3版

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

平成 ２９ 年　 ６ 月 ２７ 日現在

機関番号：３４３１５
研究種目：若手研究(B)
研究期間：2014～2016
課題番号：２６７３００１５
研究課題名（和文）マルコフ連鎖準モンテカルロ法の実装

研究課題名（英文）Implementing Markov chain quasi-Monte Carlo methods

研究代表者
原瀬　晋（HARASE, Shin）

立命館大学・理工学部・嘱託講師

研究者番号：８０６１０５７６

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費）　　1,400,000円

研究成果の概要（和文）：(1) t-値とWAFOMが共に小さい高次収束準モンテカルロ点集合を探索した。また、前の計算結果を保持したまま点数を増やすことが出来る、拡張可能性を有する低WAFOM点集合を探索した。(2) 64ビット最適均等分布F2-線形発生法を開発した。(3) 2次元プロジェクションのt-値がより小さいSobol'型点集合の試作品を探索した。金融工学の数値積分に応用し、比較を行った。(4) マルコフ連鎖準モンテカルロ法のためのCUD近似点集合の探索アルゴリズムを模索した。特に、正則連分数展開に基づいて2次元のt-値が最適化された周期の短いTausworthe発生法を応用する、見通しの良い方策を得た。

研究成果の概要（英文）：(1) We searched for higher-order quasi-Monte Carlo point sets with t-value and WAFOM both small. In addition, we searched for low-WAFOM point sets with the property that the number of points may be increased while retaining the existing points (so-called the extensibility). (2) We developed 64-bit maximally equidistributed F2-linear pseudorandom number generators. (3) We searched for a prototype version of Sobol' point sets with two-dimensional projections even better than the existing ones. We tested our point sets in financial engineering. (4) To construct quasi-Monte Carlo point sets for Markov chain Monte Carlo methods, we explored several kinds of algorithms. In particular, we noticed that short-period Tausworthe generators optimized in terms of regular continued fractions are probably hopeful.

研究分野：数物系科学

キーワード：擬似乱数　モンテカルロ法　準モンテカルロ法　マルコフ連鎖モンテカルロ法

１．研究開始当初の背景

モンテカルロ法は汎用かつ高次元に強い乱数を用いた数値計算法であり、計算機の飛躍的向上に伴って、重要な役割を果たしている。現在、世界的に使用されている擬似乱数発生法の一つに、1998 年に松本眞氏・西村拓士氏により開発されたメルセンヌツイスタ法がある。メルセンヌツイスタ法は、二元体 $\mathbf{F}_2$ 上の線形漸化式に基づく擬似乱数発生法で、従来にない高速性と長周期、計算機アーキテクチャを上手く組み合わせたメモリ効率の良さ、そして、高次元均等分布性の保証などの特徴を有しており、画期的な擬似乱数発生法として受け入れられてきた。ここで、高次元均等分布性とは、「出力の連続した組を作って高次元としてみなしても、一様に分布している」という性質である。与えられた上位ビットに対して、このような性質を満たす最大の次元を均等分布次元と呼び、一様性の規準として、安全保障の数学的根拠となっている。

申請者は、これまでの研究として、

(1) 均等分布次元の高速計算アルゴリズム：整数論の一分野である、Minkowski の数の幾何学(特に、二元体係数形式的べき級数体の格子)の手法を用いて、従来のアルゴリズム(Couture-Ecuyer 法)に比べて、少なくとも 10 倍、場合によっては 100 倍以上高速化される均等分布次元の計算アルゴリズムの開発

(2) 均等分布次元の最適化された擬似乱数発生法：出力に線形変換を組み合わせることにより、メルセンヌツイスタ法では達成されていなかった均等分布次元を理論上の上限に速度を落とさず達成

などに成功した。

しかしながら、モンテカルロ法では 1 桁精度を上げるために、サンプルサイズを 100 倍にする必要があり、非常に収束が遅い問題点を持つ。

２．研究の目的

そこで、モンテカルロ法の高速・高精度計算の技法として、より強い一様性を有した Sobol'列や Niederreiter-Xing 列に代表される「準乱数(quasi-random numbers, low-discrepancy sequences)」に置き換えて計算する準モンテカルロ法が知られている。実際、金融商品の価格計算に現れる数値積分では、数千倍も高速化される報告があり、金融機関を中心に用いられ、重要性は高い。

一方、ベイズ統計やアニーリング法では、マルコフ連鎖モンテカルロ法が必要不可欠な道具となっている。しかるに、一般的な準乱数は、強い一様性は有しているが、連続した出力が独立でないため、マルコフ連鎖モンテカルロ法にはそのまま適用できない。近年、スタンフォード大学統計学部の Art Owen 教授を中心に、CUD 列(completely uniformly distributed sequence)と呼ばれる、新しい一様性の規準を満たす点列を用いると、収束精度を大幅に改善できるという理論が誕生した。ここでの問題は、理論研究のみが先行しており、具体的な点列の構成が未発達で、そのまま使える形の実装が十分になされていない点である。

このような背景から、本研究では、マルコフ連鎖モンテカルロ法の高速・高精度計算ための CUD 列の近似点集合の実装、すなわち、マルコフ連鎖準モンテカルロ法のための点集合の開発を目指す。また、関連研究課題として、擬似乱数発生及び準モンテカルロ点集合の高性能化の研究を行う。

３．研究の方法

マルコフ連鎖準モンテカルロ法のための CUD 列の近似点集合は、短い周期の擬似乱数発生法を一周期発生させることにより得られる。良い CUD 列を得るためには、一次元の点列でありながら、(1)連続した出力を組にした場合どの次元で用いても一様に分布していること、(2)隣り合う出力同士に相関が現れないこと、の 2 点の要請を満たす必要がある。これに対して、短い周期の二元体上線形擬似乱数発生法を用意し、適切な間隔でジャンプさせながら一周期走らせて用いた際に現れる格子構造を利用することにより、CUD 列の近似点集合として使用できることが Chen-松本-西村-Owen(2012)により数値実験で示されている。そこで、Chen-松本-西村-Owen(2012)の点集合よりも一様性の高い点集合を構成したい。加えて、一様性の性能評価指標として知られる均等分布次元、並びに、準モンテカルロ点集合の評価指標として知られる(t，m，s)-net の t-値の性質を詳しく調べ、擬似乱数発生法及び準モンテカルロ点集合の高性能化に応用する。

４．研究成果

マルコフ連鎖準モンテカルロ法、及び、密接に関係する、擬似乱数発生法の高次元均等分布性、超一様分布列を用いた数値積分法(準モンテカルロ法)に関する研究と実装を行った。研究を進める中で、重要度が高い関連研究課題が複数見つかり、それらを重点的に進めた。

（1）高次収束準モンテカルロ点集合の開発

古典的な準モンテカルロ点集合は、点集合の点数 N に対して、約 O(1/N)のオーダーで収束する。ここで、被積分関数の滑らかさ(Fourier 係数や Walsh 係数の decay)に着目すると、更に収束のオーダーを改善する点集合を設計できる。この性質を利用し、松本-斎藤-Matoba(2014)は高速計算可能な点集合の性能評価指標 WAFOM を発見した。そこで、研究代表者は WAFOM を用いて、以下の二種類の低 WAFOM 点集合を探索した。

① 準モンテカルロ点集合の評価指標である(t，m，s)-net の t-値を考慮し、t-値も WAFOM も最適化された点集合を探索した。

WAFOM のみを指標として用いて点集合を探索した場合、滑らかな関数に対しては高次収束するが、滑らかでない関数に対しては(t, m, s)-net に基づく古典的な準モンテカルロ点集合の方が優れている傾向にあることが分かった。そこで、両者の利点を併せ持った点集合を探索したい。このために、予め、t-値の小さい digital (t, m, s)-net を準備しておき、線形スクランブルを用いて点集合をシャッフルすることにより、t-値も WAFOM も共に小さい点集合を探索する方法を提案した。その結果、滑らかな関数に対しては高次収束し、滑らかでない関数に対しても頑健な点集合が得られた。この結果は、Elsevier 発行の Applied Mathematics and Computation 誌に掲載された。

② 既存の低 WAFOM 点集合は点数が固定される。応用上、前の計算結果を保持したまま、次の計算を行うことが出来る拡張可能性を有する点集合が好ましい。そこで、WAFOM を性能評価指標として、生成行列の列ベクトルを帰納的に選んでいくことにより、拡張可能性を有する高次収束準モンテカルロ点集合を探索した。2013 年に執筆したプレプリントに、再度、数値実験を行い、大幅な加筆修正を行った。この論文は、Walter de Gruyter 発行のモンテカルロ法の専門誌 Monte Carlo Methods and Applications に掲載された。この点集合を用いると、Romberg 積分法への適用が可能となる。

（2）64 ビット最適均等分布 $\mathbf{F}_2$-線形擬似乱数発生法の開発

近年、CPU 及びオペレーティングシステムが 32 ビットから 64 ビットへ移行しているが、擬似乱数発生法の対応は十分ではなく、特に、64 ビットで最適均等分布性を持ったメルセンヌツイスタ型擬似乱数発生法は、未だ、開発されていなかった。そこで、木本貴光氏(東工大二宮祥一研究室元学生・現リクルートホールディングス)との共同研究として、64 ビット整数出力に対応した最適均等分布 $\mathbf{F}_2$-線形擬似乱数発生法の開発を行った。特に、

① 二重のフィードバックを持った状態遷移
② 複数ワードを参照した線形出力変換

を組み合わせることにより、速度を落とさずに、高次元均等分布性を完全に最適化することに成功した。得られた発生法は、MT19937 と同じ周期 2^{19937}-1 だけでなく、2^{607}-1 から 2^{44497}-1 までのメルセンヌ素数の周期を持つ。この結果を論文としてまとめ、投稿を行った(現在、minor revision として改訂中)。合わせて、C 言語プログラムを作成し、ホームページ上で公開した。

その後、フェレリーの指示に従い、幾つかの追加機能を付ける研究を行った。特に、並列・分散コンピューティングを行う際、擬似乱数列がオーバーラップしないように、初期値を割り振る必要がある。そこで、愛媛大学の原本博史氏らにより開発された高速ジャンプアルゴリズムを本研究の発生法でも使えるように実装した。また、初期化ルーチンを整理した。

一方、計算機環境の 64 ビット化が進展する中で、従来の 32 ビット版メルセンヌツイスタ発生法を連結して、64 ビット整数として用いる方法がしばしば実装されている。この実装は IEEE754 の倍精度浮動小数点数に変換する際に現れる。このような連結を行い、64 ビット化した出力の高次元均等分布性を調べたところ、通常の 32 ビット出力に比べて、上位ビットの均等分布次元が下がり、乱数性が低下することが分かった。この原因を MT19937 の格子構造を調べることにより解析した。また、新たに、MT19937 が、いくつかの統計的検定(オーバーラップ衝突検定・行列ランク検定など)で棄却されることが分かった。これらの結果を合わせた論文を準備している。この観点からも、本研究で開発した 64 ビット最適均等分布 $\mathbf{F}_2$-線形発生法は有用性を持つと考えられる。

（3）ファイナンス計算に特化した Sobol’型点集合の探索

金融工学では、数百次元～1000 次元以上の数値積分が頻繁に現れる。これに対して、実務では、準モンテカルロ点集合として Sobol’列が用いられている。Sobol’列は、direction number と呼ばれるパラメータを有しており、その選び方に自由度がある。ここで、Joe-Kuo(2008)による 2 次元プロジェクションの一様性を改善した Sobol’列がある。実際、研究代表者が、Black-Scholes モデルのアジア型オプション(1024 次元積分)などで数値実験したところ、Joe-Kuo(2008)の Sobol’列を用いると、それ以前の Sobol’列と比較して、大幅に収束精度が向上することが分かった(MCQMC2016 にて口頭発表)。しかしながら、彼らの Sobol’列では、高次元のパラメータの探索回数が少ないため、まだ、伸びしろがあると考えられる。そこで、高次元における 2 次元プロジェクションの更なる最適化を行い、既存の Sobol’列より 2 次元プロジェクションの一様性の高い Sobol’型点集合の試作品を作成した。特に、この Sobol’型点集合は、実効次元減少法(effective dimension reduction method)が有効でない、デジタルオプションにおいて有効ではないかと予想される。プログラムを整理して、論文を準備している。

（4）マルコフ連鎖準モンテカルロ法のための CUD 近似点集合の最適化

先行研究である Chen-松本-西村-Owen(2012)は、周期の短い Tausworthe 型擬似乱数発生法を準備し、一周期使い切った際に現れる格子構造を利用して、CUD 近似点集合として用いる数値実験を行った。Chen 氏らの論文では、一様性の指標として、擬似乱数の均等分布次元を用いてパラメータ選択を行っているが、本研究では、より高い収束レ

ートを保証する(t, m, s)-net の t-値を用いる拡張に関して検討を行った。実は、(３)の研究を行った過程で、次の事実に気づいた。Tausworthe 型擬似乱数発生法では、パラメータとして $\mathbb{F}_2$ 上の既約多項式の法 P(x)と乗数の多項式 Q(x)の組(P(x), Q(x))を考える。2 次元の t-値に関しては、有理関数 Q(x)/P(x)の正則連分数展開の部分商の次数が常に１である時、その時に限り、t-値が 0(最適値)となる。そこで、手塚-伏見(1993)の Fibonacci 多項式の理論に帰着させ、正則連分数展開の観点から、2 次元の t-値が 0 の(P(x), Q(x))の組を用意しておき、数学的に良いものを絞った上で、3 次元以上の t-値で最良のものを全数探索し、これを CUD 近似点集合として用いるという方策を得た。研究期間を若干オーバーしたが、新しい実装方法の見通しが立ったので、夏休みに、まとまった研究時間が取れ次第、実装を予定している。

５．主な発表論文等
（研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線）

〔雑誌論文〕（計 6 件）
① S. Harase, A search for extensible low-WAFOM point sets, Monte Carlo Methods and Applications, Volume 22, Issue 4 (Dec 2016), pp.349-357. DOI: https://doi.org/10.1515/mcma-2016-0119　査読有り
② 原瀬 晋, メルセンヌツイスタ擬似乱数発生法の連結について, 2016 年度応用数学合同研究集会報告集, 2016, pp.168-171.査読無し
③ 原瀬 晋, 木本貴光, 64 ビット高性能線形擬似乱数発生法の開発, 2015 年度応用数学合同研究集会報告集, 2015, pp. 144-149.　査読無し
④ 原瀬 晋, Sobol'列と関連する話題, 数理解析研究所講究録, 1956 巻, 2015, pp. 9-15. 査読無し
⑤ S. Harase, Quasi-Monte Carlo point sets with small t-values and WAFOM, Applied Mathematics and Computation, Volume 254, 1 March 2015, pp. 318-326. https://doi.org/10.1016/j.amc.2014.12.144 査読有り
⑥ 原瀬 晋, Sobol'列のプロジェクションについて, 2014 年度応用数学合同研究集会報告集, 2014, pp. 290-293. 査読無し

〔学会発表〕（計 22 件）
① 原瀬 晋, メルセンヌツイスタ擬似乱数発生法の連結について, 2016 年度応用数学合同研究集会, 龍谷大学, 滋賀県大津市, 2016 年 12 月 17 日.
② 原瀬 晋, メルセンヌツイスタ擬似乱数発生法の連結について, 日本応用数理学会 2016 年度年会, 北九州国際会議場, 福岡県北九州市, 2016 年 9 月 12 日.
③ S. Harase, A comparison study of Sobol' sequences in financial derivatives, 12th International Conference on Monte Carlo and Quasi-Monte Carlo Methods in Scientific Computing (MCQMC 2016), Stanford University, USA, 2016 年 8 月 19 日.
④ 原瀬 晋, Sobol'列と計算ファイナンスへの応用, 乱数と超一様性集会, 東京大学(本郷キャンパス), 東京都文京区, 2016 年 6 月 23 日.
⑤ 原瀬 晋, 湯浅智意, オプション価格計算における Sobol '列の比較, 日本数学会 2016 年度年会, 筑波大学, 茨城県つくば市, 2016 年 3 月 16 日.
⑥ 原瀬 晋, 湯浅智意, オプション価格計算における Sobol '列の比較, 日本応用数理学会 2016 年研究部会連合発表会, 神戸学院大学, 兵庫県神戸市, 2016 年 3 月 5 日.
⑦ 原瀬 晋, 木本貴光, 64 ビット高性能線形擬似乱数発生法の開発, 2015 年度応用数学合同研究集会, 龍谷大学, 滋賀県大津市, 2015 年 12 月 19 日.
⑧ 原瀬 晋, Implementing 64-bit maximally equidistributed Mersenne Twisters, 立命館大学理工学部数理科学科談話会, 立命館大学, 滋賀県草津市, 2015 年 10 月 30 日.
⑨ 原瀬 晋, 木本貴光, SFMT 擬似乱数発生法の統計的検定, 日本数学会 2015 年度秋季総合分科会,京都産業大学, 京都府京都市, 2015 年 9 月 13 日.
⑩ 原瀬 晋, 木本貴光, SFMT 擬似乱数発生法の統計的検定, 日本応用数理学会 2015 年度年会, 金沢大学, 石川県金沢市, 2015 年 9 月 10 日.
⑪ S. Harase, Takamitsu Kimoto, Implementing 64-bit maximally equidistributed Mersenne Twisters, Tenth IMACS Seminar on Monte Carlo Methods (MCM 2015), Johannes Kepler University and Radon Institute for Computational and Applied Mathematics, Linz, Austria, 2015 年 7 月 9 日.
⑫ 原瀬 晋, 木本貴光, 64 ビット高性能線形擬似乱数発生法の開発, 日本数学会 2015 年度年会, 明治大学, 東京都千代田区, 2015 年 3 月 22 日.
⑬ 木本貴光, 原瀬 晋, 64 ビット高性能線形擬似乱数発生法の開発, 日本応用数理学会 2015 年研究部会連合発表会, 明治大学, 東京都中野区, 2015 年 3 月 7 日.
⑭ 原瀬 晋, 木本貴光, 64 ビット高性能線形擬似乱数発生法の開発, 広島モンテカルロ法・準モンテカルロ法セミナー,

広島大学，広島県東広島市，2015 年 2 月 9 日．

⑮ 原瀬 晋，Sobol'列のプロジェクションについて，2014 年度応用数学合同研究集会，龍谷大学，滋賀県大津市，2014 年 12 月 20 日．

⑯ 原瀬 晋，Sobol'列のプロジェクションについて，日本数学会 2014 年度秋季総合分科会，広島大学，広島県東広島市，2014 年 9 月 26 日．

⑰ 原瀬 晋，準モンテカルロ積分のための WAFOM の小さい(t，m，s)-net，2014 年度統計関連学会連合大会，東京大学，東京都文京区，2014 年 9 月 15 日．

⑱ 原瀬 晋，Sobol'列のプロジェクションについて，日本応用数理学会 2014 年度年会，政策研究大学院大学，東京都港区，2014 年 9 月 3 日．

⑲ 原瀬 晋，Higher order quasi-Monte Carlo methods (Part III，Quasi-Monte Carlo point sets with small t-values and WAFOM)，数理ファイナンスセミナー，立命館大学，滋賀県草津市，2014 年 7 月 25 日．

⑳ 原瀬 晋，Sobol'列と関連する話題，平成 26 年度 RIMS 共同研究「デザイン、符号、グラフおよびその周辺」，京都大学数理解析研究所，京都府京都市，2014 年 7 月 23 日．

㉑ 原瀬 晋，On the lattice structure of Mersenne Twister pseudorandom number generators，第 13 回仙台広島整数論集会，東北大学，宮城県仙台市，2014 年 7 月 18 日．

㉒ S. Harase，Low-WAFOM point sets with small t-values，Monte Carlo and Quasi-Monte Carlo Methods (MCQMC2014)，KU Leuven，Belgium，2014 年 4 月 8 日．

〔その他〕
ホームページ等
Implementing 64-bit maximally equidistributed $\mathbf{F}_2$-linear generators with Mersenne prime period
https://github.com/sharase/melg-64

６．研究組織
(1)研究代表者
原瀬　晋（HARASE，Shin）
立命館大学・理工学部・嘱託講師
　研究者番号：80610576