2版

様　式　C－19、F－19－1、Z－19　(共通)

科研費 KAKENHI

科学研究費助成事業　　研究成果報告書

平成 30 年　 6 月 12 日現在

機関番号：15401
研究種目：挑戦的萌芽研究
研究期間：2015～2017
課題番号：15K13460

研究課題名（和文）高次超一様点集合と超収束準モンテカルロ法

研究課題名（英文）Higher order hyper uniform point sets and higher order quasi-Monte Carlo method

研究代表者
松本　眞（Matsumoto, Makoto）

広島大学・理学研究科・教授

研究者番号：70231602

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費）　　2,700,000円

研究成果の概要（和文）：fをs次元超立方体上定義された被積分関数とする。準モンテカルロ法とは、この超立方体の中にサイズNの点集合Pをとり、Pにおけるfの平均値をもって、fの積分値の数値積分近似とする手法である。Pを一様ランダムにとった場合はモンテカルロ法とよばれ、Nの-1/2乗のオーダーで誤差が減る。古典的な準モンテカルロ法では適切な点配置によりNの-1乗に近い誤差減少を目指す。本研究では、パラメータ付きWAFOMという指標を小さくするような点配置を探索した結果、従来提唱されてきた点集合よりも誤差を小さくするような点集合を発見した。特にs<5といった低次元では顕著な改善が見られた。

研究成果の概要（英文）：Let f be an integrand function defined on an s-dimensional hyper cube. Quasi-Monte Carlo method is to choose a point set P of size N in this hyper cube, and obtain numerical approximation of the integral of f by the mean value of f over P. When P is chosen uniformly randomly, the integration error is known to converge with order N's power to -1/2. Classical Quasi-Monte Carlo tries to design a good P with order nearly 1/N. Our research focuses on an index called parameterized Walsh Figure of Merit. By searching for P with small value of this index, we find P with smaller error than previously proposed point sets. In particular, for low dimensions s<5, our method shows remarkable improvements.

研究分野：代数学

キーワード：準モンテカルロ法　数値積分　WAFOM　擬似乱数

１．研究開始当初の背景

高次元立方体上で定義された非積分関数の積分値を数値的に求めることは、科学の広範な分野で必要となる。次元の高い時には通常モンテカルロ法が有効であるが、収束が遅く計算に時間がかかる。収束のオーダーを高めるために適切な点の配置を求める手法が準モンテカルロ法であり、盛んに研究されている。

２．研究の目的

モンテカルロ法では、N 点のランダムサンプルをとりそこでの関数値の平均値をとって積分近似とするが、誤差の収束のオーダーは $N^{-1/2}$と遅い。準モンテカルロ法では一様ランダム以上に一様に配置されたサンプルを用いることで、誤差の収束のオーダーを $N^{-1+\epsilon}$に近づけることが一つの目標となっている。本研究では、関数空間に制限を付けることにより、収束のオーダーが N^{-1}よりも高次になるような点集合を設計する。あわせて、準モンテカルロ法の応用、従来のモンテカルロ法に用いられる擬似乱数発生法の改良、ならびに擬似乱数の統計的検定法の評価を行う。

３．研究の方法

準モンテカルロ法においては、点集合の一様性を評価する様々な指標が提唱されている。Discrepancy は古典的な評価指標であるが計算が困難である。F2 上の線形代数に基づき生成されるデジタルネットと呼ばれる点集合に対しては、t-value という非負整数値をとる指標が計算しやすく、t-value により Discrepancy を評価する公式もあり多くの研究がなされている。t-value が t，サンプル点集合のサイズが 2^m でｓ次元立方体に分布する点集合を(t,m,s)-net という。低い t 値を持つ点集合を作る方法として Sobol 列、Niederreiter-Xing 列が研究されて来た。この方法では誤差収束は $O(N^{-1})$を超えることができない。この壁を超えるため、被積分関数のα階までの導関数のノルムを制限することで $O(N^{-\alpha+\epsilon})$の誤差収束を実現する手法(Interlaced Sobol 点集合など）が Dick により 2008 年に提唱された。本研究では､デジタルネットＰに対して導入された｢パラメータ c 付き Walsh figure of merit｣ $\mathrm{WAFOM}_c(P)$という評価指標に着目する。WAFOM値はDickの手法を用いて研究代表者らが 2011 年に導入したものであり、その後芳木・鈴木・大堀らによってパラメータが導入された。被積分関数 f に対しあるノルム $||f||_c$が定義されて、デジタルネットＰによる f の準モンテカルロ積分誤差は $||f||_c\cdot\mathrm{WAFOM}_c(P)$で上から抑えられるので、$\mathrm{WAFOM}_c(P)$の小さい点集合（低 WAFOM 点集合）は積分誤差を小さくするものと期待される。低 WAFOM 点集合の構成・探索の方法、およびパラメータｃの適切な決め方を研究する。理論的な研究に加え、種々の非積分関数（Genz のテスト関数など）に対して低 WAFOM 点集合を用いた数値積分を行い、積分誤差を他の点集合の比較することで、低 WAFOM 点集合が有効に働く関数がどのようなものかを探る。

４．研究成果

(1)WAFOM 値の準モンテカルロ法における意義の研究。

WAFOM 値により積分誤差が上から評価できること、WAFOM 値の小さい点集合の存在定理、WAFOM 値の下限、およびその離散フーリエ変換を用いた計算方法に関して、サーベイを行った（雑誌論文 1）。WAFOM 値を小さくすることにより積分誤差が小さくなることはすでに示していたが、逆に、典型的な多変数指数関数 $\exp(-c(x_1+x_2+\cdots+x_n))$に対してデジタルネットＰにより準モンテカルロ積分を行ったとき、その誤差と WAFOM 値の比が上下から次元ｓのみに依存する値でバウンドできることを示した（雑誌論文 2）。この結果は、この指数関数に対して積分誤差を小さくすることと WAFOM 値を小さくすることとがほぼ同値であることを示している。すなわち、この関数に対して積分誤差を小さくするようなデジタルネットの WAFOM 値は小さくなければならない。他の評価指標では、「点集合に対してある関数が存在してその数値積分誤差が評価指標と一致する」という性質しか持たないものが多い。人為的に作られた関数ではなく指数関数という自然な関数の数値積分誤差が WAFOM 値と直結する事実は、WAFOM 値の重要性を示している。

(2)高次元でも有効な低 WAFOM 点集合のためのパラメータ選択法。

当初導入された WAFOM 値は、次元ｓが８程度を超えると低 WAFOM 点集合が見つからないという問題点があった。パラメータｃを導入することで、ｃを小さくすれば WAFOM_c 値の小さい点集合を見つけやすくなる。一方、数値積分誤差を $\mathrm{WAFOM}_c(P)$によって上から評価できるような関数クラスは小さくなる。したがって、適切なパラメータｃを選択することが必要となる。望ましいのは、次元ｓの上昇に応じて適切にｃを小さくとり､低 WAFOM_c 点集合が見つかるように調整することである。芳木-大堀により、Ｐをランダムに選んだ際の $\mathrm{WAFOM}_c(P)$ 値の Coefficient of Variation (CV)は明示的に計算でき、ｓとｃのみに依存する関数とｍ（デジタルネットの次元、サンプルサイズは $N=2^m$ となる）のみに依存する関数の積になる。ｃを動かしたときの CV の極小値と、$c\to-\infty$としたときの CV の値（上限）の平均値を達成するような c_0 が存在し､ｍには依存せずｓのみに依存する。このような c_0 を用いることは、ヒューリスティックな試みではあるが、実際に数値実験を行ったところ良好な結果を得た。（論文準備中。）

(3)数値実験による、低 WAFOM_c 点集合の有効性の検証。

低 WAFOM_c 点集合が数値積分誤差を小さくすることが理論的に保証されている関数クラスは、高階導関数のノルムが階数に関してあまり増大しない関数である。Genz のテスト関数から被積分関数を選び、低 WAFOM_c 点集合による積分誤差と他の点集合による数値積分誤差を比較した。低 WAFOM_c 点集合を求めるため、Sobol 点集合および Niederreiter-Xing 点集合に対して linear scrambling という t-value を変えない変換を行い、低 WAFOM_c 値を持つ点集合を探索した。これは原瀬による既存の手法であるが、探索において scrambling を上位ビットから一つずつ行うことで山登り法を使って WAFOM_c 値の小さい点集合を探索する方法を開発した。この方法により、ランダムサーチよりも小さな WAFOM_c 値を持つ点集合の探索に成功した。得られた低 WAFOM_c 点集合を Sobol-LowWAFOM, NX-LowWAFOM と呼ぶこととし、Sobol については s=2 から 100 次元といった大きな次元において、サンプルサイズを 2^{10}から 2^{22} まで探索した。NX については、実装が知られている範囲である 4≦s≦30 で低 WAFOM 値をもつものを探索した。

意外な結果として、t 値においては Sobol-LowWAFOM は NX-LowWAFOM よりも劣っているが、数値実験結果では差が見られなかった。これに対し、もとの Sobol 点集合は NX 点集合よりも劣っていることが観測された。すなわち、実験的には、低 WAFOM 化することにより、Sobol も NX も改善され同程度の性能を持つようになった。NX 点集合は構成が難しく、s>30 のものは実装されていないと思われるが、Sobol 点集合は 1 万次元を超えるものが実装されている。低 WAFOM 化により Sobol 点集合の性能が NX 点集合と同等になるのであれば、実装困難な高次元 NX 点集合に代わる性能を持つ点集合となると考えられる。また、Sobol-LowWAFOM は t-value において NX より劣っているが、実際に数値積分実験すると優れた性能を示している。

近年提唱された高次収束を持つとされる interlaced Sobol 点集合とも比較実験をしたが、Sobol-LowWAFOM 点集合の方が優れていた。現在提唱されているデジタルネットの中では、数値積分誤差の観点からは、Sobol-LowWAFOM 点集合が最も優れていると思われる。

特に、s=2,3,4 といった低次元では、多くの被積分関数に対して Sobol-LowWAFOM 点集合は他の点集合よりもはるかに小さな積分誤差を示した。s=3 では Genz の C_0 関数と呼ばれる微分不可能な関数に対する積分においても、もとの Sobol 点集合に比べてサンプル数 N=2^{10}で誤差は 1/100 程度に減少しており、N=2^{22}では 1/1000 程度に減少している。微分可能なテスト関数においては、さらに良好な成績を納めている。

一方、s が 8 以上の場合には、微分不可能な関数に対しては、低 WAFOM 化による改善は見られなかった（悪化するということもなかったが)。この意味で、s が 8 以上の時には、低 WAFOM 化が有効な被積分関数のクラスは限られているということも分かった。（論文準備中。）

(4)擬似乱数に関する研究。k 次元 v ビット均等分布という観点から、最良でかつ高速に生成ができる擬似乱数発生法を開発した（雑誌論文 5)。擬似乱数に対する統計的検定について、二重検定の第二段階の繰り返しが多いと誤差が蓄積されて正しい検定が行われない可能性がある。適正な繰り返し回数を求める方法を与えた（雑誌論文 3)。

(5)t-value 0 を達成する生成行列の特長付け。生成行列が(I,B,B^2)という形の F2 上のデジタルネットについて、t-value が 0 となる必要十分条件をもとめ、B^3=0 となるという結果を得た（雑誌論文４）

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　Hiroshi Haramoto, Makoto Matsumoto, A Method to Compute an Appropriate Sample Size of the Two-Level Test for NIST Test Suite Monte Carlo and Quasi-Monte Carlo Methods 2016, Springer Proceedings 2018.（査読有、印刷中）

2 Hiroki Kajiura, Makoto Matsumoto, Kosuke Suzuki, Characterization of matrices B such that (I,B,B^2) generates a digital net with t-value zero, Finite Fields and Their Applications, 52 (2018), 289-300.（査読有）
doi.org/10.1016/j.ffa.2018.04.011

3　Shin Harase, Takamitsu Kimoto, Implementing 64-bit Maximally Equidistributed F2-Linear Generators with Mersenne Prime Period, ACM Transactions on Mathematical Software, Volume 44 Issue 3, April 2018, Article No. 30
doi.org/10.1145/3159444
（査読有）

4　Makoto Matsumoto, Ryuichi Ohori, Takehito Yoshiki, Approximation of Quasi-Monte Carlo worst case error in weighted spaces of infinitely times smooth functions, Journal of Computational and Applied Mathematics 330 (2018) 155-164, Elsevier.　（査読有）
doi.org/10.1016/j.cam.2017.08.010

5 Makoto Matsumoto and Ryuichi Ohori, Walsh Figure of Merit for Digital Nets: An Easy Measure for Higher Order Convergent QMC, Monte Carlo and Quasi-Monte Carlo Methods, Volume 163 of the series Springer Proceedings in Mathematics & Statistics, Springer pp 143-160, 2016 (査読有)

6 Shin Harase, A search for extensible low-WAFOM point sets,
Monte Carlo Methods and Applications, Volume 22, Issue 4 (Dec 2016),
Pages 349-357. (査読有)
//doi.org/10.1515/mcma-2016-0119

〔学会発表〕（計　9　件）

1 Hiroshi Haramoto
Checking the Soundness of Statistical Tests for Random Number Generators by Using a Three-Level Test
International Conference on Monte Carlo Methods and its Applications 2017

2 Shin Harase, On the concatenation of Mersenne Twisters, 11th International Conference on Monte Carlo Methods and Applications (MCM 2017), Universite de Montreal, Canada, July, 2017.

3 Shin 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, August, 2016

4 Hiroshi Haramoto, Makoto Matsumoto
A Method to Compute an Appropriate Sample Size of the Two-Level Test of NIST Test Suite for Frequency and Binary Matrix Rank Test, 12th International Conference on Monte Carlo and Quasi-Monte Carlo Methods in Scientific Computing, MCQMC 2016, 2016年8月17日 Stanford University, America

5 原瀬 晋(発表者), 湯浅智意, 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), 2016年6月23日.

6 原瀬 晋(発表者), 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, 2016年9月12日.

7 原瀬 晋(発表者), 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, 2016年12月17日.

8 Makoto Matsumoto, WAFOM with parameter for higher QMC: Revenge of the algebraic code, Part II, 10th IMACS Seminar on Monte Carlo Methods, JKU, Linz, Austria 2015 July 6th-10th

9 Shinsuke Mori, Ryuichi Ohori, Hiroki Kajiura, Makoto Matsumoto, A fast QMC computation by low-WAFOM point sets for cumulative distribution of multivariate normal distributions,
10th IMACS Seminar on Monte Carlo Methods, JKU, Linz, Austria 2015 July 6th-10th

〔図書〕（計　0　件）

〔産業財産権〕

○出願状況（計　0　件）

名称：
発明者：
権利者：
種類：
番号：
出願年月日：
国内外の別：

○取得状況（計　0　件）

名称：
発明者：
権利者：
種類：
番号：
取得年月日：
国内外の別：

〔その他〕
ホームページ等
C++ 多変量正規分布
https://mersennetwister-lab.github.io/TruncatedNormalCPP/ja/index.html

C++ 数値積分
https://mersennetwister-lab.github.io/MCQMCIntegration/ja/index.html

R 数値積分
https://mersennetwister-lab.github.io/rmcqmcint/index-ja.html

６．研究組織
(1)研究代表者
松本　眞（MATSUMOTO, Makoto）
広島大学・大学院理学研究科・教授
研究者番号：70231602

(2)研究分担者

(3)連携研究者

萩田　真理子（HAGITA, Mariko）
お茶の水女子大学・大学院人間文化創成科
学研究科・教授
研究者番号：70338218

西村 拓士（NISHIMURA, Takuji）
山形大学・理学部・准教授
研究者番号：90333947

原本 博史（HARAMOTO, Hiroshi）
愛媛大学 ・教育学部・ 講師
研究者番号：40511324

原瀬　晋（HARASE, Shin)
立命館大学・理工学部・数学嘱託講師
研究者番号：80610576

(4)研究協力者

(　　　)