

マルコフ連鎖のシミュレーション

目次

1	マルコフ連鎖のシミュレーション	1
1.1	マルコフ連鎖の構成	1
1.2	コンピューターシミュレーション	2
2	マルコフ連鎖モンテカルロ法とマルコフ確率場	3
2.1	可逆なマルコフ連鎖	3
2.2	マルコフ連鎖モンテカルロ法	4
2.3	マルコフ確率場とギブス抽出法	5
2.3.1	マルコフ確率場	5
2.3.2	ギブス抽出法	6
2.3.3	ギブス確率場	7
3	Propp と Wilson の方法	8
3.1	基本となるアイデア	8
3.2	後方カップリング時間	9
3.3	Propp-Wilson Algorithm	9
3.4	Sandwiching	9

この資料では離散時間の斉時的マルコフ連鎖 (HMC) のシミュレーションに関していくつかの話題を紹介する¹ .

1 マルコフ連鎖のシミュレーション

1.1 マルコフ連鎖の構成

状態空間を $S = \{0, 1, 2, \dots\}$ とし, $P = (p_{ij})$ を推移確率行列, $a = (a_i)$ を確率ベクトルとする. P と a に対して, 更新関数 (update function) $\phi_P : S \times [0, 1) \rightarrow S$ と初期関数 (initial function) $\psi_a : [0, 1) \rightarrow S$ を以下で定義する.

$$\phi_P(i, u) = j, \quad \text{if } \sum_{k=0}^{j-1} p_{ik} \leq u < \sum_{k=0}^j p_{ik}, \quad i \in S \quad (1.1)$$

$$\psi_a(u) = j, \quad \text{if } \sum_{k=0}^{j-1} a_k \leq u < \sum_{k=0}^j a_k, \quad i \in S \quad (1.2)$$

また, $\{U_n\}$ を $[0, 1)$ 区間の一様分布に従う i.i.d. 確率変数列とする.

補題 1.1 (マルコフ連鎖のシミュレーション)

離散時間確率過程 $\{X_n\}$ を次のように帰納的に与える.

$$X_0 = \psi_a(U_0), \quad X_{n+1} = \phi_P(X_n, U_{n+1}), \quad n \geq 1. \quad (1.3)$$

このとき, $\{X_n\}$ は初期分布を a , 推移確率行列を P とする HMC になる.

(証明) マルコフ性と推移確率行列が P であることを示せばよい. (確認せよ) □

- この資料では, このようなマルコフ連鎖の構成法を単にシミュレーションと呼ぶことにする. マルコフ連鎖のシミュレーションを考える応用上の意味は二つある. ひとつは, コンピューターシミュレーションによって様々な評価量を計算するための方法としての利用である. もう一つは, マルコフ連鎖を理論的に解析するための道具としての利用である.

¹一様化を用いれば連続時間マルコフ連鎖の定常分布を離散時間マルコフ連鎖の定常分布として与えることができる. よって, ここで紹介する方法は一様化可能であれば連続時間のモデルにも適用できる.

例 1.1 (境界のある 1 次元ランダムウォーク) 状態空間を $S = \{0, 1, 2, \dots\}$ とし, 状態 0 を境界とするランダムウォーク $\{X_n\}$ を考える. $0 < p, q < 1, p + q < 1$ とし, $\{X_n\}$ の推移確率行列を次で与える.

$$P = \begin{pmatrix} 1-p & p & 0 & 0 & \cdots \\ q & 1-p-q & p & 0 & \cdots \\ 0 & q & 1-p-q & p & \ddots \\ 0 & 0 & q & 1-p-q & p & \ddots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots \end{pmatrix} \quad (1.4)$$

条件より, P は既約で非周期的となる. この P に対して, 定常方程式 $xP = x$ を満たす解は, $\rho = p/q$ として, $x_i = \rho^i x_0, i \geq 1$ の形で与えられる. よって, $\rho < 1$ と仮定すると,

$$\pi_i = (1 - \rho)\rho^i, i \geq 0,$$

は P の定常分布となり, 既約かつ定常分布が存在することから P は正再帰的となる (資料 1 の定理 2.7). このランダムウォークのシミュレーションでは, 更新関数を次のように設定すればよい.

$$\phi(i, u) = \begin{cases} 0, & \text{if } i = 0 \text{ and } u < 1 - p \\ 1, & \text{if } i = 0 \text{ and } u \geq 1 - p \\ i - 1, & \text{if } i > 0 \text{ and } u < q \\ i, & \text{if } i > 0 \text{ and } q \leq u < 1 - p \\ i + 1, & \text{if } i > 0 \text{ and } u \geq 1 - p \end{cases} \quad (1.5)$$

この $\phi(i, u)$ では, 任意の $u \in [0, 1)$ に対して, $i \leq j \Rightarrow \phi(i, u) \leq \phi(j, u)$ となっている (単調性).

1.2 コンピューターシミュレーション

コンピューター上で疑似乱数列 $\{U_n\}$ を生成し, シミュレーションを実行することをコンピューターシミュレーションと呼ぶことにする. コンピューターシミュレーションによる評価とは, 目的とする評価量の推定量をコンピューターシミュレーションによって求め, それを統計的に処理することに対応する. S を状態空間, $f: S \rightarrow \mathcal{R}^+$ を評価関数, $P = (p_{ij})$ をエルゴード的 (既約で非周期的で正再帰的) な推移確率行列, $\pi = (\pi_i)$ をその定常分布, $\tilde{X} \sim \pi$ (\tilde{X} は分布 π に従う) とし, 評価量

$$\theta = E[f(\tilde{X})] = \sum_{i \in S} \pi_i f(i)$$

を求めることを考える. ここでは θ の推定量 $\hat{\theta}$ を構成する方法として次の二つを考える. ただし, $\{X_n\}, \{X_{n,\ell}\}, \ell = 1, 2, \dots,$ は対象とする HMC の独立なシミュレーションとする.

- ひとつのサンプルパスからの構成

$$\hat{\theta} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N f(X_n)$$

- 独立な複数のサンプルパスからの構成

$$\hat{\theta} = \frac{1}{L} \sum_{\ell=1}^L f(X_{N,\ell})$$

以下では, 前者をエルゴードシミュレーション, 後者をモンテカルロシミュレーションと呼ぶことにする.

(1) エルゴードシミュレーション

エルゴードシミュレーションの根拠となるのが次の定理であり, ひとつのシミュレーションを十分長い時間実行すれば目的とする評価量のよい近似値を得ることが期待できる.

定理 1.1 (HMC のエルゴード定理)

状態空間を S (可算) とする既約で正再帰的な HMC を $\{X_n\}$ とし, その定常分布を $\pi = (\pi_i)$ とする. S 上の非負関数 f で $\sum_{i \in S} f(i)\pi_i < \infty$ を満たすものを考える. このとき, 確率 1 で次が成り立つ.

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N f(X_n) = \sum_{i \in S} f(i)\pi_i \quad (1.6)$$

(証明) 状態 0 を訪れた時点を順に $T_0 = \tau_1, \tau_2, \dots$ とする. これらの時点は停止時間なので強マルコフ性より, 区間 $[\tau_k + 1, \tau_{k+1}]$ における確率法則は各 $k \geq 1$ に対して独立で同一となる. また, 正再帰性より区間長は確率 1 で有限であり, その期待値も有限となる. そこで, $U_k = \sum_{n=\tau_k+1}^{\tau_{k+1}} f(X_n)$ と置くと, $U_k, k \geq 1$ は独立で同一の分布に従う. U_k の期待値は,

$$E[U_1] = E \left[\sum_{n=1}^{T_0} f(X_n) \mid X_0 = 0 \right] = E \left[\sum_{n=1}^{T_0} \sum_{i \in S} f(i) 1_{\{X_n=i\}} \mid X_0 = 0 \right] = \sum_{i \in S} f(i) x_i$$

で与えられる. ここで, 不変測度を $x_i = E[\sum_{n=1}^{T_0} 1_{\{X_n=i\}} \mid X_0 = 0]$ と置いた (資料 1 の補題 2.10 を参照).

次に, 区間 $[1, N]$ の間に状態 0 を訪れた回数を $\nu(N)$ とすると, 大数の強法則より確率 1 で

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{\nu(N)} \sum_{n=1}^N f(X_n) = E[U_1]$$

となる (挟みうちの方法を用いる). よって, $\lim_{N \rightarrow \infty} N/\nu(N) = E[T_0 \mid X_0 = 0] = \sum_{j \in S} x_j$ より, 確率 1 で

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N f(X_n) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\nu(N)}{N} \frac{1}{\nu(N)} \sum_{n=1}^N f(X_n) = \sum_{i \in S} f(i) \frac{x_i}{\sum_{j \in S} x_j} = \sum_{i \in S} f(i) \pi_i$$

が成り立つ. □

- この定理は f が実数値関数の場合に拡張される.

(2) モンテカルロシミュレーション

マルコフ連鎖のモンテカルロシミュレーションは次の二つの根拠に基づいている.

(a) HMC の極限定理 (資料 1 の定理 2.8) より, 十分大きな N に対して, $X_{N,\ell}$ の分布が定常分布に近いと期待できる.

(b) 大数の強法則より,

$$\lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L} \sum_{\ell=1}^L f(X_{N,\ell}) = E[f(X_N)]$$

が成り立つので, 十分大きな L に対して推定量 $\hat{\theta}$ は $E[f(X_N)]$ のよい近似値となっていることが期待できる.

しかし, これら二つの根拠は推定量 $\hat{\theta}$ の誤差が生じる根拠ともなっている. 特に, (a) より, $\hat{\theta}$ は評価量 θ の不偏推定量ではない (このことはエルゴードシミュレーションにも当てはまる). 3 節では, θ の不変推定量を構成する方法について説明する.

2 マルコフ連鎖モンテカルロ法とマルコフ確率場

この節では, マルコフ連鎖のシミュレーションをマルコフ連鎖の解析以外の問題 (物性解析, 画像解析, 数理計画などの分野に属する問題) へ応用するための方法について述べる. マルコフ連鎖モンテカルロ法 (Markov Chain Monte Carlo method; MCMC) とは, 注目する分布を定常分布として持つ HMC を構成し, その HMC のシミュレーションにより様々な評価量を計算する方法である. HMC の構成では一般に可逆なマルコフ連鎖が用いられる.

2.1 可逆なマルコフ連鎖

可逆な HMC は詳細平衡方程式 (detailed balance equation) を満たす HMC として定義される. MCMC において, 詳細平衡方程式は与えられた分布を定常分布として持つような HMC を構成するために用いられる.

補題 2.1 (HMC の逆過程)

推移確率行列 $P = (p_{ij})$, 定常分布 $\pi = (\pi_i)$ を持つ既約で定常な HMC $\{X(t)\}$ の逆過程は, $\tilde{P} = (\tilde{p}_{ij})$,

$$\tilde{p}_{ij} = \frac{\pi_j}{\pi_i} p_{ji}, \tag{2.1}$$

を推移確率行列, π を定常分布とする定常な HMC となる.

(証明) 省略 (確認せよ) □

定義 2.1 (可逆なマルコフ連鎖) S (可算) を状態空間, $P = (p_{ij})$ を既約な推移確率行列とし, その定常分布を $\pi = (\pi_i) > \mathbf{0}^\top$ とする. 推移確率行列を P とする定常な HMC $\{X_n\}$ が詳細平衡方程式 (detailed balance equation)

$$\pi_i p_{ij} = \pi_j p_{ji} \text{ for all } i, j \in S, \tag{2.2}$$

を満たす時、可逆なマルコフ連鎖 (reversible Markov chain) であるという²。

- 以下では、推移確率行列 P とその定常分布 $\pi > 0$ の組 (P, π) が式 (2.2) を満たす時、 (P, π) を可逆ということにする。また、 P が式 (2.2) を満たす定常分布 $\pi > 0$ を持つ時、 P を可逆ということにする。
- 状態空間 S を有限とし、対角行列 $\Delta = \text{diag } \pi$ (π の要素を対角成分とする対角行列) を考える。このとき、 (P, π) が可逆であれば $P^* = \Delta^{1/2} P \Delta^{-1/2}$ は対称行列となる。この性質は P のスペクトル分解などの場面で利用される。

補題 2.2 (定常分布であることの検査法)

状態空間を S (可算) とし、 $P = (p_{ij})$ を推移確率行列、 $x = (x_i)$ を確率ベクトルとする。このとき、 P と x が詳細平衡方程式 (2.2) を満たせば、 x は P の定常分布である。

(証明) $\sum_{i \in S} x_i p_{ij} = \sum_{i \in S} x_i x_j / x_i p_{ji} = x_j$ より、 x は定常方程式 $xP = x$ を満たす。□

例 2.1 (木構造を持つマルコフ連鎖) 例 1.1 の境界のあるランダムウォークは $\rho < 1$ の時、可逆となる。一般に、推移確率行列 $P = (p_{ij})$ の推移図が木構造をしており、任意の $i, j \in S$ に対して $p_{ij} > 0$ ならば $p_{ji} > 0$ であり、 P が正再帰的であれば P は可逆となる。

2.2 マルコフ連鎖モンテカルロ法

状態空間 S 上の分布 $\pi = (\pi_i)$ に関する評価量求めるために、定常分布が π であるような HMC $\{X_n\}$ を構成し、シミュレーションによりその評価量を求める方法を一般にマルコフ連鎖モンテカルロ法 (Markov Chain Monte Carlo method; MCMC) という。HMC のシミュレーションについては既に説明したので、ここでは $\pi > 0$ と仮定し、そのような HMC の構成法について考える。

ひとつの代表的な方法は Hastings による方法である。これは、推移確率行列 $P = (p_{ij})$ を

$$p_{ij} = q_{ij} \alpha_{ij}$$

の形で与えるものがある。ここで、 q_{ij} は次に推移する状態の候補を選ぶ確率であり、 α_{ij} は候補として選んだ状態へ実際に推移する確率である。Hastings の方法では α_{ij} を次のように与える。

$$\alpha_{ij} = \frac{s_{ij}}{1 + t_{ij}}, \quad t_{ij} = \frac{\pi_i q_{ij}}{\pi_j q_{ji}}$$

ここで、 $\Sigma = (s_{ij})$ は対称行列とし、 $\alpha_{ij} \in [0, 1]$ となるように設定する。これによって、 P は詳細平衡方程式

$$\pi_i p_{ij} = \pi_j p_{ji}$$

を満たすことになり (確かめよ)、 π は P の定常分布となる (さらに、 P は可逆となる)。Hastings の方法において、注目する分布は π_i / π_j という形でのみ表れる。このことから、Hastings の方法は、分布を与える式が正規化定数を除いて既知といった場合に有効な方法であることが分かる。

ところで、Hastings の方法では $\alpha_{ij} \in [0, 1]$ の条件から $s_{ij} \leq 1 + \min\{t_{ij}, t_{ji}\}$ という条件が得られる。これが等式で成り立つ場合が、メトロポリス法 (Metropolis algorithm) であり、 α_{ij} は

$$\alpha_{ij} = \min \left(1, \frac{\pi_j q_{ji}}{\pi_i q_{ij}} \right)$$

で与えられる (メトロポリス法は Hastings の方法の中で、漸近分散を最小にするという意味で最適であることが分かっている)。

例 2.2 (Hard-core model [3]): その 1) V を頂点の集合、 E を枝の集合とするグラフ $G = (V, E)$ について、各頂点へ 0 または 1 の値をランダムに割当てる。ただし、隣接する 2 つの頂点 (枝で結ばれた頂点) の両方へ 1 を割当てることは禁止する (この条件を満たす割当を実行可能な割当と呼ぶ)。 $S = \{0, 1\}^V$ を割当の集合、 $S_F \subset S$ を実行可能な割当の集合とし、 $Z_F = |S_F|$ とする。 $X(s)$ を頂点 s へ割当てられた値 (確率変数) とし、割当 $X = (X(s), s \in V)$ の分布 $\pi = (\pi(x), x \in S)$ として次のものを考える。

$$\pi(x) = \begin{cases} 1/Z_F, & x \in S_F \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases} \quad (2.3)$$

この分布について割当の集合を S_F に制限したものを考えると、それを定常分布とする S_F 上の HMC $\{X_n\}$, $X_n = (X_n(s), s \in V)$, は次のようにして手続き的に構成することができる。

²式 (2.2) は $P = \hat{P}$ を示しており、 $\{X(t)\}$ が可逆となる (順過程と逆過程が同じ確率法則に従う) 必要十分条件となっている。ここではそれを可逆の定義とした。

1. 等確率 (確率 $1/|V|$) でひとつの頂点 $s \in V$ を選ぶ .
2. s に隣接するすべての頂点の値が 0 ならば確率 $1/2$ で $X_{n+1}(s) = 1$ とし , 確率 $1/2$ で $X_{n+1}(s) = 0$ とする .
3. s 以外の頂点 $t \in V$ については , $X_{n+1}(t) = X_n(t)$ とする .

この手続きをもとにして更新関数を作ることもできるが , 実際にはこの手続きそのものを使って $\{X_n\}$ のシミュレーションを実行する (すなわち , n 時点の状態から $n+1$ 時点の状態を生成する手続きが得られれば HMC のシミュレーションが実行できる) . $\pi(x)$ が定常分布であることは次のようにして示される . まず , $x, y \in S_F$ に対して , $d_D(x, y) = \sum_{s \in V} |x(s) - y(s)|$ と定義する . これを用いて $\{X_n\}$ の推移確率 $p(x, y) = P(X_{n+1} = y | X_n = x)$, $x, y \in S_F$ は次のように与えられる .

$$p(x, y) = \begin{cases} \frac{1}{2|V|}, & d_D(x, y) = 1 \\ 1 - \sum_{y' \in S_F; d_D(x, y')=1} p(x, y'), & d_D(x, y) = 0 \\ 0, & d_D(x, y) \geq 2 \end{cases}$$

$d_D(x, y) = 0$ は $x = y$ を示しているので , $\pi(x)p(x, y) = \pi(y)p(y, x)$ は自明である . $d_D(x, y) = 1$ のときは $\pi(x)p(x, y) = \frac{1}{Z_F} \frac{1}{2|V|} = \pi(y)p(y, x)$ となる . $d_D(x, y) \geq 2$ のとき , $\pi(x)p(x, y) = \pi(y)p(y, x)$ は自明である . よって , 補題 2.2 より , 分布 π は $\{X_n\}$ の定常分布であることが分かる .

2.3 マルコフ確率場とギブス抽出法

2.3.1 マルコフ確率場

$N = \{1, 2, \dots, |N|\}$ をノード (頂点) の集合 ($|N| < \infty$ と仮定) とする . 各 $s \in N$ に対して集合 Λ ($|\Lambda| < \infty$ と仮定) に値を取る確率変数 $X(s)$ が定義されているとし , $\mathbf{X} = (X(s), s \in N)$ を 確率場 (random field; RF) という . Λ を \mathbf{X} の相空間 (phase space) , $S = \Lambda^N$ を状態空間という . \mathbf{X} の分布を $(\pi(x), x \in S)$ とする (この RF の定義には「時間の経過」という概念がないことに注意) . $s \in N$ に対して N_s をノード s に隣接するノードの集合 (近傍集合; neighborhood set) とする . ここで , $s \notin N_s$ であるとし , $\{N_s\}_{s \in N}$ は対称 , すなわち , $t \in N_s$ ならば $s \in N_t$ であるとする . $\{N_s\}_{s \in N}$ を 近傍集合系 (neighborhood system) という . 「隣接」を「枝」に置き換えれば分かるように , $(N, \{N_s\})$ はグラフを表している . マルコフ確率場とはこのグラフに関して定義されたマルコフ性を有する RF である . (以下では , $A \subset N$, $x \in S$ に対して , $x(A) = (x(s), s \in A)$ と定義する . $x(A \setminus s)$ は $x(A \setminus \{s\})$ の略である .)

定義 2.2 (マルコフ確率場) RF $\mathbf{X} = (X(s), s \in N)$ が近傍集合系 $\{N_s\}$ に対して ,

$$\forall s \in N, \forall x \in \Lambda^N, P(X(s) = x(s) | \mathbf{X}(N \setminus s) = x(N \setminus s)) = P(X(s) = x(s) | \mathbf{X}(N_s) = x(N_s)) \quad (2.4)$$

を満たすとき , $(\{N_s\})$ を近傍集合系とする) マルコフ確率場 (Markov random field; MRF) という . また , 関数 $\pi^s : \Lambda^N \rightarrow [0, 1]$ を

$$\pi^s(x) = P(X(s) = x(s) | \mathbf{X}(N_s) = x(N_s))$$

で与え , $\{\pi^s\}_{s \in N}$ を local specification という .

以下では , MRF \mathbf{X} の分布 $\pi = (\pi(x), x \in \Lambda^N)$ に関する評価量をシミュレーションによって求めることを考える .

例 2.3 (HMC) $\{X_n\}_{n=1}^T$ をマルコフ連鎖とする . このマルコフ連鎖は , 時点 n をノード n とし , 近傍集合を $N_n = \{n-1, n+1\}$ (ただし , $N_1 = \{2\}$, $N_T = \{T-1\}$) とすることで , MRF となる .

例 2.4 (Hard-core model: その 2) 例 2.2 で示したモデルは , 各頂点の値が隣接する頂点の値のみに依存してランダムに決まることからマルコフ確率場となっている . グラフを $G = (V, E)$ とすると , ノードの集合は $N = V$ であり , $s \in N$ の近傍集合 N_s は枝の集合 E から得られる . 相空間は $\Lambda = \{0, 1\}$ であり , Local specification $\{\pi^s\}_{s \in N}$ は次で与えられる . $x \in S_F \subset S = \Lambda^N$ に対して :

$$\pi^s(x) = P(X(s) = x(s) | \mathbf{X}(N_s) = x(N_s)) = \begin{cases} 0, & x(s) = 1, x(N_s) \neq \mathbf{0} \\ 1, & x(s) = 0, x(N_s) \neq \mathbf{0} \\ \frac{1}{2}, & x(s) = 1, x(N_s) = \mathbf{0} \\ \frac{1}{2}, & x(s) = 0, x(N_s) = \mathbf{0} \end{cases}$$

2.3.2 ギブス抽出法

グラフ $(N, \{N_s\})$ に関して定義され、local specification $\{\pi^s\}$ が与えられた MRF $\mathbf{X} = (X(s), s \in N)$ の分布 $(\pi(\mathbf{x}), \mathbf{x} \in \Lambda^N)$ を MCMC によって求めることを考える。ただし、ここでは $\pi > 0$ であると仮定しておく。ひとつの方法としてメトロポリス法を用いることが考えられる。もうひとつの方法は、次のギブス抽出法であり、定常分布が π であるような HMC $\{\mathbf{X}_n\}_{n \geq 0}$ を構成する方法である。

補題 2.3 (ギブス抽出法; Gibbs sampler)

$q = (q(s), s \in N) > 0$ をノードの選択確率とする。 $\mathbf{X}_n = \mathbf{x}$ が与えられた時、 \mathbf{X}_{n+1} を次で与える。

- 確率 $q(s)$ でノード s を選ぶ。
- 確率 $\pi^s(\lambda, \mathbf{x}(N \setminus s)) = \pi(\lambda | \mathbf{x}(N \setminus s)) = P(X(s) = \lambda | \mathbf{X}(N \setminus s) = \mathbf{x}(N \setminus s))$ でノード s の相 λ を選び、 $y(s) = \lambda$ とする。
- $\mathbf{y}(N \setminus s) = \mathbf{x}(N \setminus s)$ とし、 $\mathbf{X}_{n+1} = \mathbf{y}$ とする。

このとき、 $(\pi(\mathbf{x}), \mathbf{x} \in \Lambda^N)$ は $\{\mathbf{X}_n\}_{n \geq 0}$ の定常分布となる。

(証明) 任意の $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \Lambda^N$ に対して、詳細平衡方程式

$$\pi(\mathbf{x})P(\mathbf{X}_{n+1} = \mathbf{y} | \mathbf{X}_n = \mathbf{x}) = \pi(\mathbf{y})P(\mathbf{X}_{n+1} = \mathbf{x} | \mathbf{X}_n = \mathbf{y})$$

が成り立つことを示せばよい。まず、 $\mathbf{x} = \mathbf{y}$ の時は明らかである。任意の $s \in N$ に対して $\mathbf{y}(N \setminus s) \neq \mathbf{x}(N \setminus s)$ であれば両辺ともゼロとなる。ある $s \in N$ に対して $\mathbf{y}(N \setminus s) = \mathbf{x}(N \setminus s)$ の時は次のようになる。

$$\begin{aligned} \pi(\mathbf{x})P(\mathbf{X}_{n+1} = \mathbf{y} | \mathbf{X}_n = \mathbf{x}) &= \pi(\mathbf{x})q(s)\pi(y(s) | \mathbf{x}(N \setminus s)) \\ &= \pi(\mathbf{y})q(s)\pi(x(s) | \mathbf{y}(N \setminus s)) = \pi(\mathbf{y})P(\mathbf{X}_{n+1} = \mathbf{x} | \mathbf{X}_n = \mathbf{y}) \quad \square \end{aligned}$$

- 例 2.2 で示した hard-core model のシミュレーションはギブス抽出法となっている。

補足

ノードの選択を周期的にしても同様な結果が得られる。

補題 2.4 (周期的なギブス抽出法; Periodic Gibbs sampler)

ギブス抽出法において、相を更新するノードの選択を周期的とする。すなわち、 $N = \{1, 2, \dots, |N|\}$ として、 $1 \rightarrow 2 \rightarrow \dots \rightarrow |N| \rightarrow 1 \rightarrow \dots$ の順で状態を更新する。このとき、 $\mathbf{Z}_n = \mathbf{X}_{n|N|}$ として確率過程 $\{\mathbf{Z}_n\}_{n \geq 0}$ を定義すると、 $\{\mathbf{Z}_n\}$ は $(\pi(\mathbf{x}), \mathbf{x} \in \Lambda^N)$ を定常分布とする HMC となる。

(証明) $\{\mathbf{X}_n\}$ のノード s における更新を表す推移確率行列を P_s とすと、 $\{\mathbf{Z}_n\}$ は推移確率行列を

$$P = \prod_{s=1}^{|N|} P_s$$

とする HMC である。注目している分布を $\pi = (\pi(\mathbf{x}), \mathbf{x} \in \Lambda^N)$ とおく。このとき、

$$[P_s]\mathbf{x}\mathbf{y} = \pi^s(\mathbf{y})1_{\{\mathbf{y}(N \setminus s) = \mathbf{x}(N \setminus s)\}}$$

であることより、

$$\sum_{\mathbf{x} \in \Lambda^N} \pi(\mathbf{x})\pi^s(\mathbf{y})1_{\{\mathbf{y}(N \setminus s) = \mathbf{x}(N \setminus s)\}} = \sum_{\lambda \in \Lambda} \pi(\lambda, \mathbf{y}(N \setminus s))\pi(y(s) | \mathbf{y}(N \setminus s)) = \pi(\mathbf{y}), \mathbf{y} \in \Lambda^N$$

となり、 $\pi P_s = \pi$ が得られる。よって、 $\pi P = \pi$ である。 \square

以上の結果より、Hastings の方法、またはギブス抽出法によって HMC を構成し、(状態数を有限と仮定している)それが非周期的であれば十分長い時間シミュレーションを実行することで注目している分布に従ったサンプルを得ることができる。ここで問題になるのが定常分布への収束の速さであり、予め設定した $\varepsilon > 0$ に対して、 $d_{TV}(\mathbf{X}_n, \pi) < \varepsilon$ とするために必要なステップ数 n を求めることが挙げられる (d_{TV} は全変動距離、資料 1 の定義 2.12 を参照)。そのための方法としては、推移確率行列の固有値と固有ベクトルを用いて n を評価する方法とそのバリエーションが提案されている [1]。

2.3.3 ギブス確率場

ギブス確率場も MRF と同様にグラフ $(N, \{N_s\})$ に関して定義される。ノード自身の作用及びノード間の相互作用をポテンシャルとして表すために次のクリークという互いに隣接するノードの集合 (部分完全グラフ) を定義する。

定義 2.3 (クリーク; Clique)

- 任意の $s \in N$ に対して, $\{s\}$ はクリークである。
- $(C \subset N \text{ がクリーク}) \Leftrightarrow (\text{任意の } s, t \in C \text{ に対して } t \in N_s)$

定義 2.4 (ギブスポテンシャル) $V_C : \Lambda^N \rightarrow \mathcal{R} \cup \{+\infty\}$ とし, $\{V_C\}_{C \subset N}$ が次を満たす時, ギブスポテンシャル (Gibbs potential) という。

- C がクリークでなければ $V_C \equiv 0$
- 任意の $x, y \in \Lambda^N$ と任意の $C \subset N$ に対して, $x(C) = y(C) \Rightarrow V_C(x) = V_C(y)$

定義 2.5 (ギブス分布) グラフ $(N, \{N_s\})$ に関して定義された, 温度 T , ポテンシャル $\{V_C\}$ のギブス分布 (Gibbs distribution) π_T は次で与えられる。

$$\pi_T(\mathbf{x}) = \frac{1}{Z_T} e^{-\frac{1}{T} \mathcal{E}(\mathbf{x})}, \quad \mathcal{E}(\mathbf{x}) = \sum_{C \subset N} V_C(\mathbf{x}) \quad (2.5)$$

ここで, Z_T は正規化定数 (partition function) である。

Λ^N に値を取る RF でその分布がギブス分布で与えられるものをギブス確率場 (Gibbs random field; GRF) と呼ぶことにする。

例 2.5 (Hard-core model: その 3) 例 2.2 で示したモデルはギブス確率場でもある。ギブスポテンシャルは, 隣接する頂点のペア (クリークになっている) を $\langle s, t \rangle, s, t \in N$ で表すことにし, $x \in S = \Lambda^N$ に対して

$$V_{\langle s, t \rangle}(\mathbf{x}) = \begin{cases} \infty, & x(s) = x(t) = 1 \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases}$$

で与える。その他のクリーク $C \subset N$ に対しては $V_C(\mathbf{x}) = 0$ とする。このギブスポテンシャルによって, 式 (2.3) で与えられる分布は温度 $T = 1$ のギブス分布となる。

例 2.6 (イジングモデル: その 1) 物理学で使われるイジングモデル (Ising model) は, J を内部エネルギー, H を外部磁場, k をボルツマン定数とした, 次のようなギブス確率場である。まず, $Z_m = \{1, 2, \dots, m\}$ とし,

$$N = Z_m^2, \quad \Lambda = \{-1, 1\}, \quad N_s = \{s' \in Z_m; |s' - s| = 1\}, \quad s \in Z_m,$$

とする (ここで, $s = (i, j)$ に対して $|s|^2 = i^2 + j^2$ とした)。クリークは $\{s\}$ ($s \in N$) と $\langle s, t \rangle = \{s, t\}$ ($|s - t| = 1, s, t \in N$) の 2 種類である。そして, ポテンシャルは

$$V_{\{s\}}(\mathbf{x}) = -\frac{H}{k} x(s), \quad V_{\langle s, t \rangle}(\mathbf{x}) = -\frac{J}{k} x(s)x(t)$$

で与えられる。

次の定理から, GRF は MRF であることが導かれる。ある条件を付けるとその逆も成り立つがここでは省略する。

定理 2.1 (GRF が MRF であること)

X を Λ^N に値を取る RF とし, その分布 $(\pi_T(\mathbf{x}), \mathbf{x} \in \Lambda^N)$ がグラフ $(N, \{N_s\})$ に関して定義された, 温度 T , ポテンシャル $\{V_C\}$ のギブス分布で与えられているとする。このとき, X は次で与えられる $\{\pi^s\}$ を local specification とする, $(N, \{N_s\})$ に関して定義された MRF である。

$$\pi^s(\mathbf{x}) = \frac{\exp\left(-\frac{1}{T} \sum_{C: s \in C} V_C(\mathbf{x})\right)}{\sum_{\lambda \in \Lambda} \exp\left(-\frac{1}{T} \sum_{C: s \in C} V_C(\lambda, \mathbf{x}(N \setminus s))\right)} \quad (2.6)$$

ここで, $(\lambda, \mathbf{x}(N \setminus s))$ は状態 \mathbf{x} のノード s の相を λ に置き換えた状態である。

(証明) Gibbs 分布の定義より,

$$\pi(\mathbf{x}) = \frac{1}{Z_T} \exp\left(-\frac{1}{T} \sum_{C: s \in C} V_C(\mathbf{x}) - \frac{1}{T} \sum_{C: s \notin C} V_C(\mathbf{x})\right),$$

$$\pi(\lambda, \mathbf{x}(N \setminus s)) = \frac{1}{Z_T} \exp \left(-\frac{1}{T} \sum_{C: s \in C} V_C(\lambda, \mathbf{x}(N \setminus s)) - \frac{1}{T} \sum_{C: s \notin C} V_C(\lambda, \mathbf{x}(N \setminus s)) \right),$$

である．ポテンシャルの定義より， $s \notin C$ ならば $V_C(\lambda, \mathbf{x}(N \setminus s)) = V_C(\mathbf{x})$ である．よって，

$$P(X(s) = x(s) | \mathbf{X}(N \setminus s) = \mathbf{x}(N \setminus s)) = \frac{\pi(\mathbf{x})}{\sum_{\lambda \in \Lambda} \pi(\lambda, \mathbf{x}(N \setminus s))}$$

より，式 (2.6) の右辺が $P(X(s) = x(s) | \mathbf{X}(N \setminus s) = \mathbf{x}(N \setminus s))$ に等しいことが分かる．ところで，ポテンシャルの定義より，式 (2.6) は s を含むクリークのみ依存する．すなわち， $x(s)$ と $\mathbf{x}(N_s)$ のみに依存する．これより，

$$P(X(s) = x(s) | \mathbf{X}(N_s) = \mathbf{x}(N_s)) = (\text{式 (2.6) の右辺}) = P(X(s) = x(s) | \mathbf{X}(N \setminus s) = \mathbf{x}(N \setminus s))$$

となる． \square

- GRF は MRF であることから，GRF に対してもギブス抽出法を用いて HMC を構成することができる．ここで，GRF の local specification は正規化定数 (partition function) を含んでいないことから，正規化定数が未知でもシミュレーションを実行できる．

例 2.7 (イジングモデル: その 2) イジングモデルの local specification $\{\pi^s\}$ は次のようになる．

$$\pi^s(\mathbf{x}) = \frac{\exp \left(\frac{1}{kT} \left\{ J \sum_{t: |t-s|=1} x(t) + H \right\} x(s) \right)}{\exp \left(\frac{1}{kT} \left\{ J \sum_{t: |t-s|=1} x(t) + H \right\} \right) + \exp \left(-\frac{1}{kT} \left\{ J \sum_{t: |t-s|=1} x(t) + H \right\} \right)} \quad (2.7)$$

3 Propp と Wilson の方法

ここでは，定常分布に従う不偏推定量を得るために Propp と Wilson によって提案された方法 (Propp-Wilson algorithm, perfect simulation, exact simulation などと呼ばれる) について解説する [2, 3] .

3.1 基本となるアイデア

S (可算) を状態空間， $\mathbf{a} = (a_i)$ を確率ベクトル， $P = (p_{ij})$ をエルゴード的 (既約で非周期的で正再帰的) な推移確率行列， $\pi = (\pi_i)$ をその定常分布とする． $\psi_a : [0, 1) \rightarrow S$ を \mathbf{a} から構成した初期関数， $\phi_P : S \times [0, 1) \rightarrow S$ を P から構成した更新関数とする．そして， $[0, 1)$ 区間一様分布に従う i.i.d. 確率変数列として， $\{U_n\}_{n=-\infty}^{\infty}$ を考える．まず，時点 $-k$ から開始された，初期分布が \mathbf{a} ，推移確率行列が P である HMC $\{^k X_n^{(a)}\}_{n=-k}^{\infty}$ を次のようにして構成する．

$$^k X_{-k}^{(a)} = \psi_a(U_{-k}), \quad ^k X_n^{(a)} = \phi_P(^k X_{n-1}^{(a)}, U_n), \quad n \geq -k + 1 \quad (3.1)$$

このとき，HMC の極限定理 (資料 1 の定理 2.8) より，次が得られる．

$$\lim_{k \rightarrow \infty} d_{TV}({}^k X_0^{(a)}, \pi) = \lim_{k \rightarrow \infty} d_{TV}(\mathbf{a} P^k, \pi) = 0$$

よって，(やや不正確な表現ではあるが) 無限の過去に開始された HMC の時点 0 における状態 ${}^\infty X_0^{(a)}$ は定常分布に従い， m 回目のシミュレーションの実行結果を ${}^\infty X_{0,m}^{(a)}$ とし， $f : S \rightarrow \mathcal{R}$ を評価関数として，推定量

$$\hat{\theta} = \frac{1}{L} \sum_{m=1}^L f({}^\infty X_{0,m}^{(a)})$$

は $\theta = \sum_{i \in S} \pi_i f(i)$ の不偏推定量となる．しかし， ${}^\infty X_0^{(a)}$ を直接シミュレーションによって得るためには無限のステップが必要であり，現実的には不可能である．Propp と Wilson により提案された方法は，この ${}^\infty X_0^{(a)}$ を次のようにして有限のステップで捉える方法である．

初期状態が $i \in S$ である HMC を考える．これは，初期関数を

$$\psi_i(u) = i, \quad \forall u \in [0, 1)$$

として構成される．この ψ_i と ϕ_P ， $\{U_n\}$ を用いて構成した HMC を $\{^k X_n^{(i)}\}_{n=-k}^{\infty}$ とする．今， $k=0$ から始めて k の値を増やしていき，すべての $i, j \in S$ に対して ${}^\nu X_0^{(i)} = {}^\nu X_0^{(j)}$ であるような $\nu \geq 0$ が見つかったとする．すると， $i \in S$ を代表要素として，任意の $k \geq \nu$ に対して， ${}^k X_0^{(a)} = {}^\nu X_0^{(i)}$ であることから ${}^\nu X_0^{(i)} = {}^\infty X_0^{(a)}$ となる．よって， ν が確率 1 で有限であれば，有限のステップで ${}^\infty X_0^{(a)}$ を捉えることができる．

この説明からも分かるように，Propp と Wilson による方法はカップリングする HMC と密接に関連している．ただし，考える時間の方向が逆向き (過去へ向かう方向) となっている．以下では，カップリングと関連づけながら Propp と Wilson による方法の正当性について考察していく．

3.2 後方カップリング時間

定義 3.1 (後方カップリング時間) 式 (3.1) で定義された HMC の族 $\{\{^k X_n^{(a)}\}_{n=-k}^\infty\}_{k \in \mathbb{Z}_+}$ に対し、確率変数 ν が存在して確率 1 で次が成り立つ時、 ν を後方カップリング時間 (backward coupling time: BCT) という。

$$m \geq \nu \Rightarrow {}^{k_1} X_0^{(a)} = {}^{k_2} X_0^{(a)} \text{ for all } k_1, k_2 \geq m \quad (3.2)$$

- 確率 1 で $\nu' \geq \nu$ であるような確率変数 ν' も BCT である。

定理 3.1 (BCT)

HMC の族 $\{\{^k X_n^{(a)}\}_{k \in \mathbb{Z}_+}\}$ に対し、確率 1 で有限な値を取る BCT ν が存在したとする。このとき、 $\nu X_0^{(a)} \sim \pi$ である。

(証明) $A = \{\omega : \nu(\omega) < \infty\}$ とすると、仮定より $P(A) = 1$ である。BCT の定義より、 $\omega \in A$ ならば $\lim_{k \rightarrow \infty} {}^k X_0^{(a)}(\omega) = \nu(\omega) X_0^{(a)}(\omega)$ となる。これは、 ${}^k X_0^{(a)}$ が $\nu X_0^{(a)}$ に概収束することを示している。よって、

$$d_{TV}(\nu X_0^{(a)}, \pi) = \lim_{k \rightarrow \infty} d_{TV}({}^k X_0^{(a)}, \pi) = 0$$

となり、定理が得られる。□

3.3 Propp-Wilson Algorithm

定義 3.2 (垂直後方カップリング時間) HMC の族 $\{\{^k X_n^{(i)}\}_{i \in S, k \in \mathbb{Z}_+}\}$ に対し、確率変数 η が存在して確率 1 で次が成り立つ時、 η を垂直後方カップリング時間 (vertical backward coupling time: VBCT) という。

$$k \geq \eta \Rightarrow {}^k X_0^{(i)} = {}^k X_0^{(j)} \text{ for all } i, j \in S \quad (3.3)$$

定理 3.2 (Propp-Wilson algorithm)

η が VBCT ならば、 η は BCT である。(よって、 $\eta X_0^{(i)} \sim \pi$.)

(証明) 任意に取った $k_1, k_2 \geq \eta$ について、 ${}^{k_1} X_{-\eta}^{(a)} = i$ 、 ${}^{k_2} X_{-\eta}^{(a)} = j$ であったとする。このとき、 η が VBCT であることから、

$${}^{k_1} X_0^{(a)} = \eta X_0^{(i)} = \eta X_0^{(j)} = {}^{k_2} X_0^{(a)}$$

となる。これは、 η が BCT であることを示している。□

- この定理より、 $\{\eta X_n^{(i)}\}_{n=0}^\infty$ は定常過程であることが分かる。よって、定常分布が分かっている場合でも、Propp-Wilson algorithm を用いて定常過程のサンプルを得ることができる。

3.4 Sandwiching

HMC がエルゴード的であっても、BCT や VBCT が存在し、確率 1 で有限であるとは限らない。また、Propp-Wilson algorithm は、全ての状態から開始された HMC を同時にシミュレーションする必要があり、あまり効率的ではない。ここでは、確率 1 で有限な BCT や VBCT が存在し、かつ効率的な Propp-Wilson algorithm が構成できるモデルのクラスとして、単調な HMC を考える。単調な HMC については、Sandwiching という方法により、特定の状態から開始された HMC のシミュレーションのみにより VBCT が得られる。以下では、話を簡単にするために S を有限な状態空間とし、 S 上で半順序 \preceq が定義されているものとする。

ところで、更新関数 ϕ_P からマルコフ性を導くには、 ϕ_P が次の条件さえ満たしていればよいことが分かる。

$$\int_{u=0}^1 1_{\{\phi_P(i,u)=j\}} du = p_{ij} \text{ for all } i, j \in S \quad (3.4)$$

そこで、以下ではこの条件を満たす関数 $\phi_P : S \times [0, 1) \rightarrow S$ を改めて更新関数と呼ぶことにする (よって、ひとつの推移確率行列 P に対して、複数の更新関数が存在する)。

定義 3.3 (単調な HMC) 推移確率行列 P に対して、次を満たす更新関数 $\phi_P : S \times [0, 1) \rightarrow S$ が存在する時、 P および P を推移確率行列とする HMC を単調 (monotone) であるという。

$$i \preceq j \Rightarrow \phi_P(i, u) \preceq \phi_P(j, u) \text{ for all } u \in [0, 1) \quad (3.5)$$

まず初めに、通常のカップリング時間に対応する確率変数として、次の最小前方カップリング時間を定義する。

定義 3.4 (最小前方カップリング時間) 初期分布がそれぞれ a, b であり, 推移確率行列を P とする更新関数 ϕ_P を用いて時点 0 から構成された HMC を, $\{^0X_n^{(a)}\}_{n=0}^\infty, \{^0X_n^{(b)}\}_{n=0}^\infty$ とする. このとき,

$$\tau_{ab}^* = \inf\{n \geq 0 : ^0X_n^{(a)} = ^0X_n^{(b)}\} \quad (3.6)$$

を最小前方カップリング時間 (minimal forward coupling time: MFCT) という (条件を満たす n が存在しない場合は $\tau_{ab}^* = \infty$ とする.)

補題 3.1 (MFCT)

(S, \preceq) に最大値 u と最小値 ℓ が存在したとする. このとき, P が既約で単調であれば MFCT τ_{ab}^* は確率 1 で有限である.

(証明) 状態数が有限で既約であることから P は正再帰的である. そこで, HMC $\{^0X_n^{(u)}\}$ に対して,

$$T_{u\ell} = \inf\{n \geq 0 : ^0X_n^{(u)} = \ell\}$$

を考える. この $T_{u\ell}$ は状態 u から ℓ への初到達時間なので $P(T_{u\ell} < \infty) = 1$ である. ところで, P が単調であることから単調性を満たす更新関数 ϕ_P が存在する. 以下, これを用いることにすると, 任意の $n \geq 0$ に対して,

$$\ell \preceq ^0X_n^{(a)} \preceq ^0X_n^{(u)} \preceq u, \quad \ell \preceq ^0X_n^{(b)} \preceq ^0X_n^{(u)} \preceq u$$

である. よって, $\ell = ^0X_{T_{u\ell}}^{(a)} = ^0X_{T_{u\ell}}^{(b)} = ^0X_{T_{u\ell}}^{(u)}$ となり, 確率 1 で $\tau_{ab}^* \leq T_{u\ell}$ である. $T_{u\ell}$ は確率 1 で有限なので補題が得られる. \square

定理 3.3 (Sandwiching)

(S, \preceq) に最大値 u と最小値 ℓ が存在し, P が既約で単調であったとする. このとき,

$$\eta_{u\ell}^* = \inf\{k \geq 0 : ^kX_0^{(\ell)} = ^kX_0^{(u)}\} \quad (3.7)$$

で定義される $\eta_{u\ell}^*$ は VBCT である (よって, BCT である). さらに, $\eta_{u\ell}^*$ は初期状態をそれぞれ u, ℓ とした MFCT と同じ分布を持つ (よって, $P(\eta_{u\ell}^* < \infty) = 1$ である).

(証明) (VBCT であること) P が単調であることから単調性を満たす更新関数 ϕ_P が存在する. 以下, これを用いることにすると, 任意の $x \in S$, 任意の $k \geq 0$ に対して

$$^kX_0^{(\ell)} \preceq ^kX_0^{(x)} \preceq ^kX_0^{(u)}$$

である. よって, $\eta_{u\ell}^*$ の定義より,

$$k \geq \eta_{u\ell}^* \Rightarrow ^kX_0^{(\ell)} = ^kX_0^{(x)} = ^kX_0^{(u)} \text{ for all } x \in S$$

である. これは $\eta_{u\ell}^*$ が VBCT であることを示す.

(MFCT と同じ分布を持つこと) $(^kX_0^{(\ell)}, ^kX_0^{(u)})$ は時点 $-k$ から開始された HMC の k ステップ後での状態の組であり, $(^0X_k^{(\ell)}, ^0X_k^{(u)})$ は時点 0 から開始された HMC の k ステップ後での状態の組である. 今は斉時的な場合を考えているので両者は同じ分布を持つ. よって, 任意の $k \geq 0$ に対して

$$P(\eta_{u\ell}^* > k) = P(^kX_0^{(\ell)} \neq ^kX_0^{(u)}) = P(^0X_k^{(\ell)} \neq ^0X_k^{(u)}) = P(\tau_{u\ell}^* > k)$$

が成り立つ. \square

- この補題は, u を極大値の集合, ℓ を極小値の集合に置き換えた場合へ拡張される.

例 3.1 (イジングモデルの単調性) 例 2.6, 2.7 について考える. 状態空間 $S = \{-1, 1\}^{\mathcal{Z}_m^2}$ 上の半順序 \preceq を $(x \preceq y) \Leftrightarrow (\forall s \in \mathcal{Z}_m^2, x(s) \leq y(s))$ で定義する. (S, \preceq) には最大値 $u = (1, \dots, 1)$ と最小値 $\ell = (-1, \dots, -1)$ が存在する. ところで, イジングモデルの local specification は式 (2.7) で与えられる. これより, $x \preceq y$ ならば任意の $s \in \mathcal{Z}_m^2$ に対して $\pi^s(+1, x(\mathcal{Z}_m^2 \setminus s)) \leq \pi^s(+1, y(\mathcal{Z}_m^2 \setminus s))$ である. よって, ギブス抽出法を実行する更新関数で単調であるものが構成できる.

参考文献

- [1] P. Brémaud, Markov Chains – Gibbs Fields, Monte Carlo Simulation, and Queues, Springer (1999).
- [2] S. G. Foss and R. L. Tweedie, Perfect Simulation and Backward Coupling, Stochastic Models, 14 (1998), 187–203.
- [3] Olle Häggström, Finite Markov Chains and Algorithmic Applications, Cambridge University Press (2002).