数理解析研究所講究録
第 272 巻 1976 年 124-130

モンテカルロ積分における2分法

阪大 基礎工　丘本 正

1. 序. s 次元空間内の有限区間 G_s の上で定義された実数値関数 f が与えられ，最初 $f(x)$ の値は未知であるが，G_s 内の任意の点 x において，誤差なしに観測できるものとする. モンテカルロ積分とは，適当に確率的に定められた N 個の点 x において $f(x)$ の値を観測することにより，未知母数

$$I = \int_{G_s} f(x)\,dx$$

を推定する問題である（Hammersley & Handscomb (1964)). この問題は Kitagawa (1950) ではランダム積分とよばれ，また連続母集団からの標本調査と解釈することもできる.

I を推定するために，これまでいろいろな方法が提出された. 単純ランダム法，補助情報を利用する Hammersley & Morton (1956) の antithetic 法，Haber (1966, 1967) のメッシュ法，1次元の場合に順序統計量を利用する Fukuba et al (1974) の方法など．ここでは f が連続的微分可能な場合に利用できる2分法を提出しよう．

2．いくつかのモンテカルロ推定量．一般性を失なうことなく，G_s は単位立方体 $[0,1]^s$ とする．単純ランダム推定量

$$J_0 = \frac{1}{N}\sum_{r=1}^{N} f(x_r)$$

においては，x_r は i.i.d. であり，集合 G_s 上の一様分布 $U(G_s)$ に従う．J_0 は I の不偏推定量であって，分散は

$$var(J_0) = \frac{1}{N}\left(\int_{G_s} f^2 - I^2\right)$$

である。

G_s の x^i 軸 $(i=1,\cdots,s)$ に沿う辺を n_i 個の線分に等分することによって得られる合同な部分区間を A_r $(r=1,\cdots,N)$ とする。ここに $N=n_1\cdots n_s$．c_r を A_r の中心，x_r を互いに独立に A_r の中でランダムに取った点とし，

$$x_r' = 2c_r - x_r$$

とする．Haber (1966, 1967) は f のそれぞれ N, $2N$ 回の観測に基づく I の不偏推定量として

$$J_1 = \frac{1}{N}\sum_{r=1}^{N} f(x_r)$$

$$J_2 = \frac{1}{2N}\sum_{r=1}^{N}\{f(x_r)+f(x_r')\}$$

を提出した．G_s 上で定義され，k 次の連続な偏導関数をもつ実数値関数の全体を C^k $(k=1,2)$ で表わす．以下 $N\to\infty$ といえば，$n=\min(n_1,\cdots,n_s)\to\infty$ を意味するものとする．Haber は $f\in C^k$ $(k=1,2)$ のとき

$$var(J_k)=\tau_N^2(J_k)+o((Nn^{2k})^{-1}),\quad (N\to\infty)$$

であることを示した．ここに

$$\tau_N^2(J_1)=\frac{1}{12N}\sum_{i=1}^{s}\frac{1}{n_i^2}\int_{G_s}\left(\frac{\partial f}{\partial x^i}\right)^2$$

$$\tau_N^2(J_2)=\frac{1}{1440N}\left\{2\sum_{i=1}^{s}\frac{1}{n_i^4}\int\left(\frac{\partial^2 f}{\partial (x^i)^2}\right)^2+5\sum_{i\neq j=1}^{s}\frac{1}{(n_in_j)^2}\int\left(\frac{\partial^2 f}{\partial x^i\partial x^j}\right)^2\right\}$$

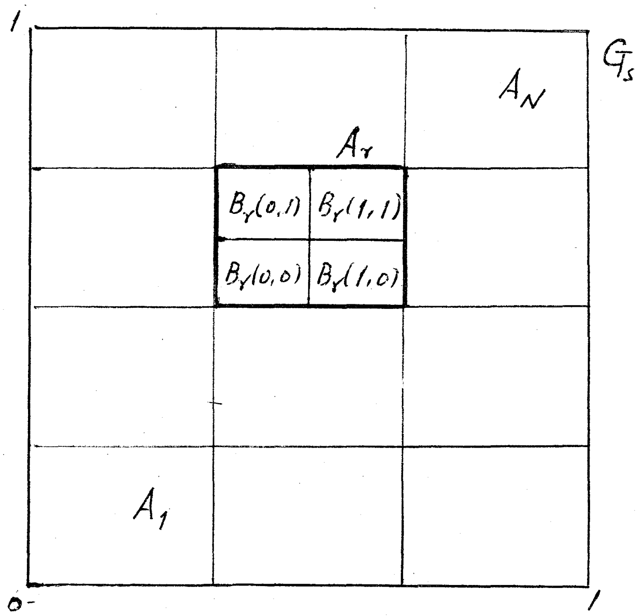
3．2分法．前節で G_s を N 個の部分区間 A_r に分割したが，各 A_r の各辺をさらに2等分することによって，これを 2^s 個の部分区間 $B_r(\pi)$ に分割しよう．ここに

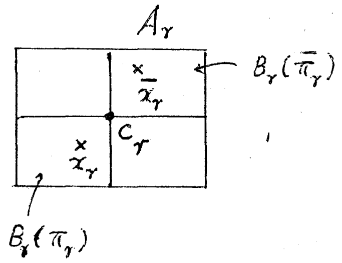
$$\pi=(\pi^1,\cdots,\pi^s),\quad \pi^i=0 \text{ または } 1\ (i=1,\cdots,s).$$

π を $B_r(\pi)$ の位置とよび，$\pi=(0,\cdots,0)$，$(1,\cdots,1)$ はそれぞれ'左下'，'右上'の部分区間を表わすように自然な対応を定めておく．Π で 2^s 個の π 全体を表わすことに

し，π と $\overline{\pi} = (\overline{\pi}^1, \cdots, \overline{\pi}^s)$ は $\pi^i + \overline{\pi}^i = 1$ ($\forall i$) のとき，相補的 (complementary) とよぶことにする．

2分法推定量 J_B は次のように定義される．まず Π から





ランダムに，かつ互いに独立に N 個の位置 $\pi_1, \cdots, \pi_N$ を取り出し，次にそれらの相補 (complement) $\overline{\pi}_1, \cdots, \overline{\pi}_N$ を取る．これで $B_r(\pi_r)$, $B_r(\overline{\pi}_r)$ が定まるから，それらの中からランダムに，かつ互いに独立に取った点をそれぞれ x_r, $\overline{x}_r$ とする．このとき

$$J_B = \frac{1}{2N} \sum_{r=1}^{N} \{ f(x_r) + f(\overline{x}_r) \}$$

とする．Haber の J_2 においては，x_r' は x_r から完全に定まるが，J_B においては $\overline{x}_r$ にまだランダム性が残っている．

定理 1.

(i) $E(J_B) = I$

(ii) $f \in C^1$ ならば, $\mathrm{var}(J_B) = \tau_N^2(J_B) + o((Nn^2)^{-1})$ $(N \to \infty)$, ここに

$$\tau_N^2(J_B) = \frac{1}{96N} \sum_{i=1}^{s} \frac{1}{n_i^2} \int_{G_s} \left(\frac{\partial f}{\partial x^i}\right)^2$$

(iii) J_B は $N \to \infty$ のとき漸近的に $N(I, \tau_N^2(J_B))$ に従う.

J_B の分散を推定するために

$$D_B^2 = \frac{1}{28N^2} \sum_{\gamma=1}^{N} \{f(x_\gamma) - f(\bar{x}_\gamma)\}^2$$

を定義する.

定理 2. $f \in C^1$ ならば

$$E(D_B^2) = \tau_N^2(J_B) + o((Nn^2)^{-1}) \qquad (N \to \infty)$$

かつ D_B^2 は $N \to \infty$ のとき漸近的に平均 $\tau_N^2(J_B)$, 適当な分散をもつ正規分布に従う.

注意 1. J_B, J_1 はともに不偏であり, かつ仮定 $f \in C^1$ の下で漸近正規であり, J_B は J_1 より漸近分散が小さいから, I の推定量として J_B は J_1 より良い. もっとも J_B, J_1

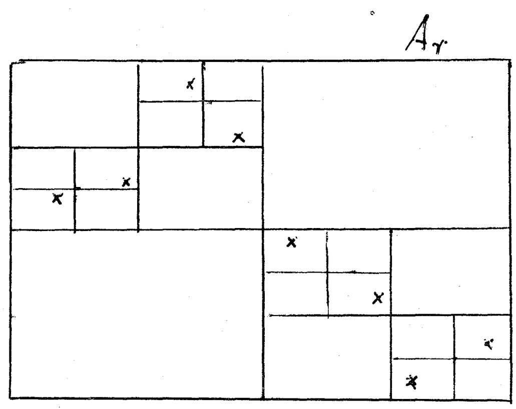
はそれぞれ 2N, N 回の観測に基づいているから，単に $\sigma_N^2(J_B)$ と $\sigma_N^2(J_1)$ を比較するのは不公平であって，観測回数をそろえる修正が必要である．逆に，漸近分散が一致するようにして，観測回数の比を取れば，J_B の J_1 に対する漸近相対効率は

$$ARE = 2^{2(s-1)/(s+1)}$$

となり，1以上である．

注意2. J_2 は仮定 $f \in C^2$ を要求するが，この仮定の下では J_2 は J_B より良い．漸近分散の次数が高いからである．

注意3. 2分法のアイデアを多段2分法に拡張することができる．各段階ごとに 2^s 個の部分区間から2個の相補の位置を選ぶことにより，p 段階ならば 2^pN 回の観測に基づくことになる．段階数が増すにつれ，しばらくは J_B の漸近分散が減少するが，やがて $(Nn^{\alpha})^{-1}$ のオーダの項において増加し始める．3段階より多くすることは無理なようである．



3段階 2分法

参考文献

[1] Fukuba, Y., Ito, K. & Tabata, Y. (1974). A probabilistic approach to the extreme-search method. Third Osaka Manag. Sci. Colloquium.

[2] Haber, S. (1966). A modified Monte-Carlo quadrature. Math. Comp. 19 361–368.

[3] Haber, S. (1967). A modified Monte-Carlo quadrature. II. Math. Comp. 21 388–397.

[4] Hammersley, J. M. & Handscomb, D. C. (1964). Monte Carlo Methods. London, Methuen.

[5] Hammersley, J. M. & Morton, K. W. (1956). A new Monte Carlo technique: antithetic variates. Proc. Camb. Phil. Soc. 52 449–475.

[6] Kitagawa, T. (1950). Random integrations. Bull. Math. Statist. 4

[7] Okamoto, M. Asymptotic normality in Monte Carlo integration (投稿中).