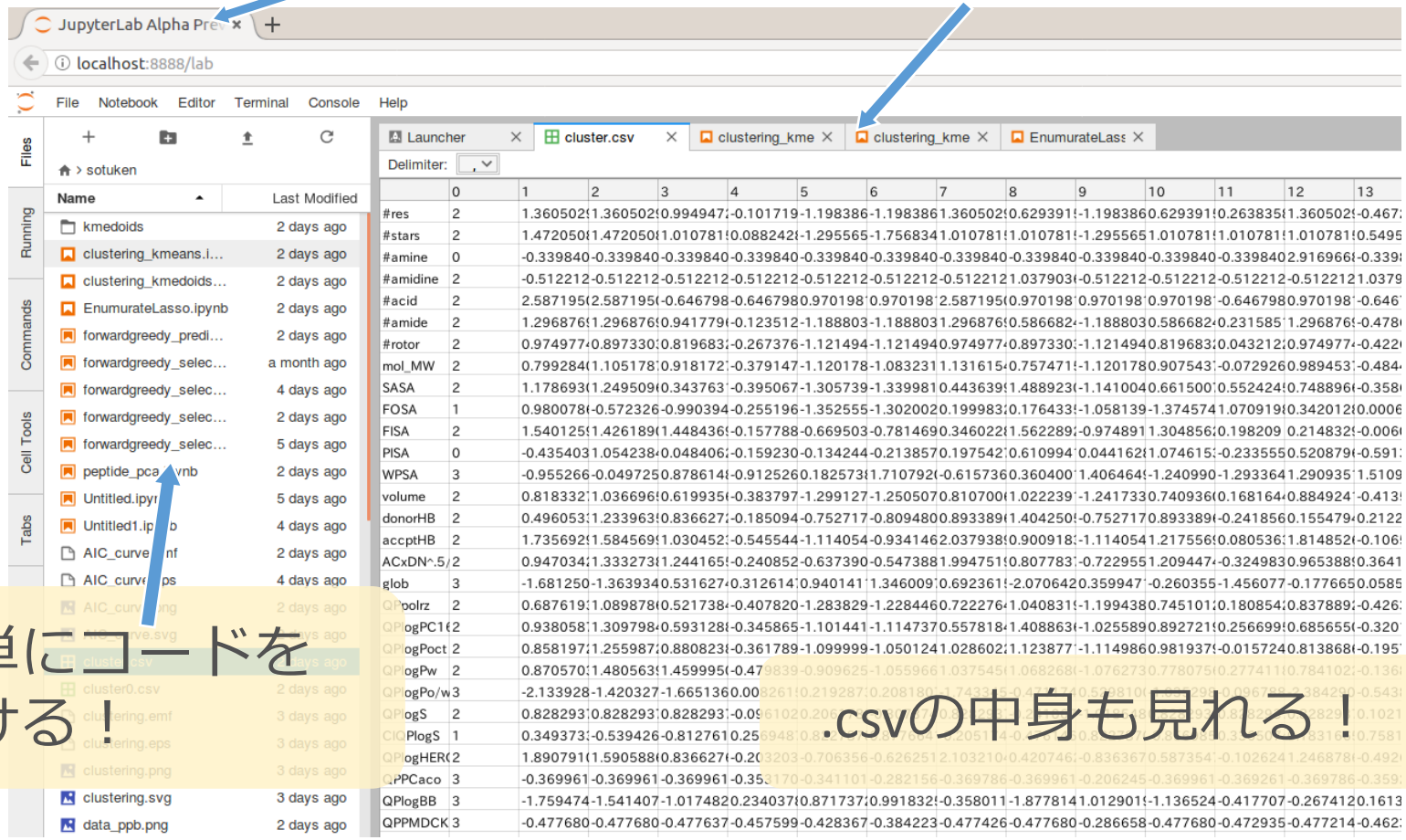




.csvがjupyterで開けない…

- 便利だけど細かい所で不便な感じ…

jupyter labなら！



インストールもたった３手順！

1. `pip install jupyterlab`

2. `jupyter serverextension enable --py jupyterlab --sys-prefix`

   (2.は１行，何してるかよく分かってない)

3. `jupyter lab` （起動）

快適なjupyterlabライフを！

というわけで本題を始めます

自己相関

自己相関$R(t,k)$は以下のように定義される

$$R(t,k) = Corr(x_t, x_{t-k})$$

$$Corr(X,Y) = \frac{\sigma_{XY}}{\sigma_X \sigma_Y}$$

- 時刻tにおけるデータ列x_tと時刻$t-k$における
  データ列x_{t-k}の間の相関

Example

以下の二つのデータ列について考える

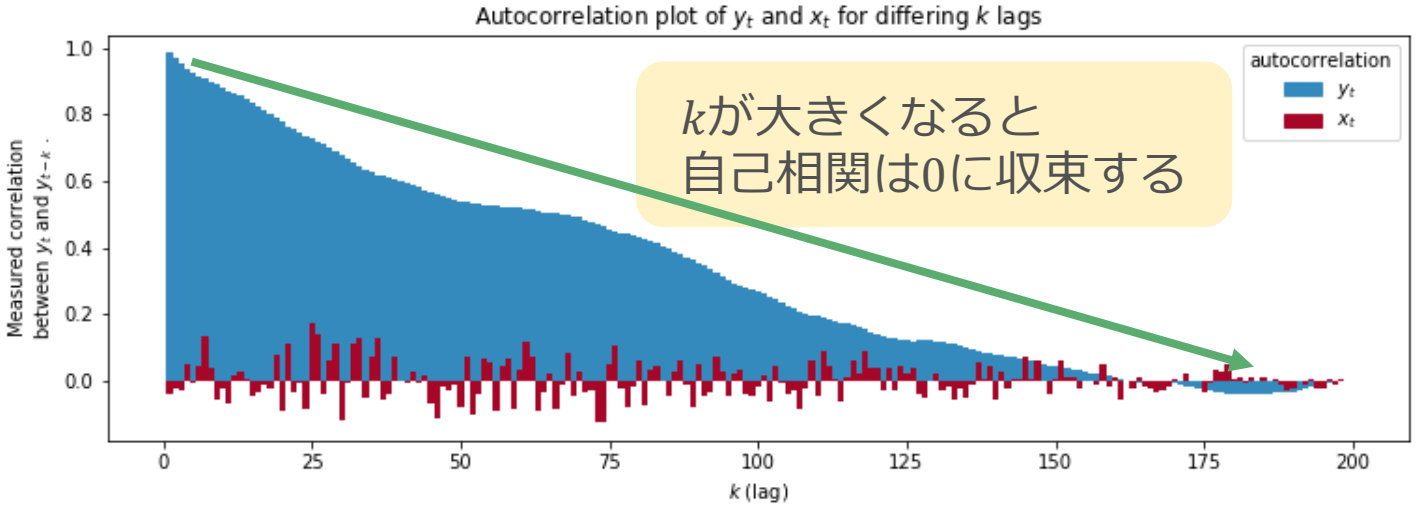
$$x_t \sim Normal(0,1), x_0 = 0$$
$$y_t \sim Normal(y_{t-1},1), y_0 = 0$$

- x_tはx_{t-k}に明らかに相関しない（独立）
- y_tはy_{t-k}に相関してそう（自己相関）

Example

- y_tは前のデータに依存しているようにみえる
- x_tは前のデータに依存せずランダムな値を取っているように見える

y_tとx_tの自己相関



- y_tはkが小さいほど大きな自己相関を持つことがわかる
- x_tにはkに関わらずほぼ自己相関はない

MCMCの収束

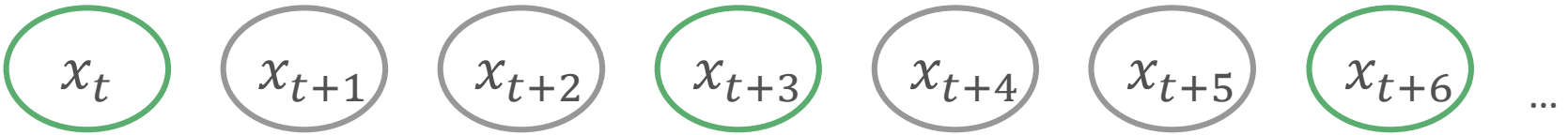
- MCMCアルゴリズムの性質上得られるサンプルは自己相関を持つ
- 後処理のアルゴリズムはサンプルに自己相関がないことを仮定している
- 自己相関を避けるために**間引き処理**を行う

間引き処理 (thinning)

nサンプルごとに間引いた系列を利用することで

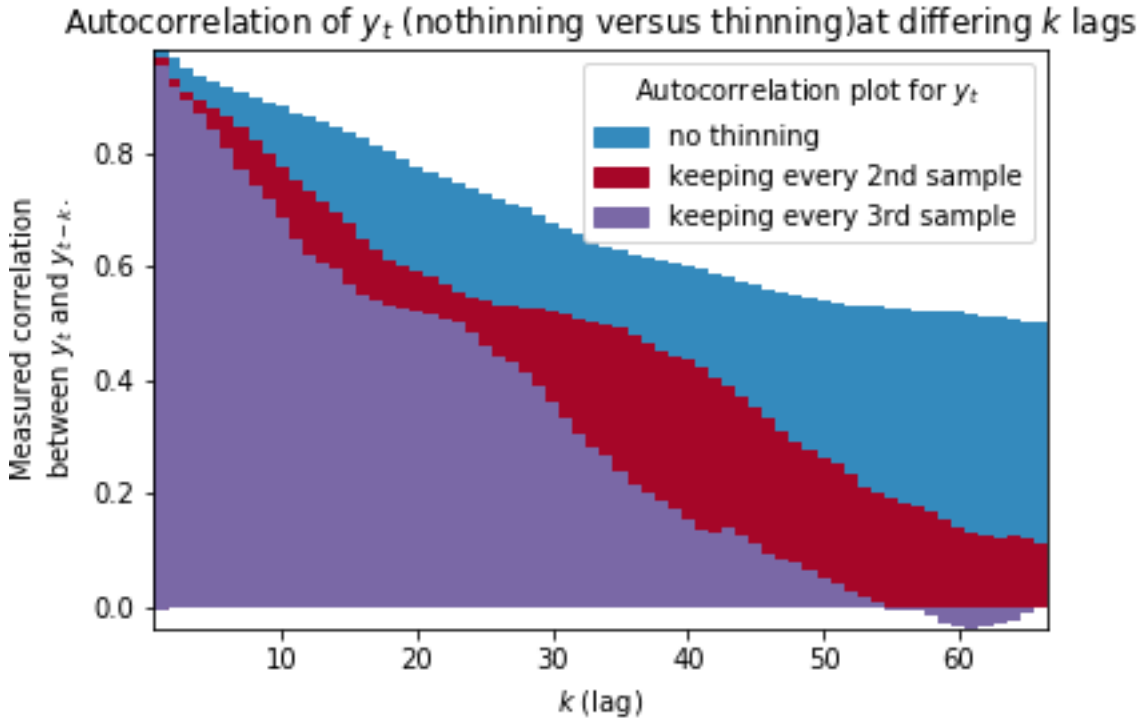
自己相関を抑える

（kが大きくなると自己相関が0に収束していくことを思い出したい）



$n = 3$のときの例

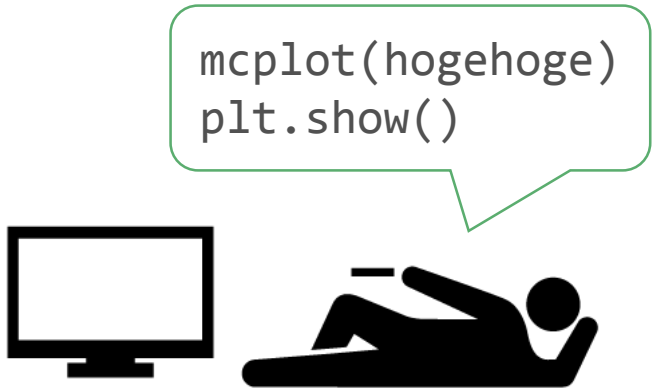
間引き処理の結果



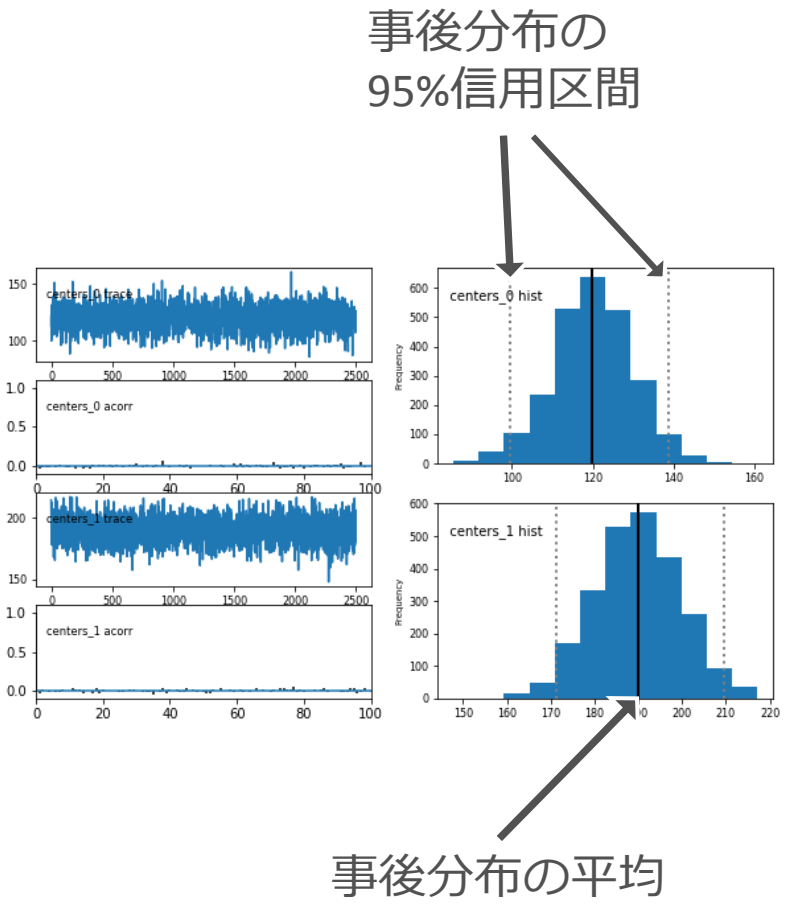
- 間引きを行うことで自己相関の収束が早くなる

可視化ツール

- pymcでは以下のものを可視化できる
  - ヒストグラム
  - 自己相関
  - 軌跡



可視化の例



これを用いて様々なことがわかる

- 軌跡から収束を見る
- ヒストグラムから妥当な事後分布か見る
- 自己相関を見る

MCMCの収束判定

教科書に載ってないおまけ

- Raftery and Lewisの診断
- Gelman-Rubin統計量
- Gewekeの診断

†目で見る†とか信用できねえ！
って人はこちらでどうぞ

Raftery and Lewisの診断

- 分位点を使った診断
- 一定数以上のMCMC連鎖が必要 (Lower Bound)
  - 正の相関があると連鎖の必要数が増える
  - Dependenceが自己相関の指標
    - 5より大きいと自己相関が強い

```
> raftery.diag(MCMC01)

Quantile (q) = 0.025
Accuracy (r) = +/- 0.005
Probability (s) = 0.95

            Burn-in  Total  Lower bound  Dependence
            (M)      (N)    (Nmin)       factor (I)
(Intercept) 2        3741   3746         0.999
X1          2        3771   3746         1.010
sigma2      2        3865   3746         1.030
```

Gelman-Rubin統計量

- ２つ以上の連鎖が必要
- 連鎖同士の平均量と個々の連鎖の値を比較
- 統計量が１に近ければ収束しているとみなす

Gewekeの診断

- 連鎖内で適当な分位点同士の差の検定を行う

なんかいっぱいあったけどよくわかんねー

MCMCの†コツ†

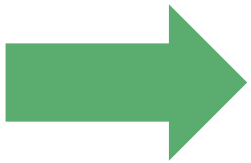
良い初期値から始める

- 悪い初期値を用いると収束しない
- とりあえず困ったらMAP推定値を使おう

今日もMCMCが収束しない…

事前分布の選び方

- 事前分布が悪いと収束しないことがある
  - パラメータが真の値に対して確率が全く割り当てられていない事前分布を用いた場合、事後確率は 0 になる



収束が悪かったり、サンプルが密集している場合は事前分布を選び直したほうがよい

今回のまとめ

- MCMCサンプリングは自己相関が起こるので間引き処理をしよう
- 可視化することで簡単に収束を確認しよう
- 事前分布や初期値は気をつけて選ぼう