1996年度日本オペレーションズ・リサーチ学会
春季研究発表会

準モンテカルロ法による多次元数値積分の誤差評価

01604870　東京大学　諸星　穂積　MOROHOSI Hozumi
01501020　東京大学　伏見　正則　FUSHIMI Masanori

1　はじめに

s 次元の単位立方体 $I^s = [0,1]^s$ 上で定義された関数 $f(z)$ の積分

$$\theta_f = \int_{[0,1]^s} f(z)\mathrm{d}z$$

を，I^s 内の点列 $\{z_1, \ldots, z_N\}$ による算術平均

$$S_N = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} f(z_i)$$

によって推定することを考える．点列として準乱数と総称される決定論的な点列を用いる方法は，準モンテカルロ法と呼ばれ，多次元の数値積分法として有効であることが知られている．

準モンテカルロ法の問題点は，現実的な誤差評価の方法がないことである．本稿では，準モンテカルロ法による数値積分の誤差について，統計的な方法による誤差評価をいくつか紹介し，それぞれの方法の有効性について数値実験を行なった結果を報告する．

2　統計的な評価

点列 $\{z_i\}$ として以下に定義する (t,m,s)-net[3] を加工したものを用いる．

定義 1 整数 $b \geq 2$ が与えられたとき，I^s 中の区間で，

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

と表現できるものを 基数 b の基本区間という．ここで，d_j, a_j は非負整数で，$a_j < b^{d_j}$ を満たすものとする．m, t を非負整数とし，$t \leq m$ とする．I^s 内の点列が，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，基数 b の (t,m,s)-net であるという．

(t,m,s)-net $\{x_i\}$ から，確率的に独立になるように変動させた点列 $\{z_i\}$ を r 組生成して，$S_N^{(1)}, \ldots, S_N^{(r)}$ を計算し，推定値

$$\hat{\theta}_f = \frac{1}{r}\sum_{i=1}^{r} S_N^{(i)}$$

とその分散

$$\hat{\sigma}_f^2 = \frac{1}{r-1}\sum_{i=1}^{r}(S_N^{(i)} - \hat{\theta}_f)^2$$

を求め，$\hat{\sigma}_f^2$ で誤差を見積もる．

確率的な変動を与える方法としては，次の3種類を考える．

1. Scramble. [4] で提案された方法である．$x_i = (x_i^1, \ldots, x_i^s)$ と座標成分で表示したとき，各成分を $x_i^j = \sum_{k=1}^{\infty} x_{ijk} b^{-k}$ と b 進展開する．$\{z_i\}$, $z_i = (z_i^1, \ldots, z_i^s)$, $z_i^j = \sum_{k=1}^{\infty} z_{ijk} b^{-k}$ を次のように決める．

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

各 π は $0, 1, \ldots, b-1$ 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 x_i^j の第1桁を置換する．$\pi_{ja_{ij1}}$ は同様に第2桁を置換するが，第1桁の値に依存して決まる．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．

2. Random shift(1). $\boldsymbol{u}_i$ を $[0,1)^s$ 上一様分布する互いに独立なベクトルとする．$\boldsymbol{z}_i = \boldsymbol{x}_i + \frac{1}{b^m}\boldsymbol{u}_i$ とする．

3. Random shift(2). $\boldsymbol{u}$ は上記2と同様．$\boldsymbol{z}_i = \boldsymbol{x}_i + \boldsymbol{u} \pmod 1$ とする．

3 数値実験

[2] で提案された6種類の試験関数を用い，前節で述べた3つの方法について，推定量の精度と誤差評価の有効性を検証した．点列は [1] により $(0,m,s)$-net を発生させ利用した．図1 に試験関数の1つ $f_1(\boldsymbol{x}) = \cos(2\pi u + \sum_{j=1}^{s} a_j x_j)$ について，各方法を用いた積分の推定値の相対誤差を関数の評価点数に対してプロットした．ここで，a_j は総和が一定になるようにした非負の一様乱数，u は $[0,1)$ の一様乱数として 30 組与え，それぞれの組で決まる f_1 について 30 回の scramble や random shift を行なって推定値を求めた．図1 中の点は30組の推定値 $\hat{\theta}_{f_1}$ の相対誤差の平均を示している．

4 結語

数値実験からは，推定値の精度で3つの方法に有意な差は見られなかった．一方計算の速度の点からは，方法2, 3が方法 1 よりも圧倒的に速い．今回の実験結果をみる限り，単純な random shift のほうが誤差見積もりの手段としては有効であると思われる．なお，誤差の評価についてはいずれの方法でも適正な誤差見積もりが行なわれている．

これらの結果についての理論的背景はまだ不明である．今後の課題としたい．

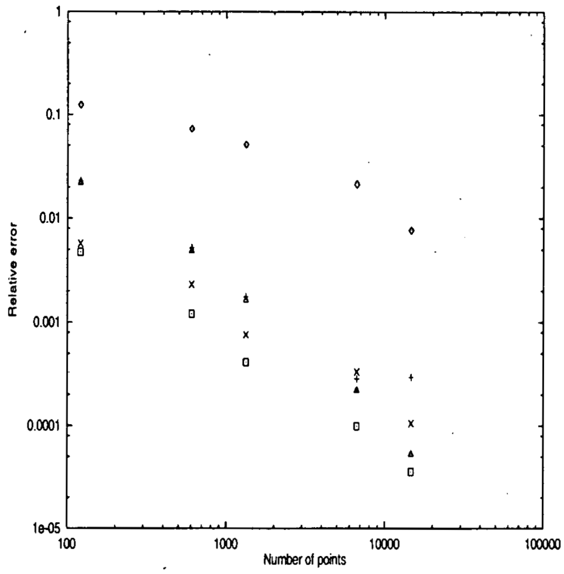

図 1: 関数 f_1 における積分の評価点数と相対誤差．◇: Monte Calro, +: Faure, ⊡: 方法1，×: 方法2，△: 方法3．

参考文献

[1] Faure, H.: Discrépance de Suites Associées à un Système de Numération (en Dimension s). Acta Arithmetica, Vol. 41, pp. 337-351, 1982.

[2] Genz, A.: Testing Multidimensional Integration Routines. In *Tools, Methods and Languages for Scientific and Engineering Computation*, B. Ford et al. eds., North-Holland, 1984.

[3] Niederreiter, H.: *Random Number Generation and Quasi-Monte Carlo Methods*. CBMS-NSF No.63, SIAM, 1992.

[4] Owen, A. B.: Ramdomly Permuted (t,m,s)-Nets and (t,s)-Sequences. Technical Report No. 464, Department of Statistics, Stanford University, September 1994.