非対称メトロポリス法

鎌谷　研吾　モデリング研究系　准教授

局所的情報と大域情報，対称性と非対称性

ベイズ統計学では，事前情報と，観測から得られる情報とを合わせて作られる事後情報によって不確実性を定量化する．定量化は，事後情報の全体を使うから計算は簡単ではない．その道具がマルコフ連鎖モンテカルロ法である．マルコフ連鎖モンテカルロ法は２つのパラメータx_i $(i=0,1)$を選び，その情報量$\pi(x_i)$ $(i=0,1)$を使って吟味し，(x_0,x_1)のうちひとつを捨ててまた別のパラメータを選び吟味することを繰り返す．事後情報の全体を，局所的な手続き繰り返すことで把握できることが強みである．しかし，こうした**局所的手続きはしばしば散漫**な動きにつながり，非効率になる．局所的に周辺を見渡し，パラメータの選び方を工夫することで非効率性の回避を試みる手法は様々提案されてきた．しかし，こうした局所的散漫さの解決には**大域的な動きの導入が自然**に思える．大域的動きを組み込んだ研究は未だ発展途上である．マルコフ連鎖モンテカルロ法の微妙なバランスを崩さずに大域的動きを導入するのは難しいからである．本研究では，大域的な動きとして有効な，方向を導入した手法を研究することにした．方向を導入した手法は以前からあったが，本質的に一次元実数空間のみの手法だった．様々な空間に，うまくバランスを壊さずに適用しようというのが本研究である．

方向と統計量

各パラメータxにたいし，統計量Δxを定める．そしてΔxの大小で方向を定めるようにする．もし正の方向に進む**気分**であれば，$\Delta x \le \Delta y$となるパラメータyを候補として保持し，$\pi(x), \pi(y)$を吟味して，(x,y)のうち一つを捨てる．もし候補が選ばれたなら，気分そのままに，次の点も同じ方向のパラメータを候補とする．一方，候補が捨てられたなら気分を転換して，今度はΔで小さくなるパラメータを候補とする．このような手続きを繰り返していく．マルコフ連鎖モンテカルロ法の微妙なバランスを崩さずにこうした手続を成立させるところに工夫がある．どんな空間でもこうした手続ができるわけではない．具体的に，うまくいく空間とΔの組は次のようなものがある：

例１：自己回帰型：空間 $\mathbb{R}^d$, $\Delta x = x_1^2 + \cdots + x_d^2$

例２：カイ二乗型：空間 $\mathbb{R}_+^d$, $\Delta x = x_1 + \cdots + x_d$

例３：ベータ・ガンマ型：空間 $\mathbb{R}_+^d$, $\Delta x = x_1 \times \cdots \times x_d$

例４：行列自己回帰型：空間 $d \times d$-正定値対称行列の空間 $\Delta x = \det x$

通常，マルコフ連鎖モンテカルロ法はある種の対称性を持つが，これらのマルコフ連鎖モンテカルロ法は**非対称**である．これらの手法のエルゴード的性質や，スケール極限についてはわからないことが多い．さらなる研究が待たれる．

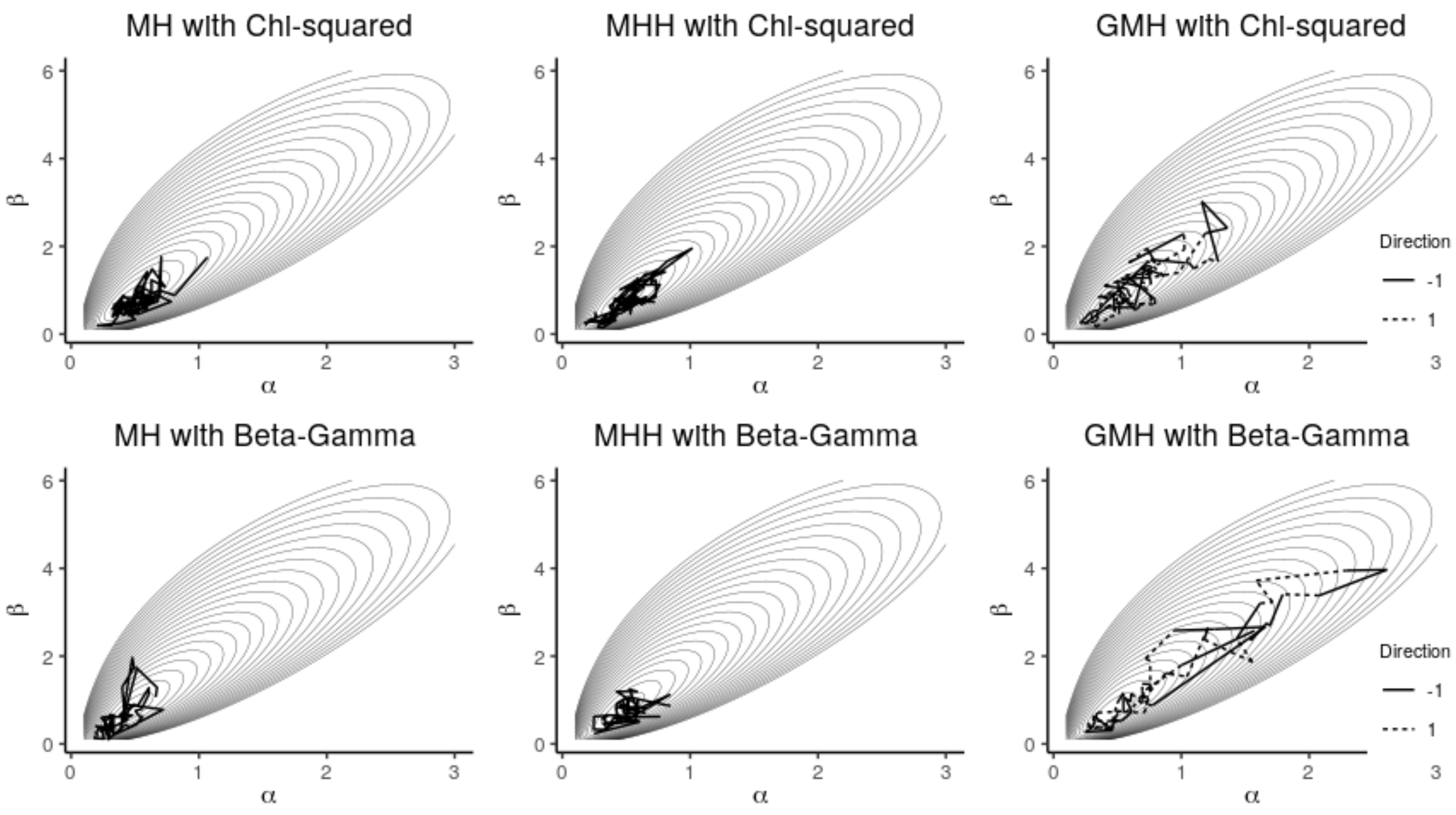

図 1: 上段がカイ二乗型，下段がベータ・ガンマ型のマルコフ連鎖モンテカルロ法．左が基本的なアルゴリズム，真ん中が方向を導入できるようにした（まだ導入していない）アルゴリズム，右が方向を導入したアルゴリズム．方向が有効に働き，ダイナミックに動いているのが見て取れる．

本研究は科学研究費補助金20H04149，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://arxiv.org/abs/2005.05584/を参照．