

論文内容の要旨

博士論文題目

Adaptive Markov chain Monte Carlo for auxiliary variable method and its applications

(補助変数法に対する適応的マルコフ連鎖モンテカルロ法とその応用)

氏名 荒木貴光

論文内容の要旨

マルコフ連鎖モンテカルロ法 (MCMC 法) はマルコフ連鎖を用いた確率分布からのサンプリング法であり, 統計物理学, 統計学, 機械学習など様々な分野において必要とされる複雑で高次元な確率分布からのサンプリングに有効である. しかし, 多峰性のある確率分布やベイジアン変数選択における特殊な事後分布に対しては標準的な MCMC 法では適切にサンプリングできず, それらの分布から適切にサンプリングするためのパラレルテンパリング, ギブス変数選択法など補助分布を用いた MCMC 法が提案された.

このような補助分布を用いた MCMC 法のクラスを補助変数法という.

パラレルテンパリングは, 多峰性のある確率分布に逆温度パラメータを導入して多峰性を徐々に緩和した分布列を構成し, 最後の分布は標準的な MCMC 法でも十分にサンプリングできるほど滑らかな分布とする. それぞれの分布からサンプリングとサンプルの交換を行い, サンプルが局所領域に留まるのを防ぎ, 分布全体からサンプリングする. パラレルテンパリングの性能は逆温度パラメータと分布列に対する Metropolis 法の提案分布の分散に強く依存し, 従来は多数の予備実験と試行錯誤によってそれらパラメータの調整が行われてきた.

ギブス変数選択法は, ベイジアン変数選択における連続変数と離散変数が混在する不連続で多峰性をもつ事後分布からサンプリングする. 係数パラメータの周辺事後分布を近似した擬似事前分布を導入し事後分布を単峰に近づけることで効率よくサンプリングする. ギブス変数選択法の性能も同様に擬似事前分布のパラメータ, 提案分布の分散共分散行列に強く依存する. 従来は一度予備実験を行いそこで得られたサンプルを用いてパラメータを設定するという方法がとられてきたが, それでは適切なパラメータを得ることができない.

一般的に補助変数法の性能も提案分布と補助分布に含まれるパラメータに強く依存するため、適切なパラメータの設定は重要な問題である。本論文では、これらパラメータ設定の問題に対して、パラレルテンパリングとギブス変数選択法を拡張して、サンプリングしながらパラメータの値を適応的に更新する適応的パラレルテンパリングと適応的ギブス変数選択法をそれぞれ提案する。数値実験を行い、これら提案アルゴリズムが適切なパラメータを得ることを確認する。

さらに、上述した提案アルゴリズムを一般化して補助変数法でサンプリングしながらそのパラメータを適応的に更新する適応的な補助変数法を提案する。

そのアルゴリズムの収束定理を証明し、緩い条件下で適応的な補助変数法が収束することを示す。

この定理を用いて適応的パラレルテンパリングと適応的ギブス変数選択法の収束を示す。

氏名	荒木 貴光
----	-------

(論文審査結果の要旨)

マルコフ連鎖モンテカルロ法 (MCMC 法) は、従来のモンテカルロ法が苦手としていた高次元空間でのサンプリングを実現するための手法として用いられてきた。しかし分布が多峰である場合などは適切なサンプリングが行えないため、パラレルテンパリングやギブス変数選択法など、補助分布を用いた MCMC 法が提案されている。

これらの手法はパラメータを適切に設定すればよいサンプルが得られるものの、そのパラメータは網羅的に実験を行って見つけていた。本研究はこの問題を解決し、パラメータを適応的に設定する仕組みを導入することで、誰もが気軽に使える MCMC 法を提案したものである。

本研究ではまずパラレルテンパリングのパラメータに適応性を導入した。適応的な MCMC は従来も存在したが、本研究では補助分布のパラメータも適応的にしている。さらに、適応的ギブス変数選択法も提案し、それらの優位性を実験によって示した。

本研究はこれらのサンプリング法を提案するのみではなく、適応的補助関数法一般の収束性の証明も数学的厳密性を持って与えている。

以上をまとめると、本論文は、MCMC 法に適応的パラメータを導入し、収束が保証されたサンプリング法を提案し、その有効性を示したものである。これはサンプリングが必要な多くの応用研究に資するものであり、博士 (工学) の学位に値するものと認められる。