2版

様　式　Ｃ－１９、Ｆ－１９－１、Ｚ－１９　（共通）

科学研究費助成事業　　研究成果報告書

科研費 KAKENHI

平成 ３０ 年　 ６ 月　 ８ 日現在

機関番号：１４４０１

研究種目：基盤研究(C)（一般）

研究期間：2014～2017

課題番号：２６４００１３３

研究課題名（和文）精密なモンテカルロ積分の研究

研究課題名（英文）Study of precise Monte Carlo integration

研究代表者

杉田　洋（Sugita, Hiroshi）

大阪大学・理学研究科・教授

研究者番号：５０１９２１２５

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費）　　2,400,000円

研究成果の概要（和文）：大数の法則が対独立な同分布確率変数列に対して成り立つことを利用して著しくランダム性を削減した厳密なモンテカルロ積分を実現したのがランダム・ワイル・サンプリング(RWS)であった．本研究ではRWSを拡張したk-対独立同分布(k-i.i.d.)確率変数列による新しい実用的なサンプリング法を開発した．k-i.i.d.確率変数列によるモンテカルロ積分ではサンプル平均のk次モーメントまで精密に計算できる．

研究成果の概要（英文）：Utilizing the fact that the law of large numbers holds for pairwise i.i.d. random variables, we realized a rigorous Monte Carlo integration, called Random Weyl sampling (RWS), with extremely reduced randomness. In this reserch, we developed a k-wise i.i.d. sampling method, which is an extension of RWS and is useful for practice. The method can compute the k-th moment of the sample mean precisely.

研究分野：確率論

キーワード：モンテカルロ積分　ランダム・ワイル・サンプリング　対独立同分布確率変数列　k-対独立同分布確率変数列

１．研究開始当初の背景

確率変数の平均(積分値)を数値的に求めることは理論上も応用上も非常に重要な課題である．しかし，確率空間上で定義された確率変数は一般に非常に複雑な関数であり，決定論的な数値積分法は大抵の場合に役に立たない．そのため，本質的にランダムなサンプリングによる数値積分法，すなわちモンテカルロ積分が必要になる．モンテカルロ積分は非常に複雑な関数の数値積分を行うことができるものの， その誤差はランダムであり，しかもサンプル数 N の増加に伴って$O(N^{-1/2})$ のオーダーでしか減衰しない．このことは誤差を1桁小さくする(1/10 にする)にはサンプル数を2桁大きくする(100 倍する) 必要があることを示して，いかにも能率が悪い．しかも，この減衰オーダーは独立同分布(i.i.d.)確率変数列に関する中心極限定理(CLT)，あるいは重複対数の法則に基づく普遍的なものであるので改善の余地はない．そのため，モンテカルロ積分を用いて精密な数値積分を行うことは諦めざるを得ない，というのが研究開始当初の状況であった．

２．研究の目的

本研究の申請者の開発したランダム-ワイル-サンプリング(RWS)と動的ランダム-ワイル-サンプリング(DRWS)([1])の理論と応用，さらにその改良について詳しく研究することによって，モンテカルロ積分の可能性の限界に挑む．(D)RWS はモンテカルロ積分専用の疑似乱数生成器として厳密な数学的理論を持つこと，そしてランダムサンプリングであるにも関わらず，誤差の実測値はサンプル数 N に対して$O(N^{-1+\varepsilon})$ の減衰を見せること，を特色とする．このような精密なモンテカルロ積分の可能性を開拓する本研究によって，従来，大雑把な解析手法と考えられてきたモンテカルロ法のあり方を根本から変えることが目的である．

＜引用文献＞

[1] Sugita, Hiroshi, *Monte Carlo Method, Random Number, and Pseudorandom Number*. MSJ Memoirs vol.25, (2011), pp.xiv+133.

３．研究の方法

(D)RWS を従来のモンテカルロ積分(i.i.d.-サンプリング)では望めなかった精密な計算を実際に行い，実績を積む．さらにそれらの理論と応用を深めることによって，その可能性の限界を明らかにする．そしてその限界を超えるために新たな改良を行う．

４．研究成果

(1) RWS のサンプルの対独立性の興味深い別証明を与えた(雑誌論文①)．

(2) RWS のサンプル平均の中心極限定理スケーリングは大きさ $N\to\infty$ では退化する．すなわち，サンプル平均は積分値に極めて高い確率でに集中する．しかしその分散は i.i.d.-サンプリングと同じ 1/N のオーダーでしか減衰しないので，結果として「外れ値」が i.i.d.-サンプリングより高い確率で出てしまう．この欠点を補うために，RWS では独立に２回(あるいはそれ以上の回数)行うことによって，外れ値かどうかを判定することを提案する．すなわち２回ともほぼ同じ値が得られればそれはきわめて高い確率で真の積分値の近似値と判定できる．

(3) しかし，非常に複雑な問題で大規模なRWS の計算を複数回も行えない状況においては，収束速度は犠牲にしてでも外れ値の生じにくいモンテカルロ積分が必要になる．そのために一般の自然数 k に対して，k-対独立同分布 (k-i.i.d.) 確率変数列の生成の理論の研究を行った．ここで k-対独立とは，任意の k 項は独立だが，それ以上の独立性を持たないことを言う．k-i.i.d.確率変数列によるサンプリングではサンプル平均は k 次モーメ

ントまでi.i.d.-サンプリングと同一にできる.言うまでもなくRWSはk=2の場合である.

mビットのk-i.i.d.を生成するために必要な最小の確率空間は$F(2^m)^k$で実現できることが従来から知られていた. しかし, 実際には有限群の乗法の計算が煩雑で実用レベルで実装することは不可能であった. そこで我々はRWSと同様のアイデアに基づいて, mビットのk-i.i.d.を2^{j+1}個実現する$k(m+(k-1)j)$ビットの確率空間を提案した.その場合のk-対独立性の証明は(1)で得たものを拡張して得られた. これは先行研究[2]で得られたものよりもずっと小さなランダム性で k-i.i.d.を2^{j+1}個実現する.

(4) 具体的にk=3,4 の場合に, 前項(2)の方法を実装し, 実際に計算を行い, 十分実用に耐えることを確認した. 我々の方法ではk-i.i.d.を生成するためには項数nに関するk-1次多項式を計算しなければならない. 多倍長の乗算を避けるため, 多項式の計算は差分を取ることにより低次の多項式の計算に帰着させ, 結果的に1次多項式をいくつも重ねて計算することによって実現した. その結果, k=3ではRWSの4倍程度, k=4ではRWSの7倍程度に生成速度を抑えることに成功した. 疑似乱数生成が律速段階であるようなモンテカルロ積分ではRWSを複数回行う方が能率的であるが, そうでないときは3-i.i.d.あるいは4-i.i.d.によるサンプリングは実用的である.

i.i.d.-サンプリングでは被積分確率変数に依らず, サンプル平均は正規分布で近似されるが, k>2 ではk-i.i.d.によるサンプリング平均の分布は被積分確率変数により変化し一定の分布の型を持たない. そこで, 典型的な3つの被積分確率変数([0,1)区間上滑らかな関数, 複雑な関数, 非常に複雑な関数)の場合に, サンプル平均の特徴を調べた.

結果は被積分確率変数の複雑さが増すにつれて, k=2(RWS),3,4の場合のk-i.i.d.-サンプル平均の分布はいずれも正規分布に近づく. とくに非常に複雑な被積分確率変数の場合はRWSでもサンプル平均はほぼ正規分布に従う. またk=4の場合にはサンプル平均の分布は滑らかな被積分確率変数の場合でもほぼ正規分布に従うことを確認した.

以上(3)(4)の成果については学術専門雑誌に投稿予定である.

(5) 数値実験によればDRWSの場合でも, サンプル平均の中心極限定理スケーリングは大きさ N→∞ では退化するように見受けられる. そのことの理論的証明を得よう努力したが, 残念ながら証明を完成させることができなかった.

＜引用文献＞

[2] Dietzfelbinger, M., Universal hashing and k-wise independent random variables via integer arithmetic without primes, *Lecture Notes in Computer Science* vol. 1046 (1996), 569-580.

5. 主な発表論文等
（研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線）

〔雑誌論文〕（計１件）

① Sugita, Hiroshi, Random Weyl sampling ---A secure Monte Carlo integration method, *Nonlinear Theory and Its Applications(NOLTA), IEICE/Special Section on Random / Pseudorandom Numbers*, 査読有り, vol.7 No.1, 2016, 2-13.

〔学会発表〕（計２件）

① 杉田洋, 確率論と計算数学---乱数と疑似乱数を中心として, 大阪大学確率論セミナー, 2018.

② 杉田洋, 確率論と乱数, 大阪大学確率論セミナー, 2014.

〔図書〕（計２件）

① Sugita, Hiroshi, World Scientific, Probability and Random Number: A first guide to randomness, 140, 2017.

② 杉田洋，数学書房，確率と乱数，2015，140.

〔産業財産権〕

○出願状況（計０件）

○取得状況（計０件）

〔その他〕

ホームページ等

http://www.math.sci.osaka-u.ac.jp/~sugita/mathematics.html

６．研究組織

(1)研究代表者

杉田　洋（Sugita, Hiroshi）

大阪大学・大学院理学研究科・教授

研究者番号：50192125

(2)研究分担者

なし

(3)連携研究者

高信 敏（Takanobu, Satoshi）

金沢大学・大学院自然科学研究科・教授

研究者番号：40197124

(4)研究協力者

なし