

# ベイズ統計の理論と方法

## 5.1 マルコフ連鎖モンテカルロ法

大橋耕也

東京工業大学 情報理工学院 数理・計算科学専攻  
渡辺澄夫研究室 修士課程 1年

2017

- ① MCMC の位置づけ
- ② メトロポリス法
- ③ ハイブリッド・モンテカルロ法 (HMC)
- ④ ギブス・サンプリング法
- ⑤ ランジュバン・モンテカルロ法 (LMC)
- ⑥ 自由エネルギーの近似
- ⑦ レプリカ交換法

# MCMC の位置づけ

確率モデル  $p(x|w)$  ( $x \in \mathbb{R}^N$ ,  $w \in W \subset \mathbb{R}^d$ ) と事前分布  $\varphi(w)$  が与えられたとき、集合  $W$  上の関数  $H(w)$  を次のように定義する。

$$H(w) = - \sum_{i=1}^n \log p(X_i|w) - \frac{1}{\beta} \log \varphi(w).$$

このとき

$$\begin{aligned} \exp(-\beta H(w)) &= \exp\left(\sum \log p(X_i|w)^\beta + \log \varphi(w)\right) \\ &= \exp\left(\log\left(\varphi(w) \prod p(X_i|w)^\beta\right)\right) \end{aligned}$$

であるから、事後分布は

$$p(w|X^n) = \frac{1}{Z_n(\beta)} \varphi(w) \prod_{i=1}^n p(X_i|w)^\beta = \frac{1}{Z_n(\beta)} \exp(-\beta H(w))$$

メモ： $H(w)$  はエネルギー等を表現することが多い (e.g. ボルツマン分布)

# MCMC の位置づけ

そもそものベイズ推測の目標:

$$\mathbb{E}_w[p(x|w)] = p^*(x|X^n)$$

により次の標本を予想すること。

しかし、**解析的に積分が処理できないケースが多い。**

⇒近似

パラメータの次元  $d = 1, 2, 3$  あたりならリーマン和近似は実用的な近似手法。

⇒高次元になったら計算量的に困難

そこで、

$$\int f(w)p(w)dw \approx \frac{1}{K} \sum_{k=1}^K f(w_k)$$

$K \rightarrow \infty$  において、右辺が左辺に収束するようなパラメータ列  $\{w_k\}_{k=1}^K$  を生成する方法を考える。

⇒サンプリングの問題になる。

⇒ サンプルングの問題になる。  
マルコフ過程を用いたサンプルング方法が広く使われている。  
MCMC (Markov Chain Monte Carlo) 法と呼ばれる。

## マルコフ過程

未来の挙動が現在の値だけで決定される確率過程。

パラメータ列  $\{w_1, w_2, \dots\}$  は  $p(w_{k+1}|w_k)$  に従って順次生成される。

# MCMC の位置づけ

次の二つの条件が満たされているとき、 $K$  を十分大きくとれば近似は真値に収束する。

## 収束条件

- 任意の  $w_a, w_b \in W$  について、

$$p(w_b|w_a)p(w_a) = p(w_a|w_b)p(w_b)$$

が成り立つ。詳細釣り合い条件という。

- 集合  $W$  の任意の要素  $w$  の近傍に到達する確率が 0 ではない。

詳細釣り合い条件は

$$\int p(w_a|w_b)p(w_b)dw_b = p(w_a)$$

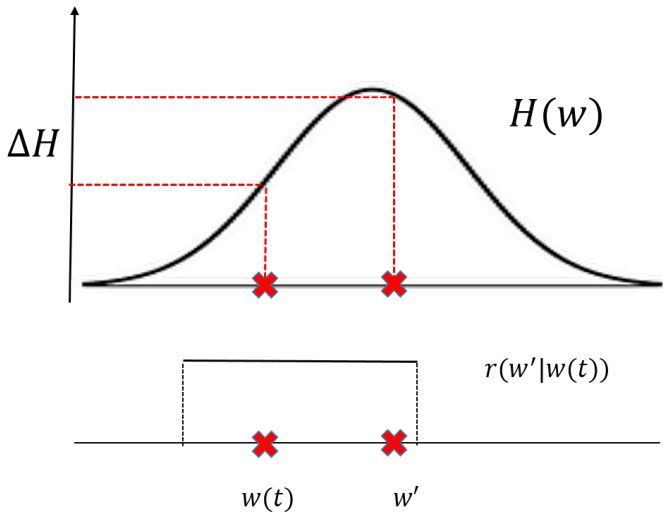
より、マルコフ連鎖が定常分布  $p(w)$  を持つことを保証している。これを満たすように遷移確率  $p(w(t+1)|w(t))$  を設計するわけであるが、いくつかの有名な手法を紹介する。

- ① MCMC の位置づけ
- ② メトロポリス法
- ③ ハイブリッド・モンテカルロ法 (HMC)
- ④ ギブス・サンプリング法
- ⑤ ランジュバン・モンテカルロ法 (LMC)
- ⑥ 自由エネルギーの近似
- ⑦ レプリカ交換法

- ① 初期値  $w(1)$  を決めて  $t = 1$  とする。
- ② 得られている  $w(t)$  から  $w'$  を条件付き確率  $r(w'|w(t))$  に従って生成する。ここでは  $r(w'|w(t))$  の対称性を仮定する。
- ③  $\Delta H = H(w') - H(w(t))$  とし、確率  $P = \min\{1, \exp(-\beta\Delta H)\}$  で  $w(t+1) = w'$ 、確率  $1 - P$  で  $w(t+1) = w(t)$  とする。
- ④  $t \leftarrow t + 1$  とし 2 に戻る。



# メトロポリス法



$\Delta H \leq 0$ 、つまり  $H(w') \leq H(w(t))$  のとき必ず遷移する。エネルギーの低い方向には必ず遷移すると解釈できる。

## 定理 18

メトロポリス法は詳細釣り合い条件の関係を満たす。

(証明)

メトロポリス法において、 $w(t)$  が与えられた下での  $w(t+1)$  の条件付き確率を  $p(w(t+1)|w(t))$  と表記する。このとき

$$p(w_a|w_b)p(w_b) = p(w_b|w_a)p(w_a)$$

$$\Leftrightarrow p(w_a|w_b) \frac{1}{Z_n(\beta)} \exp(-\beta H(w_b)) = p(w_b|w_a) \frac{1}{Z_n(\beta)} \exp(-\beta H(w_a))$$

$$\Leftrightarrow p(w_a|w_b) \exp(-\beta H(w_b)) = p(w_b|w_a) \exp(-\beta H(w_a))$$

を示せば良い。

$w(t)$  が与えられたとき、提案分布  $r(\cdot|w(t))$  から生成された  $w'$  に遷移する確率は

$$r(w'|w(t))P = r(w'|w(t)) \min\{1, \exp(-\beta H(w') + \beta H(w(t)))\}$$

である。これを  $w'$  について積分すると、 $w(t)$  から新しい場所に遷移する確率が求まる。

$$Q(w(t)) := \int r(w'|w(t)) \min\{1, \exp(-\beta H(w') + \beta H(w(t)))dw'\}$$

これより、その場にとどまる確率は  $1 - Q(w(t))$  であるから、

$$p(w_a|w_b) = r(w_a|w_b) \min\{1, \exp(-\beta H(w_a) + \beta H(w_b))\} + \delta(w_a - w_b)(1 - Q(w_b))$$

したがって、

$$\begin{aligned} p(w_a|w_b) \exp(-\beta H(w_b)) &= r(w_a|w_b) \min\{\exp(-\beta H(w_b)), \exp(-\beta H(w_a))\} \\ &\quad + \delta(w_a - w_b)(1 - Q(w_b)) \exp(-\beta H(w_b)) \\ &= r(w_b|w_a) \min\{\exp(-\beta H(w_a)), \exp(-\beta H(w_b))\} \\ &\quad + \delta(w_b - w_a)(1 - Q(w_a)) \exp(-\beta H(w_a)) \\ &= p(w_b|w_a) \exp(-\beta H(w_a)) \end{aligned}$$

証明終わり。

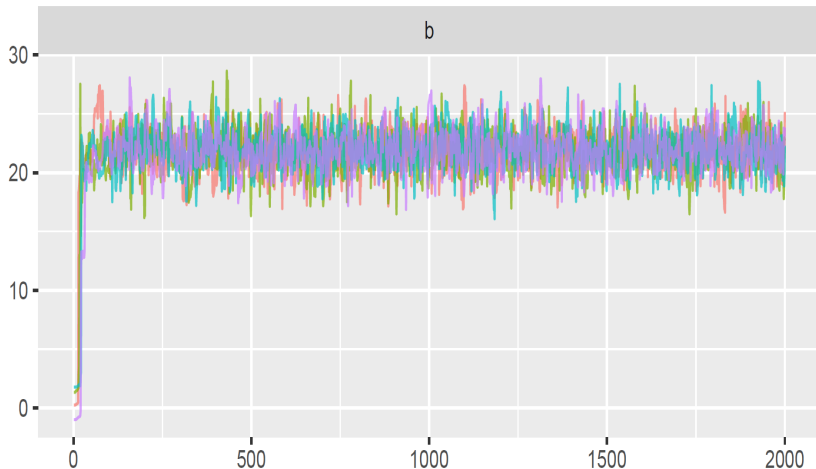
メトロポリス法では提案分布の対称性を仮定したが、仮定しない場合には遷移確率を

$$P = \min \left\{ 1, \frac{r(w(t)|w') \exp(-\beta H(w'))}{r(w'|w(t)) \exp(-\beta H(w(t)))} \right\}$$

と変更すれば同様に詳細釣り合い条件が成り立つ。一般にこれをメトロポリス-ヘイスティングス法といい、メトロポリス法はこの特別な場合にあたる。

# MCMC に関する一般的な注意

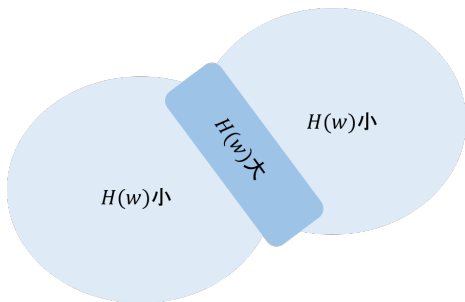
初期点から、目的とする分布へ収束するまでの点は分布の近似には用いられない。収束するまでの期間を**バーンイン**といい、問題ごとに試行錯誤するしかない。



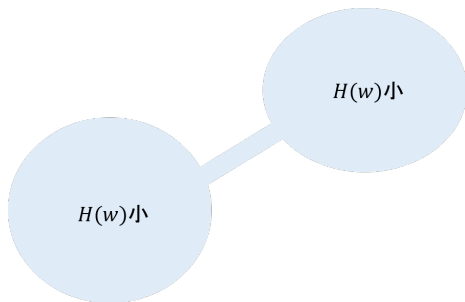
# MCMCに関する一般的な注意

- サンプル間の相関が強くパラメータ空間を網羅的に舐めることが難しい。
- 提案分布の分散が大きいと、次点へのステップ幅が大きくなるが遷移確率は小さくなることが多い。逆に分散が小さい場合は、次点へのステップ幅は小さいが遷移確率は大きくなる。

## ポテンシャル障壁の問題



## エントロピー障壁の問題



# ハイブリッド・モンテカルロ法

そのような問題点を解決する手法として、ハイブリッド・モンテカルロ法が提案されている。ハイブリッド・モンテカルロ法とは、新たな変数を加えてサンプルをする手法のこと。ここでは Stan でも採用されている **HMC(ハミルトニアン・モンテカルロ) 法**を紹介する (より正確には No-U-Turn Sampler(NUTS))。

$w \in \mathbb{R}^d$ , 新たな変数  $p \in \mathbb{R}^d$  に対し次の量を定義する。

$$\mathcal{H}(w, p) = \frac{1}{2} \|p\|^2 + \beta H(w)$$

- ① 初期値  $w(1)$  を決めて、 $t = 1$  とする。
- ② 標準正規分布から独立に  $d$  個のサンプルを発生させ、 $d$  次元ベクトル  $p$  を構成する。
- ③  $(w(t), p)$  を初期値とする次の微分方程式を解き、 $T$  時刻後の  $(w', p')$  を得る。

$$\frac{dw}{d\tau} = p, \quad \frac{dp}{d\tau} = -\beta H(w) \quad (0 \leq \tau \leq T)$$

- ④  $\Delta \mathcal{H} = \mathcal{H}(w', p') - \mathcal{H}(w(t), p)$  を求めて遷移確率を  $P = \min\{1, \exp(-\Delta \mathcal{H})\}$  とする。
- ⑤  $t \leftarrow t + 1$  とし 2 に戻る。



HMC は次のように解釈できる。

$$\mathcal{H}(w, p) = \frac{1}{2} \|p\|^2 + \beta H(w)$$

(ハミルトニアン) = (運動エネルギー) + (ポテンシャルエネルギー)

ステップ3で解く微分方程式はハミルトン方程式であり、運動量  $p$  と位置  $w$  はそれに従い変化する。力を加えることで、パラメータの位置が遠くまで移動しやすくなり、障壁の問題も解消されると解釈される。

また、微分方程式を解く反復法としてはリープ・フロッグ法が時間可逆性とエネルギー保存性を有しており適している。

# リープ・フロッグ法

微分方程式

$$\frac{dw}{d\tau} = p, \quad \frac{dp}{d\tau} = f(w)$$

に対する反復式をつぎのようにする。(n に関する反復)

$$p\left(n + \frac{1}{2}\right) = p(n) + \frac{\epsilon}{2}f(w(n)), \quad w(n+1) = w(n) + \epsilon p\left(n + \frac{1}{2}\right)$$

$$p(n+1) = p\left(n + \frac{1}{2}\right) + \frac{\epsilon}{2}f(w(n+1))$$

ここで  $\epsilon > 0$  は小さな定数とした。

つまり、運動量  $p$  は半歩ずつ更新し、位置  $w$  はそれにより更新する。保存系の力学を解くのに優れている、二次近似の解法である。

HMC を実行する際にはステップ幅  $\epsilon$  と終端時刻  $T$  をチューニングする必要があるが、これを ”うまいこと” 調節してくれる方法が NUTS であり、Stan で実装されている。

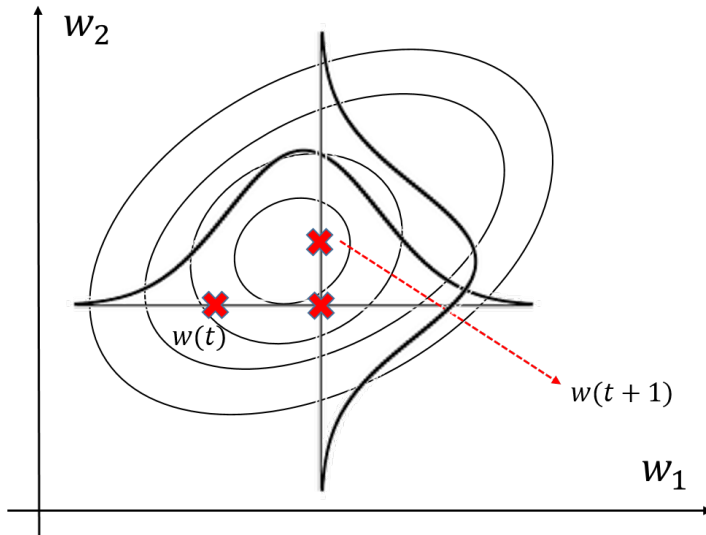
- ① MCMC の位置づけ
- ② メトロポリス法
- ③ ハイブリッド・モンテカルロ法 (HMC)
- ④ ギブス・サンプリング法
- ⑤ ランジュバン・モンテカルロ法 (LMC)
- ⑥ 自由エネルギーの近似
- ⑦ レプリカ交換法

# ギブス・サンプリング法

パラメータ  $w \in \mathbb{R}^n$  を二つの変数に分割して  $w = (w_1, w_2)$  とする。目的とする確率分布を  $p(w_1, w_2)$  とし、条件付き確率を  $p(w_1|w_2)$ ,  $p(w_2|w_1)$  とする。

- ① 初期値  $w(1)$  を決めて、 $t = 1$  とする。
- ② 確率  $1/2$  で  $p(w'_1|w'_2)p(w'_2|w_1(t))$  に従って  $(w'_1, w'_2)$  を選出し、確率  $1/2$  で  $p(w'_2|w'_1)p(w'_1|w_2(t))$  に従って  $(w'_1, w'_2)$  を選出する。
- ③  $w(t+1) = (w'_1, w'_2)$  とし、 $t \leftarrow t+1$  とおいて2に戻る。

# ギブス・サンプリング法



## 補題 26

ギブス・サンプリング法は詳細釣り合い条件の関係を満たす。

(証明)

遷移確率は

$$p(w'_1, w'_2 | w_1, w_2) = \frac{1}{2} \{ p(w'_2 | w'_1) p(w'_1 | w_2) + p(w'_1 | w'_2) p(w'_2 | w_1) \}$$

このとき、

$$\begin{aligned} & p(w'_1, w'_2 | w_1, w_2) p(w_1, w_2) \\ &= \frac{1}{2} \left\{ \frac{p(w'_2, w'_1)}{p(w'_1)} \frac{p(w'_1, w_2)}{p(w_2)} p(w_1, w_2) + \frac{p(w'_1, w'_2)}{p(w'_2)} \frac{p(w'_2, w_1)}{p(w_1)} p(w_1, w_2) \right\} \\ &= \frac{1}{2} \{ p(w_1 | w_2) p(w_2 | w'_1) + p(w_2 | w_1) p(w_1 | w'_2) \} p(w'_1, w'_2) \\ &= p(w_1, w_2 | w'_1, w'_2) p(w'_1, w'_2) \end{aligned}$$

証明終わり。

# ギブス・サンプリング法

- ギブス・サンプリングは  $p(w_1|w_2)$ ,  $p(w_2|w_1)$  からのサンプリングが容易である場合に利用される。
- サンプリングする順番をいつも同じにすると詳細釣り合い条件は満たされな  
いが、近似値は収束する。詳細釣り合い条件はあくまでも十分条件であること  
に注意。
- 毎回、各次元ごとに新たにサンプリングするのではなく、一方を固定しても  
詳細釣り合い条件が成り立つ。

$$p(w'_1, w'_2 | w_1, w_2) = \frac{1}{2} \{ p(w'_1 | w'_2) \delta(w'_2 - w_2) + p(w'_2 | w'_1) \delta(w'_1 - w_1) \}$$

- 両方を同時に動かさないと移動しにくい場合には有効に機能しない。

$$p(w_1, w_2) = \delta(w_1 - w_2) p(w_2)$$

- 変分ベイズ法が適用できる確率モデルでは有効に機能する。  
例) 混合正規分布のように、隠れ変数を導入することでパラメータと隠れ変  
数の同時分布を考える。

- ① MCMC の位置づけ
- ② メトロポリス法
- ③ ハイブリッド・モンテカルロ法 (HMC)
- ④ ギブス・サンプリング法
- ⑤ ランジュバン・モンテカルロ法 (LMC)
- ⑥ 自由エネルギーの近似
- ⑦ レプリカ交換法



$\epsilon > 0$  とする。

- ①  $w(t)$  を初期化し、 $t = 0$  とする。
- ②  $g(\epsilon) \sim N(0, 2\epsilon)$  とし、次の更新を行う。  
毎回独立な  $g(\epsilon)$  を用いて

$$w(t + \epsilon) = w(t) - \epsilon\beta\nabla H(w(t)) + g(\epsilon)$$

とする。

- ③  $t \leftarrow t + \epsilon$  として 2 に戻る。

- 更新式

$$w(t + \epsilon) = w(t) - \epsilon\beta\nabla H(w(t)) + g(\epsilon)$$

は、 $H(w)$  の勾配方向にステップ幅  $\epsilon$  で降りたあとノイズをのせる操作になっている。

- ステップ幅  $\epsilon \rightarrow 0$  として得られる確率微分方程式

$$\frac{dw}{dt} = -\beta\nabla H(w) + \frac{dB}{dt}$$

はランジュバン方程式と呼ばれる。

- ランジュバン方程式は  $t \rightarrow \infty$  である定常分布  $p(w)$  に収束することが知られており、

$$p(w) = \frac{\exp(-\beta H(w))}{\int \exp(-\beta H(w'))dw'}$$

という形をしている。LMCはこのような理論背景に基づいているが、実際の更新式は離散的である。

以下、LMCにより生成される  $w(t)$  が  $\epsilon \rightarrow 0$  で目的の確率分布に収束することを示す。

## 補題 27

LMC により得られる確率変数  $W(t)$  の確率分布を  $p(w, t)$  とする。  
 $\epsilon \rightarrow 0$  とするとき

$$\frac{\partial}{\partial t} p(w, t) - \beta \nabla \cdot ((\nabla H(w)) p(w, t)) = \Delta p(w, t)$$

が成り立つ。これを **フォッカー・プランク方程式** という。

(証明)

確率変数  $g(\epsilon)$  の確率分布  $q = N(0, 2\epsilon)$  のフーリエ変換は

$$\begin{aligned} F[q](k) &= \int q(w) \exp(ik \cdot w) dw \\ &= \int \frac{1}{\sqrt{4\pi\epsilon}} \exp\left(-\frac{\|w\|^2}{4\epsilon}\right) \exp(ik \cdot w) dw \\ &= \int \frac{1}{\sqrt{4\pi\epsilon}} \exp\left\{-\frac{1}{4\epsilon} (\|w\|^2 - 4\epsilon ik \cdot w)\right\} dw \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \int \frac{1}{\sqrt{4\pi\epsilon}} \exp \left\{ -\frac{1}{4\epsilon} (\|w\|^2 - 4\epsilon ik \cdot w) \right\} dw \\
&= \int \frac{1}{\sqrt{4\pi\epsilon}} \exp \left\{ -\frac{1}{4\epsilon} (\|w - 2\epsilon ik\|^2 + 4\epsilon^2 \|k\|^2) \right\} dw \\
&= \exp(-\epsilon \|k\|^2) \int \frac{1}{\sqrt{4\pi\epsilon}} \exp \left\{ -\frac{1}{4\epsilon} \|w - 2\epsilon ik\|^2 \right\} dw \\
&= \exp(-\epsilon \|k\|^2)
\end{aligned}$$

である。確率分布  $p(w, t)$  の  $w$  についてのフーリエ変換を

$$\varphi(k, t) = F[p](k, t) = \int p(w, t) \exp(ik \cdot w) dw$$

とおく。

LMC の更新式より、

$$\varphi(k, t + \epsilon)$$

$$= \int p(w, t + \epsilon) \exp(ik \cdot w) dw$$

$$= \mathbb{E}_g[\mathbb{E}_w[\exp(ik \cdot w(t + \epsilon)) | g]]$$

$$= \mathbb{E}_g[\mathbb{E}_w[\exp(ik \cdot (w(t) - \epsilon\beta\nabla H(w) + g)) | g]]$$

$$= \int p(w, t) dw \int q(g) dg \exp(ik \cdot (w - \epsilon\beta\nabla H(w) + g))$$

$$= \int q(g) \exp(ik \cdot g) dg \int p(w, t) dw \exp(ik \cdot w) \exp(-i\epsilon\beta k \cdot \nabla H(w))$$

$$= \exp(-\epsilon\|k\|^2) \int p(w, t) dw \exp(ik \cdot w) \exp(-i\epsilon\beta k \cdot \nabla H(w))$$

$$= (1 - \epsilon\|k\|^2 + o(\epsilon^2)) \int p(w, t) dw \exp(ik \cdot w) (1 - i\epsilon\beta k \cdot \nabla H(w) + o(\epsilon^2))$$

( $\because$  Taylor expansion)

$$= (1 - \epsilon\|k\|^2) \int p(w, t) dw \exp(ik \cdot w) (1 - i\epsilon\beta k \cdot \nabla H(w)) + o(\epsilon^2)$$

$$= (1 - \epsilon\|k\|^2)\varphi(k, t) - (1 - \epsilon\|k\|^2)i\epsilon\beta k \cdot \int (\nabla H(w))p(w, t) \exp(ik \cdot w) dw + o(\epsilon^2)$$

$$\begin{aligned}
&= (1 - \epsilon\|k\|^2)\varphi(k, t) - (1 - \epsilon\|k\|^2)i\epsilon\beta k \cdot \int (\nabla H(w))p(w, t) \exp(ik \cdot w)dw + o(\epsilon^2) \\
&= (1 - \epsilon\|k\|^2)\varphi(k, t) - (1 - \epsilon\|k\|^2)i\epsilon\beta k \cdot F[(\nabla H(w))p](k, t) + o(\epsilon^2) \\
&= \varphi(k, t) - \epsilon \{i\beta k \cdot F[(\nabla H(w))p](k, t) + \|k\|^2\varphi(k, t)\} + o(\epsilon^2)
\end{aligned}$$

ここで、関数  $f$  が無限遠で 0 と仮定した場合

$$(-ik)F[f](\xi) = F[\nabla f](\xi)$$

が成り立つから

$$\begin{aligned}
\frac{\varphi(k, t + \epsilon) - \varphi(k, t)}{\epsilon} &= \beta(-ik) \cdot F[(\nabla H(w))p](k, t) + (-ik)^2\varphi(k, t) + o(\epsilon) \\
\Leftrightarrow \frac{\varphi(k, t + \epsilon) - \varphi(k, t)}{\epsilon} &= \beta F[\nabla \cdot ((\nabla H(w))p)](k, t) + F[\Delta p](k, t) + o(\epsilon)
\end{aligned}$$

$$\frac{\varphi(k, t + \epsilon) - \varphi(k, t)}{\epsilon} = \beta F[\nabla \cdot ((\nabla H(w))p)](k, t) + F[\Delta p](k, t) + o(\epsilon)$$

に対し逆フーリエ変換を施すと

$$\frac{p(w, t + \epsilon) - p(w, t)}{\epsilon} = \beta \nabla \cdot ((\nabla H(w))p(w, t)) + \Delta p(w, t) + o(\epsilon)$$

ここで、 $\epsilon \rightarrow 0$  とすれば

$$\frac{\partial}{\partial t} p(w, t) - \beta \nabla \cdot ((\nabla H(w))p(w, t)) = \Delta p(w, t)$$

となり補題が得られる。(証明終わり)

フォッカー・プランク方程式が  $t$  に依存しない定常解  $p(w, t) = \bar{p}(w)$  をもつとする。このとき  $(\partial \bar{p} / \partial t) = 0$  であるから

$$-\beta \nabla \cdot ((\nabla H(w)) \bar{p}(w)) = \Delta \bar{p}(w)$$

無限遠で  $p$  が 0 になることを仮定すると (積分定数が等しくなるので)、

$$-(\beta \nabla H(w)) \bar{p}(w) = \nabla \bar{p}(w)$$

$$\Leftrightarrow -\beta \nabla H(w) = \nabla (\log \bar{p}(w))$$

$$\Leftrightarrow \bar{p}(w) \propto \exp(-\beta H(w))$$

以上の議論をまとめると、

- LMC の更新式は  $\epsilon \rightarrow 0$  のときランジュバン方程式になる。
- そのとき得られる  $w(t)$  の確率分布  $p(w, t)$  はフォッカー・プランク方程式を満たす。
- フォッカー・プランク方程式が定常解を持つなら、それは目的とする分布となる。

実際に LMC により得られる  $\{w(t)\}$  は離散的であるが、ステップ幅を小さくすれば目的とする分布からのサンプリングだと期待される。



- ① MCMC の位置づけ
- ② メトロポリス法
- ③ ハイブリッド・モンテカルロ法 (HMC)
- ④ ギブス・サンプリング法
- ⑤ ランジュバン・モンテカルロ法 (LMC)
- ⑥ 自由エネルギーの近似
- ⑦ レプリカ交換法

# 自由エネルギーの近似

自由エネルギーを計算するには、分配関数を求めればよい。MCMCで素直に近似しようと思うと次の関係式が浮かぶ。

$$p(w) = \frac{1}{Z} \varphi(w) \exp(-nH(w)) \quad (nH(w) = -\sum \log p(X_i|w))$$

による期待値操作を  $\mathbb{E}_w[\ ]$  とすると、

$$Z = \frac{1}{\mathbb{E}_w[\exp(nH(w))]}$$

しかしこれは適していない。なぜなら、 $\mathbb{E}_w[\ ]$  によって生成されるサンプルの位置と  $\exp(nH(w))$  が大きな  $w$  の位置が異なりすぎ、サンプルに大きな偏りができるからである。

そこで、別のやり方を考える。

# 自由エネルギーの近似

$$\hat{H}(w) = - \sum \log p(X_i|w)$$

とおき、

$$Z_n(\beta) = \int e^{-\beta \hat{H}(w)} \varphi(w) dw$$

とする。このとき逆温度  $\beta$  での平均操作を

$$\mathbb{E}_w^{(\beta)}[(\cdot)] = \frac{1}{Z_n(\beta)} \int (\cdot) e^{-\beta \hat{H}(w)} \varphi(w) dw$$

と表記する。ここで、数列  $\{\beta_k; k = 0, 1, \dots, J\}$  を

$$0 = \beta_0 < \beta_1 < \dots < \beta_J = 1$$

を満たすように決める。

# 自由エネルギーの近似

このとき周辺尤度  $Z_n(1)$  は、 $Z_n(0) = 1$  に注意すると

$$\begin{aligned} Z_n(1) &= \frac{Z_n(\beta_1)}{Z_n(\beta_0)} \frac{Z_n(\beta_2)}{Z_n(\beta_1)} \cdots \frac{Z_n(\beta_J)}{Z_n(\beta_{J-1})} \\ &= \prod_{k=0}^{J-1} \frac{Z_n(\beta_{k+1})}{Z_n(\beta_k)} \\ &= \prod_{k=0}^{J-1} \frac{1}{Z_n(\beta_k)} \int \exp(-\beta_{k+1} \hat{H}(w)) \varphi(w) dw \\ &= \prod_{k=0}^{J-1} \frac{1}{Z_n(\beta_k)} \int \exp(-(\beta_{k+1} - \beta_k) \hat{H}(w)) \exp(-\beta_k \hat{H}(w)) \varphi(w) dw \\ &= \prod_{k=0}^{J-1} \mathbb{E}_w^{(\beta_k)} [\exp(-(\beta_{k+1} - \beta_k) \hat{H}(w))] \end{aligned}$$

# 自由エネルギーの近似

したがって自由エネルギー  $F_n(1)$  は

$$F_n(1) = -\log Z_n(1) = -\sum_{k=0}^{J-1} \log \mathbb{E}_w^{(\beta_k)}[\exp(-(\beta_{k+1} - \beta_k)\hat{H}(w))]$$

により求められる。これにより、自由エネルギーは MCMC で近似できる量  $\mathbb{E}_w^{(\beta_k)}[\cdot]$  の和で表現できた。また、これは本質的には  $f(\beta) = -\log Z_n(\beta)$  にたいして

$$F_n(1) = f(1) - f(0) = \int_0^1 \frac{df}{d\beta}(\beta) d\beta = \int_0^1 \mathbb{E}_w^{(\beta)}[\hat{H}(w)] d\beta$$

を計算することに相当する。以下の計算によりそれがわかる。

$$\begin{aligned} F_n(1) &= -\sum_{k=0}^{J-1} \log \mathbb{E}_w^{(\beta_k)}[\exp(-(\beta_{k+1} - \beta_k)\hat{H}(w))] \\ &\leq -\sum_{k=0}^{J-1} \mathbb{E}_w^{(\beta_k)}[-(\beta_{k+1} - \beta_k)\hat{H}(w)] \quad (\because \text{Jensen's inequality}) \\ &\rightarrow \int_0^1 \mathbb{E}_w^{(\beta)}[\hat{H}(w)] d\beta \quad \text{as } J \rightarrow \infty \end{aligned}$$

# 自由エネルギーの近似

$$\mathbb{E}_w^{(\beta_1)}[\langle \cdot \rangle], \mathbb{E}_w^{(\beta_2)}[\langle \cdot \rangle], \dots, \mathbb{E}_w^{(\beta_{J-1})}[\langle \cdot \rangle]$$

を計算するために、 $W = (w_1, w_2, \dots, w_{J-1})$  とし、各逆温度でのパラメータの同時確率

$$P(W) = \prod_{j=1}^{J-1} p^{(\beta_j)}(w_j)$$

からのサンプリングを考える。ここで  $p^{(\beta_j)}$  は逆温度  $\beta_j$  での事後分布である。このサンプリング法として、**レプリカ交換法**が提案されている。

- ① MCMC の位置づけ
- ② メトロポリス法
- ③ ハイブリッド・モンテカルロ法 (HMC)
- ④ ギブス・サンプリング法
- ⑤ ランジュバン・モンテカルロ法 (LMC)
- ⑥ 自由エネルギーの近似
- ⑦ レプリカ交換法

# レプリカ交換法

レプリカ交換法は次の2ステップを交互に実行することでサンプリングをする。

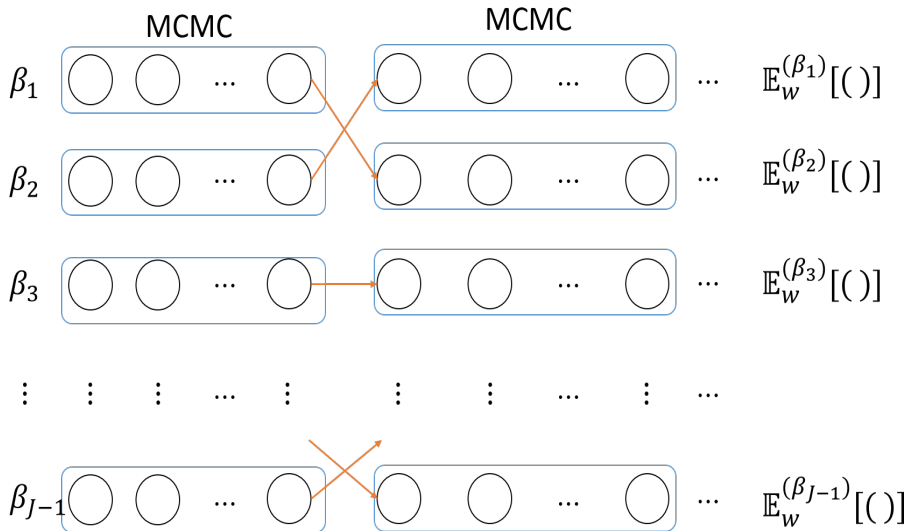
- ① 各温度ごとに通常の MCMC を行いサンプリングする。
- ② 一定の間隔で隣同士のパラメータ ( $\beta_j$  でのパラメータ  $w_j$  と、 $\beta_{j+1}$  でのパラメータ  $w_{j+1}$ ) を、確率  $P$  で交換する。ただし、

$$P = \exp\{-(\beta_{j+1} - \beta_j)(\hat{H}(w_j) - \hat{H}(w_{j+1}))\}$$

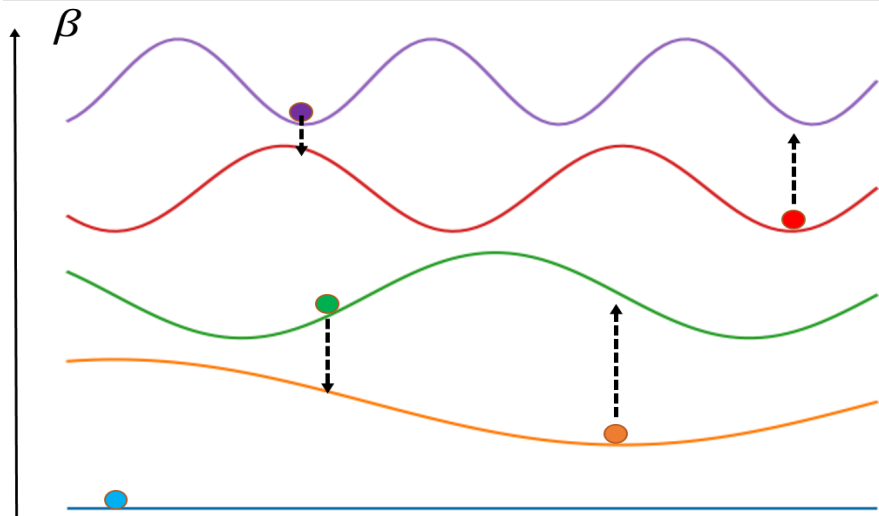
この交換は、 $P(W)$  に関する詳細釣り合い条件が成り立つので、レプリカ交換法は  $P(W)$  を定常分布にもつことが保証される。



# レプリカ交換法



# レプリカ交換法



# レプリカ交換法

- ポテンシャル障壁やエントロピー障壁の問題のように、MCMC は分布の局所ピークにつかまりやすい。レプリカ交換法はアンサンブル・モンテカルロ法の一つで、大域的なサンプリングが期待される。
- レプリカ交換法による逆温度  $\beta_1, \beta_2 (\beta_2 > \beta_1)$  の間で交換が行われる確率は

$$P(\beta_1, \beta_2) = 1 - \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{\beta_2 - \beta_1}{\beta_1} \frac{\Gamma(\lambda + \frac{1}{2})}{\Gamma(\lambda)}$$

ここで  $\lambda$  は  $\hat{H}(w)$  から定まる実対数閾値である。これから、交換確率を各温度で一定にするためには、温度  $\{\beta_j\}$  を等比数列にすればよいことがわかる。

## 参考文献 I

- [1] 渡辺澄夫. ベイズ統計の理論と方法. コロナ社. 2012
- [2] 渡辺澄夫. 代数幾何と学習理論. 森北出版. 2006
- [3] 松浦健太郎, 石田基広. Stan と R でベイズ統計モデリング. 共立出版. 2016
- [4] 渡辺澄夫. ホームページ  
<http://watanabe-www.math.dis.titech.ac.jp/users/swatanab/index-j.html>
- [5] ハミルトニアンモンテカルロ法  
<http://qiita.com/hiro5585/items/f50df506b208d37cdd7d>
- [6] Langevin Monte Carlo 法には棄却が必要か.  
<http://ktrmm.github.io/blog/2016/08/25/201608-lmc/>
- [7] レプリカ交換モンテカルロ法 (パラレル・テンパリング) による混合ガウス分布に従う乱数の生成.  
<http://d.hatena.ne.jp/teramonagi/20120930/1348982608>