# マルコフ連鎖に対する Spectral Gap とその Simulated Annealing への応用

千代延研究室　八田大樹

Simulated Annealing(焼きなまし法)、すなわち、マルコフ連鎖の長時間挙動の性質を利用して最適化問題に応用することを、数学的に厳密に論じる．特に、推移確率が時刻に依存する Non-homogeneous なマルコフ連鎖について、Spectral Gap を用いて長時間挙動を評価することと、その応用である Simulated Annealing について述べる．Simulated Annealing とは、巨大な有限集合 $E$ 上の関数 $U$ の最小値を取る点を探すための一つの手法である．マルコフ連鎖を近傍の値を比較しながら関数の値がより小さいところへ動きやすくし、最終的に関数が最小値を持つ状態へたどりつかせる．今いる点から近傍の点へ移る遷移確率を制御するパラメータをどのように調整するかを決定することが Simulated Annealing の数学的な問題である．

可逆 (reversible) なマルコフ連鎖について、Second Largest Eigenvalue(第二固有値) を用いてマルコフ連鎖が定常分布 $\pi$ に収束する早さを評価する．推移確率行列を

$$P = \{P\left(X_{n+1} = j | X_n = i\right)\}_{i,j \in E}$$

で表すと、分布の距離に関して、行列の考え方から次のことがいえる．
任意の初期分布を $\nu$ とし、$u_i$、$v_i$ をそれぞれ $P(r \times r)$ の固有値 $\lambda_i$ に対する左固有ベクトル、右固有ベクトルとすると、$\lambda_1 = 1$、$u_1 = \pi$、$v_1 = \mathbf{1}$ だから

$$|\nu P^n - \pi| = |\sum_{i=2}^{r} \lambda_i^n v_i u_i|$$

である．これより $1 = \lambda_1 > |\lambda_2| > \cdots > |\lambda_r|$ なので $\lambda_2$ が収束の速さを決める．
そこで $\lambda_2$ を調べるために Spectral Gap (第一固有値と第二固有値の差) について考える．
Dirichlet form を

$$\varepsilon_\pi(\phi, \phi) = \langle (I - P)\phi, \phi \rangle_\pi$$

ただし、$\langle \phi, \psi \rangle_\pi = \sum_{x \in E} \phi(x)\psi(x)\pi(x)$ で定めると、

$$\boxed{1 - \lambda_2 = \beta_2 = \inf \left\{ \frac{\varepsilon_\pi(\phi, \phi)}{Var_\pi(\phi)}; \sum_y \phi(y)\pi(y) = 0 \right\}}$$

がいえ、この定理から第二固有値の上からの評価を得ることができる．後に連続時間の場

合にこれを用いて Spectral Gap の評価を行う．

時刻 $n$ での遷移確率が時刻に依存するマルコフ連鎖を Non-homogeneous マルコフ連鎖という．推移確率行列は

$$P(n) = \{P(X_{n+1} = j | X_n = i)\}_{i,j \in E}$$

で表し、$k > m \geq 0$ に対して $P(m,k) = P(m)P(m+1)\cdots P(k-1)$ とする．弱エルゴード性と強エルゴード性を定義する．$\mu$、$\nu$ をマルコフ連鎖の時刻 $m$ での分布とし、任意の $m$ に対して

$$\lim_{k\to\infty} \sup_{\mu,\nu} d_v \left(\mu^T P(m,k), \nu^T P(m,k)\right) = 0$$

のとき、マルコフ連鎖は弱エルゴード的であるといい

$$\lim_{k\to\infty} \sup_{\mu} d_v \left(\mu^T P(m,k), \pi\right) = 0$$

である $\pi$ が唯一存在するとき強エルゴード的という．Non-homogeneous マルコフ連鎖が弱エルゴード的となる条件を Dobrushin's Coefficient を用いることによって与える．推移確率行列 $Q$ に対して、

$$\delta(Q) = \frac{1}{2} \sup_{i,j\in F} \sum_{k\in E} |q_{ik} - q_{jk}|$$

を Dobrushin's Coefficient という．

任意の $m$ に対して

$$\lim_{k\to\infty} \delta(P(m,k)) = 0$$

ならばマルコフ連鎖は弱エルゴード的である．

$$\sum_{s=0}^{\infty} (1 - \delta(P(n_s, n_{s+1})) = \infty$$

である単調増加数列 $\{n_s\}_{s>0}$ が存在すれば Non-homogeneous マルコフ連鎖は弱エルゴード的である．

強エルゴード的ならば弱エルゴード的であることからさらに、弱エルゴード的であることが与えられたとき、適当な条件のもとでマルコフ連鎖は強エルゴード的となる．

既約性のみを仮定する $Q=\{q(x,y)\}_{x,y\in E}$ から $\pi$ (target distribution) を定常分布に持つ推移確率行列 $P=\{p(x,y)\}_{x,y\in E}$ を、$x\neq y$ のとき

$$p(x,y)=q(x,y)\alpha(x,y)$$
$$\alpha(x,y)=\min\left(1,\frac{\pi(y)q(y,x)}{\pi(x)q(x,y)}\right)\leq 1$$

$x=y$ のとき、$p(x,y)=1-\sum_{x\neq y}p(x,y)$ とすることによって構成することができる．Non-homogeneous マルコフ連鎖の考え方を用いて、離散時間モデルの Simulated Annealing を考える．$E$ : 有限集合（ただし十分大）、$U:E\to\mathbb{R}$ の関数、$q_0:E\times E\to\mathbb{R}$; ある遷移確率、$\mu_0:E\to(0,1)$;reference measure とし、$\mu_0(x)q_o(x,y)=\mu_0(y)q_0(y,x)$ を仮定する．Target distrubution として $\beta$ に依存する次のような Gibbs measure を考える．

$$\mu_\beta(x)=\frac{1}{Z_\beta}\exp\{-\beta U(x)\}\mu_0(x).$$

ただし $Z_\beta=\sum_{x\in E}\exp\{-\beta U(x)\}\mu_0(x)$ とする．この分布は $\beta$ が大きいときには $U$ が最小値を取る点に集中する．この $\mu_\beta$ を定常分布とするマルコフ連鎖を構成することによって関数 $U$ の最小値をとる点を探したい．さらに $\beta$ を時刻 $n$ とともに変化させる．すなわち

$$\beta=\beta(n)$$

とする．$\{X_n\}$ は Non-homogeneous なマルコフ連鎖であるので、強エルゴード的であれば唯一の定常分布を持つ．そのことから $\lim_{n\to\infty}P\left(X_n\in\{U \text{ の最小値を取る点}\}\right)=1$ となる条件を考えたい．$\alpha$ も時刻とともに変化するので $\alpha(x,y)=\alpha_{\beta_n}(x,y)$ と表す．各 $T\in(0,1]$ に対して $N(x)$ は $x$ の近傍とし

$$\underline{\alpha}(\beta_n)=\inf_{x\in E,y\in N(x)}\alpha_{\beta_n}(x,y)$$

とする．次の定理が成り立つ．

十分大きな $N$ に対し、

$$\sum_{k=0}^{\infty}\underline{\alpha}(\beta_{kN})^N=\infty$$

ならば、このマルコフ連鎖は弱エルゴード的である．

この定理から $\Delta=\sup\{U(j)-U(i);j\in N(i)\}$ とおいて、$\beta(n)$ を

$$\beta(n)\leq\frac{\log n}{N\Delta}$$

を満たすようにとればマルコフ連鎖は弱エルゴード的となることがわかる．さらに、強エルゴード的となることがわかる．

連続時間モデルの Simulated Annealing を考える．

Target distrubution として $\beta$ に依存する Gibbs measure

$$\mu_\beta(x) = \frac{1}{Z_\beta}\exp\{-\beta U(x)\}\mu_0(x).$$

を考える．ただし、$Z_\beta = \sum_{x\in E}\exp\{-\beta U(x)\}\mu_0(x)$ である．

$\beta$ を時刻 $t$ とともに変化させる．すなわち

$$\beta = \beta(t)$$

とする．線形作用素 $L_\beta : C(E) \to C(E)$

$$(L_{\beta(t)}\phi)(x) = \sum_y q_{\beta(t)}(x,y)(\phi(y)-\phi(x))$$

$$(L^*_{\beta(t)}\phi)(x) = \sum_y q_{\beta(t)}(y,x)(\phi(y)-\phi(x))$$

をマルコフ連鎖の生成作用素とする．連続時間のマルコフ連鎖 $\{X_t\}$ の遷移確率 $P_{st}(x,y) = P(X_t = y|X_s = x)$ は Backward equation の解で定まる．

$$\frac{d}{dt}P_{st}(x,y) = (L^*_{\beta(t)}P_{st}(x,\cdot))(y) = \sum_\xi P_{st}(x,\xi)q_{\beta(t)}(\xi,y)$$

$$P_{ss}(x,y) = \delta_{xy}$$

このように定まるマルコフ連鎖 $\{X_t\}$ は、遷移確率が時刻に依存する Non-homogeneous なマルコフ連鎖で、$\mu_0$ を初期分布とすると時刻 $t$ での分布 $m_t(y) = P(X_t = y)$ は

$$m_t(y) = \sum_{x\in E} P_{0t}(x,y)\mu_0(x)$$

で表される．$\beta(t)$ は定める必要のある関数で、どうとれば $P(U(X_t) > \min U) \to 0 \quad (t\to\infty)$ となるか知りたい．これを Gibbs measure である Target distribution $\mu_{\beta(t)}$ を通して評価していくことで考える．

$$f_t(x) = \frac{m_t(x)}{\mu_{\beta(t)}(x)}$$

とおくと

$1 < p < \infty$ に対して、ある $C$ が存在して

$$\sup_t \sum_{x \in E} f_t(x)^p \mu_{\beta(t)}(x) \leq C$$

ならば、$\delta > 0$ が存在して

$$P(U(X_t) \geq \min U + \delta) \leq C^{\#} E\{e^{-\beta(t)\delta}\}^{1-\frac{1}{p}}.$$

ここで、$\beta(t) \to \infty$ とすれば、右辺 $\to 0$ となることから、$\beta(t)$ がどのようなときに

$$\sup_t \sum_x f_t(x)^p \mu_{\beta(t)}(x) \leq C$$

がいえるかどうかを考えていく．$\phi$ に対して、$\langle \phi \rangle_t = \sum_x \phi(x) \mu_{\beta(t)}(x)$、$1 < p < \infty$ に対して $\|\phi\|_{p,t} = \langle |\phi|^p \rangle^{\frac{1}{p}}$ とする．$f_0$ として、$f_0(x) \geq 0, \langle f_0 \rangle_0 = 1$ なるものをとり、$f_0(x)\mu_0(x)$ を初期分布としてとると

$$f_t(x) = \frac{1}{\mu_{\beta(t)}(x)} \sum_{y \in E} f_0(y) \mu_0(y) P_{0t}(y, x)$$

となる．$f_t$ は Target distribution と実際のプロセスの分布との比較であって、1 であってほしいので、$f_t$ と 1 との差 $\|f_t - 1\|_{2,t}$ を調べていく．
ここで評価のため Dirichlet form $\varepsilon_\beta(\phi, \psi)$ を

$$\varepsilon_\beta(\phi, \psi) = -\sum_{x \in E} (L_\beta \phi)(x) \psi(x) \mu_\beta(x)$$

で定義する．$\|f_t - 1\|_{2,t}^2$ を $t$ の関数として微分計算することによって、$M = \max U - \min U$ に対して

$$\frac{d}{dt} \|f_t - 1\|_{2,t}^2 \leq -2\varepsilon_{\beta(t)}(f_t - 1, f_t - 1) + M\beta'(t)\|f_t - 1\|_{2,t}^2 + 2M\beta'(t)\|f_t - 1\|_{2,t}$$

を得る．$\|f_t - 1\|_{2,t}$ と $\varepsilon_{\beta(t)}(f_t - 1, f_t - 1)$ を比較する．
そこで Spectral Gap $\gamma(\beta)$ を

$$\gamma(\beta) = \inf \left\{ \frac{\varepsilon(\phi, \phi)}{Var_\beta(\phi)}; \sum_{x \in E} \phi(x) \mu_{\beta(t)}(x) = 0 \right\}$$

で定める．これより、

$$\varepsilon_\beta(f_t - 1, f_t - 1) \geq \gamma(\beta(t)) \|f_t - 1\|_{2,t}^2$$

であり $\|f_t-1\|_{2,t}^2$ で閉じた式として評価でき、次の定理を得る.

> ある $\delta>0$ が存在して、任意の $0<a<b<\infty$ に対して
>
> $$-2\int_a^b \gamma(\beta(t))dt+(1+\delta)M\left(\beta(b)-\beta(a)\right)\le A<\infty$$
>
> である $A$ が存在するならば
>
> $$\sup_t \|f_t\|_{2,t}^2 \le 1+4\delta^{-2}\|f_0\|_{2,0}^2 e^A.$$

$\gamma(\beta)$ を評価する.

> ある定数 $c_1<c_2$ が存在して
>
> $$c_1e^{-m\beta}\le\gamma(\beta)\le c_2e^{-m\beta}$$
>
> である. ここでの $m$ は以下で定めたものである.

$x,y\in E$ に対して $\{x_k\}_{k=0}^n\subset E$ が

$$x_0=x, x_n=y, q_0(x_{i+1},x_i)>0, i=0,\cdots,n-1$$

であるとき、$x$ から $y$ への Admissible Path であるという. その Path の高さ Elev を

$$Elev(\{x_k\})=\max\{U(x_k),k=0,\cdots,n\}$$

とし、その最も低いものを $H(x,y)$ とする.

$$H(x,y)=\min\{Elev(\{x_k\}):\{x_k\}\text{ が } x \text{ から } y \text{ への } Admissible\ Path\}$$

それから $m$ を定める.

$$m=\max\{H(x,y)-U(x)-U(y):x,y\in E\}$$

$m$ は $\min U=0$ にいくのに少なくとも登らねばならない量を表し、この $m$ を用いて $\gamma(\beta)$ が評価できる.
$\gamma(\beta)$ の評価が得られたので前の定理と合わせると

$$-2\int_a^b c_1e^{-m\beta(t)}dt+(1+\delta)M(\beta(b)-\beta(a))\le A<\infty$$

ならば

$$\sup_t \|f_t\|_{2,t}^2 \leq 1 + 4\delta^{-2}\|f_0\|_{2,0}^2 e^A$$

となり $p=2$ のとき、つまり $L_2$ での $\beta(t)$ の条件が得られた．具体的には

$$\beta(t) = k + \rho \log(1+t)$$

$$\rho < \frac{1}{m}$$

ととればよいことがわかる．