数理解析研究所講究録 1240 巻 2001 年 125-132

高次元のlow discrepancy sequenceの構成

日本大学文理学部　森 真 (Makoto Mori)
College of Humanities and Sciences,
Nihon University

1 序

数値積分を擬モンテカルロ法を用いて計算するには，一様に良く分布したdiscrepancyの少ない数列 (low discrepancy sequence) が必要である．1次元のlow discreapncy sequenceでは，n 進数を用いたvan der Corput sequenceが良く知られている．この概念を拡張してNinomiya([6],[7]) は β 展開の場合に，low discrepancy sequenceを構成した．これを力学的な視点から整理することで，1次元のpiecewise linear Markov 変換からvan der Corput sequenceを定義し，それがlow discrepancy sequenceになる必要十分条件をMori([1],[2]) で与えた．その主な道具は力学系に対応するPerron–Frobenius作用素である．1次元の力学系のエルゴード的な性質を研究するのに，Perron–Frobenius作用素のスペクトルを考察するのは極めて有用な手段であることは良く知られている ([3],[4])．このことに基づいて，力学系の逆像を用いてvan der Corput sequneceを構成し，そのdiscrepancyの評価をPerron–Frobenius作用素のスペクトルによって特徴づけた．

これを2次元の場合に拡張することが本論文の目的である．高次元の場合にはPerron–Frobenius作用素のスペクトルは，大きなコアをもち，1次元の場合のように一般論を適用することができない ([5])．そこで特別に “良く混ざる” 変換を記号力学系を用いて構成し，1次元の場合と同様に，その逆像を用いてvan der Corput sequenceを構成し，それがlow discrepancyであることを示す．この方法を拡張すれば一般の高次元の場合にも，low discrepancy sequenceが構成できると思われるが，まだその証明はできていない．

2 Perron–Frobenius 作用素

$I=[0,1]^d$ を d 次元の単位区間とし，F を I からそれ自身への写像とする．このとき，

$$\int Pf(x)g(x)\,dx=\int f(F(x))g(x)\,dx \qquad (g\in L^\infty)$$

によって定義される L^1 からそれ自身への作用素を Perron–Frobenius 作用素と呼ぶ．この作用素によって，expanding な力学系のエルゴード的な性質を調べることができる．ここで expanding であるとは

$$\xi=\liminf_{n\to\infty}\frac{1}{n}\inf_{x\in I}\log|DF^{(n)}(x)|$$

とおくとき，$\xi>0$ をみたすことである．ここで DF は変換 F のヤコビアンを表す．

1. P の固有値 1 の固有空間の次元は力学系のエルゴード成分の数に等しい．さらに，$\rho(x)\geq 0$ かつ $\int\rho(x)\,dx=1$ をみたす固有関数は力学系の不変確率測度の密度関数になり，有界変動である．

2. 以下，固有値 1 が単純であるとして，固有値 1 の固有関数から作られる密度関数をもつ力学系を考える．単位円上に 1 以外の固有値を持たなければ，その力学系は混合的である．

3. P は L^1 上の作用素としては，単位円内の点全ては無限重の固有値である．P の定義域を有界変動関数に制限すると，ある $\xi\geq\xi'>0$ が存在して，$|z|<e^{-\xi'}$ 内の点(これをコアと呼ぶ) 全ては無限重の固有値であるが，円環 $e^{-\xi'}<|z|<1$ の固有値は離散的である．1 次元の場合には $\xi'=\xi$ である．

3 記号力学系，列の構成 (1 次元の場合)

F を傾きの等しい piecewise linear 変換としよう．すなわち有限集合 $\mathcal{A}$ に対応して，I を有限個に分割する区間 $\langle a\rangle$ $(a\in\mathcal{A})$ が存在して，各区間上で F は傾き β の直線のグラフをもつとする．この場合，$\beta=e^\xi$ をみたすことに注意しよう．$\mathcal{A}$ をアルファベットとよび，$\mathcal{A}$ の有限列 $w=a_1\cdots a_n$ を word とよぶ．n を w の長さよび，$|w|$ で表す．w に対応する区間

$$\bigcap_{i=1}^{n}F^{-i+1}(\langle a_i\rangle)$$

を $\langle w\rangle$ で表す．点 $x\in I$ に対して，wx で $y\in\langle w\rangle$ かつ $F^n(y)=x$ をみたす点 (もし存在すれば) を表すことにする．これは x の F^n による逆元の 1 つである．

アルファベットの元には自然な順序を考えておいて，長さ1の word に対応する点はその順序に並べて $ax, bx, \ldots$ $(a < b < \ldots)$ とする．次に長さ2の word に対応する点は，まず ax の逆元を順序にしたがって並べる．すなわち $aax, bax, \ldots$ と並べて，次に bx の逆元を $abx, bbx, \ldots$ のようになる．以下，繰り返して，

$$x, ax, bx, \ldots, aax, bax, \ldots, aaax, baax, \ldots$$

のように並べたのが我々の van der Corput 列である．Perron–Frobenius 作用素の定義より，区間 J の定義関数 1_J を考えると

$$P^n 1_J(x) = \sum_{|w|=n} 1_J(wx)\beta^{-n}$$

となる．右辺は長さ n の word に対応する点列が J をヒットする個数かける β^{-n} になっている．このことと，Perron-Frobenius 作用素のスペクトルを用いると，1次元の場合の結果が従う．

Theorem 1 ([3][4]) *1.* F を傾きの等しい *piecewise linear* 変換とする．このとき，*Perron–Frobenius* 作用素の円環 $e^{-\xi} < |z| < 1$ に固有値をもたないとき，すべての $x \in I$ について，上の *van der Corput sequence* は任意の $\varepsilon > 0$ について，N における *discrepancy* は $N^{-1+\varepsilon}$ のオーダーである．とくに F が *Markov* のときには，*low discrepancy (*オーダー $\log N/N$*)* である．

2. 円環 $e^{-\xi} < |z| < 1$ に固有値をもつときには，正の確率で $x \in I$ から作られる *van der Corput sequence* は *low discrepancy* ではない．

4 2次元の変換の構成

高次元では一般論が成立しなくなるので，特別な変換を構成する必要がある．区間 I の各点をその2進展開と同一視して，シフトを θ で表すことにする．2つの数列 s_0 と s_1 を作ろう．$s_0 = 0000\cdots$ とおく．s_1 は帰納的に構成する．s_1 の初めの長さ n の word を w_n と表そう．長さ n の word $w_n, \theta w_{n+1}, \ldots, \theta^n w_{2n}$ をいくつか選んで加えることで，長さ n のすべての word が構成できるようにとる．ここで2つの word の和は digit 毎に mod 2 でとり，桁上がりはしないものとする．このように構成するには，まず，$w_1 = 1$ とおく．これで，0 と $w_1 = 1$ で長さ1の word が構成できた．次に θs_1 の先頭の文字は何でも良いので0とおく．これで，$w_2 = 10$ が定まる．これと θw_3 で長さ2の word が全て構成できれば良いので，$w_2 = 10$ であることを考慮にいれると $\theta w_3 = 01$ でなければならない．

すなわち $w_3 = 101$ になる．実際，$w_2 = 10$ と $\theta w_3 = 01$ を適当に加え
wordがすべて構成できる．次に $\theta^2 s_1$ の2文字目は何でも良いので0と
が定まるので，s と θs は3文字目まで定まる．そこで，$\theta^2 s$ の3文字目
3のwordが全てできるように構成する．$\theta^2 s = 10\cdots$ でこれと s の初め
から3文字目を一致しないようにすればよい．したがって，$w_5 = 1010($
この方法を帰納的に行えば良い．一般的に，長さ k のwordまで構成て
すなわち，$w_k, \theta w_{k+1}, \ldots, \theta^{k-1} w_{2k-1}$ を適当に加えることで長さ k のw
とする．これで s_1 は長さ $2k-1$ まで定まっているので $2k$ 番目を0と
$\theta^k w_{2k}$ は k 番目まで定まっている．一方，$w_k, \theta w_{k+1}, \ldots, \theta^{k-1} w_{2k-1}$ によ
はすべて構成できるので，i と $0 \leq k_j < k$ $(1 \leq j \leq i)$ が存在して $\theta^k w_{2k}$
とできる．そこで，w_{2k} の $2k+1$ 番目のシンボルを $\sum_{j=1}^{i} \theta^{k_j} w_{k+k_j+1}$ の
なるように選ぶ．これで s_1 は $2k+1$ 番目まで定まった．我々に必要な
である．

Lemma 1 上の構成で得られた $w_{k+1}, \theta w_{k+2}, \ldots, \theta^k w_{2k+1}$ は長さ $k+1$
構成する．

証明． $k+1$ 個のwordの和全体で長さ $k+1$ のwordを作るのだから，
の作り方がただ1通りであることをいえば十分である．背理法で証明し
$k+1$ のwordが

$$\sum_{j=1}^{i} \theta^{k_j} w_{k+k_j} = \sum_{j=1}^{i'} \theta^{l_j} w'_{k+l_j}$$

と2通りの和によって作られたとしよう．$w + w = 0\cdots0$ に注意すれば

$$\sum_{j=1}^{i'} \theta^{l_j} w_{k+l_j} = 0\cdots0$$

となる i' と l_j が存在することと同じである．この中に $\theta^k w_{2k+1}$ が存在しな
は長さ k の $0\cdots0$ に等しくなるので帰納法の仮定に反する．一方，有
$\theta^k w_{2k} = \sum_{j=1}^{i} \theta^{k_j} w_{k+k_j-1}$ であるので，$\theta^k w_{2k+1}$ の代わりに $\sum_{j=1}^{i} \theta^{k_j} w_{k+l}$
れば，これは長さ k までは0である．これも帰納法の仮定に反するので
れた．

s_0 と s_1 を点 $x \in I$ への作用として定義する．x を2進展開して，s_0, s_1
桁上がりなしで加える．すなわち，s_0 は恒等写像である．これを用いて
構成しよう．まず．$i_1, \ldots, i_k \in \{+, -\}$ のとき，

$$s_{i_1} \cdot \theta \cdot s_{i_2} \cdot \theta \cdots s_{i_k} \cdot \theta = s_{i_1} \cdot (\theta s_{i_2}) \cdots (\theta^{k-1} s_{i_k}) \cdot \theta^k$$

であることに注意する.

Lemma 2 J を長さ $2k$ の *2* 進区間とする.

$$\bigcup_{i_1,\dots,i_k\in\{0,1\}} s_{i_1}\cdot(\theta s_{i_2})\cdots(\theta^{k-1}s_{i_k})\cdot\theta^k(J)=[0,1]$$

さらに，任意の $x\in[0,1]$ について，

$$s_{i_1}\cdot(\theta s_{i_2})\cdots(\theta^{k-1}s_{i_k})\cdot\theta^k y=x$$

をみたす $i_1,\dots,i_k$ および $y\in J$ はただ *1* 通りに定まる.

証明は s_1 の構成および Lemma 1 から明らかである.

$\vec{x}=\begin{pmatrix}x\\y\end{pmatrix}$ として，x,y の 2 進展開の最初の k を $i_1,i_2,\dots,i_k$ および $j_1,j_2,\dots,j_k$ とする．このとき

$$F^{(k)}(\vec{x})=\begin{pmatrix}s_{j_k}\cdot(\theta s_{j_{k-1}})\cdots(\theta^{k-1}s_{j_1})\cdot\theta^k x\\ s_{i_k}\cdot(\theta s_{i_{k-1}})\cdots(\theta^{k-1}s_{i_1})\cdot\theta^k y\end{pmatrix}$$

とおく．i と j の位置関係に注意しよう．この写像の逆像をもって，van der Corput sequence を構成する．すなわち，

$$\begin{pmatrix}p\\q\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}j_k\cdots j_1\\ i_k\cdots i_1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x\\y\end{pmatrix}$$

とはp,qの2進展開の初めのk桁がそれぞれ$i_1,i_2,\dots,i_k$および$j_1,j_2,\dots,j_k$で$F^{(k)}\begin{pmatrix}p\\q\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}x\\y\end{pmatrix}$ をみたす．$\begin{pmatrix}0\\0\end{pmatrix}<\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}<\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}<\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}$ と順序をつけて $\vec{x}$ の逆像を 1 次元の場合と同様に並べる.

$$\vec{x},\begin{pmatrix}0\\0\end{pmatrix}\vec{x},\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}\vec{x},\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}\vec{x},\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}\vec{x},\begin{pmatrix}00\\00\end{pmatrix}\vec{x},\begin{pmatrix}00\\10\end{pmatrix}\vec{x},\begin{pmatrix}10\\00\end{pmatrix}\vec{x},\begin{pmatrix}10\\10\end{pmatrix}\vec{x},\cdots$$

これが我々の van der Corput sequence である．以下，この列が low discrepancy であることを示す.

5 low discrepancy sequence

関数 f の積分 $\int_0^1 f(x)\,dx$ を数値的に求めるには，独立かつ一様分布にしたがう確率変数 $X_1,X_2,\dots$ を用いると大数の法則により $\frac{f(X_1)+\cdots+f(X_n)}{n}$ が $\int_0^1 f(x)\,dx$ に確率収束する.

したがって，$X_1, X_2, \dots$ の実現値 $x_1, x_2, \dots$ を用いると $\frac{f(x_1)+\cdots+f(x_n)}{n}$ は $\int_0^1 f(x)\,dx$ に近いといっても良い．さらにこの誤差は中心極限定理によれば $\frac{1}{\sqrt{n}}$ といえる．これによって積分の近似値を与える方法をモンテカルロ法という．独立な確率変数のかわりに，一様分布列を用いるのが擬モンテカルロ法である．数列 $x_1, x_2, \dots$ の discrepancy とは

$$D(n) = \sup_J \left| \frac{\#\{i \le n : x_i \in J\}}{n} - |J| \right|$$

をいう．ここで sup は d 次元の場合には I^d 内の区間 J 全体についてとり，$|J|$ は区間 J の長さ (Lebesgue 測度) である．このとき，積分との誤差については，f が有界変動関数の場合

$$\left| \frac{f(x_1) + \cdots + f(x_n)}{n} - \int_0^1 f(x)\,dx \right| \le D(n)V(f)$$

が成り立つことが知られている．ここで $V(f)$ は f の全変動である．

さらに，$d = 1, 2$ の場合には

$$|D(n)| \ge O\left(\frac{(\log n)^d}{n}\right)$$

であることが知られており，$d \ge 3$ でも成立すると予想されている．そこで，

$$|D(n)| = O\left(\frac{(\log n)^d}{n}\right)$$

をみたす一様分布列を low discrepancy sequence とよぶ．すなわち，low discrepancy sequence を用いれば，数値積分において，独立な一様分布する確率変数を用いた場合よりも良い近似が得られる．

我々の van der Corput sequence が low discreapncy であることを示そう．まず，長さ n の word に対応する部分の discrepancy を評価しよう．$D_0(n, J)$ で集合 J への長さ n の word に対応する点のヒット個数マイナス $4^n|J|$ と定義する．すなわち，長さ n 以下の word の個数は

$$N = \sum_{k=0}^{n} 4^k = \frac{4^{n+1} - 1}{3}$$

であるので，

$$\begin{aligned} D(N) &= \sup_J \left| \sum_{k=0}^{n} (D_0(k, J) + 4^k|J|) \frac{1}{N} - |J| \right| \\ &= \sup_J \left| \sum_{k=0}^{n} \frac{D_0(k, J)}{N} \right| \end{aligned}$$

が成り立つ．

区間 J がタイプ (k,l) とは 0 と 1 の列 $i_1,\dots,i_k$ と $j_1,\dots,j_l$ が存在して，$J=J_1\times J_2$ かつ J_1 はシンボル $i_1,\dots,i_k$ に対応する 2 進区間，J_2 は $j_1,\dots,j_l$ に対応する 2 進区間とする．タイプ (n,n) の正方形 J は $F^{(n)}$ で I^2 全体に広がることから，$F^{(n)}$ による逆像はただ 1 つ存在し，面積は 4^{-n} であるので，$D_0(N,J)=0$ が成り立つ．タイプ $(n+k,n-k)$ の長方形 J は，始めの $n-k$ の写像で，長さ $2k$ の word に対応する区間 $\times[0,1]$ に対応する．Lemma 2 を用いると，y 座標は任意の長さ k の word に対応する区間を含んでいることから，J は $F^{(n)}$ で I 全体に広がる．すなわち，J の中には任意の $\vec{x}$ について，$F^{(n)}$ による逆像をただ 1 つ含む．また，J の面積は 4^{-k} であることから，$D_0(n,J)=0$ をみたす．

原点を含む辺の長さが $l_1\times l_2$ の長方形 J で discrepancy が最大になるのは，$1-2^{-n}<l_1,l_2<1$ をみたすもので，その場合 $(1-2^{-n})^2$ の正方形の和集合 J_0 は，$D_0(n,J_0)=0$ になる．残るのは $(l_1+2^{-n}-1)\times 2^{-k}$ および $2^{-k}\times(l_2+2^{-n}-1)$ の長方形 $(1\le k\le n)$ が各 1 つと $(l_1+2^{-n}-1)\times(l_2+2^{-n}-1)$ の長方形が 1 つの合計 $2k+1$ 個の長方形に対応する discrepancy である．$(l_1+2^{-n}-1)\times 2^{-k}$ に含まれる $(2n-k,k)$ タイプの長方形は D_0 は 0 であるから，幅 2^{-2n+k}，高さ 2^{-k} の長方形 J_k に対応する discrepancy は，この中には高々 1 つの $F^{(n)}$ の逆像があり，面積は 4^{-n} 以下であるから，$|D_0(n,J_k)|\le 1$ である．また，$(l_1+2^{-n}-1)\times(l_2+2^{-n}-1)$ の長方形 J_n は (n,n) タイプの長方形に含まれるから，$|D_0(n,J_n)|\le 1$ である．これらを合計すれば，

$$|D_0(n,J)|\le 2\sum_{k=1}^{n}|D_0(n,J_k)|+|D_0(n,J_n)|\le 2n+1$$

となる．長さ n 以下の word の逆像に対応する数列の discrepancy は $N=\frac{4^{n+1}-1}{3}$ であるから

$$\begin{aligned}D(N)&=\sup_J\left|\sum_{k=0}^{n}\frac{D_0(k,J)}{N}\right|\\&\le\sum_{k=0}^{n}\frac{2k+1}{N}=\frac{n^2}{N}\\&=\frac{(\log_4(3N+1)-1)^2}{N}\end{aligned}$$

を得て，$O((\log N)^2/N)$ であることが証明された．一般の N については，長さ $n+1$ の逆像の始めの 4^n 個は $\begin{pmatrix}0\\0\end{pmatrix}\vec{x}$ の逆像であり，さらにその始めの 4^{n-1} 個は $\begin{pmatrix}00\\00\end{pmatrix}\vec{x}$ であることに注意する．$\frac{4^{n+2}-1}{3}>N>\frac{4^{n+1}-1}{3}$ とする．$N-\frac{4^{n+1}-1}{3}$ を 4 進展開して

$$N-\frac{4^{n+1}-1}{3}=a_04^n+a_14^{n-1}+\cdots+a_n$$

とする $(0 \leq a_i < 4)$．すなわち，a_0 個の長さ n の word に対応する discrepancy と a_1 個の長さ $n-1$ の word に対応する discrepancy などを加えればよい．したがって，合計の discrepancy は最大で

$$3\{(2n+1)+(2n-1)+\cdots+1\} = 3\{(n+1)(2n+1)-n(n+1)\} = 3(n+1)^2$$

である．これを加えても discrepancy のオーダーは $(\log N)^2/N$ である．以上により，我々の van der Corput sequence が low discrepancy であることが示された．

参考文献

[1] M.Mori, Fredholm determinant for piecewise linear transformations, Osaka J. Math., vol. 27, 81-116 (1990)

[2] M.Mori, Fredholm determinant for piecewise monotonic transformations, Osaka J. Math., vol. 29, 497-529 (1992)

[3] M.Mori, Low discrepancy sequences generated by piecewise linear Maps, Monte Carlo methods and Applications vol. 4 No.2, 141-162(1998)

[4] M.Mori, Discrepancy of sequences generated by piecewise monotone Maps, Monte Carlo Methods and Application, vol.5 No.1, 55-68(1999)

[5] M.Mori, Fredholm determinant for higher dimensional piecewise linear transformations, Japanese Journal of Mathematics, vol. 25 No.2, 317-342(1999)

[6] S.Ninomiya, Cnstructing a new class of low-discrepancy sequences by using the β-adic transformation, Math. Comput. Simul., vol. 47, 405-420, (1998).

[7] S.Ninomiya, On the discrepancy of the β-adic van der Corput sequence, Journal of Mathematical Science, J. Math. Sci. Univ. Tokyo vol. 5, 345–366(1998).