Chapter 3. マルコフ連鎖モンテカルロ法 (古澄 2015)　　　　2019.2.21

MCMC はその名の通り「マルコフ連鎖」と「モンテカルロ法(積分)」を組み合わせた手法である

◦モンテカルロ法

確率変数 x の任意の関数を $g(x)$ と表し、ある確率分布 $h(x)$ に関する期待値

$$r = E_{h(x)}[g(x)] = \int_{\mathcal{X}} g(x)h(x)\,dx \quad , \quad x \in \mathcal{X} \in R^k$$

を求めることを考える。

$h(x)$ からサンプリングを行い、その系列を $(x^{(1)}, \dots, x^{(T)})$ とすると、

$$\hat{r} = \frac{1}{T}\sum_{t=1}^{T} g(x^{(t)})$$

は求めたい期待値の一つの推定値と言える。このとき $T \to \infty$ を考えると、

大数の法則により、$\hat{r} \xrightarrow{a.s.} r$ となる

このようにして積分を求める方法をモンテカルロ法と呼ぶ。

◦マルコフ連鎖

確率変数の系列を $\{x^{(0)}, x^{(1)}, \dots\}$ (簡単のために $x^{(t)}$ は1次元とする) とし、

その取りうる値を $\mathcal{X} = \{1, \dots, k\}$ とする

このとき、確率過程 $\{x^{(0)}, x^{(1)}, \dots\}$ が全ての $i, j \in \mathcal{X}$ と $t \geq 0$ に対して

$$P(x^{(t+1)} = j \mid x^{(0)} = i_0, x^{(1)} = i_1, \dots, x^{(t)} = i) = P(x^{(t+1)} = j \mid x^{(t)} = i)$$

を満たすとき、$\{x^{(0)}, x^{(1)}, \dots\}$ はマルコフ連鎖であると言う

状態 i から j への推移確率を

$$P(i,j) = P(x^{(t+1)} = j \mid x^{(t)} = i) \quad , P(i,j) \geq 0$$

とし、これを (i,j) 要素に持つ $k \times k$ 行列を推移行列と呼ぶ

$$T = \begin{pmatrix} P(1,1) & \cdots & P(1,k) \\ \vdots & & \vdots \\ P(k,1) & \cdots & P(k,k) \end{pmatrix} \quad , \quad \sum_{j=1}^{k} P(i,j) = 1$$

t期の状態 $x^{(t)}$ の確率分布を

$$\pi^{(t)} = (\pi_1^{(t)}, \cdots, \pi_k^{(t)}) = (P(x^{(t)}=1), \cdots, P(x^{(t)}=k))$$

と表す。$x^{(1)}$ の確率分布 $\pi^{(1)}$ について考えると、

$$\begin{aligned}\pi_j^{(1)} &= P(x^{(1)}=j) \\ &= \sum_{i=1}^{k} P(x^{(0)}=i)\,P(x^{(1)}=j \mid x^{(0)}=i) \\ &= \sum_{i=1}^{k} \pi_i^{(0)} P(i,j)\end{aligned}$$

$$\therefore \pi^{(1)} = \left(\sum_{i=1}^{k} \pi_i^{(0)} P(i,1), \cdots, \sum_{i=1}^{k} \pi_i^{(0)} P(i,k)\right) = \pi^{(0)} T$$

$\pi^{(2)}$ についても $\pi^{(2)} = \pi^{(1)} T = \pi^{(0)} T^2$ であることから、これをくり返せば

$\pi^{(t)} = \pi^{(0)} T^t$ が導かれる。

◦ マルコフ連鎖モンテカルロ法

MCMCとの関連を考えたときに、$t \to \infty$ で $\pi^{(t)}$ が不変分布 π に収束するか否かが問題となってくる。ここで $\pi = (\pi_1, \cdots, \pi_k)$ が

$$\begin{cases} \cdot\ \pi_i \geq 0 \quad (i \in \mathcal{X}), \quad \sum_{i=1}^{k} \pi_i = 1 \\ \circ\ \pi = \pi T \end{cases}$$

を満たすとき、π は T の不変分布であるという。

マルコフ連鎖が下の2つの性質を満たしているとき、不変分布が一意に存在する

- ◦ 既約性

  全ての $i, j \in \mathcal{X}$ について、$(T^n)_{ij} > 0$ を満たす有限の n が存在する。

- ◦ 非周期性

  全ての $i \in \mathcal{X}$ について、$\{n \geq 1 : (T^n)_{ii} > 0\}$ で定義される集合の最大公約数が1である。

  元の状態に戻るのに必要なステップ数の集合

まとめてエルゴード性とも言う

ここまでの議論で、確率分布π（例えば、求めたいパラメータの事後分布）から
サンプリングを行うためには、

『既約性と非周期性を満たし、πを不変分布とする推移行列』

を作ればよいと分かる。（$x^{(0)}, x^{(1)}, \cdots$）をサンプリングしてマルコフ連鎖を生成すれば、十分に大きいtに関して、（$x^{(t+1)}, x^{(t+2)}, \cdots$）は求めたい確率分布である$\pi$からのサンプルとなることが保証されている。

しかし、既約性と非周期性を満たす推移行列の設計は実はさほど難しくない
むしろ、所与のπを不変分布とする推移行列の設計の方が問題である

所与の確率分布πが推移行列Tの不変分布となるための十分条件は、

$$\pi_i P(i,j) = \pi_j P(j,i) \qquad , \; i,j \in \mathcal{X}$$

で与えられる。この条件を詳細釣り合い条件と言い、この条件を満たすマルコフ連鎖を可逆であると言う

これは両辺iに関して和を取れば

$$\sum_{i=1}^{k} \pi_i P(i,j) = \sum_{i=1}^{k} \pi_j P(j,i) = \pi_j \sum_{i=1}^{k} P(j,i) = \pi_j$$

どの状態iからjに推移しても同じ分布πになっている。

$$\therefore \pi T = \pi$$

となることを確認できるので十分条件であると分かる

ここまで離散的な状態空間を考えていたが、連続に拡張しても同様のことが言える（具体的にはMHアルゴリズムの項で）

◦MHアルゴリズム

確率分布$\pi(x)$からのサンプリングを行いたいとする。これを目標分布と呼ぶ。しかし、一般に積分評価が難しく、サンプリングが容易でない場合が多い。そこで、MHアルゴリズムでは、サンプリングが容易な提案分布$q(y|x)$とMCMCを用いて$\pi(x)$からのサンプリングを達成する。

・アルゴリズム

初期値$x^{(0)}$を決め、$t=0,1,\ldots$に対して以下をくり返す。

1. yを$q(y|x)$から発生させる
2. uを一様分布$U(0,1)$から発生させる
3. $$x^{(t+1)} = \begin{cases} y & \text{if } u \leq \alpha(x^{(t)}, y) \\ x^{(t)} & \text{otherwise} \end{cases}$$ ただし、 $$\alpha(x,y) = \min\left\{1, \frac{\pi(y)q(x|y)}{\pi(x)q(y|x)}\right\}$$

MHアルゴリズムでは$q(y|x)$を事前に決める必要があり、いくつかの方法が提案されているが、例えば次のようなものがある。

・酔歩連鎖

目標分布$\pi(x)$だとして、現在の状態が$x^{(t)}=x$のとき、

$$y = x + \varepsilon \quad , \quad \varepsilon \sim N(0, \sigma^2 I)$$

として候補を発生させる。このとき$q(y|x)=q(x|y)$が成り立つので、

$$\alpha(x,y) = \min\left\{1, \frac{\pi(y)}{\pi(x)}\right\}$$

となる。ここでσ^2はハイパーパラメータであり、採択確率が高くなりすぎず、低くなりすぎもしないように調整される。

↳ 経験的には30%〜50%が良いとされる。

・独立連鎖

提案分布を$q(y|x)=q(y)$として現在の値に関係なく発生させる方法であり、採択確率は

$$\alpha(x,y)=\min\left\{1,\frac{\pi(y)q(x)}{\pi(x)q(y)}\right\}$$

となる。採択確率が高くなるように$q(y)$を選ぶ必要があり、具体的には

- パラメータの事前分布
- 平均が$mode(x)$、共分散行列が$\left\{-\frac{\partial \log \pi(x)}{\partial x \partial x'}\right\}^{-1}$の多変量t分布

などがよく用いられる

◦ 連続状態空間のマルコフ連鎖とMHアルゴリズムの合理性

連続状態空間のマルコフ連鎖を考える場合は、推移行列の代わりに

$$P(x^{(t+1)}\in A \mid x^{(t)}=x)=\int_A T(x,y)\,dy \quad , \quad x, A\in \mathcal{X}$$

を満たす推移カーネル$T(x,y)$を考える。このとき$T(x,y)$の不変分布は

$$\pi(y)=\int_{\mathcal{X}}\pi(x)T(x,y)\,dx$$

を満たす確率分布$\pi(x)$として定義される。さらに、詳細釣り合い条件は

$$\pi(x)T(x,y)=\pi(y)T(y,x)$$

によって与えられる

一般に、MCMCを行うとき、目標分布$\pi(x)$が(正規化定数を除いて)既知であり、推移カーネル$T(x,y)$が未知である

MHアルゴリズムは提案分布$q(x,y)$を用いて詳細釣り合い条件を満たす$T(x,y)$を探すものであると言える。

しかし、単に $T(x,y)$ を $q(x,y)$ に置き換えただけでは うまくいかない。

例えば、

$$\pi(x)q(x,y) > \pi(y)q(y,x)$$

となってしまう。これをどうにか等号にする調整メカニズムを考える。

x から y に推移する確率が高いので、左辺に $\alpha(x,y) < 1$ を掛け、

ただし、右辺にも $\alpha(y,x)=1$ を掛ける。すると、

$$\pi(x)q(x,y)\alpha(x,y) = \pi(y)q(y,x)\underbrace{\alpha(y,x)}_{=1}$$

$$\therefore \alpha(x,y) = \frac{\pi(y)q(y,x)}{\pi(x)q(x,y)}$$

したがって、常に詳細釣り合い条件を成り立たせるためには、

$$\alpha(x,y) = \min\left\{1, \frac{\pi(y)q(y,x)}{\pi(x)q(x,y)}\right\}$$

と決めればよい。