

Z121r マルコフ連鎖モンテカルロ法 — その特徴, 歴史, 発展

伊庭幸人 (統計数理研究所)

マルコフ連鎖モンテカルロ法 (MCMC) は 1950 年代に分子シミュレーションの方法として生まれてから, 長らく物理科学の中でのみ使われていたが, 1990 年代になってから統計学, とくにベイズ統計における事後分布からのサンプリング法として使われるようになった. その後, WinBugs, Stan などの計算ツールが出現したことで, データ解析の分野で広く普及することとなった.

データ解析への応用では, ひとつの計算手段に過ぎない MCMC よりも, 各分野に即したベイズモデリングの仕組みや事例を知ることがより本質的である. その一方で, (1) 特定の問題に対する MCMC のコードを作成することは比較的容易でしばしば高速化が可能, (2) ツールを利用する場合でも MCMC の原理や性質を知っていることは有用, という点から, アルゴリズムとしての MCMC の中身について知ることにもそれなりに有意義と思われる. また, (3) データ解析以外でも天文学にとって有用な応用が存在しうる, という点も潜在的に重要である.

本講演では, まず, 数値的最適化とも異なり, (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も異なる MCMC 固有の特徴を説明する. 次に, 歴史的な展開を意識しつつ, メトロポリス法, ギブス・サンプラー, ハミルトニアン・モンテカルロ法などの主要な技法を導入する. 後半では「悪条件の問題をどう扱うか」「多峰性の分布をどう扱うか」という 2 つの視点から, アルゴリズムの発展について述べる. 時間があれば, ベイズ統計以外への応用やもうひとつのモンテカルロ法である逐次モンテカルロ法 (粒子モンテカルロ法) についても触れたい.