球面デザインの研究と最近の動向について

愛知県立大学・情報科学部　平尾 将剛 *

Masatake Hirao
School of Information and Science Technology,
Aichi Prefectural University

1 はじめに

本稿は，東京大学の田中健一郎氏からお声掛け頂き，RIMS 共同研究「諸科学分野を結ぶ基礎学問としての数値解析学」にて講演した内容を文章にまとめたものである．

講演では，主に (代数的) 組合せ論研究者が「球面デザイン」をどのような課題意識を持って研究してきたのかについてを球面デザインが登場した Dersarte-Goethals-Seidel [16] の紹介からはじめ，筆者の知る限りではあるが主要と思われる結果を掻い摘んで紹介した．また，筆者らの近著である Sawa-Hirao-Kageyama [36] において整理した有限既約鏡映群の軌道を用いた球面デザインの構成法 (コーナーベクトル法) とその点数削減法，および Brauchart-Saff-Sloan-Womersly [8] で提案された球面デザインの準モンテカルロ法的拡張である QMC デザインについて述べた．筆者の不勉強な点，及び，時間的な制約からそれらはいささか断片的過ぎたかもしれないが，この分野の入り口として楽しんで頂けたならこの上ない幸せである．

2 球面デザイン

まずは球面デザインの定義から始める．球面デザインとは，ある次数までの多項式に対する積分値を有限個の点での算術平均として与える球面上の有限集合のことである．やや乱暴に言ってしまえば，我々がよく知る **Simpson の台形則**の球面拡張と思えば良い．球面デザインを正確に定義するために記号を幾つか準備する．

$\mathbb{R}^d$ を d 次元ユークリッド空間とする．$\boldsymbol{x} = (x_1, \ldots, x_d)$ に対し，その距離を $\|\boldsymbol{x}\| = \sqrt{x_1^2 + \cdots + x_d^2}$ とする．単位球面を $\mathbb{S}^{d-1} = \{\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^d \mid \|\boldsymbol{x}\| = 1\}$ とし，正規化された表面測度 $\sigma := \sigma_d$ を備えているものとする．非負整数 $t \geq 0$ に対して，t 次の斉次多項式全体の作るベクトル空間を $\mathrm{Hom}_t(\mathbb{R}^d)$ とし，t 次の斉次かつ調和な多項式全体の作るベクトル空間を $\mathrm{Harm}_t(\mathbb{R}^d)$ と

* 本研究の一部は JSPS 科研費 16K17645 の助成を受けたものである．

する．さらに次数が高々 t 以下の多項式全体の作るベクトル空間を

$$\mathcal{P}_t(\mathbb{R}^d) = \bigoplus_{\ell=0}^{t} \mathrm{Hom}_\ell(\mathbb{R}^d)$$

とする．

Definition 2.1 (球面デザイン). t を非負整数とし，X を $\mathbb{S}^{d-1}$ の有限部分集合とする．任意の多項式 $f \in \mathcal{P}_t(\mathbb{R}^d)$ に対して，

$$\frac{1}{|X|} \sum_{\boldsymbol{x} \in X} f(\boldsymbol{x}) = \int_{\mathbb{S}^{d-1}} f(\boldsymbol{x}) \, d\sigma(\boldsymbol{x}) \tag{1}$$

が成り立つとき，X は**球面 t-デザイン** (もしくは，$\mathbb{S}^{d-1}$ **上の t-デザイン**) であるという．

球面デザインは組合せデザイン理論の拡張として知られている「アソシエーションスキーム上の Delsarte 理論」の球面類似として，Delsarte-Goethals-Seidel [16] により「再導入」された．ここで「再導入」と書いた理由は，数値解析においては Delsarte らの研究以前に (1) 式を球面積分に対する **cubature 公式** と呼び，その研究がされてきたからである（例えば，Stroud [40] によると少なくとも 1950 年代後半から具体的な cubature 公式の構成法が研究されてきたことがわかる)．球面上のデザイン理論の原点に立ち返ると球面デザインだけではなく，符号理論からの問題意識も述べるべきであるが必要最低限のことを除き，それについては本稿では割愛する．興味のある読者は例えば，原点である Dersarte [15]，球面上のデザイン理論の入門和書である坂内-坂内 [3]，及び，宗政 [30, 31] なども参照して欲しい．

球面デザインの例としては，例えば，(1) X を円周 $\mathbb{S}^1$ に内接する正 $(t+1)$ 角形の頂点集合とするとき，X は $\mathbb{S}^1$ 上の t-デザインである，(2) X を 2 次元球面 $\mathbb{S}^2$ に内接する正多面体の頂点集合とするとき，(2-i) 正四面体ならば，2-デザイン，(2-ii) 正六面体，正八面体ならば，3-デザイン，(2-iii) 正十二面体，正二十面体ならば 5-デザインであることが古典的に知られている*1．また，$d-1$ 次元球面 $\mathbb{S}^{d-1}$ においては，正多面体の概念を拡張した正多胞体 (regular polytope) の頂点集合が $\mathbb{S}^{d-1}$ 上のデザインになっていることも確かめられている．(これらは例えば，坂内-坂内 [3] の第 5 章，及び，その参考文献を参照)．このように球面デザインは「対称性を持つ正多面体・正多胞体」となっていることが多いが，これらの性質を拡張した構成法が**コーナーベクトル法**である．コーナーベクトル法とその点数削減法については，3.3.2, 3.3.3 節において具体例を用いてその概要を述べる．

3 球面デザインの研究課題

球面デザインの主な研究課題は大きく分けて次の (a), (b), (c) であるというのは共通認識であると思われる (例えば，宗政 [31], Brauchart-Grabner [6] を参照)．

*1 さらに Hardin-Sloane [21] では，変形立方体の頂点集合がなすデザインについてリストが与えられている．

(a) 非存在問題：球面デザインが存在するために必要な最小点数はいくらか？ (3.1 節)
(b) 存在問題：球面デザインが「常に」存在するために必要な点数はいくらか？ (3.2 節)
(c) 構成問題：どのように球面デザインを構成するか？ (3.3 節)

本節では上記の 3 項目についてそれぞれ主要な結果の主張を述べるだけに止める．証明等については Brauchart-Grabner [6] に加え，坂内-坂内 [3], Bannai-Bannai [5], 坂内-坂内-伊藤 [4] を適宜参照して欲しい．

3.1 非存在問題について

自然数 d, t を固定した際に，$\mathbb{S}^{d-1}$ 上の t-デザインが存在するためには何点必要となるかといった問題は最も基本となる問題であり，球面デザインが導入された Delsarte et al. [16] においてもその点数の下界が調べられている．

Theorem 3.1 (Delsarte-Goethals-Seidel, [16])**.** 自然数 d, t を固定する．$N(d,t)$ を $\mathbb{S}^{d-1}$ 上の t-デザインが存在するための最小点数とすると，次の不等式が成り立つ:

$$N(d,t) \geq \begin{cases} \binom{d+t/2-1}{d-1} + \binom{d+t/2-2}{d-1}, & t \text{ が偶数のとき}, \\ 2\binom{d+(t-1)/2-1}{d-1}, & t \text{ が奇数のとき}. \end{cases} \tag{2}$$

Delsarte らのこの不等式は **Fisher 型不等式**として知られている．また，勿論，この結果は 1977 年に得られた結果であるので現在では多くの改良が得られている．例えば，坂内 [2] により指摘されているが，Yudin [43] による結果など，d を固定し，t を大きくした場合における改良は数多く得られているが，t を固定し，d を大きくした場合に Fisher 型不等式を超える改良は全く得られていない．

(2) において等号を達成する $\mathbb{S}^{d-1}$ 上の t-デザインを **tight (堅い) t-デザイン**と呼び，代数的組合せ論においてはその存在問題が重要となる．そのひとつの理由は先述したように符合理論との関連である．ここで本筋から少し離れるが球面上の符号とは何か述べる．$\mathbb{S}^{d-1}$ 上の有限部分集合 X に対して，**X の距離集合**を

$$A(X) = \{\langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \rangle \mid \boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \in X, \boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{y}\}$$

とする．

Definition 3.2 (球面符号)**.** A を区間 $[-1, 1)$ の部分集合とし，X を $\mathbb{S}^{d-1}$ 上の有限部分集合とする．$A(X) = A$ が成り立つとき，X は **($\mathbb{S}^{d-1}$ 上の)A-コード**であるという．

球面符号の問題は球充填問題，接触球問題などと深く関連するが，球面デザインとの関連で言えば，$|A(X)| = s$ となる s-距離集合の問題と密接に関連している．s-距離集合の問題とは，$|A(X)| = s$ の仮定のもとで，$|X|$ が最大となるのはいつかと言った問いである．$\mathbb{S}^{d-1}$ 上の s-距離集合に関して，Delsarte-Goethals-Seidel [16] により次の定理が知られている．

Theorem 3.3 (Delsarte-Goethals-Seidel, [16])**.** X が $\mathbb{S}^{d-1}$ 上の s-距離集合ならば，

$$|X| \leq \binom{d+s-1}{s} + \binom{d+s-2}{s-1}. \tag{3}$$

さらに X が**極対的 (antipodal**，すなわち，$\boldsymbol{x} \in X$ ならば $-\boldsymbol{x} \in X$ が成り立つとき，次の定理が知られている．

Theorem 3.4 (Delsarte-Goethals-Seidel, [16])**.** X が $\mathbb{S}^{d-1}$ 上の極対的な s-距離集合ならば，

$$|X| \leq 2\binom{d+s-2}{s-1}. \tag{4}$$

これらの定理より，$\mathbb{S}^{d-1}$ 上の tight t-デザインと s-距離集合で最大個数となる集合とに一致性を見出すことができるのである．

3.2 存在問題

Fisher 型不等式 (2) を達成する $\mathbb{S}^{d-1}$ 上の tight t-デザインは散在的にしか存在しないことが知られているが ($\mathbb{S}^{d-1}$ 上の tight t-デザインがいつ存在するかについてはまだ完全には解決していない)，Seymour-Zaslavsky [37] により次の事実が保証されている．

Theorem 3.5 (Seymour-Zaslavsky, [37])**.** 自然数 d, t を固定する．点数が十分大ならば，$\mathbb{S}^{d-1}$ 上の t-デザインはいつでも存在する．

Seymour-Zaslavsky の結果はそれだけ点数が必要かは述べられていない．しかしながら，多くの研究者により，$\mathcal{O}(t^{d-1})$ の $\mathbb{S}^{d-1}$ 上の球面 t-デザインは存在するであろうと予想されている．その中でも有名なのが Korevaar-Meyers [25] の予想である:

『$\mathbb{S}^{d-1}$ 上の球面 t-デザインで点数が $N \asymp t^{d-1}$ のものが存在する．』

この予想は近年，Bondarenko-Radchenko-Viazovska [9] により肯定的に解決された．

Theorem 3.6 (Bondarenko et al. [9])**.** 自然数 $d \geq 2$ を固定する．このとき，任意の $N \geq c_d t^{d-1}$ に対して，N 点での $\mathbb{S}^{d-1}$ 上の t-デザインが存在する．

さらに Bondarenko-Radchenko-Viazovska [10] では，“well-separated” と呼ばれる点同士がある程度離れて配置される球面デザインに対しても同様の主張が成り立つことを述べている．また，Etayo-Marzo-Ortega Cerda [18] では Bondarenko らの結果をコンパクト代数多様体上の積分に対してまで押し上げている．

Bondarenko らの結果は近年の球面デザインの研究の中でも最もインパクトを与えたものであり，この研究以降，点の個数が $\mathcal{O}(t^{d-1})$ の $\mathbb{S}^{d-1}$ 上の t-デザインの存在を認めた上でどのような応用があるかを論じた研究が多く見られるようになった．しかしながら，Bondarenko らの主張，お

よびその証明法には要求を満たす点集合の**構成法**については何ら述べていないことに注意しておく．そこで次の問題が重要である．

Problem 3.7. $\mathbb{S}^{d-1}$ 上の t-デザインで点数が $N \asymp t^{d-1}$ のものを具体的に構成する方法を与えよ．

また 2 次元球面 $\mathbb{S}^2$ 上の t-デザインに限定すれば，Hardin-Sloane [21] により，『$\mathbb{S}^2$ 上の t-デザインで点数が $N \geq \frac{1}{2}t^2 + o(t^2)$ $(t \to \infty)$ となるものが常に存在する』ことが予想されている[*2] この予想に関して Brauchart-Grabner [6] によれば，次のことが知られているとのことである：Chen-Womersley [12] では $t \leq 100$ に対して，数値実験により，$(t+1)^2$ 点での t-デザインを得ている．また，Chen-Frommer-Lang [11] では，$t \leq 100$ までの $\mathbb{S}^2$ 上の t-デザインの存在性を証明している．さらに Sloan-Womersley [38] では，Hardin-Sloane の予想の正しさを数値実験によりさらに検証し，実際には $N \geq \frac{1}{2}(t+1)^2$ ではないかと新たな予想を与えている．さらに Gräf-Potts [19, 20] では $t \leq 1000$ に対して，高速フーリエ変換を用いた手法による数値実験により，t-デザインを得ている．

3.3　構成問題

Problem 3.7 として挙げたように球面デザインの構成法の研究は数多くあるものの未だ改良の余地が多分に残されている．代表的な球面デザインの構成法としては (a) 直交多項式の零点を用いたもの，(b) 群軌道を用いたもの，(c) 整数格子の殻を用いたものがある．(c) に関してはここでは割愛し (例えば，Brauchart-Grabner [6], 坂内-坂内 [3]，およびその参考文献を参照して欲しい)，ここでは主に (a), (b) についてその概要を述べる．

3.3.1　(a) 直交多項式の零点を用いた構成法

Cubature 公式論において Gauss 型 quadrature 公式のように直交多項式の零点，ひいては多項式空間の再生核を用いた構成法はよく研究されている．ここでは主に 1990 年代に Wagner, Bajnok らによって提案された方法を再確認する．Wagner [42]，Radau-Bajnok [34] では次の積分に対する Chebyshev 型 quadrature と $\mathbb{S}^{d-2}$ 上の t-デザインを用いることにより，$\mathbb{S}^{d-1}$ 上の t-デザインを構成する方法を与えている.:

$$\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} f(\gamma_i) = \int_{-1}^{1} f(x)(1-x^2)^{(d-3)/2}\,dx, \quad \forall f \in \mathcal{P}_{2n-1}(\mathbb{R})$$

---

*2 これの予想は Korevaar-Meyers の予想より精密である．また，Fisher 型不等式は

$$N(3,t) \geq \begin{cases} \frac{1}{4}(t+2)^2, & t\text{ が偶数のとき,} \\ \frac{1}{4}(t+1)(t+3), & t\text{ が奇数のとき} \end{cases}$$

であることにも注意する．

また，Bajnok [1] では

$$\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} f(\gamma_i) = \int_{-1}^{1} f(x)(1-x^2)^{(d-2-j)/2}\,dx, \quad \forall f \in \mathcal{P}_{2n-1}(\mathbb{R}), (j=1,\ldots,d-2)$$

と正 m 角形の頂点を用いて，$\mathbb{S}^{d-1}$ 上の t-デザインを構成する方法を与えている．ここで Chebyshev 型 quadrature 公式の存在については，Kuijlaars [26] によって保証されており，点数が大きくなるが $\mathbb{S}^{d-1}$ 上の t-デザインをいつでも構成できることがわかる．

近年，Kuperberg [27] は $\int_{-1}^{1} \cdot dx$ に対する $2n+1$ 次の quadrature の明示的な構成法を与えることに成功している．Bannai-Bannai [3] では，彼の手法を $\int_{-1}^{1} \cdot (1-x^2)^{\alpha}\,dx$ に対して拡張できるのではないかと予想を与えている．さらに次のような問題も自然な問いかけではないだろうか: $t' > t$ とする．$\mathbb{S}^{d-1}$ 上の t-デザインに適切な部分集合 Y を付け加え，$\mathbb{S}^{d-1}$ 上の t'-デザインを構成するアルゴリズムを提示できないか?

3.3.2 群軌道を用いた方法

群軌道を用いた構成法自体は球面デザインの研究以前に数値積分法の研究者，実験計画法の研究者によって導入されてきた．例えば，Stroud [40] では対称群 $\mathcal{S}_d$ (座標の交換)，および，超八面体群 B_d (対称群 $\mathcal{S}^d$ と $(\mathbb{Z}/2\mathbb{Z})^n$ の半直積，すなわち，座標の交換と $\pm$ の入換) による球面デザインを発見的に与えている．これらは言わば，2 節で見たように円に内接する正多角形，もしくは球に内接する多面体の頂点集合，もしくは Hardin-Sloane [21] のように変形多面体の頂点集合の一般化として捉えることができる．

本節でこれらを包括する枠組みとして**コーナーベクトル法**を紹介する．コーナーベクトル法とは端的に言えば，

- **各群に付随するコーナーベクトルの群軌道の和集合を用意し，それがデザインとなる重み関数を探索する方法**

のことである．探索には後述する Sobolev の定理 (Theorem 3.8) が重要となる．有限既約鏡映群に対するコーナーベクトル法は Nozaki-Sawa [32, 33] により与えられ[*3]，Hirao-Sawa-Jimbo [23], Sawa-Hirao [35], Sawa-Hirao-Kageyama [36] により特に統計的実験計画の構成法として整理されている．以降，有限既約鏡映群の中でも超八面体群 B_d に焦点を当て，コーナーベクトル法を紹介する．

コーナーベクトル　超八面体群の B_d の**コーナーベクトル**は

$$\boldsymbol{v}_i := \boldsymbol{v}_{i,d} = \frac{1}{\sqrt{i}}\sum_{k=1}^{i} \boldsymbol{e}_k, \quad i=1,\ldots,d \quad (\boldsymbol{e}_1,\ldots,\boldsymbol{e}_d : \mathbb{R}^d \text{ の標準基底})$$

[*3] 有限既約鏡映群に対するコーナーベクトル法で構成できる $\mathbb{S}^{d-1}$ 上の t-デザインの “t” の上限を決定している．

であり，各コーナーベクトル $\boldsymbol{v}_i$ の B_d-軌道 $\boldsymbol{v}_i^{B_d}=\bigcup_{i=1}^m\{\boldsymbol{v}_i^\gamma \mid \gamma\in B_d\}$ は **(正) 多胞体**をなす．例えば，$d=3$ のとき，$\boldsymbol{v}_1=(1,0,0)$, $\boldsymbol{v}_2=(1/2,1/2,0)$, $\boldsymbol{v}_3=(1/\sqrt{3},1/\sqrt{3},1/\sqrt{3})\in\mathbb{S}^2$ の B_3-軌道はそれぞれ次で与えられる．

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{v}_1^{B_3}&=(1,0,0)^{B_3}=\{(\pm1,0,0),(0,\pm1,0),(0,0,\pm1)\},\\
\boldsymbol{v}_2^{B_3}&=(1/2,1/2,0)^{B_3}=\{(\pm1/2,\pm1/2,0),(\pm1/2,0,\pm1/2),(0,\pm1/2,\pm1/2)\},\\
\boldsymbol{v}_3^{B_3}&=(1/\sqrt{3},1/\sqrt{3},1/\sqrt{3})^{B_3}=\{(\pm1/\sqrt{3},\pm1/\sqrt{3},\pm1/\sqrt{3})\}
\end{aligned}
$$

であり，それぞれ正六面体の頂点集合，辺の中点集合，面の重心集合 (正八面体の頂点集合) となる．

B_d-不変重み付き集合　$\{\boldsymbol{x}_1,\dots,\boldsymbol{x}_m\}$ を $\mathbb{S}^{d-1}$ 上の m 点集合とし，それらの B_d-軌道の和集合を $X=\bigcup_{i=1}^m\boldsymbol{x}_i^{B_d}=\bigcup_{i=1}^m\{\boldsymbol{x}_i^\gamma\mid\gamma\in B_d\}$ とする．さらに X 上の正値関数 w を $w(\boldsymbol{x})=w(\boldsymbol{y})$, $\forall\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\in\boldsymbol{x}_i^{B_3}$ を満たすとする．このとき，重み付き点集合 (X,w) は B_d-**不変**であるという．特にコーナーベクトル法では特に $\{\boldsymbol{x}_1,\dots,\boldsymbol{x}_m\}$ をコーナーベクトル (もしくはそれらのベクトルの内分点) の中から選択する．

B_d-不変多項式空間　$\mathcal{P}_t(\mathbb{S}^{d-1})^{B^d}$ を B_d-不変な t 次以下の d 変数多項式からなるベクトル空間とし，その変数を $\mathbb{S}^{d-1}$ 上へ制限をした多項式からなるベクトル空間を $\mathcal{P}_t(\mathbb{S}^{d-1})^{B_d}$ とする．すなわち，$\mathcal{P}_t(\mathbb{S}^{d-1})^{B_d}=\{f\mid_{\mathbb{S}^{d-1}}\mid f\in\mathcal{P}_t(\mathbb{S}^{d-1})^{B_d}\}$ である．このとき，

$$
\mathcal{P}_t(\mathbb{S}^{d-1})^{B_d}\simeq\oplus_{l=0}^t\mathrm{Harm}_l(\mathbb{R}^d)^{B^d} \tag{5}
$$

であることにも注意する．

一般的には $\dim\mathcal{P}_t(\mathbb{S}^{d-1})^{B_d}\le\dim\mathcal{P}_t(\mathbb{S}^{d-1})$ が成り立り，実際に 7 次以下の B_d-不変調和多項式空間 $\mathcal{P}_7(\mathbb{S}^{d-1})^{B_d}$ に焦点を絞ると，

$$
\mathcal{P}_7(\mathbb{S}^{d-1})^{B_d}\simeq\mathrm{Harm}_0(\mathbb{R}^d)^{B^d}\oplus\mathrm{Harm}_4(\mathbb{R}^d)^{B^d}\oplus\mathrm{Harm}_6(\mathbb{R}^d)^{B^d}
$$

であり，さらに

$$
\dim\mathrm{Harm}_4(\mathbb{R}^d)^{B_d}=\dim\mathrm{Harm}_6(\mathbb{R}^d)^{B_d}=1
$$

であることが調和 Molien 級数を用いた議論により分かる (例えば，坂内-坂内 [3]，第 6 章を参照)．また，$\mathrm{Harm}_4(\mathbb{R}^d)^{B_d}$, $\mathrm{Harm}_4(\mathbb{R}^d)^{B_d}$ の具体的な基底はそれぞれ

$$
f_4=\mathrm{sym}(x_1^3)-\frac{6}{d-1}\mathrm{sym}(x_1^2x_2^2),\quad d\ge2, \tag{6}
$$

$$
f_6=\mathrm{sym}(x_1^6)-\frac{15}{d-1}\mathrm{sym}(x_1^2x_2^4)+\frac{180}{(d-1)(d-2)}\mathrm{sym}(x_1^2x_2^2x_3^2), \tag{7}
$$

で与えられることも初等的な計算により確かめることができる (cf. [36])．ここで

$$
\mathrm{sym}(f)=\frac{1}{|(\mathcal{S}_d)_f|}\sum_{g\in\mathcal{S}_d}f(x^g),\quad(\mathcal{S}_d)_f:=\{g\in\mathcal{S}_d\mid f(x^g)=f(\boldsymbol{x}),\forall x\in\mathbb{R}^d\}
$$

である．

Sobolev の定理

Theorem 3.8 (Sobolev の定理，[39])．(X,w) を B^d-不変重み付き有限集合とする．このとき，次の (i), (ii) は同値である．

(i) (X,w) が $\mathbb{S}^{d-1}$ 上の t-デザインである．

(ii) 任意の $f\in\mathcal{P}_t(\mathbb{S}^{d-1})^{B^d}$ に対して，

$$\sum_{\boldsymbol{x}\in X} w(\boldsymbol{x})f(\boldsymbol{x}) = \int_{\mathbb{S}^{d-1}} f(\boldsymbol{x})\,d\sigma(\boldsymbol{x})$$

上の定理の (ii) は (5) より，次のように書き換えることができる．

(ii)$'$ 任意の $f\in\mathrm{Harm}_l(\mathbb{R}^d)^{B_d}$, $l=0\ldots,t$ に対して，

$$\sum_{\boldsymbol{x}\in X} w(\boldsymbol{x})f(\boldsymbol{x}) = 0. \tag{8}$$

(ii)$'$ により，与えられた重み付き集合 (X,w) が $\mathbb{S}^{d-1}$ 上のデザインであるかを判定するためには上の代数方程式 (8) が成り立つかを確かめるだけでよい．

具体例　B_d-不変重み付き集合 (X,w) を注意深く選ぶことにより，数多くのデザインを構成することができる (cf. [36])．中でも幾つかのパラメタに対しては，次のように無限系列が得られる．Theorem 3.8，(6), (7) により，方程式 (8) がいつでも解をもつことを確認すればよい．

Theorem 3.9 (cf. [36])．$d=3n+2$, $n\geq 1$ において，常に $X=\boldsymbol{v}_1^{B_d}\cup\boldsymbol{v}_{n+2}^{B_d}$ となる $\mathbb{S}^{d-1}$ 上の (重み付き) 7-デザインが存在する．

本節では超八面体群 B_d に着目したが，他の有限既約鏡映群について例えば，Nozaki-Sawa [32, 33], および，Sawa-Hirao-Kageyama [36] を参照して欲しい．

3.3.3 点数削減法

本節では Victoir [41], および，Kuperberg [27] において提案された組合せ t-デザイン，および直交配列 (OA) を用いた点数削減法について具体例を用いて紹介する．

最初に組合せ t-デザインの定義を述べる．それぞれ v 個，b 個の元をもつ 2 つの有限集合

$$V=\{p_1,\ldots,p_v\},\quad B=\{B_1,\ldots,B_b\}$$

として，結合関係 $I\subset V\times B$ をもつ V と B の結合構造 (V,B,I) を考える．V, B の元をそれぞれ**点** (vertex), **ブロック** (block) と呼び，$(p_i,B_j)\in I$ のとき，点 p_i はブロック B_j に含まれるという．

Definition 3.10 (組合せ t-デザイン)**.** 結合構造 (V, B, I) が次の条件を満たすとき，(V, B, I) は組合せ t-デザインであるといい，t-(v, k, λ) と書く．

(i) 任意のブロックに含まれる点の数は一定 $(= k)$.
(ii) 任意の異なる t 個の点を同時に含むブロックの数は，点の選び方によらず一定 $(= \lambda)$

また，これは解析的には次のように言い換えることもできる．

$$\Omega = \Omega(k, v) = \left\{ \boldsymbol{x} = (x_1, \ldots, x_v) \mid x_i \in \{0, 1\}, \sum_{i=1}^{v} x_i = k \right\}$$

とする．このとき，Ω の有限部分集合 Y が組合せ t-(v, k, λ) デザインであるとは，次の条件を満たすことである．

(i) 任意の $f \in \mathcal{P}_t(\mathbb{R}^v)$ に対して，

$$\frac{1}{|Y|} \sum_{\boldsymbol{x} \in Y} f(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{\binom{v}{k}} \sum_{\boldsymbol{x} \in \Omega(k,v)} f(\boldsymbol{x}) \tag{9}$$

(ii) 任意の $f(\boldsymbol{x}) = x_1^{i_1} \cdots x_1^{i_v} \in \mathrm{Hom}_t(\mathbb{R}^d)$, $i_1, \ldots, i_v \in \{0, 1\}$,

$$\sum_{\boldsymbol{x} \in Y} f(\boldsymbol{x}) = \lambda$$

次に直交配列 (OA) の定義を述べる．

Definition 3.11 (直交配列 (OA))**.** A を $N \times k$-行列とし，その行列の各要素は S の元とする．A がレベル $|S|$, 強さ (strength) t, index λ (ここで t は $0 \le t \le \lambda$) の直交配列であるとは，すべての A の $N \times |S|$-部分配列が S 上の全ての t 組をちょうど λ 個ずつ含むときをいう．このような配列を $\mathrm{OA}(N, k, |S|, t)$ と表す．

ここで $\boldsymbol{x}_1, \ldots, \boldsymbol{x}_N$ を成分が ± 1 の $\mathrm{OA}(N, d, 2, 2e+1)$ の行とすると，(9) と同様に次が成り立つが知られている (例えば，[41] を参照).

$$\frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} f(\boldsymbol{x}_i) = \frac{1}{2^d} \sum_{\boldsymbol{g} \in \{-1,1\}^d} f(\boldsymbol{g}), \quad \forall f \in \mathcal{P}_{2e+1}(\mathbb{R}^d). \tag{10}$$

端的に言えば，超八面体群 B_d $(\simeq \mathcal{S}_d \rtimes (\mathbb{Z}/2\mathbb{Z})^d)$ をもとに構成した $\mathbb{S}^{d-1}$ 上のデザインは，組合せデザインを用いることにより，座標の入れ替え (すなわち，対称群 $\mathcal{S}_d$ の作用) で増えた点数を削減することが可能であり，直交配列を用いることにより，$\pm$ の入れ替え (すなわち，$(\mathbb{Z}/2\mathbb{Z})^d$ の作用) で増えた点数を削減することが可能である．

以下，$(d, t) = (8, 7)$ としたときの組合せ 3-デザインを用いた具体例を提示する．

$$X = \boldsymbol{v}_1^{B_8} \cup \boldsymbol{v}_4^{B_8}, \quad w(\boldsymbol{x}) = \begin{cases} \frac{1}{240} & \boldsymbol{x} \in \boldsymbol{v}_1^{B_8}, \\ \frac{1}{1200} & \boldsymbol{x} \in \boldsymbol{v}_4^{B_8} \end{cases}$$

とすると，この (X, w) は B_8-不変な $\mathbb{S}^7$ 上の 7-design であることが，Theorem 3.8 より容易に示すことができる．このとき，X の点数は $|X| = 2 \cdot {}_8C_1 + 2^4 \cdot {}_8C_4 = 1136$ 点である．

一般に $\mathbb{S}^{d-1}$ 上の $2t$-デザインの点数を削減するためには，組合せ t-(d, k, λ) デザインが必要である (k は非零な座標の個数)．このとき，組合せ 3-(8,4,1) デザイン (ブロックサイズは 14) が存在することが知られており (例えば，[24] を参照)，この 3-デザインを用いると点数は 1136 点数から $|X'| = 2 \cdot {}_8C_1 + 2^4 \cdot 14 = 240$ 点へと大幅に減らすことができる．(このとき，Fisher 型不等式は $N(8,7) \geq 2\binom{10}{7} = 240$ であるので，X' は $\mathbb{S}^7$ 上の tight 7-デザインとなる.)

実際には $|\Omega(8,4)| = {}_8C_4$ 個のベクトルの中から次の $|Y| = 14$ 個のベクトルだけ選べばよいが，これは組合せ 3-(8,4,1) デザインの接続行列に付随する次の 14 個のベクトルとして取ればよい．

$$
\begin{array}{cccccccc}
(1/2, & 1/2, & 1/2, & 0, & 1/2, & 0, & 0, & 0), \\
(1/2, & 0, & 1/2, & 1/2, & 0, & 1/2, & 0, & 0), \\
(1/2, & 0, & 0, & 1/2, & 1/2, & 0, & 1/2, & 0), \\
(1/2, & 0, & 0, & 0, & 1/2, & 1/2, & 0, & 1/2), \\
(1/2, & 1/2, & 0, & 0, & 0, & 1/2, & 1/2, & 0), \\
(1/2, & 0, & 1/2, & 0, & 0, & 0, & 1/2, & 1/2), \\
(1/2, & 1/2, & 0, & 1/2, & 0, & 0, & 0, & 1/2), \\
(0, & 0, & 0, & 1/2, & 0, & 1/2, & 1/2, & 1/2), \\
(0, & 1/2, & 0, & 0, & 1/2, & 0, & 1/2, & 1/2), \\
(0, & 1/2, & 1/2, & 0, & 0, & 1/2, & 0, & 1/2), \\
(0, & 1/2, & 1/2, & 1/2, & 0, & 0, & 1/2, & 0), \\
(0, & 0, & 1/2, & 1/2, & 1/2, & 0, & 0, & 1/2), \\
(0, & 1/2, & 0, & 1/2, & 1/2, & 1/2, & 0, & 0), \\
(0, & 0, & 1/2, & 0, & 1/2, & 1/2, & 1/2, & 0).
\end{array}
$$

上記のように組合せ構造を用いて点数を削減するためには，その組合せ構造自体が具体的にわかっていなくてはならない．例えば，組合せ構造を「近似した」構造を用いることにより，より柔軟に点数削減を行うことができるのではないか，どのようにその「近似構造」を見つけるかは面白い問題だと思われる．

4 QMC デザイン

近年，球面デザインは統計的実験計画法 [36, 17]，カーネル法における特徴写像の近似 [14], 数理ファイナンスへの応用として Wiener 空間上の cubature 理論 [29] など幅広く応用される．しかしながら，3.2 節でも述べたように具体的な応用に耐えうる球面デザインの系列の構成法は未だ確立していない．本節ではその解決法のひとつである球面上の Sobolev 空間に対する QMC デザインを紹介する．そのために先ずは球面 $\mathbb{S}^d$ 上の Sobolev 空間の定義から行う．本稿で扱う Sobolev 空間は再生核 Hilbert 空間であることが解析を行う上で非常に有効に働くことを注意しておく．

$h_l^d := \dim(\mathrm{Harm}_l(\mathbb{S}^d))$ とする．$Y_{l,k}(\boldsymbol{x}), k = 1, \ldots, h_l^d$ を次の条件を満たす $\mathrm{Harm}_l(\mathbb{S}^d)$ の正規直交基底とする:

$$\int_{\mathbb{S}^d} Y_{l_1,k_1}(\boldsymbol{x}) Y_{l_2,k_2}(\boldsymbol{x})\, d\sigma_d(\boldsymbol{x}) = \delta_{l_1,l_2}\delta_{k_2,k_2}$$

ここでやや乱暴だが，パラメータ $s \geq 0$ の Sobolev 空間 $\mathbb{H}^s(\mathbb{S}^d)$ を次の性質を満たす関数

$f \in \mathbb{L}_2(\mathbb{S}^d)$ の作るベクトル空間として定義する: $f \in \mathbb{L}_2(\mathbb{S}^d)$ のフーリエ係数

$$\hat{f}_{l,k} := \langle f, Y_{l,k} \rangle_{\mathbb{L}_2(\mathbb{S}^d)} = \int_{\mathbb{S}^d} f(\boldsymbol{x}) Y_{l,k}(\boldsymbol{x})\, d\sigma_d(\boldsymbol{x})$$

について，$\lambda_l := l(l+d-1)$ として，

$$\sum_{l=0}^{\infty} \sum_{k=1}^{h_l^d} (1+\lambda_l)^s |\hat{f}_{l,k}|^2 < \infty$$

を満たす (より詳細は例えば，Brauchart et al. [8] を参照)．また，$\mathbb{H}^s(\mathbb{S}^d)$ の内積とノルムは $a_l^{(s)} \asymp (1+\lambda_l)^{-s} \asymp (1+l)^{-2s}$ を満たす実正数列 $\{a_l^{(s)}\}_{l \geq 0}$ に対し，それぞれ

$$\langle f, g \rangle_{\mathbb{H}^s} := \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{k=1}^{h_l^d} \frac{1}{a_l^{(s)}} \hat{f}_{l,k} \hat{g}_{l,k}, \quad \|f\|_{\mathbb{H}^s} := \left(\sum_{l=0}^{\infty} \sum_{k=1}^{h_l^d} \frac{1}{a_l^{(s)}} |\hat{f}_{l,k}|^2 \right)^{1/2}$$

とする．

球面上の Sobolev 空間 $\mathbb{H}^s(\mathbb{S}^d)$ の解析において重要となるのが，先述したようにこれが再生核 Hilbert 空間になることである．例えば，Brauchart et al. [8] におけるジッタード・サンプリングの近似性能の評価は，内積をデリケートに選ぶことにより，$d/2 < s < d/2+1$ に対して，再生核 $K^{(s)}(\cdot,\cdot)$ が以下のようにコンパクトな表示を持つことを利用している (Cui-Freeden [13] で提示された distance kernel の一般化であることから，Brauchart らは，**generalized distance kernel** と呼んでいる):

$$K^{(s)}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) := 2V_{d-2s}(\mathbb{S}^d) - |\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}|^{2s-d}, \quad \forall \boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \in \mathbb{S}^d. \tag{11}$$

Sobolev 空間 $\mathbb{H}^s(\mathbb{S}^d)$ において，積分 $I(f) = \int_{\mathbb{S}^d} f(\boldsymbol{x})\, d\sigma_d(\boldsymbol{x})$ に対する N 点集合 $X_N \subset \mathbb{S}^d$ での近似 $Q[X_N](f) := \frac{1}{N} \sum_{\boldsymbol{x} \in X_N} f(\boldsymbol{x})$ における最悪誤差 (worst-case error) を

$$\mathrm{wce}(Q[X_N]; \mathbb{H}^s(\mathbb{S}^d)) := \sup_{\substack{f \in \mathbb{H}^s(\mathbb{S}^d) \\ \|f\|_{\mathbb{H}^s} \leq 1}} |Q[X_N](f) - I(f)|$$

で定義する．このとき，$\mathbb{H}^s(\mathbb{S}^d)$ 上の QMC デザイン系列は次で定義される．

Definition 4.1 ($\mathbb{H}^s(\mathbb{S}^d)$ 上の QMC デザイン系列, [8])**.** $s > d/2$ とし，$\{X_N\}$ を $\mathbb{S}^d$ 上の点集合の増大列とする．このとき，N に依存しない定数 $c(s,d) > 0$ が存在し，

$$\mathrm{wce}(Q[X_N]; \mathbb{H}^s(\mathbb{S}^d)) \leq \frac{c(s,d)}{N^{s/d}}. \tag{12}$$

が成り立つとき，増大列 $\{X_N\}$ を $\mathbb{H}^s(\mathbb{S}^d)$ 上の QMC デザイン系列であると言う．

近年，Brauchart et al. [8] により，一般の Sobolev 空間 $W_p^s(\mathbb{S}^d)$ 上の QMC デザインや，球面以外の多様体上の Sobolev 空間における QMC デザインが定義され，その研究が行われている．QMC デザインの「確率的な」構成法に関する研究は Brauchart et al. [8] のジッタード・サンプ

リングを用いた方法，筆者 [22], Brauchart et al. [7] による行列式点過程と呼ばれる確率点過程を用いた方法などが進められている (さらに Brauchart et al. [7] では，“hyperuniformity” と呼ばれる概念のもとで統一的に扱う試みを行なっている)．一方で「決定的な」構成法については，未解決であり，さらなる進展が望まれる．

参考文献

[1] Bajnok, B.: Construction of spherical t-designs. Geom. Dedicata **43**(2) 167–179 (1992)

[2] 坂内英一，On some problems related to spherical designs. 数理解析研究所講究録 **1844**, 103–112 (2013)

[3] 坂内英一，坂内悦子，球面上の代数的組合せ理論，丸善出版，2012

[4] 坂内英一，坂内悦子，伊藤達郎，代数的組合せ論入門，共立出版，2016

[5] Bannai, E., Bannai, E.: Spherical designs and Euclidean designs. In: Recent Developments in Algebra and Related Areas (Beijing, 2007), *Adv. Lect. Math.*, vol. 8, pp. 1–37. Higher Education Press, Beijing; International Press (2009)

[6] Brauchart, J.S., Grabner, P.J.: Distributing many points on spheres: minimal energy and designs. J. Complexity **31**(3), 293–326 (2015)

[7] Brauchart, J.S., Grabner, P.J., Kusner, W., Ziefle, J.: Hyperuniform point sets on the sphere: probabilistic aspects. arXiv:1809.02645v2

[8] Brauchart, J.S., Saff, E.B., Sloan, I.H., Womersley, R.S.: QMC designs: optimal order quasi-Monte Carlo integration schemes on the sphere. Math. Comput. **83**(290), 2821–2851 (2014)

[9] Bondarenko, A., Radchenko, D., Viazovska, M.: Optimal asymptotic bounds for spherical designs. Ann. Math. **178**, 443–452 (2013)

[10] Bondarenko, A., Radchenko, D., Viazovska, M.: Well-separated spherical designs. Constr. Approx. **41**(1), 93–112 (2015)

[11] Chen, X., Frommer, A., Lang, B.:Computational existence proofs for spherical t-designs. Numer. Math. **117**(2), 289–305 (2011)

[12] Chen, X., Womersley, R. S.: Existence of solutions to systems of underdeter- mined equations and spherical designs. SIAM J. Numer. Anal. **44**(6), 2326–2341 (2006)

[13] Cui, J., Freeden, W.: Equidistribution on the sphere. SIAM J. Sci. Comput. **18**(2), 595–609 (1997)

[14] Dao, T., De Sa, C., Ré, C.: Gaussian quadrature for kernel features. Adv. Neural. Inf. Process. Syst. **30**, 6109–6119 (2017)

[15] Delsarte, P.: An algebraic approsch to the association schemes of coding theory. Philips Res. Rep. Suppl. **10** (1973)

[16] Delsarte, P., Goethals, J.M., Seidel, J.J.: Spherical codes and designs. Geom. Dedicata

6(3), 363–388 (1977)

[17] Dette, H., Maria, K., Kirsten, S., Josua, G.: Optimal designs for regression with spherical data. Electron. J. Stat. **13**(1), 361–290 (2019)

[18] Etayo, U., Marzo, J., Ortega-Cerdá, J.: Asymptotically optimal designs on compact algebraic manifolds. Monatsh. Math. **186**(2), 235–248 (2018)

[19] Gräf, M., Potts, D.: On the computation of spherical designs by a new optimization approach based on fast spherical Fourier transforms. Numer. Math. **119**(4), 699–724 (2011)

[20] Gräf, M., Potts, D.: Table of spherical designs. http://www-user.tu-chemnitz.de/˜potts/workgroup/graef/quadrature

[21] Hardin, R.H., Sloane, N.J.A.: Mclaren's improved snub cube and other new spherical designs in three dimensions. Discrete Comput. Geom. **15**(4), 433–440 (1996)

[22] Hirao, M.: QMC designs and determinantal point processes. In: Monte carlo and quasi-monte carlo methods 2016, pp. 331–343. Springer (2018)

[23] Hirao, M., Sawa, M., Jimbo, M.: Constructions of Φ_p-optimal rotatable designs on the ball. Sankhyā Ser. A **77**(1), 211–236 (2015)

[24] Khosrovshahi, G.B., Laue, R.: t-Designs with $t \geq 3$. In: Handbook of Combinatorial Designs (2nd ed.), pp. 79–101. CRC Press, Boca Raton, USA (2007)

[25] Korevaar, J., Meyers, J.L.H.: Spherical Faraday cage for the case of equal point charges and Chebyshev-type quadrature on the sphere. Integral Transform. Spec. Funct. **1**(2), 105–117 (1993)

[26] Kuijlaars, A.B.J.: The minimal number of nodes in Chebyshev type quadrature formulas. Indag. Math. **4**, 339–362 (1993)

[27] Kuperberg, G.: Special moments. Adv. in Appl. Math. **34**(4), 853–870 (2005)

[28] Kuperberg, G.: Numerical cubature using error-correcting codes. SIAM J. Numer. Anal. **44**(3), 897–907 (2006)

[29] Lyons, T., Victoir, N.: Cubature on Wiener spaces. Proc. R. Soc. Lond. A Math. Phys. Sci. **460**, 169–198 (2004)

[30] 宗政 昭弘: 球面上の最適配置入門 (2007). 応用数学連携フォーラム第 1 回ワークショップ, http://www.math.is.tohoku.ac.jp/˜munemasa/documents/2007-09-04-for-upload.pdf

[31] 宗政 昭弘: 球面上の配置と符号理論 (2018). 東北大学情報科学研究科談話会, http://www.math.is.tohoku.ac.jp/˜munemasa/documents/20181206.pdf

[32] Nozaki, H., Sawa, M.: Note on cubature formulae and designs obtained from group orbits. Can. J. Math. **64**(6), 1359–1377 (2012)

[33] Nozaki, H., Sawa, M.: Remarks on Hilbert identities, isometric embeddings, and invariant cubature. Algebra i Analiz **25**(4), 139–181 (2013)

[34] Rabau, P., Bajnok, B.: Bounds for the number of nodes in Chebyshev type quadrature

formulas. J. Approx. Theory **67**, 199–214 (1991)

[35] Sawa, M., Hirao, M.: Characterizing D-optimal rotatable designs with finite reflection groups. Sankhyā Ser. A **79**(1), 101–132 (2017)

[36] Sawa, M., Hirao, M., Kageyama, S.: Euclidean design theory. Springer (2019)

[37] Seymour, P.D., Zaslavsky, T.: Averaging sets: a generalization of mean values and spherical designs. Adv. Math. **52**(3), 213–240 (1984)

[38] Sloan, I. H., Womersley, R. S.: A variational characterisation of spherical designs. J. Approx. Theory **159**(2), 308–318 (2009)

[39] Sobolev, S.L.: Cubature formulas on the sphere which are invariant under transformations of finite rotation groups (in Russian). Dokl. Akad. Nauk SSSR **146**, 310–313 (1962)

[40] Stroud, A.H.: Approximate Calculation of Multiple Integrals. Prentice-Hall Series in Automatic Computation. Prentice-Hall, Inc., Englewood Cliffs, N.J. (1971)

[41] Victoir, N.: Asymmetric cubature formulae with few points in high dimension for symmetric measures. SIAM J. Numer. Anal. **42**(1), 209–227 (2004)

[42] Wagner, G.: On averaging set. Monatsh. Math. **111**, 69–78 (1991)

[43] Yudin, V.A.: Lower bounds for spherical designs. Izv. Ross. Akad. Nauk Ser. Mat. **61**(3), 213–223 (1997)