

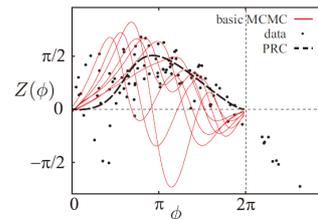
マルコフ連鎖モンテカルロ法がひらく確率の世界

伊庭 幸人 モデリング研究系 准教授

「モンテカルロ法」とは乱数を用いて、さまざまな量を計算する手法の総称です。計算機の中で擬似的に「サイコロ」を投げることで複雑な計算を行うことができます。なかでも、統計物理に起源を持つ「マルコフ連鎖モンテカルロ法」(MCMC)は、高次元の確率分布を扱うための強力な道具です。

われわれは、データ解析、珍しい事象のサンプリング、組み合わせ問題、非線形科学、統計物理など、さまざまな分野でMCMCの新しい応用を探求しています。なかでも、困難な問題で力を発揮するMCMCの技法「レプリカ交換モンテカルロ法」「マルチカノニカル法」の応用に特に力を入れています。

一緒に研究をして頂ける大学院生・共同研究者の方を募集しています。MCMCやマルチカノニカル法の応用についての提案も歓迎です

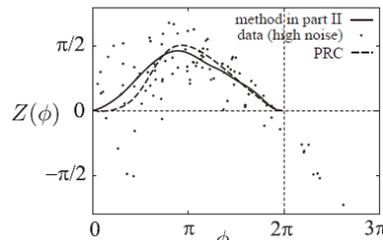


レプリカ交換モンテカルロ法なしだと局所的な解につかまりやすい。

サイコロを振ってデータを解析する

複雑な構造を持ったデータの解析には、階層ベイズモデルにもとづく方法が有効です。データの可能な解釈をあらゆる高次元の「事後分布」の扱いがポイントですが、そこでMCMCが用いられます。ベイズモデル+MCMCはすでに確立された手法といえますが、さらに高度なモデリング技術・計算技術を必要とする事例について研究を進めています。

共同研究 総研大博士課程 中江健氏(現 京大特定研究員)
京大 情報学研究科 青柳富誌生氏 理研BSI 深井朋樹氏, 坪泰宏氏



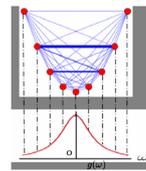
脳科学への応用
ニューロンの実験データからベイズモデルとMCMCで「位相応答曲線」 $Z(\Phi)$ を推定します。

サイコロを振って設計する

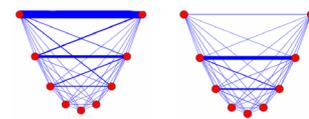
MCMCを用いて、特定の性質が優れた対象を系統的に探索・生成することもできます。単なる最適化と異なり、解の多様性を定量的に評価できるのが特徴です。たとえば、その上の非線形振動子の同期が起きやすいようなネットワークをこの方法で調べることができます。また、その上でランダムに動いたときの拡散が速いグラフである「ラマヌジャングラフ」についても同様の研究を行いました。

共同研究 京大 情報学研究科 青柳研究室
阪大 Cybermedia Center 齊藤稔氏(現 東大特任研究員)

Designing Optimal Oscillator Networks



ネットワーク科学への応用
左下:レプリカ交換モンテカルロ法で生成された同期が起りやすいネットワーク。
右下:「ラマヌジャングラフ」の一例。



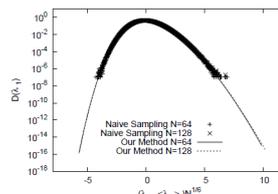
横軸が振動数, 線の太さが結合の強さ



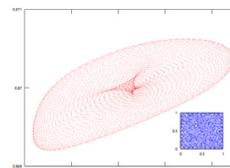
サイコロを振って珍しい事象を作り出す

与えられた確率モデルのもとで、めったに起きない事象(レア・イベント)の確率を少ないサンプルで求める方法を研究しています。たとえば、ランダムに作った行列の最大固有値の分布の裾をMCMCの一種である「マルチカノニカル法」で計算すると、極めて小さい確率まで評価することができます。また、カオス力学系では、珍しい初期条件に対応した「珍しい軌道」が重要な意味を持つと考えられていますが、そうした軌道をMCMCで探索し、その確率を定量的に評価する研究も行っています。

共同研究 阪大 Cybermedia Center 齊藤稔氏(現 東大特任研究員),
北島顕正氏(菊池研), 東大総合文化 福島孝治氏, 北大電子研 柳田達雄氏



ランダム行列の最大固有値の分布
マルチカノニカル法を用いることで、小さい行列では 10^{-100} の確率で起きる事象まで扱うことができます。



カオスの海の中の準周期軌道
マルチカノニカル法で、カオスの海に棲む微小なトーラスを見つけ出すことができます。