

**科学研究費助成事業 研究成果報告書**

平成 28 年 6 月 9 日現在

機関番号：15401

研究種目：挑戦的萌芽研究

研究期間：2012～2015

課題番号：24654019

研究課題名(和文) 準モンテカルロ点集合の新評価指標

研究課題名(英文) New figure of merits for quasi-Monte Carlo point set

研究代表者

松本 眞 (Matsumoto, Makoto)

広島大学・理学(系)研究科(研究院)・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)：科学の広範な分野において、高次元空間上の積分の数値計算があらわれる。モンテカルロ法が有効な手段だが、 $N$ 点サンプルをとった時の誤差のオーダーは $N$ の $-1/2$ 乗で大きい。準モンテカルロ法はこれを改良し、空間内に超一様に配置された $N$ 点をサンプルとすることで誤差を減らす手法である。本研究では、「点集合の超一様性の評価指標」として、(1)誤差評価に直結し、(2)指標自体の計算が高速、なものを開発した。さらに、次元が高い時にも有用に働くように、微分感受性パラメーターを導入した。点集合はホームページ上に公開した。また、数値実験により、本点集合が既存のアルゴリズムより優位であることを実験的に示した。

研究成果の概要(英文)：Numerical integration over a high dimensional space appears in many area in sciences. A major algorithm is Monte Carlo method, but the order of the estimated error, inverse of square root of  $N$ , where  $N$  is the size of point sets, is relatively large. Quasi-Monte Carlo method is to choose a "good" point set to make the error much smaller. In this research, as a criterion on the hyper uniformity of point sets, Walsh figure of merit is introduced. It directly bounds the integration error, and it is efficiently computable. More over, we introduced "derivation sensitivity parameter", which makes the point set effective for higher dimensions. The point set is available from a homepage. We conducted several numerical experiments, which show advantages of the proposed point sets over existing ones.

研究分野：擬似乱数、準モンテカルロ法

キーワード：準モンテカルロ法 数値積分

### 1. 研究開始当初の背景

高次元空間上の数値積分は、科学の広範な分野で現れる。もっとも広く使われているのはモンテカルロ法であるが、近年これを高速化する準モンテカルロ法の研究が盛んになっている。準モンテカルロ法では、一様性が高い点集合を構成することが必要であるが、様々な「一様性の評価指標」があり、計算が困難であるなどの問題があった。

### 2. 研究の目的

上述のモンテカルロ法は有効な手段だが、 $N$ 点サンプルをとった時の誤差のオーダーは $O(N^{-1/2})$ になる。準モンテカルロ法はこれを改良し、空間内に超一様に配置された $N$ 点をサンプルとすることで誤差を $O(N^{-1+\epsilon})$ に減らす手法であり、有用である。ここで主要な問題の一つは、「点集合の超一様性の評価指標として、(1)誤差評価に直結し、(2)指標自体の計算が高速、という二条件を同時に満たすものが無かった」点にある。研究代表者は2011年に、この二条件を満たすと思われる指標を発見した。これにより、準モンテカルロ法点集合間に優劣順位を与えることができ、従来は非現実的であったランダム・サーチなどにより高性能点集合を構成することが目的である。

### 3. 研究の方法

Digital Net という有限体を用いた点集合の構成法がある。ベースが2のDigital ネットとは、以下のように構成される。実区間 $[0,1]$ の元は、2進小数展開を介して、 $0,1$ の可算列をあたえる。 $GF(2)$ で2元体をあらわすとすると、 $[0,1]$ から $GF(2)$ の可算直積への写像が作られる。逆に、 $GF(2)$ の可算直積にたいし、それを桁とした2進小数を対応づけることで、 $[0,1]$ への写像ができる。 $GF(2)$ の可算直積から測度が0の集合を取り除くと、この写像は測度を保つ一対一写像である。Digital Net とは、この同一視により、 $GF(2)$ 線形空間の構造を持つ点集合のことである。これに対し、我々はWalsh Figure of Merit と名付けた評価基準を導入した。 $d$ 次元超立方体 $[0,1]^d$ を $n$ 桁で打ち切り $GF(2)^{nd}$ と同一視する。その線形部分空間 $P$ を点集合とする。 $GF(2)^{nd}$ の元 $A$ にはDick weight  $\mu(A)$ が定義される。 $P$ の直交空間上で、 $2^{-\mu(A)}$  (ただし $A=0$ を除く)の和をとったものが $P$ のWAFOM値である。それが数値積分誤差を上から抑えること、並びに少ない計算量で計算できることを示した。この結果をもちいて、理論的研究としてWAFOMの上限・下限を求めること、すなわちWAFOMにより真に高速な数値積分が可能かを調べた。そのような点集合の存在と構成について、理論面での解析および計算機を多用した数値実験を行い、実用性の観点からの研究を行った。特に、多変量正規分布など、統計や工学で広く実用されている関数を目標にした。

### 4. 研究成果

(1)低 WAFOM 値を持つ点集合のランダムサーチと、得られた点集合の数値積分での性能の評価実験。Poisson 和公式により、WAFOM 値を高速に計算できるため、点集合の基底をランダムに発生させて良い点集合を探した。おおくの滑らかな被積分関数に対し、関数の積分誤差と WAFOM 値には強い正の相関があることがわかった。また、次元が4程度ならば、ランダムサーチにより WAFOM 値が $O(N^{-2})$ 程度に減少する点集合が得られることがわかった。また、十分なめらかな被積分関数に関しては、実際に $O(N^{-2})$ に近い誤差収束が観測された。滑らかでない関数にたいしても、通常のモンテカルロ法よりも高速な誤差収束が観測されたが、一部の不連続関数ではモンテカルロ法よりも優れた結果は観測できなかった。これらの比較から、低 WAFOM 点集合はモンテカルロ法よりも悪くなることはなく、滑らかさの高い関数に置いては既存の点集合よりもはるかに誤差収束を速くすることが示された。

(2)低 WAFOM 値を持つ点集合の存在。 $O(N^{-C/s \log(N)})$ のオーダーの WAFOM 値を持つ点集合が存在することが示された。これにより、従来にはないタイプの高速な誤差収束を見せる点集合の存在が証明された。既存の結果は、任意に定数  $\epsilon$  にたいし、 $O(N^{-\epsilon})$ の誤差収束を見せる点集合が存在するというものであったが、われわれの結果はこの定数  $\epsilon$  を $C/s \log N$ という単調に増大する関数に置き換えている。

(3)他の点集合の WAFOM の観点からの改良。Niederreiter-Xing 点集合とよばれる有力な点集合が存在する。この点集合は、「 $t$ 値」と呼ばれる評価指標によって選ばれているが、 $t$ 値を変えずに WAFOM 値が小さくなるような変形を用いた点集合の探索を行った。この変形はOwen linear scramble と呼ばれるもので、準モンテカルロ法のランダム化の方法として良く知られているものであるが、これを用いて $t$ 値も WAFOM 値も低い点集合を探索するのはあたらしい試みである。結果として得られた点集合は、滑らかな関数に関して誤差収束が非常に速いだけでなく、滑らかでない関数に対しても収束が速いことが数値実験で確かめられた。

(4)微分感受性パラメータの導入。8次元以上では、ランダムサーチによっては低 WAFOM 点集合がなかなか見つからないということが数値実験的に示された。高次元では、WAFOM 値は点集合のサイズにのみ主に依存し、点集合を取り換えてもあまり小さくならない。そこで、WAFOM にパラメータを導入し、高次元でも WAFOM 値が動きやすくなるように、次元と点集合のサイズに応じてパラメータを調整した。Niederreiter-Xing 点集合からOwen-linear scramble によるランダムサーチによって得られた点集合は、数値積分実験に

において 16 次元と言った高次元でも良い誤差収束を示した。ただし、WAFOM 値を小さくするには微分感受性パラメータの値を大きくする必要があり、積分誤差は被積分関数の高階偏微分のノルムに対して感受性が高くなる。

(5)多変数指数関数の積分誤差による WAFOM 値の近似。WAFOM 値の計算には bit 演算が用いられるために、そこに計算時間がかかる。Exp(-2x<sub>1</sub>-2x<sub>2</sub>-...-2x<sub>d</sub>)という関数に対して 2 進 Digital Net による準モンテカルロ積分を行い、得られた誤差を Err とすると、WAFOM 値は上からも下からも Err の定数倍で押さえられることが分かった。上記の関数は通常の CPU で高速に計算できるため、Err を用いて低 WAFOM 点集合を探索できることが可能になった。また、この事実は、上記のような良く現れる被積分関数に対して積分誤差を小さくするためには、点集合の WAFOM 値は小さくなくてはならないということを示しており、WAFOM が準モンテカルロ法のための点集合の指標として意義深いものであることを示している。

(6)多変数正規分布の累積度数関数の計算。多変数正規分布とは、確率密度関数が

$$C \exp(-1/2 x' x)$$

で与えられる確率分布である。ここで  $x$  は分散共分散行列と呼ばれるサイズ  $d$  の正定値対称行列、 $x'$  は  $d$  次元縦ベクトル、 $x'$  はその転置を表す。この分布の累積度数関数は統計学や工学上さまざまな需要があり、Genz - Blez, Miwa らによるアルゴリズムが実装され広く使われている。しかし、Genz-Blez は誤差の収束がおそく、Miwa らのアルゴリズムは誤差は少ないものの次元の階乗の計算時間を必要とするため、9 次元程度で計算時間が爆発する。上記(5)の手法により得られた点集合を用いた数値実験結果は、これら既存のアルゴリズムよりも高速に誤差を減らすことができることを示している。ここでは、分散共分散行列が優対角になるものを対象に、Probit 変換により正定値性が保たれる範囲での変数変換を行う Gaussian Reduction of Variation という方法を導入した。Mathematica や統計ソフト R の標準計算アルゴリズムとも比較して、格段に良い性能を得ることができた。

(7)t-値の高速算法。Niederreiter により Digital Net に導入された t-値は、滑らかとはかぎらない、有界変動というより広いクラスの被積分関数に有効な点集合を与える指標である。t 値の計算には多数のベクトルの一次独立性を判定する必要がある。本研究では、MacWilliams 型の反転公式を用いて、NRT-weight の数え上げ多項式を計算する手法を与えた。これにより、t 値を高速に求めるアルゴリズムを開発した。

## 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 2 件)

1. Matsumoto, Makoto; Saito, Mutsuo; Matoba, Kyle, A computable figure of merit for quasi-Monte Carlo point sets. Math. Comp. 83 (2014), no. 287, 1233-1250. DOI://dx.doi.org/10.1090/S0025-5718-2013-02774-3 査読有

2. J. Dick, M. Matsumoto, "On the fast computation of the weight enumerator polynomial and the  $t$  value of digital nets over finite abelian groups," SIAM J. Discrete Math. 27-3 (2013), pp. 1335-1359 <http://dx.doi.org/10.1137/120893677> 査読有

[学会発表](計 3 件)

1. Makoto Matsumoto 2015/07/06-10 "WAFOM with parameter for higher QMC: Revenge of the algebraic code, Part II" 10th IMACS Seminar on Monte Carlo Methods, JKU, Linz, Austria.

2. 松本 眞 2015/04/20 愛媛代数学セミナー 準モンテカルロ法超入門(Walsh Figure of Merit からの) 愛媛大学

3. Makoto Matsumoto 2014/04/07-11 "Walsh Figure of Merit (WAFOM) for digital nets: An easy measure for higher order convergent QMC" 11th International Conference on Monte Carlo and Quasi-Monte Carlo Methods in Scientific Computing, KU Leuven, Leuven, Belgium.

[その他]

ホームページ等 <http://majiang.github.io/qmc/index.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

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

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・准教授  
研究者番号：70338218

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