Efficient discretization of measures by optimization: numerics of analytic functions and cubature construction

(最適化による測度の効率的な離散化：解析関数に対する数値手法と cubature 公式の構成法)

数理情報学専攻 48196224 早川 知志
指導教員 田中 健一郎 准教授

1 はじめに

積分計算あるいは期待値計算を計算機上で行うためには, 適切な離散化を施さなければならない. 本研究では, 測度の離散化としての数値積分公式

$$\int_{\mathcal{X}} f(x)\,\mathrm{d}\mu(x) \simeq \sum_{i=1}^{n} \lambda_i f(x_i) \quad f \in \mathcal{F} \tag{1}$$

を考える. ここでは, $\mathcal{X}$ 上の測度 μ について, 集合 $\mathcal{F}$ に属する関数 f の積分を「よく」近似するような n 個の重み λ_i と点 $x_i \in \mathcal{X}$ $(i = 1, \dots, n)$ を数値積分公式と呼ぶ. この数値積分公式を与える問題を統一的なテーマとして, 本研究では重み付き Hardy 空間上の数値解析手法および一般の空間における cubature 公式の構成法について, 大きく分けて二つの問題を扱う.

2 重み付き Hardy 空間上の数値解析

ここでは被積分関数の空間 $\mathcal{F}$ として重み付き Hardy 空間 $\mathbb{H}^\infty(\mathcal{D}_d, w)$ を考える. この空間は,

- 帯状領域 $\mathcal{D}_d := \{z \in \mathbb{C} \mid |\operatorname{Im} z| \le d\}$ $(d > 0)$
- $\mathcal{D}_d$ 上の正則重み関数 w (ただし $w(\mathbb{R}) \subset (0, 1]$, $\log w$ は $\mathbb{R}$ 上狭義凸, その他条件をみたす)

が与えられたとき, ノルム $\|f\| := \sup_{x\in\mathcal{D}_d} |f(x)/w(x)|$ を用いて $\mathbb{H}^\infty(\mathcal{D}_d, w) := \{f : \mathcal{D}_d \text{ 上正則} \mid \|f\| < \infty\}$ と定義される. 代表的な w として $\tanh$ や $\tanh\circ\sinh$ (二重指数) などがある.

田中らは $\mathbb{H}^\infty(\mathcal{D}_d, w)$ 上で (1) と類似の近似問題をポテンシャル論を通して考察し, $K = -\log|\tanh(\frac{\pi}{4d}\cdot)|$, $Q = -\log w$ とした凸最適化問題

$$\min_{a_1<\cdots<a_n} \sum_{i\ne j} K(a_i - a_j) + \frac{2(n-1)}{n} \sum_{i=1}^{n} Q(a_i) \tag{2}$$

の解を用いた Lagrange 補間公式 (および同様の手法による数値積分公式, 積分の場合は $Q = -\frac{1}{2}\log w$) を提案した [5, 6, 7]. それらの公式は準最適性の示されている既存手法 [3, 4] に対して実験的優越性を示していたが, 理論的な (準) 最適性や誤差評価は不完全であった.

そこで, 本研究では田中らの近似公式の誤差評価・準最適性, および積分公式の誤差評価を理論的に与えた. ここでは関数近似についての我々の結果を紹介する. n 点近似 $\tilde{f}_n$ であって

$$\tilde{f}_n(x) = \sum_{j=1}^{\ell} \sum_{k=0}^{m_j-1} f^{(k)}(a_j)\varphi_{jk}(x)$$

(ただし $1 \le \ell \le n$, $m_1 + \cdots + m_j = n$, φ_{jk} は $\mathcal{D}_d$ 上解析的) で定まるような近似公式について, 最適誤差を $E_n^{\min}(\mathbb{H}^\infty(\mathcal{D}_d, w)) := \inf_{\tilde{f}_n} \sup_{\|f\|\le1, x\in\mathbb{R}} |\tilde{f}_n(x) - f(x)|$ により定める. この値にどれくらい近い誤差を達成できるかが重要である.

定理 1 (準最適性)**.** 田中・杉原の n 点近似公式を $\tilde{f}_n^{\mathrm{TS}}$ とすると次が成立：

$$\sup_{x\in\mathbb{R},\, \|f\|\le1} |\tilde{f}_n^{\mathrm{TS}}(x) - f(x)| \le \sqrt{2e^3}\, E_n^{\min}(\mathbb{H}^\infty(\mathcal{D}_d, w))^{\frac{n-1}{2n}}.$$

また次の最適誤差の評価により, 田中・杉原の公式の誤差も評価することができる.

定理 2. w が $\mathbb{R}$ 上で偶関数であるとする. $\alpha_n > 0$ が $\frac{2\alpha_n}{\pi\tanh(d)} \frac{Q(\alpha_n)^2 + Q'(\alpha_n)^2}{Q(\alpha_n)} \le n$ をみたすとき, 次の評価が成り立つ：

$$E_n^{\min}(\mathbb{H}^\infty(\mathcal{D}_d, w)) \le \sqrt{2e^3} \exp\left(-\frac{n-1}{4n} Q(\alpha_n)\right).$$

この α_n は具体的な Q では $Q(x) \sim |x|^\rho$ ならば $Q(\alpha_n) \sim n^{\frac{\rho}{\rho+1}}$, $Q(x) \sim \exp|x|$ ならば $Q(\alpha_n) \sim \frac{n}{\log n}$ とレートがわかるが, これらは [6] のヒューリスティックな議論で示唆されていた結果と一致し, その予想を厳密に示したことになる.

数値積分公式に関する誤差評価も, 近似の場合の評価を少し修正して導くことが可能である.

3 cubature 公式の構成

cubature 公式とは, (1) 型の数値積分公式であって, いくつかのテスト関数 $\varphi_1, \dots, \varphi_d$ に関しては (1) において等式を成り立たせるようなものである. 古典的にはユークリッド空間上である次数までの多項式を厳密に

積分するような重み (正であることを課すことが多い) と点配置のことをいう [2]. cubature はテスト関数によってよく近似される関数の積分もよく近似できるため, 古典的なものは滑らかな関数に対して有効である.

3.1　一般の cubature

今回は一般の確率測度についての cubature, すなわち $\mathcal{X}$ 値確率変数 X と可積分なベクトル値関数 $\boldsymbol{\varphi} = (\varphi_1, \ldots, \varphi_d)^\top : \mathcal{X} \to \mathbb{R}^d$ について

$$\sum_{i=1}^n \lambda_i \boldsymbol{\varphi}(x_i) = \mathrm{E}\left[\boldsymbol{\varphi}(X)\right] \tag{3}$$

をみたすような総和 1 の重み $\lambda_i > 0$ と点 $x_i \in \mathcal{X}$ を構成したい. $\mathcal{X}$ が超三角形や超球, X が一様分布, $\boldsymbol{\varphi}$ が多項式, などの特殊ケースには小さい n での構成が知られているが, 一般の場合の構成は知られていなかった. 非構成的な存在定理として次の Tchakaloff の定理がある.

定理 3 ([8])**.** *上の設定のもと, $n \le d+1$ をみたす cubature が存在する. また $\varphi_1 \equiv 1$ のときは $n \le d$ が達成できる.*

以下 $\varphi_1 \equiv 1$ とする. Tchakaloff の定理は $\mathrm{E}\left[\boldsymbol{\varphi}(X)\right]$ が $\{\boldsymbol{\varphi}(x) \mid x \in \mathcal{X}\}$ の凸包に入ることから示せるが, 我々はより強い次の主張を示した.

定理 4. *$X_1, X_2, \ldots$ を X と同分布の確率変数列とするとき, $\mathrm{E}\left[\boldsymbol{\varphi}(X)\right]$ が $\{\boldsymbol{\varphi}(X_1), \ldots, \boldsymbol{\varphi}(X_n)\}$ の凸包に含まれるような有限の n が確率 1 で存在する.*

この主張により, あとは線形計画問題

$$\min 0 \quad \text{s.t.} \ \sum_{i=1}^n \lambda_i \boldsymbol{\varphi}(X_i) = \mathrm{E}\left[\boldsymbol{\varphi}(X)\right], \ \lambda_i \ge 0$$

を解けば cubature 公式が構成できることになり, 例えば単体法などを用いて実行可能基底解をとれば, それは Tchakaloff の定理のバウンドをみたす公式となる. したがって, X の分布に従う乱数が生成可能でかつ $\mathrm{E}\left[\boldsymbol{\varphi}(X)\right]$ が既知のとき, cubature 公式が確率的に構成できることがわかった.

3.2　Wiener 空間上の cubature

次のような Stratonovich 型の $\mathbb{R}^N$ 値確率微分方程式を考える.

$$X_0 = x, \quad \mathrm{d}X_t = \sum_{i=1}^D V_i(X_t) \circ \mathrm{d}B_t^i + V_0(X_t)\,\mathrm{d}t. \tag{4}$$

ただし $x \in \mathbb{R}^N$, $B = (B^1, \ldots, B^D)$ は D 次元 Brown 運動, $V_i : \mathbb{R}^N \to \mathbb{R}^N$ は滑らかな関数で, 任意の階数の導関数が有界であるとする. ここで例えば Lipschitz 連続な関数 $f : \mathbb{R}^N \to \mathbb{R}$ に対して $\mathrm{E}\left[f(X_T)\right]$ を求める問題は, 数理ファイナンスなどで非常に重要な問題である.

このとき, $\mathbb{R}^D$ 値有界変動パス $w = (w^1, \ldots, w^D)$ と多重指数 $\alpha = (i_1, \ldots, i_k) \in \bigcup_{j=0}^\infty \{0, \ldots, D\}^j$ に対して多重積分 $I^\alpha(w)$ を

$$I^\alpha(w) := \int_{0<t_1<\cdots<t_k<1} \mathrm{d}w^{i_1}(t_1) \cdots \mathrm{d}w^{i_k}(t_k)$$

で定める ($w^0(t) = t$ とする). また Brown 運動に対しても Stratonovich 積分を用いて同様に $I^\alpha(B)$ を定めることができる. 長さと 0 の個数の和が m 以下の α について I^α を並べてできるテスト関数ベクトルを $\boldsymbol{\varphi}_W$ とすると, $\sum_{i=1}^n \lambda_i \boldsymbol{\varphi}_\mathrm{W}(w_i) = \mathrm{E}\left[\boldsymbol{\varphi}_\mathrm{W}(B)\right]$ をみたす λ_i とパス w_i の組を m 次の Wiener 空間上の cubature という [1]. B の代わりにこの w_i たちについて (4) を解くことで, よい近似が得られる. 一般には $m \le 5$ の cubature しか構成されていなかった.

Brown 運動の見本路は確率 1 で非有界変動なので定理 4 はそのままでは使えないが, 仮定を弱めて Brown 運動の多重積分の性質を用いることで任意の次数 m について次を得た.

定理 5. *M を十分大きい整数とし, $w_i^j(\frac{k}{M}) - w_i^j(\frac{k-1}{M})$ が平均 0 分散 $1/M$ の正規分布に従うように $w_1, w_2, \ldots$ をとると, $\mathrm{E}\left[\boldsymbol{\varphi}_W(B)\right]$ が $\{\boldsymbol{\varphi}_\mathrm{W}(w_1), \ldots, \boldsymbol{\varphi}_\mathrm{W}(w_n)\}$ の凸包に含まれるような有限の n が確率 1 で存在する.*

4　結論

重み付き Hardy 空間上のポテンシャル論を用いた数値公式に対する理論保証, そして一般および Wiener 空間上の cubature の構成法を与えた. これらは数値積分法への最適化の応用として繋がっている.

参考文献

[1] T. Lyons and N. Victoir. Cubature on Wiener space. *Proceedings of the Royal Society of London Series A*, 460:169–198, 2004.

[2] A. H. Stroud. *Approximate calculation of multiple integrals.* Prentice-Hall, 1971.

[3] M. Sugihara. Optimality of the double exponential formula functional analysis approach . *Numerische Mathematik*, 75:379–395, 1997.

[4] M. Sugihara. Near optimality of the sinc approximation. *Mathematics of Computation*, 72(242):767–786, 2003.

[5] K. Tanaka, T. Okayama, and M. Sugihara. Potential theoretic approach to design of accurate numerical integration formulas in weighted Hardy spaces. In G. E. Fasshauer and L. L. Schumaker, editors, *Approximation Theory XV: San Antonio 2016*, pages 335–360. Springer, 2017.

[6] K. Tanaka, T. Okayama, and M. Sugihara. Potential theoretic approach to design of accurate formulas for function approximation in symmetric weighted Hardy spaces. *IMA Journal of Numerical Analysis*, 37(2):861–904, 2017.

[7] K. Tanaka and M. Sugihara. Design of accurate formulas for approximating functions in weighted hardy spaces by discrete energy minimization. *IMA Journal of Numerical Analysis*, 39(4):1957–1984, 2019.

[8] V. Tchakaloff. Formules de cubature mécanique à coefficients non négatifs. *Bulletin des Sciences Mathématiques*, 81:123–134, 1957.