論文の内容の要旨

論文題目

Research on Walsh figure of merit for higher order convergent Quasi-Monte Carlo integration
（高次収束準モンテカルロ積分のための Walsh figure of merit の研究）

氏名　　芳木　武仁

本研究では，数値積分法の一種である準モンテカルロ積分（Quasi-Monte Carlo integration，以下 QMC と略記）の考察を行う．QMC とは，s 次元超立方体 $[0,1)^s$ 上の関数 f の真の積分値 $I(f) := \int_{[0,1)^s} f(x)\,dx$ を，$[0,1)^s$ の有限点集合 P 上の平均

$$I_P(f) := \frac{1}{|P|}\sum_{x\in P} f(x)$$

を用いて近似する手法である [3, 5]．次元 s がある程度大きな場合でも，積分値 $I(f)$ を効率的に近似できるのが QMC の特徴である．

QMC の研究課題は，より多くの関数 f に対し QMC 積分誤差 $|\mathrm{Err}(f;P)| := |I(f) - I_P(f)|$ を同時に小さくする点集合 P を求めることである．このために $[0,1)^s$ 上の関数空間 H に属する任意の関数 f に対して，$|\mathrm{Err}(f;P)|$ を抑える Koksma-Hlawka 型不等式

（以下 KH 型不等式と略記）

$$|\mathrm{Err}(f;P)| \leq w(H;P) \times \|f\|_H$$

を構成する [3, 5]．ここで $w(H;P)$ は関数空間 H と P にしか依存しない関数，$\|f\|_H$ は H のノルムとする．この KH 型不等式から，QMC 積分誤差の上界 $w(H;P)$ が小さな P を構築することで，H に属するすべての関数 f に対して $|\mathrm{Err}(f;P)|$ が同時に小さくなることが期待される．

また QMC の研究では，点集合 P は $\mathbb{Z}_b = \mathbb{Z}/b\mathbb{Z}$ 加群の構造が入った digital net over $\mathbb{Z}_b$ [5] を扱うことが多い．本研究も点集合 P は digital net であるとする．特に $b = 2$ の場合を扱う．

古典的な QMC の研究では，偏導関数 $\{\frac{\partial^{n_1+\cdots+n_s}}{\partial^{n_1}x_1\ldots\partial^{n_s}x_s}f\}_{i\leq s, n_i\in\{0,1\}}$ たちが連続な関数の空間などが研究対象であった．これらの関数に対しては，点集合のサイズ N に関する QMC 積分誤差のオーダーが $O(N^{-1}\log^{s-1}N)$ となる点集合 P の構築法が知られている [3]．このオーダーは log の指数を除けば，これ以上改善できないことがわかっている [1]．

近年，高階偏導関数 $\{\frac{\partial^{n_1+\cdots+n_s}}{\partial^{n_1}x_1\ldots\partial^{n_s}x_s}f\}_{i\leq s, 0\leq n_i\leq\alpha}$ たちが連続な関数（ここでは α-smooth な関数と呼ぶ）に対する QMC が盛んに研究されるようになった [2]．α-smooth な関数たちに対しても，N に関する QMC 積分誤差のオーダーが $O(N^{-1}\log^{s-1}N)$ よりも高次の収束を起こす点集合 P の構築法が明らかになってきた [2]．

本研究でも滑らかな関数に対する QMC についての考察を行う．第一部（2,3,4 章）では，滑らかさ α が十分大きなとき，α-smooth な関数に対する KH 型不等式の上界を近似する Walsh figure of merit（WAFOM）[4, 8] を考察する．具体的には，点集合のサイズ N に関する WAFOM(P) の下界と，その下界を達成する点集合 P の存在証明を与える．さらに WAFOM のより効率的な計算手法を与える．第二部（5 章）では，α-smooth な関数に対する既存の KH 型不等式の改善を行う．

1　滑らかな関数に対する QMC と Walsh figure of merit

digital net P over $\mathbb{Z}_b$ による α-smooth な関数 f の QMC 積分誤差に対しては，以下のような KH 型不等式

$$|\mathrm{Err}(f;P)| \leq C_{s,b,\alpha} \cdot W_\alpha(P) \cdot \|f\|_\alpha \tag{1}$$

が成り立つことが知られている [2]．ここで $C_{s,b,\alpha}$ は s, b, α に依存する定数，$\|f\|_\alpha$ は α-smooth な関数に対するノルムであり $s\alpha$ 個の高階偏導関数の積分値たちの和で定義さ

れる．これまでに，点集合のサイズ N に関して $W_\alpha(P)$ のオーダーが $O(N^{-\alpha}\log^{s\alpha} N)$ をみたす点集合 P の構築法が知られている [2]．このオーダーは log の指数を除けば，これ以上改善できないことがわかっている [7]．

一方で計算機での実装では点集合のサイズ N は無限に大きくとれない．そこで N があまり大きくない場合にも，QMC 積分誤差の小さな点集合を与えるため，Matsumoto らによって，Walsh figure of merit (WAFOM) [4] が digital net P over $\mathbb{Z}_2$ に対して定義された（後に $b>2$ の場合にも一般化された [8]）．WAFOM(P) は十分大きな α に対して，QMC 積分誤差の上界 $W_\alpha(P)$ を近似する．この近似が WAFOM の高速計算を可能にし，現実的なサイズ N に対して WAFOM(P) を（つまりは QMC 積分誤差を）小さくする P を，計算機を用いて求めることが可能になった．

2 主定理

【第 2, 3 章】: WAFOM の上界と下界

筆者は，松本氏との共著で WAFOM の小さな digital nets over $\mathbb{Z}_2$ の存在を示した．具体的には，定数 $C, D, E > 0$ があって，$m > 9s$ をみたす任意の自然数 $N = 2^m$ に対して，$\mathrm{WAFOM}(P) \le EN^{-C\frac{\log N}{s}+D}$ をみたす digital net P over $\mathbb{Z}_2$ が存在することを証明した．

また筆者は，WAFOM の digital net over $\mathbb{Z}_2$ のサイズ N に関する下界も求めた．具体的には，定数 $C' > 0$ があって，$|P| = N = 2^m$ を満たす任意の digital net P over $\mathbb{Z}_2$ に対して，$\mathrm{WAFOM}(P) \ge N^{-C'\frac{\log N}{s}}$ が成り立つ．

これらの結果は，関数空間が十分な滑らかさをもつ場合，関数の QMC 積分誤差のオーダーが，任意の固定された $\alpha > 1$ に対して $O(N^{-\alpha}\log^{s\alpha} N)$ よりも早い収束が達成できることを示している．またこのオーダーは，WAFOM の小さな点集合を計算機を用いて探索する際の目安にもなる．

【第 4 章】: 効率的な WAFOM の近似

松本氏，大堀氏との共同研究により，$\exp(-2\sum_{i=1}^{s} x_i)$ の QMC 積分誤差と WAFOM との比が，上下から定数で抑えられることが明らかになった（この結果はもう少し一般的に述べられる）．この結果は，WAFOM が指数関数を含む滑らかな関数空間の QMC 積分誤差を小さくするために不可欠なものであることを示している．さらに，WAFOM を指数関数の QMC 積分誤差の計算で代替することで WAFOM の計算コストが節約できることを意味する．

【第 5 章】: 新たな Koksma-Hlawka 型不等式の構築

P が digital net over $\mathbb{Z}_b$ のとき，α-smooth な関数 f の QMC 積分誤差は，b-adic Walsh 係数 $\hat{f}(k)$ を用いて $|\mathrm{Err}(f;P)| = |\sum_{k\in P^\perp\setminus\{0\}} \hat{f}(k)|$ に書き換えることができる．ここで b-adic Walsh 係数 $\hat{f}(k)$ [6] とは，$L^2[0,1)^s$ の正規直交基底である b-adic Walsh 関数系 $(\mathrm{wal}_k)_{k\in(\mathbb{N}\cup\{0\})^s}$ に付随する一般化フーリエ係数であり，$P^\perp \subset (\mathbb{N}\cup\{0\})^s$ は，P の双対空間 [5] とよばれ P のみに依存して決まる．

筆者は，$b=2$ の場合に新たに '二進差分 $\partial_{i,n}$' を定義し，Walsh 係数と二進差分の関係を表す簡明な等式を証明した．また二進差分と微分係数を比較することで，既存の結果よりも精密な Walsh 係数の高階偏導関数による評価を得た．さらにこの Walsh 係数の評価と上述の QMC 積分誤差の $\hat{f}(k)$ による書き換えを用いて，以下の KH 型不等式を得た．

$$|\mathrm{Err}(f;P)| \leq 2^{\frac{s}{p}} \cdot W'_\alpha(P) \cdot \sup_{n_i\leq\alpha} \|f^{(n_1,\dots,n_s)}\|_{L^p}.$$

この式の上界に現れる $W'_\alpha(P)$ は，既存の KH 型不等式 (1) に登場する $W_\alpha(P)$ よりも真に小さい値をとる．また (1) に登場するノルム $\|f\|_\alpha$ は $s\alpha$ 個の高階偏導関数の積分値たちの和で定義されるため，α を増やすほどに値が発散してしまう問題があったが，この式で登場する新しいノルムではその問題も改善される．さらに (1) は α が有限な場合にのみ示されていたが，この式は $\alpha=\infty$ の場合に対しても成立する．今後，この精密な KH 型不等式を用いた QMC 積分誤差の新たな解析が期待できる．

参考文献

[1] D. Bilyk, M. T. Lacey, and A. Vagharshakyan. J. Funct. Anal., 254 (2008), 2470-2502.

[2] J. Dick. In: P. L'Ecuyer, A.B. Owen (eds.), Monte Carlo and Quasi-Monte Carlo Methods 2008, Springer, (2009), 73-96.

[3] J. Dick and F. Pillichshammer. Cambridge University Press, Cambridge, 2010.

[4] M. Matsumoto, M. Saito, and K. Matoba. Math. Comp., 83 (2014), 1233-1250.

[5] H. Niederreiter. CBMS-NSF, Philadelphia, Pennsylvania, 1992.

[6] F. Schipp, W. R. Wade, and P. Simon. With the collaboration of J. Pál. Adam Hilger Ltd., Bristol, 1990.

[7] I. F. Sharygin. Zh. Vychisl. Mat. i Mat. Fiz., 3 (1963), 370-376.

[8] K. Suzuki. arXiv:1403.7276 (2014).