修士論文 要旨

半正定値計画法による有限マルコフ連鎖の解析と最適化

数理情報学専攻 48-146201　赤木 康紀
指導教員　定兼 邦彦 教授

1 はじめに

マルコフ連鎖モンテカルロ法 (MCMC 法) は，マルコフ連鎖を利用して与えられた確率分布からのサンプリングを行う手法であり，統計学における期待値計算や数値積分，シミュレーションなどで広く利用されている．MCMC 法は所望の分布について可逆なマルコフ連鎖を設計し，遷移を行うことでサンプリングを実行するが，推移確率行列の選び方には自由度がある．MCMC 法による期待値計算の精度は漸近分散と呼ばれる量によって特徴づけられ，どのような推移確率行列を使うかに大きく依存することが知られている．そのため，どのような推移確率行列が漸近分散を小さくするかという問題は重要な問題である．本研究では，グラフ上での MCMC 法を考え，漸近分散を小さくするような推移確率行列は何かという問題に関する 2 つの話題を扱う．

2 MCMC 法と漸近分散

MCMC 法を用いて，連結なグラフ $G = (V, E)$，V 上の確率分布 $\pi : V \to (0, 1)$，V 上の関数値 f に対して $\mathrm{E}_\pi(f) := \sum_{v \in V} \pi(v) f(v)$ を計算する方法を以下に示す．

1. 既約かつ π を定常分布にもつ，グラフ G 上のマルコフ連鎖の推移確率行列 P を作る．
2. ある状態 $v_0 \in V$ から，P をもとに確率的な遷移を行う．こうして得られるマルコフ連鎖を $\{X_t\}$ とする．
3. 十分大きいステップ数 $T-1$ で遷移を終了させ，$\mu_T(f) := \frac{1}{T} \sum_{t=0}^{T-1} f(X_t)$ を出力する．

推定の精度は漸近分散と呼ばれる指標によって評価される．漸近分散の存在は以下の定理が保証している．

定理 1 ([3])**.** P を既約なマルコフ連鎖の推移確率行列とすると，初期状態の分布に関係なく

$$\lim_{T \to \infty} T \cdot \mathrm{Var}(\mu_T(f))$$

が存在する．

この収束先を漸近分散と呼び，$v(f, P)$ で表す．漸近分散の意味は，$\mathrm{Var}(\mu_T(f)) \approx \frac{1}{T} \cdot v(f, P)$ と書き直すと分かりやすい．漸近分散が小さければ推定はより正確に，大きければより不正確になる．そのため，漸近分散は推定の良さの指標としてしばしば用いられる．

漸近分散は V 上の関数値 f に依存する値であることから，推移確率行列 P そのものの良し悪しを議論する上では扱いにくい．そのため，P の良し悪しの指標として $v_A(P) := E_B[v(f, P)]$ を使うことが提案されている．ただし，B は

$$B = \{f \in \mathbf{R}^n \mid \mathrm{E}_\pi(f) = 0, \mathrm{Var}_\pi(f) = 1\}$$

なる領域であり，$E_B[\cdot]$ は f が B から一様乱択された場合の期待値を表す．P の固有値を $1 = \lambda_1 > \lambda_2 \geq \cdots \geq \lambda_n$ とすると，π が一様分布である場合

$$v_A(P) = \sum_{i=2}^{n} \frac{2}{1 - \lambda_i} - 1$$

と書けることが Chen らによって示されている [2]．ここで，$\sum_{i=2}^{n} \frac{1}{1-\lambda_i}$ は Kemeny 定数と呼ばれ，マルコフ連鎖の理論において重要な量である．

3 関数が固定されている場合の漸近分散の最小化問題

まずは，グラフ $G = (V, E)$，確率分布 $\pi : V \to (0, 1)$，V 上の関数値 f が与えらている場合に，漸近分散 $v(f, P)$ を最小化する π について可逆な推移確率行列は何かという問題を考える．この問題には，漸近分散は既約なマルコフ連鎖にしか定義されないにもかかわらず，実行可能領域を既約な推移確率行列に制限すると最適解が存在しない場合があるという困難がある．本研究では関数の推定可能性という概念を新しく導入し，その概念を用いて非既約な推移確率行列の一部にも漸近分散の定義を拡張した．そして，拡張された漸近分散の最小化問題が半正定値計画問題として定式化できることを示した．この最適化問題によって得られる最適解の例が図 1 である．これらの結果は，漸近分散を最小化する推移確率行列の構造に関して興味深い洞察を与えている．

4 Kemeny 定数の最小化問題

さらに本研究では，グラフ G 上の，一様分布について可逆なマルコフ連鎖の Kemeny 定数の最小化問題に

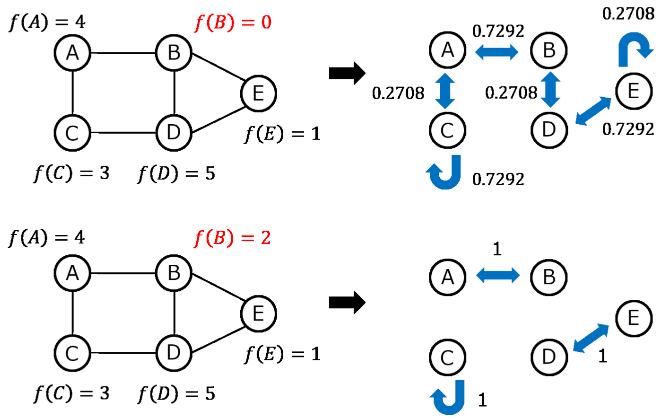

図 1. 最適解の例．$\pi = \frac{1}{4}[1,1,1,1]^\top$ である．

ついての研究を行った．この問題は，半正定値計画法を利用して数値的には正確に解けることが Agharkar らによって示されている [1] が，具体的なグラフにおける最小値や下界は知られていなかった．本研究では，具体的な幾つかのグラフにおいて Kemeny 定数の最小値や下界を解析的に求め，MH 法による推移確率行列の Kemeny 定数との比較を行った．得られた結果は表 1 にまとめてある．ただし，主要な項のみを記しており，n は頂点数である．

表 1. 具体的なグラフに対する Kemeny 定数

グラフ	$K(P^{\mathrm{MH}})$	$K(P^{\mathrm{opt}})$
完全グラフ	n	n
サイクルグラフ	$\frac{1}{6}n^2$	$\frac{1}{6}n^2$
スターグラフ	n^2	n^2
超立方体	n〜$2n$	n〜$2n$
バーベルグラフ	$\frac{1}{8}n^2$	$\frac{7+2\sqrt{2}}{4}n$
ダブルスターグラフ	$\frac{5}{8}n^2$	$\frac{1}{2}n^2$
パスグラフ	$\frac{1}{3}n^2$	$\frac{1}{3}n^2$
完全 r 分木	$rn\log_{r-1} n$	$rn\log_{r-1} n$

さらに，$K(P^{\mathrm{MH}})$ と $K(P^{\mathrm{opt}})$ の間に以下の関係があることを示した．

定理 2. 任意のグラフにおいて

$$K(P^{\mathrm{opt}}) \le K(P^{\mathrm{MH}}) \le d_{\max} \cdot K(P^{\mathrm{opt}})$$

が成立する．ただし $d_{\max}$ はグラフの最大次数である．

定理 2 より，最大次数が小さいグラフにおいては P^{MH} は最適に近いことがわかる．

さらに，Kemeny 定数の上界について以下の定理が成り立つことを示した．

定理 3. 任意の連結なグラフにおいて，

$$K(P^{\mathrm{MH}}) \le 3(n^2 - n)$$

が成り立つ．

この上界は緩い評価であるが，G が木である場合は次のように改善することができる．

定理 4. 任意の木において，

$$K(P^{\mathrm{MH}}) \le (n-1)^2$$

が成立する．

この上界はほとんどタイトである．これは，スターグラフにおいて $K(P^{\mathrm{MH}}) = (n-1)^2 - O(n)$ であることからわかる．つまり，$K(P^{\mathrm{MH}})$ はスターグラフにおいてほぼ最悪になる．

さらに，定理 4 より，任意の連結なグラフにおいて $K(P^{\mathrm{opt}}) \le (n-1)^2$ が成り立つこともわかる．この不等式もほとんどタイトである．

参考文献

[1] P. Agharkar, R. Patel, and F. Bullo. Robotic surveillance and Markov chains with minimal first passage time. In *Proceedings of the 53rd Annual Conference on Decision and Control*, pp. 6603–6608. IEEE, 2014.

[2] T.-L. Chen, W.-K. Chen, C.-R. Hwang, and H.-M. Pai. On the optimal transition matrix for Markov chain Monte Carlo sampling. *SIAM Journal on Control and Optimization*, Vol. 50, No. 5, pp. 2743–2762, 2012.

[3] J. G. Kemeny and J. L. Snell. *Finite Markov Chains*. Van Nostrand, 1960.