

詳細つりあいを満たさないマルコフ連鎖モンテカルロ法

東京大学工学系研究科物理工学専攻 諏訪秀磨

マルコフ連鎖モンテカルロ法は、多重積分を数値的に求める汎用手法であり、物理に限らず、化学、生物、医学、統計など、様々な分野で必要不可欠である。特に近年、バイオインフォマティクス、金融などで欠かせないベイズ推定法は、マルコフ連鎖モンテカルロ法が威力を発揮する格好の舞台となっている。この手法では、標的分布（例えばボルツマン分布）に従ってサンプルを生成するために、つりあい条件を課す。1953年の手法の発明 [1] 以来、これまでのほとんどの計算では、つりあい条件の十分条件として詳細つりあいを課してきた。標準的な状態更新法となっているメトロポリス法 [1] や熱浴法（ギブスサンプラー）は、詳細つりあいを満たす遷移確率を与える。これまでの遷移確率に対する改良は、この条件の範囲内で議論されてきた [2]。このようにマルコフ連鎖モンテカルロ法は、長い間詳細つりあい条件の枠の中で発展を続けてきたと言える。しかし、詳細つりあいは必要条件ではない。我々は最近、この条件を満たさずともつりあい条件を満たす遷移確率を与える、新しいアルゴリズムを考案した [3]。

以下、このアルゴリズムを説明する。マルコフ連鎖モンテカルロ法では局所的な状態更新を繰り返す。今、あるひとつの変数を更新するとして。遷移状態候補の数を  $n$ 、それぞれの重みを  $w_i (i = 1, 2, \dots, n)$  とする。我々のアルゴリズムは、「重みの埋め立て」という幾何学的な手続きにより簡単に記述される (Fig.1)。以下にその具体的な手続きを述べる。

1. 遷移状態候補の中で最大の重みのものを選ぶ。複数ある場合はそのうちの1つを選ぶ。以下ではその重みを  $w_1$  とする。残りの順序は任意でよい。
2. 最大重み  $w_1$  を次の箱 ( $i = 2$ ) に埋める。さらに余りを次の箱 ( $i = 3$ ) に埋める。余りがなくなるまで続ける。

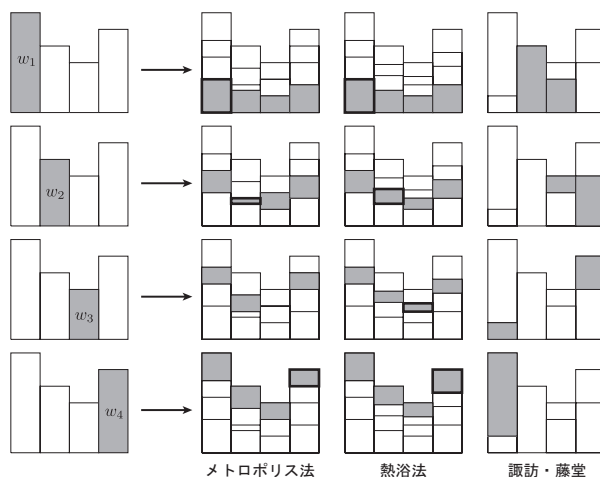


FIG. 1: 遷移候補数  $n = 4$  の場合の例。本手法では棄却率がゼロになる。

3. 最初に埋め立てられた箱 ( $i = 2$ ) の重み ( $w_2$ ) を、ステップ 2 の続きに埋める。同様に余りがなくなるまで続ける。
4. 残りの重み  $w_3, w_4, \dots, w_n$  についてもステップ 3 を順番に繰り返す。一度  $i \geq 2$  の全ての箱が埋め立てられたら、その後は最初の箱 ( $i = 1$ ) に埋める。

この手順によって  $j$  番目の箱に割り当てられた  $w_i$  の重みを  $w_{i \rightarrow j}$  とし、遷移確率を  $p_{i \rightarrow j} = w_{i \rightarrow j} / w_i$  と決める。その結果、平均棄却率がいつでも必ず最小化され、多くの場合に完全にゼロとなる (Fig.1)。また詳細つりあいを破る帰結として、正味の確率流が生じサンプリング効率を高める。状態変数が離散的な場合、我々の手法はそのままの形で応用できる。例えば 4 状態ポッツ模型の臨界点直上では、構造因子の収束がメトロポリス法を用いた場合より約 6.4 倍速まる (Fig.2)。また磁場中の反強磁性量子ハイゼンベルグ鎖では、磁化の収束が熱浴法より 100 倍以上速まる [3]。

今回我々はこのアルゴリズムを拡張し、状態変数が連続変数の場合においても、詳細つりあいを満たさない状態更新法を開発した。特に逆関数法を用いることができる場合、前述の埋め立てアルゴリズムの連続極限に対応する状態更新が可能となる。例えば 2 変量正規分布からのサンプリングにおいて、詳細つりあいの破れにより導入される正味の確率流が、状態探索の効率を大幅に向上させることを確認した (Fig.3)。これらの我々の改良は、様々な分野で用いられている全てのマルコフ連鎖モンテカルロ法に対して有効である。講演ではこれらのアルゴリズムを説明し、これまでの手法と比較した結果について述べる。

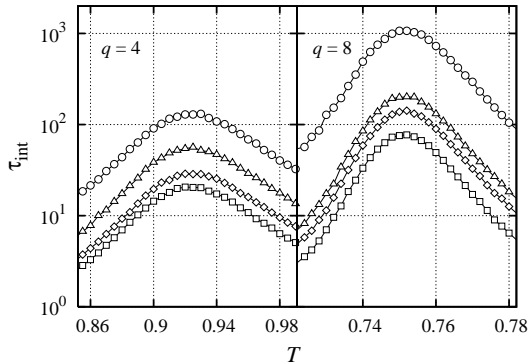


FIG. 2: 正方形格子強磁性ポッツ模型 ( $q = 4, 8$ ) の構造因子の自己相関時間。メトロポリス法 (○)、熱浴法 (□)、局所最適更新法 [2] (△)、本手法 [3] (◇) の結果を示す。転移温度はそれぞれ  $T \simeq 0.910, 0.745$ 。格子サイズは  $16 \times 16$ 。

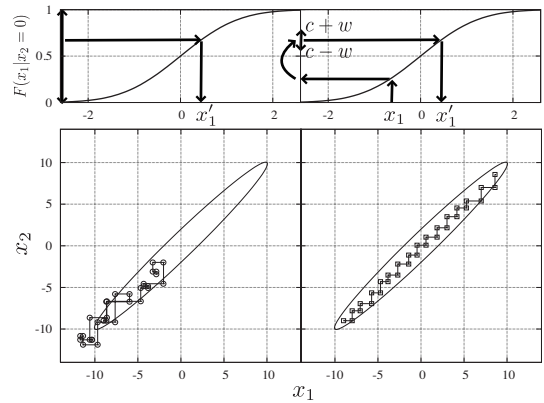


FIG. 3: 2変量正規分布での、熱浴法(左)と我々の手法(右)による状態の軌跡。上は条件付き累積分布関数を用いた状態更新の手順。

- [1] N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller, and E. Teller, J. Chem. Phys. 21, 1087 (1953).
- [2] L. Pollet, S. M. A. Rombouts, K. Van Houcke, and K. Heyde, Phys. Rev. E 70, 056705 (2004).
- [3] H. Suwa and S. Todo, Phys. Rev. Lett. 105, 120603 (2010).