パスカル三角形を用いたLow-Discrepancy Sequences構成法

5L−1

手塚 集　　　徳山 豪
日本アイビーエム株式会社東京基礎研究所*

1 はじめに

Low-discrepancy sequences は、かつては Monte Carlo 法のデランダマイゼーションに用いられるのみであったが、最近では、計算幾何学、Computer Graphics、などにも用いられるようになってきた。ここでは、パスカル三角形を用いた Low-discrepancy sequences 構成法について報告する。

2 背景

例として、モンテカルロ法による多重積分を考える。k次元単位立方体I^kにおける多重積分

$$S(f) = \int_{I^k} f(x) \quad \mathrm{d}x$$

の数値計算に台形公式などの数値積分法を多次元に拡張したものを使うと、kが5以上の時、非常に効率が悪くなるため、代わりにモンテカルロ法が用いられる。具体的には、

$$S_N(f) = \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N} f(X_n)$$

として、$S_N(f)$ を $S(f)$ の推定値にしようというものである。しかしこの方法は、$X_n (n = 1, ..., N)$ として真にランダムな点列を用いることを仮定しているため、現実には実行不可能なアルゴリズムであり、その妥協案として、擬似ランダム点列と呼ばれる決定的なアルゴリズムで生成される点列を真にランダムな点列の代わりに用いて、モンテカルロ法を行なっている。そのため、この場合の計算誤差の振舞いがどうなるかは一般にはよくわからない。

*Constrcution method of low-discrepancy sequences using Pascal's triangle, by Shu Tezuka and Takeshi Tokuyama, IBM Japan, Tokyo Research Laboratory, 1623-14, Shimotsuruma, Yamato, Kanagawa, Japan

また、ランダマイズドアルゴリズムとよばれる乱数を用いるアルゴリズムでは、その平均的な time-complexity は真の乱数を仮定して解析されている。したがって、上の場合と同様に実際の擬似乱数を用いている場合の平均的な time-complexity がどうなっているのかはわからず、またある場合にはかなり振舞いが違ってしまうことも報告されている。

こういう背景から、最近「デランダマイゼーション」とよばれる技術がかなり広く研究されるようになってきた。つまり、擬似乱数を使わずにある特殊な数列を用いて、乱数を用いるアルゴリズムからランダムネスを取り去ろうというものである。まず、そこで必要となる low-discrepancy sequences から説明する。

3 Low-discrepancy sequences

$D_N^{(k)}$は、k次元単位立方体$I^k = [0,1]^k$ における N 個の点の Discrepancy と呼ばれ、

$$D_N^{(k)} = \sup_J |\frac{A(J;N)}{N} - Vol(J)| \qquad (1)$$

で定義される。ここで、上限 sup は $J = [0,t_1) \times \cdots \times [0,t_k) \subseteq I^k$ という形のすべての領域にわたってとるものとする。また、$A(J;N)$ はJに含まれる点の個数を表し、Vol(J) はJの体積である。つまり、点列の一様分布の度合を示している。

I^k における無限列 $X_0, X_1, ...,$ が次の条件を満たす時それは、low-discrepancy sequence と呼ばれる[2]。

「任意の $N > 1$ に対して、点集合 $\{X_0, X_1, ..., X_{N-1}\}$, の discrepancy が常に

$$D_N^{(k)} \leq C_k(\log N)^k/N,$$

となる。ここで、C_k は次元 kにのみ依存する定数である。」

4 多重数値積分への応用

つぎの Koksma-Hlawka の定理に基づくデランダマイゼーションの技術が知られている [2]：任意の点列 $X_n(n = 0, ..., N-1)$ と $V(f)$ が有界であるような任意の関数 f に対して、不等式

$$|S(f) - S_N(f)| \leq V(f) D_N^{(k)}$$

が成り立つ。ここで、$V(f)$ は関数 f の Hardy-Krause の意味での変動と呼ばれ、f の変化の激しさを表す量である。この公式からわかることは、Discrepancy $D_N^{(k)}$ が小さいほど積分誤差は小さくなるという事実である。ここでは、ランダムネスは一切仮定しておらず、また誤差のオーダーが通常のモンテカルロ法の $O(N^{-1/2})$ より優れていることがその長所である。

5 (t, k)-sequences による low-discrepancy sequences の構成法

一般の k 次元における low-discrepancy sequence の構成方法については現在活発な研究がされている [1, 2, 3, 4]。ここでは、まず (t, k)-sequences の定義を述べる [2]。

定義 1 A b-ary box とは、

$$E = \prod_{h=1}^{k} [a_h b^{-d_h}, (a_h + 1) b^{-d_h})$$

であり、ここで、$d_h \geq 0$ 、$0 \leq a_h < b^{d_h}, 1 \leq h \leq k.$ は整数である。□

定義 2 $0 \leq t \leq m$ を整数とする。基底 b の (t, m, k)-net とは $[0, 1]^k$ 内の b^m 点の集合で、すべての $V(E) = b^{t-m}$ となる b-ary box E に対し $A(E; b^m) = b^t$ となっている。□

定義 3 $0 \leq t \leq m$ を整数とする。基底 b の (t, k)-sequence, $X_0, X_1, ...,$ とは $[0, 1]^k$ 内の無限点列で、すべての整数 $j \geq 0$ and $m > t$ に対し, $jb^m \leq n < (j+1)b^m$ となる点 X_n の集合が基底 b の (t, m, k)-net になっている。□

次の定理が知られている。

定理 1 N を任意の 1 より大きい整数とする。基底 b の (t, k)-*sequence*, $X_0, X_1, ...,$ のはじめの N 点の *discrepancy* は

$$D_N^{(k)} \leq C_k b^t (\log N)^k / N,$$

となる。ここで、C_k は次元 k にのみ依存する定数である。

つまり、t が N によらない定数ならば、low-discrepancy sequences が得られる。また、$t = 0$ とできれば、理想的である。

最近、手塚 [4] は新しい (t, k)-sequences の構成方法を提案した。この結果に基づき、パスカル三角形を用いた次のような基底 p の $(0, k)$-sequences （p 素数）が得られる。つまり、I^k における点列 $X_i = (x_{i1}, ..., x_{ik})$ を、次のように定義する。整数 $0 \leq h \leq k-1$ として、

$$x_{i,h+1} = \sum_{j=0}^{m-1} e_{h+1,j+1} 2^{-j-1},$$

ここで、整数 $e_{h+1,j+1}$ は

$$e_{h+1,j+1} = \sum_{k=0}^{m-1} \sum_{q=0}^{\min(j,k)} \binom{j}{q} \binom{k}{q} h^{j+k-2q} i_k \pmod{p}$$

である。また、整数 i の 2 進表現を $(i_{m-1}, ..., i_0)$ とする。

参考文献

[1] P. Bratley, B.L. Fox, and H. Niederreiter, *Implementation and tests of low discrepancy sequences*, ACM Trans. Modeling and Computer Simulation, 2 (1992), 195-213.

[2] Niederreiter, H., *Random Number Generation and Quasi-Monte Carlo methods*, CBMS-NSF Regional Conference Series in Applied Mathematics, No. 63, SIAM, Philadelphia, Pen., 1992.

[3] Press, W.H., Flannery, B.P., Teukolsky, S.A., and Vetterling, W.T., *Numerical Recipes in C*, 2nd Edition, Cambridge University Press, Cambridge Mass., 1993.

[4] Tezuka, S., *Polynomial arithmetic analogue of Halton sequences*, ACM Trans. Modeling and Computer Simulation, 3 (1993), 99-107.