

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とその一般化

諏訪 秀磨^{1,2}, 藤堂 眞治³

¹ 東京大学大学院工学系研究科

² Department of Physics, Boston University

³ 東京大学物性研究所

Hidemaro Suwa^{1,2} and Synge Todo³

¹ Department of Applied Physics, University of Tokyo

² Department of Physics, Boston University

³ Institute for Solid State Physics, University of Tokyo

メトロポリス法や熱浴法など、代表的なマルコフ連鎖モンテカルロ法は、これまでほぼ全て、詳細つりあいの枠内で議論されてきた。しかし、詳細つりあいは必要条件ではない。本稿では、つりあい条件を満たしながらも詳細つりあいを破るような新しいタイプのマルコフ連鎖について解説する。この手法では、重みの埋め立てという幾何学的な手続きにより、平均棄却率を最小化、もしくは完全にゼロにすることができる。さらに、詳細つりあいを破ることにより、正味の確率流が生じ、より高いサンプリング効率が実現される。また、状態変数が連続自由度をもつ場合への拡張についても議論する。

1 はじめに

モンテカルロ法は、高次元の問題に対する汎用的なシミュレーション手法であり、物理に限らず、化学、生物、医学、統計、経済など、様々な分野で広く使われている。特に、相関の強い系の相転移現象などにおいては、多自由度であることが本質的に重要であり、その数値的研究においてマルコフ連鎖モンテカルロ法は大きな役割をはたしてきた [1]。

マルコフ連鎖モンテカルロ法は、状態間を動き回る一種のランダムウォークを導入することで、任意の分布からの重要度サンプリングを実現する。これにより、高次元においてもサンプリングの効率を高く保ち、「次元の呪い」を克服することができる。その反面、直前の状態に依存して次の状態が決められるので「サンプル間の相関」が生じる。サンプル間の相関は2つの問題を引き起こす：1つは平衡状態に収束するまでの時間（緩和時間）の増加、もう1つは有効サンプル数の減少である。前者は、平衡分布からの分布の「ずれ」あるいは遷移行列（カーネル）におけるスペクトルギャップから定量的に評価することができる。一方、有効サンプル数の減少は、以下で定義される積分自己相関時間で特徴付けるこ

とができる:

$$\tau_{\text{int}} = \sum_{t=1}^{\infty} C(t) = \sum_{t=1}^{\infty} \frac{\langle O_{i+t} O_i \rangle - \langle O \rangle^2}{\langle O^2 \rangle - \langle O \rangle^2}. \quad (1)$$

ここで, O_i は i ステップ目における物理量の測定値, $C(t)$ は相関関数であり分布が収束した後には, i には依存しない. 総モンテカルロステップ数を M とすると, この自己相関の効果により, 有効サンプル数はおよそ $M_{\text{eff}} \simeq M/(1 + 2\tau_{\text{int}})$ に減少する. すなわち, 測定量の期待値の分散は, $v/M \simeq \text{var}(f)/M_{\text{eff}}$ のように振る舞う. ここで, v は漸近分散と呼ばれ, 測定量および更新方法に依存する量である.

より効率的なマルコフ連鎖モンテカルロ法を実現するには, 以下の3つの点を考慮する必要がある. 1つめは, アンサンブル (目的とする確率分布) の選択である. タンパクの折り畳みやスピングラス問題に対しては, マルチカノニカル法やレプリカ交換法など, 様々な拡張アンサンブル法が用いられる. 2つめは, 遷移先となる状態候補の選択である. クラスタアルゴリズムは, グラフ配位を経由することで, 状態を大域的に更新する. それにより, 多くの系において臨界緩和 (系のサイズにしたがって, 緩和時間が冪的に増加する現象) を解決することができる. また, ハイブリッド (ハミルトニアン) モンテカルロ法においては, 仮想的な運動量のもとでの時間発展を導入することで, 大域更新を実現する. 3つめは, 候補状態の組が与えられたときの遷移行列 (カーネル) の選択である. 以下では, 最後の点に焦点を絞り遷移行列の構成法について考えていくことにする.

2 遷移行列の可逆性

マルコフ連鎖モンテカルロ法において, 「エルゴード性」は状態分布が初期状態によらず同一の分布に収束することを保証する (既約性・非周期性). また, その分布が目的とする確率分布 (平衡分布) と一致するように, 「つりあい条件」が課される. しかしながら, 1953年にマルコフ連鎖モンテカルロ法が提案されてからこれまで, 単なるつりあい条件ではなく, 主としてその十分条件である「詳細つりあい条件」が用いられてきた. 詳細つりあい条件のもとでは, 全ての過程の遷移確率は, 対応する逆過程とつりあうように定められる (可逆性). そのため, それぞれの状態の組ごとに方程式を解くだけで簡単に遷移確率を決定することができる. メトロポリス法 (メトロポリス・ヘイスティング法) [2, 3] や熱浴法 (ギブスサンプラー) [4] などは, 全て可逆的なモンテカルロ法である.

ここでは有限な状態空間 S を考えることにする. 2つのカーネル P_1, P_2 (それぞれ遷移行列で表される) について, P_2 の全ての非対角要素が, 対応する P_1 の非対角要素と等しいか, より大きい場合に, $P_2 \geq P_1$ と定義する. このとき, 可逆的なカーネルに対して, 以下の定理が知られている.

定理 1 (Peskun [5]) 既約な遷移行列 P_1, P_2 が, 不変確率分布 π に対して可逆的であるとする. $P_2 \geq P_1$ であるならば, 任意の実数値関数 $f: S \rightarrow \mathbf{R}$ に対して

$$v(f, P_1, \pi) \geq v(f, P_2, \pi) \quad (2)$$

が成り立つ。ここで漸近分散 $v(f, P, \pi)$ は、遷移行列 P をもつマルコフ鎖により生成される連続した M 個のサンプルによる推定値 $\hat{I}_M = \sum_{i=1}^M f(x_i)/M$ から

$$v(f, P, \pi) = \lim_{M \rightarrow \infty} M \text{var}(\hat{I}_M) \quad (3)$$

と定義される。

一般的に、Peskun の定理から、より小さな棄却率 (すなわち対角成分) を持つ遷移行列はより短い相関時間を与えると期待される。この定理にもとづき、「メトロポリス化されたギブスサンプラー」が提案されている [6, 7]。通常のギブスサンプラーでは、次の状態は現在の状態とは全く無関係に選ばれる。一方、メトロポリス化された方法では、現在とは異なる状態の組からその重みにしたがって候補を選んだ後、メトロポリスの方法で採用/棄却を行う。状態 i から j への遷移確率は次の式で与えられる:

$$p_{i \rightarrow j}^{MG} = \min[\pi_j/(1 - \pi_i), \pi_i/(1 - \pi_j)] \quad \forall i \neq j. \quad (4)$$

ここで、 π_i は状態 i の重みを表す。状態が 2 つしかない場合には、この修正ギブスサンプラーは、通常のギブスサンプラーではなくメトロポリス法に帰着する。Peskun の定理より以下が示される。

定理 2 (Frigessi-Hwang-Younes-Liu [6, 7]) 同一の不変確率分布 π に対するギブスサンプラーとメトロポリス化したギブスサンプラーの遷移行列をそれぞれ P^G と P^{MG} とする。定数ではない任意の有界な実数値関数 f に対して

$$v(f, P^G, \pi) > v(f, P^{MG}, \pi) \quad (5)$$

が成り立つ。

さらにこのメトロポリス化による修正を繰り返し用いる方法も提案されている [6]。これらは全て、詳細つりあいの枠中での最適化である。

しかしながら、詳細つりあい (可逆性) はマルコフ連鎖モンテカルロ法にとって必要条件ではない。例えば、格子上的状態変数をあらかじめ決まった順序で更新する「逐次更新」においては、全体としてのつりあい条件は満たされているものの、詳細つりあいは破れている [8]。これまでにも、様々な不可逆なマルコフ鎖が試みられている。Diaconis らは、エネルギー (コスト関数) など一次元空間上での向きをあらわす新たな状態変数を導入することにより、状態空間を複製する手法を提案した [9, 10]。さらに複素軸への拡張も行われている [11]。ハイブリッドモンテカルロ法 [12] において導入される仮想的な運動量も状態空間における一種の向きとして働く。直前の状態だけではなく、2 つ以上の状態を考慮に入れることにより、向きを導入する試みもある [13]。他にも、状態空間への確率渦の導入 [14]、剛体球系における非対称な方向選択 [15]、大域的な遷移行列の最適化 [16] など様々な手法が提案されている。なお、ハイブリッドモンテカルロ法で、仮想運動量により向きが導入されるが、運動量の更新により可逆性は回復している。このように、近年、正味の確率流 (不可逆性) の導入 [17] が様々な形で議論されているが、以下では、幾何学的なアプローチにもとづいた、より積極的に可逆性を破る手法について見ていくことにする。

アルゴリズム 1 不可逆カーネル構成法 (諏訪・藤堂 [18])

- (i) 遷移状態候補の中から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.
 - (ii) 最大重み w_1 を次の箱 ($i = 2$) に埋める. 余りが生じる場合には次の箱 ($i = 3$) に埋める. 余りがなくなるまで続ける.
 - (iii) 最初に埋め立てられた箱 ($i = 2$) の重み (w_2) を, ステップ (ii) の続きに埋める. 同様に余りがなくなるまで続ける.
 - (iv) 残りの重み $w_3, w_4, \dots, w_n$ についてもステップ (iii) を順に繰り返す. 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.
-

3 幾何学的埋め立て

マルコフ連鎖モンテカルロ法においては, 局所的な状態更新を続けて行うことにより全体の状態を更新する. 以下では, 文献 [18] の内容に沿って, 離散変数の場合の局所更新について考えていくことにする. 遷移状態の候補 (現在の状態も含む) の数を n , それぞれの重みを $w_i \in \mathbf{R}$ ($i = 1, \dots, n$) とする. それぞれの状態の出現確率 π_i は重みに比例する. ここで, 状態 i から状態 j への (差し引き前の) 生の確率流に相当する量として $v_{i \rightarrow j} := w_i p_{i \rightarrow j}$ を導入する. 確率の保存則とつりあい条件はそれぞれ

$$w_i = \sum_{j=1}^n v_{i \rightarrow j} \quad \forall i, \quad (6)$$

$$w_j = \sum_{i=1}^n v_{i \rightarrow j} \quad \forall j \quad (7)$$

と表わされる. 同様に平均の棄却率は $\sum_i v_{i \rightarrow i} / \sum_i w_i$ と表わされる. 生の確率流 $v_{i \rightarrow j}$ は, メトロポリス法では

$$v_{i \rightarrow j} = \frac{1}{n-1} \min[w_i, w_j] \quad i \neq j, \quad (8)$$

熱浴法では

$$v_{i \rightarrow j} = \frac{w_i w_j}{\sum_{k=1}^n w_k} \quad \forall i, j \quad (9)$$

と与えられ, 条件 (6), (7) を満たすことが確認できる. 両者とも可逆的なので, $v_{i \rightarrow j}$ は添字の入れ替えに対して対称である.

我々の目標は, 条件 (6), (7) のもとで, 平均棄却率を最小化する $\{v_{i \rightarrow j}\}$ を見つけることである. この問題は, 「重みの埋め立て」として視覚的に解釈できる. すなわち, もとの色の面積が変わらないように, かつ全体の形が変わらないように, 状態 i から j に重み $v_{i \rightarrow j}$ を移動する (埋め立てる) ことに他ならない (図 1). 我々が文献 [18] で提案した方法をアルゴリズム 1 に示す. 重み w_1 が最も大きいと仮定すると, 確率流 $\{v_{i \rightarrow j}\}$ は

$$v_{i \rightarrow j} = \max(0, \min(\Delta_{ij}, w_i + w_j - \Delta_{ij}, w_i, w_j)), \quad (10)$$

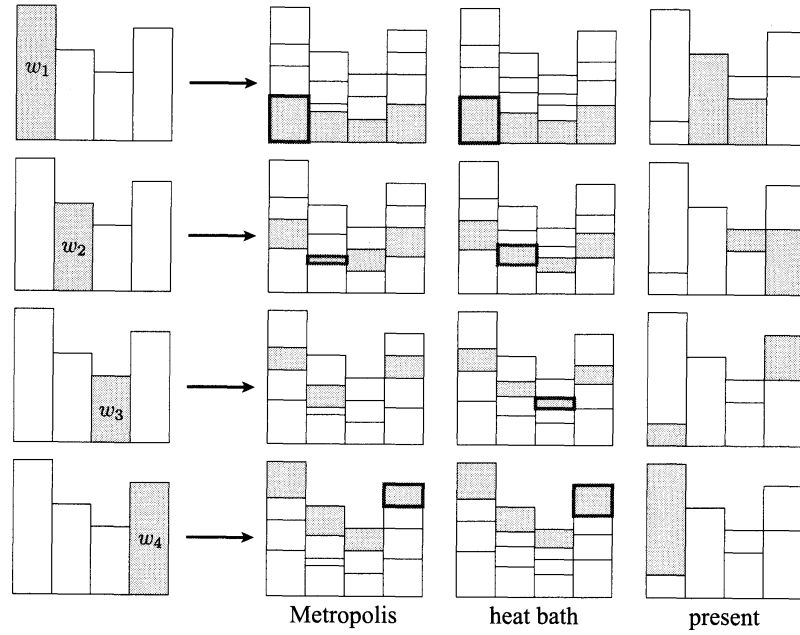


図 1: メトロポリス法, 熱浴法, 諏訪・藤堂法による重みの埋め立て. 諏訪・藤堂法では, 他の 2 つと異なり棄却率はゼロとなっている. (文献 [18] より)

で与えられる. ここで

$$\Delta_{ij} := S_i - S_{j-1} + w_1 \quad 1 \leq i, j \leq n \quad (11)$$

$$S_i := \sum_{k=1}^i w_k \quad 1 \leq i \leq n \quad (12)$$

$$S_0 := S_n \quad (13)$$

である. この解は, 条件 (6) と (7) をともに満たしているが, 可逆性は破っている. 例えば, 図 1 では, $v_{1 \rightarrow 2} > 0$ であるが, $v_{2 \rightarrow 1} = 0$ である. 棄却確率 (自分自身への割り当て量) は

$$v_{i \rightarrow i} = \begin{cases} \max(0, w_1 - \sum_{i=2}^n w_i) & i = 1 \\ 0 & i \geq 2 \end{cases} \quad (14)$$

で与えられる. すなわち

$$w_1 \leq \frac{S_n}{2} \equiv \frac{1}{2} \sum_{k=1}^n w_k \quad (15)$$

の時, 平均棄却率はゼロとなることが分かる. 逆にこの条件が満たされていない場合, 最大重みは残りの和よりも大きいので, 自分自身への割り当ては避けられない. すなわち, ここで得られた解は, 最小の平均棄却率を与えることが分かる. さらに, 遷移状態の候補の数を増やすことにより, 棄却率を確実に減らすことができるということも, 式 (14) から明らかである. 実際, この考えにもとづき, 量子統計力学模型において棄却のない量子モンテカルロ法が構成されている [18]. 連続自由度をもつ系への拡張については 6 節, 7 節で議論する.

4 エルゴード性

次に、前節で導入された遷移確率によるマルコフ鎖のエルゴード性について考えよう [19, 20]. 有限グラフ (格子) G において、頂点の集合を V , 各頂点 $(v_i \in V, i = 1, 2, \dots, |V|)$ での局所状態変数を x_{v_i} , 局所状態空間を $S_{v_i} = \{x_{v_i}\}$, 系全体の状態を $x = (x_{v_i})$, 状態空間を $S = \{x\}$ とする. また、任意の状態 x に対し、重み (測度) w_x が定義されているとする. ある初期状態 $x^{(0)} \in S$ から出発し、以下の手順にしたがって状態更新することを考えよう.

1. 確率密度 q ($q(v) > 0 \forall v \in V$) にしたがって、頂点 $v \in V$ を選ぶ.
2. 他の局所変数 $x_{-v} = (x_s)_{v \neq s \in V}$ を固定したまま、アルゴリズム 1 [式 (10)] にしたがって状態 x_v を更新する.

アルゴリズム 1 における埋め立ての順番は任意だが、あらかじめ固定されているとする. 遷移確率はシミュレーションの前に全て計算できる. この手順をランダム更新諏訪・藤堂法と呼ぼう. すると次の定理が成り立つ.

定理 3 有限グラフ上において、ランダム更新諏訪・藤堂法で構成されるマルコフ鎖は既約である.

証明 (定理 3) 更新手順 2 における局所状態変数 x_v の更新において、局所状態数を $n_v = |S_v|$, 局所遷移行列 (次元 n_v) を $\tilde{P} \equiv \tilde{P}(x_v)$ とする. 状態 $a \in S_v$ から状態 $b \in S_v$ への遷移確率に対応する $\tilde{P}$ の行列要素を $\tilde{P}_{a \rightarrow b}$ とする. まず次の補題を示そう.

補題 1 アルゴリズム 1 による遷移行列は既約である.

証明 (補題 1) 遷移行列 $\tilde{P}$ により、状態を繰り返し更新することを考えよう. 遷移確率 $\tilde{P}_{a \rightarrow b}$ が正となるのは、アルゴリズム 1 で $v_{a \rightarrow b} > 0$ となるときである. ここで今、最大の重みを持つ状態 $c \in S_v$ から状態更新していくとする. すると他の状態を巡りながら、 n_v 回以下の更新で必ず c に戻って来る. 言い換えると、 c 以外のどの状態へも c から n_v 回未満で行くことができ、また c 以外のどの状態からでも、 c に n_v 回未満で戻って来ることができる. したがって、任意の $a, b \in S_v$ に対して、 $m < 2n_v$ を満たす整数 m が存在し、 $\tilde{P}_{a \rightarrow b}^m > 0$. すなわち $\tilde{P}$ は既約. $\square$

P を 1 モンテカルロステップに対応する遷移行列とし、ある状態 $y \in S$ から別の状態 $z \in S$ への遷移を考える. 補題 1 により、ある整数 $m_1 < 2n_{v_1}$ 回連続で v_1 を選ぶことにより、 $y_{v_1} = z_{v_1}$ とすることができる. 他の $i = 2, 3, \dots, |V|$ についても、 m_i 回連続で v_i を選ぶことにより、 $y_{v_i} = z_{v_i}$ とすることができる. したがって、任意の $y, z \in S$ について $M = \sum_i m_i$ とすると、 $P_{y \rightarrow z}^M > 0$. すなわち P は既約. $\square$

次にマルコフ鎖の周期性について考えよう. 状態 x_i の周期は、その状態から出発してまたその状態に戻りうるまでのステップ数の最大公約数として定義される. つまり周期 $k = \gcd\{n : \Pr(x^{(n)} = x_i | x^{(0)} = x_i) > 0\}$ であり、状態 x_i は $k \neq 1$ のとき周期的、 $k = 1$ のとき非周期的となる. すべての状態が非周期的のとき、そのマルコフ鎖は非周期的である. 状態空間が有限の場合、確率行列に関する Perron-Frobenius の定理により、マルコフ鎖が

既約かつ非周期的であることはエルゴード的であることの必要十分条件となる [20]. 既約なマルコフ鎖において、もし有限の棄却率を持つ状態があれば、マルコフ鎖は非周期的となり、したがってエルゴード的である。一方、棄却がゼロである場合には、マルコフ鎖は周期的になりうる。例えば $n=3$ で $w_1 = w_2 + w_3$ の場合、局所遷移行列は周期的でその周期は2である。仮に全ての局所遷移行列が同じ周期を持つとすると、マルコフ鎖は周期的となる。

局所遷移行列により局所変数 x_{v_i} を繰り返し更新する際に、最大の重みを持つ状態 $c \in S_{v_i}$ から出発すると必ず n_{v_i} 回以下で c に戻ってくことを述べた。このときいくつかの周期がありうるが、その周期を $\ell_{i1}, \ell_{i2}, \dots$ と呼ぼう。次にこれら局所周期の最大公約数を $\ell_{\text{gcd}} = \text{gcd}\{\ell_{ij}\}$ と定義する。このとき次の定理が示される。

定理 4 ランダム更新諏訪・藤堂法によるマルコフ鎖がエルゴード性である必要十分条件は $\ell_{\text{gcd}} = 1$ である。

証明 (定理 4) まず $\ell_{\text{gcd}} \neq 1$ のときは、すべての局所遷移行列が周期的であり、マルコフ鎖も周期的となるため、エルゴード的でない。よって対偶をとり、マルコフ鎖がエルゴード的のとき $\ell_{\text{gcd}} = 1$ 。逆に $\ell_{\text{gcd}} = 1$ のとき、互いに素な局所周期の組 p, q が存在する [$\text{gcd}(p, q) = 1$]. このとき全ての $k \geq (p-1)(q-1)$ に対して、0以上の整数 $a, b \in \mathbb{N}^0$ が存在し、 $k = a \times p + b \times q$ と表すことができる。定理3よりランダム更新諏訪・藤堂法は既約であるので、任意の $y, z \in S$ に対してある自然数 M が存在して $P_{y \rightarrow z}^M > 0$ 。状態の組 y, z に関して、このような自然数の最大値を M_m とする。また互いに素な局所周期 p, q は、それぞれ頂点 v_i, v_j での状態更新に関するもので、 $n_{v_i} = |S_{v_i}|, n_{v_j} = |S_{v_j}|$ とする。すると自然数 $N = M_m + (p-1)(q-1) + n_{v_i} + n_{v_j}$ が存在し、全ての $k \geq N$ と任意の $y, z \in S$ に対し、 $P_{y \rightarrow z}^k > 0$ となる。よってマルコフ鎖は非周期的なのでエルゴード的。□

この定理の条件 ($\ell_{\text{gcd}} = 1$) はほとんどの場合満たされるので、エルゴード性を直接示すことができる。一方、ここではある確率密度 q に従って頂点を選ぶことを考えてきた。最も単純な方法としては、均等な確率で頂点を選べば良い。しかし実際の多くのシミュレーションでは、更新する頂点をあらかじめ固定した順序で順番に選ぶ「逐次更新」が用いられる。なぜなら多くの場合に相関時間がより短くなることが経験的に知られているからである。実際、逐次更新の方が均一ランダム更新より棄却率が小さくなることを示すことができる [21]。しかし一般的に、順序更新の場合にマルコフ鎖のエルゴード性を示すことは簡単でない。標準的な手法であるメトロポリス法においても、順序更新を用いると正しいサンプリングが保証されない場合がある。例えば、 2×2 正方格子上的イジング模型においては任意の温度で周期的となりエルゴード性が破れる [8]。このように、順序更新を用いた場合のエルゴード性の問題は、今後の興味深い課題である。

5 ベンチマークテスト

正方格子上的強磁性 q 状態ポッツ模型 [22] において、我々のアルゴリズムの性能検証を行った。ポッツ模型のコスト (エネルギー) 関数は $H = - \sum_{\langle i, j \rangle} \delta_{\sigma_i \sigma_j}$ で与えられる。ここで σ_k はサイト k の状態を表わす整数 ($1 \leq \sigma_k \leq q$)、 $\langle i, j \rangle$ は格子上的最近接点の組を表わす。こ

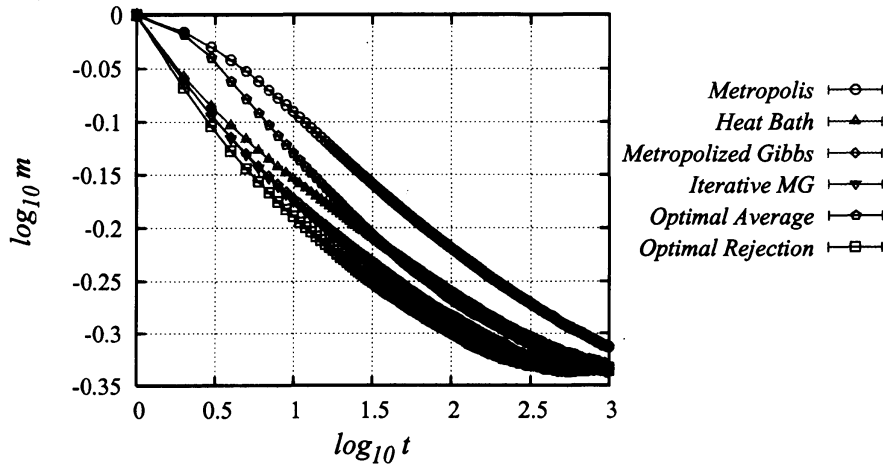


図 2: 正方格子上的強磁性 4 状態ポッツ模型の臨界温度直上における秩序変数の収束の様子. 系のサイズは $L = 32$. 横軸はモンテカルロステップを表す. エラーバーの大きさはシンボルサイズと同程度.

の模型は, $q \leq 4$ で連続相転移を, $q > 4$ では一次相転移を起こすことが知られている. 臨界温度は $T = 1/\ln(1 + \sqrt{q})$ で与えられる. 様々な方法で $q = 4$ と 8 の場合について秩序変数 [23] の二乗 (構造因子) の計算を行った.

秩序変数の収束 (平衡化) の様子を図 2 に示す. シミュレーションは完全秩序状態から出発し, 格子上的状態変数を順に逐次的に更新した. 格子は $L = 32$ の周期境界条件を課した正方格子で温度は臨界点に設定した. メトロポリス法, 熱浴法 (ギブスサンプラー), メトロポリス化ギブスサンプラー [7], 反復メトロポリス化ギブスサンプラー [6], 平均最適化法 [16], および最小棄却アルゴリズム (アルゴリズム 1) [18, 24] について比較を行った結果, 我々の方法が最も速く収束することを確認した. すなわち, 局所的な棄却率の最適化により, 全体の遷移行列の第 2 固有値が絶対値としてより小さく, マルコフ鎖のスペクトルギャップがより大きくなっていることを強く示唆している.

図 3 に $q = 4, 8$ の場合について自己相関時間の測定結果を示す. ここでも我々の方法が最も短い自己相関時間を達成していることが分かる. 自己相関時間 τ_{int} は, 関係式 $\sigma^2 \simeq (1 + 2\tau_{\text{int}})\sigma_0^2$ を用いて見積もった. ここで σ_0^2 は相関がないと仮定した時の測定量の期待値の分散, σ^2 は自己相関時間よりも十分長いサイズのビンに分けて見積もった真の分散である [1]. $q = 4$ (8) の場合, メトロポリス法に比べ約 6.4 (14) 倍, 熱浴法に比べ 2.7 (2.6) 倍, 反復メトロポリス化ギブスサンプラーと比べても 1.4 (1.8) 倍, 我々の方法が高速であることが分かる. 一方, 臨界点直上における動的臨界指数 (自己相関時間のシステムサイズ依存性) は方法によらずほぼ一定 ($z \simeq 2$) であった.

このように, 幾何学的埋め立てにもとづく我々の方法 (最小棄却アルゴリズム) [18, 24] は, 秩序変数の収束を加速すると同時に, 自己相関時間を短縮することが分かる. 本手法はポッツ模型だけでなく, 広く一般の模型に適用することが可能である.

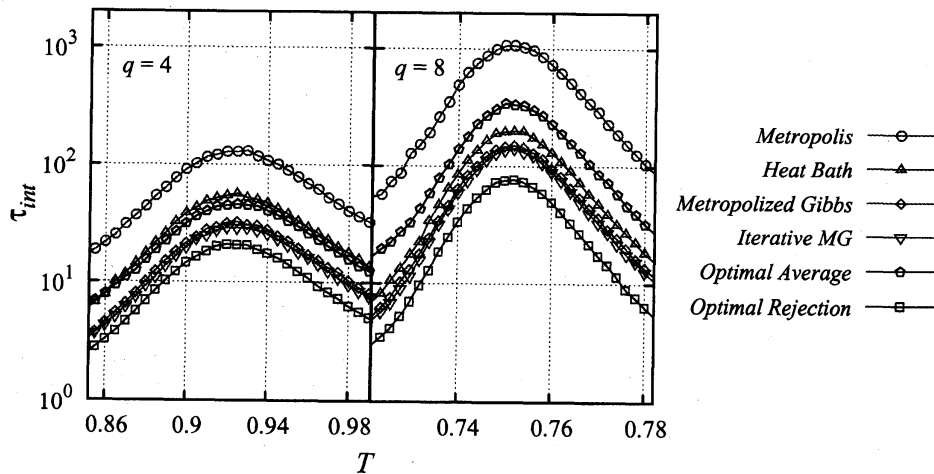
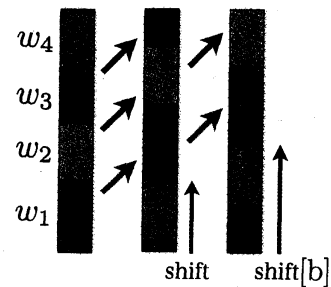


図 3: 正方格子上的強磁性 4 状態 (左) および 8 状態 (右) ポッツ模型の臨界温度近傍での構造因子の自己相関時間. 系のサイズは $L = 16$. (文献 [18] より)

図 4: 埋め立て法の累積分布関数による表現. アルゴリズム 1 は, 最大重み (w_1) だけ累積分布関数をシフトすることに対応する (中). 最大重みがそれ自身と重ならない範囲で任意の量だけシフトを行うことができる (右).



6 連続自由度系に対する拡張

次に状態変数が連続変数の場合を考える. 通常, 逆関数法が使える場合には, 熱浴法 (ギブスサンプラー) が用いられる. 逆関数法では, 一様分布にしたがう乱数 $r \in [0, 1]$ を生成し, 条件つき累積分布関数の逆関数を用いて, 新たな状態を決定する. 一方, 逆関数法が使えない場合には, ある提案分布にしたがって状態候補を生成し, メトロポリス法により採択/棄却する方法が用いられることが多い. 後者の場合, 提案分布の選択によっては棄却率が非常に大きくなってしまう. 連続自由度系の場合, 各状態の重みがゼロとなるので, 我々の埋め立ての方法をそのままの形では使うことはできない. しかしながら, 逆関数法, メトロポリス法, いずれの方法に対しても, 積極的に詳細つりあいを破ることにより, より効率のよいアルゴリズムを作ることが可能である. 本節では, まず, 逆関数法の改良について考える. より一般の場合については, 次節で考察する.

ここで, 3 節の埋め立ての方法の別の表現を考えよう. 埋め立て法では, まず, 最大重みを次の状態に割り当てる (アルゴリズム 1). この手続きは, 累積分布関数において, 最大重みだけシフトすることと等価である (図 4). シフトした分布関数ともとの分布の重なりが $\{v_{i \rightarrow j}\}$ を与える. このシフト量は, 最大重みである必要はない. 特に, 最大重みが残りの和より小さい場合, 棄却率がゼロとなる割り当てを与えるシフト量は一意には定まらず, 自由に選ぶことができる.

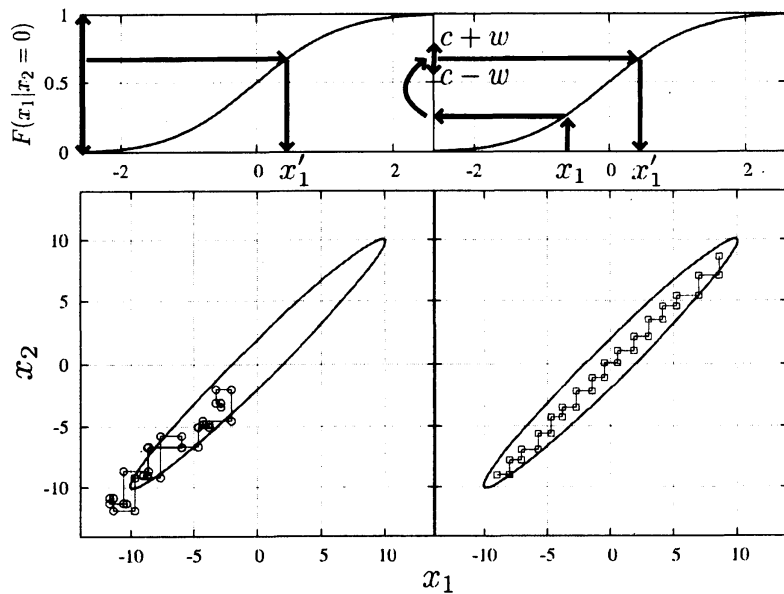


図 5: 2変量正規分布 ($\sigma_1 = 1, \sigma_2 = 10$) に対するギブスサンプラー (左) と不可逆アルゴリズム ($c = 0.4, w = 0.1$) (右) における状態の生成手順 (上) と状態遷移 (下). 楕円は分布の 3σ を表わす. (文献 [27] より)

例として, 2変量正規分布を考えよう:

$$P(x_1, x_2) \propto \exp \left[-\frac{(x_1 - x_2)^2}{2\sigma_1^2} - \frac{(x_1 + x_2)^2}{2\sigma_2^2} \right]. \quad (16)$$

熱浴法では, x_2 が与えられたとき, x_1 の条件付き累積分布関数

$$F(x_1|x_2) = \int_{-\infty}^{x_1} P(x, x_2) dx. \quad (17)$$

を用いて, 遷移先は

$$x'_1 = F^{-1}(r), \quad (18)$$

と求まる. ここで r は区間 $[0, 1]$ で一様分布する擬似乱数である. この手続きは明らかに詳細釣りあいを満たす.

正規分布に対しては, 過剰緩和法 [25] が最善な手法と考えられてきた. 過剰緩和法では, 直前の状態との相関が負となるように次の状態を決める. 条件付き正規分布 $P(z_i|\cdot) \sim N(\mu_i, \sigma_i^2)$, の場合, 次の状態は $z'_i = \mu_i + \alpha(z_i - \mu_i) + \sigma_i\sqrt{1-\alpha^2}\nu$, のように選ばれる. ここで ν は正規分布 $N(0, 1)$ にしたがう擬似乱数, α は $-1 < \alpha < 1$ を満たす定数である. さらに, その拡張として, 順序付き過剰緩和法 [26] も提案されている. この方法では, いくつかの候補状態を並びかえ, 現在の状態とほぼ「反対の」位置にある状態を選択することで, より効率的な更新を実現する.

ここではまた別の方法として, 以下の式にしたがう状態更新を考える [27]:

$$x'_1 = F^{-1}(\{F(x_1|x_2) + c + wu\}). \quad (19)$$

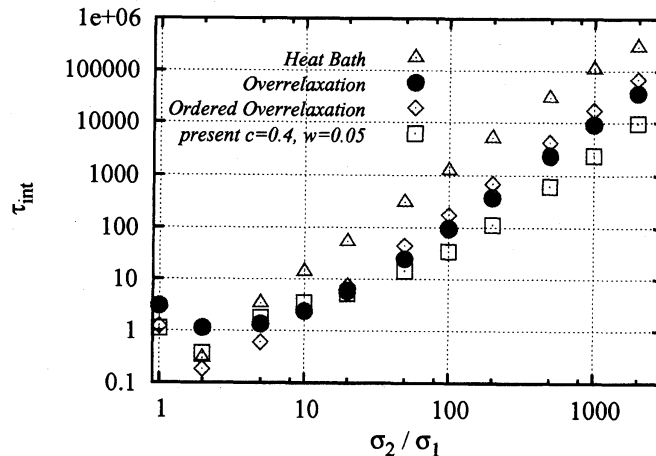
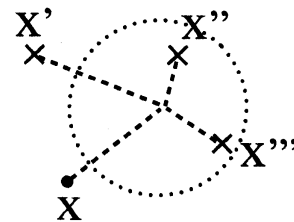


図 6: 2変量正規分布に対する, ギブスサンプラー, 過剰緩和法 ($\alpha = -0.86$), 順序付き過剰緩和法 (候補数 10), および我々の手法 ($c = 0.4, w = 0.05$) による $(x_1 + x_2)^2$ の自己相関時間. 横軸 σ_2/σ_1 はサンプリングの難しさを表す. エラーバーの大きさはシンボルサイズと同程度.

図 7: 複数の候補の生成方法 ($n = 4$). まず, 現在の状態 x をもとにハブ(ピボット)を選択する. 次に, ハブを基準として候補 x', x'', x''' を生成する.



ここで, x_1 は現在の状態, c と w は $c \geq w$ を満たす正の実数, u は区間 $[-1, 1]$ で一様分布する擬似乱数である. 記号 $\{a\}$ は実数 a の小数部を表わす. $c = w = 1/2$ の場合には, この方法は通常のギブスサンプラーに帰着する. 逆に, $c \neq 0, 1/2$ の場合には, 詳細つりあいが破れることにより, 正味の確率流が生じ, 図 5 のように状態空間全体としても流れが生じることになる. 結果として, $(x_1 + x_2)^2$ の自己相関時間は大幅に減少する. 図 6 において, ギブスサンプラー, 過剰緩和法 ($\alpha = -0.86$), 順序付き過剰緩和法 (候補数 10), および我々の手法 ($c = 0.4, w = 0.05$) の比較を示す. $\sigma_2/\sigma_1 \geq 50$ の領域では, 不可逆な遷移確率を用いた方法が最も短い自己緩和時間を実現する. 特にギブスサンプラーと比較すると約 50 倍速いことが分かる. また, 適切な定数 (c および w) を選択することにより, ほぼ全ての領域で過剰緩和法よりも効率的となることも分かった. この方法をランダム更新とともに用いた場合のエルゴード性は, 定理 4 と同様の方法で容易に示すことができる.

7 メトロポリス法を越えて

より一般の問題に対しても, 前節の考え方を応用することで棄却率を大幅に減らすことができる. 逆関数法を直接使うことができない場合には, 通常メトロポリス法が用いられる.

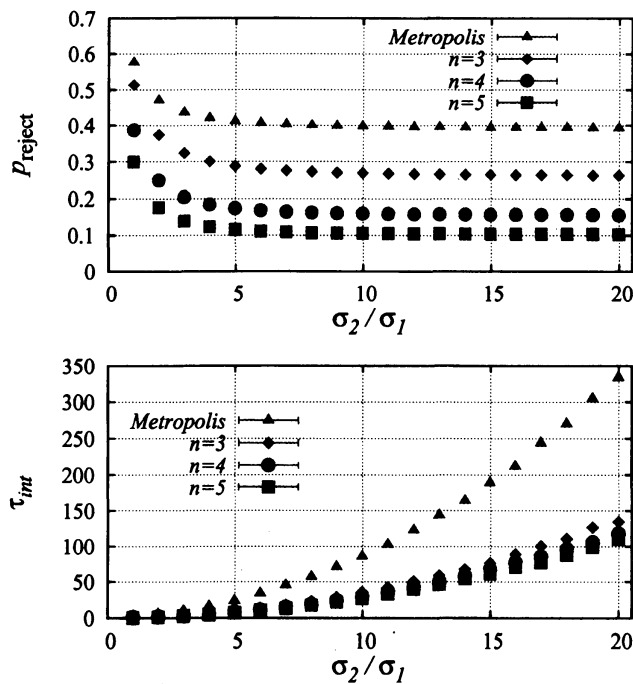


図 8: ワインボトルポテンシャル (20) に対するメトロポリス法と多点最小棄却法 ($n = 3, 4, 5$) の比較. 棄却率 (上) は n を大きくするにしたがい低下する. 同時に測定量 $(x_1 + x_2)^2$ の自己相関時間 (下) も短くなる.

メトロポリス法では, ある提案分布を用いて, 候補となる状態を生成し, 状態の重みにしたがって, 候補の採択/棄却を行う [2]. しかしながら, しばしば大きな棄却率が問題となる. すでに3節で示した通り, 候補の数 (今の状態を含む) が2つだけのときは, メトロポリス法が最適 (最小の棄却率を与える) である. すなわち棄却率をさらに下げするためには, より多くの候補を用意する必要がある. そのような複数の遷移先を導入する方法として, 例えば多点メトロポリス法が知られている [28, 29].

この方法では, まず複数の遷移候補を生成し, 次に生成された候補 (現在の状態も含む) の中から1つをその重みにしたがって選択する. しかし, 単に現在の状態からある分布にしたがって複数の候補を作るだけでは, つりあい条件が破れてしまう. なぜなら, 逆にその候補の1つから生成される複数の候補の分布を考えると, それはもとの状態から生成される候補の分布とは異なるためである. つりあい条件を満たすには, 以下の手順で n 個の候補を生成し, 次の状態を選択すれば良い [30]:

1. ある提案分布にしたがい, 現在の状態をもとに1つのハブ (ピボット) を生成する.
2. 次に, 同じ提案分布を用いて, ハブを基準として $(n - 1)$ 個の遷移候補を生成する (図 7).
3. 元の状態を含む合計 n 個の遷移候補の中から, 状態の重みにしたがって1つを選択する.

従来の多点メトロポリス法では, ステップ3において, 熱浴法を用いて最終的な遷移先を決定するが, 代わりに我々の提案した方法を用いることで, 棄却率を最小化することができる(多点最小棄却法). 例として, 下のようなワインボトル(メキシカンハット)ポテンシャルからのサンプリングを考えよう.

$$P(x_1, x_2) \propto \exp \left(- \left(\frac{(x_1 - x_2)^2}{2\sigma_1^2} + \frac{(x_1 + x_2)^2}{2\sigma_2^2} \right) \left(\frac{(x_1 - x_2)^2}{2\sigma_1^2} + \frac{(x_1 + x_2)^2}{2\sigma_2^2} - h \right) + \frac{h^2}{4} \right). \quad (20)$$

提案分布としては, 等方的な2変量正規分布 $q(\Delta x_1, \Delta x_2) \propto \exp(-(\Delta x_1)^2 - (\Delta x_2)^2)$ を採用する. $h = 16$ の場合の従来のメトロポリス法との比較を図8に示す. 候補を増やすことで棄却率が低下していることが分かる. それと同時に物理量 $(x_1 + x_2)^2$ の自己相関時間も短くなっている.

8 おわりに

本稿では, 有限自由度系における不可逆なマルコフ連鎖モンテカルロ法について紹介し, そのエルゴード性, 収束性について議論した. つりあい条件を満たしつつ詳細つりあい条件を破ることにより, 従来から用いられてきたメトロポリス法やギブスサンプラーなどと比較して, 収束が速くかつ自己相関時間の短いマルコフ鎖が構成できることを示した. 本稿では単純な例のみを取りあげたが, 我々の手法は任意のマルコフ連鎖モンテカルロに応用できる. 不可逆なマルコフ鎖の効率や状態空間の中での大域的な流れの構造について, より詳細な解析, 数値的な検証が今後の課題である.

参考文献

- [1] Landau, D. P. & Binder, K. *A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics* (Cambridge University Press, Cambridge, 2005), 2nd edn.
- [2] Metropolis, N., Rosenbluth, A. W., Rosenbluth, M. N., Teller, A. H. & Teller, E. Equation of state calculations by fast computing machines. *J. Chem. Phys.* **21**, 1087 (1953).
- [3] Hastings, W. K. Monte Carlo sampling methods using Markov chains and their applications. *Biometrika* **57**, 97 (1970).
- [4] Geman, S. & Geman, D. Stochastic relaxation, Gibbs distributions and the Bayesian restoration of images. *IEEE Trans. Pattn. Anal. Mach. Intel.* **6**, 721 (1984).
- [5] Peskun, P. H. Optimum Monte Carlo sampling using Markov chains. *Biometrika* **60**, 607 (1973).

- [6] Frigessi, A., Hwang, C.-R. & Younes, L. Optimal spectral structure of reversible stochastic matrices, Monte Carlo methods and the simulation of Markov random fields. *Ann. Appl. Probab.* **2**, 610–628 (1992).
- [7] Liu, J. S. Peskun's theorem and a modified discrete-state Gibbs sampler. *Biometrika* **83**, 681–682 (1996).
- [8] Manousiouthakis, V. I. & Deem, M. W. Strict detailed balance is unnecessary in Monte Carlo simulation. *J. Chem. Phys.* **110**, 2753 (1999).
- [9] Diaconis, P., Holmes, S. & Neal, R. M. Analysis of a nonreversible Markov chain sampler. *Ann. Appl. Probab.* **10**, 726 (2000).
- [10] Turitsyn, K. S., Cherkov, M. & Vucelja, M. Irreversible Monte Carlo algorithms for efficient sampling. *Physica D* **240**, 410–414 (2011).
- [11] Fernandes, H. C. M. & Weigel, M. Non-reversible Monte Carlo simulations of spin models. *Comput. Phys. Commun.* **182**, 1856–1859 (2011).
- [12] Duane, S., Kennedy, A. D., Pendleton, B. J. & Roweth, D. Hybrid Monte Carlo. *Phys. Lett. B* **195**, 216 (1987).
- [13] Neal, R. M. Improving asymptotic variance of MCMC estimators: non-reversible chains are better. Tech. Rep. 0406, Department of Statistics, University of Toronto (2004).
- [14] Sun, Y., Gomez, F. J. & Schmidhuber, J. Improving the asymptotic performance of Markov chain Monte-Carlo by inserting vortices. In *NIPS*, 2235–2243 (2010).
- [15] Bernard, E., Krauth, W. & Wilson, D. B. Event-chain Monte Carlo algorithms for hard-sphere systems. *Phys. Rev. E* **80**, 056704 (2009).
- [16] Hwang, C.-R., Chen, T.-L., Chen, W.-K. & Pai, H.-M. On the optimal transition matrix for MCMC sampling. *Siam J. Control. Optim.* (2012-02).
- [17] Hwang, C.-R., Hwang-Ma, S.-Y. & Sheu, S.-J. Accelerating diffusions. *Ann. Appl. Probab.* **15**, 1433–1444 (2005).
- [18] Suwa, H. & Todo, S. Markov chain Monte Carlo method without detailed balance. *Phys. Rev. Lett.* **105**, 120603 (2010).
- [19] Tierney, L. Markov chain for exploring posterior distributions. *Ann. Stat.* **22**, 1701 (1994).
- [20] Meyn, S. P. & Tweedie, R. L. *Markov Chains and Stochastic Stability* (Springer, New York, 1993).

- [21] Ren, R. & Orkoulas, G. Acceleration of Markov chain Monte Carlo simulations through sequential updating. *J. Chem. Phys.* **124**, 064109 (2006).
- [22] Wu, F. Y. The Potts model. *Rev. Mod. Phys.* **54**, 235 (1982).
- [23] Zheng, B. Monte Carlo simulations of short-time critical dynamics. *Int. J. Mod. Phys. B* **12**, 1419 (1998).
- [24] Suwa, H. & Todo, S. Geometric allocation approach for transition kernel of Markov chain. *Monte Carlo Methods and Applications* 213–221 (2012).
- [25] Adler, S. L. Over-relaxation method for the Monte Carlo evaluation of the partition function for multi-quadratic actions. *Phys. Rev. D* **23**, 2901 (1981).
- [26] Neal, R. M. Suppressing random walks in Markov chain Monte Carlo using ordered overrelaxation. In Jordan, M. I. (ed.) *Learning in Graphical Models*, 205–228 (MIT Press, 1999).
- [27] Suwa, H. & Todo, S. 詳細つりあいを満たさないモンテカルロ法. *Butsuri* **66**, 370 (2011).
- [28] Liu, J. S. *Monte Carlo Strategies in Scientific Computing* (Springer, 2001), 1st edn.
- [29] Tjelmeland, H. Using all Metropolis-Hastings proposals to estimate mean values. Tech. Rep. 4, Norwegian University of Science and Technology (2004).
- [30] Murray, I. *Advances in Markov chain Monte Carlo methods*. Ph.D thesis, Gatsby computational neuroscience unit, University College London (2007).