計算機実験 補足資料

1　マルコフ連鎖モンテカルロ法

1.1　自己相関と統計誤差解析

1.1.1　平均値の分散

確率密度関数 $p(x)$ にしたがう確率変数があるとする。その平均値 μ (母平均) と分散 σ^2 (母分散) はそれぞれ

$$\mu = \langle x \rangle = \int x\, p(x)\, dx \tag{1}$$

$$\sigma^2 = \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = \int x^2 p(x)\, dx - \Big(\int x\, p(x)\, dx \Big)^2 \tag{2}$$

で与えられる。母平均 μ を有限個のサンプル (観測値) から推測することを考える。統計的に独立な M 個のサンプル $(x_1, x_2, \ldots, x_M)$ が得られている時、母平均と母分散は、

$$\bar{x} = \frac{1}{M} \sum_i x_i \tag{3}$$

$$s^2 = \frac{1}{M-1} \sum_i (x_i - \bar{x})^2 \tag{4}$$

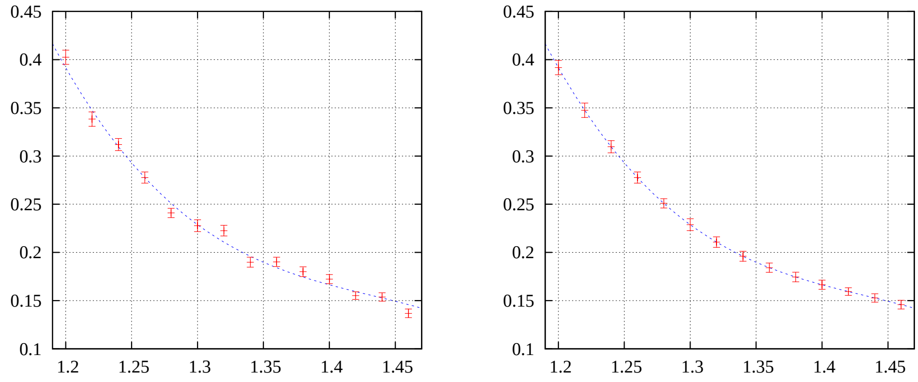
により見積もることができる。これらの量が不偏推定量になっていることを確認するのは簡単である。

一方、$\bar{x}$ の真の平均値 μ からのずれを評価すると、

$$\langle (\bar{x} - \mu)^2 \rangle = \frac{\sigma^2}{M} = \frac{1}{M(M-1)} \langle \sum_i (x_i - \bar{x})^2 \rangle \tag{5}$$

となる。最後の式で M で割るのを忘れると、「平均値の分散」ではなく、「母分散」を計算していることになるので注意。

ここで、次のような 2 つの図があったとする。このうちどちらが信用できる図だろうか？



右側の図では、すべてのデータがエラーバーの範囲で完全に曲線に乗っており、左の図と比べてよい結果であるように見えるが、このような図を見かけた場合には注意が必要である。1σ や 2σ ではなく 100σ でエラーバーをつけた、と明示されていれば問題ないが、おそらく、エラーバーの計算を間違えているか、データの間の強い相関を見落としている。あるいは、きれいに見えるようにデータに手を加えている (もちろん不正行為である) かもしれない。実際の論文においても、$\sqrt{M}$ で割るのを忘れ、平均値のエラーバーではなく母分布の標準偏差をプロットしてしまっているのを見かけることがある。

1.1.2　自己相関関数

ここまでは、測定値が統計的に独立である場合を考えてきた。次にマルコフ連鎖モンテカルロ法で得られた測定値の平均値の統計誤差について考えよう。

モンテカルロステップ数を M とする。前節と同様に、測定された物理量 A_i $(i = 1, 2, \ldots, M)$ の平均 $\bar{A} = \frac{1}{M}\sum_i A_i$ と真の期待値 $\langle A \rangle$ のずれを評価すると

$$\langle(\bar{A} - \langle A \rangle)^2\rangle = \langle(\frac{1}{M}\sum_i A_i - \langle A \rangle)^2\rangle = \langle\frac{1}{M^2}\sum_i(A_i^2 - \langle A^2 \rangle)\rangle + \frac{2}{M^2}\sum_{i=1}^{M}\sum_{t=1}^{M-i}(\langle A_i A_{i+t}\rangle - \langle A \rangle^2) \tag{6}$$

と書ける。マルコフ連鎖モンテカルロでは、直前の配位から次の配位を確率的に生成するので、時系列データには相関があり、最後の式の第 2 項はゼロではない。

ここで、相関の効果をより詳細に評価するために、自己相関関数 (autocorrelation function) と呼ばれる量を導入する。

$$C(t) = \frac{\langle A_i A_{i+t}\rangle - \langle A \rangle^2}{\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2} \tag{7}$$

分子の $\langle A_{i+t} A_i \rangle$ には i があらわに残してあるが、この平均値は i によらず時間差 t だけの関数である。各モンテカルロステップにおける測定値が統計的に独立である場合、

$$\langle A_i A_{i+t}\rangle = \begin{cases} \langle A_i A_i \rangle = \langle A^2 \rangle & \text{for } t = 0 \\ \langle A_i \rangle\langle A_{i+t}\rangle = \langle A \rangle^2 & \text{for } t \neq 0 \end{cases} \tag{8}$$

であるので、$C(t) = \delta_{t,0}$ となる。

一方、マルコフ連鎖モンテカルロでは、$t \neq 0$ においても $C(t) \neq 0$ であり、t の絶対値が大きな極限において、$C(t) \sim \exp(-|t|/\tau_{\rm exp})$ のように指数関数的に減衰する。この $\tau_{\rm exp}$ を指数自己相関時間 (exponential autocorrelation time) と呼ぶ。また、

$$\tau_{\rm int} = \sum_{t=1}^{\infty} C(t) \tag{9}$$

を積分自己相関時間 (integrated autocorrelation time) と呼ぶ。自己相関関数が単純な指数関数で表される場合には両者は等しい。一般には両者は異なる値をもつが、一方が大きいときにはもう一方もそれに比例して大きな値をもつことが多い。なお、自己相関時間は物理量 A ごとに定義される。一般に物理量によって異なることに注意。

自己相関関数 $C(t)$ と積分自己相関時間 $\tau_{\rm int}$ を用いると、$M \gg 1$ において式 (6) は

$$\langle(\bar{A} - \langle A \rangle)^2\rangle \approx \langle\frac{1}{M^2}\sum_i(A_i^2 - \langle A^2 \rangle)\rangle + \frac{2}{M^2}\sum_{i=1}^{M}\sum_{t=1}^{\infty}(\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2)C(t) = \frac{1}{M}\sigma^2(1 + 2\tau_{\rm int}) \tag{10}$$

と書き直すことができる。ここで、σ^2 は母分散 [式 (2)]、すなわち σ^2/M は A_i が互いに独立であると仮定したときの「誤った」エラーバーである。このように、積分自己相関時間が長ければ長いほど、平均値の「真の」エラーバーは大きくなる。あるいは、自己相関の影響により、有効サンプル数 (=統計的に独立なサンプル数) が M から $M/(1 + 2\tau_{\rm int})$ に減少する、と言うこともできる。

1.1.3　ビニング解析

マルコフ連鎖モンテカルロ法でえられた平均値の「真の」エラーバーは、母分散 σ^2 と積分自己相関時間 $\tau_{\rm int}$ から見積もることができる。しかしながら、自己相関関数の積分の計算には $O(M^2)$ のコストがかかる。実際のマルコフ連鎖モンテカルロシミュレーションでは、ビニング (binning) という手法を用いて、正しいエラーバーと積分自己相関時間を見積もることが多い。

ビニング解析では、マルコフ連鎖モンテカルロ法で得られた M 個の測定値を連続する n 個毎に合計 $m = M/n$ 個のビンに分ける。ビン毎の平均値を計算すると

$$\bar{A}_k^{(n)} = \frac{1}{n} \sum_{i=n(k-1)+1}^{nk} A_i \qquad (k = 1, \cdots, m) \tag{11}$$

ここで、$\bar{A}_k^{(n)}$ の右肩の添字 (n) は、長さ n のビンに関する平均であることを表している。

次に「ビン毎の平均値」の分散 $(s^{(n)})^2$ を考える。ビン毎の平均値の平均値は、全体の平均値に等しいので、

$$(s^{(n)})^2 = \frac{1}{m-1} \sum_{k=1}^{m} (\bar{A}_k^{(n)} - \bar{A})^2 \tag{12}$$

と書ける。$n = 1$ の時、$m = M$, $\bar{A}_k^{(n)} = A_k$ なので、

$$\langle (s^{(1)})^2 \rangle = \langle s^2 \rangle = \sigma^2 \tag{13}$$

一方、$n \gg \tau_{\rm int}$ では、全体を一つのビンと考えると

$$\langle (s^{(n)})^2 \rangle \approx \frac{1}{n} \sigma^2 (1 + 2\tau_{\rm int}) \tag{14}$$

となる。ここで

$$(\sigma^{(n)})^2 = \frac{n}{M} (s^{(n)})^2 \tag{15}$$

を定義する。M を固定したままでビンのサイズ n を増やしていくと、$(\sigma^{(n)})^2$ の値は増加し、$n \gg \tau_{\rm int}$ でほぼ一定値 $(\sigma^{(\infty)})^2$ を取るようになる。その値が真のエラーバー [式 (10)] の推定値を与える。さらに自己相関時間も

$$\tau_{\rm int} = \frac{1}{2} \Big(\frac{(\sigma^{(\infty)})^2}{(\sigma^{(1)})^2} - 1 \Big) \tag{16}$$

により見積もることができる。ただし n を大きく取りすぎると m が小さくなる (ビンの数が少なくなる) ため「エラーバーのエラーバー」が増加してしまう。m は最小でも 10 程度となるようにするのがよい。

なお、ビニング解析は、測定量の平均値同士の比のような非線形な量のエラーバーを見積もるのにも有効な手法である。あるいは、より高度な解析手法として、ジャックナイフ法やブートストラップ法といった方法を使うことも多い。

修正履歴

- 2021/10/21: 作成
- 2021/12/10: 式 (12) を修正
- 2021/12/12: 後半で推定量と期待値の表式が混乱していたので整理
- 2021/12/13: 式 (6) を修正