# 研究室セミナー

2019/05/14

19MM336　横田　知大

# 今日の内容

- モンテカルロ法とは
- マルコフ連鎖とは
- メトロポリス-ヘイスティングス法について
- シミュレーテッド・アニーリングについて

# モンテカルロ法 (Monte Carlo method)

数値計算手法の一つ.

乱数を用いた試行を繰り返すことで近似解を求める手法.

入力 → 解析的に解くことが困難な数式 → 出力

## モンテカルロ法 (Monte Carlo method)

数値計算手法の一つ.

乱数を用いた試行を繰り返すことで近似解を求める手法.

入力 → 解析的に解くことが困難な数式 → 出力

- 計算コストがかさむ
- 計算時間の割に精度が低い

# マルコフ連鎖（Markov chain)

未来の状態の確率が現在の状態のみで決定するような
確率過程のことをマルコフ連鎖という.

$x^{(t+1)}$ の確率分布について

一般の確率過程の場合 $\left(x^{(0)}, x^{(1)}, \ldots, x^{(t)}\right)$ に依存する

マルコフ連鎖の場合 $x^{(t)}$ に依存する

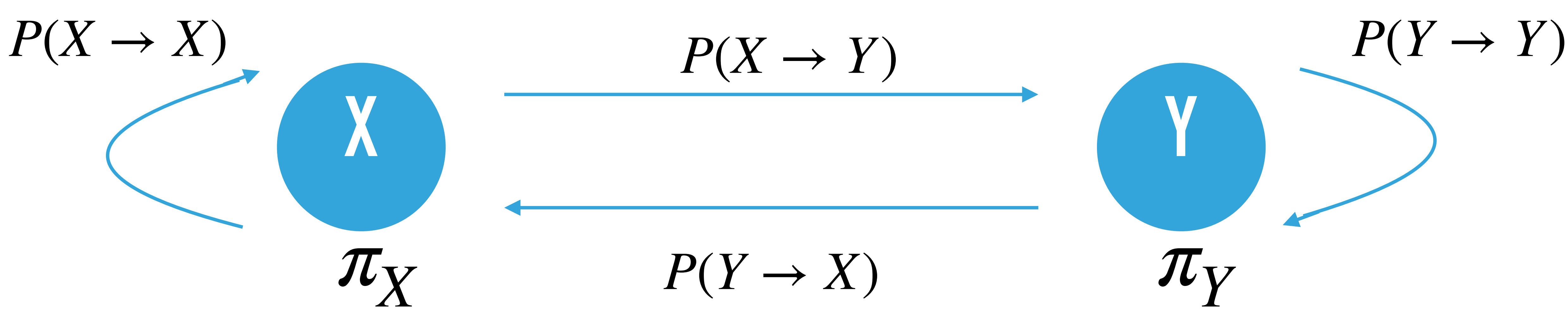
# メトロポリス-ヘイスティングス法の簡単な説明

$E_i$：状態 $i$ でのエネルギー

$T$：温度

$\pi_i$：状態 $i$ での定常分布

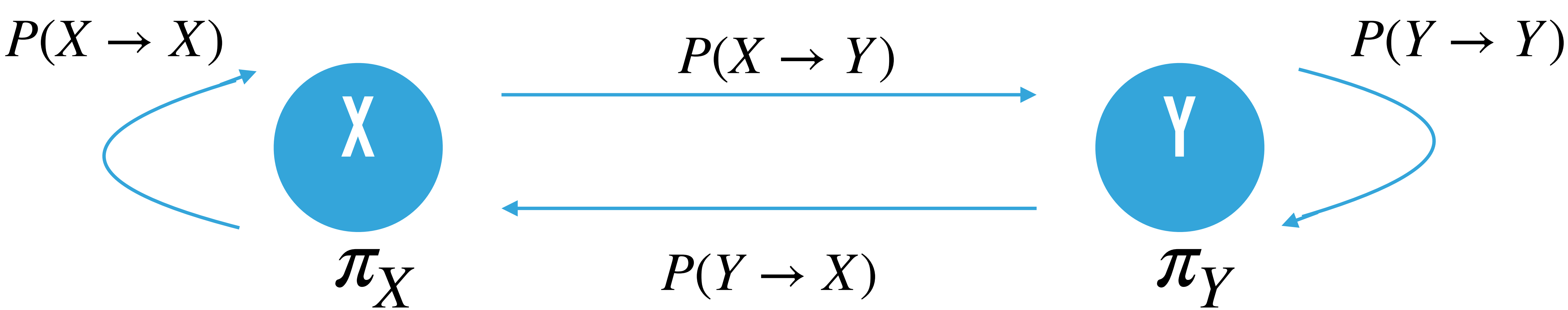
ボルツマン因子 $exp(-E_i/kT)$ の確率でサンプリングをする.



各状態の存在確率は次のようになる.

$$\pi_X = \frac{exp(-E_X/kT)}{exp(-E_X/kT) + exp(-E_Y/kT)}$$

$$\pi_Y = \frac{exp(-E_Y/kT)}{exp(-E_Y/kT) + exp(-E_X/kT)}$$



平衡状態にある場合, 次の等式が成り立つ.

$$\pi_X P(X \to Y) = \pi_Y P(Y \to X)$$

$$\Leftrightarrow exp(-E_X/kT)P(X \to Y) = exp(-E_Y/kT)P(Y \to X)$$

遷移確率のうち大きい方を 1 になるようにする

$$P(X \to Y) = \min\left(1, \frac{exp(-E_Y/kT)}{exp(-E_X/kT)}\right)$$

$$= \min\left(1, exp(-\Delta E/kT)\right)$$ $\Delta E = E_Y - E_X$ とする

エネルギーが下がる方向には確率 1 で遷移し, エネルギーが大きくなる方向には確率 $exp(-\Delta E/kT)$ で遷移する.

遷移確率 $exp(-\Delta E/kT)$ の温度 $T$ について考える

$T$ が大きい場合 :

$exp$ 内の $\Delta E$ の値に影響されずにサンプリングを行う.

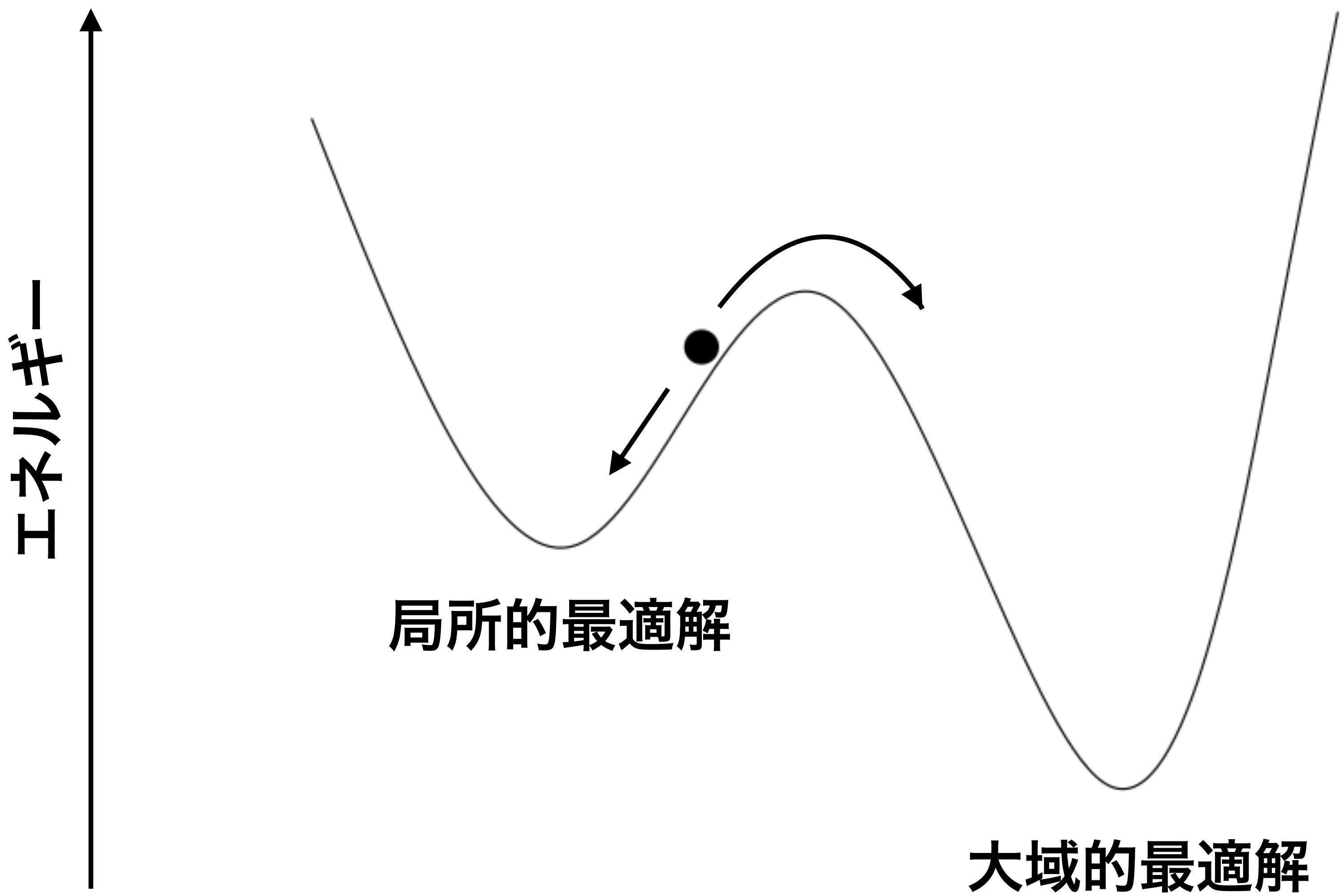
一様乱数からのサンプリングとほとんど変わらない.

$T$ が小さい場合 :

$exp$ 内の $\Delta E$ の値に大きく影響を受ける.

サンプリングが特定の場所に集中してしまう.

$T$ を大きい状態からサンプリングを開始し, 徐々に小さくしていき最適解を得る方法をシミュレーテッドアニーリングという.



# メトロポリス-ヘイスティングス法について

$r_i$： 状態 $i$ での定常分布

$p(i \to j)$： 状態 $i$ から状態 $j$ への遷移確率

$\alpha(i \to j)$： 状態 $i$ にいる時に状態 $j$ を採択する確率

$q(i \to j)$： 状態 $i$ にいる時に状態 $j$ を提案する確率

遷移確率は次のように表せる

$$p(i \to j) = q(i \to j)\alpha(i \to j)$$

詳細釣り合い条件から

$$r_i p(i \to j) = r_j p(j \to i)$$

$$\Leftrightarrow r_i q(i \to j)\alpha(i \to j) = r_j q(j \to i)\alpha(j \to i)$$

$$\Leftrightarrow \frac{\alpha(i \to j)}{\alpha(j \to i)} = \frac{r_j q(j \to i)}{r_i q(i \to j)}$$

メトロポリス- ヘイスティングス法の場合は次のようになる

$$\alpha(i \to j) = \min\left(1, \frac{r_j q(j \to i)}{r_i q(i \to j)}\right)$$