論文の内容の要旨

論文題目　マルコフ連鎖モンテカルロ法における詳細つり合い条件の破れの効果とその応用

Theoretical study of violating detailed balance condition in Markov chain Monte Carlo methods

氏名　酒井 佑士

本博士論文は, 汎用的な数値計算手法のひとつであるマルコフ連鎖モンテカルロ法 (Markov chain Monte Carlo method, MCMC 法) において「詳細つり合い条件の破れ」がもたらす効果を理論的に理解し, MCMC 法の性能向上に活かすことを目指したものである.

MCMC 法を実行するためには, 定常分布の設定と遷移確率の構成が必要となる. 設定した定常分布への収束を保証するためには, 遷移確率がエルゴード条件とつり合い条件をみたすことが必要十分である. 実際は遷移確率の構成において, つり合い条件のかわりにその十分条件である詳細つり合い条件を課すことが多い. たとえば拡張アンサンブル法やクラスターアルゴリズムなど, これまで提案されてきた効率的な MCMC 法は詳細つり合い条件の枠組みの中で発展し, その性能改善が図られてきた. しかし詳細つり合い条件はあくまで定常分布への収束を保証するための十分条件でしかなく, 詳細つり合い条件を破りつつもつり合い条件をみたす MCMC 法を構成することも原理的には可能である. MCMC 法の性能の観点からも詳細つり合い条件を課すことがよいことなのかどうかはわかっておらず, より効率的な MCMC 法を追求する上で詳細つり合い条件の破れが MCMC 法の性能に及ぼす効果を理解することが不可欠である.

近年, 詳細つり合い条件を破りつつもつり合い条件をみたす MCMC 法がいくつか提案され, その有用性が数値的に示されている. また詳細つり合い条件の破れが一般に MCMC 法の性能に及ぼす効果について部分的にではあるが理論的にも示されつつある. しかしこれら

の理論的な結果には不十分な点もあり, MCMC 法の性能の観点からみた詳細つり合い条件の位置づけや詳細つり合い条件を破る効果は十分に理解されているとはいえない.

そこで本博士論文では, 詳細つり合い条件の破れが MCMC 法の性能にもたらす効果を理論的により深く理解することを試みた. その結果として, 本文中の各章 (特に第 4 章・第 5 章・第 6 章) で述べるいくつかの結果を得た. 以下に各章の概要を記す.

第 1 章　序論

計算物理学における数値計算の位置づけやその性能評価の例, および MCMC 法の性能改善の歴史をまとめる.

第 2 章　マルコフ連鎖モンテカルロ法の理論的性能評価

MCMC 法の数理的基礎を概観する. 特に定常分布への収束を保証する条件を述べた Perron–Frobenius の定理を中心に, MCMC 法の理論的背景を詳細に扱う. また MCMC 法の性能と, 対応する遷移確率行列の固有値の関係を議論する.

第 3 章　詳細つり合い条件を破るマルコフ連鎖モンテカルロ法

これまでに提案されている詳細つり合い条件を破る MCMC 法の例として, Suwa–Todo アルゴリズムと irreversible Metropolis–Hastings (IMH) アルゴリズムの構成法をみる. また詳細つり合い条件の破れが MCMC 法の性能にもたらす効果について, これまで一般的に示されている結果を述べ, 本博士論文の論点を明らかにする.

第 4 章　詳細つり合い条件を破る 1 次元ランダムウォーク

詳細つり合い条件の破れが MCMC 法の性能にもたらす効果を理論的に理解するために, 1 次元リング上のランダムウォーク問題を考察する. ここでは, ねじれ詳細つり合い条件を用いた lifting によって 1 次元ランダムウォークの遷移確率行列に詳細つり合い条件の破れを導入する. その結果, 詳細つり合い条件の破れはいくつかのパラメタ δ, δ', γ で特徴づけられる. 本博士論文は類似の先行研究と異なり, 対応する遷移確率行列を解析的に対角化し, すべての固有値, 固有ベクトルを導出することで緩和時間や漸近分散の表式を与える. 特に詳細つり合い条件の破れを特徴づけるパラメタ δ, δ' の値を制限した 2 通りの設定で解析を行った結果, そのいずれにおいても詳細つり合い条件をみたす場合と比較して, 緩和時間や性能指数の最悪評価を改善できることを示す. さらにその改善は定量的なもの (定数倍程度の改善) にとどまらず, 緩和時間の状態数依存性が変化するなどの質的な改善をもたらしうることも明らかにする. しかし一方で, 詳細つり合い条件の破れが MCMC 法の性能を悪化させるパラメタ領域の存在も明らかとなり, 一般に詳細つり合い条件の破れが MCMC 法の性能改善をもたらすわけではないことも示唆される.

第 5 章　Irreversible simulated tempering アルゴリズム

第 4 章で明らかとなった詳細つり合い条件の破れの効果を MCMC 法の性能改善に活かすため, 拡張アンサンブル法のひとつであるシミュレーテッドテンパリングに詳細つり合い条件の破れを導入する．特にシミュレーテッドテンパリングにおける逆温度の状態遷移図が 1 次元ランダムウォークの状態遷移図と類似することに着目し, シミュレーテッドテンパリングの逆温度更新プロセスに IMH アルゴリズムを用いることで詳細つり合い条件を破る．本章で構成するアルゴリズムを irreversible simulated tempering (IST) アルゴリズムと呼ぶ. IST アルゴリズムでは逆温度の提案確率が lifting parameter に依存し, 詳細つり合い条件の破れはひとつのパラメタ δ で特徴づけられる．特に $\delta = 0$ で IST アルゴリズムは従来のシミュレーテッドテンパリングと等価になる．またシミュレーテッドテンパリングの実行に必要な重み因子を推定するアルゴリズム on-the-fly weight estimation に IST アルゴリズムを応用する.

第 6 章　Irreversible simulated tempering アルゴリズムの性能評価

第 5 章で提案した IST アルゴリズムにおいて詳細つり合い条件の破れがもたらす効果を検証するため, 2 次元イジング模型・2 次元 8 状態ポッツ模型・2 次元 XY 模型のそれぞれに IST アルゴリズムを適用し, その性能を数値的に評価する．その結果, on-the-fly weight estimation による重み因子推定では詳細つり合い条件の破れにより逆温度の緩和ダイナミクスが加速する一方, 重み因子の推定精度に詳細つり合い条件の破れの影響は見出されず, 要したモンテカルロステップ数に大きく依存することが示唆される．また重み因子を固定して IST アルゴリズムを実行し, 逆温度の round-trip time, 緩和関数, 経験遷移確率を測定することで, 逆温度の緩和時間を評価する．その結果, 詳細つり合い条件の破れは逆温度の緩和を加速させることが明らかとなる．特に緩和時間の逆温度個数 R 依存性が $\delta = 0$ では漸近的に $O(R^2)$ である一方, $\delta \neq 0$ では漸近的に $O(R)$ となることを数値的に示す．この結果は詳細つり合い条件の破れがシミュレーテッドテンパリングにおける逆温度の緩和を質的に改善することを示唆している．さらにこれにともなって, スピンの自己相関時間や秩序変数, エネルギーの自己相関時間にも改善がみられる．このことから, IST アルゴリズムの性能は従来のシミュレーテッドテンパリングよりも向上していることが数値的に示される.

第 7 章　結論と今後の展望

本博士論文で得られた結果をまとめ, これをふまえて今後の展望を述べる．また本博士論文で扱いきれなかったいくつかの事項を指摘し, 論点を明らかにした上で今後の課題を挙げる.