

(t, m, s) -net による数値積分の誤差評価

東京大学大学院工学系研究科 諸星穂積 (Hozumi MOROHOSI)
東京大学大学院工学系研究科 伏見正則 (Masanori FUSHIMI)

1 はじめに

本論では、 s 次元の単位立方体 $[0, 1]^s$ 上で定義された関数 $f(\mathbf{x})$ の積分値

$$I = \int_{[0,1]^s} f(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} \tag{1}$$

を準モンテカルロ法によって求め、その計算値の誤差評価法を検討する。準モンテカルロ法は多次元数値積分の手法の中で、ある程度高次元まで利用でき、かつ収束が速いという特徴をもっており、(1)の積分を後述する“差異の小さい点集合” $\{\mathbf{x}_i\} \in [0, 1]^s$ による均等重みの和

$$I_N = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(\mathbf{x}_i) \tag{2}$$

で近似する方法である。本論では、差異の小さい集合の中でも (t, m, s) -net といわれる点集合を用いたときの誤差評価法を検討する。この方法については、理論的な誤差の上界の評価式が存在するだけで、実用的に利用できるような誤差評価法が確立されていない。[5]では、scramble法とshift法という2種類の確率的誤差評価法について数値実験を行った結果を報告した。そこでは、実験的には2つの手法が与える誤差の推定値の間に大きな違いは見られないこと、また誤差を評価するための所用計算時間の比較では、shift法がscramble法よりもはるかに高速であることを示し、数値実験の結果を見る限り、実用的観点からはshift法のほうが優れていることを主張した。本論では、この2つの手法が与える誤差評価(分散)を精密に解析し、相違を明確にする。この結果より、被積分関数がどのような性質を満たしていれば、2つの手法がほぼ同じ大きさの誤差評価を与えるか、という問題に対する1つの予想を行う。

2 (t, m, s) -net のランダム化

2.1 差異の小さい点列

$f(\mathbf{x})$ を s 次元の単位立方体 $[0, 1]^s$ 上で定義された有界変動関数とする。点列 $P = \{\mathbf{x}_i\}_{i=1}^N \in [0, 1]^s$ の差異 D_N は次式で与えられる。

$$D_N = \sup_J \left| \frac{A(J; P)}{N} - V(J) \right|. \tag{3}$$

ここで \sup は $J = [0, t_1] \times \dots \times [0, t_s] \subset [0, 1]^s$ なる全ての半開区間にわたり、 $A(J; P)$ は J に含まれる P の点の個数を表す。差異の小さい点列が多次元の数値積分に有効であるとされる根拠は、次の Koksma-Hlawka の不等式である。

$$\left| \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(\mathbf{x}_i) - \int_{[0,1]^s} f(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} \right| \leq V(f) D_N. \tag{4}$$

ここで、 $V(f)$ は関数 f の (Hardy-Krause の意味での) 全変動とよばれる量である。差異の小さい点列として、以下に述べる (t, s) -sequence を用いると、 D_N が漸近的に $O((\log N)^s/N)$ となり、高次元の数値積分を高速に行なうことが可能であると考えられている。

ここで、 (t, s) -sequence の定義を述べておく [7]。そのために、いくつかの予備的定義を行なう。

定義 1 整数 $s \geq 1$ と $b \geq 2$ が与えられたとき, b を基数とする基本区間を

$$E = \prod_{j=1}^s \left[\frac{a_j}{b^{d_j}}, \frac{a_j+1}{b^{d_j}} \right) \quad (5)$$

で定義する. ここで, d_j, a_j は整数で, $d_j \geq 0, 0 \leq a_j < b^{d_j}$ を満たすものとする.

定義 2 s, m, t, b は整数で $s \geq 1, m \geq 0, 0 \leq t \leq m, b \geq 2$ とする. s 次元の単位立方体 I^s 内の点集合 $\{z_i : i = 1, \dots, b^m\}$ が, 任意の体積 b^{t-m} の基本区間にちょうど b^t 個含まれるとき, この点集合は基数 b の (t, m, s) -net であるという.

以上の定義の下で, (t, s) -sequence を次のように定義する.

定義 3 $t \geq 0$ を整数とする. 点列 $\{z_n\}$ において, 任意の整数 $k \geq 0, m > t$ に対して $\{z_n : n = kb^m, \dots, (k+1)b^m - 1\}$ が (t, m, s) -net になるとき, 基数 b の (t, s) -sequence であるという.

(t, s) -sequence としては, Sobol' 列や Faure 列が知られている. Sobol' 列は, 上記の定義に従えば, GF(2) 上の原始多項式 $p_i(x)$ を次数が低いほうから s 個とってきたとき, それらの原始多項式の次数の総和 $\sum_{i=1}^s \deg p_i(x)$ を求め, $t = \sum_{i=1}^s \deg p_i(x) - s$ とした基数 2 の (t, s) -sequence であり, Faure 列は次元 s 以上の最小の素数 p を基数とする $(0, s)$ -sequence である. 実際の計算では有限個の点しか使わないわけで, (t, s) -sequence を利用する利点は, 任意の m に対する (t, m, s) -net を容易に作成できることにある.

実際にこの点列を使って数値積分を行ないその誤差評価をしようとする, 関数の全変動を計算することは事実上不可能であるので, Koksma-Hlawka の不等式を利用することはできない. 次節以降で本論で扱う誤差評価手法を述べる.

2.2 ランダム化

以下では (t, m, s) -net を対象とし, 本論で用いる 2 つの確率的な誤差評価法を説明する. これは, (t, m, s) -net をもとにして, 確率的に独立な複数の点集合をつくり, それらで (2) を評価しそのばらつきをもとに誤差を見積もる方法である.

scramble 法

Owen[8] によって提案された方法である. 点集合 $\{z_i\}$ を (t, m, s) -net とする. $z_i = (z_1^{(i)}, \dots, z_s^{(i)})$ と座標成分で表示したとき, 各成分を $z_j^{(i)} = \sum_{k=1}^{\infty} z_{ijk} b^{-k}, 0 \leq z_{ijk} < b$ と書く. この $\{z_i\}$ から $\{x_i\}, x_i = (x_1^{(i)}, \dots, x_s^{(i)}), x_j^{(i)} = \sum_{k=1}^{\infty} x_{ijk} b^{-k}$ を次のように決める.

$$\begin{aligned} x_{ij1} &= \pi_j(z_{ij1}), \\ x_{ij2} &= \pi_{jz_{ij1}}(z_{ij2}), \\ &\vdots \\ x_{ijk} &= \pi_{jz_{ij1}z_{ij2}\dots z_{ij,k-1}}(z_{ijk}). \end{aligned} \quad (6)$$

各 π は $0, 1, \dots, b-1$ の置換で, 全置換 $b!$ 個の上で一様に分布しているとする. π_j は全ての i について各 $z_j^{(i)}$ の最初の桁を置換する. $\pi_{jz_{ij1}}$ は同様に第 2 桁を置換するが, 第 1 桁の値毎に互いに独立な置換とする. 以下同様に, 第 k 桁の置換は, $k-1$ 桁までの値に依存して決まる.

この方法は次のような操作を行なっているものと解釈できる. 積分領域を各座標軸ごとに b 分割して得られた b 個の小領域をランダムに並べ換え, 次に各小領域の中で更に b 分割を行なってランダムに並べ換えを行なう. 各小領域での並べ換えが互いに独立になるようにすることが, $\pi_{jz_{ij1}}$ という置換を用いたことに対応する. 以下分割で得られた小領域のなかで, この操作を繰り返す. もとの点集合 $\{z_i\}$ が (t, m, s) -net であれば, scramble 法によって得られる点集合 $\{x_i\}$ も, (t, m, s) -net である.

shift 法

この方法は, もともと優良格子点法に対して [2] で提案されたものである. u を $[0, 1)^s$ 上一様分布するベクトルとして, $x_i = z_i + u \pmod{1}$ とする. つまり, もとの点集合 $\{z_i\}$ を一斉にある方向

に平行移動させて、領域 $[0, 1]^s$ からはみ出した点については、周期性条件によって $[0, 1]^s$ 内に引きもどす。shift 法の場合、もとの点集合 $\{z_i\}$ が (t, m, s) -net であっても、 $\{x_i\}$ は (t, m, s) -net になるとは限らない。しかし、一様な分布をする点集合を確率的に選択するという観点からは、この方法も妥当性をもつと考えられる。

以上の確率変動を M 回独立に繰返し、それによって得られた積分の計算値を $\hat{I}^{(1)}, \dots, \hat{I}^{(M)}$ とし、これらから積分 I の推定値

$$\bar{I} = \frac{1}{M} \sum_{j=1}^M \hat{I}^{(j)}, \quad (7)$$

を求める。また、各計算値から誤差の推定値として分散

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{1}{M(M-1)} \sum_{j=1}^M (\hat{I}^{(j)} - \bar{I})^2, \quad (8)$$

を計算する。

3 誤差の確率的評価

ランダム化した (t, m, s) -net による数値積分の誤差 $I - I_N$ の平均 2 乗誤差 (分散) $E[(I - I_N)^2]$ と平均絶対値誤差 $E[|I - I_N|]$ の評価を与える。誤差の評価は、被積分関数を b 進 Haar 関数で展開したときの展開係数によって表現する。scramble 法による平均 2 乗誤差については Owen [8] が既に詳細な計算を行なっていて、表現方法は少し異なるが、ここで与える評価は、本質的に彼の与えた評価と同じである。ここでは、shift 法による誤差との違いを明確にするために、記述方法を Owen のものとは少し変えた。平均絶対値誤差については誤差の上界を与えた。また被積分関数の連続度によって、誤差の評価を表現した。

3.1 1 次元の場合の平均 2 乗誤差の評価

Owen [8] は、scramble 法による積分の 2 乗誤差の期待値を、Haar 関数を拡張した b 進 Haar 関数を用いて解析している。ここでは、1 次元の場合について、 b 進 Haar 関数を用いて scramble 法と shift 法で得られる誤差の比較を与える。なお、2 乗誤差を考える都合上、対象とする被積分関数は 2 乗可積分な関数の空間 $L_2[0, 1]$ に属すると仮定する。1 次元の b 進 Haar 関数は次のようなものである。まず、 $[0, 1]$ 上の b 個の関数 $\psi_c(x)$, $c = 0, 1, \dots, b-1$ を次のように定義する。

$$\psi_c(x) = \begin{cases} \sqrt{b} - \frac{1}{\sqrt{b}}, & \frac{c}{b} \leq x < \frac{c+1}{b}, \\ -\frac{1}{\sqrt{b}}, & \text{otherwise.} \end{cases} \quad (9)$$

$\psi_c(x)$ をもとに、 b 進 Haar 関数系 ψ_{ktc} を次のように定義する。 $k \geq 1, 0 \leq t < b^{k-1}$ を整数とする。 $\psi_c(x)$ を用いて、

$$\psi_{ktc}(x) = b^{(k-1)/2} \psi_c(b^{k-1}x - t) \quad (10)$$

とする (図 1 参照)。 b 進 Haar 関数の性質で以下で利用するものをあげる。

命題 1 ψ_{ktc} を b 進 Haar 関数、 $\{z_i\}$ を基数 b の $(t, m, 1)$ -net とすると、次がなりたつ。

a) 任意の $k \geq 1, 0 \leq t < b^{k-1}$ に対して、 ψ_{ktc} を c について和をとったものは 0 である。

$$\sum_{c=0}^{b-1} \psi_{ktc}(x) = 0. \quad (11)$$

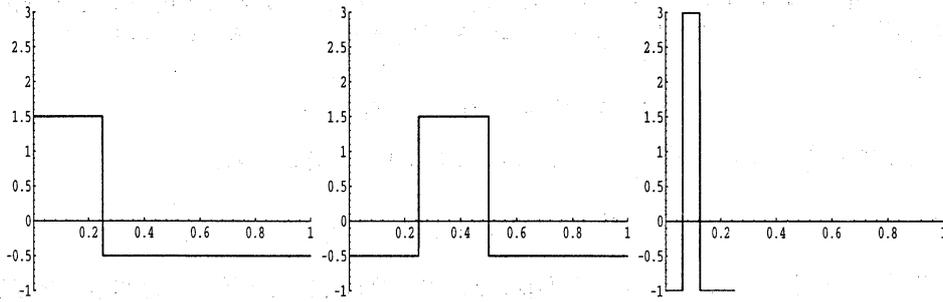


図 1: b 進 Haar 関数の例. $b = 4$ のとき, 左から $(k = 1, t = 0, c = 0)$, $(k = 1, t = 0, c = 1)$, $(k = 2, t = 0, c = 1)$ の場合.

b) ψ_{ktc} と $\psi_{k't'c'}$ の内積は, $k = k'$ かつ $t = t'$ のときのみ非零であって, $c = c'$ のとき $(b-1)/b$, $c \neq c'$ のとき $-1/b$ なる値をとる.

$$\int_0^1 \psi_{ktc}(x) \psi_{k't'c'}(x) dx = \delta_{kk'} \delta_{tt'} \left(\frac{b-1}{b} \delta_{cc'} - \frac{1}{b} (1 - \delta_{cc'}) \right). \quad (12)$$

ここで $\delta_{kk'}$ は Kronecker のデルタで, $k = k'$ のとき 1, $k \neq k'$ で 0 をとる.

c) $k \leq m - t$ なる ψ_{ktc} の $\{z_i\}$ 上の関数値の総和は 0 である.

$$\sum_{i=1}^{b^m} \psi_{ktc}(z_i) = 0, \quad \text{for } k \leq m - t. \quad (13)$$

$\{\psi_{ktc}\}_{k=1}^{\infty}$ に, $\psi_0(x) = 1, (0 \leq x < 1)$ を加える. ψ_0 については t, c は値をとらないが, 記法上まとめて $\{\psi_{ktc}\}_{k=0}^{\infty}$ とかくことにする. $\{\psi_{ktc}\}_{k=0}^{\infty}$ は命題 1 の a), b) が示すように独立ではなく, 直交もしないが, $f(x) \in L^2[0, 1)$ に対して,

$$f(x) = I + \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{t=0}^{b^k-1} \sum_{c=0}^{b-1} \langle f, \psi_{ktc} \rangle \psi_{ktc}(x) \quad (14)$$

が成り立つ. ここで, $\langle \cdot, \cdot \rangle$ は内積を表し,

$$\langle f, \psi_{ktc} \rangle = \int_0^1 f(x) \psi_{ktc}(x) dx. \quad (15)$$

である. また $I = \langle f, \psi_0 \rangle$ である. $\{\psi_{ktc}\}_{k=0}^{\infty}$ は独立ではないので, 展開係数は一意には決まらないのだが, 上式のように被積分関数 f と ψ_{ktc} の内積を係数にとることができる.

ランダム化された (t, m, s) -net による数値積分の平均 2 乗誤差は次のように表される.

$$\begin{aligned} V(\hat{I}_N) &= E[(I_N - I)^2] \\ &= E \left[\left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{t=0}^{b^k-1} \sum_{c=0}^{b-1} \langle f, \psi_{ktc} \rangle \psi_{ktc}(X_i) \right)^2 \right] \end{aligned} \quad (16)$$

期待値は $\{X_i\}$ に与えた確率構造に関するものである. ここではこの期待値の計算の, 多次元の場合の定式化を述べておく. scramble 法と shift 法のいずれの場合も, もともとの点集合 $\{z_i\}$ に対して, 領域 $[0, 1)^s$ 上の双射を確率的に選択して, この双射によって点集合の変換を行なっていると考えることができる. すなわち,

$$\tau(z_i) = \mathbf{X}_i \quad (17)$$

とし、 τ が確率的に選択されると考える。scramble 法の場合は、 b 進の l 桁目まで scramble を行なう変換を明示的に示すため $\tau_s^{(l)}$ とする。shift 法の場合を τ_t とする。 $\tau_s^{(l)}$ は次式で与えられる。 $\mathbf{z} = (z_1, z_2, \dots, z_s)$ とする。

$$\tau_s^{(l)}(\mathbf{z}) = (\pi_1^{(l)}(z_1), \dots, \pi_s^{(l)}(z_s)). \quad (18)$$

ここで、第 j 成分に作用する $\pi_j^{(l)}$, $j = 1, \dots, s$, は次のように定義する。

$$\pi_j^{(l)} = \pi_{jl} \circ \pi_{j,l-1} \circ \dots \circ \pi_{j1}$$

“ \circ ” は写像の合成を表す。 π_{j1} は、第 j 座標軸に沿って区間 $[0, 1)$ を b 等分した得られた b 個の領域 $[0, b^{-1}), [b^{-1}, 2b^{-1}), \dots, [(b-1)b^{-1}, 1)$ をランダムに並べ換える。ここでランダムとは、scramble 法の定義に対応して、 b 個の領域の全ての順列が等確率で現れることを意味する。 π_{j2} は、並べ換えをした b 個の各々の領域をさらに第 j 座標軸に沿って b 等分して、得られた小領域を各領域の中でランダムに並べ換える。すなわち、 π_{j2} は各領域 $[ib^{-1}, (i+1)b^{-1})$, $i = 0, \dots, b-1$ を b 等分した領域 $[ib^{-1}, ib^{-1} + b^{-2}), [ib^{-1} + b^{-2}, ib^{-1} + 2b^{-2}), \dots, [ib^{-1} + (b-1)b^{-2}, (i+1)b^{-1})$ をランダムに並べ換える b 個の置換からなる。以下同様に π_{jk} , $k = 3, \dots, l$ を定義する。 π_{jk} は b^k 個の置換よりなる。これらの置換は互いに独立である。

τ_t は次式で与えられる。

$$\tau_t(\mathbf{z}) = \mathbf{z} + \mathbf{u} \pmod{1} \quad (19)$$

\mathbf{u} は単位立方体上に一様分布するベクトルであり、 $\pmod{1}$ は各成分毎に 1 による剰余をとることを意味する。すなわち成分でかけば、

$$\tau_t(\mathbf{z}) = (z_1 + u_1 \pmod{1}, \dots, z_s + u_s \pmod{1})$$

である (図 2 参照)。

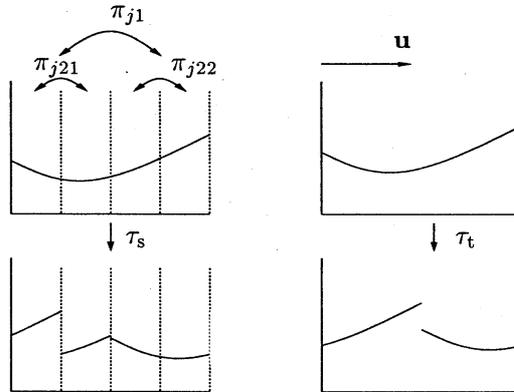


図 2: scramble 法と shift 法

この解釈を利用して、scramble 法と shift 法で計算したときの平均 2 乗誤差を求める。以下では、scramble 法と shift 法のどちらの場合でも成り立つ事柄を述べるときは、 τ を用いることにする。以上より、数値積分 (2) は以下のように表される。

$$\hat{I} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(X_i) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f \circ \tau(z_i) \quad (20)$$

分散は次のように表される。

$$V(\hat{I}_N) = \frac{1}{N^2} \sum_{i,j} \sum_{k_1, k_2} \sum_{t_1, t_2} \sum_{c_1, c_2} E[\langle f \circ \tau, \psi_{k_1 t_1 c_1} \rangle \langle f \circ \tau, \psi_{k_2 t_2 c_2} \rangle] \psi_{k_1 t_1 c_1}(z_i) \psi_{k_2 t_2 c_2}(z_j) \quad (21)$$

ここで, i, j に関する和は 1 から N までにわたる. k_1, k_2 に関する和は 1 から無限大にわたる. t_1, t_2 に関する和は, それぞれ 0 から $b^{k_1-1} - 1$, 0 から $b^{k_2-1} - 1$ にわたる. c_1, c_2 に関する和は 0 から $b-1$ にわたる. 以下, 特に明示する場合を除いて, これらの変数に関する和はこの範囲をとるものとする.

さて, scramble 法と shift 法の両方について, この分散を計算して比較する. 関数 $\psi_{k_t c}$ の台を $\text{supp } \psi_{k_t c}$ で表す. すなわち $\text{supp } \psi_{k_t c} = \{x | \psi_{k_t c}(x) \neq 0\}$ である.

補題 1 $\text{supp } \psi_{k_1 t_1 c_1} \cap \text{supp } \psi_{k_2 t_2 c_2} = \emptyset$ かつ $l \geq \min(k_1, k_2)$ のとき, または $\text{supp } \psi_{k_1 t_1 c_1} \cap \text{supp } \psi_{k_2 t_2 c_2} \neq \emptyset$ かつ $\text{supp } \psi_{k_1 t_1 c_1} \neq \text{supp } \psi_{k_2 t_2 c_2}$ かつ $l \geq \max(k_1, k_2)$ のとき, scramble 法による展開係数について $E[\langle f \circ \tau_s^{(l)}, \psi_{k_1 t_1 c_1} \rangle \langle f \circ \tau_s^{(l)}, \psi_{k_2 t_2 c_2} \rangle] = 0$ が成り立つ.

(証明) $k_1 \geq k_2$ として一般性を失わない. $\psi_{k_1 t_1 c_1}$ と $\psi_{k_2 t_2 c_2}$ の台が重ならない場合, それぞれの台の上での置換は互いに独立なので,

$$E[\langle f \circ \tau_s^{(l)}, \psi_{k_1 t_1 c_1} \rangle \langle f \circ \tau_s^{(l)}, \psi_{k_2 t_2 c_2} \rangle] = E[\langle f \circ \tau_s^{(l)}, \psi_{k_1 t_1 c_1} \rangle] E[\langle f \circ \tau_s^{(l)}, \psi_{k_2 t_2 c_2} \rangle] \quad (22)$$

である. $l \geq k_2$ であれば, $\psi_{k_2 t_2 c_2}$ のほうの期待値は,

$$E[\langle f \circ \tau_s^{(l)}, \psi_{k_2 t_2 c_2} \rangle] = \frac{1}{b} \sum_{c=0}^{b-1} \int_0^1 f(x) \psi_{k_2 t_2 c}(x) dx = 0 \quad (23)$$

となり. 命題の前半が示された. 次に台が重なるときを考える. この場合, $\psi_{k_t c}$ の構成法により一方の台が他方の台に完全に含まれるので, $k_1 > k_2$ とする. $l \geq k_1$ であれば $\tau_s^{(l)} = \pi_{1l} \circ \dots \circ \pi_{1k_1} \circ \dots \circ \pi_{1k_2} \circ \dots \circ \pi_{11}$ である. $\pi_{1k_2} \circ \dots \circ \pi_{11}$ に関する条件付き期待値を考える.

$$E[\langle f \circ \tau_s^{(l)}, \psi_{k_1 t_1 c_1} \rangle \langle f \circ \tau_s^{(l)}, \psi_{k_2 t_2 c_2} \rangle] = E[\langle f \circ \tau_s^{(l)}, \psi_{k_2 t_2 c_2} \rangle E[\langle f \circ \tau_s^{(l)}, \psi_{k_1 t_1 c_1} \rangle | \pi_{1k_2} \circ \dots \circ \pi_{11}]]$$

ここで, $E[\langle f \circ \tau_s^{(l)}, \psi_{k_1 t_1 c_1} \rangle | \pi_{1k_2} \circ \dots \circ \pi_{11}]$ の部分は, k_2 桁までの scramble を任意に固定したときの期待値である. $l \geq k_1$ なので, 上と同様

$$\begin{aligned} E[\langle f \circ \tau_s^{(l)}, \psi_{k_1 t_1 c_1} \rangle | \pi_{1k_2} \circ \pi_{11}] &= \frac{1}{b} \sum_{c=0}^{b-1} \int_0^1 f \circ \pi_{1k} \circ \pi_{11}(x) \psi_{k_1 t_1 c}(x) dx \\ &= 0 \end{aligned}$$

となり, 以上で命題が示された. ■

上記補題より, l 桁目までの scramble を行なうと, 分散の展開項のうち, $k_1, k_2 \leq l$ となる項では, $k_1 = k_2, t_1 = t_2$ となる係数のみが非零となる. $k_1 > l, k_2 \leq l$ では, $\text{supp } \psi_{k_1 t_1 c_1} \subset \text{supp } \psi_{k_2 t_2 c_2}$ かつ $\text{supp } \psi_{k_1 t_1 c_1} \neq \text{supp } \psi_{k_2 t_2 c_2}$ の場合に展開項の係数が非零となる. これは, $[b^{k_2 - k_1} t_1] = t_2$ となる場合である. $k_1, k_2 > l$ の場合は, 展開項の係数は全て非零である. 一方 shift 法の場合は, 一般に全ての $\psi_{k_1 t_1 c_1}, \psi_{k_2 t_2 c_2}$ の組に対して

$$E[\langle f \circ \tau_t, \psi_{k_1 t_1 c_1} \rangle \langle f \circ \tau_t, \psi_{k_2 t_2 c_2} \rangle] \neq 0$$

である. また (13) より $\{z_i\}$ が (t, m, s) -net であるとき $k \leq m - t$ なる $\psi(z_i)$ は $\{z_i\}$ に関する和をとると 0 になる. 以上の結果より次の補題を得る.

系 1 (t, m, s) -net $\{z_i\}$ を用いた数値積分において, l 桁目まで scramble 法を行なったときの分散は次式で表される.

$$\begin{aligned} &V_s(\hat{I}_N) \\ &= \frac{1}{N^2} \sum_{i,j} \left(\sum_{k=m-t+1}^l \sum_t \sum_{c_1, c_2} E_s[\langle f \circ \tau_s^{(l)}, \psi_{k t c_1} \rangle \langle f \circ \tau_s^{(l)}, \psi_{k t c_2} \rangle] \psi_{k t c_1}(z_i) \psi_{k t c_2}(z_j) + \right. \end{aligned}$$

$$2 \sum_{k_1 \geq l+1} \sum_{k_2 = m-t+1}^l \sum_{[b^{k_2-k_1} t_1] = t_2} \sum_{c_1, c_2} E_s \left[\langle f \circ \tau_s^{(l)}, \psi_{k_1 t_1 c_1} \rangle \langle f \circ \tau_s^{(l)}, \psi_{k_2 t_2 c_2} \rangle \right] \psi_{k_1 t_1 c_1}(z_i) \psi_{k_2 t_2 c_2}(z_j) + \left(\sum_{k_1, k_2 \geq l+1} \sum_{t_1, t_2} \sum_{c_1, c_2} E_s \left[\langle f \circ \tau_s^{(l)}, \psi_{k_1 t_1 c_1} \rangle \langle f \circ \tau_s^{(l)}, \psi_{k_2 t_2 c_2} \rangle \right] \psi_{k_1 t_1 c_1}(z_i) \psi_{k_2 t_2 c_2}(z_j) \right) \quad (24)$$

shift 法を行なったときの分散は次の式で表される。

$$V_t(\hat{I}_N) = \frac{1}{N^2} \sum_{i, j} \sum_{k_1, k_2 \geq m-t+1} \sum_{t_1, t_2} \sum_{c_1, c_2} E_t \left[\langle f \circ \tau_t, \psi_{k_1 t_1 c_1} \rangle \langle f \circ \tau_t, \psi_{k_2 t_2 c_2} \rangle \right] \psi_{k_1 t_1 c_1}(z_i) \psi_{k_2 t_2 c_2}(z_j) \quad (25)$$

この結果は、 l 桁までの scramble 法は $m-t < k \leq l$ の範囲の分散の展開項の一部を消去する効果をもつことを示している (図3 参照)。従って、scramble 法のほうが shift 法よりも、小さい分散を与える可能性があり、推定の精度はよいと考えられる。多次元の場合でも同様の結果が成り立つことを、後の節で示す。

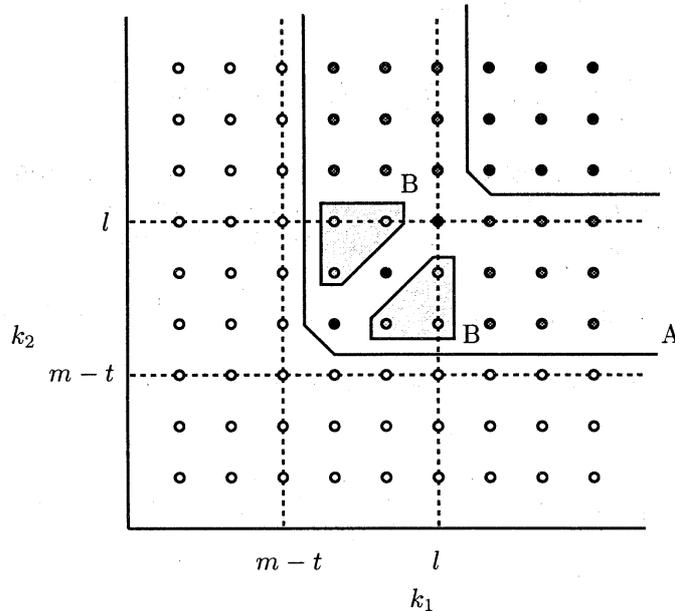


図3: scrambleによって消去される項。○で示される $\min(k_1, k_2) \leq m-t$ となる項は、 (t, m, s) -netの性質によって消去される。Aで示される領域 ($k_1, k_2 > m-t$ かつ $\min(k_1, k_2) \leq l$) では台が重ならない b 進 Haar 関数の積の項が消去される。Bの領域 ($k_1, k_2 > m-t$ かつ $\max(k_1, k_2) \leq l$) では、台が重なる (完全に一致する場合を除く) b 進 Haar 関数の積の項も消去される。

3.2 1次元の場合の平均絶対値誤差の上界

ここでは、平均絶対値誤差

$$R(I_N) = E \left[\left| \int_0^1 f(x) dx - \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i) \right| \right] \quad (26)$$

について、関数の連続度を用いた誤差の上界の評価を与える。Haar 関数による被積分関数の展開を考慮することにより次式を得る。

$$R(I_N) \leq \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{k=m-t+1}^{\infty} \sum_{t=0}^{b^{k-1}-1} \sum_{c=0}^{b-1} E[|\langle f \circ \tau, \psi_{ktc} \rangle| |\psi_{ktc}(z_i)|]. \quad (27)$$

具体的に、scramble 法と shift 法のそれぞれについて、 $E[|\langle f \circ \tau, \psi_{ktc} \rangle|]$ を計算する。scramble 法の場合は、

$$\begin{aligned} E[|\langle f \circ \tau_s^{(l)}, \psi_{ktc} \rangle|] &= \frac{1}{b^{k-1}} \sum_{t=0}^{b^{k-1}-1} \frac{1}{b} \sum_{c=0}^{b-1} \left| \int_0^1 f(x) \psi_{ktc}(x) dx \right| \\ &\leq \sup_{t,c} \left| \int_0^1 f(x) \psi_{ktc}(x) dx \right| \end{aligned} \quad (28)$$

と計算される。shift 法の場合は、 $f^*(x) = f(x \pmod{1})$ として、

$$\begin{aligned} E[|\langle f \circ \tau_t, \psi_{ktc} \rangle|] &= \frac{1}{b^{k-1}} \int_0^{b^{k-1}} \left| \int_0^1 f^*(x) \psi_{ktc}^*(x) dx \right| dt \\ &\leq \sup_{t,c} \left| \int_0^1 f^*(x) \psi_{ktc}^*(x) dx \right| \end{aligned} \quad (29)$$

と計算される。ここで、 ψ_{ktc}^* では t は $0 \leq t < b^{k-1}$ なる実数として $\psi_{ktc}^*(x) = b^{(k-1)/2} \psi_c(b^{k-1}x - t)$ と定義する。(27) と (28) より、scramble 法の平均絶対値誤差は、

$$\begin{aligned} R_s(I_N) &= \frac{1}{N} \sum_{k=m-t+1}^{\infty} \sup_{t,c} \left| \int_0^1 f(x) \psi_{ktc}(x) dx \right| \sum_{i=1}^N \sum_{t=0}^{b^{k-1}-1} \sum_{c=0}^{b-1} |\psi_{ktc}(z_i)| \\ &\leq \sum_{k=m-t+1}^{\infty} b^{k/2} \sup_{t,c} \left| \int_0^1 f(x) \psi_{ktc}(x) dx \right|. \end{aligned}$$

と評価される。2 行目の不等式は、 k を固定したとき、 i, t, c に関する和の中の非零の項は N 項であり、 $|\psi_{ktc}| < b^{k/2}$ あることより従う。さて $[0, 1)$ 上で定義された関数 f の連続度を以下のように定義する。

$$\omega_1(f; \delta) = \sup \left\{ \int_0^1 |f(x + \xi) - f(x)| dx : x + \xi \in [0, 1), 0 < \xi < \delta \right\}. \quad (30)$$

$\omega_1(f; \delta)$ を用いて Haar 展開係数の大きさを次のように評価できる。

$$\begin{aligned} \sup_{t,c} \left| \int_0^1 f(x) \psi_{ktc}(x) dx \right| &\leq \sup_{t,c} \int_0^1 |f(x) \psi_{ktc}(x)| dx \\ &\leq b^{k/2} \cdot b^{-k+1} \sup_{0 < \xi < b^{-k+1}} \int_0^1 |f(x + \xi) - f(x)| dx \\ &= b^{-k/2+1} \omega_1(f; b^{-k+1}). \end{aligned}$$

よって、次の評価を得る。

$$R_s(I_N) \leq b \sum_{k=m-t+1}^{\infty} \omega_1(f; b^{-k+1}). \quad (31)$$

ここで、連続度に対して以下の仮定を試みる。

$$\omega_1(f; b^{-k+1}) \leq C(b^{-k})^\alpha. \quad (32)$$

$\alpha > 0$ と $C > 0$ は関数 f によって決まる定数である。これは、関数 f に対する Hölder 条件にほかならない。この条件下で、 $N = b^m$ をという関係を使うと、

$$R_s(I_N) \leq Cb \sum_{k=m-t+1}^{\infty} (b^{-k})^\alpha = Cb(b^{-m+t-1})^\alpha \frac{1}{1-b^\alpha} = \frac{Cb^{\alpha(t-1)+1}}{1-b^\alpha} \frac{1}{N^\alpha}. \quad (33)$$

なる評価を得る。

shift 法の場合も同様で、

$$R_t(I_N) \leq b \sum_{i=m-t+1}^{\infty} \omega_1^*(f^*; b^{-k+1}), \quad (34)$$

となる。ここで $\omega_1^*(f^*; \delta) = \sup\{\int_0^1 |f^*(x+\xi) - f^*(x)| dx : 0 < \xi < \delta\}$ とする。

(31) と (34) より、 $\omega_1(f; \delta)$ と $\omega_1^*(f^*; \delta)$ の値によって、scramble 法と shift 法の与える推定値の平均絶対値誤差は決定されることが示された。

ここでの議論の要点は、Haar 関数による展開係数の大きさをどのように評価するかという点にある。ここではノルムとして L_1 を用いたが、 L_∞ ノルムによる連続度を用いて Hölder 条件を課して評価する方法は Sobol' [10] が既に行なっている。Haar 展開係数が対応する Haar 関数の台の容積のべき乗 $(b^{|k|})^\alpha$ によって抑えられる関数のクラスを導入する例もある [3]。

3.3 多次元の場合の平均 2 乗誤差の評価式

多次元の解析を進めるためには、多次元の b 進 Haar 関数を構成しなければならない。Owen [8] は次のように 1 次元の b 進 Haar 関数のテンソル積によって構成している。

$$\psi_{\mathbf{k}\mathbf{t}\mathbf{c}}(\mathbf{x}) = \prod_{r=1}^s \psi_{k_r t_r c_r}(x_r). \quad (35)$$

ここで、 ψ の添字は $\mathbf{k} = (k_1, \dots, k_s)$, $\mathbf{t} = (t_1, \dots, t_s)$, $\mathbf{c} = (c_1, \dots, c_s)$ を意味する。これらの添字のベクトル表現に関連して次のような表記を定義する。 $\max \mathbf{k} = \max_{1 \leq i \leq s} k_i$, $\min \mathbf{k} = \min_{1 \leq i \leq s} k_i$ とし、 $|\mathbf{k}| = \sum_{i=1}^s k_i$ とする。また \mathbf{k}_j の座標成分を $\mathbf{k}_j = (k_1^{(j)}, \dots, k_s^{(j)})$ とする。さて、このように構成した b 進 Haar 関数の性質を以下に述べる。

命題 2 $\psi_{\mathbf{k}\mathbf{t}\mathbf{c}}$ を s 次元 b 進 Haar 関数、 $\{\mathbf{z}_i\}$ を基数 b の (t, m, s) -net とする。

a) 任意の $\mathbf{k} \neq \mathbf{0}$, \mathbf{t} に対して、 c_i に関する総和は 0 になる。

$$\sum_{c_i=0}^{b-1} \psi_{\mathbf{k}\mathbf{t}\mathbf{c}}(x) = 0. \quad (36)$$

b) $\psi_{\mathbf{k}_1 \mathbf{t}_1 \mathbf{c}_1}$ と $\psi_{\mathbf{k}_2 \mathbf{t}_2 \mathbf{c}_2}$ の L_2 での内積は、以下のようになる。

$$\int \psi_{\mathbf{k}_1 \mathbf{t}_1 \mathbf{c}_1}(\mathbf{x}) \psi_{\mathbf{k}_2 \mathbf{t}_2 \mathbf{c}_2}(\mathbf{x}) dx = \prod_{i=1}^s \delta_{k_i^{(1)} k_i^{(2)}} \delta_{t_i^{(1)} t_i^{(2)}} \left(\frac{b-1}{b} \delta_{c_i^{(1)} c_i^{(2)}} - \frac{1}{b} (1 - \delta_{c_i^{(1)} c_i^{(2)}}) \right). \quad (37)$$

c) $|\mathbf{k}| \leq m - t$ について $\psi_{\mathbf{k}\mathbf{t}\mathbf{c}}$ の $\{\mathbf{z}_i\}$ 上での関数値の総和は 0 である。

$$\sum_{i=1}^{b^m} \psi_{\mathbf{k}\mathbf{t}\mathbf{c}}(\mathbf{z}_i) = 0. \quad (38)$$

証明は 1 次元の場合から直接導かれる。

$[0, 1]^s$ 上の 2 乗可積分関数 $f \in L^2[0, 1]^s$ は次のように展開される.

$$f(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{t}} \sum_{\mathbf{c}} \langle f, \psi_{\mathbf{k}\mathbf{t}\mathbf{c}} \rangle \psi_{\mathbf{k}\mathbf{t}\mathbf{c}}(\mathbf{x}) \quad (39)$$

\mathbf{k} に関する総和 $\sum_{\mathbf{k}}$ は $\sum_{k_1=0}^{\infty} \cdots \sum_{k_s=0}^{\infty}$ を表し, $\sum_{\mathbf{t}}$ は $\sum_{t_1=0}^{b^{k_1}-1} \cdots \sum_{t_s=0}^{b^{k_s}-1}$ を表し, $\sum_{\mathbf{c}}$ は $\sum_{c_1=0}^{b-1} \cdots \sum_{c_s=0}^{b-1}$ を表すものとする. 分散は 1 次元の場合と同様に以下のように表される.

$$V(\hat{I}_N) = \frac{1}{N^2} \sum_{i,j} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \sum_{\mathbf{t}_1, \mathbf{t}_2} \sum_{\mathbf{c}_1, \mathbf{c}_2} E[\langle f \circ \tau, \psi_{\mathbf{k}_1 \mathbf{t}_1 \mathbf{c}_1} \rangle \langle f \circ \tau, \psi_{\mathbf{k}_2 \mathbf{t}_2 \mathbf{c}_2} \rangle] \psi_{\mathbf{k}_1 \mathbf{t}_1 \mathbf{c}_1}(\mathbf{z}_i) \psi_{\mathbf{k}_2 \mathbf{t}_2 \mathbf{c}_2}(\mathbf{z}_j) \quad (40)$$

scramble 法の場合についての解析の基礎は, 1 次元の補題を拡張した次の補題である.

補題 2 $\text{supp } \psi_{\mathbf{k}_1 \mathbf{t}_1 \mathbf{c}_1} \cap \text{supp } \psi_{\mathbf{k}_2 \mathbf{t}_2 \mathbf{c}_2} = \emptyset$ かつ $l \geq \min(\min \mathbf{k}_1, \min \mathbf{k}_2)$ のとき, または, $\text{supp } \psi_{\mathbf{k}_1 \mathbf{t}_1 \mathbf{c}_1} \cap \text{supp } \psi_{\mathbf{k}_2 \mathbf{t}_2 \mathbf{c}_2} \neq \emptyset$ ($\text{supp } \psi_{\mathbf{k}_1 \mathbf{t}_1 \mathbf{c}_1} \neq \text{supp } \psi_{\mathbf{k}_2 \mathbf{t}_2 \mathbf{c}_2}$) かつ $l \geq \min_i(\max(k_i^{(1)}, \min k_i^{(2)}))$ のとき, scramble 法による期待値について $E[\langle f \circ \tau_s^{(l)}, \psi_{\mathbf{k}_1 \mathbf{t}_1 \mathbf{c}_1} \rangle \langle f \circ \tau_s^{(l)}, \psi_{\mathbf{k}_2 \mathbf{t}_2 \mathbf{c}_2} \rangle] = 0$ となる.

(証明) 台が重ならない場合は, 1 次元の場合と同様に, $\text{supp } \psi_{\mathbf{k}_1 \mathbf{t}_1 \mathbf{c}_1}$ と $\text{supp } \psi_{\mathbf{k}_2 \mathbf{t}_2 \mathbf{c}_2}$ の上での, 置換を独立にとることができるので,

$$E[\langle f \circ \tau, \psi_{\mathbf{k}_1 \mathbf{t}_1 \mathbf{c}_1} \rangle \langle f \circ \tau, \psi_{\mathbf{k}_2 \mathbf{t}_2 \mathbf{c}_2} \rangle] = E[\langle f \circ \tau, \psi_{\mathbf{k}_1 \mathbf{t}_1 \mathbf{c}_1} \rangle] E[\langle f \circ \tau, \psi_{\mathbf{k}_2 \mathbf{t}_2 \mathbf{c}_2} \rangle]$$

となる. $\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2$ の成分のうち, l より小さいものが少なくとも 1 つある (すなわち $l \geq \min(\min \mathbf{k}_1, \min \mathbf{k}_2)$ が成り立つ) とする. その成分が $k_i^{(2)}$ としても一般性は失わない. このとき, 以下が成り立つ.

$$\begin{aligned} E[\langle f \circ \tau, \psi_{\mathbf{k}_2 \mathbf{t}_2 \mathbf{c}_2} \rangle] &= E \left[\int \cdots \int f(\pi_1^{(l)}(x_1), \dots, \pi_1^{(l)}(x_s)) \psi_{k_1^{(2)} t_1^{(2)} c_1^{(2)}} \cdots \psi_{k_s^{(2)} t_s^{(2)} c_s^{(2)}} dx_1 \cdots dx_s \right] \\ &= E \left[\int \cdots \int \left(\frac{1}{b} \sum_{c_1=0}^{b-1} \int f(x_1, \pi_2^{(l)}(x_2), \dots, \pi_1^{(l)}(x_s)) \psi_{k_1^{(2)} t_1^{(2)} c_1^{(2)}} dx_1 \right) \right. \\ &\quad \left. \psi_{k_2^{(2)} t_2^{(2)} c_2^{(2)}} \cdots \psi_{k_s^{(2)} t_s^{(2)} c_s^{(2)}} dx_2 \cdots dx_s \right] \\ &= 0. \end{aligned}$$

台が重なる場合, 多次元の場合は $\text{supp } \psi_{\mathbf{k}_1 \mathbf{t}_1 \mathbf{c}_1} \cap \text{supp } \psi_{\mathbf{k}_2 \mathbf{t}_2 \mathbf{c}_2} \neq \emptyset$ であっても, 一方の台が他方の台に完全に含まれるとは限らない. しかし, $k_i^{(1)} > k_i^{(2)}$ となる座標 i が少なくとも存在する. その座標に着目して, 1 次元の場合のように条件付期待値を考えると, 上と同様の計算によって補題は示される. ■

この補題より, 1 次元の場合と同様に次の分散評価を得る.

系 2 (t, m, s)-net を用いた数値積分において, l 桁まで scramble 法を行なったときの分散は次式で表される.

$$\begin{aligned} &V_s(\hat{I}_N) \\ &= \frac{1}{N^2} \sum_{i,j} \left(\sum_{\substack{|\mathbf{k}| > m-t \\ \min \mathbf{k} < l}} \sum_{\mathbf{t}} \sum_{\mathbf{c}_1, \mathbf{c}_2} E[\langle f \circ \tau_s^{(l)}, \psi_{\mathbf{k}\mathbf{t}\mathbf{c}_1} \rangle \langle f \circ \tau_s^{(l)}, \psi_{\mathbf{k}\mathbf{t}\mathbf{c}_2} \rangle] \psi_{\mathbf{k}\mathbf{t}\mathbf{c}_1}(\mathbf{z}_i) \psi_{\mathbf{k}\mathbf{t}\mathbf{c}_2}(\mathbf{z}_j) + \right. \\ &\quad \left. 2 \sum_{\substack{\min \mathbf{k}_1 \geq l \\ \min \mathbf{k}_2 < l}} \sum_{\substack{|\mathbf{k}_2| > m-t \\ \text{cond. A}}} \sum_{\mathbf{c}_1, \mathbf{c}_2} E[\langle f \circ \tau_s^{(l)}, \psi_{\mathbf{k}_1 \mathbf{t}_1 \mathbf{c}_1} \rangle \langle f \circ \tau_s^{(l)}, \psi_{\mathbf{k}_2 \mathbf{t}_2 \mathbf{c}_2} \rangle] \psi_{\mathbf{k}_1 \mathbf{t}_1 \mathbf{c}_1}(\mathbf{z}_i) \psi_{\mathbf{k}_2 \mathbf{t}_2 \mathbf{c}_2}(\mathbf{z}_j) + \right. \\ &\quad \left. \sum_{\substack{\min \mathbf{k}_1 \geq l \\ \min \mathbf{k}_2 \geq l}} \sum_{\mathbf{t}_1, \mathbf{t}_2} \sum_{\mathbf{c}_1, \mathbf{c}_2} E[\langle f \circ \tau_s^{(l)}, \psi_{\mathbf{k}_1 \mathbf{t}_1 \mathbf{c}_1} \rangle \langle f \circ \tau_s^{(l)}, \psi_{\mathbf{k}_2 \mathbf{t}_2 \mathbf{c}_2} \rangle] \psi_{\mathbf{k}_1 \mathbf{t}_1 \mathbf{c}_1}(\mathbf{z}_i) \psi_{\mathbf{k}_2 \mathbf{t}_2 \mathbf{c}_2}(\mathbf{z}_j) \right). \quad (41) \end{aligned}$$

第 2 項の総和中の cond. A は次の条件を表すものとする: $\text{supp } \psi_{\mathbf{k}_1 \mathbf{t}_1 \mathbf{c}_1} \cap \text{supp } \psi_{\mathbf{k}_2 \mathbf{t}_2 \mathbf{c}_2} \neq \emptyset$, $\text{supp } \psi_{\mathbf{k}_1 \mathbf{t}_1 \mathbf{c}_1} \neq \text{supp } \psi_{\mathbf{k}_2 \mathbf{t}_2 \mathbf{c}_2}$.

shift 法を行なったときの分散は次式で表される.

$$V_t(\hat{I}_N) = \frac{1}{N^2} \sum_{i,j} \sum_{\substack{|\mathbf{k}_1| > m-t \\ |\mathbf{k}_2| > m-t}} \sum_{\mathbf{t}_1, \mathbf{t}_2} \sum_{\mathbf{c}_1, \mathbf{c}_2} E[\langle f \circ \tau_{\mathbf{t}_1}, \psi_{\mathbf{k}_1 \mathbf{t}_1 \mathbf{c}_1} \rangle \langle f \circ \tau_{\mathbf{t}_2}, \psi_{\mathbf{k}_2 \mathbf{t}_2 \mathbf{c}_2} \rangle] \psi_{\mathbf{k}_1 \mathbf{t}_1 \mathbf{c}_1}(\mathbf{z}_i) \psi_{\mathbf{k}_2 \mathbf{t}_2 \mathbf{c}_2}(\mathbf{z}_j).$$

1次元の場合と同様に, scramble 法のほうが, 消去される分散の展開項が多い. よって, scramble 法のほうが shift 法よりも, 小さい分散を与える可能性があり, 推定の精度はよいと考えられる. しかし, 後述する数値計算例の多くでは, 両者の誤差推定の結果に著しい差は認められない. このことは, 実験例の被積分関数は, これらの問題では, scramble 法では消去され, shift 法では消去されない分散の展開項が小さい値をとっており, このため誤差の推定値の差が小さかったと予想される.

3.4 多次元の場合の平均絶対値誤差の上界

1次元の場合と同様に, 多次元の平均絶対値誤差の上界を評価することができる.

$$\begin{aligned} R_s(I_N) &\leq \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{|\mathbf{k}| > m-t} \sum_{\mathbf{t}} \sum_{\mathbf{c}} E[|(f \circ \tau_s^{(i)}, \psi_{\mathbf{k} \mathbf{t} \mathbf{c}})|] |\psi_{\mathbf{k} \mathbf{t} \mathbf{c}}(\mathbf{z}_i)| \\ &\leq \frac{1}{N} \sum_{|\mathbf{k}| > m-t} \sup_{\mathbf{t}, \mathbf{c}} \left| \int_{[0,1]^s} f(\mathbf{x}) \psi_{\mathbf{k} \mathbf{t} \mathbf{c}}(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} \right| \sum_{i=1}^N \sum_{\mathbf{t}} \sum_{\mathbf{c}} |\psi_{\mathbf{k} \mathbf{t} \mathbf{c}}(\mathbf{z}_i)| \\ &\leq \sum_{|\mathbf{k}| > m-t} b^{|\mathbf{k}|/2} \sup_{\mathbf{t}, \mathbf{c}} \left| \int_{[0,1]^s} f(\mathbf{x}) \psi_{\mathbf{k} \mathbf{t} \mathbf{c}}(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} \right| \end{aligned}$$

ここで, $\psi_{\mathbf{k} \mathbf{t} \mathbf{c}}(\mathbf{x})$ の値が高々 $b^{|\mathbf{k}|/2}$ であることを用いた. $\text{supp } \psi_{\mathbf{k} \mathbf{t} \mathbf{c}}$ の容積が $b^{-|\mathbf{k}|+s}$ であることより, 展開係数の上限は以下のように抑えられる.

$$\sup_{\mathbf{t}, \mathbf{c}} \left| \int_{[0,1]^s} f(\mathbf{x}) \psi_{\mathbf{k} \mathbf{t} \mathbf{c}}(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} \right| \leq b^{-|\mathbf{k}|/2+2s} \omega_1(f; \prod_{i=1}^s [0, b^{-k_i+1}]).$$

ここで, 多次元関数の連続度は以下のように定義する.

$$\omega_1(f, \Delta) = \sup \left\{ \int_{[0,1]^s} |f(\mathbf{x}) - f(\mathbf{x} + \mathbf{y})| \, d\mathbf{x} : \mathbf{y} \in \Delta, \mathbf{x} + \mathbf{y} \in [0,1]^s \right\}.$$

これより,

$$R_s(I_N) \leq b^{2s} \sum_{|\mathbf{k}| > m-t} \omega_1(f; \prod_{i=1}^s [0, b^{-k_i+1}]) \quad (42)$$

という評価を得る. ここで, 連続度について $\omega_1(f; \prod_{i=1}^s [0, b^{-k_i+1}]) \leq C b^{-\alpha|\mathbf{k}|}$ なる仮定をすると, 直ちに

$$R_s \leq C b^{2s} \sum_{|\mathbf{k}| > m-t} b^{-\alpha|\mathbf{k}|} = C b^{2s} \sum_{k > m-t} \binom{s+k-1}{k} b^{-\alpha k} \quad (43)$$

という評価を得る. 1次元の場合と違いこれ以上計算を続けてサンプル点数 N との関係は直接導くことはできない.

なお, shift 法についても同様の議論が可能である.

4 数値実験

4.1 Genz の試験関数

Genz [4] によって提案された以下の 6 種類の関数を用いて誤差評価の有効性の実験を行った。積分区間は $[0, 1]^s$ である。各関数は s 次元で定義されており、 $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_s)$ である。各関数の後ろにはその関数の特徴が記されている。 $f_1(\mathbf{x}) = \cos(2\pi u_1 + \sum_{j=1}^s a_j x_j)$ (Oscillatory), $f_2(\mathbf{x}) = \prod_{j=1}^s (a_j^{-2} + (x_j - u_j)^2)$ (Product Peak), $f_3(\mathbf{x}) = (1 + \sum_{j=1}^s a_j x_j)^{-s-1}$ (Corner Peak), $f_4(\mathbf{x}) = \exp(-\sum_{j=1}^s a_j^2 (x_j - u_j)^2)$ (Gaussian), $f_5(\mathbf{x}) = \exp(-\sum_{j=1}^s a_j |x_j - u_j|)$ (C_0), $f_6(\mathbf{x}) = \exp(-\sum_{j=1}^s a_j x_j) 1_{x_1 > u_1} 1_{x_2 > u_2}$ (Discontinuous). f_6 で $1_{x_1 > u_1}$ は $x_1 > u_1$ なる x_1 の領域で 1, 他で 0 となる関数である ($1_{x_2 > u_2}$ も同様). u_i は $[0, 1]$ 上の一様乱数であり, a_j は $[0, 1]$ 上の一様乱数をそれぞれの f_k に対して, $\sum_{j=1}^s a_j = h_k s^{-e_k}$ となるように規格化した。規格因子である e_k, h_k については, $(e_k) = (1.5, 2, 2, 1, 2, 2)$, $(h_k) = (110, 600, 600, 100, 150, 100)$ とした ([4] で推奨している値をそのまま使った)。 a_j の値が大きいくほど数値積分は難しくなる。 u_j は関数の対称性による影響を除くためのものである。 10 次元の f_1 に対して, a_j, u_j を 10 組与え, それぞれの組で決まる f_1 について 30 回の scramble や shift を行なって式 (7) によって推定値を求めた。点列としては, Faure 列, および Sobol' 列を用いた。どの関数についても, 10 組の異なるパラメータの組に対して, 真値が推定値 $\pm 3\hat{\sigma}$ の範囲に概ね入ることが確認された。図 4, 5, 6 では, 代表例として, 各 f_k についてパラメータの値を 1 つ固定して, 横軸にサンプル点数をとり, scramble 法と shift 法双方について標本分散 $\hat{\sigma}^2$ を求め, $3\hat{\sigma}$ を誤差の推定値として表示した。点線は積分の真値である。

4.2 Feynman-Kac 径路積分

[6] は次の期待値をとる問題を, 多次元の数値積分の問題として定式化し, 準乱数による計算を行なっている。

$$E \left[\exp \left\{ - \int_0^1 V(b(\tau)) d\tau \right\} \right]$$

ここで, $b(\tau)$ はブラウン運動を表し, 全てのブラウン運動についての期待値をとるものとする。具体的には, $V(x) = \exp(-ix)$ とし, 時間の離散化を行ない,

$$\int_0^{2\pi} \int_{\mathcal{R}^s} \prod_{k=1}^s \left(1 - \frac{1}{s} \exp \left\{ i \left(x + \sqrt{\frac{1}{s}} \sum_{i=1}^k g_i \right) \right\} \right) \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \right)^s \exp \left(-\frac{g_1^2}{2} \right) \dots \exp \left(-\frac{g_s^2}{2} \right) dg_1 \dots dg_s dx$$

とし, 多次元の数値積分の例題として扱っている。この問題に誤差評価の手法を適用した。なお, 積分区間を無限区間から $[0, 1]^s$ にするために, 正規分布関数の逆関数による変数変換を行なった。図 7 に結果を示す。ここで, $s = 40$ とした。点列としては Faure 列を用い, 30 回の scramble, shift を行なった。

4.3 ヨーロピアンコールオプション

次のような多次元の積分を求める問題が, 金融工学の例として挙げられる。 $S_0 = 100, r = 0.1, \sigma = 0.3, K = 100, \Delta t = 1/52$ とした (個々の定数についての説明は省略する)。

$$\int_{\mathcal{R}^s} \max \left(S_0 \prod_{i=1}^s (1 + r\Delta t + \sigma \sqrt{\Delta t} g_i) - K, 0 \right) \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \right)^s \exp \left(-\frac{g_1^2}{2} \right) \dots \exp \left(-\frac{g_s^2}{2} \right) dg_1 \dots dg_s$$

積分は Feynman-Kac の場合と同様に正規分布関数の逆関数を用いて変数変換を行った。図 8 に結果を示す。点列としては Faure 列を用い, 30 回の scramble, shift を行なった。

5 結語

scramble 法と shift 法が与える分散は、数値実験の結果を見る限り、3 節で行った解析結果が示すほどには大きくない。これは、被積分関数がなんらかの“よい”性質をもつためであると考えられる。一つの考えとして、 b 進 Haar 関数の展開係数の性質や、被積分関数の連続度という概念からの説明をしたが、十分とはいえない。

一方、本論との直接の関係はないが、なぜ準モンテカルロ法が効率的に高次元の数値積分を行うことができるのか、という問題もある。説明の一つとして、“effective dimension”という概念が提案されている (cf. [1])。また [9] には異なる立場からの説明が見られる。これらの概念と、本論で行った誤差解析との関係も解明したい課題である。

参考文献

- [1] Caffisch, R. E., W. J. Morokoff, and A. B. Owen: Valuation of Mortgage Backed Securities Using Brownian Bridges to Reduce Effective Dimensions, *Journal of Computational Finance*, Vol. 1, pp. 27–46, 1997.
- [2] Cranley R. and T. N. L. Patterson: Randomization of Number Theoretic Methods for Multiple Integration, *SIAM Journal on Numerical Analysis*, Vol. 13, No. 6, pp. 904–914, 1976.
- [3] Entacher, K.: Quasi-Monte Carlo Methods for Numerical Integration of Multivariate Haar Series. *BIT*, Vol. 37, No. 4, pp. 846–861, 1997.
- [4] Genz, A.: Testing Multidimensional Integration Routines. In *Tools, Methods and Languages for Scientific and Engineering Computation*, B. Ford, J. C. Rault, F. Thomasset (editors), pp. 81–94, North-Holland, 1984.
- [5] 諸星穂積, 伏見正則: 準モンテカルロ法における誤差推定, 京都大学数理解析研究所講究録 1032 (確率数値解析に於ける諸問題, III), April, 1998.
- [6] Morokoff W. J. and R. E. Caffisch: Quasi-Monte Carlo Integration, *Journal of Computational Physics*, Vol. 122, pp. 218–230, 1995.
- [7] Niederreiter, H.: *Random Number Generation and Quasi-Monte Carlo Methods*. CBMS-NSF Regional Conference Series in Applied Mathematics No.63, SIAM, 1992.
- [8] Owen, A. B.: Monte Carlo Variance of Scrambled Equidistribution Quadrature. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, Vol. 34, No. 5, pp. 1884–1910, 1997.
- [9] Sloan, I. H. and H. Woźniakowski: When Are Quasi-Monte Carlo Algorithms Efficient for High Dimensional Integrals?, *Journal of Complexity*, Vol. 14, pp. 1–33, 1998.
- [10] Sobol', I. M.: Functions of Many Variables with Rapidly Convergent Haar Series. *Soviet Mathematics Doklady*, Vol. 1, pp. 655–658, 1960.

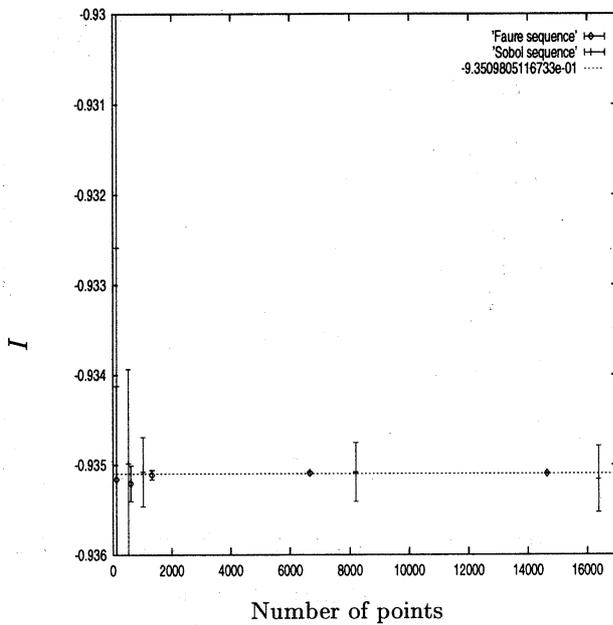
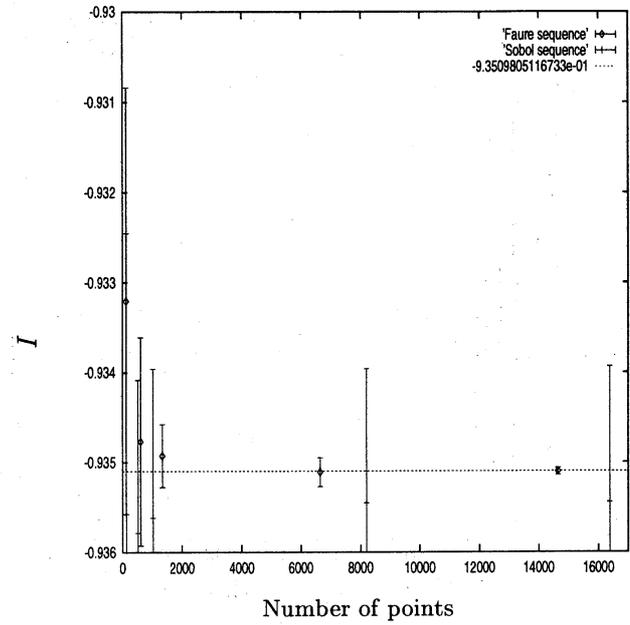
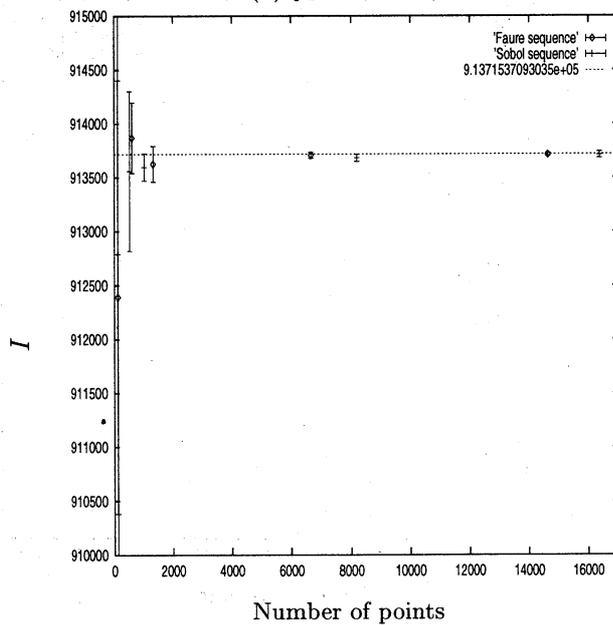
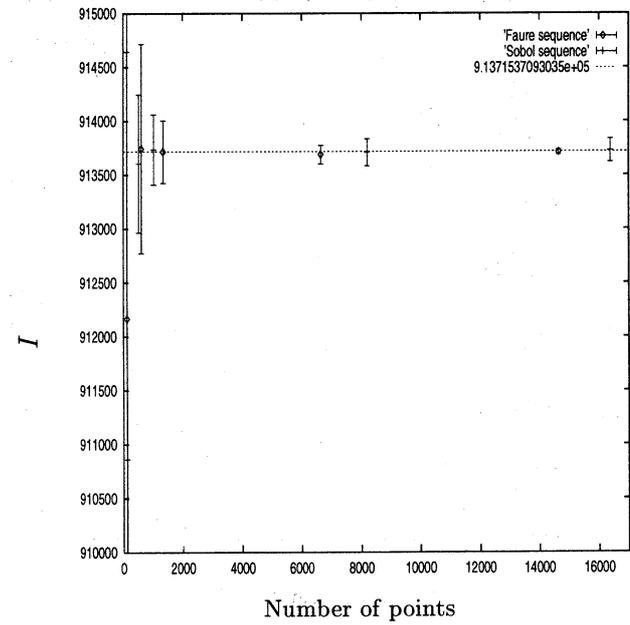
(a) f_1 scrambled(a') f_1 shifted(b) f_2 scrambled(b') f_2 shifted

図 4: Genz の試験関数に対する誤差評価 (1)

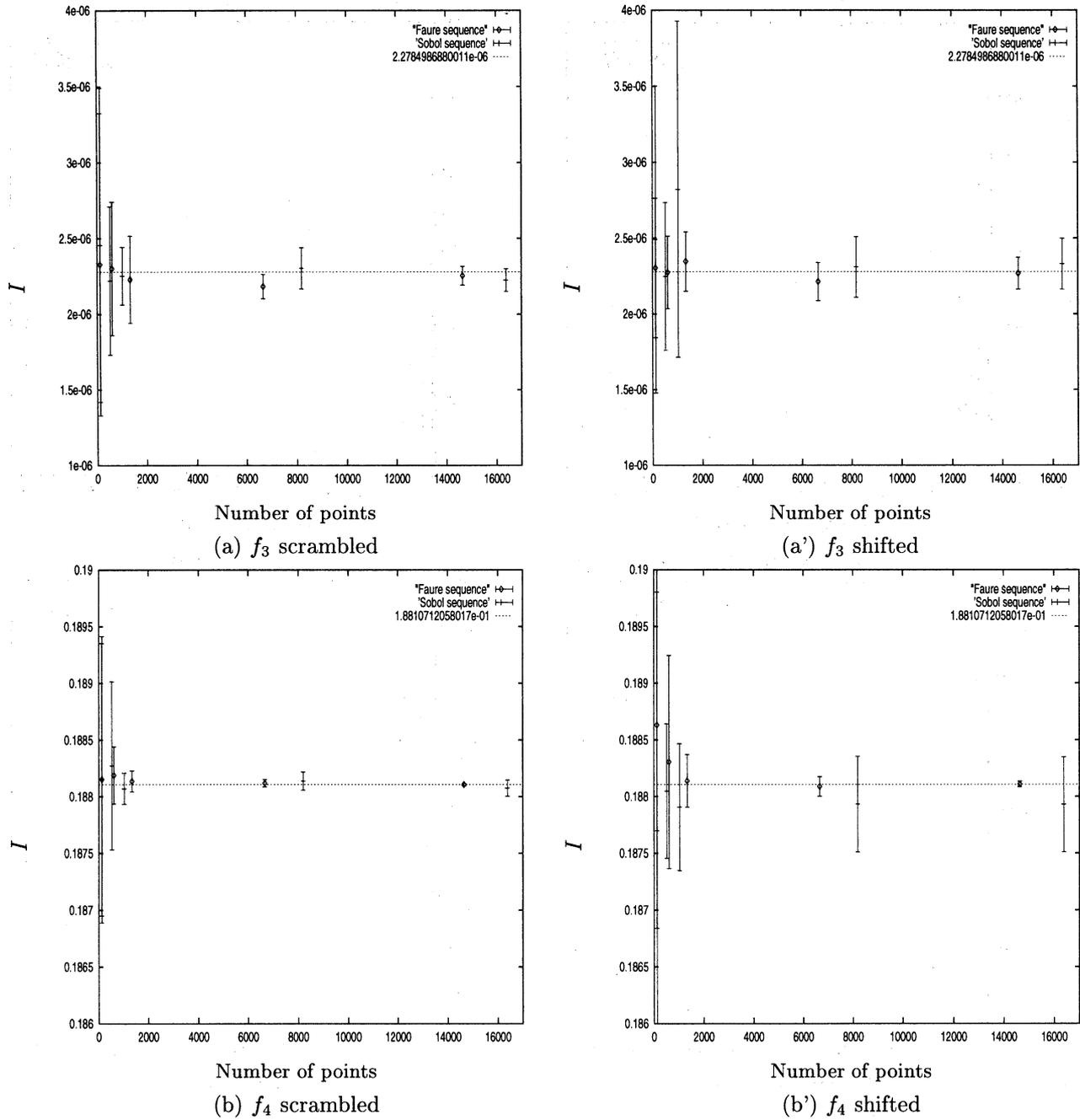
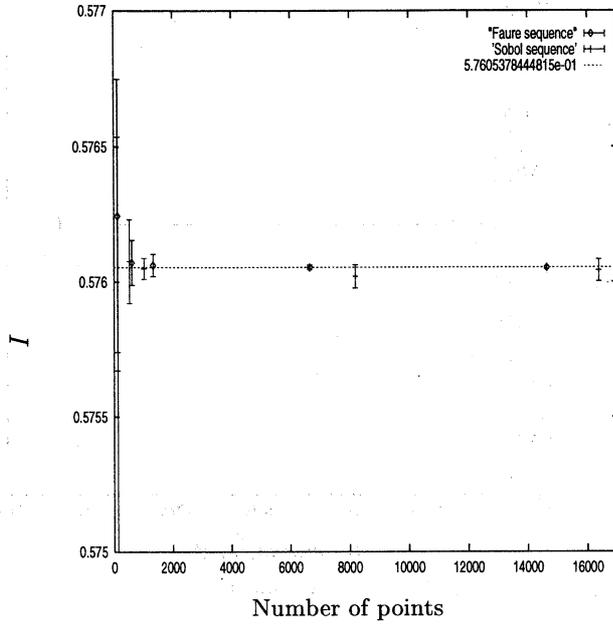
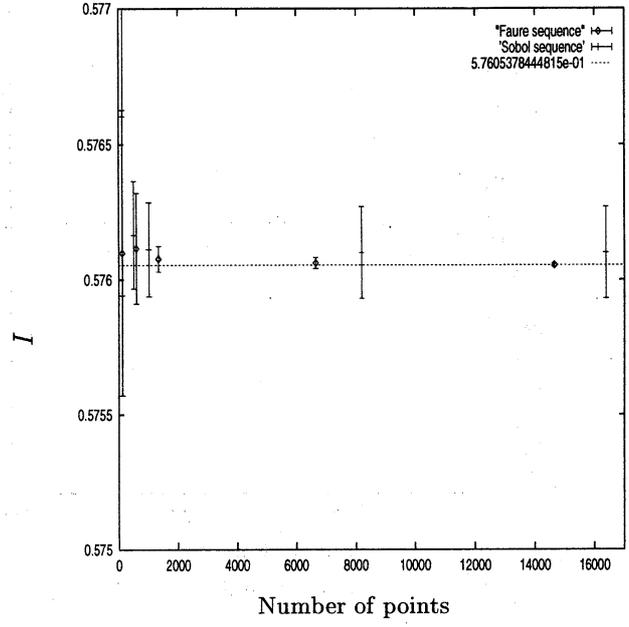


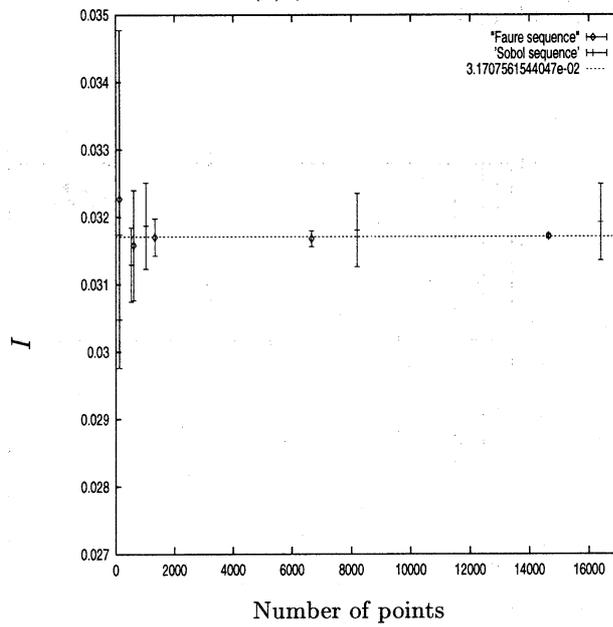
図 5: Genz の試験関数に対する誤差評価 (2)



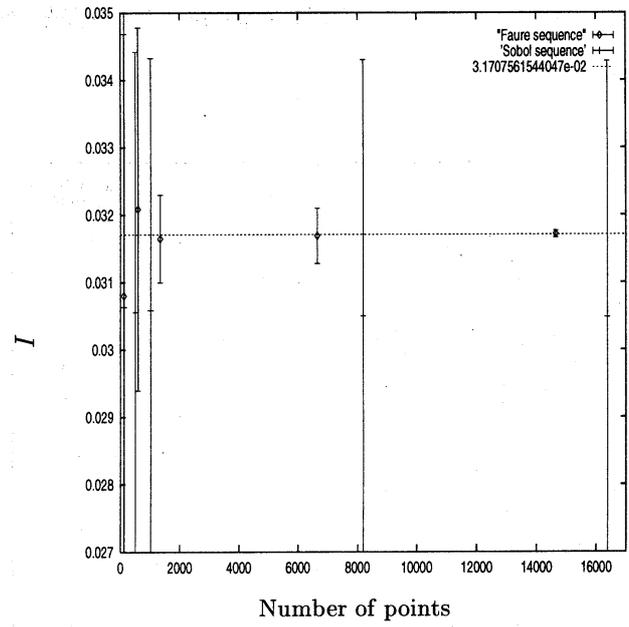
(a) f_5 scrambled



(a') f_5 shifted



(b) f_6 scrambled



(b') f_6 shifted

図 6: Genz の試験関数に対する誤差評価 (3)

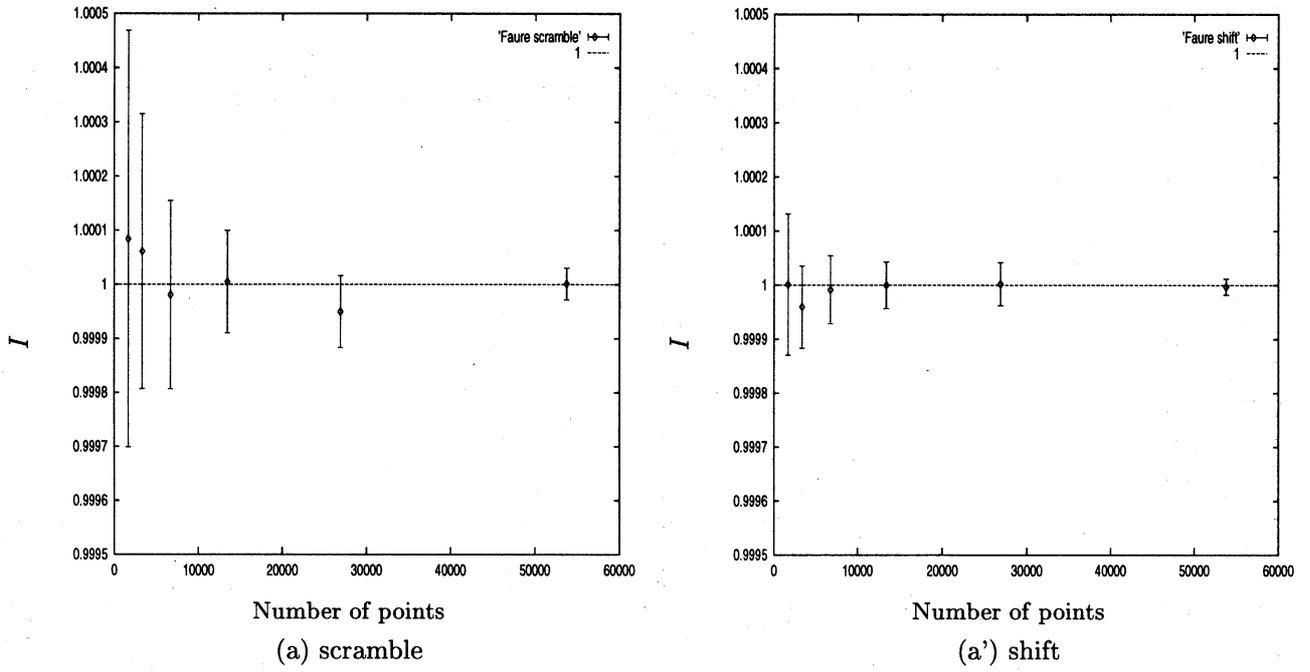


図 7: Feynman-Kac 径路積分に対する誤差評価

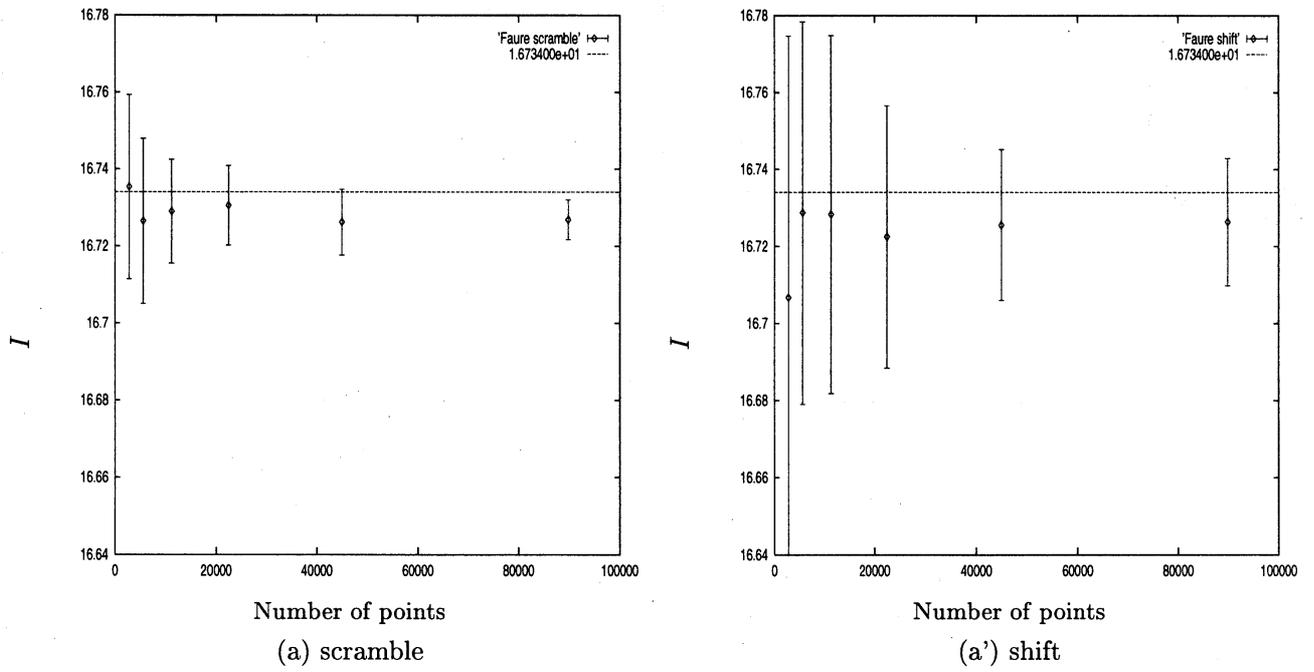


図 8: ヨーロピアンコールオプションに対する誤差評価