数理解析研究所講究録
第1956巻 2015年 9-15

Sobol' 列と関連する話題

東京工業大学・大学院イノベーションマネジメント研究科* 原瀬 晋
Shin Harase
Graduate School of Innovation Management
Tokyo Institute of Technology

1 はじめに

Riemann 可積分関数 $f:[0,1)^{s}\rightarrow \mathbb{R}$ に対して，s 次元積分

$$\int_{[0,1)^{s}}f(\mathbf{x})\mathrm{d}\mathbf{x}$$

の数値計算を考える．ここで，s が大きい場合，$[0,1)^{s}$ 上の一様乱数列 $\{\mathbf{u}_{k}\}$ を用いたモンテカルロ近似

$$\int_{[0,1)^{s}}f(\mathbf{x})\mathrm{d}\mathbf{x}\approx\frac{1}{N}\sum_{k=0}^{N-1}f(\mathbf{u}_{k}) \tag{1}$$

により計算する方法が考えられるが，収束が非常に遅い問題点を有する．そこで，乱数列 $\{\mathbf{u}_{k}\}$ の代わりに，強い一様性を有する点列 $\{\mathbf{x}_{k}\}$ を決定論的に選んで取り，収束を改善させる準モンテカルロ法が研究されてきた．代表的な準モンテカルロ点列として Sobol' 列があり，金融工学を中心に成功を収めている．このノートでは，準モンテカルロ法の基本的な概念である digital net，(t, m, s)-net，並びに Sobol' 列について簡単に紹介する．また，最後のセクションで，この分野の代表的な文献や最新の研究動向を記しておく．

〒152-8550 東京都目黒区大岡山 2-12-1 W9-115 (e-mail: harase@craft.titech.ac.jp)

2 Digital net

$\mathbb{F}_2 := \{0,1\}$ を 2 元体とし，以下 $\mathbb{F}_2$ 上で四則演算を行うものとする．準モンテカルロ点集合 P を得るために，*digital net* と呼ばれる枠組みが知られている (詳細は [7, 18]).

定義 1 (Digital net)　自然数 $s \geq 1, m \geq 1$ に対して $C_1, \ldots, C_s \in \mathbb{F}_2^{m \times m}$ を $m \times m$ 行列とし，生成行列と呼ぶ．$k = 0, 1, \ldots, 2^m - 1$ に対して，k の 2 進展開を $k = \sum_{j=0}^{m-1} k_j 2^j$ とおく．各 $1 \leq i \leq s$ に対して，$(x_{k,i,0}, \ldots, x_{k,i,m-1})^T := C_i(k_0, \ldots, k_{m-1})^T \in \mathbb{F}_2^m$ と定義し，

$$x_{k,i} := \frac{x_{k,i,0}}{2} + \cdots + \frac{x_{k,i,m-1}}{2^m} \in [0,1)$$

とおく．点集合 $P := \{\mathbf{x}_k := (x_{k,1}, \ldots, x_{k,s}) \mid k = 0, \ldots, 2^m - 1\} \subset [0,1)^s$ を *digital net* と呼ぶ.

良い点集合 P を得るためには良い $C_1, \ldots, C_s$ を決定する問題に帰着される．また，$m = \infty$ と取ると，無限点列 $S := \{\mathbf{x}_k\}_{k=0}^{\infty} \subset [0,1)^s$ を得ることが出来る (但し，無限に 1 の続く 2 進展開は避けるものとする).

3 (t, m, s)-net

点集合 P の一様性を図る規準として (t, m, s)-net の t-値と呼ばれる概念がしばしば用いられる ([7, 18]).

定義 2 ((t, m, s)-net)　次元 $s \geq 1$ と非負整数 k に対して，$J = \prod_{i=1}^{s} [A_i/2^{d_i}, (A_i + 1)/2^{d_i})$ の形をした区間を次数 d の s 次元 2 進基本区間と呼ぶ．但し，$d_1, \ldots, d_s$ は $d_1 + \cdots + d_s = d$ を満たす非負整数，A_i は $0 \leq A_i < b^{d_i}$ を満たす整数とする．次数 d の s 次元 2 進基本区間の体積は 2^{-d} である．点集合 $P \subset [0,1)^s$ の要素数を 2^m とする．次数 $m - t$ の全ての s 次元 2 進基本区間が P の点を同じ数だけ (即ち，2^t 個ずつ) 含んでいるとき，P を (t, m, s)-net という．また，この条件を満たす最小の t を t-値と呼ぶ.

t-値が小さいとき，点が一様に分布しており，良い準モンテカルロ点集合と考えらる．$t = 0$ のとき最良となる．特に，$N = 2^m$ に対して，(1) 式における絶対誤差が $O(2^t (\log N)^{s-1}/N)$ となることが知られている．また，P が digital net の場合，t-値を計算する 2 つのアルゴリズム

1) 生成行列の行ベクトルの一次独立性をチェックする方法 [23]
2) 符号理論における MacWilliams 恒等式 (の改良版) を用いた方法 [6]

があり，計算速度については一長一短ある．

一方，組合せ論との関係から言えば，(t, m, s)-net の存在は mutually orthogonal Latin square (MOLS) や ordered orthogonal array (OOA) などの存在条件と等価であることが知られている ([17]，[18] の 4.2 章，[7] の 6 章などを参照)．

4 Sobol' 列

Sobol' [24] は 1967 年に準モンテカルロ点列の構成法を発表した．現在，この点列は Sobol' 列と呼ばれている．Sobol' 列は次のような digital net として定式化出来る ([27] など)．各次元 $1 \leq i \leq s$ に対して，生成行列 $C_i \in \mathbb{F}_2^{\infty \times \infty}$ を以下のように決める：

1) $p_1(x) := x$ とおき，$2 \leq i \leq s$ に対して $p_i(x)$ を次数により順番に並べられた $(i-1)$ 番目の $\mathbb{F}_2$ 上の原始既約多項式とする (即ち $p_2(x) := x+1, p_3(x) := x^2+x+1, \ldots$)．次数 $e_i := \deg p_i(x)$ とおく．
2) 各 $1 \leq i \leq s$ に対して，$\deg g_{i,l}(x) = e_i - 1 - l$ なる多項式 $g_{i,0}(x), \ldots g_{i,e_i-1}(x)$ を予め準備しておく．
3) $j = 1, 2, \ldots$ に対して，形式的べき級数展開

$$\frac{g_{i,l}(x)}{p_i(x)^j} = \sum_{r=1}^{\infty} a^{(i)}(j, l, r) x^{-r} \in \mathbb{F}_2((x^{-1})) \tag{2}$$

を考える．

このとき，生成行列

$$C_i = (c_{j,r}^{(i)})_{j \geq 1, r \geq 1}$$

を $c_{j,r}^{(i)} = a^{(i)}(Q+1, l, r) \in \mathbb{F}_2$ により定める．つまり，生成行列の各行が (2) の一つの形式的べき級数に対応する．但し，非負整数 Q と l は $j - 1 = Qe_i + l$ 及び $0 \leq l < e_i$ を満たすものとする．これは，生成行列が上三角行列となるように (2) を並べることに対応している (並べ方は一意的に決まる)．このような $C_1, \ldots, C_s \in \mathbb{F}_2^{\infty \times \infty}$ によって生成される点列を Sobol' 列と呼ぶ (生成行列は上三角行列なので前の点を保持したまま m を増加させることが出来て無限点列が得られる)．また，最初の 2^m 個の出力を (t, m, s)-net として見た際に，

- 任意の m に対して点集合 P の t-値は $\leq \sum_{i=1}^{s}(e_i - 1)$ となること
- 各 1 次元プロジェクションは $(0, m, 1)$-net となり最良であること

が証明できる (前者は証明に部分分数分解の一意性を使う). 特に, 任意のプロジェクションを考えても, その t-値は $\leq \sum(e_i - 1)$, 即ち, 対応するプロジェクションの $(e_i - 1)$ の和で上から抑えられる (詳細は [7, 18] を参照せよ).

ここで, 多項式 $g_{i,0}(x), \ldots g_{i,e_i-1}(x)$ の取り方は, 各

$$g_{i,l}(x) = x^{e_i-1-l} + (\text{低次の項}) \in \mathbb{F}_2[x]$$

の低次の項をパラメータとして自由に取ることができる. この項を適切に選ぶと, 上述の上限より t-値を小さくできる可能性がある. Joe–Kuo[12] は 2 次元プロジェクションの t-値がなるべく小さくなるようにパラメータを決め, 21201 次元までの生成行列を与えている. 生成行列は `http://web.maths.unsw.edu.au/~fkuo/sobol/` から入手出来る.

他の準モンテカルロ点列として, 代数幾何を用いた Niederreiter–Xing 列があり, あまり次元の高くない問題の場合, 極めて有効である ([19, 20, 23]).

5 今後の研究のために

最後に, 専門外の方に向けて, 準モンテカルロ法の代表的な文献及び最近の研究動向について, 解説をつけて紹介する. まず, 準モンテカルロ法の基本的な文献として, Niederreiter [18] 及び Dick–Pillichshammer [7] の 2 冊の本がある. Niederreiter [18] はこの分野の大家が自身の研究を中心にまとめた本であり, 歴史的に準モンテカルロ法の発端となった解析数論の一分野である Wyle の一様分布論, 特に, discrepancy と呼ばれる一様性の指標の定義から開始し, 重要事項に対してほとんど漏れなく証明が付けられている. より新しい結果まで記述されている本として, Dick–Pillichshammer [7] があるが, 通読するのにはやや分量が多い印象がある. 最近, Dick–Kuo–Sloan [5] によるサーベイ論文が出ており, 初学者は, まず, この論文の §2 を読むのが良いように思う. また, 実装については, digital net を発生させる際, グレイコードを用いて, 順番を入れ替えることにより, 高速化を図ることが出来る ([1, 2]).

一方, 準モンテカルロ法の重要な応用分野として金融工学がある. 準モンテカルロ法は 1980 年代まで, 比較的低次元の問題 (例えば $s \leq 12$ 程度) にしか有効でないと考えられてきたが, 90 年代の初頭から半ばにかけて, オプション価格や MBS の計算に現れる数百次元の数値積分, 場合によっては 1000 次元以上の超高次元数値積分についても, 問題によっては効果を発揮することが相次いで報告された ([21, 22] など). 金融工学に用いら

れる (準) モンテカルロ法の包括的な書籍として Glasserman [8] がある．また，収束精度を上げる手法として，ランダマイゼーション (デジタルシフト，スクランブルなど) がある．これらの情報は Lemieux[14] が詳しく，実際に金融工学へ応用する際の助けになる．L'Ecuyer [13] によるサーベイ論文も手短によくまとまっている．

最近の研究動向としては，(主に低次元の場合) 関数の滑らかさを利用することにより，従来の準モンテカルロ点集合 (即ち，誤差オーダー $O(1/N)$) よりも高次オーダーで収束する点集合の研究が盛んに行われている．まず，先駆的な仕事として，Dick [3, 4] による interlacing 法がある．松本–斎藤–Matoba [15] は，[3, 4] で証明された積分誤差の不等式を基に，digital net に対して，高速計算可能な性能評価指標 Walsh figure of Merit (WAFOM) を提案した．その後，低 WAFOM 点集合の存在と最良オーダー [16, 28]，低 WAFOM 点集合の構成 [25]，WAFOM の 2 進から b 進への拡張 [26]，デジタルシフトのための WAFOM [9]，低 WAFOM 点集合の探索 [10, 11] などの研究が進められている．

その他，定期的に開催される (準) モンテカルロ法の国際会議として Monte Carlo and Quasi-Monte Carlo Methods in Scientific Computing (MCQMC) と IMACS Seminar on Monte Carlo Methods (MCM) があり，報告集が刊行されている．また，MCQMC wiki `http://roth.cs.kuleuven.be/wiki/Main_Page` からも最先端の情報を得ることが出来る．日本語で読める文献としては [29, 30, 31, 32] を挙げておく．

参考文献

[1] Paul Bratley and Bennett L. Fox. Algorithm 659: Implementing Sobol's quasirandom sequence generator. *ACM Trans. Math. Softw.*, Vol. 14, No. 1, pp. 88–100, mar 1988.

[2] Paul Bratley, Bennett L. Fox, and Harald Niederreiter. Implementation and tests of low-discrepancy sequences. *ACM Trans. Model. Comput. Simul.*, Vol. 2, No. 3, pp. 195–213, jul 1992.

[3] Josef Dick. Explicit constructions of quasi-Monte Carlo rules for the numerical integration of high-dimensional periodic functions. *SIAM J. Numer. Anal.*, Vol. 45, No. 5, pp. 2141–2176, 2007.

[4] Josef Dick. Walsh spaces containing smooth functions and quasi-Monte Carlo rules of arbitrary high order. *SIAM J. Numer. Anal.*, Vol. 46, No. 3, pp. 1519–1553, 2008.

[5] Josef Dick, Frances Y. Kuo, and Ian H. Sloan. High-dimensional integration: the

quasi-Monte Carlo way. *Acta Numer.*, Vol. 22, pp. 133–288, 2013.

[6] Josef Dick and Makoto Matsumoto. On the fast computation of the weight enumerator polynomial and the t value of digital nets over finite abelian groups. *SIAM J. Discrete Math.*, Vol. 27, No. 3, pp. 1335–1359, 2013.

[7] Josef Dick and Friedrich Pillichshammer. *Digital nets and sequences.* Cambridge University Press, Cambridge, 2010. Discrepancy theory and quasi-Monte Carlo integration.

[8] Paul Glasserman. *Monte Carlo methods in financial engineering*, Vol. 53 of *Applications of Mathematics (New York).* Springer-Verlag, New York, 2004. Stochastic Modelling and Applied Probability.

[9] Takashi Goda, Ryuichi Ohori, Kosuke Suzuki, and Takehito Yoshiki. The mean square quasi-Monte Carlo error for digitally shifted digital nets, 2014. Preprint.

[10] Shin Harase. Quasi-Monte Carlo point sets with small t-values and WAFOM, 2014. arXiv:1406.1967.

[11] Shin Harase and Ryuichi Ohori. A search for extensible low-WAFOM point sets, 2013. arXiv:1309.7828.

[12] Stephen Joe and Frances Y. Kuo. Remark on Algorithm 659: implementing Sobol's quasirandom sequence generator. *ACM Trans. Math. Software*, Vol. 29, No. 1, pp. 49–57, 2003.

[13] Pierre L'Ecuyer. Quasi-Monte Carlo methods with applications in finance. *Finance Stoch.*, Vol. 13, No. 3, pp. 307–349, 2009.

[14] Christiane Lemieux. *Monte Carlo and quasi-Monte Carlo sampling.* Springer Series in Statistics. Springer, New York, 2009.

[15] Makoto Matsumoto, Mutsuo Saito, and Kyle Matoba. A computable figure of merit for quasi-Monte Carlo point sets. *Math. Comp.*, Vol. 83, No. 287, pp. 1233–1250, 2014.

[16] Makoto Matsumoto and Takehito Yoshiki. Existence of higher order convergent quasi-Monte Carlo rules via Walsh figure of merit. In *Monte Carlo and quasi-Monte Carlo methods 2012*, Vol. 65 of *Springer Proc. Math. Stat.*, pp. 569–579. Springer, Heidelberg, 2013.

[17] Harald Niederreiter. Orthogonal arrays and other combinatorial aspects in the theory of uniform point distributions in unit cubes. *Discrete Math.*, Vol. 106/107, pp. 361–367, 1992. A collection of contributions in honour of Jack van Lint.

[18] Harald Niederreiter. *Random number generation and quasi-Monte Carlo methods*, Vol. 63 of *CBMS-NSF Regional Conference Series in Applied Mathematics.* Society for Industrial and Applied Mathematics (SIAM), Philadelphia, PA, 1992.

[19] Harald Niederreiter and Chaoping Xing. *Rational points on curves over finite fields: theory and applications*, Vol. 285 of *London Mathematical Society Lecture Note Series.* Cambridge University Press, Cambridge, 2001.

[20] Harald Niederreiter and Chaoping Xing. *Algebraic geometry in coding theory and cryptography.* Princeton University Press, Princeton, NJ, 2009.

[21] Syoiti Ninomiya and Shu Tezuka. Toward real-time pricing of complex financial derivatives. *Applied Mathematical Finance*, Vol. 3, No. 1, pp. 1–20, 1996.

[22] Spassimir H. Paskov and Joseph F. Traub. Faster valuation of financial derivatives. *J. Portfolio Management*, Vol. 22, No. 1, pp. 113–120, 1995.

[23] Gottlieb Pirsic. A software implementation of Niederreiter-Xing sequences. In *Monte Carlo and quasi-Monte Carlo methods, 2000 (Hong Kong)*, pp. 434–445. Springer, Berlin, 2002.

[24] Il′ya M. Sobol′. Distribution of points in a cube and approximate evaluation of integrals. *Ž. Vyčisl. Mat. i Mat. Fiz.*, Vol. 7, pp. 784–802, 1967.

[25] Kosuke Suzuki. An explicit construction of point sets with large minimum Dick weight. *J. Complexity*, Vol. 30, No. 3, pp. 347–354, 2014.

[26] Kosuke Suzuki. WAFOM on abelian groups for quasi-Monte Carlo point sets, 2014. arXiv:1403.7276.

[27] Shu Tezuka. *Uniform Random Numbers : Theory and Practice.* Kluwer Academic Publishers, Drodrecht, 1995.

[28] Takehito Yoshiki. A Lower Bound on WAFOM, 2013. Preprint.

[29] 手塚集. 超一様分布列の数理. 計算統計 I, 統計科学のフロンティア, 第 11 巻, pp. 65–120. 岩波書店, 2003.

[30] 湯前祥二, 鈴木輝好. モンテカルロ法の金融工学への応用, 現代金融工学, 第 6 巻. 朝倉書店, 2000.

[31] 伏見正則. 確率的方法とシミュレーション, 岩波講座応用数学, 方法, 第 10 巻. 岩波書店, 1994.

[32] 伏見正則, 逆瀬川浩孝 (監修・翻訳). モンテカルロ法ハンドブック. 朝倉書店, 2014. D.P. Kroese, T. Taimre, Z.I. Botev (2011). Handbook of Monte Carlo Methods, John Wiley and Sons, New York. の日本語訳.