

線形合同擬似乱数列とモンテカルロ積分†

平 川 保 博*

ABSTRACT This paper discusses general linear congruential pseudo-random numbers for Monte Carlo integration.

A sequence of uniform pseudo-random numbers is generated by the t th order linear recurrence modulo p which is set up with a primitive polynomial modulo p . Thus the modulus p is a prime number and the sequence has maximum period length $p^t - 1$. A search method is employed to find multipliers for the maximum period generator and table of such multipliers corresponding to prime moduli $p: p \leq 10^8$ ($s=2, \dots, 7; t=1, 2, 3$), is included.

The property of the maximum period sequences is measured by the Monte Carlo integration error of n -dimensional hypersphere ($n=2, \dots, 7$).

1. はじめに

モンテカルロ法は確率現象を伴うシステムの挙動を解析するための技法の1つとして、時には決定論的な問題に対してさえも利用され、計算機の高速・大容量化に伴いその有用性はますます高まると思われる。

解析の対象とするシステムの確率現象が n 個の確率変数の関係により記述されるとき、システム解析の問題は n 次元空間で定義された関数の多重積分の問題として定式化される。この多重積分を数值的に計算する際、次元数 n が小さい場合には数値積分が、次元数 n が大きい場合にはモンテカルロ積分が有効であるといわれている³⁾。

単純な数値積分では n 次元の正方格子点で関数値が評価される。これに対し、モンテカルロ積分では関数値を評価する n 次元点を“ランダムに”選択するため擬似乱数列と呼ばれる有限数列を用いる。従って、解析に先立ち、どのような方法でこの有限数列を生成するかを決定することがモンテカルロ法の有効性を左右する重要な問題となる。しかしながら、確率変数の意味で“ランダムな”数列は存在しないのであるから、使用目的に適した数列およびその使用方法を選択することになる。

現在でも良く使用される擬似乱数列の生成法の1つに線形合同法がある。線形合同法により生成される数列の n 項対は n 次元空間において格子構造をもつことが知られている¹⁾。すなわち、線形合同数列を用いるモンテカルロ積分はこの格子点で関数値を評価している。 t 次の線形合同法は素数の法 p に対して最長周期 $p^t - 1$ をもつ乗数を選択することができる⁵⁾。この最長周期をもつ t 次の線形合同数列（以後、強さ t の M-系列と呼ぶ）が原点を除く t 次元の正方格子構造をもつことから、全周期列を使用する t 次元のモンテカルロ積分は単純な数値積分に一致する。従って、 t 次元空間で強さ t の M-系列を用いるモンテカルロ積分は、部分列ではモンテカルロ積分、全周期列では単純な数値積分を実施していることになる。

本研究の目的はこの強さ t の M-系列が多次元空間におけるモンテカルロ積分の積分精度に及ぼす影響を明らかにすることである。始めに、強さ t の M-系列を与えるための乗数が素数 $p: p \leq 10^8$ ($s=2, \dots, 7; t=1, 2, 3$) について求められる。そして、この M-系列の n 次元特性が n 次元の超球関数 ($n=2, \dots, 7$) のモンテカルロ積分精度によって評価され、M-系列の強さおよびその使用方法の影響が解析される。

2. 線形合同法における M-系列の生成

t 次の線形合同法

$$X_k = (b_{t-1}X_{k-1} + \dots + b_0X_{k-t}) \bmod p \quad (1)$$

において p を素数とすれば、線形合同数列 $\{X_k\}$ が最

Linear Congruential Pseudo-Random Numbers and Monte Carlo Integration. By Yasuhiro Hirakawa (Faculty of Science and Technology, Science University of Tokyo).

*東京理科大学理工学部

†1988年12月6日受付 1989年5月10日再受付

長周期 $\tau = p^t - 1$ をもつ乗数 $b_0, \dots, b_{t-1}$ をガロア体 $GF(p)$ 上の原始規約多項式により選択することができる⁵⁾。すなわち、 $GF(p)$ 上の t 次の原始規約多項式

$$f(z) = a_0 + a_1 z + \dots + a_{t-1} z^{t-1} + z^t \text{ に対し, 多項式列}$$

$$z^m \bmod f(z), \quad m=0, \dots, \tau-1 \quad (2)$$

は 0 を除く $t-1$ 次以下のすべての多項式を尽し,

$$b_j = p - a_j, \quad j=0, \dots, t-1$$

とおけば, この多項式列の $t-1$ 次の項の係数列として (1) 式を導く。

所与の p と t に対する原始規約多項式を求めるには, 候補とする t 次の多項式に対し, 実際に (2) 式の $p^t - 1$ 個の多項式が 0 以外の $t-1$ 次の多項式をすべて尽すことを逐一調べる必要がある。素数 p を法とする t 次の原始規約多項式は $\phi(p^t - 1)/t$ 個ある (ここに, ϕ はオイラー関数)。しかし, その原始規約多項式の 1 つ $f(z)$ が与えられたならば, 残りは最長周期 τ と互いに素な数 m に対し, $f(z) = 0$ の根を α としたとき α^m を根にもつ最小多項式として容易に求められる²⁾。

ここでは, $p \equiv 10^s (s=2, \dots, 7; t=1, 2, 3)$ であるような素数 p を法とする t 次の原始規約多項式が調査された。法 p と次数 t の各組 (p, t) に対して求めた強さ t の M-系列を与えるための 1 組の乗数を表 1 に示す。

原始規約多項式 $f(z)$ に対し

$$z^\tau = 1 \bmod f(z)$$

である。 τ は偶数で, $q = \tau/2$ とおけば

$$(z^q - 1)(z^q + 1) = 0 \bmod f(z)$$

と因数分解され, $z^q \neq 1 \bmod f(z)$ より

$$z^q + 1 = 0 \bmod f(z)$$

従って, 多項式の $t-1$ 次の項の係数列すなわち M-系列 $\{X_k\}$ の要素間に

$$X_{q+k} + X_k = p \quad (3)$$

の関係が成り立つ。

(1) 式より求まる M-系列 $\{X_k\}$ を $t=1$ ならば

$$y_k = (X_k - 0.5) / (p-1) \quad (4)$$

$t \geq 2$ ならば

$$y_k = (X_k + 0.5) / p \quad (5)$$

と変換すると, 区間 $[0, 1]$ 上の一様数列 $\{y_k\}$ が得

られる。すなわち, 素数 p の大きさは区間 $[0, 1]$ の離散近似精度を定め, 乗数 $b_0, \dots, b_{t-1}$ は $p-1$ 個 ($t=1$) あるいは p 個の点 ($t \geq 2$) の出現順序を定める。

3. 超球のモンテカルロ積分による M-系列の評価

n 次元空間 R^n 上の半径 1 の超球 $B = \{x \in R^n : \|x\|^2 \leq 1\}$ の体積は

$$S_n = \int_{\|x\|^2 \leq 1} dx = (2\pi/n) S_{n-2} \quad (6)$$

である。ここに, $S_1 = 2, S_2 = \pi$ 。

$X_1, \dots, X_N$ は互いに独立に $[-1, 1]^n$ 上の一様分布に従い, I_B を集合 B の定義関数とすると, 超球の体積 S_n の推定量

$$\hat{S}_n(N) = (2^n) \sum_{k=1}^N I_B(X_k) / N \quad (7)$$

はつぎの平均値と分散をもつ。

$$E[\hat{S}_n(N)] = S_n,$$

$$V[\hat{S}_n(N)] = S_n(2^n - S_n) / N. \quad (8)$$

(8) 式より, モンテカルロ積分による S_n の推定量 $\hat{S}_n$ の標準偏差 $V[\hat{S}_n(N)]^{1/2}$ は N の平方根に逆比例する。以後, S_n からの標準偏差を積分精度と呼ぶことにする。ただし, 1 つの推定値の積分精度を表すときには, S_n と推定値の差の絶対値という表現を用いる。

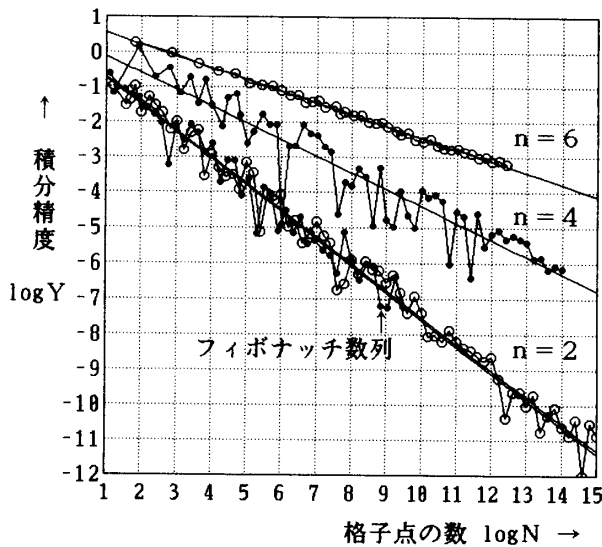
3.1 n 次元超球の数値積分精度

n 次元超球 B の体積の定積分を領域 $[-1, 1]^n$ 上の正方格子点で評価する単純な数値積分の積分精度と格子点の数 N の関係を $n=2, 4, 6$ について図 1 に示す。 $n=2$ の場合は good lattice points 法において精度が良いといわれるフィボナッチ数列を用いた場合^{4), 6)} を加える。ここに, 縦軸は超球の体積の積分精度 $Y(S_n)$ と推定値の差の絶対値を, 横軸は格子点の数 N を各々常用対数で示す。図 1 の直線は対数変換した積分精度 $\log Y$ と格子点の数 $\log N$ との関係に直線をあてはめたもので, $n=2 \sim 6$ におけるその切片 a と傾き b を表 2 に示す。

積分精度と格子点の数の関係は次元数 n に依存し, 対数軸で表された $n=4$ における直線の傾きはモンテカルロ積分における標準偏差の傾き -0.5 に近く, $n=4$ 以上の多重度 n では, 正方格子点を用いた単純な数値積分よりもモンテカルロ積分を用いる方が有効であることを示唆している³⁾。しかし, 数値積分では, 積分評価をする n 次元の点列の選択方法を工夫す

表 1 M-系列を与える乗数 ($t=1, 2, 3$)

p	b_0	p	b_1	b_0	p	b_2	b_1	b_0
101	2	11	3	1	5	2	1	2
1009	11	37	2	3	11	2	2	3
10007	5	101	3	4	23	5	1	1
100003	2	317	2	2	47	5	2	1
1000003	2	1009	11	3	101	3	3	2
10000019	6	3163	6	3	223	3	2	1

図1 n 次元超球の数値積分精度 Y と格子点の数 N 表2 n 次元超球の数値積分精度 Y と格子点の数 N

n	a	b	
2	0.013	-0.761	フィボナッチ数列
2	0.022	-0.755	正方格子点
3	0.563	-0.640	"
4	0.341	-0.474	"
5	0.773	-0.406	"
6	0.875	-0.333	"

ここに、 $\log Y = a + b \cdot \log N$.

ることにより積分精度を改善することが可能であると言われている⁴⁾。ただし、 $n=2$ では、精度が良いと言われるフィボナッチ数列を利用した際の積分精度は図1あるいは表2に示されるように正方格子点におけるそれとはほぼ同じである。

3.2 M-系列のモンテカルロ積分精度への影響

モンテカルロ積分における理論的な積分精度（標準偏差）は確率変数を前提としたものであり、M-系列を擬似乱数列として用いた場合の計算結果がこの標準偏差と同様の傾向を示すとは限らない。そこで、以下、M-系列がモンテカルロ積分精度に及ぼす影響を解析する。

① 積分領域と積分精度

超球 $B = \{x \in \mathbb{R}^n : \|x\|^2 \leq 1\}$ の領域は原点に対して点対称であることから

- (a) 領域 $A_1 = [-1, 1]^n$ 上の B の体積と
- (b) 領域 $A_2 = [0, 1]^n$ 上の B の体積の 2^n 倍は同じである。

モンテカルロ積分の理論からは(a), (b)いずれの方法で計算しても超球の体積の推定量の分散は等しい。こ

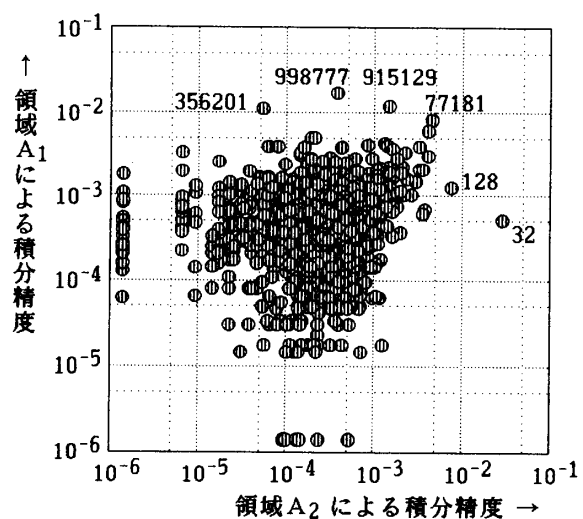
れに対し、正方格子点での数値積分では後者の方が超球をより細分した点で評価しており精度は良い。

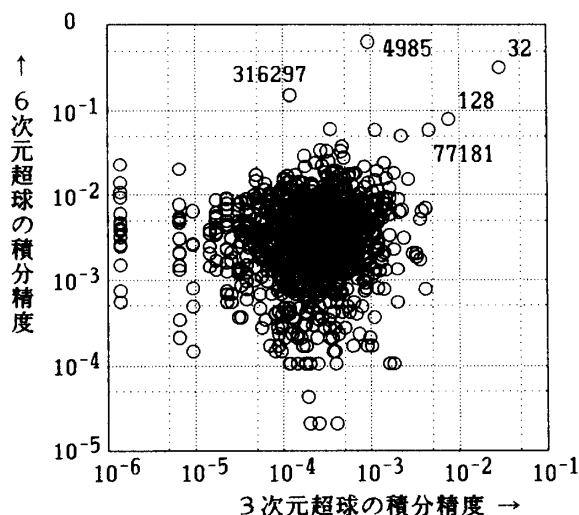
同じ擬似乱数列を用いた場合の2つの積分領域 A_1 と A_2 におけるモンテカルロ積分精度 (S_n と推定値の差の絶対値) の差異を図2 ($p=1000003$, $t=1$, $n=3$) に示す。ここに、縦軸は領域 A_1 を用いた場合の積分精度、横軸は領域 A_2 を用いた場合の積分精度を表す。このモンテカルロ積分では法 p の各値において、各々1000個のM-系列 ($t=1$) の全周期列が使用される。図の中の数値は近接の点に使用したM-系列の乗数を表す。図2より、同じ系列を用いたモンテカルロ積分においても積分領域が異なれば積分精度も大きく異なり、一方で精度の良い系列が他方でも精度が良いという傾向はみられない。逆に、一方で非常に精度の悪い系列は他方でも比較的精度が悪いという傾向をもつ。

以下の②、③および④の解析では、領域 A_2 での超球 B の体積を計算し、後で 2^n 倍するという計算方法(b)を用いる。

② 次元数 n と積分精度

次元数 n の違いによるモンテカルロ積分精度の差異を、同じ擬似乱数列を用いたときの $n=3$ と $n=6$ の超球の積分精度の関係として $p=1000003$, $t=1$ の場合について図3に示す。ここに、縦軸は $n=6$ の超球の積分精度、横軸は $n=3$ の積分精度を表す。図中の数値は図2の場合と同様、近接する点で使用されたM-系列の乗数を示す。図3は同じ系列を用いたモンテカルロ積分においても次元数 n が異なれば積分精度も大きく異なることを示す。また、乗数 $a=32, 128$ のM-

図2 積分領域と積分精度 ($p=1000003$, $t=1$, $n=3$)

図3 超球の次元数と積分精度 ($p=1000003$, $t=1$)

系列を使用した場合は、積分領域および次元数にかかわらず積分精度は悪い。

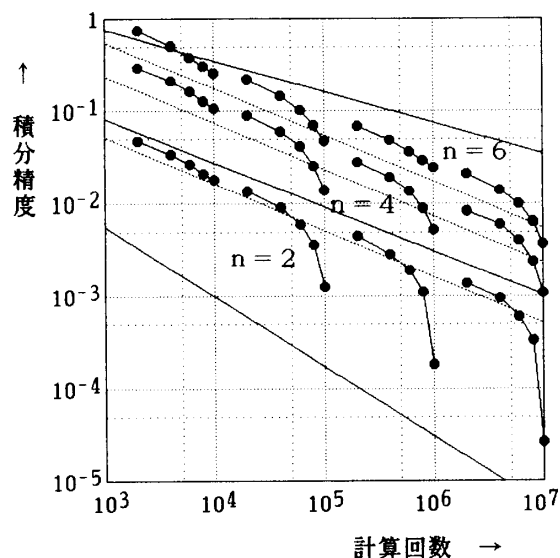
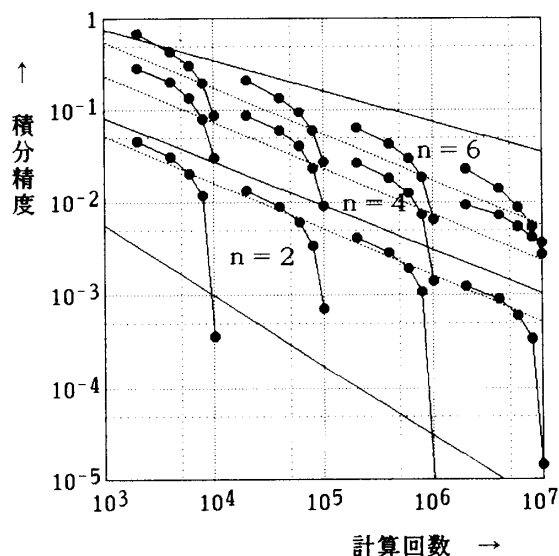
③ M-系列の部分列と全周期列

モンテカルロ積分は、通常、計算機に組み込まれた擬似乱数発生のための関数を利用して生成される数列の部分を用いて実施される。ここでは、全周期列に対する使用数列の長さの影響を明らかにするため、M-系列の部分 $\tau/5$, $2\tau/5$, $3\tau/5$, $4\tau/5$ および全周期 τ の各々を計算回数 N としたモンテカルロ積分の精度を解析する。解析には、法 p の各々で1000個 ($p=10000019$ の場合は200個) の M-系列を使用している。M-系列における使用数列の長さとの積分精度の関係を図4 ($t=1$) および図5 ($t=2$) に示す。ここに、縦軸は積分精度 (異なる系列による複数の推定値の標準偏差)、横軸は計算回数を表す。黒丸を結んだ実線は部分列と全周期列における積分精度の関係を示し、使用数列の長さが全周期列 τ に近づくと積分精度が急速に向上することがわかる。図4, 5の実直線は図1に示した正方格子点での数値積分精度を、点数は(8)式より求めた標準偏差の理論値を示す。

図4, 5より、M-系列の部分列を用いた場合のモンテカルロ積分精度は理論値よりも悪く、次元数 n が大きくなるに従い、その差は増加する。しかし、全周期列を用いることにより、その大部分においてモンテカルロ積分の理論精度を上回る。

④ M-系列の強さ t と積分精度

法 p と次数 t の各組 (p, t) に対し、各々1000個の M-系列を用いた超球のモンテカルロ積分を行い、積分精度の相対累積度数を $n=3, 5$ の場合について示し

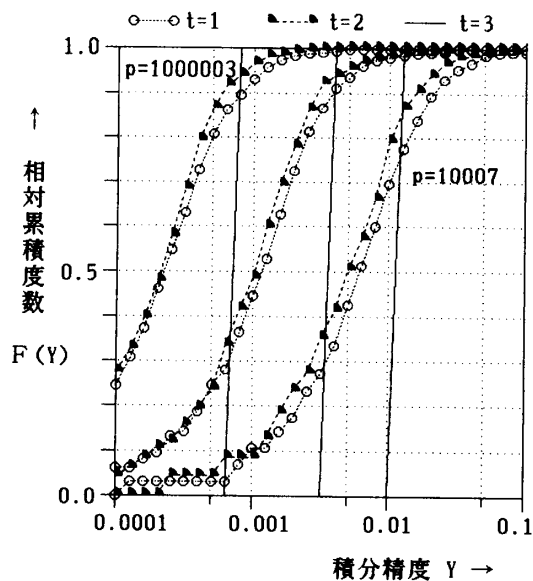
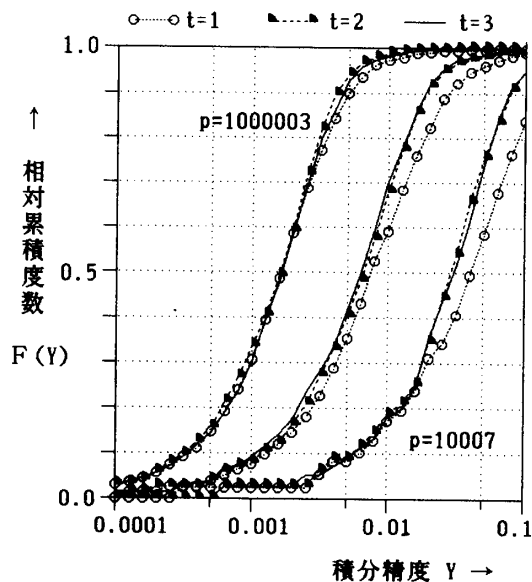
図4 M-系列の部分列と全周期列 ($t=1$)図5 M-系列の部分列と全周期列 ($t=2$)

たのが図6, 7である。

図6, 7より、強さ t の M-系列による t よりも大きい次元のモンテカルロ積分では、乗数による積分精度の差異が強さ t による積分精度の差異よりもはるかに大きいことがわかる。

強さ t の M-系列の全周期列は t 次元空間で原点を除く p^t-1 個の正方格子点を尽すことから、全周期列を用いた t 以下の n 次元空間での積分精度は乗数によらず一定である。従って、この積分精度は正方格子点による数値積分精度にほぼ一致する。

図6より、 $n=3$ における積分精度は強さ $t=1, 2$ の

図6 M-系列の強さ t と積分精度 ($n=3$)図7 M-系列の強さ t と積分精度 ($n=5$)

M-系列の大部分（例えば、 $p=100003$ では90%以上）で、 $t=3$ のM-系列を用いた場合の積分精度を上回っている。図7の $n=5$ では、強さ $t=2$ と3に大きな差異は認められない。また、 $t=1$ と2を比べると計算

回数 $N=10^4, 10^5, 10^6$ のすべてにおいて、強さ1よりも強さ2のM-系列に積分精度の良いものが多いとみられる。しかし、 p が大きくなるとその差は減少する。

4. 結 論

- (1) 次数 $t=1, 2, 3$ の線形合同法における最長周期列（強さ t のM-系列）を与えるための乗数が表1に得られた。
- (2) 計算回数を N とするモンテカルロ積分においては、 N より長い周期長をもつM-系列の部分列を使用するよりも N に近い周期長をもつM-系列の全周期列を用いることにより積分精度が向上する（図4, 5）。
- (3) M-系列の強さ t の影響は周期長 $p-1$ あるいは次元数 n によって異なるが、その大部分において $t=2$ の系列を用いるとき積分精度の良いものが多い（図6, 7）。しかし、 p が大きくなるとその差は縮小する。
- (4) 同じ強さのM-系列でも、異なる乗数による系列間の積分精度の差が非常に大きい。また、次元数 n あるいは積分領域に共通して良い精度をもつ系列は認められない（図2, 3）。経験的には法 p に対して相対的に小さな乗数を持つM-系列は一般的に精度が悪い。

M-系列の全周期列を用いたモンテカルロ積分においては、上記の点に注意し、数個の系列を選択してシミュレーション解析を行い、計算精度の確認をすることが大切である。

参 考 文 献

- 1) G. Marsaglia: Random numbers fall mainly in the planes, Proc. N. A. S., 61, 25/28 (1968)
- 2) 高橋磐郎: 組合せ理論とその応用, 岩波書店 (1976)
- 3) 津田孝夫: モンテカルロ法とシミュレーション, 培風館 (1977)
- 4) H. Niederreiter: Quasi-Monte Carlo methods and pseudo-random numbers, Bull. Amer. Math. Soc. 84, 957/1041 (1978)
- 5) D. E. Knuth: The Art of Computer Programming, Vol. 2-2., Addison-wesley (1981)
- 6) 杉原正顕: 数論的数値積分法, 数理科学, 4, 31/37 (1983)