

令和 2 年 6 月 22 日現在

機関番号：15401

研究種目：基盤研究(B)（特設分野研究）

研究期間：2014～2019

課題番号：26310211

研究課題名（和文）諸科学における一様性と超一様性の利用

研究課題名（英文）Application of uniformity and hyper uniformity in sciences

研究代表者

松本 眞（Matsumoto, Makoto）

広島大学・理学研究科・教授

研究者番号：70231602

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 10,800,000円

研究成果の概要（和文）：超立方体上にN個の一様ランダムなサンプル点を発生し、それらの点での関数fの値の平均値を持ってfの積分値を近似するのがモンテカルロ法である。これに対し、超立方体におけるサンプル点を巧みに配置することで、数値積分誤差をより小さくする手法が準モンテカルロ法である。そのような点集合を超一様点集合と呼ぶ。t-valueを小さくする点集合が良く用いられている。本研究においては「パラメータ付きWAFOM」という指標を導入し、それに基づいた超一様点集合を探索した。滑らかな関数に対しては、既存のものよりも高い性能をもつことを数値実験で示した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

モンテカルロ積分・準モンテカルロ積分は、高い次元の空間上の積分を行う際に有用であり、工学・科学・金融など幅広い応用を持つ。モンテカルロ積分法では、次元に無関係に誤差をサンプルポイント数の-0.5乗で小さくできるが、この誤差収束の遅さが問題となることも多い。本研究では、滑らかな関数に対しては誤差収束をNの-1乗以上に効率化する点集合の構成法を与えた。また、滑らかでない関数に対しても従来広く使われているlow discrepancy点集合と同程度の性能を持つことを実験的に示した。

研究成果の概要（英文）：Monte Carlo integration of a function  $f$  on a hypercube means to generate uniformly random sample points on the hypercube, and then take the average of the function evaluated at these points as a numerical approximation of the integration of  $f$ . Quasi-Monte Carlo integration is to choose hyper-uniform sample points to make the integration error smaller. Widely known point sets uses the t-value as a figure of merit. In this study we introduced "WAFOM with parameters" as a new figure of merit, and obtained hyper-uniform point sets according to this index. It is experimentally shown that the new point sets perform better than existing methods, for relatively smooth integrands

研究分野：代数学

キーワード：準モンテカルロ法

様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19 (共通)

#### 1. 研究開始当初の背景

乱数発生は、確率的現象を含むシミュレーションにおいて必須の技術であり、諸科学において広く用いられている。乱数を発生するには、熱雑音などを用いた物理乱数と、数学的的技巧に基づきさまざまな性質を持つように設計された漸化式により数列を発生し、乱数として用いる疑似乱数の二種がある。確率シミュレーションにおいては、ソフトウェアにより安価に高速に発生させることができ、初期値と漸化式を記録しておけば誰にでも同じ数列が再現できる疑似乱数が主流である。研究代表者は西村拓士氏と、1998年に Mersenne Twister (MT) 疑似乱数発生法を開発した。この発生法は、現在世界標準の生成法として、あらゆる分野で広く利用されている。ユーザからのメールにより、「疑似乱数発生法を MT に替えたとたんにシミュレーションの結果が納得のいくものになった」という連絡を多数受けている。ここで、研究代表者が哲学的に不思議に感じていることは「数学的秩序を作って保証した方が、疑似乱数の乱数性(無秩序性)が良くなる」という経験的事実である。より具体的には、「一周期にわたる高次元一様分布性を最適に近づけた疑似乱数は、あらゆる確率シミュレーションで正しい結果を導くことが多い」という事実である。

暗号乱数の定義は無秩序性に近いものであり、「キーを持たなければ、計算機で解析しても現実的な時間では構造を見いだせない数列」というものである。これは暗号乱数の使用目的にも合致している。しかしながら、少なくとも NP - P 予想を含めた強い予想を仮定しない限り、そのような数列は作れないことが知られている。

我々が扱うモンテカルロ法用疑似乱数については、解析の難しさは必要なく、高速生成性と、シミュレーションで精度の良い結果が出ることのみが要求される。一見弱い要求であるように見えるため、無数のモンテカルロ法用疑似乱数発生法が現在に至るまで提唱されているが、そのほとんどは大規模シミュレーションでの使用に耐える精度を持っていない。数多くの事例が示しているのは、「長周期で高次元一様性の高い疑似乱数」が、大規模シミュレーションでの使用に耐えるものであるということである。しかしながら、この経験則には理論的な裏打ちがない。第一、モンテカルロ法用疑似乱数については数学的定義が存在せず、客観的な評価基準も存在せず、統計的検定以外には客観的なテストは存在しない。定義が存在しないので、数学的には「良い疑似乱数」を選ぶ理論的尺度は存在しない。にも関わらず、高次元一様分布性を良くすると、実用上は良い乱数が得られる。

この、「理論的裏打ちが存在しないが、数列に対するある数学量を良くすると、実用上良くなる」という現象が、科学諸分野の確率過程的シミュレーションに潜在しているのではないかという直感が、本研究課題を考える土台となっている。このような研究は、数学的定義の不在から、数学分野内だけでは研究を進めることができない。乱数列を実用に供する現場との共同作業と多数の実験を通してのみ研究を進められるものであり、連携探索型に応募する動機となった。

この方向で、次の部分的成功例がある。疑似乱数と一見似てはいるが全く異なる概念として、超一様点集合がある。これは、与えられた次元に対し、その次元の超立方体内の有限点集合であって、一様ランダム以上に一様に分布した点集合のことである。このような有限点集合を用いて、超立方体上定義された関数  $f$  の積分値を、 $f$  のこれらの点における値の平均により近似するのが準モンテカルロ積分である。モンテカルロ法では、積分誤差は点集合のサイズ  $N$  に対して  $O(1/N)$  で小さくなっていくが、超一様点集合を用いた準モンテカルロ法では  $\log N$  のべき乗項を無視すれば  $O(1/N)$  でより高速に真の値に収束していく。これは、Koksma-Hlawka の 70 年代の結果であり、超一様性の評価値としては star-discrepancy を用いている。そのような点列の構成には Sobol 列や Niederreiter による  $(t, m, s)$ -net が用いられる。Josef Dick (2008) らの研究に

より、被積分関数の滑らかさをより高く仮定すれば、積分誤差がより高いオーダー（ $N$  の負冪）で減少するような点列も構成されている。研究代表者らは、Dick の結果を離散化し、star-discrepancy の代替となりうる超一様性の評価値 Walsh Figure-of-Merit(WAFOM)を導入し、その高速算法を与えた（松本ら、2013）。超一様性の技法の適用範囲は理論的には20次元程度の定義域を持つ数値積分に限られるものであるが、実際に金融工学における株式派生商品の価格決定のための確率積分に用いてみると、20次元を大きく超えても単なる疑似乱数より高速に誤差を減らせることが経験的に知られており、実用に供されている（二宮ら、1996）。その理論的背景はさかんに研究されているがこれといった決め手はないのが現状である。ここでも、「数学的裏打ちがきちんとしていないが、使ってみると良くなる」という現象がみられる。

## 2．研究の目的

所与の確率分布に従う乱数は、諸科学において基本的な数理科学概念であり、広く応用されている。乱数が利用される現場は、株価の変動、核反応シミュレーション、たんぱく質折りたたみ、遺伝的アルゴリズムなど枚挙にいとまがない。これらの分布をもつ乱数は、通常、適切な変換により一様乱数から生成される。一方、モンテカルロ積分を高速化するために、一様乱数よりも均等に高次元的に分布しているような、超一様数列が開発され、実用されている。本研究の目的は、一様乱数が使われるあらゆる場面において、一様乱数を超一様数列に置き換えたときの効果を研究することである。より広い目的は、使われる現場ごとに適した「乱数の代替物」の開発である。

## 3．研究の方法

モンテカルロ積分とは、 $s$ 次元超立方体上で定義された非積分関数  $f$  の積分値を近似する方法である。超立方体上に  $N$  個の一様ランダムなサンプル点を発生し、それらの点での  $f$  の値の平均値を持って  $f$  の積分値を近似するのがモンテカルロ法である。これに対し、超立方体におけるサンプル点を巧みに配置することで、数値積分誤差をより小さくする手法が準モンテカルロ法である。そのような点集合を超一様点集合と呼ぶ。なかでも、2元体の線形代数を用いて生成された点集合をデジタルネットと呼ぶ。デジタルネットにも各種あり、 $t$ -value を小さくする Sobol 点集合、また近年提案されたより高次の収束を狙いとする Interlaced Sobol 点集合などがある。本研究においては、 $t$ -value とはタイプの異なるパラメータ付き WAFOM を指標として、準モンテカルロ法にとって良いデジタルネットを、山登り法を用いて探索した。得られた点集合の性能を既存の点集合と数値実験を行って比較した。被積分関数が三角関数や指数関数、正規分布密度関数のような滑らかなもので、かつ変数の係数が大きくないときは、低 WAFOM 点集合は他の点集合よりもよい近似を与えた。特に、空間の次元が4以下のときには、サンプル点の個数  $N$  に対して  $N^{-2}$  程度のオーダーで誤差が収束することが実験的に確認された。一方、微分不可能な関数や関数の高階導関数のノルムが大きい場合には、低 WAFOM 点集合は有効に働かないことも実験的に確認された。関連する研究として、指数関数の準モンテカルロ積分誤差と WAFOM 値が近い（比が次元にのみ依存し、あまり大きくならない）ことも示した。これは、指数関数を含む関数クラスに対して準モンテカルロ誤差を小さくするためには、使用する点集合の WAFOM 値を小さくしなくてはならないことを意味しており、WAFOM 値の重要性を裏付けている。

## 4．研究成果

低 WAFOM 点集合を用いて、既存の点集合よりも誤差の小さい数値積分が得られる条件について進展があった。すなわち、被積分関数の高階導関数のノルムが小さいことが必要であることがわ

かった。また、このような場合に、既存の点集合に比べて優位に誤差を小さくすることもわかった。逆に、提案する方法が有効ではない状況についても明らかになりつつある。関数が微分不可能であったり、高階導関数のノルムが大きい場合である。

一方、点集合を探索する際に、一つの次元にのみ変更を加えて山登り法を繰り返し行うことで、探索時間を短くする方法が得られた。探索した準モンテカルロ

法用点集合は、一般に利用可能なようにホームページにおいて公開している。我々の研究により得られた点集合は、最近提案された高次収束点集合 (higher order convergent digital net) よりも小さな誤差を達成している。特に、サンプル点の個数が少なく、かつ関数が滑らかな時にその傾向は強い。被積分関数の計算に非常に時間がかかるような応用例においてはサンプル点を多くはとれないことがあるので、本研究で得られた点集合はそのような場合にも有効であると考えられる。

準モンテカルロ法の離散化について、有限群上の複素数値関数の平均をとることを考える。有限部分集合上の平均で近似するとする。すると、表現論的手法をもちいて、誤差をバウンドすることができる。このバウンドが達成される必要十分条件が「部分集合が difference set であること」と同値になることを示した。このようにして、一見無関係な、準モンテカルロ誤差と difference set の間に、関係があることを示した。さらに、有限群から、一般のアソシエーションスキームにおいて、同様な定理を示した。後者で考えたほうが、証明は道筋がわかりやすい。有限群、より一般的に可換アソシエーションスキームに対し、pre difference set の概念を導入した。この成果は、広島大学 D2 学生梶浦大起氏、講師奥田孝幸氏との共同研究である。

従来の超一様点集合は、特殊な有限群上にウェイトをもうけ、ウェイト付の評価基準を定義し、重みが小さい Fourier 成分を禁止する。今回提唱したのは、全てのキャラクター上でどれも等しい大きさの Fourier 成分をもつデザインであり、多くの場合 difference set と一致することを示した。全数探索により、pre difference set であるが difference set でない例が多数発見された。

## 5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計6件（うち査読付論文 6件/うち国際共著 0件/うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 Matsumoto Makoto, Ohori Ryuichi, Yoshiki Takehito	4. 巻 330
2. 論文標題 Approximation of Quasi-Monte Carlo worst case error in weighted spaces of infinitely times smooth functions	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Journal of Computational and Applied Mathematics	6. 最初と最後の頁 155 ~ 164
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) doi.org/10.1016/j.cam.2017.08.010	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 Hiroshi Haramoto, Makoto Matsumoto	4. 巻 241
2. 論文標題 A Method to Compute an Appropriate Sample Size of the Two-Level Test for NIST Test Suite	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Monte Carlo and Quasi-Monte Carlo Methods 2016	6. 最初と最後の頁 283-294
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	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 Kajiura Hiroki, Matsumoto Makoto, Suzuki Kosuke	4. 巻 52
2. 論文標題 Characterization of matrices $B$ such that $(I, B, B^2)$ generates a digital net with $t$ -value zero	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Finite Fields and Their Applications	6. 最初と最後の頁 289 ~ 300
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) doi.org/10.1016/j.ffa.2018.04.011	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 Makoto Matsumoto, Ryuichi Ohori	4. 巻 163
2. 論文標題 Walsh Figure of Merit for Digital Nets: An Easy Measure for Higher Order Convergent QMC	5. 発行年 2016年
3. 雑誌名 Springer Proceedings in Mathematics & Statistics	6. 最初と最後の頁 143-160
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/978-3-319-33507-0_5	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 Shin Harase	4. 巻 22
2. 論文標題 A search for extensible low-WAFOM point sets	5. 発行年 2016年
3. 雑誌名 Monte Carlo Methods and Applications	6. 最初と最後の頁 349-357
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1515/mcma-2016-0119	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 Shin Harase	4. 巻 254
2. 論文標題 Quasi-Monte Carlo point sets with small t-values and WAFOM	5. 発行年 2015年
3. 雑誌名 Appl. Math. Comput.	6. 最初と最後の頁 318-326
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) doi:10.1016/j.amc.2014.12.144	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 -

〔学会発表〕 計10件 (うち招待講演 1件 / うち国際学会 4件)

1. 発表者名 Hiroshi Haramoto
2. 発表標題 Checking the Soundness of Statistical Tests for Random Number Generators by Using a Three-Level Test
3. 学会等名 International Conference on Monte Carlo Methods and its Applications 2017 (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Hiroshi Haramoto, Makoto Matsumoto
2. 発表標題 A Method to Compute an Appropriate Sample Size of the Two-Level Test of NIST Test Suite for Frequency and Binary Matrix Rank Test
3. 学会等名 12th International Conference on Monte Carlo and Quasi-Monte Carlo Methods in Scientific Computing, MCQMC 2016 (国際学会)
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 原本博史, 松本眞
2. 発表標題 NISTの二重検定における適切なサンプル数の決定
3. 学会等名 日本応用数学会2016年度年会
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 原瀬 晋, 湯浅智意
2. 発表標題 Sobol' 列と計算ファイナンスへの応用
3. 学会等名 乱数と超一様性集会
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 Shin Harase, Tomooki Yuasa
2. 発表標題 A comparison study of Sobol' sequences in financial derivatives
3. 学会等名 12th International Conference on Monte Carlo and Quasi-Monte Carlo (国際学会)
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 原瀬 晋
2. 発表標題 メルセンヌツイスタ擬似乱数発生法の連結について
3. 学会等名 日本応用数学会2016年度年会
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 原瀬 晋
2. 発表標題 メルセンヌツイスタ擬似乱数発生法の連結について
3. 学会等名 2016年度応用数学合同研究集会
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 Makoto Matsumoto
2. 発表標題 `WAFOM with parameter for higher QMC: Revenge of the algebraic code, Part II''
3. 学会等名 10th IMACS Seminar on Monte Carlo Methods, JKU, Linz, Austria. (国際学会)
4. 発表年 2015年

1. 発表者名 松本眞
2. 発表標題 準モンテカルロ法超入門(Walsh Figure of Meritからの)
3. 学会等名 愛媛代数学セミナー
4. 発表年 2015年

1. 発表者名 松本 眞
2. 発表標題 準モンテカルロ法・超入門(Walsh figure of meritからの)
3. 学会等名 愛媛代数学セミナー (招待講演)
4. 発表年 2015年



〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

Rによる準モンテカルロ積分法  
<https://mersennetwister-lab.github.io/rmcqmcint/index-ja.html>  
C++によるモンテカルロ・準モンテカルロ積分法  
<https://mersennetwister-lab.github.io/MCQMCIntegration/ja/index.html>

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
--	---------------------------	-----------------------	----