様　式　Ｃ－１９、Ｆ－１９－１、Ｚ－１９　(共通)

科学研究費助成事業　　研究成果報告書

令和　２年　４月　２日現在

機関番号：１４４０１
研究種目：基盤研究(C)（一般）
研究期間：2016～2019
課題番号：１６Ｋ０００４６

研究課題名（和文）対称な提案を用いる次世代モンテカルロ法の研究

研究課題名（英文）Next generation Monte Carlo methods based on reversible proposal Metropolis-Hastings algorithms

研究代表者

鎌谷　研吾（Kamatani, Kengo）

大阪大学・基礎工学研究科・准教授

研究者番号：００５６９７６７

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費）　　3,500,000円

研究成果の概要（和文）：ベイズ統計学にあらわれる数値計算のためのモンテカルロ法の研究をおこなった．ひとつは対称なマルコフ連鎖の研究である．既存研究のなかでも最も基本的な，対称なマルコフ連鎖に注目し，その発展をおこなった．同じ性質をもつ手法は知られていない．ふたつめの方向として非対称なマルコフ過程の研究を進めた．英国，オランダの研究者とはじめて定量的な評価をおこなった．

研究成果の学術的意義や社会的意義
対称なマルコフ連鎖の研究の成果により，研究開始以前に提案していた手法が，高次元にも，裾の重い分布にも有効に働くことがわかった．おなじ性質を持つ手法は知られていない．また，研究開始前後に，非対称なマルコフ過程の重要性がベイズ統計学者に認識され始めていた．我々がはじめて定量的な評価をしたことによって実際にどの程度有効であるか，どんな場合に有効であるかがよりはっきりわかった．

研究成果の概要（英文）：I worked on Monte Carlo methods for the integral evaluations that appear in Bayesian statistics. We focused on the simplest class of Markov kernels for Monte Carlo methods. I showed that a minor generalization of a simple method worked quite well in both high-dimensional and heavy-tailed target distributions. No other method of having the same properties is known. Another result is the non-reversible Markov process. In collaboration with the UK and Netherlands' researchers, we obtained quantitative results for non-reversible Markov processes in a Monte Carlo context.

研究分野：統計科学

キーワード：ベイズ統計学　マルコフ連鎖　モンテカルロ法　確率過程

※科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属されます。

（1）研究開始当初の背景：ベイズ統計学は，統一的な考え方が特徴である．すべての不確実性を，事後分布と呼ばれる確率分布を通して解釈する．解釈する際には積分計算が必要だから，ベイズ統計学において数値計算は不可欠である．数値計算可能な問題がすなわち，ベイズ統計学で扱える問題ということである．1990 年代初頭に，マルコフ連鎖を用いたモンテカルロ法がベイズ統計学でも広がり，数値計算可能な問題の範囲を飛躍的に押し広げた．しかし四半世紀もすると，その範囲はすでに押し広げきったという感覚がベイズ統計学者の間にあったように思う．たとえば，当時のレビューGreen et al. Statistics and Computing 2015でも既存研究の限界を指摘してる．

（2）研究の目的：研究開始当初には，マルコフ連鎖を用いた方法は発展しきったという感覚があったのではないかと述べた．そのため，そうした手法におもいきった近似を代入した研究が発展しはじめていたし，あとでのべるように，非対称な MCMC 法の研究への機運があった．そうした中にあって，一部の優秀な若手研究者は，マルコフ連鎖を用いたモンテカルロ法の基本的数理的事実を次々と見つけていた．彼らの研究に触発され，基本的な手法の研究をあらためて行おうと考えた．実用研究で用いられている，殆どすべての手法を含む，対称性を持つマルコフ連鎖についてよりふかく考えることにした．

（3）研究の方法：研究開始以前に MpCN 法とよばれる対称性を持つマルコフ連鎖を用いた方法を提案した (K. Bernoulli 2018)．この手法は基本的手法でありながら，裾の重い分布にも高次元にもうまく働くことが実験的にわかっていた．この手法の様々な性質やその発展をベースに研究をすすめる予定であった．

実際の研究は，当初研究を一つの柱として，もうひとつの柱が加わった．研究開始の 2016 年４月にキックスタートと位置づけていたローザンヌでのワークショップで，非対称なマルコフ過程を用いた手法に想像以上に発展の余地があることがわかった．そこで，非対称な手法を第二の柱として研究をすすめることにした．同時期にオックスフォードを中心とするグループも非対称なマルコフ過程の研究に着手しており，研究を始める良いタイミングだった．

（4）研究成果

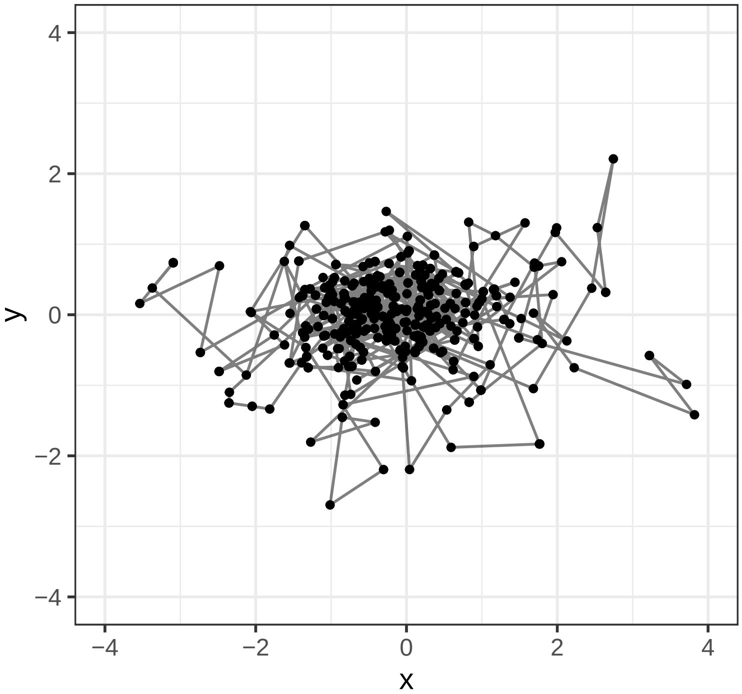
研究成果は前述のふたつの柱と，その他の研究に類別されるが，ここでは２つの柱について紹介する．ひとつめの，当初計画のものを対称性の研究，あたらしいものを非対称性の研究ということにしよう．

まず対称性の研究について．対称性とは，確率分布を人口分布に見立て，マルコフ連鎖を人の移動と見立てたとき，定常な人口分布のもとで，任意の２つの都市間の移動割合が同じということである．マルコフ連鎖を用いたモンテカルロ法は，対称性を持たないマルコフ連鎖を微調整して，対称性をもつようにできたことがブレークスルーであった．わたしはさらに，もともとのマルコフ連鎖が既に対称であるという，さらに狭いクラスに注意して研究をすすめることにした．このような狭いクラスにさえ，まだわからないことが少なくなく，実用的に有用な情報があると思ったのである．

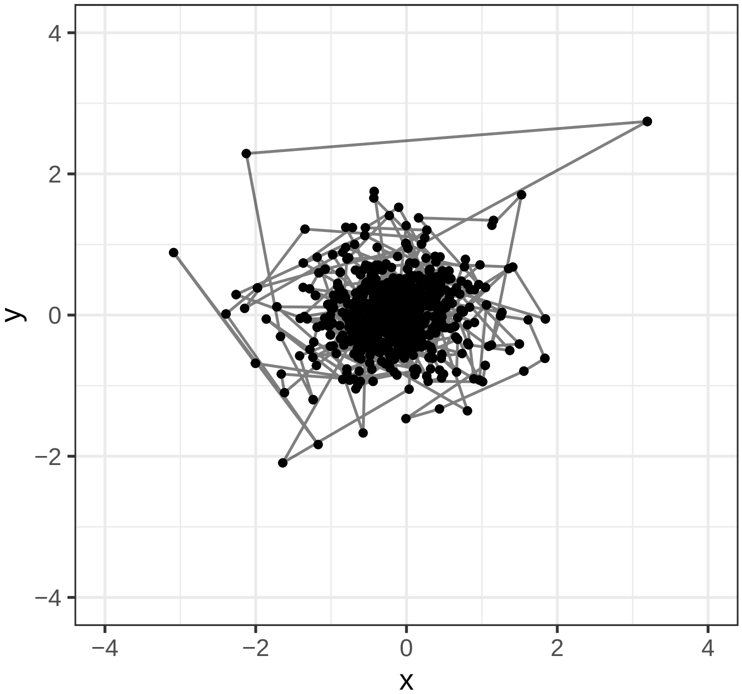
マルコフ連鎖を用いたモンテカルロ法のなかでもっとも基本的な手法が，ランダムウォーク型メトロポリス法である．その発展として，研究開始以前に，MpCN 法 (K. Bernoulli 2018) を提案した．MpCN 法は数値計算と，高次元漸近論によって，従来手法よりも計算効率が高いことが示されていた．それに加えてエルゴード性を調べることで，MpCN 法の有効性をよりよく説明することを試みた．実際に MpCN 法が従来の手法と比べ，格段に広いクラスの確率分布に対しても幾何エルゴード性を持つことを示した．裾の重い確率分布に対する MCMC 法は，一次元の場合を除き，劣幾何型のエルゴード性の観点からしか研究がなされていなかったが，MpCN はそうした制限にとらわれない事が示された（K. Journal of applied probability, 2017）．

簡単な例を用いて MpCN 法の特徴をみてみよう．下記の２つの図はランダムウォーク型メトロポリス（RWM）法と MpCN 法のマルコフ連鎖の経路図である．対象分布（近似したい確率分布）は二次元の t 分布をすこし変化させたものである．後者は，原点から離れるほど大きく動く特徴が見えている．この特徴によって高次元でも，裾が重い重い分布でも，よく動く．

RWM algorithm



MpCN algorithm



アルゴリズム自体は極めて簡単な作りである．このマルコフ連鎖と，位相空間におけるハール測度は密接な関係があり，様々な発展研究ができる．実際に，行列空間への発展を UCL (UK) の研究者と，適合的手法を Google, U. Warwick (UK) の研究者と，またスライスサンプラーへの応用を U. Göttingen (Germany) の研究者と進めた．残念ながら期間内の出版は叶わなかったが，１つ目の研究は投稿中であり，ふたつめもほぼ完成している．さらにハール測度との関連を調べた研究も間もなく投稿するところである．

ふたつめの柱として，非対称の研究をすすめた．非対称を学ぶことで，対称性の意義がより明確になる．非対称な確率過程である Piecewise determinisitc Markov processes (PDMP) を用いたモンテカルロ法に対し，U. Warwick (UK), TU Delft (Netherlands) の

研究者とともに初めて高次元解析に成功し，現在投稿中である（Bierkens et al）．特筆すべきことは，チューニングパラメータの選択基準を導出することに成功したことである．引き続き，PDMP に対する異なった視点からのアプローチでの解析を行っており，一つを投稿中であり，もう一つの関連研究も進めている．2019 年度には，パレルモで PDMP に関するセッションを主催し，最先端の研究者と意見交換を行った．Corona virus の影響が不安であるが，2020 年中にも PDMP を中心とするワークショップも開かる予定である．今後の展開が期待される．

５．主な発表論文等

〔雑誌論文〕　計7件（うち査読付論文　7件／うち国際共著　5件／うちオープンアクセス　0件）

１．著者名	４．巻
Kamatani Kengo	130
２．論文標題 Random walk Metropolis algorithm in high dimension with non-Gaussian target distributions	５．発行年 2020年
３．雑誌名 Stochastic Processes and their Applications	６．最初と最後の頁 297～327
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） https://doi.org/10.1016/j.spa.2019.03.002	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 －

１．著者名	４．巻
Bishop A. N.、Del Moral P.、Kamatani K.、Remillard B.	29
２．論文標題 On one-dimensional Riccati diffusions	５．発行年 2019年
３．雑誌名 The Annals of Applied Probability	６．最初と最後の頁 1127～1187
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1214/18-AAP1431	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

１．著者名	４．巻
Jasra Ajay、Kamatani Kengo、Masuda Hiroki	46
２．論文標題 Bayesian inference for stable Levy-driven stochastic differential equations with high-frequency data	５．発行年 2019年
３．雑誌名 Scandinavian Journal of Statistics	６．最初と最後の頁 545-574
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） https://doi.org/10.1111/sjos.12362	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

１．著者名	４．巻
Jasra Ajay、Kamatani Kengo、Law Kody J. H.、Zhou Yan	55
２．論文標題 Multilevel Particle Filters	５．発行年 2017年
３．雑誌名 SIAM Journal on Numerical Analysis	６．最初と最後の頁 3068～3096
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） doi:10.1137/17M1111553	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

１．著者名 Beskos Alexandros、Crisan Dan、Jasra Ajay、Kamatani Kengo、Zhou Yan	４．巻 49
２．論文標題 A stable particle filter for a class of high-dimensional state-space models	５．発行年 2017年
３．雑誌名 Advances in Applied Probability	６．最初と最後の頁 24～48
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） https://doi.org/10.1017/apr.2016.77	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

１．著者名 Kamatani K.	４．巻 54
２．論文標題 Ergodicity of Markov chain Monte Carlo with reversible proposal	５．発行年 2017年
３．雑誌名 Journal of Applied Probability	６．最初と最後の頁 638～654
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） https://doi.org/10.1017/jpr.2017.22	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 －

１．著者名 Ajay Jasra, Kengo Kamatani, Prince Peprah Osei, and Yan Zhou	４．巻 28
２．論文標題 Multilevel Particle Filters: Normalizing Constant Estimation	５．発行年 2018年
３．雑誌名 Statistics and Computing	６．最初と最後の頁 47-60
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1007/s11222-016-9715-5	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

〔学会発表〕　計13件（うち招待講演　1件／うち国際学会　11件）

１．発表者名 Kengo Kamatani
２．発表標題 Reversible proposal MCMC with heavy-tailed target distributions
３．学会等名 AIMS Conference（国際学会）
４．発表年 2018年

１．発表者名 Kengo Kamatani
２．発表標題 Reversible proposal MCMC with heavy-tailed target distributions
３．学会等名 Bayesian Computation for High-Dimensional Statistical Models（国際学会）
４．発表年 2018年

１．発表者名 Kengo Kamatani
２．発表標題 Bayesian inference for stable Levy driven stochastic differential equations with high-frequency data
３．学会等名 ERCIM 2018（国際学会）
４．発表年 2018年

１．発表者名 Kengo Kamatani
２．発表標題 Reversible proposal MCMC in high dimension
３．学会等名 SIAM Conference on Uncertainty Quantification (UQ16)（国際学会）
４．発表年 2016年

１．発表者名 Kengo Kamatani
２．発表標題 Some properties of the mixed preconditioned Crank-Nicolson algorithm
３．学会等名 IMS-APRM（国際学会）
４．発表年 2016年

１．発表者名
鎌谷研吾

２．発表標題
マルコフ連鎖モンテカルロ法の高次元解析

３．学会等名
日本統計学会

４．発表年
2016年

１．発表者名
鎌谷研吾

２．発表標題
対称な提案を用いる次世代モンテカルロ法の研究

３．学会等名
日本応用統計学会（招待講演）

４．発表年
2019年

１．発表者名
Kengo Kamatani

２．発表標題
High-dimensional scaling limit of Monte Carlo methods

３．学会等名
Dynstoch（国際学会）

４．発表年
2019年

１．発表者名
Kengo Kamatani

２．発表標題
High-dimensional scaling limit of Monte Carlo methods

３．学会等名
EcoSta（国際学会）

４．発表年
2019年

１．発表者名 Kengo Kamatani
２．発表標題 Analysis of Markov Chain Monte Carlo Method with Heavy-tailed Target Distributions
３．学会等名 ISBA-EAC（国際学会）
４．発表年 2019年

１．発表者名 Kengo Kamatani
２．発表標題 Scaling limits of piecewise deterministic Monte Carlo methods
３．学会等名 European Meeting of Statisticians（国際学会）
４．発表年 2019年

１．発表者名 Kengo Kamatani
２．発表標題 Metropolis-within-piecewise deterministic Markov processes
３．学会等名 ERCIM（国際学会）
４．発表年 2019年

１．発表者名 Kengo Kamatani
２．発表標題 Robust Markov chain Monte Carlo methodologies with respect to tail properties
３．学会等名 BayesComp（国際学会）
４．発表年 2020年

〔図書〕　計1件

1．著者名 鎌谷 研吾、駒木 文保	4．発行年 2020年
2．出版社 講談社	5．総ページ数 192
3．書名 モンテカルロ統計計算	

〔産業財産権〕

〔その他〕

KAMATANI, Kengo/ 鎌谷 研吾
http://www.sigmath.es.osaka-u.ac.jp/~kamatani/research/

6．研究組織

	氏名 （ローマ字氏名） （研究者番号）	所属研究機関・部局・職 （機関番号）	備考