

マルコフ連鎖モンテカルロ法：新しい応用分野と手法の発展

伊庭幸人

YUKITO IBA

統計数理研究所

THE INSTITUTE OF STATISTICAL MATHEMATICS*

マルコフ連鎖モンテカルロ法 (MCMC) の目的は「高次元・多変量の分布からのサンプリング (乱数の生成)」である。パラメータを非定常に変化させることで最適化に用いることもできる (simulated annealing) が、本来は最適化手法ではない。簡単にいえば、1 個だけ良い解を求めるのが最適化、与えられた重み (測度) に従ってたくさんの解を求めるのがサンプリングである。

マルコフ連鎖モンテカルロ法の具体的なアルゴリズムにはさまざまなものがあるが、それらに共通する特徴は「サンプリングしたい分布に対してそれを定常分布とするマルコフ連鎖を構成し擬似乱数を使ってシミュレートする」ことである。数理的な本質はマルコフ連鎖の収束定理 (エルゴード定理) にほかならない。マルコフ連鎖によって確率の大きい領域を探索しつつサンプリングを行うので、その意味では「円の面積を乱数で求める」ような素朴なモンテカルロ法と最適化の中間的な性質を持っている。

「マルコフ連鎖モンテカルロ法」という名前は 1990 年代になって統計学者がつけたものであるが、アルゴリズムそのものは古くからあり、物理の研究者には「モンテカルロ法」あるいは「動的モンテカルロ法」として知られていた。その誕生は 1950 年代の前半にさかのぼり、計算機を用いて多数の原子や分子の振る舞いの計算を行うことが最初の目標であった。これに対して、マルコフ連鎖モンテカルロ法が最近になってあらためて注目されているのは、ベイズ推論などの新しい応用分野が開拓されたことが大きい。その背景としては、長い歴史を持つ学問である統計科学が機械学習やデータマイニングとの関連であらためて評価されていることや、より一般に確率的なモデル化への関心が高まっていることがある。

講演の前半では、2 次元正規分布やイジング模型などの例を用いて、ギブスサンプラー (熱浴法) やメトロポリス法などマルコフ連鎖モンテカルロ法の基本的なアルゴリズムをデモンストレーション付きで紹介した。マルコフ連鎖モンテカルロ法の場合、アルゴリズムの「収束」は、異なる乱数列に対応する多数のシミュレーションの確率分布の収束であって、1 本のサンプルパスがある固定点に収束するという意味ではない、ということを強調したつもりである。また、アルゴリズム設計の基礎となる詳細釣り合い原理、高次元問題でマルコフ連鎖モンテカルロ法が有利な理由などについても簡単に説明した。

講演の後半では、advanced topics として、困難な問題での収束を加速するパラレルテンパリング法 (レプリカ交換モンテカルロ法) と、収束保証つきのアルゴリズムであるパーフェクトサンプリングについて触れた。後者は、文字通りの意味で「収束」して、毎回独立のサンプルを生成するという、マルコフ連鎖モンテカルロ法としては変わった手法であるが、ここでは特別に簡単な例 (dead leaves simulation) を説明するに留めた。

参考文献 計算統計 II, 統計科学のフロンティア 12, 岩波書店, 2005.

*iba@ism.ac.jp