

NUTS による長期記憶を持つ非対称 SV モデルの ベイズ推定 (第 1 回)

日本大学経済学部 戸塚英臣

日本大学経済学部 三井秀俊

1. はじめに

本稿では, NUTS (No-U-Turn Sampler; 以下, NUTS) を利用したハミルトニアン・モンテカルロ (Hamiltonian Monte Carlo; 以下, HMC) 法によるベイズ推定¹⁾ により, 日経平均のボラティリティの長期記憶性について非対称確率的ボラティリティ変動 (Stochastic Volatility; 以下, SV) モデルを用いて実証研究を行なう.

NUTS は, Hoffman and Gelman (2014) によって, HMC 法における Leapfrog 法の計算回数を自動的に決定する方法として考案された. 第 1 回では, HMC 法と Leapfrog 法を簡単に説明した上で, NUTS の要点について述べる.

2. HMC 法と Leapfrog 法

HMC 法は, 物理学における古典的運動を扱う解析力学のデータとモデルのパラメータをそれぞれ $\mathbf{y} = \{y_t\}_{t=1}^n$ と $\boldsymbol{\theta}$ とする. 事後分布 $f(\boldsymbol{\theta}|\mathbf{y})$ は, 尤度関数 $f(\mathbf{y}|\boldsymbol{\theta})$, 事前分布 $\pi(\boldsymbol{\theta})$, 周辺尤度関数 Z を用いると

$$f(\boldsymbol{\theta}|\mathbf{y}) = \frac{f(\mathbf{y}|\boldsymbol{\theta})\pi(\boldsymbol{\theta})}{Z} \quad (1)$$

と表される. パラメータに共役な運動量 \mathbf{p} を補助変数として導入し, (1) を拡張すると

$$\begin{aligned} f(\boldsymbol{\theta}, \mathbf{p}|\mathbf{y}) &\propto e^{-\mathbf{p}^2/2} f(\mathbf{y}|\boldsymbol{\theta})\pi(\boldsymbol{\theta}) = \exp\left[-\frac{\mathbf{p}^2}{2} + \log f(\mathbf{y}|\boldsymbol{\theta})\pi(\boldsymbol{\theta})\right] \\ &= \exp[-H(\mathbf{p}, \boldsymbol{\theta}, \mathbf{y})] \end{aligned} \quad (2)$$

となる. ここで, H を解析力学にならってハミルトニアンと呼ぶ. なお, $H(\mathbf{p}, \boldsymbol{\theta}, \mathbf{y})$ が $\boldsymbol{\theta}$ と \mathbf{p} のみの項の和になっていることから, 補助変数として導入された運動量は, 事後分布に影響を与えない. 解析力学によれば, ハミルトニアンは, 次の運動方程式に従う.

$$\frac{d\boldsymbol{\theta}}{d\tau} = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}} = \mathbf{p}, \quad (3)$$

$$\frac{d\mathbf{p}}{d\tau} = -\frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{\theta}} = -\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\theta}} \log f(\mathbf{y}|\boldsymbol{\theta})\pi(\boldsymbol{\theta}). \quad (4)$$

¹⁾戸塚・三井 (2020a, 2020b) では, 株価指数先物に関して Leapfrog 法を利用した HMC 法によるベイズ推定の実証研究を行なっている. 戸塚・三井 (2020c, 2021a) では, 日経平均ボラティリティー・インデックス先物に関して同様の実証研究を行なっている. また, Leapfrog 法による非対称確率的ボラティリティ変動モデルのベイズ推定への影響に関しては, 戸塚・三井 (2021b) を参照のこと.

これをハミルトニアン方程式という。なお、 τ は仮想的な時間を表す。HMC 法では、パラメータは、仮想的な時間によって (3) – (4) 式に従って運動していると考えられる。更新されたパラメータの採択は、Metropolis-Hastings 法を用いて行なわれる。(3) – (4) 式は、解析的に解けないため、詳細つり合い条件 (detailed balance condition) を満たすため時間反転や体積保存を満足する数値積分が用いられる。代表的な数値積分が Leapfrog 法であり、(3) – (4) 式は次のように差分化される。

$$\mathbf{p}(\tau + \frac{\epsilon}{2}) = \mathbf{p}(\tau) - \left(\frac{\epsilon}{2}\right) \frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{\theta}} \Big|_{\boldsymbol{\theta}=\boldsymbol{\theta}(\tau)}, \quad (5)$$

$$\boldsymbol{\theta}(\tau + \frac{\epsilon}{2}) = \boldsymbol{\theta}(\tau) + \epsilon \mathbf{p}(\tau + \frac{\epsilon}{2}), \quad (6)$$

$$\mathbf{p}(\tau + \epsilon) = \mathbf{p}(\tau + \frac{\epsilon}{2}) - \left(\frac{\epsilon}{2}\right) \frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{\theta}} \Big|_{\boldsymbol{\theta}=\boldsymbol{\theta}(\tau+\epsilon)}. \quad (7)$$

ここで、 ϵ は、仮想的な時間における微小時間を表す。積分する時間間隔 T 、分割数 N は、 $T = N \times \epsilon$ を満足する。Leapfrog 法では、時間間隔と分割数が任意パラメータとなる。

HMC 法のアルゴリズムは、次の手順を繰り返すことになる。

1. \mathbf{p} を $N(0, \sigma^2)$ に従う乱数として生成する。
2. (5)–(7) 式を用いて、パラメータを時間発展させる。
3. 更新前後のハミルトニアンを用いて、Metropolis Test により、パラメータの採択/棄却を決定する。

時間間隔 T を小さくすると、運動量の更新が頻繁に行なわれ、短いランダム・ウォークを再現する。一方、 T を大きくすると、ハミルトニアン方程式で運動する時間が長くなり、異なる H の値に移るのが遅れ、局所的に安定な軌道にトラップされる可能性が高くなる。したがって、Leapfrog 法による HMC 法において時間間隔は、計算時間を決めるだけでなく、推定精度にも重要なパラメータである。

3. NUTS

Hoffman and Gelman (2014) により提唱された NUTS は、HMC 法の時間間隔の長さを適応的に決定するアルゴリズムである。ここでは、NUTS の概要について解説する²⁾。

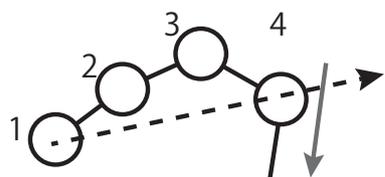


図 1: ハミルトン方程式を解いて生成される軌跡

図 1 に、(5) – (7) 式のハミルトン方程式を解いて生成される軌跡 (以下、パスと呼ぶ) のイメージを示す。図中の白丸は、Leapfrog ステップで生成されるパラメータを表し、番号は生成された順番を表すとする。グレーの矢線は 4 番の時点での仮想的な運動量を表す。図 1 に示すように、パス上の 1 番と 4 番のパラメータを結ぶ矢線と仮想的な運動量を表すグレーの矢線がなす角度が 90 度

²⁾詳しくは、Hoffman and Gelman (2014)、豊田 [編著] (2015、付録 2) を参照のこと。

を超えたことを U-Turn と定義し、NUTS では、U-Turn が生じたとき、Leapfrog 法の計算を止める。しかし、このアルゴリズムだけでは、詳細釣り合い条件を満足せず、また、正しい事後分布への収束が保証されない。NUTS では、Slice Sampling と Doubling 法を適用することで、これらの問題を解決している。

Slice Sampling は、確率分布からサンプリングするためのマルコフ連鎖モンテカルロ (Markov Chain Monte Carlo; MCMC) 法の 1 つである。目的分布 $f(\boldsymbol{\theta})$ から $\boldsymbol{\theta}$ のサンプルを取得するために、補助変数 u と同時分布 $f(u, \boldsymbol{\theta})$ を導入する。この同時分布は次のように定義される。

$$f(u, \boldsymbol{\theta}) = \begin{cases} 1/z & 0 \leq u \leq \pi(\boldsymbol{\theta}), \\ 0 & \text{otherwise.} \end{cases} \quad (8)$$

ここで、 $z = \int \pi(\boldsymbol{\theta}) d\boldsymbol{\theta}$ であり、 $\pi(\boldsymbol{\theta})$ は $f(\boldsymbol{\theta})$ のカーネルである。 $f(u, \boldsymbol{\theta})$ の周辺分布は、

$$\int f(u, \boldsymbol{\theta}) du = \int_0^{\pi(\boldsymbol{\theta})} \frac{1}{Z} = \frac{\pi(\boldsymbol{\theta})}{Z} = f(\boldsymbol{\theta}) \quad (9)$$

に従う。したがって、 $f(u, \boldsymbol{\theta})$ からのサンプリングにより、目的分布から $\boldsymbol{\theta}$ を得ることができ、Slice Sampling では、これらの手続きは、 u と $\boldsymbol{\theta}$ を交互にサンプリングすることにより実行される。最初のステップでは、 $\boldsymbol{\theta}$ を固定し、 $u \leq \pi(\boldsymbol{\theta})$ を満たすように u を均一にサンプリングする。

$$p(u|\boldsymbol{\theta}) \sim \text{Uniform}[0, \pi(\boldsymbol{\theta})]. \quad (10)$$

次に、 u を固定し、次のように定義される水平スライス領域 S から $\boldsymbol{\theta}$ を均一にサンプリングする。

$$S = [\boldsymbol{\theta} : u \leq \pi(\boldsymbol{\theta})]. \quad (11)$$

ただし、Slice Sampling では、 S の境界を見つけることが課題である。この課題を解決するために、Neal (2003) は、 $\boldsymbol{\theta}$ の現時点の値を含む初期セグメントのサイズをランダムに選択し、セグメントを 2 倍にすることによって拡張する倍加法を提案した。この手法を、Doubling Process と呼ぶ。Doubling Process によって生成されたセグメントから $\boldsymbol{\theta}$ の候補の部分集合が得られる。NUTS は、 u を次のような一様分布で導入する。

$$p(u|\boldsymbol{\theta}) \sim \text{Uniform} \left[0, \exp \left(\log f(\boldsymbol{\theta}) - \frac{1}{2} \mathbf{p}^2 \right) \right]. \quad (12)$$

NUTS は、すべての $(\boldsymbol{\theta}, \mathbf{p})$ の有限集合を、その大きさを 2 倍にすることを繰り返しながら生成する。Doubling Process は、時間可逆性を満たすようにランダムに前進と後退で Leapfrog 法が行なわれ、次の条件を満足するまで Leapfrog 法による移動が行なわれる。

$$(\boldsymbol{\theta}^+ - \boldsymbol{\theta}^-) \mathbf{p}^- < 0 \text{ or } (\boldsymbol{\theta}^- - \boldsymbol{\theta}^+) \mathbf{p}^+ > 0. \quad (13)$$

ここで、 θ^+ , θ^- , p^+ , p^- は、Doubling Process で生成される (θ, p) の左端と右端のパラメータと運動量である。次のサンプリングの候補となる (θ, p) の部分集合を C と表す。NUTS では、 C は次の式を満たすように Doubling Process によって生成される (θ, p) から選ばれる。

$$u \leq \exp \left[\log f(\theta) - \frac{1}{2} p^2 \right]. \quad (14)$$

(θ^*, p^*) の次の値は、 C からサンプリングされる。Hoffman and Gelman (2014) は、このアルゴリズムを改良し、Doubling の各ステップで次の遷移カーネルを利用した。

$$T(\theta^*, p^* | \theta, p) = \begin{cases} \frac{I[\theta^*, p^* \in C^{\text{new}}]}{|C^{\text{new}}|} & |C^{\text{new}}| > |C^{\text{old}}|, \\ \frac{|C^{\text{new}}|}{|C^{\text{old}}|} \frac{I[\theta^*, p^* \in C^{\text{new}}]}{|C^{\text{new}}|} + \left(1 - \frac{|C^{\text{new}}|}{|C^{\text{old}}|} \right) I[(\theta^*, p^*) = (\theta, p)] & |C^{\text{new}}| \leq |C^{\text{old}}|. \end{cases} \quad (15)$$

ここで、 $I[\cdot]$ は括弧内の式が真なら 1, 偽なら 0 となる関数である。 C^{new} は最後の Doubling Process で追加された (θ, p) の部分集合、 C^{old} は $C = C^{\text{new}} \cup C^{\text{old}}$, かつ $(\theta, p) \in C^{\text{old}}$ を満たす離散部分集合である。この遷移カーネル T は、 C^{old} から C^{new} のランダム状態への移動を提案し、 $C^{\text{new}}/C^{\text{old}}$ の確率で受理される。Leapfrog ステップでは、遷移カーネル T は、メモリ効率の高い実装を可能にし、単純な均一サンプリングよりも平均して大きな移動を生成する。

4. まとめ

本稿では、HMC 法と Leapfrog 法を説明し、NUTS について解説を行なった。来月号では、本研究の分析モデルである長期記憶を持つ非対称 SV モデルについて簡単に説明し、日経平均のデータを用いて、NUTS を利用した HMC 法によるベイズ推定の実証結果について報告する予定である。

(来月号につづく)

参考文献

- [1] 戸塚英臣・三井秀俊 (2020a), 「ハミルトニアン・モンテカルロ法による非対称 SV モデルの推定 日経 225 先物, TOPIX 先物— (第 1 回)」, 日本取引所グループ『先物・オプションレポート』, Vol. 32, No. 2, pp. 1–6.
- [2] 戸塚英臣・三井秀俊 (2020b), 「ハミルトニアン・モンテカルロ法による非対称 SV モデルの推定 日経 225 先物, TOPIX 先物— (第 2 回)」, 日本取引所グループ『先物・オプションレポート』, Vol. 32, No. 3, pp. 1–8.

- [3] 戸塚英臣・三井秀俊 (2020c), 「日経平均 VI 先物のハミルトニアン・モンテカルロ法によるベイズ時系列分析 (第 1 回)」, 日本取引所グループ『先物・オプションレポート』, Vol. 32, No. 12, pp. 1-5.
- [4] 戸塚英臣・三井秀俊 (2021a), 「日経平均 VI 先物のハミルトニアン・モンテカルロ法によるベイズ時系列分析 (第 2 回)」, 日本取引所グループ『先物・オプションレポート』, Vol. 33, No. 1, pp. 1-5.
- [5] 戸塚英臣・三井秀俊 (2021b), 「ハミルトニアン・モンテカルロ法におけるリープフロッグ法による非対称 SV モデルのベイズ推定への影響」, 日本大学経済学部『経済集志』, 第 91 巻, 第 1 号, pp. 1-22.
- [6] 豊田秀樹 [編著] (2015), 『基礎からのベイズ統計学 —ハミルトニアンモンテカルロ法による実践的入門—』, 朝倉書店.
- [7] Hoffman, M., and Gelman, A. (2014), “The No-U-Turn Sampler: Adaptively Setting Path Lengths in Hamiltonian Monte Carlo,” *The Journal of Machine Learning Research*, Vol. 15, pp. 1593-1623.
- [8] Neal, R. M. (2003), “Slice Sampling,” *The Annals of Statistics*, Vol. 31, No. 3, pp. 705-741.

本資料に関する著作権は、株式会社大阪取引所にあります。

本資料の一部又は全部を無断で転用、複製することはできません。

本資料の内容は、株式会社大阪取引所の意見・見解を示すものではありません。

本資料は、デリバティブ商品の取引の勧誘を目的としたものではありません。

筆者および株式会社大阪取引所は、本資料に基づく投資あるいは類似の行為により発生した如何なる損失や損害に対して、一切の責任を負うものではありません。