2020 年 4 月 2 日

熱浴法と Metropolis 法の棄却率

渡辺 宙志

慶應義塾大学理工学部物理情報工学科

概 要

二準位系と三準位系で熱浴法と Metropolis 法の平均棄却率を比較する。

1 はじめに

マルコフ連鎖モンテカルロ法においては、最終的に平衡状態がボルツマン重みに比例していればどのような遷移確率を用いても良いが、簡単のために詳細釣り合い条件を要請することが多い。しかし、詳細釣り合い条件を課すだけでは、まだ遷移確率を決めることができない。例えば二準位系では、遷移確率は 4 通り決める必要があるが、確率の保存で 2 つ、詳細釣り合い条件で 1 つ、合計 3 つの条件があり、自由度が 1 つ残る。三準位系では、遷移確率が 9 通りあり、拘束条件は確率の保存で 3 つ、詳細釣り合いで 3 つであるため、自由度が 3 つ残る。一般に状態が増えれば増えるほど残る自由度が増えていき、N 個の状態がある系では $(N^2 - N)/2$ 個の自由度が残る。この時、もっとも「良い」遷移確率の選び方はあるのだろうか？よく使われる Metropolis 法と熱浴法は、何かを最適化した結果得られる選択なのか？そのあたりを調べるため、とりあえず二準位系と三準位系において Metropolis 法と熱浴法の棄却率を比較してみた。

2 二準位系の場合

状態 A、B の二準位系を考える。それぞれのエネルギーを E_A、E_B とし、逆温度を β とする。ここで、$E_A < E_B$ としても一般性を失わない。

$$a \equiv \exp(-\beta E_A) \tag{1}$$

$$b \equiv \exp(-\beta E_B) \tag{2}$$

と略記すると、それぞれの平衡状態での存在確率 $\pi(A)$、$\pi(B)$ は、

$$\pi(A) = \frac{a}{a+b} \tag{3}$$

$$\pi(B) = \frac{b}{a+b} \tag{4}$$

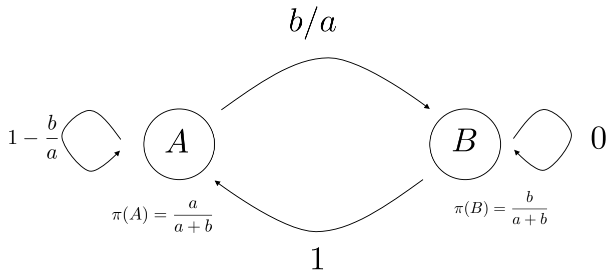

図 1: 二準位系における Metropolis 法のマルコフ遷移図。

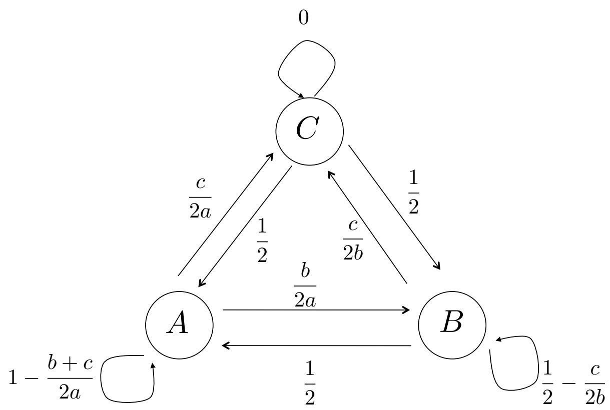

図 2: 三準位系における Metropolis 法のマルコフ遷移図。

と表される。なお、$E_A < E_B$ より、$a > b$ である。さて、平衡状態における棄却確率を考える。平衡状態における棄却確率 R とは、一ステップ後に現在の状態にとどまる確率、すなわち

$$R \equiv \sum_{X}^{A,B} \pi(X) P(X \to X) \tag{5}$$

として定義する。ただし $P(X \to Y)$ は状態 X から状態 Y への遷移確率とする。Metroplis 法の場合、棄却確率 R_{M} は

$$R_{\mathrm{M}} = \left(1 - \frac{b}{a}\right) \frac{a}{a+b} \tag{6}$$

$$= \frac{a-b}{a+b} \tag{7}$$

である (図 1 参照)。熱浴法の場合、新しい状態は現在の状態に関係なく、平衡状態での存在確率 π に比例して決まる。したがって、棄却確率 R_{hb} は

$$R_{\mathrm{hb}} = \pi(A)^2 + \pi(B)^2 \tag{8}$$

$$= \frac{a^2 + b^2}{(a+b)^2} \tag{9}$$

となる。ここで、状態 A のエネルギー E_A を原点に取り直す ($E_A = 0$ とする)。すると $a = 1$ となるので、

$$R_{\mathrm{M}} = \frac{1-b}{1+b} \tag{10}$$

$$R_{\mathrm{hb}} = \frac{1+b^2}{(1+b)^2} \tag{11}$$

したがって、

$$R_{\mathrm{hb}} - R_{\mathrm{M}} = \frac{2b^2}{(1+b)^2} > 0 \tag{12}$$

つまり、Metropolis 法よりも、熱浴法のほうが常に棄却率が高いことがわかる。一般に、二準位系においては、詳細釣り合い条件を満たす範囲においては Metroplis 方がもっとも平均棄却率が低いことを証明できる。

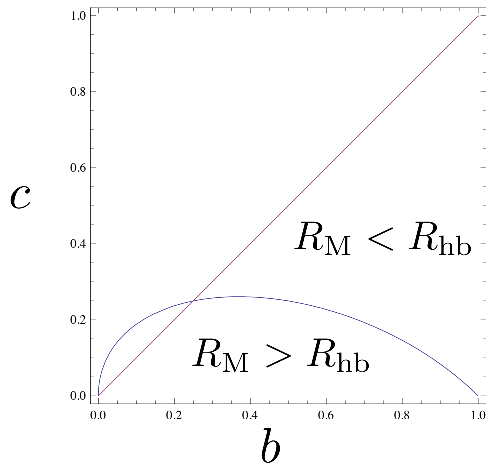

図 3: 三準位系における棄却率。$b > c$ の領域で、下の方は熱浴法のほうが Metropolis 法よりも棄却率が低くなる。

3 三準位系の場合

三準位系でも同様に棄却率を計算してみる。状態は A, B, C とし、$E_A < E_B < E_C$ とする。二準位系と同様に重み a, b, c を導入すると。Metroplis 法の場合の棄却確率 R_{M} は

$$R_{\mathrm{M}} = \left(1 - \frac{b+c}{2a}\right)\pi(A) + \left(\frac{1}{2} - \frac{c}{2b}\right)\pi(B) \tag{13}$$

$$= \frac{a-c}{a+b+c} \tag{14}$$

となる ((図 2 参照))。熱浴法では

$$R_{\mathrm{hb}} = \pi(A)^2 + \pi(B)^2 + \pi(C)^2 \tag{15}$$

$$= \frac{a^2+b^2+c^2}{(a+b+c)^2} \tag{16}$$

二準位系と同様に状態 A のエネルギーを原点に取り直し $(a = 1)$、棄却率の差を計算すると

$$R_{\mathrm{hb}} - R_{\mathrm{M}} = \frac{b^2 + (c-1)b + 2c^2}{(1+b+c)^2} \tag{17}$$

この値は、b と c の値により正にも負にもなる。したがって、熱浴法と Metropolis 法のどちらが棄却率が低いかは条件に依存する (図 3)。

4 考察

遷移確率は詳細釣り合い条件だけでは決まらないため、そこに自由度が存在する。二準位系においては、「平衡状態における棄却率を最小化する」という要請により Metropolis 法が選ばれるが、三準位以上の系においては、熱浴法と Metropolis 法のどちらが棄却率が低いかは条件に依存する。また、三準位以上の系においては熱浴法、Metropolis 法のどちらよりも棄却率の低い遷移確率の決め方があるのかもしれないし、実は熱浴法か Metropolis 法のどちらかになってしまうのかもしれないが、面倒なのでまだ計算していない。

5 Appendix

一般に N 状態の Metropolis 法の棄却率は

$$R = \frac{1}{N-1}\sum_{k=1}^{N}(N+1-2k)\pi_k \tag{18}$$

で、熱浴法の平均棄却率は

$$R = \sum_{k=1}^{N}\pi_k^2 \tag{19}$$

で与えられる。