

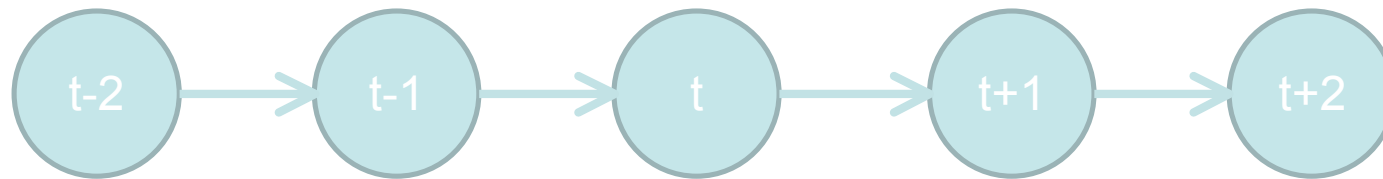
マルコフ連鎖モンテカルロ法

MCMC (Markov Chain Monte Carlo)

総研大
山道真人

MCMCの名前の由来は？

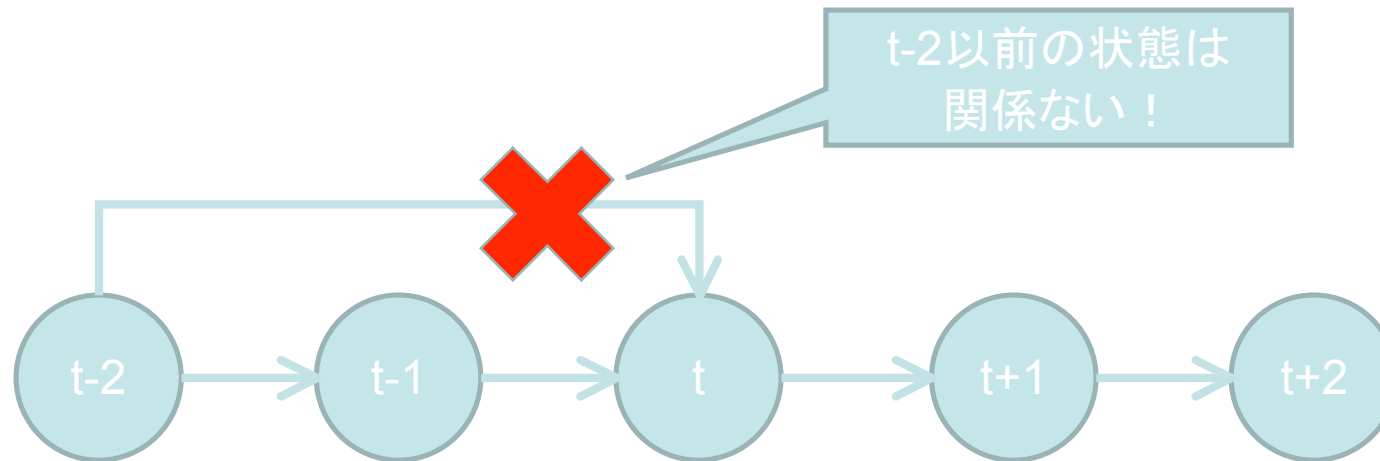
- マルコフ連鎖とは...1個前の状態によって次の状態が決まる連鎖



- モンテカルロ法とは...乱数を発生させること

MCMCの名前の由来は？

- マルコフ連鎖とは...1個前の状態によって次の状態が決まる連鎖

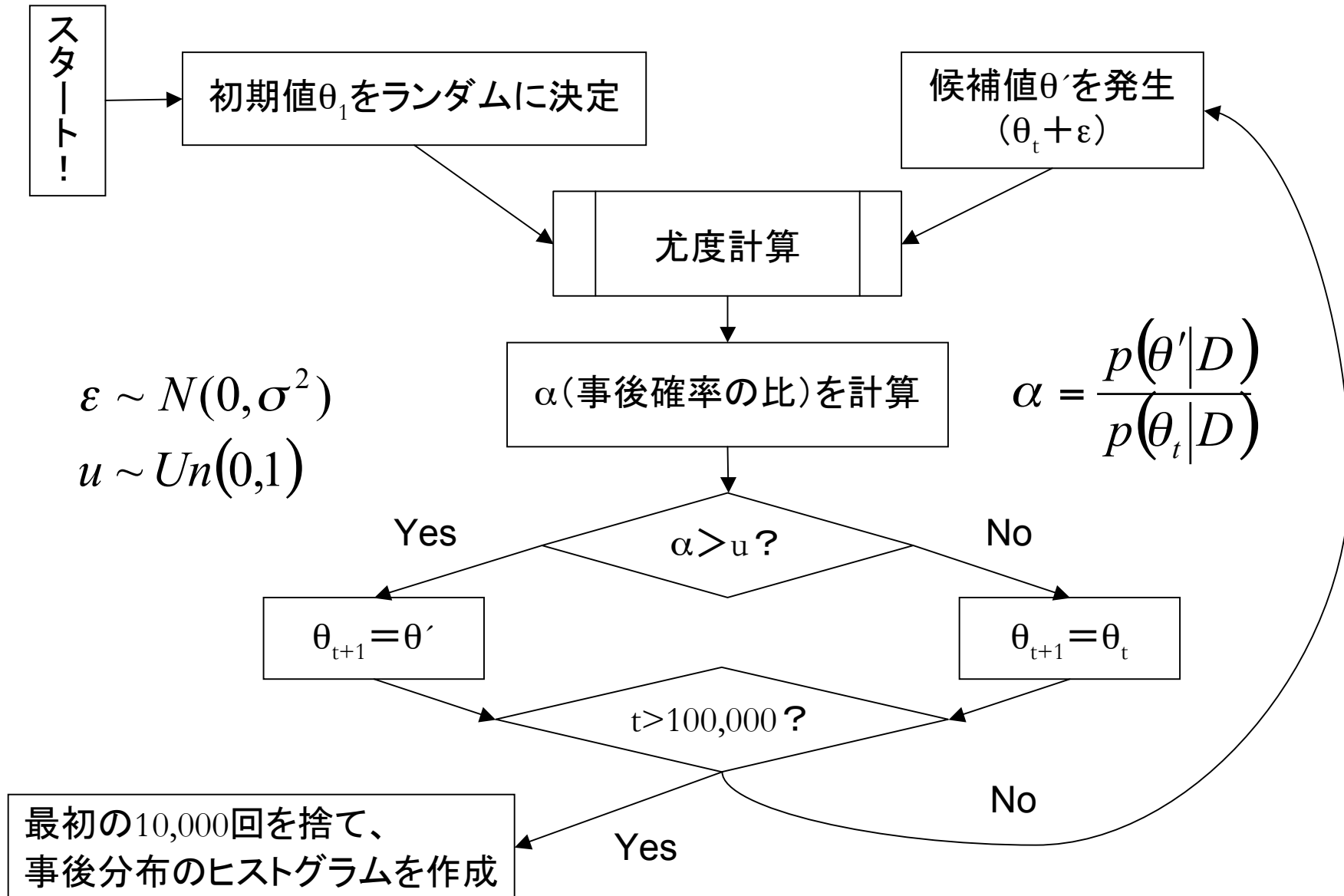


- モンテカルロ法とは...乱数を発生させること

いろいろなMCMC

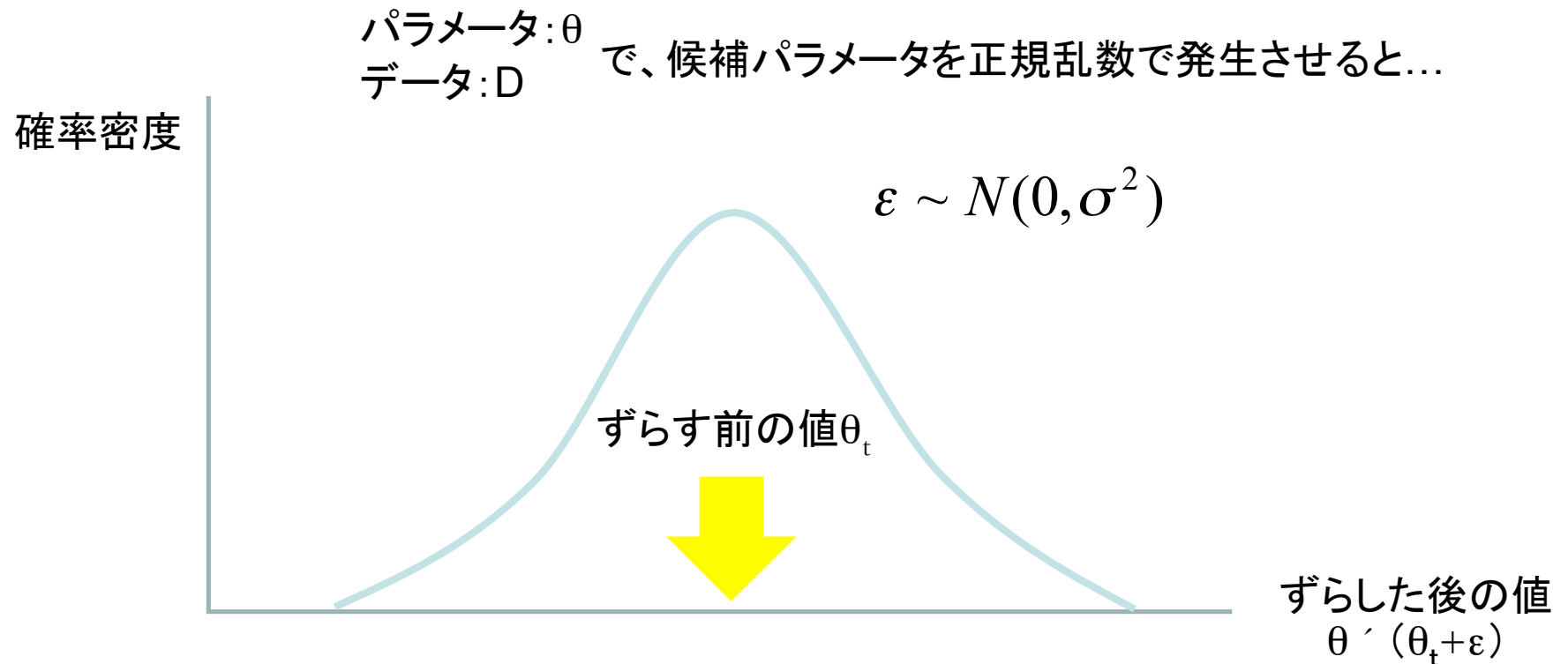
- メトロポリス法
 - アルゴリズム自体は単純
 - ここで紹介
- ギブズ・サンプラー
 - 事後分布が特定の確率分布からサンプリングできる時に使える場合がほとんど
 - WinBUGSで使える

全体的なアルゴリズム



MCMCのアルゴリズム①

- 1つ前の値から、パラメータを少しずつ動かす
=マルコフ連鎖！

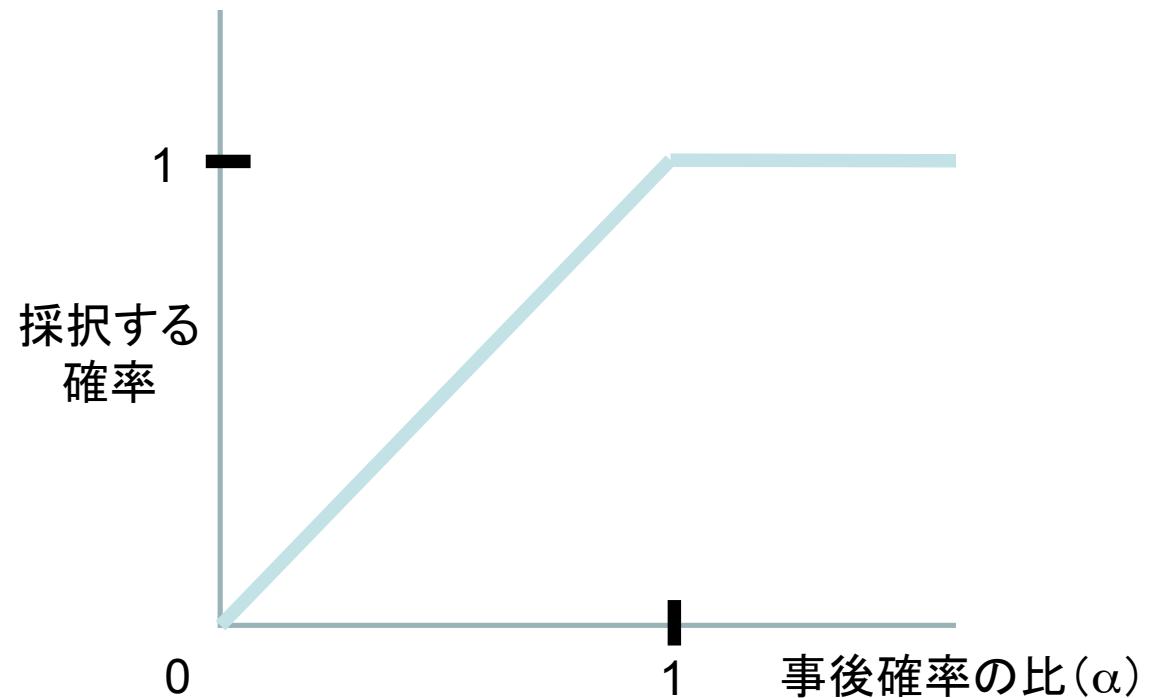


MCMCのアルゴリズム②

- 動かした値に対して、尤度を計算する
- パラメータの1つ前の値の事後確率との比を取り、採択する確率とする

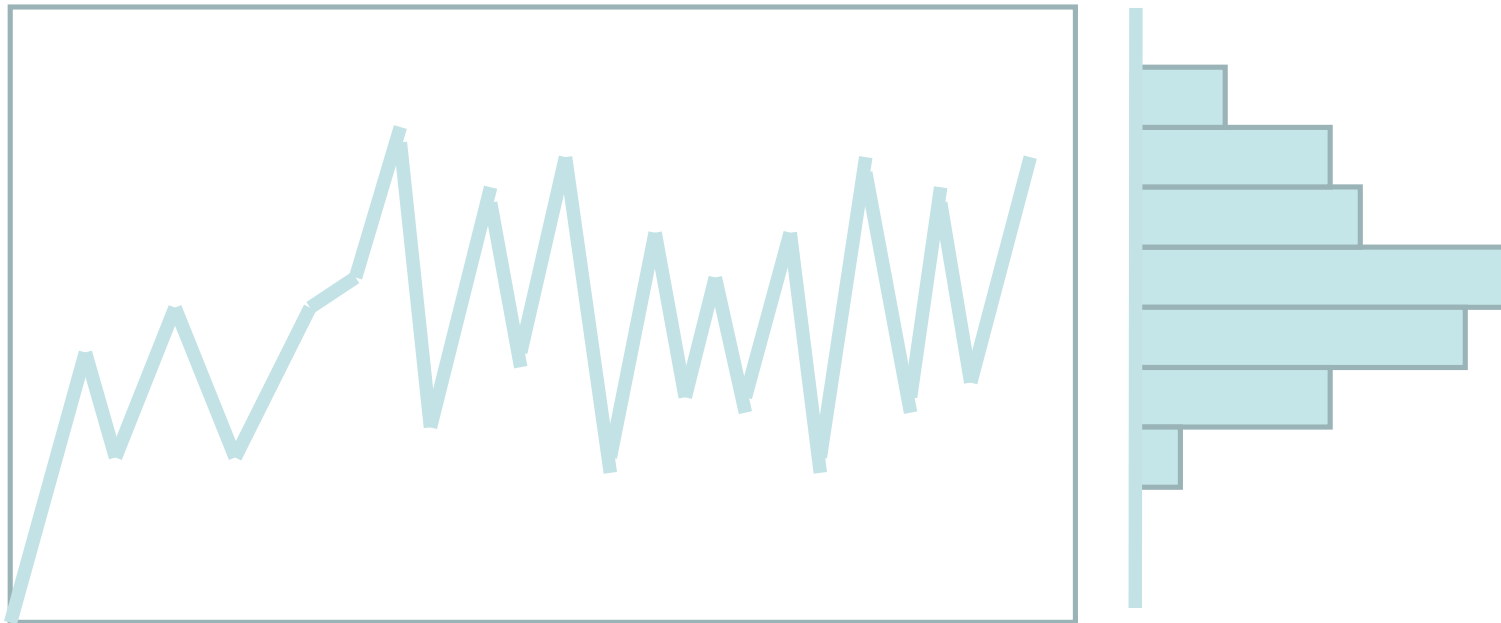
=モンテカルロ！

$$\alpha = \frac{p(\theta'|D)}{p(\theta_t|D)}$$



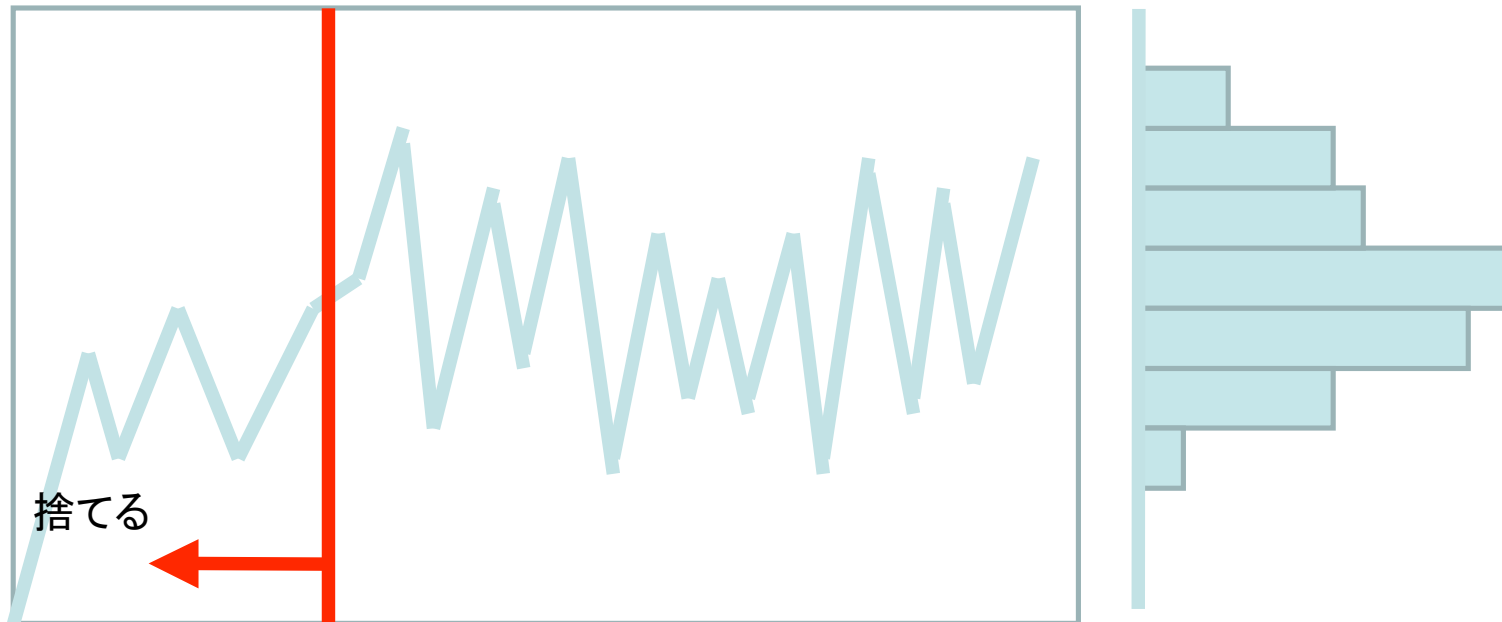
MCMCのアルゴリズム③

- このプロセスを十分長い間繰り返し、初期値の影響を受けていそうな部分を捨て、収束していそうな部分でヒストグラムを作る



MCMCのアルゴリズム③

- このプロセスを十分長い間繰り返し、初期値の影響を受けていそうな部分を捨て、収束していそうな部分でヒストグラムを作る



MCMCの何がいいのか？

- 高次元のパラメータ空間を効率的に探索することができる
- 尤度関数が多峰型になっていても、局所的な最適解にとらわれることがない
- ソフトも充実、アルゴリズムがシンプル

次元の呪い

- パラメータ数が増えれば、組み合わせの多さ (=探索すべき数)が増える
- 最尤法なら全部の組み合わせについて尤度を計算するしかないが(b)、MCMCならより少ない計算量で済む(c)

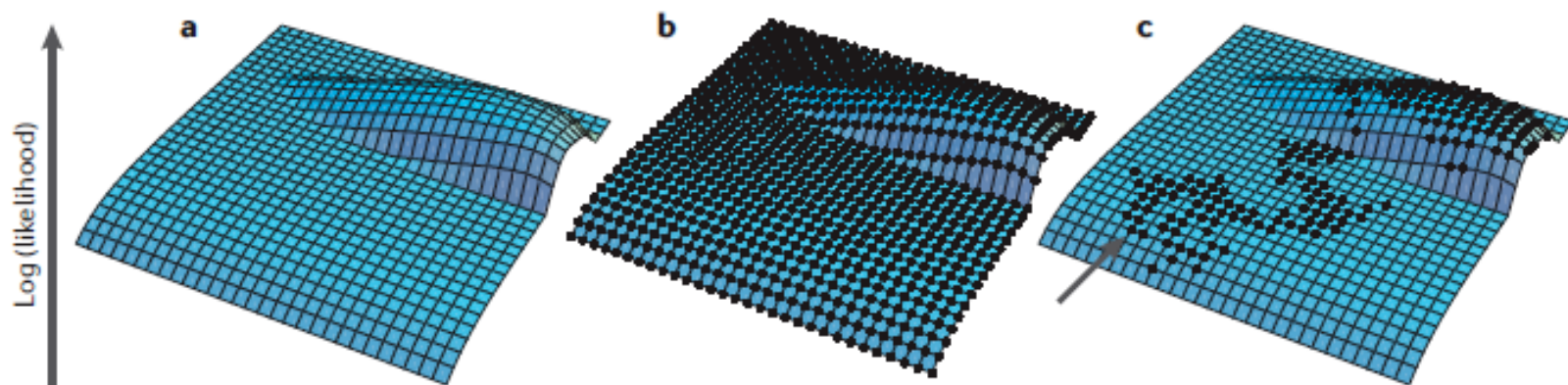
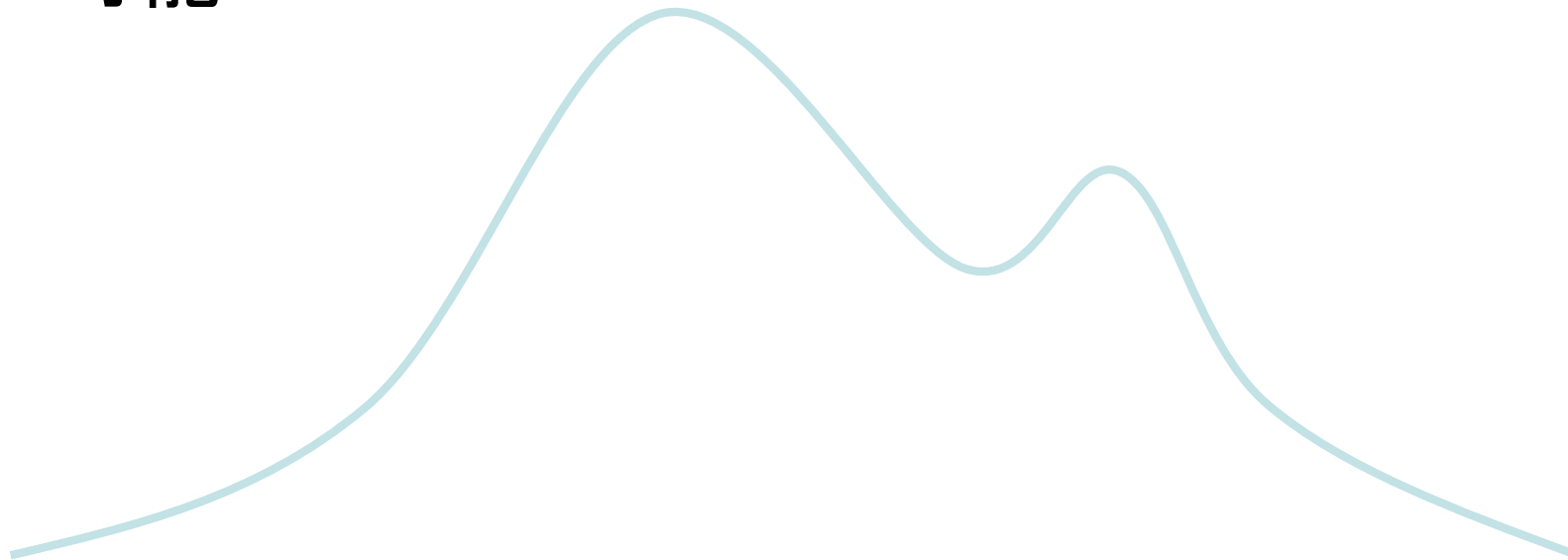


Image courtesy of Peter Beerli, Florida State University, USA.

Excoffier & Heckel. 2006. Nature Review Genetics.

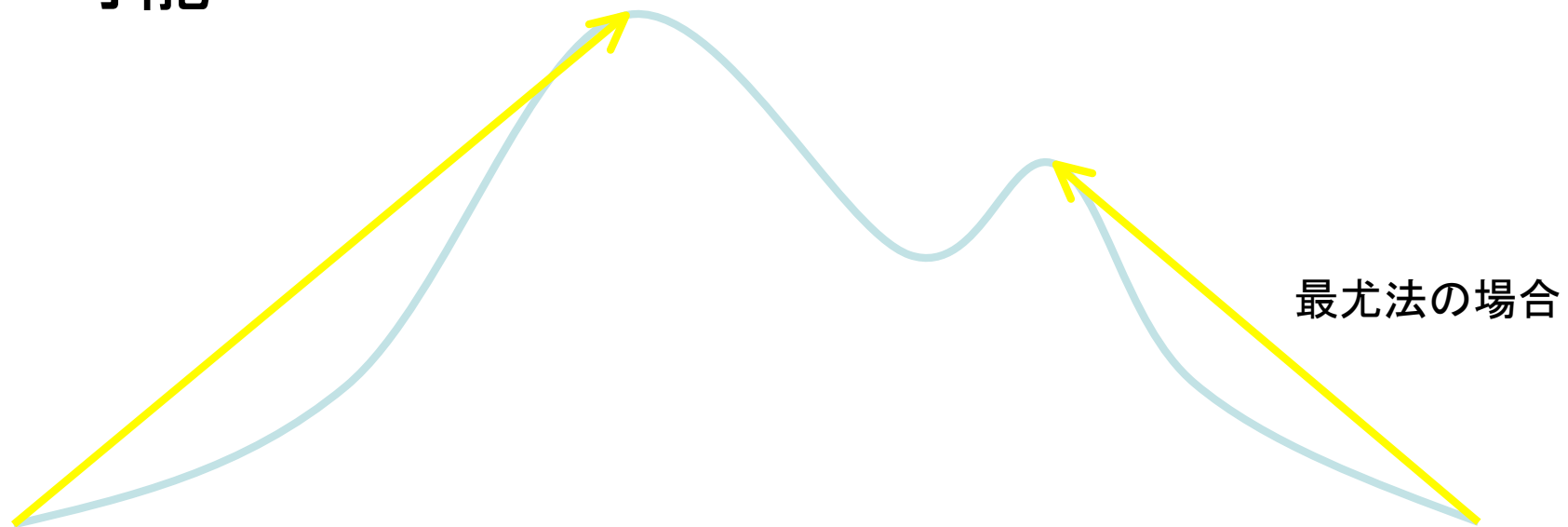
尤度関数が多峰型になっていた時

- 最尤法ならば、初期値に依存して局所的なピークに達してしまうことも
- MCMCなら大域的なピークを探し出すことが可能



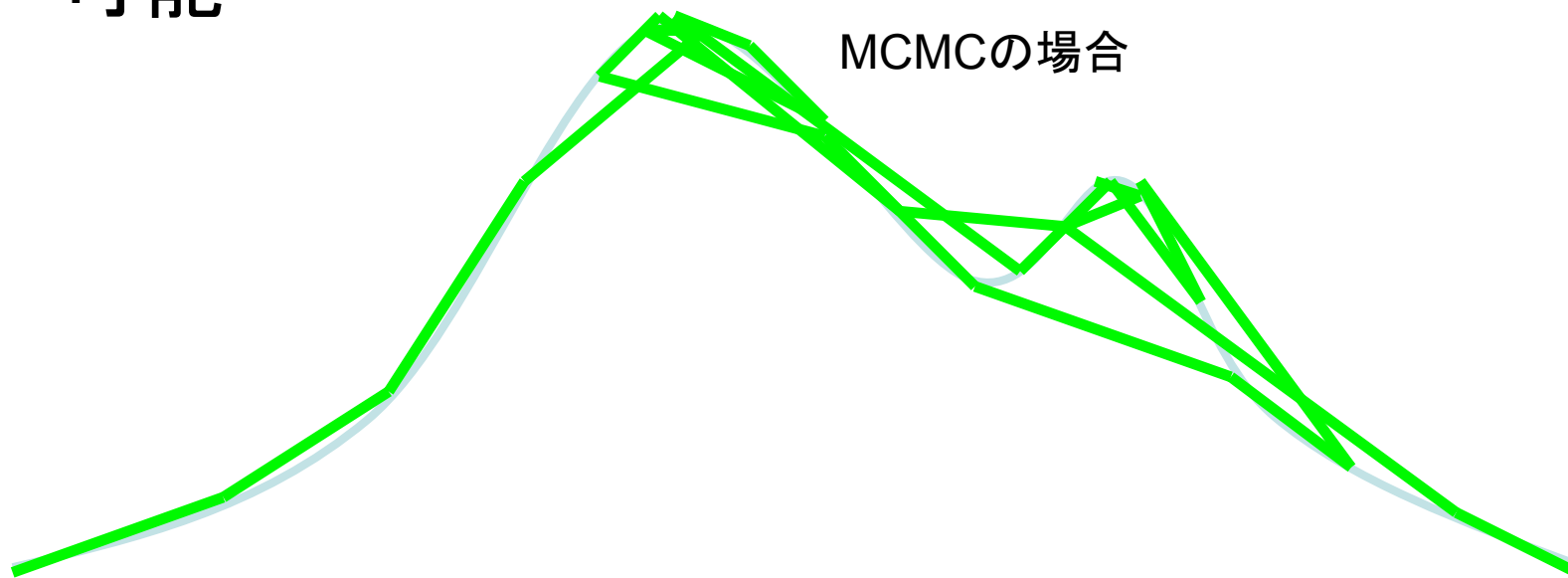
尤度関数が多峰型になっていた時

- 最尤法ならば、初期値に依存して局所的なピークに達してしまうことも
- MCMCなら大域的なピークを探し出すことが可能



尤度関数が多峰型になっていた時

- 最尤法ならば、初期値に依存して局所的なピークに達してしまうことも
- MCMCなら大域的なピークを探し出すことが可能



ソフト

- R
 - MCMCpack
- WinBUGS
 - R2WinBUGSでRと連動
- MCMC++
 - C++のクラスライブラリ
- 他にもOpenBUGS、JAGSなど...

参考文献、Web

- 統計科学のフロンティアシリーズ (岩波書店)
 - 12: マルコフ連鎖モンテカルロ法とその周辺
 - 4: 階層ベイズモデルとその周辺
- Markov chain Monte Carlo in Practice
(Gilks et al. 1995. Chapman & Hall/CRC.)
- KuboWeb
(<http://hosho.ees.hokudai.ac.jp/~kubo/index-j.html>)