

論文審査の結果の要旨

論文提出者氏名 酒井 佑士

マルコフ連鎖モンテカルロ法 (Markov chain Monte Carlo method, MCMC 法) は、与えられた確率分布からのサンプリングを実現する汎用的な数値計算技法である。特に、一般に高次元空間のサンプリングは「次元の呪い」と呼ばれる計算困難さを伴うが、それを回避する方法として MCMC 法は古くから注目され、統計物理をはじめとする様々な分野で応用されている。これまでは MCMC 法の構成には強い条件である詳細つりあい条件を課すことが多かったが、近年になり、詳細つり合い条件を破る方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。しかし、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。この「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ことがこの博士論文である。

本論文は七章と付録からなり、第一章から第三章までに、計算物理学の意義やマルコフ連鎖モンテカルロ法の数理的基礎がまとめられ、先行研究の詳細つりあいを破る MCMC 法が説明されている。第四章では最も単純な問題に詳細つり合い条件の破れを導入し、その効果を議論する。そこで得られた知見を元に、詳細つり合い条件の破れの効果を活かした応用を第五章および第六章で議論している。最後に、第七章で本論文をまとめ、今後の課題と展望を述べている。また、付録には、第四章の内容の詳しい計算が示されている。

第一章は、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がまとめられる。第二章では、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い、MCMC 法の性能評価に遷移確率行列の固有値や漸近分散などがあることを説明している。第三章では、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。

第四章では、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している。本論文は先行研究と異なり、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により緩和時間や漸近分散の表式を与える。その結果として、詳細つり合い条件をみたまつり合い条件より性能が改善することを示した。さらにその改善は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すことも明らかにした。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。

第五章では、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の逆温度

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、その逆温度更新プロセスにIMH アルゴリズムにより詳細つり合い条件の破れを導入する。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にこのアルゴリズムを応用することを提案している。

第六章では、提案した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、様々は統計力学のスピンモデルに適用し、その性能を数値的に評価する。その結果、詳細つり合い条件の破れが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、提案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。

最後に、第七章にて、本論文で得られた結果をまとめ、今後の展望や課題を述べている。

なお、本論文の内容の一部は、福島孝治氏との共同研究であるが、論文提出者が主体になって解析を行ったものであると判断される。また、本論文の第四章と第五章の内容は三報の学術論文として出版されており、第六章の内容は投稿準備中である。

以上のように、本論文ではMCMC法における詳細つりあい条件の破れの効果の理解と応用に関して、数理的な側面とアルゴリズム開発の観点から大きく寄与したことが認められる。

したがって、本論文は博士(学術)の学位を授与するにふさわしい内容であると審査委員会は全員一致で判定した。