

時系列解析・マルコフ連鎖モンテカルロ法

樋口さぶろお <https://hig3.net>

龍谷大学大学院 先端理工学研究科 数理・情報科学コース

計算科学特論 L13(2025-12-17 Wed)

最終更新: Time-stamp: "2025-12-04 Thu 17:08 JST hig"

今日の目標

- AR(1) モデルの母/標本自己相関係数を計算できる
- マルコフ連鎖モンテカルロ法を説明できる
- 詳細つりあいの条件を説明できる



L12-Q1

Quiz 解答: 移動平均

実は問題の $x(t)$ はこうやって作ってました. 周期が 4 だから, 4 次の移動平均でトレンドをだいたい回復できるでしょ.

t	0	1	2	3	4	5	6	7	8	
トレンド	0.0	0.2	0.4	0.6	0.8	1.0	1.2	1.4	1.6	
周期	2.0	-2.0	2.0	-2.0	2.0	-2.0	2.0	-2.0	2.0	-
ノイズ	-0.2	0.2	0.2	0.2	0.2	-0.2	0.2	-0.2	0.2	
x	1.8	-1.6	2.6	-1.2	3.0	-1.2	3.4	-0.8	3.8	
y_3		0.9	-0.1	1.5	0.2	1.7	0.5	2.1	1.0	
y_4			0.0	0.8	0.9	1.1	1.2	1.5		

ここまで来たよ

12 時系列解析

- 自己回帰モデル $AR(m)$
- 時系列データの分析方法 (2) 標本自己相関係数

13 時系列解析・マルコフ連鎖モンテカルロ法

- マルコフ連鎖モンテカルロ法
- メトロポリス・ヘイスティングス法

1 次の自己回帰モデル AR(1)

確率過程の単純な例

定義 (1 次の自己回帰モデル AR(1))

$t = 0, 1, 2, \dots$: 時刻

$\{\epsilon_t\}_{t=1, \dots}, \{X_t\}_{t=0, 1, \dots}$: 連続型確率変数の列

$\phi_1 \in \mathbb{R}$: パラメタ

$X_t (t \geq 0)$ は次のように定まる.

$$X_{t+1} = \phi_1 \cdot X_t + \epsilon_{t+1}. \quad (t \geq 0)$$

ただし ϵ_t は WN1, WN2, PI を満たす.

変数が過去の目的変数自身であることから **自己回帰** (auto regression).
過去に最大 $m = 1$ まで遡ることから, AR(m) の $m = 1$.

例

- $t = \text{シーズン}$, $X_t = \text{タイガースの勝率の5割との差}$, $-1 < \phi < 0$.

AR(1) の漸化式の計算

$$\begin{aligned} X_t &= \phi_1 X_{t-1} + \epsilon_t \\ &= \phi_1 (\phi_1 X_{t-2} + \epsilon_{t-1}) + \epsilon_t \\ &= \phi_1 (\phi_1 (\phi_1 X_{t-3} + \epsilon_{t-2}) + \epsilon_{t-1}) + \epsilon_t \\ &= \dots \\ &= \phi_1^t X_0 + \phi_1^{t-1} \epsilon_1 + \phi_1^{t-2} \epsilon_2 + \dots + \phi_1^0 \epsilon_t \\ &= \phi_1^t X_0 + \sum_{k=0}^{t-1} \phi_1^k \epsilon_{t-k} \end{aligned}$$

AR(1) の母平均値, 母分散

$$E[X_t] = E[\phi_1^t X_0 + \sum_{k=0}^{t-1} \phi_1^k \epsilon_{t-k}] X_0 \quad (\text{WN1})$$

$$\begin{aligned} V[X_t] &= V[\phi_1^t X_0 + \sum_{k=0}^{t-1} \phi_1^k \epsilon_{t-k}] \\ &= V[\phi_1^t X_0] + \sum_{k=0}^{t-1} V[\phi_1^k \epsilon_{t-k}] \quad (\text{WN2, PI}) \\ &= \phi_1^{2t} V[X_0] + \sum_{k=0}^{t-1} \phi_1^{2k} \sigma^2 \quad (\text{WN2}) \\ &= \phi_1^{2t} V[X_0] + \frac{1 - \phi_1^{2t}}{1 - \phi_1^2} \sigma^2 \quad (\phi_1 \neq 1 \text{ のとき}) \end{aligned}$$

$|\phi_1| < 1$ ならば, $t \rightarrow +\infty$ で, $E[X_t] \rightarrow 0$, $V[X_t] \rightarrow \frac{1}{1-\phi_1^2} \sigma^2$ となり時間によらなくなる可能性. 以下, 簡単のため $E[X_0] = E[X_t] = 0$ と仮定.

時系列モデルの自己共分散

定義 (母自己共分散, 母自己相関係数)

時系列 $\{X_t\}$ に対して, k 次の

- 母自己共分散 (auto covariance) $\text{Cov}[X_t, X_{t-k}]$.

- 母自己相関係数

$$(\text{autocorrelation}) r_t(k) = \frac{\text{Cov}[X_t, X_{t-k}]}{\sqrt{\text{V}[X_t]\text{V}[X_{t-k}]}} \stackrel{\text{定常なとき}}{=} \frac{\text{Cov}[X_t, X_{t-k}]}{\text{Cov}[X_t, X_t]} = r(k).$$

$k = 0$ 次の母自己共分散はふつうの母分散, 母自己相関係数は 1.

k をラグ (lag) という.

時系列の定常性

定義 (時系列の (弱い意味での) 定常性)

時系列 $\{X_t\}$ が (弱い意味で) **定常** (stationary) であるとは、次の両方を満たすこと.

- 母平均値 $E[X_t]$ が t によらないこと.
- 各ラグ k に対して, k 次の母**自己共分散** (auto covariance) $\text{Cov}[X_t, X_{t-k}]$ が t によらないこと.
- 分布や高次のモーメントは t に依存してもよい (依存しない $\Leftrightarrow$ 強い意味での定常性)

AR(1) の母自己共分散

$$\begin{aligned}\text{Cov}[X_t, X_{t-k}] &= \text{E}[X_t X_{t-k}] \\ &= \text{E}\left[\left(\phi_1^t X_0 + \sum_{m=0}^{t-1} \phi_1^m \epsilon_{t-m}\right) \times \left(\phi_1^{t-s} X_0 + \sum_{\ell=0}^{t-s-1} \phi_1^\ell \epsilon_{t-s-\ell}\right)\right]\end{aligned}$$

展開すると 0 にならないのは, $\text{E}[X_0 X_0]$, $\text{E}[\epsilon_k \epsilon_k] = \sigma^2$ のみ.

$$\begin{aligned}\text{Cov}[X_t, X_{t-k}] &= \phi_1^{2t-k} \text{E}[X_0 X_0] + (\phi_1^{2t-2k-2} + \phi_1^{2t-2k-4} + \dots + \phi_1^0) \phi_1^k \sigma^2 \\ &= \phi_1^{2t-k} \text{E}[X_0 X_0] + \frac{1 - (\phi_1^2)^{t-k}}{1 - \phi_1^2} \phi_1^k \sigma^2 \quad (|\phi_1| \neq 1) \\ &\rightarrow \begin{cases} \frac{\phi_1^k \sigma^2}{1 - \phi_1^2} & (|\phi_1| < 1) \\ \approx t & (|\phi_1| = 1) \\ \approx t \phi_1^{2t} & (|\phi_1| > 1) \end{cases}\end{aligned}$$

$|\phi_1| < 1$ のとき, $t \rightarrow +\infty$ で定常.

AR(1) モデルの母自己相関係数

k 次の母自己相関係数

$$r(k) = \frac{\text{Cov}[X_t, X_{t-k}]}{\sqrt{V[X_t]}\sqrt{V[X_{t-k}]}} \stackrel{\text{定常}}{=} \frac{E[X_t X_{t-k}]}{E[X_t X_t]} = \phi_1^k.$$

L12-Q2

Quiz(自己回帰モデル $AR(2)$ の例)

2 次の自己回帰モデル $AR(2)$ モデルを考える (授業中に使った記号で). 初期条件として, X_0, X_1 は定数 0 に等しいとしてよい ($P(X_0 = 0) = P(X_1 = 0) = 1$).

- ① 確率変数 X_2 を, ϵ_t と ϕ_k で表そう.
- ② 母期待値 $E[X_3^2]$ を σ と ϕ_k で表そう.
- ③ 母自己共分散 $\text{Cov}[X_3, X_4]$ を σ と ϕ_k で表そう.

ここまで来たよ

12 時系列解析

- 自己回帰モデル $AR(m)$
- 時系列データの分析方法 (2) 標本自己相関係数

13 時系列解析・マルコフ連鎖モンテカルロ法

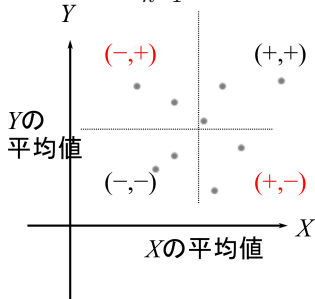
- マルコフ連鎖モンテカルロ法
- メトロポリス・ヘイスティングス法

復習: 標本共分散と標本相関係数

標本共分散 (covariance)

$$x, y \text{ の共分散 } C_{xy} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x}) \times (y_i - \bar{y})$$

(不偏なら $\frac{1}{n-1}$)



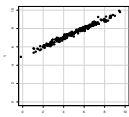
$(+, -) = (x_i - \bar{x} \text{ の符号}, y_i - \bar{y} \text{ の符号})$.

相関係数

$$\text{標本相関係数 } r = \frac{C_{xy}}{s_x s_y}$$

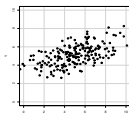
s_x, s_y : 標本標準偏差

分子分母で $\frac{1}{n}$, 不偏 $\frac{1}{n-1}$ をそろえる.



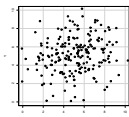
強い正の相関

$$r = 0.99$$



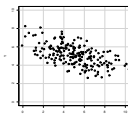
弱い正の相関

$$r = 0.55$$



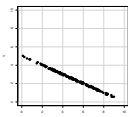
無相関

$$r = 0$$



弱い負の相関

$$r = -0.55$$



強い負の相関

$$r = -0.99$$

相関

‘正の相関’: x が大きい $\Leftrightarrow y$ が**大きい**

‘負の相関’: x が大きい $\Leftrightarrow y$ が**小さい**

強い/弱い: 傾向がはっきりしている/していない

標本自己共分散, 標本自己相関係数

k 次の標本自己共分散・標本自己相関係数

時間 t を, **ラ**グ k だけずらした x_t, x_{t-k} を 2 変量データだと思って, 標本共分散・標本自己相関係数を考えたもの

$k = 1$ の例

x	y
x_1	—
x_2	x_{2-1}
x_3	x_{3-1}
$\vdots$	$\vdots$
x_{T-1}	x_{T-1-1}
x_T	x_{T-1}
—	x_T

k の例

x	y
x_1	—
$\vdots$	
x_{k+1}	x_1
$\vdots$	$\vdots$
x_T	x_{T-k}
$\vdots$	
—	x_T

k 次の標本自己共分散 autocovariance

$$C(k) = \frac{1}{T-k} \sum_{t=k+1}^T (x_t - \bar{x})(x_{t-k} - \bar{x})$$

$$\text{ただし標本平均値 } \bar{x} = \frac{1}{T} \sum_{t=1}^T x_t$$

k 次の標本自己相関係数 (標本自己相関関数) autocorrelation

$$r(k) = \frac{\text{自己共分散}}{\sqrt{\text{分散}}\sqrt{\text{分散}}} = \frac{C(k)}{C(0)}$$

$C(0)$ は $x(t)$ をサイズ T の標本と思ったときの分散.

コレログラム correlogram

横軸 ラグ k , 縦軸 k 次の標本自己相関係数 $r(k)$ のグラフ.

- 多くの定常モデル (自己回帰モデルなど) では, k が大きいほど (遠い時刻ほど), 標本自己相関係数 $r(k)$ の絶対値は小さくなる.

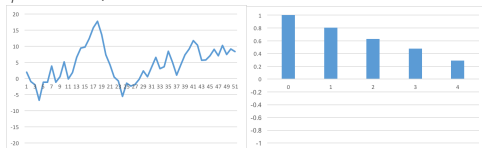
Python tsa=Time Series Analysis 時系列解析

自己相関係数 `statmodels.tsa.stattools.acf(df['x'])`

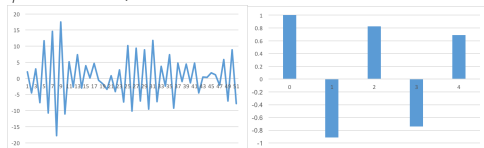
コレログラム `statmodels.graphics.tsa.plot_acf(df['x'])`

サンプルパスの $t-X_t$ グラフと、下で説明する方法で推定した $k-r(k)$ グラフ
 $\phi = 0.9, \sigma = 1$

フ (コレログラム)



$\phi = -0.9, \sigma = 1$



$\phi = 0.2, \sigma = 1$



$\phi = 0.2, \sigma = 3$



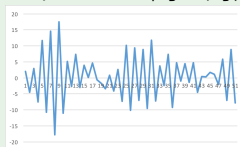
L12-Q3

Quiz(コレログラム)

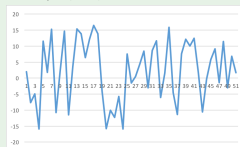
次の時系列データと、コレログラムの間の対応をつけよう。



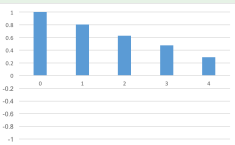
1.



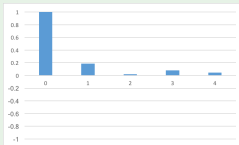
2.



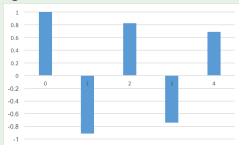
3.



a.



b.



c.

ここまで来たよ

12 時系列解析

- 自己回帰モデル $AR(m)$
- 時系列データの分析方法 (2) 標本自己相関係数

13 時系列解析・マルコフ連鎖モンテカルロ法

- マルコフ連鎖モンテカルロ法
- メトロポリス・ヘイスティングス法

マルコフ連鎖モンテカルロ法が求められる状況

目的 やりにくい確率（密度）関数 $f(x)$ にしたがう X の標本（＝乱数）を実際に抽出する．標本期待値を求める．ベイズ推定する．

確率の問題だけではない．例えば、図形の面積は何かの確率変数の母期待値として書けることがある

前提

- ① 計算機で、一様分布 $U(0, 1)$ の独立同分布に「ほぼ」したがうような **擬似乱数列** (pseudo-random number) は比較的容易に生成できる.
 - ▶ `double getuniform()`
- ② 任意の確率分布にしたがう擬似乱数列を容易に作れるわけではない.
 - ▶ 作る工夫: 逆関数法, 棄却法, 個別の超絶技巧, ...
- ③ $f(x)$ が定数倍だけ不明なことがある.
 - ▶ $f(x) = \frac{1}{Z}g(x)$ の定数 $Z = \int_{-\infty}^{+\infty} g(x)dx$ を計算できないことがある.
 - ▶ 同じことの別の言い方: 比 $f(x_1)/f(x_2)$ は計算できるけど, $f(x)$ そのものは計算できないことがある.

マルコフ連鎖モンテカルロ (MCMC=Markov chain Monte Carlo)

設計問題: $g(x) = Zf(x) \geq 0$ が与えられたとき, $f(x) = \frac{1}{Z}g(x)$ がその定常分布であるようなマルコフ連鎖 M (で, かつ「いいやつ」) を作れ.

実行: このマルコフ連鎖をシミュレートして, 極限分布にしたがう状態列 X_t として擬似乱数列を得る

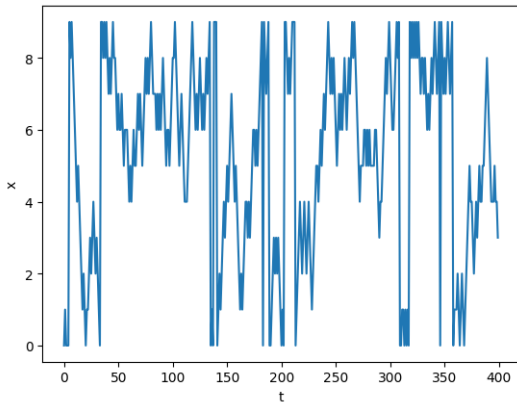
Listing 1: MCMC

```
1 double x=xinitial; // 初期状態
2 for (n=0;n<サンプルサイズ;n++){
3     for (t=0;t<待ち時間;t++){
4         x=getnext(x); // Mにしたがう.  $[0,1)$  一様擬似乱数利用.
5     }
6     // 定常分布に近づいただろう
7     printf("%f\n",x);
8 }
```

- 「いいやつ」: X_t から X_{t+1} を得るのは, $[0,1)$ 一様擬似乱数だけでできる
- 「いいやつ」: 極限分布が一意に存在する, 可約でない, 周期的でない
- 最初のそれなりの個数の出力は, 初期分布の影響を受けているかもしれないので=極限分布に十分に近づいていないかもしれないので捨てる (**burn-in**).
- 出力が定常分布にしたがっていても, 互いに独立になっていないかもしれないので, 待ち時間は十分大きくとる. 標本自己相関係数で判定できる.
- 「いいやつ」: 標本自己相関係数の 0 への収束が速い → 待ち時間を大きくしなくても済む → 計算時間が短くて済む

トレースプロット (trace plot)

横軸ステップ t , 縦軸状態 x または状態から決まる期待値, 秩序変数 (order parameter) のプロットを**トレースプロット (trace plot)** という. burn-in や待ち時間が適切かを直観的に判断するのに使われる.



定常分布が与えられたときのマルコフ連鎖設計作戦

定義 (対称分布 鎌谷 MC 定義 4.5)

マルコフ連鎖 (の転置推移確率行列) M_{xy} に対して, 次の条件を満たす分布 p_x を, M の対称分布 (symmteric distribution) という. (和はとっていない)

$$\forall x, y \in S \quad M_{xy}p_y = M_{yx}p_x$$

- $P(X_0 = y \text{ かつ } X_1 = x) = P(X_0 = x \text{ かつ } X_1 = y)$ なので, 同時分布が $f_{X_0X_1}(x, y) = f_{X_0X_1}(y, x)$ だというのが '対称' の語源.
- 任意の 2 つの状態 x, y を結ぶ矢印は, 向きが逆のもの 2 本あるが, それを通過する条件付き確率が等しい, という条件.

$\vec{p}$ が M の対称分布であることを, M は分布 p に関する詳細つりあいの条件 (detailed balance condition) を満たすともいう.

命題 (鎌谷 MC 定理 4.8)

対称分布は定常分布である.

p の次の時刻の分布 q を求める.

$$q_x = \sum_y M_{xy} p_y = \sum_y M_{yx} p_x = 1 \cdot p_x = p_x.$$

よって p_x は定常分布.

逆は真でない. (既約で非周期的なマルコフ連鎖に限ったとしても) 対称分布は定常分布の中の特別なクラス.

極限分布は定常分布に限られるのだった. 定常分布なら極限分布かも?

設計の方針

$\tilde{p}$ を定常分布として持つ M を作る. さらに限定して, 対称分布として持つような特殊な M をわざわざ作る. というのも, 効率はともかく, ある程度機械的に作れるから (メトロポリス・ヘイスティングス法).

この方針にしたがわず, 対称でなく (irreversible) 「性能のよい」 M を得る方法も近年盛んに研究されている.

ここまで来たよ

12 時系列解析

- 自己回帰モデル $AR(m)$
- 時系列データの分析方法 (2) 標本自己相関係数

13 時系列解析・マルコフ連鎖モンテカルロ法

- マルコフ連鎖モンテカルロ法
- メトロポリス・ヘイスティングス法

メトロポリス・ヘイスティングス法 Replace

与えられた $\vec{p}$ を対称分布として持つ M を作るうまい方法のひとつ.

メトロポリス・ヘイスティングス法 (Metropolis-Hastings)

$$M_{xy} = q_{xy} \min\left\{1, \frac{p_x q_{yx}}{p_y q_{xy}}\right\} + k_y \times \delta_{xy}$$

定数 $k_y \geq 0$ は, M_{xy} が転置確率行列となるように調整できる.

$\vec{p}$ は比 p_x/p_y の形でだけ現れている (比例定数が不要である) ことに注意.

q_{xy} **提案分布** 自由に決めていい転置推移確率行列. これにしたがって, 次に移る状態の候補を「提案」する.

メトロポリス・ヘイスティングス法のアルゴリズム

Listing 2: MH in MCMC

```
1 //確率  $q(y, x)$  にしたがって提案  $y$  を選ぶ
2 double getproposal(double y, double x);
3 //[0, 1) 一様擬似乱数
4 double getuniform(void);
5
6 double getnext(double x){ //x:現在の状態
7     int y; // 次の状態
8     int yproposal;
9     double u;
10    yproposal=getproposal(y,x); // 提案
11    u=getuniform();
12    if(u< min(1, (p(x)*q(y,x))/(p(y)*q(x,y)) )){
13        y=yproposal; // 提案を採択
14    } else {
15        y=x; // 提案を棄却
16    }
17    return y; // 次の状態
18 }
```

転置推移確率行列であること

列の和が 1 になるように，（定数で）対角成分を調節できる．

対称であること

$p_x q_{yx} \geq p_y q_{xy}$ のとき

$$M_{xy} = q_{xy} \cdot 1, \quad M_{yx} = q_{yx} \cdot \frac{p_y q_{xy}}{p_x q_{yx}}$$

よって， $M_{xy} p_y = q_{xy} p_y \cdot$ $M_{yx} p_x = q_{xy} p_y \cdot$

$p_x q_{yx} < p_y q_{xy}$ のとき

$$M_{xy} = q_{xy} \cdot \frac{p_x q_{yx}}{p_y q_{xy}}, \quad M_{yx} = q_{yx} \cdot 1$$

よって， $M_{xy} p_y = p_x q_{yx} \cdot$ $M_{yx} p_x = p_x q_{yx} \cdot$

メトロポリス法 (q_{xy} が対称な場合)

例

- S が有限集合のとき, $q_{xy} = 1/|S|$ (全状態平等な提案),
- $x, y \in S = \mathbb{Z}$ のとき, $q_{xy} = \delta_{x, y-1} + \delta_{x, y+1}$ (近くの状態を提案)
- $x, y \in S = \mathbb{R}$ のとき, $q_{xy} = \begin{cases} 1 & (|x - y| \leq \frac{1}{2}) \\ 0 & (\text{他}) \end{cases}$ (近くの状態を提案)

このとき q は $\min$ の中から約分される (メトロポリス法という. こちらが先に提案された).

直観的には, q_{xy} で x が提案されたなら,

- p_x が p_y 以上のときは, かならず x に移る
- 以上でないときは, 移すかどうか比に応じて決める

L13-Q1

Quiz(メトロポリス-ヘイスティングス法・MCMC)

次の問に、短いけど完全な日本語の文章で答えよう。

- ① マルコフ連鎖モンテカルロ法とは何か。確率分布、定常分布、サンプル（標本）、マルコフ連鎖という言葉を使って答えよう（これらの言葉をさらに説明する必要はない）。
- ② マルコフ連鎖モンテカルロ法において、なぜ、burn-in が必要なのか、説明しよう。
- ③ マルコフ連鎖モンテカルロ法において、なぜ、内側のループで毎回サンプルしてはいけないのか、説明しよう。
- ④ メトロポリス法の転置推移確率行列において、なぜ $\min\{1, \dots\}$ という書き方にしないといけないのか、説明しよう。
- ⑤ メトロポリス法の転置推移確率行列において、なぜ $\frac{p(x)}{p(y)}$ であって、 $\frac{p(y)}{p(x)}$ ではないのか、後で自分が思い出すのに役立つ言い方で、説明しよう。

メトロポリス法を思いついた人の心理を想像

$M_{xy} = p_x$ ってしたいけど, p_x 小さいから効率悪いな… Z わからないから比で書きたいな… または密度だと 1 越えちゃうな…

$M_{xy} = \frac{p_x}{p_x + p_y}$ 熱浴法 heat-bath もあるな…

もっと効率よくしたいな… $\frac{p_x}{p_x + p_y} : \frac{p_y}{p_x + p_y}$ じゃなくて, $\frac{p_x}{p_y} : 1$ にしちゃえ.