編み込みメトロポリス法

鎌谷　研吾　モデリング研究系　教授

大域的・局所的な性質

ベイズ統計学においては，解析はすべて事後分布による積分を通しておこなわれる．巨大なデータが身近になるにつれ，より複雑な依存モデルが発展し，そのために必要な積分の評価もますます難しくなっている．積分計算における標準的な手法はメトロポリス・ヘイスティングス法であった．しかし，巨大なデータの前にその有効性は相対的に低下しており，研究者は様々な工夫でこの困難の打開を目指している．

近年は勾配などの空間・時間的に局所的な情報を利用した手法が基本であり，様々な発展が開発されている．しかし，大域的な性質を利用しなければ，これらの手法の有効性は限定的である．ここでいう，大域的な性質とは，長期的な振る舞いや，広範囲の振る舞いに影響するもののことである．メトロポリス・ヘイスティングス法の提案の不変分布を適切に選択すれば，大域的な性質を変えることができる．逆に，選択に失敗すれば，メトロポリス・ヘイスティングス法は有効ではなくなる．

複雑な積分問題を解決するには，局所的および大域的な性質を同時に改善する必要がある．しかし，局所的な性質を調整すると大域的な性質が大きく変わってしまうことがありえるから，局所的，大域的性質をともに調整するには，慎重なデザインが必要である．本研究では，大域的な性質はハール測度をベースにして，また局所的性質についても特別な手法，**編み込み法**を用いることで，局所・大域の性質を改善させることに成功した．

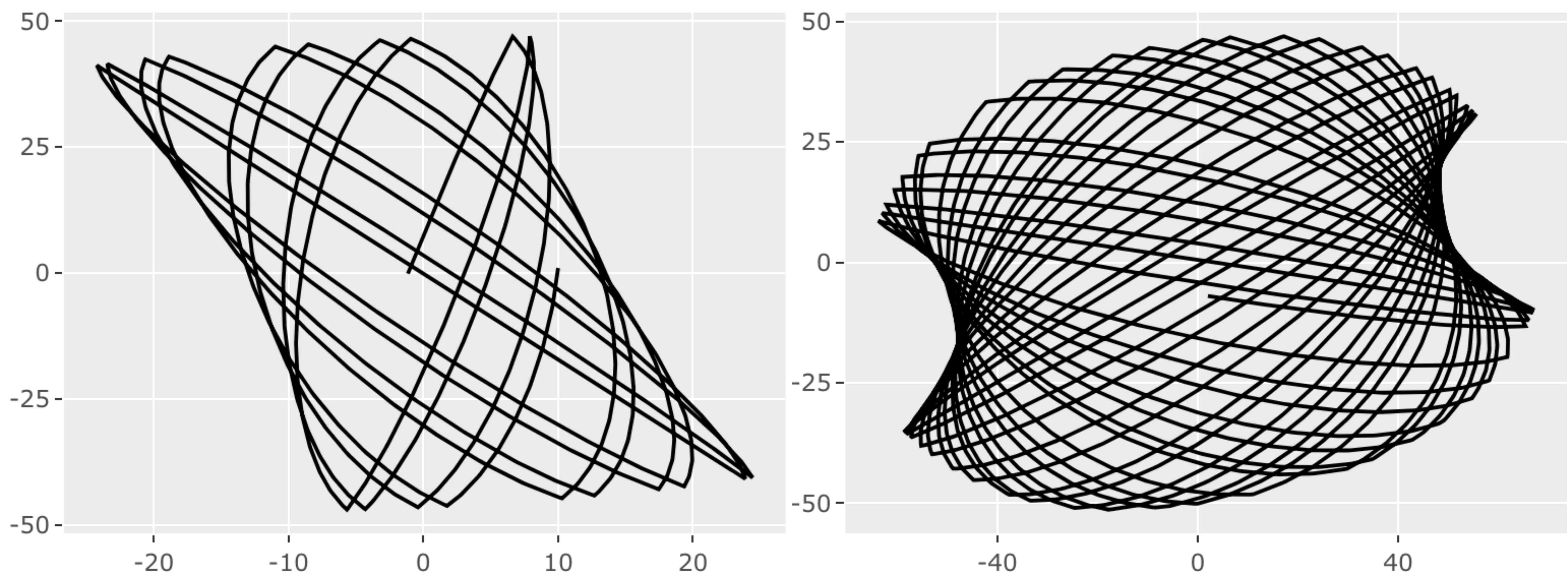

図 1: 編み込み法の軌跡．ここではわかりやすさのため，ステップ幅は大きめにとっているが，実際は小さく取る．初期値よりも遠ざからないことが編み込み法の特徴．たびたび初期値を一新（リフレッシュ）することでエルゴード性を担保する．

極限の過程

ここで提案された編み込み法はハミルトニアンモンテカルロ法とよく似ているが，ステップ幅の極限を見てみることで，両者の違いを明確にすることを試みた．編み込み法は極限に置いては，ハミルトニアンを保持しつつ，その経路が原点から初期値までの距離を半径とする球の中に収まる．ハミルトニアンモンテカルロ法はこの性質を持たない．ハミルトニアンモンテカルロ法は，尤度の微分係数の絶対値が大きい場合に不安定になり，中心部分から大きく遠ざかろうとすることもあるから，編み込み法が頑健であることが期待される．いくつかの数値実験でその傾向は確認された．

本研究は科学研究費補助金20H04149, 21K18589，JST CREST JPMJCR14D7の援助を受けた．本研究は宋小林（大阪大学大学院基礎工学研究科）との共同研究である．宋小林の研究は市川国際奨学財団の援助を受けた．研究詳細についてはhttps://doi.org/10.5109/4755997 を参照．