

令和 6 年 4 月 5 日現在

機関番号：12601

研究種目：研究活動スタート支援

研究期間：2020～2023

課題番号：20K22301

研究課題名（和文）確率数値手法の実装理論構築

研究課題名（英文）Theory and implementation of probabilistic numerical methods

研究代表者

河合 玲一郎 (Kawai, Reiichiro)

東京大学・大学院総合文化研究科・教授

研究者番号：20464258

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 1,300,000円

研究成果の概要（和文）：確率モデルにおける計算資源の最適実行や反復計算の最適停止といった実装レベルにおいて必要不可欠な諸問題に主眼を置き、多岐に渡る確率数値解析の基盤理論構築、収束誤差解析、そして計算速度向上を目指した。研究内容は、モデルや問題設定に依存しない確率数値手法と、モデルベースもしくは問題設定毎の確率数値手法に分類される。その両体系において、モンテカルロ法、分散減少法、確率的勾配降下法、無限分解可能分布、マルチンゲール理論、マリアバン解析といった理論に基づいて、研究期間を通じて多大な成果をあげることができ、論文20編が査読付き国際専門誌において採択に至った。

研究成果の学術的意義や社会的意義

実用レベルで求められる確率モデルは年々際限なく大規模かつ複雑になり、数値計算に頼らざるを得ない問題設定が大多数を占めるにいたり、数値手法の効果的な実装理論、収束保証、誤差評価の需要は恒久的に高まっていた。本研究から得られた多岐に渡る確率数値解析の基盤理論構築、収束誤差解析、そして計算速度向上は、自然科学や社会科学のあらゆる分野で用いられる確率モデルにおける計算資源の最適実行や反復計算の最適停止といった実装レベルにおいて必要不可欠な諸問題に対して、大きく、また普遍的に寄与できると考えている。

研究成果の概要（英文）：The focus centered on essential issues of stochastic models in numerical implementation, such as optimal execution of computational resources and optimal termination of iterative calculations. Specifically, the research aimed at establishing the foundational theory of probabilistic numerical analysis, convergence error analysis, and enhancing computational speed. The research content can be classified into two categories: probabilistic numerical methods independent of the model or problem setting, and those tailored to specific model based or problem setting specific approaches. Significant achievements were made in both realms throughout the research period based on theories such as Monte Carlo methods, variance reduction methods, stochastic gradient descent methods, infinitely divisible distributions, martingale theory, and Malliavin analysis. As a consequence, 20 articles were published in established peer-reviewed international journals.

研究分野：確率数値解析

キーワード：確率数値解析 確率過程 モンテカルロ法 統計力学 機械学習

様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

現実の世界で観察される諸現象を表現、解析、さらに将来予測等のために、数理モデル、特に確率要素の表現を目指した確率モデルが自然科学や社会科学のあらゆる分野で用いられる。そして、実用レベルで求められる確率モデルは年々際限なく大規模かつ複雑になり、数値計算に頼らざるを得ない問題設定が大多数を占めるに至った。それらの数値手法の効果的な実装理論、収束保証、誤差評価の需要はこれまで以上に高まっており、さらにいえば、今後も恒久的に高まり続けることは明らかであった。

2. 研究の目的

数理モデル、特に確率要素の表現を目指した確率モデルにおける数値手法の開発とその理論分析が研究の主目的となる。具体的には、計算資源の最適実行や反復計算の最適停止といった実装レベルにおいて必要不可欠な諸問題に主眼を置き、その過程で多岐に渡る確率数値解析の基盤理論構築、収束誤差解析、そして計算速度向上を目指した。

3. 研究の方法

自身の先行業績にて、問題設定に依存しない重点サンプリングや制御変量法をパラメトリックに構築し、収束保証下で分散が逐次減少されるモンテカルロ法の理論体系を確立した。本研究では、さらにそれらの実装を主眼に置いた理論発展を目指す。要求される専門知識という視点からは、たとえば無限分解可能分布、マリアバン解析といった極めて高度で厳密な確率論に基づいて数値手法の実装理論を構築することになり、典型的な実証研究とは一線を画す。

- (1) 計算コストを下げるために、分散減少法に関わるパラメータ探索は反復毎でなくバッチ処理で十分でないかという発想のもとに、本研究ではパラメータ探索の最適なタイミングやバッチサイズの理論構築を目指す。実装レベルでは反復を有限回数で停止せざるを得ないため、できる限り漸近手法に頼らない理論構築を目指す。
- (2) たとえば金融実務において日常的に適用される層化抽出法を先行業績の理論体系に加えることで、さらなる実用性向上を目指す。特に、分散が逐次減少されていく状況下で各層への動的予算最適分配スキームを理論的に導出する。
- (3) モンテカルロ法の骨格をなす中心極限定理はあくまで収束定理であり、厳密な誤差評価に直接用いることはできない。したがって、モンテカルロ法を実際いつ反復計算を停止すべきであるかという議論はほとんどなされてこなかった。ここでは、分散逐次減少型モンテカルロ推定における反復計算停止理論の構築を目指す。
- (4) 確定“ベクトル”を確率“ベクトル”の次元毎平均にて推定するベクトル版モンテカルロ法が存在する。最近の好例として、確率偏微分方程式の複数点を同時にモンテカルロ推定するという問題が挙げられる。ここでは、ベクトル版モンテカルロ法の分散減少法や反復計算停止理論の構築を目指す。
- (5) 単体上で定義される積分の数値計算は非常に重要かつ、難解な問題であることが知られている。この積分をモンテカルロ積分である解釈した上で、そのディリクレ分布内での測度変換を施せば効果的な重点サンプリングが可能であることを研究期間直前に発見した。ここから研究課題(1)-(3)のアイデアを導入することで、計算効率向上、そして現実的な実装を目指す。

4. 研究成果

研究開始当初は、「研究活動スタート支援」という枠組みの性質上、研究期間は一年半と極めて短かった。ところが新型コロナウイルス感染症の影響で共同研究者を訪問することがかなわなかったこともあり、研究期間が三年半へと延長となったおかげで、当初の想定よりもかなり多くの研究成果があげることができた。具体的には、対象期間中に理論的な成果、さらにそれらの応用結果も含め、関連研究論文 20 編が査読付き国際専門誌において採択に至った。

- (1) 分散減少法のパラメータ探索を反復毎でなくバッチ処理にて行なうアルゴリズムをできる限り一般体系的に構築し、総サンプル数とバッチサイズの関係を実験的に導出することに成功した。一連の成果は、*ACM Transaction on Modeling and Simulation*をはじめとする査読付き国際論文誌にて研究論文として掲載された。
- (2) モンテカルロ法のサンプル空間を層化した上で、さらに各層に重点サンプリング法と制御変量法を適用し、各層分散が逐次減少されていく状況下で、計算予算の動的最適分配スキームを実験的に導出することに成功した。一連の理論成果は、*SIAM Journal on Scientific Computing*をはじめとする国際論文誌にて掲載され、特に構造信頼工学分野における応用論文として *Structural Reliability*をはじめとする査読付き国際論文誌にて掲載された。
- (3) 分散逐次減少型モンテカルロ推定における反復計算停止理論の構築には、マルチンゲール中心極限定理の Berry-Esseen を適用することを当然想定していたが、Berry-Esseen の既存結果は反復計算停止理論構築の文脈で要求されるレベルには達していない。これは今後の研究課題である。
- (4) ベクトル版モンテカルロ法において、分散減少法（具体的には、重点サンプリング法、制御変量法、層化抽出法）を適用する枠組みを開発した上で、そのパラメータ探索と最適停止の性質を明らかにすることに成功した。現在、一連の成果を複数の研究論文としてまとめている。さらに、ベクトル版かつ上記(3)のような分散逐次減少型に同時に対処するには、少なくとも多次元マルチンゲール中心極限定理の Berry-Essen が必要となるが、現時点では技術的に実装レベルには程遠く、今後の課題である。
- (5) 単体上で定義される積分計算をディリクレ分布内での測度変換を施したモンテカルロ法にて行う際に、パラメータ探索や最適停止の観点から計算効率を大幅に向上させることに成功した。一連の成果は、研究論文として *Journal of Scientific Computing*をはじめとする査読付き国際論文誌にて掲載された。
- (6) 最後に、反復計算停止理論構築の成否については、すでに述べたとおり中心極限定理の Berry-Esseen の精度に依存するところが大きく、現時点では実装レベルにおいて有効な状態に昇華できていない。したがって、当該 Berry-Esseen 理論の改善も視野に入れて、今後の研究を行っていきたい。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計20件（うち査読付論文 20件 / うち国際共著 18件 / うちオープンアクセス 2件）

1. 著者名 He Yue, Kawai Reiichiro	4. 巻 588
2. 論文標題 Super- and subdiffusive positions in fractional Klein-Kramers equations	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physica A: Statistical Mechanics and its Applications	6. 最初と最後の頁 126570 ~ 126570
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.physa.2021.126570	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 He Yue, Kawai Reiichiro	4. 巻 302
2. 論文標題 Moment and polynomial bounds for ruin-related quantities in risk theory	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 European Journal of Operational Research	6. 最初と最後の頁 1255 ~ 1271
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.ejor.2022.01.040	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Qiu Qinjing, Kawai Reiichiro	4. 巻 36
2. 論文標題 Iterative Weak Approximation and Hard Bounds for Switching Diffusion	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Journal of Theoretical Probability	6. 最初と最後の頁 1003 ~ 1036
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/s10959-022-01185-x	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Song Chenxiao, Kawai Reiichiro	4. 巻 101
2. 論文標題 Adaptive stratified sampling for structural reliability analysis	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Structural Safety	6. 最初と最後の頁 102292 ~ 102292
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.strusafe.2022.102292	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 He Yue, Kawai Reiichiro	4. 巻 98
2. 論文標題 Dimension dependent properties of subdiffusions in damping force fields from an inference perspective	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physica Scripta	6. 最初と最後の頁 015006 ~ 015006
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1402-4896/aca3d8	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Song Chenxiao, Kawai Reiichiro	4. 巻 33
2. 論文標題 Batching Adaptive Variance Reduction	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 ACM Transactions on Modeling and Computer Simulation	6. 最初と最後の頁 1 ~ 24
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1145/3573386	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 He Yue, Kawai Reiichiro, Shimizu Yasutaka, Yamazaki Kazutoshi	4. 巻 109
2. 論文標題 The Gerber-Shiu discounted penalty function: A review from practical perspectives	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Insurance: Mathematics and Economics	6. 最初と最後の頁 1 ~ 28
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.insmatheco.2022.12.003	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Song Chenxiao, Kawai Reiichiro	4. 巻 72
2. 論文標題 Adaptive radial importance sampling under directional stratification	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Probabilistic Engineering Mechanics	6. 最初と最後の頁 103443 ~ 103443
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.probengech.2023.103443	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Chessari Jared, Kawai Reiichiro, Shinozaki Yuji, Yamada Toshihiro	4. 巻 20
2. 論文標題 Numerical methods for backward stochastic differential equations: A survey	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Probability Surveys	6. 最初と最後の頁 486 ~ 567
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1214/23-PS18	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Song Chenxiao, Kawai Reiichiro	4. 巻 45
2. 論文標題 Dynamic Finite-Budget Allocation of Stratified Sampling with Adaptive Variance Reduction by Strata	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 SIAM Journal on Scientific Computing	6. 最初と最後の頁 A898 ~ A932
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1137/21M1430996	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Kawai Reiichiro	4. 巻 174
2. 論文標題 A general approach to sample path generation of infinitely divisible processes via shot noise representation	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Statistics & Probability Letters	6. 最初と最後の頁 109091 ~ 109091
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.spl.2021.109091	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Yuan Sida, Kawai Reiichiro	4. 巻 18
2. 論文標題 Numerical aspects of shot noise representation of infinitely divisible laws and related processes	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Probability Surveys	6. 最初と最後の頁 201 ~ 271
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1214/20-PS359	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 He Yue, Kawai Reiichiro	4. 巻 31
2. 論文標題 Time-squeezing and time-expanding transformations in harmonic force fields	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science	6. 最初と最後の頁 093107 ~ 093107
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0054330	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Qiu Qinjing, Kawai Reiichiro	4. 巻 182
2. 論文標題 A decoupling principle for Markov-modulated chains	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Statistics & Probability Letters	6. 最初と最後の頁 109301 ~ 109301
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.spl.2021.109301	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Yuan Sida, Kawai Reiichiro	4. 巻 53
2. 論文標題 Asymptotic degeneracy and subdiffusivity	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical	6. 最初と最後の頁 095002 ~ 095002
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1751-8121/ab69a5	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Kawai Reiichiro	4. 巻 483
2. 論文標題 Adaptive importance sampling and control variates	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of Mathematical Analysis and Applications	6. 最初と最後の頁 123608 ~ 123608
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jmaa.2019.123608	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Jiao Chunxi, Kawai Reiichiro	4. 巻 58
2. 論文標題 Computable primal and dual bounds for stochastic control	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 SIAM Journal on Control and Optimization	6. 最初と最後の頁 3709 ~ 3733
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1137/18M1232231	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Song Chenxiao, Kawai Reiichiro	4. 巻 73
2. 論文標題 Monte Carlo and variance reduction methods for structural reliability analysis: A comprehensive review	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Probabilistic Engineering Mechanics	6. 最初と最後の頁 103479 ~ 103479
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.proengmech.2023.103479	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Qiu Qinjing, Kawai Reiichiro	4. 巻 96
2. 論文標題 A recursive representation for decoupling time-state dependent jumps from jump-diffusion processes	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 Stochastics	6. 最初と最後の頁 1 ~ 41
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1080/17442508.2023.2259534	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Song Chenxiao, Kawai Reiichiro	4. 巻 98
2. 論文標題 Sampling and Change of Measure for Monte Carlo Integration on Simplices	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 Journal of Scientific Computing	6. 最初と最後の頁 64
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/s10915-024-02461-0	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

〔学会発表〕 計3件（うち招待講演 3件 / うち国際学会 2件）

1. 発表者名 Reichiro Kawai
2. 発表標題 Stochastic approximation in adaptive Monte Carlo variance reduction
3. 学会等名 KAFF-JAFEE International Symposium (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Reichiro Kawai
2. 発表標題 Stochastic approximation in adaptive Monte Carlo variance reduction
3. 学会等名 One World Virtual Seminar Series - Stochastic Numerics and Inverse Problems (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 河合玲一郎
2. 発表標題 確率制御問題の主双対最適バウンド計算法について
3. 学会等名 大阪大学中之島ワークショップ金融工学・数理計量ファイナンスの諸問題2020 (招待講演)
4. 発表年 2020年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

<p>https://researchmap.jp/raykawai https://sites.google.com/site/reiichirokawai/ UTokyo BiblioPlaza https://www.u-tokyo.ac.jp/biblioplaza/ja/J_00135.html</p>

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
--	---------------------------	-----------------------	----

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------