

詳細つりあいの条件とメトロポリス・ヘイスティングズ法

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 L15(2026-01-07 Wed)

最終更新: Time-stamp: "2026-01-19 Mon 18:41 JST hig"

今日の目標

- 詳細つりあいの条件を説明できる
- メトロポリス・ヘイスティングズ法を説明できる



L13-Q1

L13-Q2

Quiz 解答: 自己回帰モデル AR(2) の例

① モデルの定義より $X_2 = \phi_1 X_1 + \phi_2 X_0 + \epsilon_2 = \epsilon_2$.

② モデルの定義より

$$X_3 = \phi_1 X_2 + \phi_2 X_1 + \epsilon_3 \phi_1 (\phi_1 X_1 + \phi_2 X_0 + \epsilon_2) + \phi_2 X_1 + \epsilon_3 = \phi_1 \epsilon_2 + \epsilon_3.$$

$$E[(\phi_1 \epsilon_2 + \epsilon_3)^2] = \phi_1^2 \sigma^2 + 2 \cdot \phi_1 \cdot 0 + \sigma^2.$$

③ モデルの定義より

$$X_4 = \phi_1 X_3 + \phi_2 X_2 + \epsilon_4 = \phi_1^2 \epsilon_2 + \phi_1 \epsilon_3 + \phi_2 \epsilon_2 + \epsilon_4.$$

$$E[X_3] = E[X_4] = 0 \text{ より,}$$

$$\text{Cov}[X_3, X_4] = E[X_3 X_4] = \phi_1^3 E[\epsilon_2^2] + \phi_1 \phi_2 E[\epsilon_2^2] + \phi_1 E[\epsilon_3^2] =$$

$$(\phi_1^3 + \phi_1 \phi_2 + \phi_1) \sigma^2.$$

L13-Q3

Quiz 解答: コレログラム

1-a, 2-c, 3-b

ここまで来たよ

14 時系列解析・マルコフ連鎖モンテカルロ法と詳細つりあいの条件

15 詳細つりあいの条件とメトロポリス・ヘイスティングズ法

- 二項モデルのベイズ推定への適用例
- メトロポリス・ヘイスティングズ法

ベルヌイ分布のベイズ推定再訪

L15-Q1 計算科学 (2025)L03

TA Prob and Sol: ベルヌイ分布のベイズ推定: 非一様事前分布

$X \sim B(1, y)$ の母数 y の事前分布を $f_Y(y) = 6y(1-y)u(y; 0, 1)$ とする.
サイズ N の標本として, $x_1, \dots, x_N$ が得られた. ただし,
 $\sum_{i=1}^n x_i = k \leq N$ だった.
母数 y の事後分布を求めよう.
事後分布の確率密度関数が最大となる y を求めよう.

略解

$$\begin{aligned} f_{Y|X}(y|x_i) &= \frac{f_{x|y}(x_1, \dots, x_N|y) f_Y(y)}{\int f_{x|y}(x|y) f_Y(y) dy} \\ &\propto \prod_i y^{x_i} (1-y)^{1-x_i} 6y(1-y)u(y; 0, 1) \\ &\propto y^{k+1} (1-y)^{N-k+1} u(y; 0, 1) \end{aligned}$$

確率密度関数 $f(y) = \frac{1}{Z} y^{k+1} (1-y)^{N-k+1}$

に従う疑似乱数を生成するにはどうする？

分子だけ見ると y 依存性はわかるが、分母 $= Z$ を正確に求めるには、
ベータ分布、ベータ関数の迷宮へ

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 }
```

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逆に, 「 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.

$\vec{p}$ の次の時刻の分布 $\vec{q}$ 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

$\vec{p}$ 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・ヘイスティングズ法).

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

14 時系列解析・マルコフ連鎖モンテカルロ法と詳細つりあいの条件

15 詳細つりあいの条件とメトロポリス・ヘイスティングズ法

- 二項モデルのベイズ推定への適用例
- メトロポリス・ヘイスティングズ法

メトロポリス・ヘイスティングズ法

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・ヘイスティングズ法 (Metropolis-Hastings)

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

$\vec{p}$ 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。

M が転置確率行列となるように対角成分 k_y を調整するが、 k_y を q_{yy} に吸収すれば、けっきょく $k_y = 0$ とおける。

メトロポリス・ヘイスティングズ法のアルゴリズム

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

M が転置確率行列となるように対角成分 k_y は調整できる（提案される確率という意味からはずれる）。

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)

メトロポリス法 (Metropolis)

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

M が転置確率行列となるように対角成分 k_y を調整するが, k_y を q_{yy} に吸収すれば, けっきょく $k_y = 0$ とおける.

例

- S が有限集合のとき, $q_{xy} = 1/|S|$ (全状態平等な提案),
- $x \neq y \in S = \mathbb{Z}$ のとき, $q_{xy} = \delta_{x, y-1} + \delta_{x, y+1}$ (近くの状態を提案)
- $x \neq y \in S = \mathbb{R}$ 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

メトロポリス法では、 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

ベルヌイ分布のベイズ推定を MCMC で

マルコフ連鎖の状態（連続的） $x, y \in S = [0, 1]$. コイン裏表の $x_i = 0, 1$ ではない.

提案分布の確率密度は $q_{xy} = 1$ などでもよい. 対称なのでメトロポリス法でいい.

$$M_{xy} = \min\left\{1, \frac{x^{k+1}(1-x)^{N-k+1}}{y^{k+1}(1-y)^{N-k+1}}\right\}.$$

上の M の計算には何も難しいところがない. y は今のパラメタ, x は提案された次のパラメタ. $x_1, \dots, x_N$ は観測結果のデータで, $k = \sum_i x_i$.

MCMC の実行中は単なる整数定数.

- $q_{xy} = 5u(x; y - 0.1, y + 0.1)$ などとしてもいいが, 端 $y = 0, 1$ では対称でなくなるのでメトロポリス・ヘイスティングズ法で.

L15-Q2

Quiz(メトロポリス-ヘイスティングズ法・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…

$M_{xy} = q_{xy} \frac{p_x}{p_x + p_y}$ 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.