

令和元年5月24日現在

機関番号：12601

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2015～2018

課題番号：15K20964

研究課題名（和文）高次収束を達成する準モンテカルロ法の構成と応用

研究課題名（英文）Construction of quasi-Monte Carlo rules achieving high-order convergence with applications

研究代表者

合田 隆 (Goda, Takashi)

東京大学・大学院工学系研究科（工学部）・准教授

研究者番号：50733648

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 2,600,000円

研究成果の概要（和文）：高次元数値積分法の一つである準モンテカルロ法について、特に非周期かつ滑らかな関数に対して、高次の近似誤差収束を達成するような点集合の構成法や理論に関する研究が進んでいる。本研究では、この高次準モンテカルロ法に関して、従来より精緻な近似誤差評価のアプローチを模索することによって、本手法の（収束オーダーの意味での）最良性を示すことに初めて成功した。また、リチャードソン補外を用いることによって、高次準モンテカルロ点集合の各点各座標の2進数表現に元来必要であった精度桁を大幅に削減できるという実装上有用な知見を得ることができた。

研究成果の学術的意義や社会的意義

高次準モンテカルロ法が最良な収束オーダーを達成する高次元数値積分法であることを初めて証明した研究であり、そこに学術的意義がある。現時点において、構成が容易で、点集合のサイズおよび次元について拡張可能である唯一のアルゴリズムと言える。また、高次元数値積分問題は工学分野（例えば、多孔質媒体中の流体挙動の不確実性定量評価）において広くニーズがあることから、本研究で確立された理論ならびにリチャードソン補外の応用による精度桁削減法は、当該分野の広範な応用に向けた重要なステップであると位置付けられ、そこに社会的意義があると考えられる。

研究成果の概要（英文）：Quasi-Monte Carlo (QMC) methods are a class of high-dimensional numerical integration algorithms. There have been several progresses made on QMC methods achieving high-order convergence for non-periodic smooth functions. In this research, we have succeeded for the first time in proving an error bound of such higher order QMC methods, that is best possible in terms of the order of convergence, by employing a sophisticated approach to analyzing the worst-case error for smooth functions. Moreover, we have shown that Richardson extrapolation technique allows us to significantly reduce the precision of higher order QMC points, i.e., the number of digits necessary to describe each quadrature node, which has a practically useful implication.

研究分野：数値解析

キーワード：準モンテカルロ 高次収束 Walsh解析 リチャードソン補外

様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19、CK - 19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

準モンテカルロ法は高次元単位立方体上で定義された関数の積分値を近似するための数値計算法であり、ディスクレパンシーと呼ばれる非一様分布性を測る尺度をもとにした点集合構成に関する研究がこれまでに広く行われてきた。ディスクレパンシーの小さな点列の代表例として Halton 列や Sobol'列がある。特に後者の Sobol'列は Niederreiter によって統一化された概念「デジタルネット/デジタル列」と呼ばれる点集合のクラスに属するものであり、その後、様々な形で拡張や一般化がなされ、ディスクレパンシーの小さな点列の明示的構成法がいくつも見いだされてきた。

ただし、ディスクレパンシーを尺度として構成された点集合を用いると、被積分関数がいくら滑らかであっても、 N 点集合を用いたときの近似誤差のオーダーはおおよそ $1/N$ であった。しかし理論的には、滑らかな被積分関数に対しては、より高次のオーダーで近似誤差が収束するような積分則を構成できるはずである。実際に、関数の周期性を仮定すれば、高次オーダーの誤差収束を達成するような点集合の存在は古くから知られている。しかし、非周期かつ滑らかな関数に対する結果はほとんど示されておらず、ディスクレパンシーに取って代わる尺度に基づく、新たな点集合の構成法が必要であった。

このような状況において、Dick (2007, 2008) は滑らかな関数に対する Walsh 係数の評価を行い、ディスクレパンシーに取って代わる尺度を導出すると同時に、その尺度を小さくするようなデジタルネット/デジタル列の明示的構成法を見出した。この構成法は、Sobol'列のようなディスクレパンシーの小さなデジタルネット/デジタル列に対して、“digit interlacing”と呼ばれる操作を施すだけであり、計算機上も極めて容易に構成可能なものである。このようにして、被積分関数の滑らかさに応じて近似誤差がおおよそ $1/N$ のオーダーで減衰するような準モンテカルロ法が初めて示された。これを機に高次準モンテカルロ法 (HoQMC: higher order quasi-Monte Carlo methods) と呼ばれる分野が開拓され始め、本申請者も Dick 氏との過去の共同研究において、interlaced polynomial lattice rules という特定のクラスの点集合に関して、その高速な構成アルゴリズムの開発に成功していた。

2. 研究の目的

以上の背景を受けて、本研究では HoQMC に関して、その実用性を高めることを最終的な目標として、具体的な研究テーマとして、1) 精緻な近似誤差の解析、2) digit interlacing の必要性・代替手段の検討と新たな HoQMC 点集合構成法の開発、の 2 つを主な目的に掲げ、研究を遂行した。また、開発されたアルゴリズムの実装と工学的応用まで広くカバーすることによって、実用性の検討を行うことを目指した。

3. 研究の方法

1) 精緻な近似誤差の解析

Dick (2008) による HoQMC 近似誤差の解析は、先述の通り、滑らかな関数に対する Walsh 係数の評価に基づくものであるが、特にその減衰のみに着目したものであった。点集合の尺度として、滑らかな関数からなる再生核ヒルベルト空間に対する最悪誤差を採用すると、この Walsh 係数の減衰のみに基づく議論では $(\log N)^s/N$ (ただし、 s は積分領域の次元) となることが示されていた。

一方で、Dick & Pillichshammer (2014) は L_2 -ディスクレパンシーという非一様分布性を測る尺度について、それに対応する再生核に関する Walsh 係数の減衰とスパース性を同時に利用することによって、HoQMC 点集合が L_2 -ディスクレパンシーの最良オーダー $(\log N)^{(s-1)/2}/N$ を達成することを証明している。このアイデアを滑らかな関数に対する近似誤差評価にも応用できないかという方針のもとで解析を行った。

2) 新たな HoQMC 点集合構成法の開発

Digit interlacing による方法では、滑らかさの被積分関数に対する点集合を構成する場合、各点各座標の 2 進数表現に $\log_2 N$ 桁の精度が必要であった。したがって、あるいは N がある程度大きくなると、計算機の精度を越えてしまい、打ち切り誤差が生じてしまう、という問題点があった。そこで、2 進数表現に必要な精度桁を削減するためのアプローチについて模索することとした。

一つの指針として、「デジタルネットによる近似誤差には、一部にそのデジタルネットを覆う正方格子を点集合として用いた積分則による近似誤差を含んでいる」という比較的単純な考察に基づいて、近似誤差を 2 項に分けた上で各項を評価する、ということ考えた。

4. 研究成果

1) 精緻な近似誤差の解析 (鈴木航介氏・芳木武仁氏との共同研究)

前項に記した「再生核の減衰とスパース性を同時に利用する」という方針に沿って、近似誤差の解析を行うために、再生核のスパース性を示すということを試み、実際にスパースである(ほとんどの Walsh 係数が正確に 0 である)ことを証明した。一方で、再生核の減衰については、直接応用できる結果が Baldeaux & Dick (2009) によって証明されていたことから、2 つの結果を併せることによって、当初の方針に沿った解析を試せる道筋が立った。

Dick & Pillichshammer (2014) による L_2 -ディスクレパンシーの解析との大きな相違点として、収束オーダーが高次であるという点が挙げられる。これは再生核のスプース性を利用する際に大きな障壁となることが判明し、それを解決する手段として、Walsh 係数の減衰を表す重み関数の補間不等式を証明した。この不等式を応用した近似誤差評価はそのアプローチそのものが新規的であり、本テーマに類似する重要な結果を導いたことから、その内容のみを切り離して論文として執筆し、IMA Journal of Numerical Analysis に投稿、受理された。

重み関数の補間不等式を応用した近似誤差評価に、再生核の減衰とスプース性についての結果を組み合わせることによって、HoQMC による最悪誤差の収束オーダーが $(\log N)^{(s-1)/2}/N$ に改善できることを証明した。このオーダーは N 点集合を用いたどんな積分則であってもこれ以上改善できないという意味において最良であることが分かっており、HoQMC の最良性の証明に初めて成功した。この結果を学術論文としてまとめ、Foundations of Computational Mathematics に投稿、受理された。

2) 新たな HoQMC 点集合構成法の開発 (一部は Josef Dick 氏・芳木武仁氏との共同研究) 前項に記した方針に沿って、デジタルネットによる近似誤差を 2 項に分けて、各項を独立に評価した。その過程で「デジタルネットを覆う正方形格子を点集合として用いた積分則による近似誤差」の項には Euler-Maclaurin 展開があることを見出し、その証明に成功した。この結果から、「Richardson 補外を HoQMC に応用できるのではないか」という着想を得た。

まず、デジタルネットの中でも特に polynomial lattice 点集合に制限して、残るもう 1 項の誤差評価を試みたところ、その項を $1/N$ のオーダーにするような点集合を高速に構成できることが分かった。この結果から、

- ・点集合のサイズが幾何的に異なる の polynomial lattice 点集合を構成、
- ・各点集合で数値積分を実行、
- ・得られた積分近似値列に対して Richardson 補外を適用する

というアルゴリズムによって最終的な近似値の誤差は $1/N$ のオーダーとなることが示された。この構成法は digit interlacing を必要とせず、各点各座標の 2 進数表現に必要な精度は に関係なく $\log_2 N$ であるだけでなく、以前に開発していた interlaced polynomial lattice rules よりも高速に構成できるという意味においても、実用的なアルゴリズムであると言える。また、テスト関数を用いた数値実験においても interlaced polynomial lattice rules と同等の性能を有していることが分かった。これら一連の結果を学術論文としてまとめ、SIAM Journal on Numerical Analysis に投稿、受理された。

Richardson 補外を HoQMC に応用する、というアイデアを更に考究したところ、digit interlacing を用いて明示的に構成された点集合の精度桁を $\log_2 N$ に打ち切ってしまうと、Richardson 補外によって所望の収束オーダー $1/N$ が達成できる、ということを証明した。補外しなければ、収束オーダーは高々 $1/N$ となってしまうことから、HoQMC と Richardson 補外との非自明な関係性を示すことに初めて成功した。この結果は IMA Journal of Numerical Analysis に投稿、受理されている。

以上が本研究課題に対する主な成果であり、特に 1) の内容については Radon Institute for Computational and Applied Mathematics において招待講演を行い、その紀要として総説論文を執筆し、投稿したところである (arXiv:1903.12353)。また、それ以外にも工学的応用、特に部分完全情報の期待値の近似計算、に対して準モンテカルロを応用を試みるなど、実装上の成果を挙げることができた。

5. 主な発表論文等

[雑誌論文](計 14 件)

1. T. Goda: Richardson extrapolation allows truncation of higher order digital nets and sequences, IMA Journal of Numerical Analysis, in press. 査読あり
2. M. Giles, T. Goda: Decision-making under uncertainty: using MLMC for efficient estimation of EVPPI, Statistics and Computing, in press. 査読あり
3. J. Dick, T. Goda, T. Yoshiki: Richardson extrapolation of polynomial lattice rules, SIAM Journal on Numerical Analysis, 57(1):44-69 (2019). 査読あり
4. T. Goda: On the separability of multivariate functions, Mathematics and Computers in Simulation, 159:210-219 (2019). 査読あり
5. T. Goda, K. Suzuki, T. Yoshiki. Lattice rules in non-periodic subspaces of Sobolev spaces, Numerische Mathematik, 141(2):399-427 (2019). 査読あり
6. T. Goda, K. Suzuki, T. Yoshiki: Optimal order quadrature error bounds for infinite-dimensional higher-order digital sequences, Foundations of Computational Mathematics, 18(2):433-458 (2018). 査読あり
7. T. Goda, D. Murakami, K. Tanaka, K. Sato: Decision-theoretic sensitivity analysis for reservoir development under uncertainty using multilevel quasi-Monte Carlo methods, Computational Geosciences, 22(4):1009-1020 (2018). 査読あり

8. J. Dick, T. Goda, K. Suzuki, T. Yoshiki: Construction of interlaced polynomial lattice rules for infinitely differentiable functions, *Numerische Mathematik*, 137(2):257-288 (2017). 査読あり
9. T. Goda: Computing the variance of a conditional expectation via non-nested Monte Carlo, *Operations Research Letters*, 45(1):63-67 (2017). 査読あり
10. T. Goda: The b-adic symmetrization of digital nets for quasi-Monte Carlo integration, *Uniform Distribution Theory*, 12(1):1-25 (2017). 査読あり
11. T. Goda, K. Suzuki, T. Yoshiki: Optimal order quasi-Monte Carlo integration in weighted Sobolev spaces of arbitrary smoothness, *IMA Journal of Numerical Analysis*, 37(1):505-518 (2017). 査読あり
12. T. Goda, K. Suzuki, T. Yoshiki: Quasi-Monte Carlo integration for twice differentiable functions over a triangle, *Journal of Mathematical Analysis and Applications*, 454(1):361-384 (2017). 査読あり
13. T. Goda: Quasi-Monte Carlo integration using digital nets with antithetics, *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 304:26-42 (2016). 査読あり
14. T. Goda, K. Suzuki, T. Yoshiki: An explicit construction of optimal order quasi-Monte Carlo rules for smooth integrands, *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 54(4):2664-2683 (2016). 査読あり

〔学会発表〕(計 12 件)

1. T. Goda: Optimal order digital nets and sequences, RICAM Special Semester "Multivariate Algorithms and their Foundations in Number Theory", Linz, Austria, November 2018.
2. T. Goda: Quasi-Monte Carlo integration over a triangle, 13th International Conference on Monte Carlo and Quasi-Monte Carlo Methods in Scientific Computing (MCQMC 2018), Rennes, France, July 2018.
3. 合田隆: マルチレベルモンテカルロ法と EVPP1 推定への応用, 数値解析セミナー, 東京大学, 2018年12月.
4. 合田隆: 高次準モンテカルロ法へのリチャードソン加速の応用, 乱数・準乱数とその周辺, 愛媛大学, 2018年6月.
5. T. Goda: Richardson extrapolation of polynomial lattice rules for smooth functions, ESI Program on Tractability of High Dimensional Problems & Discrepancy, Vienna, Austria, September-October 2017.
6. T. Goda: Optimal order quasi-Monte Carlo integration for smooth functions, International Conference on Monte Carlo Methods and Applications (MCM 2017), Montreal, Canada, July 2017.
7. T. Goda: Optimal order quadrature error bounds for higher order digital nets and sequences, 7th Workshop on High-Dimensional Approximation (HDA 2017), Sydney, Australia, February 2017.
8. 合田隆: 準モンテカルロ法の基礎から工学的応用の可能性まで, 日本 OR 学会 2017 年度中部支部シンポジウム, 愛知, 2017年9月.
9. T. Goda: Antithetic sampling for quasi-Monte Carlo integration using digital nets, 12th International Conference on Monte Carlo and Quasi-Monte Carlo Methods in Scientific Computing (MCQMC 2016), Stanford, USA, August 2016.
10. 合田隆: 不偏推定量を構成する汎用的手法としてのマルチレベル(+ランダム化準)モンテカルロ法, 乱数と超一様性集会, 東京, 2016年6月.
11. T. Goda: The b-adic tent transformation for digital nets, 10th IMACS Seminar on Monte Carlo Methods (MCM 2015), Linz, Austria, July 2015.
12. T. Goda: Construction of interlaced polynomial lattice rules achieving accelerating convergence for a class of infinitely smooth functions, Information-Based Complexity, Bedlewo, Poland, April 2015.

〔図書〕(計 件)

〔産業財産権〕

出願状況(計 件)

名称:
 発明者:
 権利者:
 種類:
 番号:

出願年：
国内外の別：

取得状況（計 件）

名称：
発明者：
権利者：
種類：
番号：
取得年：
国内外の別：

〔その他〕
ホームページ等

6. 研究組織

(1) 研究分担者

研究分担者氏名：

ローマ字氏名：

所属研究機関名：

部局名：

職名：

研究者番号（8桁）：

(2) 研究協力者

研究協力者氏名：Dick, Josef

ローマ字氏名：(DICK, Josef)

研究協力者氏名：鈴木 航介

ローマ字氏名：(SUZUKI, Kosuke)

研究協力者氏名：芳木 武仁

ローマ字氏名：(YOSHIKI, Takehito)

研究協力者氏名：Giles, Michael

ローマ字氏名：(GILES, Michael)

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属されます。