解説

完璧にサンプリングしよう！ —第一話　遥かなる過去から—

来嶋　秀治，松井　知己

1.　はじめに

本連載は3回にわたって「マルコフ連鎖の極限分布の実現」をテーマとする．この話題は，MCMC (Markov chain Monte Carlo) 法との関わりが深い．連載はアルゴリズムの話が中心だが，その奇抜なアイデアを楽しんでいただきたい．初回は「無限のシミュレーションを有限時間で実現」してしまう，夢のようなアルゴリズムの基本アイデアを紹介しよう．

2.　マルコフ連鎖の設計

2.1　マルコフ連鎖

以降，状態数が有限のマルコフ連鎖について考える．いま，マルコフ連鎖$\mathcal{M}$はm個の状態で構成される状態空間$\Omega=\{s_1, s_2, ..., s_m\}$と推移確率行列$P$を持っているとしよう．すなわち，$\mathcal{M}$が各時刻で取りうる状態は$\Omega$上のいずれかであり，時刻$t$で状態$x\in\Omega$にいる時，時刻$t+1$の状態が$y\in\Omega$である確率は$P(x, y)$である．ただし，$P(x, y)$は行列$P$の$x, y$成分を表す．

マルコフ連鎖$\mathcal{M}$の状態空間Ω上の確率分布$\boldsymbol{\pi}=(\pi(s_1), \pi(s_2), ..., \pi(s_m))$について考える．このとき$\boldsymbol{\pi}$は$\sum_{x\in\Omega}\pi(x)=1$および$\pi(x)\geq 0$ $(\forall x\in\Omega)$を満たす．この$\boldsymbol{\pi}$が$\boldsymbol{\pi}P=\boldsymbol{\pi}$を満たす時，**定常分布**と呼ぶ．今後，マルコフ連鎖$\mathcal{M}$は唯一の定常分布$\boldsymbol{\pi}$を持つ（エルゴード的）と仮定する．このとき，マルコフ連鎖を無限回推移させると，その状態は定常分布$\boldsymbol{\pi}$に収束することが知られている[1]．

2.2　MCMC法

MCMC法の基本的なアイデアは非常に簡明で，「マルコフ連鎖の極限分布からサンプリングを行い，モンテカルロ法(等)を行う．」というものである．

MCMC法の利点は状態空間が非常に大きかったり，あるいはその状態数を知ることさえ困難な場合に，局所的な情報を手がかりに，集合全体の持つ情報を計算することができる点である．例えば，前者の例として，イジングモデルの分配関数（正規化定数）の計算が，また後者の例として，分割表の正確検定が，それぞれ挙げられる．広い意味でのMCMC法は，いまや統計物理，医療統計，遺伝情報学，数値積分，画像処理，最適化算法など，様々な分野に現れる．

2.3　定常分布の設計

MCMC法を用いる上で，目標の分布を定常分布に持つマルコフ連鎖の設計は重要である．これに関して，目標の分布を設計する方法が知られている．代表的な方法として，M-H (Metropolice-Hastings) 法やGibbsサンプラが挙げられるが，これらが目標の定常分布を持つことは，次の定理によって保証される．

定理1　エルゴード的マルコフ連鎖$\mathcal{M}$は有限の状態空間Ωと推移確率行列Pを持つとする．状態空間Ω上の確率分布$\boldsymbol{\pi}$ $(\sum_{x\in\Omega}\pi(x)=1,\ \pi(x)\geq 0\ (\forall x\in\Omega))$が，任意の状態対$\{x, y\}\subset\Omega$について，

$$\pi(x)P(x, y)=\pi(y)P(y, x) \tag{1}$$

を満たす時，確率分布$\boldsymbol{\pi}$はマルコフ連鎖$\mathcal{M}$の唯一の定常分布である．

定理中の式(1)は**詳細均衡方程式**と呼ばれる．例えば図1のマルコフ連鎖は任意の状態対$\{x, y\}\subset\{s_1, s_2, s_3\}$に

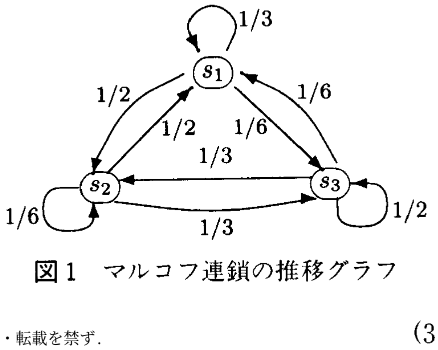

図1　マルコフ連鎖の推移グラフ

きじま　しゅうじ，まつい　ともみ
東京大学 大学院情報理工学系研究科
〒113-8656 文京区本郷7-3-1

λ:	$0 \sim \frac{1}{6}$	$\sim \frac{2}{6}$	$\sim \frac{3}{6}$	$\sim \frac{4}{6}$	$\sim \frac{5}{6}$	~ 1
s_1	s_1	s_2	s_2	s_3	s_2	s_1
s_2	s_1	s_1	s_1	s_2	s_3	s_3
s_3	s_3	s_2	s_3	s_2	s_3	s_1
さいころの目:	1	2	3	4	5	6

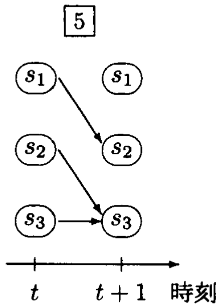

図 2　更新関数の例

ついて $P(x, y)=P(y, x)$ が成り立つので，定常分布は一様分布になる．詳細均衡方程式は目標の定常分布を持つための十分条件であり，マルコフ連鎖の定常分布は必ずしもこれを満たす必要はない．しかし，MCMC 法の利点が局所的情報のみで推移できる点にあることを考慮すれば，この局所的な方程式はマルコフ連鎖の設計に非常に有効である．

2.4　更新関数

マルコフ連鎖の推移は，一様実数乱数 $\Lambda \in [0, 1)$ と，(決定的) 関数 ϕ: $\Omega \times [0, 1) \rightarrow \Omega$ をもちいて表現することができる．関数 ϕ は，一様実数乱数 $\Lambda \in [0, 1)$ と任意の $x, y \in \Omega$ に対して，$\Pr[\phi(x, \Lambda)=y]=P(x, y)$ を満たさなければならない．この関数 ϕ は**更新関数** (update function) と呼ばれる．

図 2 の左側の表は，図 1 のマルコフ連鎖に対する更新関数の例である．簡単のため，乱数の値が区間 $[(i-1)/6, i/6)$ $(i \in \{1, 2, ..., 6\})$ に含まれる事象をさいころの目$\boxed{i}$だと思うとよい．図 2 の右の図はさいころの目が$\boxed{5}$であったときの時刻 t から $t+1$ への推移を図示したものである．

更新関数の概念を再帰的に拡張すると，時刻 t_1 から t_2 $(t_1 < t_2)$ への推移も乱数列 $\boldsymbol{\lambda}=(\lambda[t_1], \lambda[t_1+1], ..., \lambda[t_2-1])$ と下記のように定義される関数 $\Phi_{t_1}^{t_2}$: $\Omega \times [0, 1)^{t_2-t_1} \rightarrow \Omega$ を用いて

$$\Phi_{t_1}^{t_2}(x, \boldsymbol{\lambda}) \stackrel{\mathrm{def.}}{=} \phi(\phi(\cdots\phi(x, \lambda[t_1]), ..., \lambda[t_2-2]), \lambda[t_2-1])$$

と表すことができる．

もちろん，状態空間 Ω と推移確率行列 P を持つマルコフ連鎖の更新関数の決め方は**一意ではない**[1]．

2.5　問題点は何か？

目標の定常分布を持つマルコフ連鎖を手に入れた後の問題点は，「何回推移させれば定常分布 (極限分布) と言えるのか？」ということである．しかし，マルコフ連鎖を何回推移させても，有限回の推移で打ち切ってしまうとひずみは生じる．

これに対し，1996 年に Propp and Wilson は「無限回のシミュレーションを有限時間で実現」する乱択アルゴリズムを提案した．このアルゴリズムは CFTP (coupling from the past：過去からのカップリング[2]) と呼ばれる．それでは，いよいよ CFTP について紹介しよう．

3.　過去からのカップリング

3.1　アルゴリズム

状態空間 Ω と更新関数 ϕ を持つマルコフ連鎖 $\mathcal{M}$ に対して，CFTP アルゴリズムは次のように定義される．

アルゴリズム 1　(CFTP アルゴリズム)

<u>Step 1</u>：シミュレーションの開始時刻を $T := -1$ とする．空列 $\boldsymbol{\lambda} := ()$ を用意する．

<u>Step 2</u>：乱数 $\lambda[T]$ を生成し，数列 $\boldsymbol{\lambda}$ の先頭に挿入する．すなわち $\boldsymbol{\lambda} := (\lambda[T], \lambda[T+1], ..., \lambda[-1])$ とする．

<u>Step 3</u>：Ω の各状態 x について，x を初期状態とし，共通の乱数列 $\boldsymbol{\lambda}$ を用いて時刻 T から時刻 0 までマルコフ連鎖を推移させる．このとき，

(a) もし，時刻 0 で coalesce[3] していれば $(\exists y \in \Omega, \forall x \in \Omega, y=\Phi_T^0(x, \lambda))$，時刻 0 の状態 y を出力し，停止する．

(b) そうでなければ，シミュレーションの開始時刻を $T := T-1$ として Step 2 に戻る．

アルゴリズム 1 が終了したときの $|T|$ の値を coalescence **時間**と呼ぶ．以降，図 3 を例にアルゴリズムを説明する．

---

[1] 松：うまい更新関数が必要になるんだよね．来：研究者の腕の見せどころですね．

[2] 松：この名前長くない？　来：僕は慣れちゃいました．

[3] 松：この訳語は合流でどうかな．来：収斂くらいが無難じゃないですか？　松：「収斂」って漢字書けないだよぉ．

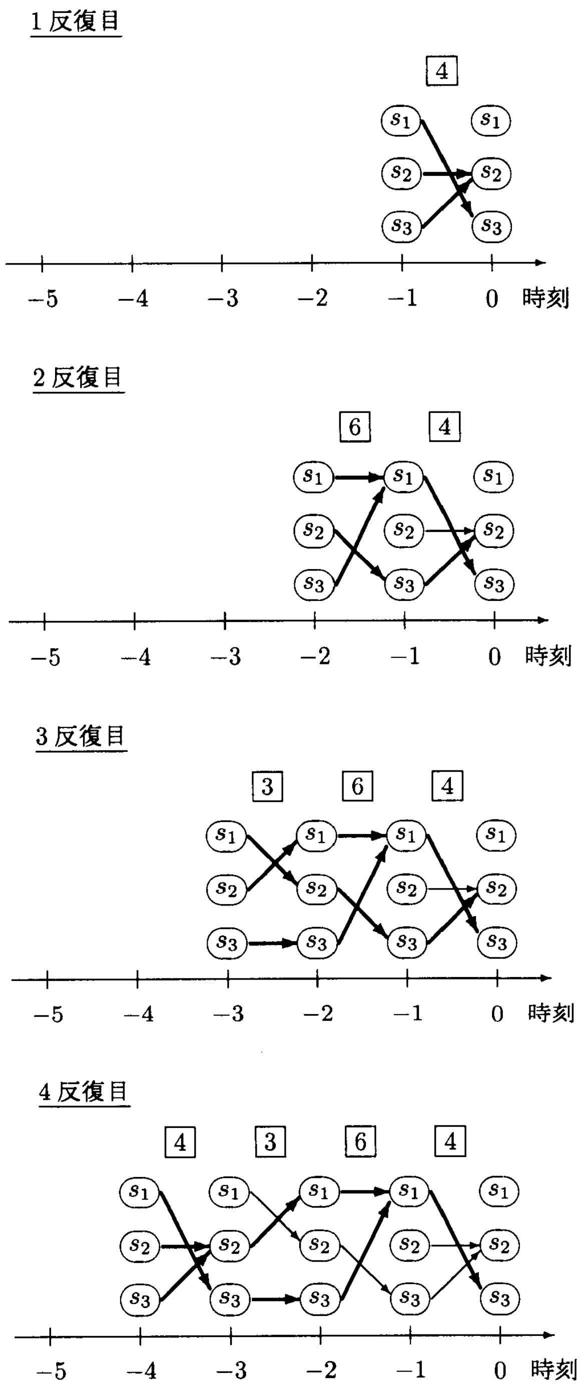

図3　アルゴリズムの例

1反復目：Step 2 でさいころをふり$\boxed{4}$の目を得る．Step 3 ですべての状態 s_1, s_2, s_3 について，さいころの目$\boxed{4}$を用いて時刻−1から0までに対する推移を行う．このとき，時刻0で coalesce していない（状態 s_2 と s_3 が存在する）ので(b)に従う．

2反復目：Step 2 でさいころの目$\boxed{6}$を得る．Step 3 ですべての状態について，さいころの目$\boxed{6}$, $\boxed{4}$を用いて時刻−2から0まで推移を行う．特に，時刻−1から0への推移は1反復目で得られた$\boxed{4}$を用いているので，1反復目と同一の推移であることに注意する．やはり時刻0で coalesce していないので(b)に従う．

3反復目：Step 2 でさいころの目$\boxed{3}$を得る．Step 3 で coalesce を確認するが，やはり coalesce していないので(b)に従う．

4反復目：Step 2 でさいころの目$\boxed{4}$を得る．Step 3 で coalesce を確認する．このとき，時刻0の状態は s_3 で coalesce しているので，状態 s_3 を出力しアルゴリズムを終了する．

定理2　任意のエルゴード的な有限マルコフ連鎖に対して，ある更新関数[4]が存在して，アルゴリズム1は確率1で有限停止し，アルゴリズムの返す値は定常分布に**厳密**に従う．

上記の定理から分かるように，アルゴリズム1によって，定常分布に厳密に従うサンプリング（perfect sampling[5]）を行うことができる．次節では，このアルゴリズムが何をしているのかを解説しよう．

3.2　寓話的解説—マルコフの洞窟

とある村には「マルコフの洞窟」と呼ばれる洞窟があった．「マルコフの洞窟」の奥ではマルコフ仙人がさいころをふってマルコフ連鎖を推移させている（図2参照）．このマルコフ連鎖はいつ始まって，初期状態が何だったのか，何回推移しているのか，そもそもマルコフ仙人は何のためにこんなことをしているのか，村の誰も知らない．とにかく仙人はこの村ができるよりもずーっと昔からさいころをふり続けているので，マルコフ連鎖は定常分布に収束している．だから時刻を決めて（時刻0と呼ぶ），その状態をサンプルすれば定常分布からのサンプリングができるのだが，仙人は少々へそ曲がりで，マルコフ連鎖の「状態」を教えてくれない．

ある時，村の若者はこう考えた．仙人の教えてくれるさいころの目から，マルコフ連鎖の状態を推理することはできないだろうか？

若者は仙人に尋ね，時刻−3から時刻0の間に出たさいころの目が$\boxed{3}$, $\boxed{6}$, $\boxed{4}$であることを聞き出した．若者はさっそく推理を始めた．もし時刻−3の状態が s_1 だった場合，さいころの目$\boxed{3}$, $\boxed{6}$, $\boxed{4}$にしたがって推移すると時刻0の状態は s_2 である．同様に，時刻−3の状態が s_2 だとすれば，時刻0の状態は s_3，時刻

[4] 松：定理2の証明は，存在性の証明だけなんだよね．
[5] 松：この訳語って，完璧サンプリングでいいかな？
来：理想サンプリングもありですね．「完璧」は書けるんですか？

−3の状態がs_3なら時刻0の状態はs_2である．だから，少なくとも現在の状態がs_1でないということは分かる（図3「3反復目」参照）．しかし，真実はただ一つ．推理にはさらに情報が必要だ．

若者はさらに仙人に目をたずねた．仙人はその前の目（時刻−4の目）が$\boxed{4}$であると告げた．若者は，時刻−4の状態がs_1, s_2, s_3だった場合それぞれについて，さいころの目$\boxed{4}$，$\boxed{3}$，$\boxed{6}$，$\boxed{4}$で起こりうる時刻0の状態を推理した．その結果，時刻−4の状態がs_1, s_2, s_3の場合のいずれであろうと，時刻0の状態はs_3しかないという結論に達したのである（図3「4反復目」参照）．

こうして若者は思惑通り時刻0の状態を知り，すなわち定常分布からのサンプルを得たのである．

しかし，若者はこの一つのサンプルだけでは満足できなかった．若者はもっと多くのサンプルを必要としていたのだ．残念ながら，マルコフ仙人はたった一人しかいない．

ふと，若者は気づいた．マルコフ仙人の教えてくれるのは各時刻のさいころの目だけなのだ．その目というのも，仙人はさいころをふっている**だけ**である．さいころの目を知るだけだったら，何も仙人に聞かなくたって自分でさいころをふったって一緒のことではないか！　そう，さいころを自分でふって，現時点から過去に向かってその目を決めていけば，仙人なんて要らないのだ！

3.3 もう少し数学的な説明

マルコフ連鎖の極限分布からのサンプリングは，片側無限の乱数列をサンプリングし，対応するマルコフ連鎖の最終状態についての同値類を判定することに他ならない[6]．

ここでアルゴリズムのcoalesceの確認とは何かを考えよう．ある時刻での状態に依存することなく最終状態が一意に定まっているということは，無限長の乱数列のある時刻より後ろを見て同値類判定を行うことに対応する．このとき，乱数列がマイナス方向に無限であることが肝である．実は，“うまい更新関数”に対して最終的にcoalesceしている確率はほぼ1となることがいえるので，coalesceが確認がされた条件下での同値類の生起確率は定常分布と一致する[7]．

したがってcoalesceしないからといって，**決して中断してはならない**．もし中断してしまう（ようにする）と，厳密性は失われる．

4. いくつかの注意点

4.1 うまい更新関数

定理2において，確率1でアルゴリズム1が有限停止するには“うまい更新関数”を考える必要があった．実は，この“うまい更新関数”というのは，coalesceする確率が0**でない**ものを指す．もしcoalesceする確率が0の更新関数を使ってしまうと，アルゴリズム1は停止しない．

そのようなcoalesce**しない**更新関数の例を挙げてみよう．図4は状態空間$\{s_1, s_2\}$を持つマルコフ連鎖で推移確率は図4の右上のように定義される．このマルコフ連鎖に対して図4左上の表のような更新関数を考える．この更新関数に対して，乱数$[0,\ 0.5)$の時の推移は$s_1 \mapsto s_1$，$s_2 \mapsto s_2$となり，乱数$[0.5,\ 1)$の時の推移は$s_1 \mapsto s_2$，$s_2 \mapsto s_1$となり，coalesceしないことが分かる．

実は，任意のマルコフ連鎖に対して“うまい更新関数”が存在することがいえる[8]．これは状態空間の有限性を考えると比較的容易に示せる．

4.2 なぜ前向きではいけないのか？

CFTPアルゴリズムの鍵はcoalesceにあるといえる．しかし，ならば，アルゴリズム1のようなまどろっこしいことをしなくても，通常のマルコフ連鎖シミュレーション同様，「時刻0からの推移を行い，coalesceした時刻での状態を返せばよいのではないのか？」という疑問を持つ方もいるかもしれない．このようなアルゴリズムを“前向きアルゴリズム”と呼ぼう．次に“前向きアルゴリズム”では，パーフェクトサンプリングが行えないことが簡単に理解できる例と

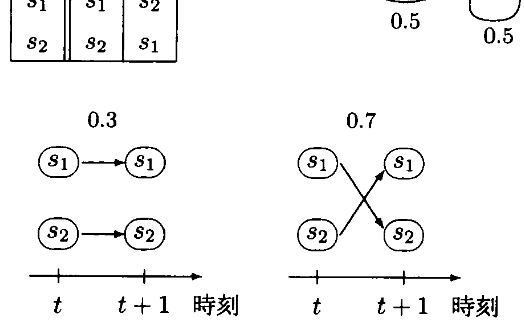

図4　coalesceしない更新関数の例

---

[6] 松：厳密には‘ε-N’の議論が必要になるね．

[7] 来：ちょっと難しくないですか？　松：難しいねぇ….

[8] 松：“うまい更新関数”が存在するというより，coalesceしない更新関数が間抜けなんだよね．来：….

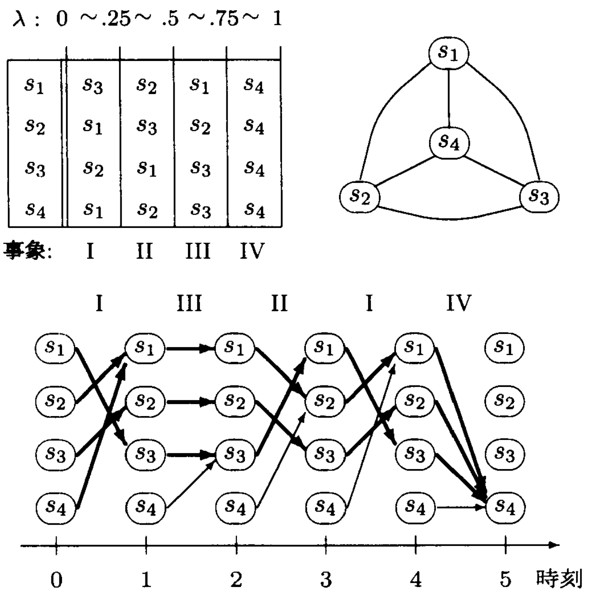

図5 前向きではいけない例

して図5の例を紹介する．この例では状態空間 $\{s_1, s_2, s_3, s_4\}$ を持つマルコフ連鎖を考える．このマルコフ連鎖は $P(x, y)=1/4$ $(\forall(x, y)\in\Omega^2)$ であり，定常分布は $\boldsymbol{\pi}=(1/4, 1/4, 1/4, 1/4)$ である．

このマルコフ連鎖に対して図5の左上のような更新関数を与える．もし，時刻0で事象IVが起これば当然coalesceするので，この場合‘前向きアルゴリズム’は s_4 を返す．それ以外の場合，いずれにしても時刻1の状態として s_1, s_2, s_3 を取りうる．そして時刻1での事象がIVなら，やはり s_4 を返す．それ以外の場合，時刻2の状態としてはやはり s_1, s_2, s_3 のいずれも取りうる．同様に考えると，この更新関数を用いて“前向きアルゴリズム”を行うと，得られる値は常に s_4 となってしまうのである．

注意として，この更新関数を使っても，CFTPアルゴリズムで得られる値はもちろんパーフェクトサンプリングである．この例は極端ではあるが，一般に“前向きアルゴリズム”では偏りが起こるので，パーフェクトサンプリングとしては**決してやってはならない**．

4.3 簡単な改良

いま，アルゴリズム1のcoalescence時間を確率変数 T^* で表す．各反復でのStep 3のシミュレーション時間を考えれば，アルゴリズムの計算時間は

$$1+2+\cdots+|T^*|=\frac{|T^*|(|T^*|+1)}{2}$$

に比例することが分かる．

ここで，アルゴリズム1でcoalesceを確認しても停止せず，さらに遡ると何が起こるのかを考えてみよう．

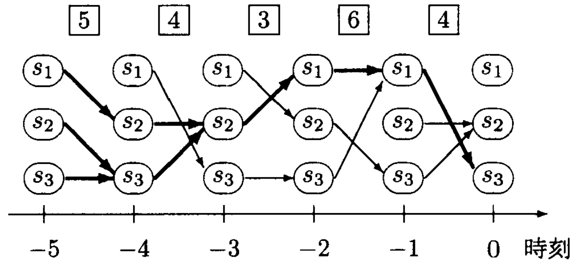

図6 図3の3反復目の後，時刻−5まで遡った例

いま，時刻 $T^*<0$ からのシミュレーションを行ったとき，時刻0でcoalesceして状態 $y\in\Omega$ であることが確認されたとする．さらに時刻 T^*-1 の乱数を生成し，時刻 T^*-1 からシミュレーションを行う．このとき，時刻 T^* の状態は，もちろん Ω のうちのいずれかなので，時刻0ではやはり同一の y にcoalesceしている．図6は，図3の4反復目の後，さらに時刻−5に遡って振ったさいころの目が $\boxed{5}$ だった例である．時刻0の状態は図3の4反復目と同じ s_3 である．

つまり，シミュレーションの開始時刻 T を時刻 T^* より過去の時刻に設定すれば，時刻 T^* からのcoalesceで得られる状態が得られるのであって，アルゴリズム1のStep 3におけるcoalesceの確認を毎反復行う必要はない．そこで次のように改良した標準CFTPアルゴリズムを作ることができる．カギとなるアイデアは，Step 3(b)で過去へ戻るステップ幅を2倍2倍していくことである．

アルゴリズム2 (標準CFTPアルゴリズム)

Step 1：シミュレーションの開始時刻を $T:=-1$ とする．空列 $\boldsymbol{\lambda}:=()$ を用意する．

Step 2：乱数 $\lambda[T], ..., \lambda[\lfloor T/2\rfloor+1]$ を生成し，数列 $\boldsymbol{\lambda}$ の先頭に挿入する．すなわち，$\boldsymbol{\lambda}:=(\lambda[T], \lambda[T+1], ..., \lambda[-1])$ とする．

Step 3：Ω のすべての状態について，共通の乱数列 $\boldsymbol{\lambda}$ を用いて時刻 T から時刻0までマルコフ連鎖を推移させる．このとき，

(a) もし，coalesceしていれば（すなわち，$\exists y\in\Omega$, $\forall x\in\Omega$, $y=\Phi_T^0(x, \lambda)$），時刻0の状態 y を出力し，停止する．

(b) そうでなければ，シミュレーションの開始時刻を $T:=2T$ としてStep 2に戻る．

これまでの議論から，このアルゴリズムももちろんパーフェクトサンプリングを実現する．このアルゴリズムの計算時間は $1+2+4+\cdots+2^{\lceil \log_2|T^*|\rceil}<4|T^*|$ に比

例するので，coalescence 時間のたかだか 4 倍の時間のシミュレーションで時刻 0 の状態は得られる．

5. まとめにかえて

連載第 1 回はパーフェクトサンプリングを実現する「過去からのカップリング」を紹介した．マルコフ連鎖の収束に関する研究の中で，1996 年の Propp and Wilson の CFTP アルゴリズムには多くの研究者が驚き，強い関心を持った．英語の紹介記事では "amazing," "surprizing" と紹介されることも多い．以降，簡単にこの分野の研究の動向について述べる．

5.1 研究の動向

マルコフ連鎖，あるいはランダムウォークは確率モデルとして非常にすぐれ，モデル解析，シミュレーションに活躍する．さらに近年では，便利な「道具」としても注目されている．

統計物理の分野において，MCMC 法は 20 世紀半ばからすでに活躍していた．これをシミュレーションと捉えるか，物理現象を記述するためのモデルと捉えるかは各人に任せるとして，近年，MCMC 法を「道具」と捉えた研究が進んでいるのは確かである．一つには計算機能力の向上により大規模な問題に対する計算が可能となり，様々な分野で MCMC 法が実用的に用いられる場面が増えてきたためである．

実用の面において，マルコフ連鎖の収束の速さは大きな問題といえよう．近年，組合せアルゴリズム理論の研究者を中心に様々なマルコフ連鎖の収束の速さの算定に関して精力的な研究が行われている．

5.2 次回予告

CFTP は確かに面白いアイデアである．しかし，マルコフ連鎖を用いたサンプリングの最大の利点は，全体を知らなくても実行できる点にある．通常，MCMC 法が状態空間の非常に大きな対象に対して用いられることを考えると，全状態からの coalesce を確認というのはナンセンス極まりない．この点を克服する「とっても巧妙な更新関数」について，次回お話しよう．

（「第二話　天と地の狭間で」に続く）

参考文献

[1] O. Häggström : "Finite Markov Chains and Algorithmic Application," London Mathematical Society, Student Texts, 52, Cambridge University Press, 2002.

[2] J. Propp and D. Wilson : "Exact sampling with coupled Markov chains and applications to statistical mechanics," Random Structures and Algorithms, 9 (1996), 223-252.

[3] 大森裕浩 : "マルコフ連鎖モンテカルロ法の最近の展開," 日本統計学会誌, 31 (2001), 305-344.