数理解析研究所講究録
第 850 巻 1993 年 198-206

無限次元準モンテカルロ法

九大教養　　杉　田　　洋 (Hiroshi SUGITA)

Abstract:
$[0,1)$ 上の無理数回転によってできる数列を 2 進小数展開して $\{0,1\}^\infty$ 上の列 $\{X_n\}_{n=1}^\infty$ を作る。このとき、$\{0,1\}^\infty$ 上の連続関数 F に対して

$$\frac{1}{K}\sum_{n=1}^{K} F(X_n) \longrightarrow \int_{\{0,1\}^\infty} F(\xi)P(d\xi), \quad K\to\infty,$$

が成り立つ。ただし P は $\{0,1\}^\infty$ 上の公平な Bernoulli 測度である。この事実は 2 進小数展開を多倍長で行うことによって random walk などに関する無限次元数値積分計算に応用できる。

0 プロローグ

モンテカルロ法は "乱数" を使って色々な確率的現象の近似計算を行う方法一般をいう。しかしこの言葉の創始者フォン・ノイマンによればモンテカルロ法の原意は「決定論的に定まる量を確率論的に求めること」であったという[1]。

1 モンテカルロ法の弱点

Pを $\{0,1\}^\infty$ 上の公平な Bernoulli 測度とする。すなわち、$\xi=(\xi^{(1)},\xi^{(2)},\ldots)\in\{0,1\}^\infty$ とするとき、$\xi^{(1)},\xi^{(2)},\ldots$ は P の下で独立同分布 (i.i.d.) の確率変数列であり、その分布は

$$P(\xi^{(1)}=0) = P(\xi^{(1)}=1) = \frac{1}{2}$$

である。

このとき 1 次元 simple random walk $\{S_m\}_{m=0}^\infty$ は確率空間 $(\{0,1\}^\infty, P)$ 上の確率変数列として

$$\begin{cases} S_0(\xi) &=& 0, \\ S_m(\xi) &=& \sum_{n=1}^m (2\,\xi^{(n)}-1), \quad \xi=\{\xi^{(n)}\}_{n=1}^\infty \in \{0,1\}^\infty \end{cases}$$

によって定義される。

[1] 岩波数学辞典第 3 版、p.419

さて、たとえば S_m の分布、すなわち確率 $P(S_m = a)$ 、$a \in \mathbf{Z}$ 、 を計算機によって数値的に計算させることを考えよう。モンテカルロ法はこの場合、Pに従う $\{0,1\}^\infty$-値確率変数 ξ の独立なコピー $\xi_1, \xi_2, \ldots$ に対して

$$\frac{1}{K}\sum_{n=1}^{K} \mathbf{1}_{\{S_m=a\}}(\xi_n) \longrightarrow P(S_m = a), \quad K \to \infty, \quad \text{a.s.} \tag{1}$$

となること (大数の強法則) を用いて計算するものである。ただし、

$$\mathbf{1}_{\{S_m=a\}}(\xi) = \begin{cases} 1, & S_m(\xi) = a, \\ 0, & S_m(\xi) \neq a, \end{cases}$$

である。実際には $\{0,1\}$-値の乱数を多数発生させて十分大きな Kに対して (1) の左辺を計算する。

しかし、ここに「どのようにして乱数を発生させるか」という大問題が生ずる。現在、知られている優秀な (擬似) 乱数[2]を用いればほとんど望む結果が出ているようであるが理論的な保証はない[3]。従って不幸なことに現実にはモンテカルロ法を確実に行う手段は存在しないのである。

2 {0,1}-列上の準モンテカルロ法

ところでいま問題にしている $P(S_m = a)$ は $\{0,1\}^\infty$上の積分として次のように書ける。

$$\int_{\{0,1\}^\infty} \mathbf{1}_{\{S_m=a\}}(\xi) P(d\xi)$$

この例のように現実に知りたい量は個々の $\xi \in \{0,1\}^\infty$に対する $\{0,1\}^\infty$上の確率変数 Fの実現値 $F(\xi)$ そのものではなく、その平均値 (積分値) である場合が多い。そこで問題を測度空間 $(\{0,1\}^\infty, P)$ 上の数値積分と見ることにしよう。すると (1) の左辺において $\{0,1\}^\infty$ 上の sample points ξ_n たちは独立である必要はなく、ただ $\{0,1\}^\infty$上で稠密に Pに従って均等に分布すれば良い。そのような立場に立った数値積分法は有限次元の場合は “準モンテカルロ法” として知られていて、大きな効果をあげている (C.f. [10]) 。

“均等分布する点列” を具体的に作る方法は種々知られているが、最も有名なのが無理数回転 (Weyl 変換ともいう) を用いるものである。基本となる定理 (Weyl の定理) を 1 次元の場合に紹介する (C.f. [3][11] 、あるいは [5] の p.54) 。

---

[2]たとえば M-系列 ([6]) 。

[3]それどころか、高嶋は十分優秀といわれているある M-系列について random walk に関する逆正弦法則による検定を行い、有意の誤差を発見している ([9]) 。

Theorem 1 任意の $x_1 \in [0,1)$ と任意の無理数 $\alpha > 0$ に対して数列 $\{x_n\}_{n=1}^{\infty}$ を

$$x_n = (x_{n-1} + \alpha) \bmod 1, \quad n = 2, 3, \ldots$$

と定める。このとき $[0,1)$ 上の Riemann 可積分な関数 f に対して、

$$\frac{1}{K}\sum_{n=1}^{K} f(x_n) \longrightarrow \int_0^1 f(x)dx, \quad K \to \infty \tag{2}$$

が成り立つ。

Theorem 1 は 2 進小数展開によって容易に無限次元に引き上げることができる。そのために、ほとんど至るところ定義された全単射写像 $\varphi : \{0,1\}^{\infty} \to [0,1)$ を

$$\varphi(\xi) := \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\xi^{(n)}}{2^n}, \quad \xi = \{\xi^{(n)}\}_{n=1}^{\infty} \in \{0,1\}^{\infty}$$

によって定める。このとき、φ は確率空間 $(\{0,1\}^{\infty}, P)$ から確率空間 $([0,1), dx)$ への測度を保存する写像となる ([1] の最初の十数ページを参照) 。そこで次が成り立つ。

Theorem 2 ([8]) $\{x_n\}_{n=1}^{\infty}$ を Theorem 1 における $[0,1)$ 上の数列とし、

$$\{0,1\}^{\infty} \ni X_n := \varphi^{-1}(x_n), \quad n = 1, 2, \ldots$$

と置く。このとき、$\{0,1\}^{\infty}$ の直積位相に関して連続な関数 F に対して、

$$\frac{1}{K}\sum_{n=1}^{K} F(X_n) \longrightarrow \int_{\{0,1\}^{\infty}} F(\xi)P(d\xi), \quad K \to \infty, \tag{3}$$

が成り立つ。

Proof. まず F が cylindrical function であるときは $F \circ \varphi^{-1}$ は階段関数だから $[0,1)$ 上で Riemann 可積分となり、Theorem 1 と写像 φ の測度保存性より (3) が成り立つ。一般の連続関数 F は cylindrical functions の一様収束極限であるから、$F \circ \varphi^{-1}$ も $[0,1)$ 上の階段関数の一様収束極限となり、やはり Riemann 可積分である。従ってこの場合も (3) が成り立つ。 □

Theorem 2 に従って $\{0,1\}^{\infty}$ 上の関数の積分を求める方法を "**$\{0,1\}$-列上の準モンテカルロ法**" と呼ぶことにしよう。有限次元の場合と同様に数値積分法として通常のモンテカルロ法よりも、少なくとも理論が存在するという点で優れている。たとえば $\{0,1\}^{\infty}$ 上の関数 $\mathbf{1}_{\{S_m = a\}}$ は cylindrical function であるから $P(S_m = a)$ の値はこの定理によって計算できることが分かる。

3　計算機による数値実験

「Theorem 2 に従って $P(S_{500}=a)$、$a\in\mathbf{Z}$、を計算する」ことを目的として、計算機による数値実験を行った。それについて概要を述べる。その特長は多倍長計算を使用した点にある。単に桁数を増やすという量的変化が質的変化 (1 次元の準モンテカルロ法から $\{0,1\}$-列上の準モンテカルロ法への推移) をもたらすことに注目されたい。

使用した無理数 α は黄金分割の比として知られている次の値である。

$$\alpha=\frac{\sqrt{5}-1}{2}=0.6180339887\ldots=(0.10011110001\ldots)_2$$

ここで $(\cdots)_2$ は 2 進数展開を表わす。また初期値として円周率 π の小数部分をとった。

$$x_1=\pi-3=0.1415926535\ldots=(0.00100100001\ldots)_2$$

これら 2 数が我々の目的のために良い選択だったかどうかは分からない[4]。ただし、α と x_1 を下手に選ぶと収束が遅くなることあるのは確かである。

とにかく、これら 2 数を 2 進小数 3,000 桁まで求めてデータファイルを作りプログラムに読み込ませることにした。ただし実際に計算する桁数は必要に応じて変更する。我々は S_{500} の分布を最大サンプル数 $K=10,000,000$ として計算することにしたので、2 進 540 桁の精度で多倍長加算を繰り返し、そのうち上位 500 桁を使用した。2 進 40 桁だけ余分に加算を繰り返したのは、有限桁に制限したことによる誤差を生じさせないためである。その結果、我々は要求された精度で要求された回数だけ無理数回転を正確に実行したと確信している。

実験では、32 ビットパーソナルコンピュータ[5]および Pascal コンパイラ[6] を使って S_{500} の 10,000,000 サンプルを計算するために要した時間はおよそ 19 時間であった。これは 1 秒間に約 140 個の S_{500}、つまり約 70,000 個のランダムな 0 または 1 を算出した勘定になる。多倍長計算といっても加算だけであるから $\{0,1\}$-列の発生効率は極めて良いことが分かる。

次のページに、この実験で得られた S_{500} の相対度数分布をサンプル数 $K=1{,}000$、10,000、100,000、1,000,000 および 10,000,000 の各々の場合について図示した。すなわち、これらは Theorem 2 に基づいて上記の各 K について

$$\frac{1}{K}\sum_{n=1}^{K}\mathbf{1}_{\{S_{500}=a\}}(X_n),\quad -500\le a\le 500$$

を計算し、そのグラフを描いたものである。

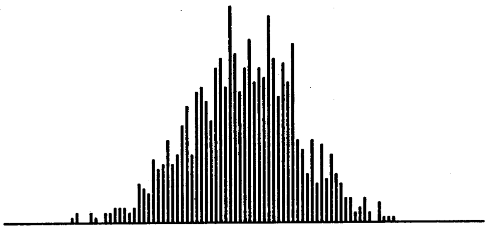
---

[4]黄金分割の比は Diophantus 近似の意味で最も有理数で近似しにくいという事実を基に我々の無理数として選んだが、その実際的効用はまだわからない。

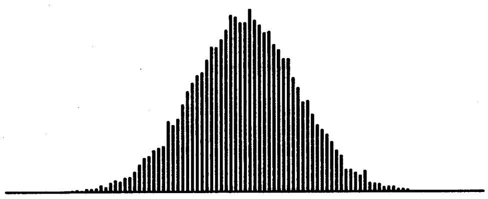
[5]NEC PC-9801RA(20MHz)、数値計算用プロセッサなし。

[6]Turbo-Pascal Ver.5.5 (Borland 社)

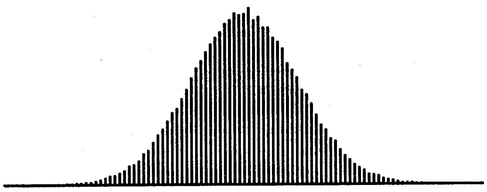
“ S_{500} の相対度数分布 ”



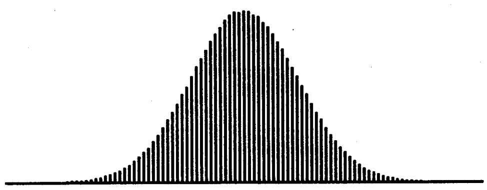
1,000 samples



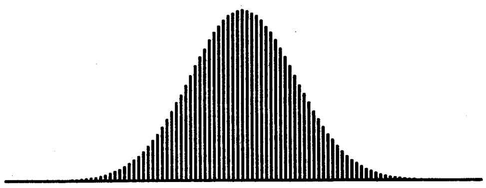
10,000 samples



100,000 samples



1,000,000 samples



10,000,000 samples

Fig.1

4 収束の速さに関する注意

Theorem 1 で述べた準モンテカルロ法における収束の速さは

$$\left|\frac{1}{K}\sum_{n=1}^{K} f(x_n) - \int_0^1 f(x)dx\right| = O(K^{-1+\varepsilon}), \quad K \to \infty, \quad \forall\varepsilon > 0$$

であることが知られている ([2])。通常のモンテカルロ法の収束の速さは $O(K^{-1/2})$ であるから、このことは準モンテカルロ法の方が優れていることの一つの証である。我々の無限次元準モンテカルロ法の場合も、もちろん $O(K^{-1+\varepsilon})$ で収束することが数学的に厳密に保証されている。

ところが、我々の数値実験では $O(K^{-1+\varepsilon})$ というオーダーを見いだすことができなかった。実際、Fig.2 は 500 ステップの random walk による中心極限定理のシミュレーションで誤差の収束状況を示している。横軸はサンプル数 (最大 10,000,000) の対数、縦軸は誤差の対数である。図に引かれた直線は傾きが$-1/2$ であり、これは誤差の収束がおよそ $O(K^{-1/2})$ であることを意味する。Fig.3 は同じく 500 ステップの random walk で逆正弦法則 (正の側の滞在時間の分布) のシミュレーションを行ったときの誤差の収束状況である。この場合も、図に引かれた直線の傾きは$-1/2$ であり、収束がほぼ $O(K^{-1/2})$ であることが読みとれる。これでは通常のモンテカルロ法の場合と変わらない。

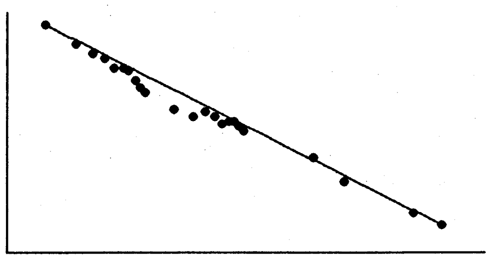


Fig.2

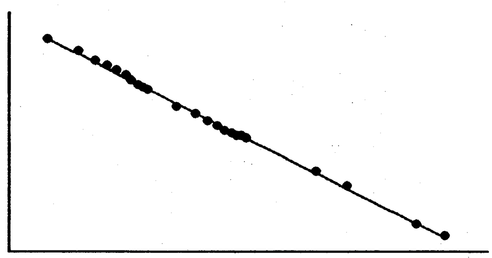


Fig.3

詳しい解析はまだ行っていないが、このような状況を直感的に説明することは可能である。一般に準モンテカルロ法がモンテカルロ法に比べて速い収束を実現する理由はサンプル数が十分大きい数に達したとき、無理数回転の点列の方が独立確率変数列 (i.i.d.) のサンプルよりも偏在しにくいからである。なぜならば、i.i.d. の場合はサンプル数が増えてくると "空いた所" に落ちにくくなり偏在の原因となる一方、無理数回転で得られる点列は "空いた所" に計画的に落されるので偏在しにくいのである。

さて我々の実験の場合、S_{500} のサンプルを最大 10,000,000 個算出した。この数は日常的感覚からは決して小さな数ではないが、500 ステップの random walk の道の総数 2^{500} から見るとまったく微量だといわざるを得ない。だから、この場合、i.i.d. のサンプルと無理数回転で得られる点列の間に決定的な差が現れず、収束の速さとしてほぼ同じオーダーが観測されるのであろう。

ためしに、Fig.2 の場合と同様のことをステップ数 24 の random walk で試みた (Fig.4)。最大サンプル数は 2^{26} と大変多くとっている。図の直線 k の傾きは$-1/2$、直線 l の傾きは -1 であるから、この場合はサンプル数が小さいうちは $O(K^{-1/2})$ 程度だが、サンプル数が大きいと $O(K^{-1+\varepsilon})$ が見えてくる。このことは上記の推論と符合する。

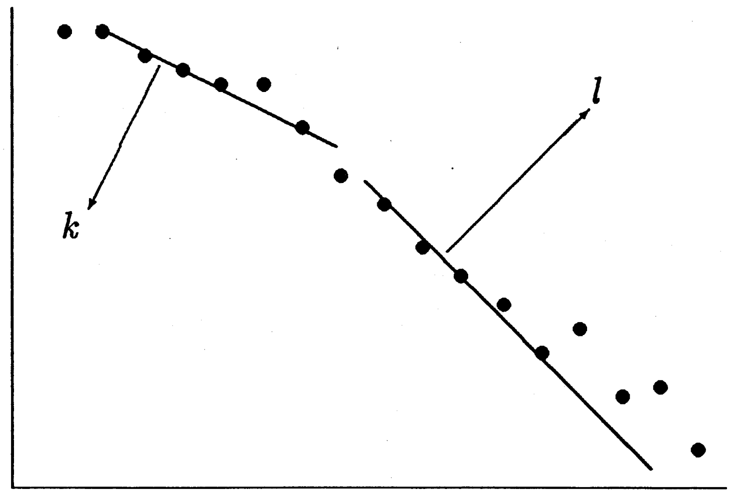


Fig.4

もし以上の推論が正しければ、非常に高い次元の準モンテカルロ法では、いかなる力学系を利用したとしても、観測される収束の速さはほとんど $O(K^{-1/2})$ を越えることができないであろう。筆者はこのことを理論的に裏付ける必要を感じている。

5 結語

確率変数の平均 (期待値) を数値計算によって求めようとする場合に、乱数が必要だと思うのは実は強迫観念にすぎない。確率論的にいうと、確率空間を設定した後では、原理的にはすべての事象の確率もすべての確率変数の分布も決定されている。だから決定論的手法で —すなわち乱数を使わずに— それらが求まっても何ら不思議ではないのである。むしろ、数学者の良心に照らしていえば、不確かな擬似乱数を用いるより、理論的に保証された決定論的手法が存在するならば、そちらを使う方を勧めざるを得ない。

ここで述べた $\{0,1\}$-列上の準モンテカルロ法はそのような決定論的手法の最も単純なものと考えられよう。もちろん、いくつかの技術的難点もある。たとえば、

- 前もって無理数の 2 進小数展開を多数桁、用意しておかなくてはならない。従って可搬性に乏しい。

- 確率変数の一つのサンプルを発生するために必要となる bit 数を前もって計算しておいて、無理数の多倍長加算を何 bit で打ち切るか判断しなければならない。これは "棄却法" を用いる場合にとくに面倒である。

- 多倍長の繰上がり計算のために点列の発生がM-系列等に比較して少し時間がかかると思われる。

さらに、準モンテカルロ法による点列が完全に乱数にとって代わるものではないことは明白である。準モンテカルロ法は確率変数の平均を求めること以外に用いるべきではない。たとえば、simulated annealing で必要とされる確率過程のサンプルは generic であって長時間にわたるものが少数あればよいのであって、それは何かの平均を求めることが目的であるわけではない。このような場合は準モンテカルロ法は適さない。

我々は $\{0,1\}^\infty$ 上の準モンテカルロ法を展開して来たわけだが、原理的にはこれから任意の (無限次元) 確率空間上の準モンテカルロ法を構成できる。それはちょうど、$\{0,1\}$-値擬似乱数から任意の分布を作り出せるのと同じである。その意味で、今後の発展の期待を込めて、筆者は拙文の題を "無限次元準モンテカルロ法" とした[7]。

といっても、実際上はいろいろな個別の問題がある。たとえば、[4] では Wiener 空間上で準モンテカルロ法の理論的考察を試みているが、完全な解決には至っていない。その最大の理由は、準モンテカルロ法が基本的に Riemann 可積分関数に対してしか収束が保証されないからである。Wiener 空間上の関数で重要なもののほとんどは連続でないので、これでは不十分である。今後の研究に期待したい。

6 エピローグ

最初にフォン・ノイマンの言葉「決定論的に定まる量を確率論的に求めること」を紹介したが、無限次元準モンテカルロ法は「確率変数の平均を決定論的に求めること」であってちょうど裏返しのようになっているのが面白い。

参考文献

[1] Billingsley P., *Probability and measure*, 2nd edition, John Willey & Sons, (1986)

[2] Bouleau N., On effective computation of expectations in large or infinite dimension, *J. of Comput. and Appl. Math.*, 31, 23-34, (1990)

[3] Bouleau N., An implementation of irrational translations on the torus, to appear in *J. of Comput. Appl. Math.* (1992)

[4] Bouleau N., Suite de points d'un espace de Hilbert distributée selon la promesure gaussienne canonoique, *C. R. Acad. Sci. Paris, t.315, Série I*, 2197-1300, (1992)

[5] Dym H. and McKean H.P., *Fourier series and integrals*, Academic press, (1972)

[6] 伏見正則、乱数、(東京大学出版会) 、(1989)

[7][2][3] では実際に一般の無限次元準モンテカルロ法の考察を行っている。

[7] Knuth D.E., 準数値算法/乱数 (渋谷政昭訳)、サイエンス社、(1983)

[8] Sugita H., Quasi-Monte-Carlo method on {0,1}-valued sequence space, preprint, (1993)

[9] 高嶋恵三、擬似乱数に対する sojourn time test について、preprint

[10] 津田孝夫、モンテカルロ法とシミュレーション、培風館、改定版 (1977)

[11] Walter P., *An Introduction to Ergodic Theory*, Springer, 1981

[12] Zielinsky R., An aperiodic pseudorandom number generator, *J. of Comput. Appl. Math.*, 31(1990), pp.205-210.