

Sparse Grids を用いた 多次元数値積分法に関する研究

数理情報第3研究室 66219 中島卓也

指導教員: 杉原 正顯 教授

2008 年 2 月 4 日

1 はじめに

一般に多次元積分を精度良く行うには、次元に指数関数的に増加するサンプル点が必要となり、curse of dimension (次元の呪い) といわれている。これを回避する方法として、近年、Sparse Grids 数値積分法といわれる方法が注目を集めている。この Sparse Grids 数値積分法では、1 次元の積分公式の直積から得られる公式 (直積公式とよばれる) の分点を適切に間引いて積分公式を構成する。基礎になる 1 次元積分公式としては、台形則、Clenshaw-Curtis 積分公式、Gauss-Patterson 積分公式等が用いられる。本研究の成果は主に 3 つある。1 つ目は、直積型公式、Good Lattice Points 法、Sparse Grids 数値積分法の比較をクラス $\mathcal{P}^{(d)}(r, C)$ 、クラス $\mathcal{E}_\alpha^{(d)}$ に属する関数に対して、実験的に行ったことである。2 つ目の成果は、Sparse Grids 数値積分法の誤差に関する $(\Delta_{k_1} \otimes \dots \otimes \Delta_{k_d})f$ の値の上限を与える定理を、クラス $\mathcal{P}^{(d)}(r, C)$ 、クラス $\mathcal{E}_\alpha^{(d)}$ の場合に示したことである。3 つ目の成果は、Sparse Grids 数値積分法を拡張した、拡張 Sparse Grids 数値積分法の導入し、クラス $\mathcal{P}^{(d)}(r, C)$ 、 $\mathcal{E}_\alpha^{(d)}$ に属する関数に対して有効な拡張法を提案し、実験的にも有効性を確かめたことである。

2 多次元数値積分

Sparse Grids 数値積分法を説明する前に、まず多次元数値積分の一般的な説明を行う。まず、関数 $f(\mathbf{x}) \in \mathcal{F}$ の $\Omega = [-1, 1]^d$ 上での積分、

$$I^{(d)}f = \int_{\Omega} f(\mathbf{x})d\mathbf{x}$$

について考える。次に、サンプル点 $\mathbf{x}_{li} = (x_{l_1 i_1}, \dots, x_{l_d i_d}) \in \mathbb{R}^d$ 、 $w_{li} \in \mathbb{R}$ を $\mathbf{x}_{li}$ の重みとして、この積分をレベル $l \in \mathbb{N}$ 、サンプル点数 $n_l^{(d)}$ で数値積分を行ったものを、

$$Q_l^{(d)}f = \sum_{i=1}^{n_l^{(d)}} w_{li}^{(d)} f(\mathbf{x}_{li})$$

とすると、この数値積分に対する誤差 $E_l^{(d)}f$ は、

$$E_l^{(d)}f = |I^{(d)}f - Q_l^{(d)}f|$$

と書ける。また、サンプル点集合 $\Gamma_l^{(d)}$ とする。特に、

$$\Gamma_l^{(d)} \subset \Gamma_{l+1}^{(d)}$$

を満たす場合、サンプル点集合は入れ子上になっているという。今後特に断りがない場合は、サンプル点集合は入れ子上になっているとする。サンプル点集合が入れ子上にあることが、Sparse Grids 数値積分法で数値積分する際にサンプル点数を減らす役割を果たし、重要である。また、レベル l はサンプル点数の多さの度合いの指標であり、 $n_l < n_{l+1}$ が成り立つ。

3 Sparse Grids 数値積分法

Sparse Grids 数値積分法を用いた数値積分の形式的表現について説明する。関数 f のレベル l での 1 次元数値積分値 $Q_l^{(1)}f$ は、

$$Q_l^{(1)}f = \sum_{i=1}^{n_l^{(1)}} w_{li}^{(1)} f(x_{li})$$

と書ける。ただし、 $Q_0^{(1)} = 0$ とする。またレベル k とレベル $(k-1)$ の数値積分の値の差 $\Delta_k f$ は、

$$\Delta_k f = (Q_k^{(1)} - Q_{k-1}^{(1)})f$$

と書ける。Smolyak は [3] において、 d 次元の Sparse Grids 数値積分法 $A(q, d)$ 、

$$A(q, d)f = \sum_{|\mathbf{k}|_1 \leq q} (\Delta_{k_1} \otimes \dots \otimes \Delta_{k_d})f \quad (1)$$

を導入した。実際の数値積分値は、

$$A(q, d)f = \sum_{|\mathbf{k}|_1 \leq q} \sum_{j_1=1}^{m_{k_1}} \dots \sum_{j_d=1}^{m_{k_d}} w_{\mathbf{kj}} f(\mathbf{x}_{\mathbf{kj}}) \quad (2)$$

から得られる。次に重みとサンプル点集合について説明する。サンプル点集合が入れ子上になっている時、1 次元数値積分において、レベル l とレベル $(l-1)$ のサンプル点集合の差 $\Theta_l^{(1)}$ は、

$$\Theta_l^{(1)} = \Gamma_l^{(1)} \setminus \Gamma_{l-1}^{(1)}$$

と書ける. $\Gamma_0^1 = \phi$ とし, $\Theta_l^{(1)}$ の要素数を m_l とする. d 次元の Sparse Grids 数値積分法で現れるサンプル点集合 Γ_q^d は $\Theta_{k_i}^{(1)}$ の直積で書けて,

$$\Gamma_q^d = \bigcup_{|\mathbf{k}|_1 \leq q} \Theta_{k_1}^{(1)} \times \cdots \times \Theta_{k_d}^{(1)}$$

となる.

重み $w_{\mathbf{k}j}$ は, $\mathbf{p} \in \mathbb{N}^d$ として,

$$w_{\mathbf{k}j} = \sum_{|\mathbf{k}+\mathbf{p}|_1 \leq q} v_{(k_1+p_1)j_1} \cdots v_{(k_d+p_d)j_d}$$

$$v_{(k+p)j} = \begin{cases} w_{kj}^{(1)} & \text{if } p = 0 \\ w_{(k+p)r}^{(1)} - w_{(k+p-1)s}^{(1)} & \text{otherwise} \end{cases}$$

と計算できる. ただし, $x_{kj} = x_{(k+p)r} = x_{(k+p-1)s}$ とする. サンプル点集合を疎 (Sparse) にしている本質的部分は, $|\mathbf{k}|_1 \leq q$ である. $\mathbf{k}$ のノルムの取り方は他にも考えられる. Δ_k は k に関して単調に減少することが期待されるから, Sparse Grids 数値積分法の形式的表現, 式 (1) の $(\Delta_{k_1} \otimes \cdots \Delta_{k_d})f$ も $|\mathbf{k}|_1$ に対して単調に減少することが期待される.

4 拡張 Sparse Grids 数値積分法

従来の Sparse Grids 数値積分法の基本的なアイデアは, $(\Delta_{k_1} \otimes \cdots \otimes \Delta_{k_d})f$ を $|\mathbf{k}|_1 \leq q$ 上で足し合わせることである. しかし, $\mathbf{k}$ の集合の取り方は他にも考えられるはずである. そこで, 拡張 Sparse Grids 数値積分法を以下のように定義する.

定義 1 集合 S を $\mathbb{Z}_+^d$ の部分集合とする. 積分値 $I^{(d)}f$ を

$$\sum_{\mathbf{k} \in S} (\Delta_{k_1} \otimes \cdots \otimes \Delta_{k_d})f, \quad (3)$$

の値で近似することを拡張 SparseGrids 数値積分法という.

集合 S をどのように選ぶかが問題となるが, 関数のクラスが $\mathcal{P}^d(r, C), \mathcal{E}_\alpha^{(d)}$ の場合には, $(\Delta_{k_1} \otimes \cdots \otimes \Delta_{k_d})f$ の値を考えることにより, 合理的な S を取ることができる.

4.1 $f \in \mathcal{P}^d(r, C)$ に対する拡張 Sparse Grids

定義 2 $n > 1, C > 0$ とし, $f(\mathbf{x})$ が, 絶対収束する d 次元のフーリエ級数 $f(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{h}} c_{\mathbf{h}} \exp(2\pi i \mathbf{x} \cdot \mathbf{h})$ に展開可能で, そのフーリエ係数 $c_{\mathbf{h}}$ が, $\bar{h} = \max(1, |\mathbf{h}|)$ を用いて,

$$|c_{\mathbf{h}}| \leq C |\bar{h}_1 \bar{h}_2 \cdots \bar{h}_d|^{-r} \quad (\mathbf{h} \neq \mathbf{0})$$

とかけるとき, $f(\mathbf{x})$ の族を $\mathcal{P}^d(r, C)$ とする. また,

$$b_r^{(d)}(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{h} \in \mathbb{Z}^d} \frac{1}{(\bar{h}_1 \cdots \bar{h}_d)^r} \exp(2\pi i \mathbf{h} \cdot \mathbf{x}),$$

とする.

このクラスの関数に対して, $(\Delta_{k_1} \otimes \cdots \otimes \Delta_{k_d})f$ の値に関する定理を本研究で示した.

定理 1 d 次元関数 $f \in \mathcal{P}^d(r, C)$ の台形則に基づく SparseGrids 数値積分法を利用した時,

$$|(\Delta_{k_1} \otimes \cdots \otimes \Delta_{k_d})f| \leq C \cdot |(\Delta_{k_1} \otimes \cdots \otimes \Delta_{k_d})b_r^{(d)}| \quad (4)$$

が成り立つ. ただし, $k_i \geq 2, i \leq d$ とする.

定理 1 より, 定義 1 の S を $S = \{\mathbf{k} | |\mathbf{k}|_1 \leq q\}$ とすることが, $k_i \geq 2$ で合理的であることがわかった. しかし, $k_i = 1$ の場合には $S = \{\mathbf{k} | |\mathbf{k}|_1 \leq q\}$ とするのが良いかはわからない. そこで, 経験的知見から $S = \{\mathbf{k} | |\mathbf{k}|_1 \leq q, k_i \leq q-3\}$ とする拡張 Sparse Grids 数値積分法を提案した. 実験的にこの拡張 Sparse Grids 数値積分が従来の Sparse Grids 数値積分法より, 精度良く計算できることを実験的に確かめた.

4.2 $f \in \mathcal{E}_\alpha^{(d)}$ に対する拡張 Sparse Grids

定義 3 $f(\mathbf{x})$ が絶対収束する d 次元のフーリエ級数に展開可能で, $f(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{h}} c_{\mathbf{h}} \exp(2\pi i \mathbf{x} \cdot \mathbf{h})$ と書けて, そのフーリエ係数 $c_{\mathbf{h}}$ が,

$$|c_{\mathbf{h}}| \leq e^{-\alpha(|h_1| + \cdots + |h_d|)}$$

と書ける時, f の族を $\mathcal{E}_\alpha^{(d)}$ とする. また,

$$f_\alpha = \sum_{\mathbf{h}} e^{-\alpha(|h_1| + \cdots + |h_d|)} \exp(2\pi i \mathbf{x} \cdot \mathbf{h})$$

とする.

このクラスの関数に対しても, $(\Delta_{k_1} \otimes \cdots \otimes \Delta_{k_d})f$ の値に関する定理を本研究で示した.

定理 2 d 次元関数 $f \in \mathcal{E}^{(d)}$ の台形則に基づく SparseGrids 数値積分法を利用した時,

$$|(\Delta_{k_1} \otimes \cdots \otimes \Delta_{k_d})f| \leq C \cdot |(\Delta_{k_1} \otimes \cdots \otimes \Delta_{k_d})f_\alpha| \quad (5)$$

が成り立つ. ただし, $k_i \geq 2, i \leq d$ とする.

また, $\mathcal{E}_\alpha^{(d)}$ に対する, 合理的な集合 S を提案し, その S に基づく拡張 Sparse Grids 数値積分法が, 従来の Sparse Grids 数値積分法より, 精度良く計算できることを実験的に確かめた. また, Clenshaw-Curtis 法が Sparse Grids 数値積分に向かないことも, $(\Delta_{k_1} \otimes \cdots \otimes \Delta_{k_d})f$ の値を実際に計算し, 等高線を見ることで確かめられた.

参考文献

- [1] E. Novak, K. Ritter: The curse of dimension and a universal method for numerical integration, in *Multivariate Approximation and Splines* (G. Nürnberger, J. W. Schmidt, G. Walz (eds.)), Birkhäuser, pp. 177–188, 1997.
- [2] G. W. Wasilkowski, H. Wozniakowski: Explicit cost bounds of algorithms for multivariate tensor product problems, *J. Complexity*, Vol. 11, pp. 1–56, 1995.
- [3] S. A. Smolyak: Quadrature and interpolation formulas for tensor products of certain classes of functions, *Dokl. Akad. Nauk SSSR*, Vol. 4, pp. 240–243, 1963.