

交換モンテカルロ法における交換率とカルバック距離の関係について

永田 賢二[†] 渡辺 澄夫^{††}

[†] 東京工業大学 総合理工学研究科 知能システム科学専攻 〒226-8503 横浜市緑区長津田 4259

^{††} 東京工業大学 精密工学研究所 〒226-8503 横浜市緑区長津田 4259

E-mail: [†]kenji.nagata@cs.pi.titech.ac.jp, ^{††}swatanab@pi.titech.ac.jp

あらまし 交換モンテカルロ法は、MCMC法の改良アルゴリズムとして特異モデルのベイズ学習など様々な分野でその有効性が示されている。交換モンテカルロ法の実装において、異なる確率分布間での交換率およびその平均を定める際に温度パラメータの設定が重要となる。その基準として、異なる温度間での対称カルバック距離を用いる手法が提案されているが、交換率とカルバック距離との関係は明らかにされていなかった。本研究では、任意の確率分布の低温極限における平均交換率と対称カルバック距離の漸近形を解析的に導出することで両者の関係を明らかにする。キーワード 交換モンテカルロ法、カルバック距離、交換率

On Relation between Exchange Ratio and Kullback Divergence in Exchange Monte Carlo Method

Kenji NAGATA[†] and Sumio WATANABE^{††}

[†] Department of Computer Science Tokyo Institute of Technology, 4259

Nagatsuda, Midori-ku, Yokohama, 226-8503 Japan

^{††} PI Lab., Tokyo Institute of Technology.

E-mail: [†]kenji.nagata@cs.pi.titech.ac.jp, ^{††}swatanab@pi.titech.ac.jp

Abstract The exchange Monte Carlo method was proposed as an improved algorithm of Markov Chain Monte Carlo method, and its effectiveness has been shown in many fields. In the exchange Monte Carlo method, the setting of temperatures is important to make the algorithm efficient because this setting controls the exchange ratio, with which the position exchange between two sequences is accepted. The symmetrized Kullback divergence between two distributions with different temperatures is used as the criterion for setting of temperature. However, the mathematical relation between the symmetrized Kullback divergence and the exchange ratio is not clarified. In this paper, we analytically calculate the asymptotic form of the symmetrized Kullback divergence and the exchange ratio for the arbitrary distribution, and clarify the relation between the symmetrized Kullback divergence and the exchange ratio.

Key words Exchange Monte Carlo Method, Kullback Divergence, Exchange Ratio

1. ま え が き

ある確率分布からサンプル系列を生成するアルゴリズムとして、マルコフ連鎖モンテカルロ法（以下、MCMC法と略記する）が統計学、情報科学、自然科学などの分野において広く用いられている。例えば、ベイズ学習では学習データが与えられたもとでのパラメータの分布を表すベイズ事後分布における期待値計算が必要になり、その際にMCMC法を用いて計算を行う[6]。しかしながら、一般にMCMC法ではサンプリングに要する計算量が膨大になってしまうという問題がある。特に、エ

ネルギー関数が高い障壁をもっていたり[4]、基底状態が1点ではなくサンプル空間上で拡がりをもつようなケースでは[7]、この問題が顕著に現れることが知られている。

近年、この問題に対して、拡張アンサンブル法に基づくMCMC法のさまざまな改良が行われている。改良されたアルゴリズムの一つとして、交換モンテカルロ法が挙げられる[4]。交換モンテカルロ法は、異なる温度パラメータをもつ確率分布を複数まとめた同時分布からのサンプリングを考え、従来のMCMC法の更新に加え、2つの分布間のサンプルの交換を確率的に実行するアルゴリズムであり、スピングラスにおけるシ

ミュレーション [4]、組み合わせ最適化問題や [3] [8]、階層的な学習モデルにおけるベイズ学習など [6]、さまざまな問題において有効性が示されている。

交換モンテカルロ法を実装する際、温度パラメータの設定が重要である [2]。温度パラメータは、異なる温度をもつ 2 つの分布間での交換率およびその平均と深い関わりがあり、最適な温度パラメータを設定することで効率のよいアルゴリズムが実装できることが知られている。温度パラメータを設定する際の基準として、異なる温度をもつ 2 つの分布間における対称化したカルバック距離を考える手法が提案されているが [5]、実際に交換モンテカルロ法を適用する確率分布は複雑であることが多く、そのような確率分布に対して対称カルバック距離を解析的に求めることは非常に困難であるため、平均交換率と対称カルバック距離の間の数学的な関係は明らかにされていなかった。

そこで、本研究では、低温極限のもとで任意の確率分布に対する対称カルバック距離と平均交換率を解析的に計算した結果を定理として述べ、両者の関係を明らかにする。

2. 交換モンテカルロ法

まず始めに、MCMC 法の拡張アルゴリズムである交換モンテカルロ法について説明する。

$w \in R^d$ とし、エネルギー関数 $H(w)$ と任意の確率分布 $\varphi(w)$ を用いて表される以下の確率分布

$$P(w) = \frac{1}{Z(n)} \exp(-nH(w))\varphi(w)$$

に法則収束するサンプル系列を生成することを考える。ここで、 $Z(n)$ は規格化定数である。交換モンテカルロ法では、異なる温度パラメータ $\{t_k : k = 1, \dots, K\}$ をもつ確率分布 $P(w|t_k)$ を複数まとめた同時分布

$$P(w_1, \dots, w_K) = \prod_{k=1}^K P(w_k|t_k) \quad (1)$$

$$P(w|t) = \frac{1}{Z(nt)} \exp(-ntH(w))\varphi(w)$$

からのサンプリングを MCMC 法によって行う。一般には、 $P(w|t)$ を以下のように定義することで、交換モンテカルロ法を適用することが出来る。

$$P(w|t) = \frac{P(w)^t}{\int P(w)^t dw}$$

交換モンテカルロ法のアルゴリズムは、確率分布 (1) を不変にするような以下の 2 種類のサンプルの更新を考え、これらを交互に実行することで定義される。

(1) それぞれの分布における従来のサンプリングメトロポリス法やギブスサンプラーなどの従来の MCMC 法により、それぞれの分布 $P(w_k|t_k)$ からのサンプリングを並列に実行する。

(2) 2 つの分布間における確率的交換
上記の操作に加えて、適当なステップごとにサンプル w_k と w_{k+1} を確率 $u = \min(1, r)$ で交換する。ここで、

$$r = \frac{P(w_{k+1}|t_k)P(w_k|t_{k+1})}{P(w_k|t_k)P(w_{k+1}|t_{k+1})}$$

$$= \exp(n(t_{k+1} - t_k)(H(w_{k+1}) - H(w_k))) \quad (2)$$

である。 u を交換率と呼ぶ。

これらの操作は確率分布 (1) を不変にするので、 w_k は確率分布 $P(w|t_k)$ からのサンプルとみなすことができる。よって、任意の確率分布 $P(w|t_k)$ での期待値の計算は得られたサンプル系列を用いることで計算できる。特に、確率分布の規格化定数を MCMC 法によって計算する際、異なる温度パラメータをもつ確率分布からのサンプルが必要となるため、より効率よく計算できる。

従来の MCMC 法の問題点として、目標分布の形状が複雑になるとサンプル系列の収束が遅くなり、計算量が膨大になるということがあげられる。特に、エネルギー関数 $H(w)$ が多数の局所解をもっていたり、基底状態が一点ではなくサンプル空間上で拡がりをもっているケースでは、変数 n が大きくなるにつれて、計算量が急激に増えてしまう。交換モンテカルロ法では、交換の対象としてサンプル系列が収束しやすい確率分布を用意することで、その収束の早さが他のサンプル系列に対して良い影響を及ぼす。実際には、目標分布での温度パラメータを $t = 1$ とし、収束しやすい確率分布での温度パラメータを $t = 0$ とし、その間に適当な間隔で確率分布を用意することで、効率のよいサンプリングが可能になる。この点が交換モンテカルロ法の利点であり、さまざまな応用においてその有効性が示されている。

3. 交換モンテカルロ法の設計

交換モンテカルロ法を実装する上で、温度パラメータにおける間隔や用意する確率分布の個数などの設定が重要である。式 (2) からわかるとおり、温度パラメータは交換率に大きく関わりがあり、交換率およびその平均を調整する上で重要なパラメータである。

交換モンテカルロ法により効率のよいサンプリングを行うためには、温度パラメータ上でサンプルが端から端まで (t_1 から t_K まで) 移動する時間が短いことが好ましい。そのためには、平均交換率が高いことが望ましいが、平均交換率を高くするには温度パラメータの間隔を小さくする必要があり、用意する確率分布の数 K は大きくなってしまふ。そのため、それぞれの分布に対するサンプリングに要する時間が大きくなり、さらに K が大きすぎると、サンプルが端から端まで移動する時間も大きくなってしまふため効率的な設定ではない。逆に、確率分布の数 K を小さく設定すると、平均交換率が低くなってしまふため、この設定も効率的ではない。従って、隣り合ったそれぞれの確率分布に対して平均交換率がほぼ一定になるように温度パラメータを最適に設定することが、効率のよい交換モンテカルロ法の実装につながる。

平均交換率を一定にするような温度パラメータの間隔を設定する際に、以下で示される対称化したカルバック距離 $I(t_k, t_{k+1})$ (以後、対称カルバック距離と呼ぶ) を基準とする方法が知られている。

$$I(t_k, t_{k+1}) = \int P(w_k|t_k) \log \frac{P(w_k|t_k)}{P(w_k|t_{k+1})} dw_k \\ + \int P(w_{k+1}|t_{k+1}) \log \frac{P(w_{k+1}|t_{k+1})}{P(w_{k+1}|t_k)} dw_{k+1}$$

この関数は、式 (2) で定められた r に対して、 $P(w_k|t_k) \times P(w_{k+1}|t_{k+1})$ における $\log r$ の期待値 $E[\log r]$ との間に

$$E[\log r] = -I(t_k, t_{k+1})$$

という関係が成り立つ性質をもつ。さらに、自由エネルギーを

$$F(nt) = -\log \int \exp(-ntH(w))\varphi(w)dw$$

と定義すると、温度パラメータの間隔が小さいとき、

$$I(t_k, t_{k+1}) = \frac{\partial^2 F(nt)}{\partial t^2} (t_{k+1} - t_k)^2$$

となる。よって、 $\sqrt{\partial^2 F(nt)/\partial t^2}$ に反比例して温度パラメータの間隔をとることで、対称カルバック距離を一定にするように温度パラメータを設定することができる。しかしながら、厳密な平均交換率の定義は、

$$J(t_k, t_{k+1}) = E[u] \\ = \int \int uP(w_k|t_k)P(w_{k+1}|t_{k+1})dw_kdw_{k+1}$$

であり、 I と J は一般には性質が異なるため、 $I(t_k, t_{k+1})$ の値が一定になるような温度パラメータの間隔において平均交換率が一定になるかどうかは明らかにされていない。そのため、理論的な最適温度パラメータの間隔は解明されていない。

そこで、本研究では、 $n \rightarrow \infty$ (低温極限) における対称カルバック情報量と平均交換率の漸近形を定理として示し、両者の性質および関係について明らかにする。

4. 解析

以下で与えられる 2 つの確率分布間で交換モンテカルロ法を実行することを考える。

$$P_1(w) = \frac{1}{Z(nt)} \exp(-ntH(w))\varphi(w) \\ P_2(w) = \frac{1}{Z(n(t+\Delta t))} \exp(-n(t+\Delta t)H(w))\varphi(w)$$

また、上の 2 つの分布に対する対称カルバック距離 I と平均交換率 J を以下のように定義しなおす。

$$I = \int P_1(w_1) \log \frac{P_1(w_1)}{P_2(w_1)} dw_1 \\ + \int P_2(w_2) \log \frac{P_2(w_2)}{P_1(w_2)} dw_2 \\ J = \int \int uP_1(w_1)P_2(w_2)dw_1dw_2$$

一般にエネルギー関数 $H(w)$ に対して、ヘシアンが正であるという性質 $H''(w) > 0$ が成り立たないため、低温極限においても $P(w|t)$ は正規分布に漸近しない。

このとき、対称カルバック距離に関する以下の定理が得られる。

[定理 1] 対称カルバック距離 I は、 $n \rightarrow \infty$ において

$$I = \lambda \left(\frac{\Delta t}{t} \right)^2 \left(1 - \frac{\Delta t}{t} + O\left(\left(\frac{\Delta t}{t} \right)^2 \right) \right)$$

に収束する。ここで、有理数 $\lambda > 0$ は以下で定義するゼータ関数における最も原点に近い極が $-\lambda$ となることから求められる。

$$\zeta(z) = \int H(w)^z \varphi(w)dw.$$

(証明) $P_1(w)$ 、 $P_2(w)$ の定義から、

$$\log \frac{P_1(w)}{P_2(w)} = \log Z(n(t+\Delta t)) - \log Z(nt) + n\Delta tH(w) \\ \log \frac{P_2(w)}{P_1(w)} = \log Z(nt) - \log Z(n(t+\Delta t)) - n\Delta tH(w)$$

となるため、対称カルバック距離 I は

$$I = n\Delta t \left\{ \int H(w)P_1(w)dw - \int H(w)P_2(w)dw \right\}$$

と表すことができる。従って、以下の汎関数 $K(P)$ を求めることで、 I を解析することができる。

$$K(P) = n\Delta t \int H(w)P(w)dw$$

まず、 $K(P_1)$ に関して解析する。汎関数 $K(P_1)$ はディラックのデルタ関数 $\delta(s)$ を用いて以下のように表される。

$$K(P_1) = n\Delta t \int H(w)P_1(w)dw \\ = n\Delta t \frac{\int H(w) \exp(-ntH(w))\varphi(w)dw}{\int \exp(-ntH(w))\varphi(w)dw} \\ = n\Delta t \frac{\int_0^\infty se^{-nts} ds \int \delta(s - H(w))\varphi(w)dw}{\int_0^\infty e^{-nts} ds \int \delta(s - H(w))\varphi(w)dw}$$

ここで、右辺の w に関する積分は状態密度関数 $V(s)$ と呼ばれ、 $s \rightarrow 0$ における漸近形として、以下の式を導出することができる [9] [10]。

$$V(s) = \int_0^\infty \delta(s - H(w))\varphi(w)dw \\ \cong cs^{\lambda-1} (-\log s)^{m-1} \quad (3)$$

ここで、実数 c は $H(w)$ と $\varphi(w)$ から定まる定数で自然数 m は $\zeta(z)$ における極 $-\lambda$ での位数である。従って、 $s' = nts$ とすることで、

$$K(P_1) = n\Delta t \frac{\int \left(\frac{s'}{nt} \right)^\lambda e^{-s'} (\log nt - \log s')^{m-1} \frac{ds'}{nt}}{\int \left(\frac{s'}{nt} \right)^{\lambda-1} e^{-s'} (\log nt - \log s')^{m-1} \frac{ds'}{nt}} \\ = \frac{\Delta t}{t} \frac{\int e^{-s'} s'^\lambda \left(1 + O\left(\frac{1}{\log nt} \right) \right) ds'}{\int e^{-s'} s'^{\lambda-1} \left(1 + O\left(\frac{1}{\log nt} \right) \right) ds'} \\ = \frac{\Delta t}{t} \frac{\Gamma(\lambda+1) + O\left(\frac{1}{\log nt} \right)}{\Gamma(\lambda) + O\left(\frac{1}{\log nt} \right)} \\ \rightarrow \frac{\Delta t}{t} \lambda$$

と計算することができる。ここで、 $\Gamma(\lambda)$ は以下のように定義されるガンマ関数である。

$$\Gamma(\lambda) = \int_0^\infty \exp(-s)s^{\lambda-1} ds$$

上の導出ではガンマ関数の性質である $\Gamma(\lambda+1) = \lambda\Gamma(\lambda)$ を用いている。上の導出と同様に、 $K(P_2)$ は

$$\begin{aligned} K(P_2) &= n\Delta t \int H(w)P_2(w)dw \\ &\rightarrow \frac{\Delta t}{t+\Delta t}\lambda \end{aligned}$$

と求まるので、

$$\begin{aligned} I &= \lambda \left(\frac{\Delta t}{t} - \frac{\Delta t}{t+\Delta t} \right) \\ &= \lambda \frac{\Delta t^2}{t(t+\Delta t)} \\ &= \lambda \left(\frac{\Delta t}{t} \right)^2 \left(1 - \frac{\Delta t}{t} + O\left(\left(\frac{\Delta t}{t} \right)^2 \right) \right) \end{aligned}$$

と導出することができ、定理が示された。(証明終)

以上の定理から、低温極限のもとでは、 $\frac{\Delta t}{t}$ の値を一定にするように温度パラメータを設定する、つまり、温度パラメータを等比数列により設定することで隣り合った温度間での対称カルバック距離が一定になることが明らかになった。特に、 $\frac{\Delta t}{t}$ の値が小さいときは、

$$\Delta t = t\sqrt{\frac{a}{\lambda}}$$

と設定することで対称カルバック距離の値が一定の値 a になることがわかる。

しかしながら、対称カルバック距離を一定にするように温度パラメータを設定したときに、それぞれの温度における平均交換率が等しくなるかは明らかにされていない。さらに、対称カルバック距離の値 a と平均交換率の関係もまた明らかでない。そこで、次に平均交換率について解析を行う。

[定理 2] 平均交換率 J は、 $n \rightarrow \infty$ において

$$J = 1 - \frac{|\Delta t|}{t} \frac{2\Gamma(2\lambda)}{4\lambda\Gamma(\lambda)^2} + O\left(\left(\frac{\Delta t}{t} \right)^2 \right)$$

に収束する。

(証明) $\Delta t \geq 0$ のとき、交換率 u の定義から、 J は

$$\begin{aligned} J &= \int \int_{H(w_1) < H(w_2)} P_1(w_1)P_2(w_2)dw_1dw_2 \\ &\quad + \int \int_{H(w_1) \geq H(w_2)} rP_1(w_1)P_2(w_2)dw_1dw_2 \\ &= 2 \int \int_{H(w_1) < H(w_2)} P_1(w_1)P_2(w_2)dw_1dw_2 \\ &= 2 \int \int_{H(w_1) < H(w_2)} \frac{e^{-ntH(w_1)}\varphi(w_1)}{Z(nt)} \\ &\quad \times \frac{e^{-n(t+\Delta t)H(w_2)}\varphi(w_2)}{Z(n(t+\Delta t))} dw_1dw_2 \end{aligned}$$

となり、 $\Delta t < 0$ のとき、

$$J = 2 \int \int_{H(w_1) > H(w_2)} \frac{e^{-ntH(w_1)}\varphi(w_1)}{Z(nt)}$$

$$\times \frac{e^{-n(t+\Delta t)H(w_2)}\varphi(w_2)}{Z(n(t+\Delta t))} dw_1dw_2$$

となる。そこで、まず $\Delta t \geq 0$ の場合について考える。定理 1 での導出と同様にすると、

$$Z(nt) \rightarrow \frac{c(\log nt)^{m-1}}{(nt)^\lambda} \Gamma(\lambda)$$

となるので、

$$\begin{aligned} J^* &= \int \int_{H(w_1) < H(w_2)} e^{-ntH(w_1)}\varphi(w_1) \\ &\quad \times e^{-n(t+\Delta t)H(w_2)}\varphi(w_2)dw_1dw_2 \end{aligned}$$

とおくと、

$$J = \frac{2J^*}{Z(nt)Z(n(t+\Delta t))}$$

であるから、 J^* を計算することで J を求めることができる。定理 1 の場合と同様にディラックのデルタ関数 $\delta(s)$ を用いると、

$$\begin{aligned} J^* &= \int_0^\infty ds_2 \int_0^{s_2} ds_1 e^{-nts_1} e^{-n(t+\Delta t)s_2} \\ &\quad \times \int \delta(s_1 - H(w_1))\varphi(w_1)dw_1 \\ &\quad \times \int \delta(s_2 - H(w_2))\varphi(w_2)dw_2 \\ &= \int_0^\infty ds_2 \int_0^{s_2} ds_1 e^{-nts_1} e^{-n(t+\Delta t)s_2} \\ &\quad \times cs_1^{\lambda-1} (-\log s_1)^{m-1} cs_2^{\lambda-1} (-\log s_2)^{m-1} \end{aligned}$$

となる。ここで、 $s_1 = s'_1 s_2$ とすると、

$$\begin{aligned} J^* &= \int_0^\infty ds_2 \int_0^1 ds'_1 e^{-nts'_1 s_2} e^{-n(t+\Delta t)s_2} \\ &\quad \times cs_1^{\lambda-1} (-\log s'_1 s_2)^{m-1} cs_2^{2\lambda-1} (-\log s_2)^{m-1} \end{aligned}$$

となり、さらに $s'_2 = nt s_2$ とし、 $s'_2 = 0$ における $e^{-(1+\frac{\Delta t}{t})s'_2}$ のテーラー展開

$$e^{-s'_2} \left(1 - \frac{\Delta t}{t} s'_2 + O\left(\left(\frac{\Delta t}{t} \right)^2 \right) \right)$$

を用いると、

$$\begin{aligned} J^* &= \int_0^\infty \frac{ds'_2}{nt} \int_0^1 ds'_1 e^{-s'_1 s'_2} e^{-(1+\frac{\Delta t}{t})s'_2} \\ &\quad \times cs_1^{\lambda-1} (\log nt - \log s'_1 s'_2)^{m-1} \\ &\quad \times c \left(\frac{s'_2}{nt} \right)^{2\lambda-1} (\log nt - \log s'_2)^{m-1} \\ &\rightarrow \frac{c^2 (\log nt)^{2(m-1)}}{(nt)^{2\lambda}} \left\{ O\left(\left(\frac{\Delta t}{t} \right)^2 \right) \right. \\ &\quad \left. + \int_0^\infty ds'_2 \int_0^1 ds'_1 e^{-(1+s'_1)s'_2} s_1^{\lambda-1} s_2^{2\lambda-1} \right. \\ &\quad \left. - \frac{\Delta t}{t} \int_0^\infty ds'_2 \int_0^1 ds'_1 e^{-(1+s'_1)s'_2} s_1^{\lambda-1} s_2^{2\lambda} \right\} \end{aligned}$$

と計算できる。 $s''_2 = (1+s'_1)s'_2$ とすると、

$$J^* = \frac{(c')^2(\log nt)^{2(m-1)}}{(nt)^{2\lambda}} \left\{ O\left(\left(\frac{\Delta t}{t}\right)^2\right) + \int_0^\infty e^{-s_2''} (s_2'')^{2\lambda-1} ds_2'' \int_0^1 \frac{(s_1')^{\lambda-1}}{(1+s_1')^{2\lambda}} ds_1' - \frac{\Delta t}{t} \int_0^\infty e^{-s_2''} (s_2'')^{2\lambda} ds_2'' \int_0^1 \frac{(s_1')^{\lambda-1}}{(1+s_1')^{2\lambda+1}} ds_1' \right\}$$

となる。ここで、簡単な計算により

$$\int_0^1 \frac{(s_1')^{\lambda-1}}{(1+s_1')^{2\lambda}} ds = \frac{\Gamma(\lambda)^2}{2\Gamma(2\lambda)}$$

$$\int_0^1 \frac{(s_1')^{\lambda-1}}{(1+s_1')^{2\lambda+1}} ds = \frac{\lambda\Gamma(\lambda)^2}{2\Gamma(2\lambda+1)} + \frac{1}{2\lambda 4^\lambda}$$

と求まるので、

$$J^* = \frac{(c')^2(\log nt)^{2(m-1)}}{(nt)^{2\lambda}} \left\{ \frac{\Gamma(\lambda)^2}{2} - \frac{\Delta t}{t} \left(\frac{\lambda\Gamma(\lambda)^2}{2} + \frac{\Gamma(2\lambda)}{4^\lambda} \right) + O\left(\left(\frac{\Delta t}{t}\right)^2\right) \right\}$$

が得られる。従って、平均交換率 J は

$$J = 2 \frac{J^*}{Z(nt)Z(n(t+\Delta t))}$$

$$\rightarrow \left(1 + \frac{\Delta t}{t}\right)^\lambda \times \left(1 - \frac{\Delta t}{t} \left(\lambda + \frac{2\Gamma(2\lambda)}{4^\lambda\Gamma(\lambda)^2}\right) + O\left(\left(\frac{\Delta t}{t}\right)^2\right)\right)$$

$$\cong 1 - \frac{\Delta t}{t} \frac{2\Gamma(2\lambda)}{4^\lambda\Gamma(\lambda)^2} + O\left(\left(\frac{\Delta t}{t}\right)^2\right)$$

と導出される。 $\Delta t < 0$ の場合も同様の計算により、

$$J \cong 1 + \frac{\Delta t}{t} \frac{2\Gamma(2\lambda)}{4^\lambda\Gamma(\lambda)^2} + O\left(\left(\frac{\Delta t}{t}\right)^2\right)$$

と得られるため、

$$J = 1 - \frac{|\Delta t|}{t} \frac{2\Gamma(2\lambda)}{4^\lambda\Gamma(\lambda)^2} + O\left(\left(\frac{\Delta t}{t}\right)^2\right)$$

となり、定理が示された。(証明終)

この定理から、 $\frac{\Delta t}{t}$ を一定にするように温度パラメータを区切ると、隣り合った2つの温度間における平均交換率が一定になることがわかる。つまり、2つの温度間での対称カルバック距離が一定になるように温度パラメータを設定することで、平均交換率が一定になることが証明された。特に $\frac{\Delta t}{t}$ が小さいときは、対称カルバック距離が a となるように温度パラメータの間隔を設定すると、平均交換率 J は

$$J = 1 - \sqrt{\frac{a}{\lambda}} \frac{2\Gamma(2\lambda)}{4^\lambda\Gamma(\lambda)^2}$$

となり、平均交換率を見積もるには対称カルバック距離の値 a だけでなく、目標分布から定まる定数 λ も必要であることがわかる。また、対称カルバック距離と平均交換率の漸近形を比較すると、対称カルバック距離は $\Delta t = 0$ で最小値 0 をとる二次形式であるのに対し、平均交換率は $\Delta t = 0$ で最大値 1 をとる一次形式であるという両者の性質の違いも明らかになった。

5. 考 察

本研究では、低温極限のもとで任意の確率分布に対する対称カルバック距離と平均交換率を解析的に計算し、その結果から両者の性質および関係を明らかにした。結果として、2つの温度間での対称カルバック距離が一定になるように温度パラメータを設定することで平均交換率が一定になること、その際の温度パラメータは等比数列であること、また、両者の性質として、対称カルバック距離が二次形式であるのに対し、平均交換率が一次形式であることが明らかになった。平均交換率が一次形式になった原因としては、交換率を考える際の $u = \min(1, r)$ という場合分けの影響によるものと思われる。

本研究の結果に関連して、いくつかの考察を行う。

まず始めに、目標分布の形状と温度パラメータの間隔について議論する。目標分布に対するエネルギー関数の基底状態が1点の分布とパラメータ空間上に拡がりをもつ分布の2つの確率分布を考えると、定数 λ の値は拡がりをもつ分布のほうが小さくなることが知られている [1][12]。一方、対称カルバック距離が a となるように温度パラメータを設定することを考えると、本研究の定理により、 λ の値が小さいほど温度パラメータの間隔を大きく設定できる、つまり交換モンテカルロ法で用意する確率分布の数を少なくできることがわかる。従って、基底状態がパラメータ空間上に拡がりをもつ分布に対して交換モンテカルロ法を行う場合、正規分布などの基底状態が1点の分布に比べて少ない数の確率分布で実装できることが明らかになった。これは、ニューラルネットワークや混合正規分布などの階層的な学習モデルのベイズ学習を行う際に生じる問題であり、本結果は、複雑な学習モデルのベイズ学習における交換モンテカルロ法の有用性を示している。

次に、定数 λ について議論する。先にも述べたように、エネルギー関数 $H(w)$ と確率分布 $\varphi(w)$ が与えられたとき、ゼータ関数 $\zeta(z)$ の最も原点に近い極が $-\lambda$ になることで解析的に λ を求めることが出来る。しかしながら、ゼータ関数の極を求めためにはブローアップと呼ばれる操作を行う必要があり、エネルギー関数が複雑な場合ではブローアップを行うことが困難であるため、実際に λ を解析的に計算することは難しい。本定理の結果から、平均交換率に λ が含まれていることが明らかになったため、実験的に平均交換率を測定することで λ の推定値を求めることが可能である。階層的な構造をもつ学習モデルのモデル選択基準として λ の推定値を用いる方法が知られ [11]、本研究の結果からこのようなモデル選択問題にも応用することが可能である。

最後に、交換モンテカルロ法の実装について議論する。本結果は、平均交換率を一定にするような温度パラメータの設定法を与えたものであるが、実際に最適な平均交換率の値は未だ解明されていない。これは、交換モンテカルロ法において用意する確率分布の個数を最適にする際に重要となる問題である。また、交換モンテカルロ法では従来の MCMC 法のアルゴリズムも用いるため、メトロポリス法で候補を選ぶ際の確率分布の設

定なども交換モンテカルロ法の実装において重要である。より効率のよい交換モンテカルロ法の実装を実現するためにこれらの問題を考えることは重要であり、今後の課題である。

6. 結 論

本研究では、低温極限のもとで任意の確率分布に対する対称カルバック情報量と平均交換率を解析的に計算し、両者の関係および平均交換率を一定にする温度パラメータの設定を明らかにした。今後の課題として、本研究で得られた理論を実験により検証すること、本定理に基づいた交換モンテカルロ法の設計法の構築、および、ベイズ学習などの実問題への応用が挙げられる。

この研究は、科学研究費補助金 18009007、および特別研究員 18-5809 の援助を受けた。

文 献

- [1] M.Aoyagi, S.Watanabe, “Stochastic complexities of reduced rank regression in Bayesian estimation,” *Neural Networks*, Vol.18, No.7, pp.924-933, 2005.
- [2] K.Hukushima, “Domain-Wall Free-Energy of Spin Glass Models: Numerical Method and Boundary Conditions,” *Physical Review E* 60, pp.3606-3613, 1999.
- [3] K.Hukushima, “Extended ensemble Monte Carlo approach to hardly relaxing problems,” *Computer Physics Communications*, 147, pp.77-82, 2002.
- [4] K.Hukushima, K.Nemoto, “Exchange Monte Carlo Method and Application to Spin Glass Simulation,” *Journal of the Physical Society of Japan*, Vol.65, No.6, pp.1604-1608, 1996.
- [5] 伊庭幸人他, “計算統計 II マルコフ連鎖モンテカルロ法とその周辺,” 岩波書店.
- [6] K.Nagata, S.Watanabe, “The Exchange Monte Carlo Method for Bayesian Learning in Singular Learning Machines,” *Proceedings of World Congress on Computational Intelligence 2006 (WCCI2006)*, pp.6383-6389, 2006.
- [7] 中野修弘, 高橋克之, 渡辺澄夫, “特異モデルにおけるマルコフ連鎖モンテカルロ法の評価法,” *電子情報通信学会論文誌*, Vol.J88-D-2, No.10, pp.2011-2020, 2005.
- [8] K.Pinn, C.Wieczerkowski, “Number of magic squares from parallel tempering Monte Carlo,” *Int. J. Mod. Phys. C9*, 541, 1998.
- [9] S.Watanabe, “Algebraic analysis for nonidentifiable learning machines,” *Neural Computation*, Vol.13, No.4, pp.899-933, 2001.
- [10] S.Watanabe, “Algebraic geometrical methods for hierarchical learning machines,” *Neural Networks*, Vol.14, No.8, pp.1049-1060, 2001.
- [11] K.Yamazaki, K.Nagata, S.Watanabe, “A New Method of Model Selection Based on Learning Coefficient,” *Proceedings of International Symposium on Nonlinear Theory and its Applications (NOLTA2005)*, pp.389-392, 2005.
- [12] K.Yamazaki, S.Watanabe, “Singularities in mixture models and upper bounds of stochastic complexity,” *Neural Networks*, Vol.16, No.7, pp.1029-1038, 2003.