詳細つりあいを満たさないマルコフ連鎖モンテカルロ法

東京大学工学系研究科 [1], CREST-JST[2], 諏訪秀麿[1], 藤堂眞治 [1,2]

マルコフ連鎖モンテカルロ法は、多重積分を数値的に求める汎用手法であり、物理に限らず、化学、生物、医学、統計など、様々な分野で必要不可欠である。特に近年、バイオインフォマティクス、金融などで欠かせないベイズ推定法は、マルコフ連鎖モンテカルロ法が強力な威力を発揮する舞台となっている。この手法では、標的分布（例えばボルツマン分布）に従ってサンプルを生成するために、つりあい条件を課す。1953 年の手法の発明 [1] 以来、これまでのほとんどの計算では、つりあい条件の十分条件として詳細つりあいを課してきた。有名なメトロポリス法 [1] や熱浴法 (ギブスサンプラー) は、詳細つりあいを満たす遷移確率を与える。マルコフ連鎖モンテカルロ法は、長い間この条件の枠の中で発展を続けてきたと言える。しかし、詳細つりあいは必要条件ではない。我々は最近、詳細つりあいを満たさずともつりあい条件を満たす遷移確率を与える、画期的なアルゴリズムを考案した [2]。このアルゴリズムは、重みの埋め立てという幾何学的な手続きにより、平均棄却率を最小化、もしくは完全にゼロにする (図 1)。また詳細つりあいを破る帰結として、正味の確率流が生じサンプリング効率を高める。状態変数が離散的な場合、我々の手法はそのままの形で応用できる。例えば 4 状態ポッツ模型の臨界点直上では、構造因子の収束がメトロポリス法を用いた場合より約 6.4 倍速まる。また磁場中の反強磁性量子ハイゼンベルグ鎖では、磁化の収束が熱浴法より 100 倍以上速まる [2]。今回我々はこのアルゴリズムを拡張し、状態変数が連続変数の場合においても、詳細つりあいを満たさない状態更新法を開発した。ベイズ推定法では多くの場合連続変数を扱うため、この拡張は非常に重要である。本発表では、我々の手法を説明し、ほぼ全てのマルコフ連鎖モンテカルロ法において、我々の更新法が現在の最善の状態更新法であることを示す。

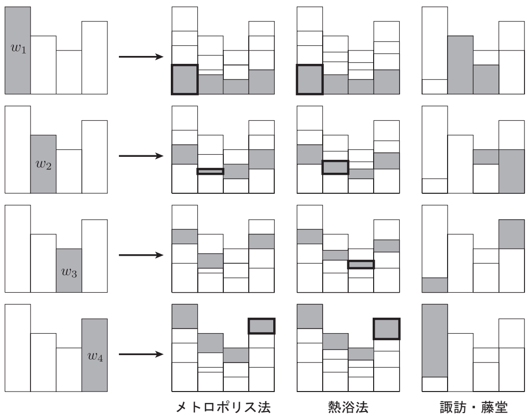

Figure 1: 我々の手法とこれまでの手法による遷移確率の決め方の比較。

[1] N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller, and E. Teller, J. Chem. Phys. **21**, 1087 (1953).
[2] H.Suwa and S. Todo, Phys. Rev. Lett. **105**, 120603 (2010).