エルゴード的マルコフ鎖の一般的改良

諏訪　秀麿
東京大学工学系研究科物理工学専攻

本発表ではマルコフ連鎖モンテカルロ法での局所状態更新法による計算効率の違いを議論し、いくつかの系で実用的に最も効率の高い更新法を提案する。一般的にマルコフ連鎖モンテカルロ法はモンテカルロ積分における次元の呪いを解決するが、代わりに「サンプル間の相関」に苦しむ。相関を減らし効率的なサンプリングを行うために、以下の3つの点を考慮することが重要となる。1つ目はアンサンブルの決定である。欲しい量をどういったアンサンブルから抽出するかという問題であり、交換法やマルチカノニカル法等の拡張アンサンブル法はこの点における改良法と言える。2つ目は遷移先状態候補の選択である。クラスターアルゴリズムやハイブリッドモンテカルロ法が顕著な例となる。前者は分配関数を異なる状態変数で表現し、変数の変換を行いながら大域的な状態更新を可能とし、後者は人工的な状態変数を加え物理的な運動方程式を用いて候補を提案する。そして3つ目が本発表のテーマとなる遷移確率 (カーネル) の最適化である。遷移確率を決める方法として、これまではメトロポリス法や熱浴法が主に用いられてきた。しかしこれらは最適ではない。

では「最適」な更新法とはどういったものであろうか。マルコフ連鎖モンテカルロ法におけるエルゴート的マルコフ鎖の良し悪しは2つの基準により議論できる。ひとつは分布収束の速さで、収束 (緩和) が速ければ早くサンプルを開始できる。もうひとつは漸近分散の大きさで、分散が小さければ自己相関時間が短くサンプル効率が高い。状態数が有限の場合、マルコフ鎖は遷移行列と一対一に対応する。そして遷移行列の固有値が上記の基準と結びつく。分布収束は第2固有値の絶対値の大きさで決まり、一方、漸近分散は全固有値が関係する。これまで、全遷移確率を調整できる場合での遷移行列の最適化が数学的に議論されてきた [1,2]。しかしその状況では、そもそもモンテカルロ法による近似を必要としない。広大な状態空間に対し、局所的な更新を繰り返すことがマルコフ連鎖モンテカルロ法の基本精神なのだ。局所的更新における遷移確率をどのように最適化するべきかは自明ではない。直感的にはできるだけ以前とは違う状態に遷移する方が、サンプリング効率が良いと考えられる。そこで我々は状態更新において状態が全く変化しない (平均の) 棄却率をどんな場合でも最小化する遷移確率決定法を考案した [3,4]。これまで代数的に解かれてきた問題を幾何学的な「重みの割り当て」問題に置

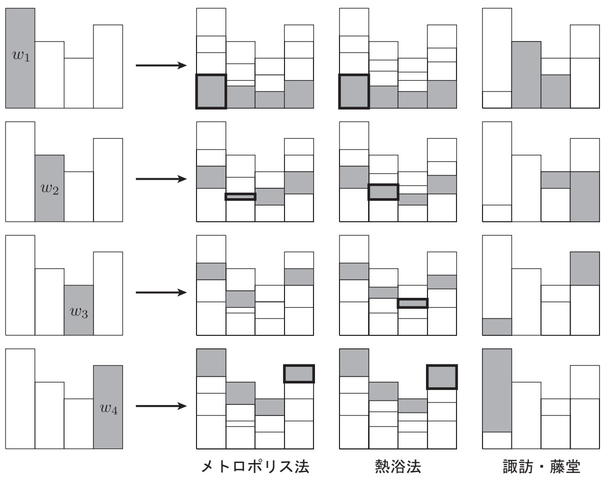

図 1:　遷移候補数 $n=4$ の場合の例。我々の手法 [3] では棄却率がゼロになる。

き換えることでこれを可能とした (図 1)。一方、これまでのマルコフ鎖はほとんどの場合「詳細つりあい」条件を満たすように構成されてきた。1953 年の手法開発以来、マルコフ連鎖モンテカルロ法はこの条件の範囲内で発展を続けてきたと言える。しかし、詳細つりあいは十分条件にすぎず、必要条件ではない。我々は前述の新しい幾何学的なアプローチにより、この十分条件を満たさずとも正しいサンプリングを一般的に可能とする初めての手法を開発した [3]。このように幾何学的に構成されたマルコフ鎖の性能をポッツ模型を使って調べた。その結果上記の 2 つの基準のどちらにおいても、既存手法と比べ我々の状態更新法が最も優れていた (図 2 は自己相関時間の比較)。例えば 4-状態ポッツ模型では、メトロポリス法より 6 倍以上計算効率を向上させる。

この離散状態変数に対するアルゴリズムのある種の連続極限を考えることができる [5]。条件付き累積分布関数における周期的シフトを用いることで、それは連続状態変数に対する熱浴法の改良法となる。熱浴法では今の状態を忘れて次の状態を決定するが、その代わりに累積分布関数において今の状態から周期的にシフトした点を次の状態として選ぶのである (図 3)。この手順により詳細つりあいは破れ正味の確率流が導入される。その結果ある種の負の相関が生じサンプリング効率が高まるというわけである。一方、熱浴法のような棄却のない更新法が使えない連続変数に対しては、これまでほとんどの場合メトロポリス法またはメトロポリス・ヘイスティング法が用いられてきた。ここで棄却がボトルネックとなる。我々は新しい複数状態候補生成法を提案し、離散変数に対するアルゴリズムを用いることで棄却率を大幅に減らすことに成功した。発表ではこれまでの状態更新法と我々の新しい手法を説明し、いくつかの例で性能を比較した結果について議論する。

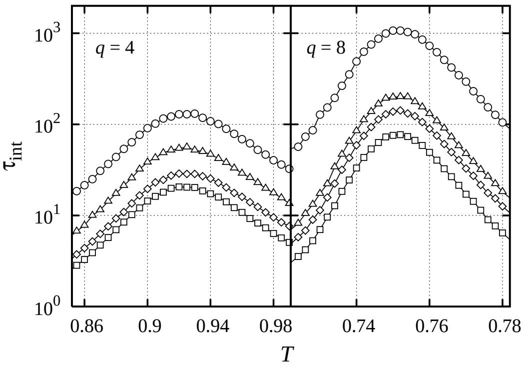

図 2:　正方格子強磁性ポッツ模型 ($q = 4$, 8) の構造因子の自己相関時間。メトロポリス法 (◯)、熱浴法 (△)、逐次的メトロポリス化ギブスサンプラー [1](◇)、我々の手法 [3,4](□) の結果を示す。転移温度はそれぞれ $T \simeq 0.910$, 0.745。格子サイズは 16×16。

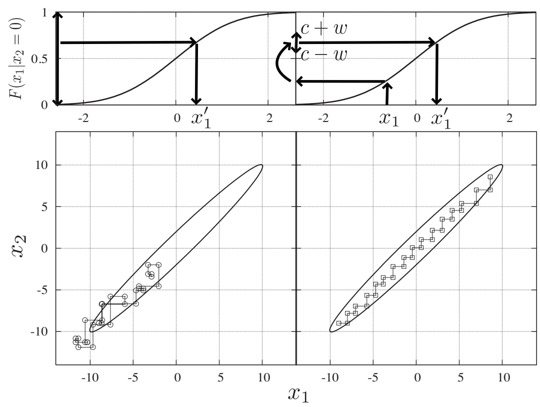

図 3:　2 変量正規分布での、熱浴法 (左) と我々の手法 (右)[5] による状態の軌跡。上は条件付き累積分布関数を用いた状態更新の手順。

[1] A. Frigessi, C.-R. Hwang, L. Younes, *Ann. Appl. Probab.* **2**, 610—628 (1992).
[2] C.-R. Hwang *Cosmos* **1(1)**, 87 (2005).
[3] H.Suwa and S. Todo, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 120603 (2010).
[4] H.Suwa and S. Todo, arXiv:1106.3562
[5] H.Suwa and S. Butsuri 66, 370 (2011).