

マルコフ連鎖準モンテカルロ法のための短い周期の Tausworthe 発生法

立命館大学理工学部 原瀬 晋

多変数関数 f と確率分布 π に対して, MCMC 法を用いた期待値 $E_\pi[f(X)]$ の計算を考える. 乱数を用いたモンテカルロ法は収束が非常に遅いため, より高い一様性を有する準乱数に置き換えて高速化を図る準モンテカルロ法を適用したい. しかし, 通常の準乱数は MCMC にそのまま適用することが出来ない. 近年, Owen 教授ら [1, 2] により, CUD 列の規準を満たす準乱数を用いると, MCMC による期待値計算の一致性が示された. しかし, CUD 列の定義は構成的でない. 本研究では, 短い周期の擬似乱数発生法を用意し, 一周期使い切った際に現れる格子構造を利用して, CUD 列の近似点集合の実装を考える.

定義 1 (CUD 列) 1次元無限点列 $u_0, u_1, u_2, \dots \in [0, 1)$ が, 全ての次元 $s \geq 1$ に対して,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} D_n^{*s}((u_0, \dots, u_{s-1}), (u_1, \dots, u_s), \dots, (u_{n-1}, \dots, u_{s+n-2})) = 0$$

となるとき, $\{u_i\}$ を CUD 列という. D_n^{*s} は s 次元ディスクレパンシーと呼ばれ, 一様分布からどの程度ずれているかを示す一つの尺度である.

そこで, Tausworthe 法を用いて, CUD 列を近似する点列を発生させることにする. この発生法は, 二元体 $\mathbb{F}_2 = \{0, 1\}$ 上の多項式演算の乗算合同法として定式化される:

$$\begin{aligned} X_i(x) &= q(x)X_{i-1}(x) \pmod{p(x)} \\ X_i(x)/p(x) &= a_{i\sigma}x^{-1} + a_{i\sigma+1}x^{-2} + a_{i\sigma+2}x^{-3} + \dots \in \mathbb{F}_2((x^{-1})). \end{aligned}$$

多項式 $p(x), q(x) \in \mathbb{F}_2[x]$ は法と乗数を表すパラメータであり, $p(x)$ は m 次の原始多項式, $0 < \sigma < 2^m - 1$ で $\gcd(\sigma, 2^m - 1) = 1$ を満たす自然数 σ について $q(x) = x^\sigma \pmod{p(x)}$ とする. $u_i := \sum_{j=0}^w a_{i\sigma+j} \cdot 2^{-j-1} \in [0, 1)$ と変換すると, $u_0, u_1, u_2, \dots \in [0, 1)$ は最大周期 $2^m - 1$ を持つ点列となる (w は計算機のワードサイズ). CUD 列の定義にすり合わせるように, 高い一様性をもつ多項式の組 $(p(x), q(x))$ を上手く決定することが問題となる.

一般に, D_n^{*s} の計算は NP-困難である. 一方, Tausworthe 法の出力列 $\{u_i\}$ から作られる s 次元点列の一周期分に原点を加えた点集合では, 一様性を表す非負整数 t -値を計算できて, $D_N^{*s} = O(2^t(\log N)^{s-1}/N)$ となる ($N = 2^m$). この t -値が小さいことが望ましい. 本発表では, $s = 1, 2$ で最適値 $t = 0$ を取り, $s \geq 3$ のとき, 小さい t -値を持つ $(p(x), q(x))$ の探索方法を述べる. また, MCMC を用いた期待値計算の数値実験を紹介する.

参考文献

- [1] S. Chen, J. Dick, and A. B. Owen. Consistency of Markov chain quasi-Monte Carlo on continuous state spaces. *Ann. Statist.*, 39(2):673–701, 2011.
- [2] A. B. Owen and S. D. Tribble. A quasi-Monte Carlo Metropolis algorithm. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, 102(25):8844–8849, 2005.