# Monte Carlo Method

モンテカルロ法と乱数

# モンテカルロ法

- 乱数を用いた計算法の総称
  - 数値積分
  - 物理現象のシミュレーション
  - 在庫管理、交通量、待ち行列などのシミュレーション
- 問題が正攻法で解けないときの最後の手段

# 多重積分（2次元）

$$\int_0^1 f(x)dx = \frac{1}{N}\sum_{n=0}^{N-1} f(\tfrac{n}{N})$$

$$\int_0^1\int_0^1 f(x,y)dxdy$$
$$= \int_0^1 \frac{1}{N}\sum_{n=0}^{N-1} f(\tfrac{n}{N},y)dy = \frac{1}{N}\sum_{n=0}^{N-1}\int_0^1 f(\tfrac{n}{N},y)dy$$
$$= \frac{1}{N}\sum_{n=0}^{N-1}\frac{1}{M}\sum_{m=0}^{M-1} f(\tfrac{n}{N},\tfrac{m}{M}) = \frac{1}{NM}\sum_{n=0}^{N-1}\sum_{m=0}^{M-1} f(\tfrac{n}{N},\tfrac{m}{M})$$

# 多重積分

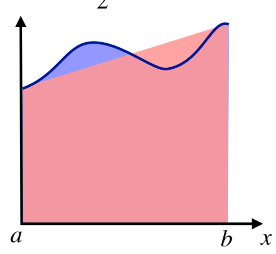
$$\int_0^1\int_0^1\cdots\int_0^1 f(x_1,x_2,\cdots,x_L)dx_1dx_2\cdots dx_L$$
$$= \frac{1}{N^L}\sum_{n_1=0}^{N-1}\sum_{n_2=0}^{N-1}\cdots\sum_{n_L=0}^{N-1} f(\tfrac{n_1}{N},\tfrac{n_2}{N},\cdots,\tfrac{n_L}{N})$$

- $L$ 重積分を行うためには $N^L$ 回の和の計算が必要
- $L$=100 ならば $N$=2 でも $2^{100}\approx 10^{30}$回の和が必要
- 1PFLOPSの計算機=毎秒$10^{15}$回の実数計算が可能
- 1年が$3\times 10^7$秒なので$10^{30}\div 10^{15}\div(3\times 10^7)=0.3\times 10^8$年
- 1PFLOPSの計算機でも3000万年かかる

➡ モンテカルロ法

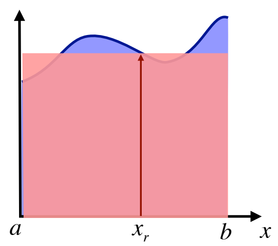
# モンテカルロ法

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx \frac{f(a)+f(b)}{2}(b-a)$$

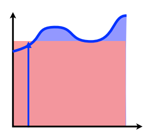
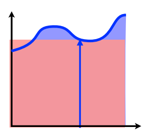


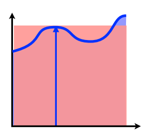
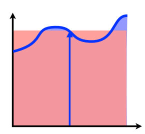
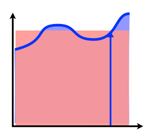

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx f(x_r)(b-a)$$

$x_r$ は乱数　$(a \le x_r \le b)$




# モンテカルロ法

$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx \frac{1}{2}\times\Big\{$  +  $\Big\}$

+  +  +  $\cdots\Big\}$

# モンテカルロ法(プログラム例)

複合矩形公式

```
h=(b-a)/(double)N;
s=0.0;
for(k=0;k<N;k++){
  x=a+h*(double) k;
  s=s+f(x);
}
s=s*h;
```

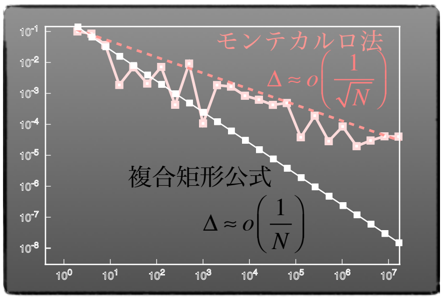
モンテカルロ法

```
h=(b-a)/(double)N;
s=0.0;
for(k=0;k<N;k++){
  x=a+(b-a)*RND();
  s=s+f(x);
}
s=s*h;
```

RND():0から1の一様乱数を返す関数

# モンテカルロ法の誤差

$\int_1^2 \frac{1}{x}\mathrm{d}x$ の相対誤差




分割数 or サンプル数

# モンテカルロ法の利点

- 多重積分

$$\int_1^2\int_1^2\cdots\int_1^2 f(x_1,x_2,\cdots,x_L)\,\mathrm{d}x_1\,\mathrm{d}x_2\cdots\mathrm{d}x_L$$

$$\approx \sum_{n_1=0}^{N-1}\sum_{n_2=0}^{N-1}\cdots\sum_{n_L=0}^{N-1} f\left(\frac{n_1}{N},\frac{n_2}{N},\cdots,\frac{n_L}{N}\right) \qquad N^L\text{個の和}$$

$$\approx \sum_{k=0}^{N-1} f\left(R_1^{(k)},R_2^{(k)},\cdots,R_L^{(k)}\right) \qquad NL\text{個の乱数}+N\text{個の和}$$

- 計算対象がそもそも確率過程

# 乱数の応用例

- **ランダムな現象のシミュレーション**
  - 粒子の衝突
  - 客がでたらめな時間間隔で到着する
- **大きな集団の中から小数の標本を取り出す**
  - 原子、分子の状態
  - 世論調査

# 乱数

- **乱数**
  - でたらめに並んだ数字の列
- **疑似乱数**
  - 計算機などを用いて生成した
    でたらめに近い数字の列
    - **再現性**
    - **周期性**

# 乱数の作製法

- サイコロを振る

  例: 正２０面体サイコロ
- 物理現象を利用する

  例: 放射線、電流のノイズ
- 国勢調査などの中から数字を抜き出す
- ある規則に従って「乱数のようなもの」を作る

  →疑似乱数

# (一様)疑似乱数

- 乱数の性質のうちいくつかを再現する数列
  - それぞれの数が出現する頻度が一様
  - (一桁の整数の乱数)
    5の次に6が来る頻度は1/10
  - (0と1の乱数)
    長さn+1の連の個数と長さnの連の個数の比は1/2
  - 一部を取り出しても偏りがない。
    ⇒局所ランダム性

# 一様乱数の発生法

- 線形合同法
- *Lagged Fibonacci*法
- *M*系列法
- *Mersenne Twister*法

# 線形合同法

- 線形合同法 (*Lehmer 1948*)
  - $X_n = (aX_{n-1} + c) \bmod M$

| | | |
|---|---|---|
| $M$ | 法 | $M > 0$ |
| $a$ | 乗数 | $0 \leq a < M$ |
| $c$ | 増分 | $0 \leq c < M$ |
| $X$ | 初期値 | $0 \leq$ |

- 乗算合同法
  - $X_n = (aX_{n-1}) \bmod M$

# 線形合同法の例

$c = 0, a = 11, M = 2^5 = 32, X_0 = 1$

```
                                  1
 1*11 Mod 32 =                   11
11*11 Mod 32 = 121 Mod 32 =      25
25*11 Mod 32 = 275 Mod 32 =      19
19*11 Mod 32 = 209 Mod 32 =      17
17*11 Mod 32 = 187 Mod 32 =      27
27*11 Mod 32 = 297 Mod 32 =       9
 9*11 Mod 32 =  99 Mod 32 =       3
 3*11 Mod 32 =  33 Mod 32 =       1
```

- 周期：8

# 線形合同法の特徴

- 0から$M$–1の間の整数の乱数を生成する
- $n$番目の乱数は$n$–1番目の乱数により決まる
- 最大周期は$M$である
- 1周期の中に同じ数は2度出てこない
- $a$と$M$は互いに素にとらないと充分にデタラメにならない
- 結晶構造になる

# 線形合同法の実装系

- $X_n = (aX_{n-1} + c) \bmod M$
- rand（Cの元標準乱数）
  - $a$=1103515245, $c$=12345, $M$=$2^{31}$ (BSD)
- drand48（randの代替標準乱数）
  - $a$=25214903917, $c$=11, $M$=$2^{48}$

# 実数の一様乱数

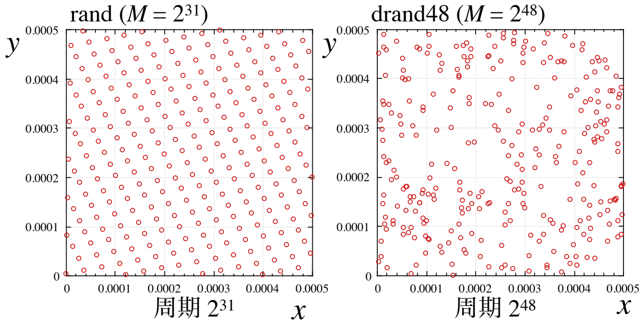
$[0, M-1]$の乱数$\{x_i\}$を$[0, 1)$の乱数$\{u_i\}$に変換

- $u_i = x_i / M$

例）$c = 0, a = 177, M = 2^{15}, X_0 = 1$

(1) $1 / 2^{15}$ = 0.00003051758
(2) $177 / 2^{15}$ = 0.00540161133
(3) $31329 / 2^{15}$ = 0.95608520508
(4) $7441 / 2^{15}$ = 0.22708129883
(5) $6337 / 2^{15}$ = 0.19338989258

# 二次元結晶構造




$2^{31}$個発生させ、2個ずつペアにして$x$-$y$座標としてプロット

# Lagged Fibonacci法

$X_n = f(X_{n-r}, X_{n-s})$ Mod $M$

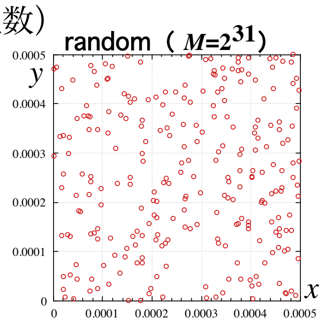
$r, s, M$：整数，　$r > s$

$X_n = (X_{n-r} + X_{n-s})$ Mod $M$

- 周期は最大$2^w-1(2^r-1)$（$w$はワード長）
- 連続する乱数の和の分布が正規分布からずれる

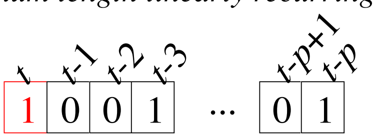
# Lagged Fibonacci法の実装系

- $X_n = (X_{n-r} + X_{n-s})$ Mod $M$
- random（Cの現標準乱数）
  - $r$=31, $s$=28, $M$=$2^{31}$
  - 周期～$2^{62}$




# M系列法(線形最大周期列法)

*Maximum length linearly recurring sequence*




$a_t = c_1 a_{t-1} \oplus c_2 a_{t-2} \oplus \ldots \oplus c_p a_{t-p}$

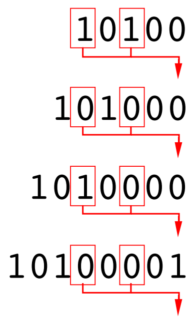
排他的論理和

$c_i$=0,1
$c_p$=1

| $\oplus$ | 1 | 0 |
|---|---|---|
| 1 | 0 | 1 |
| 0 | 1 | 0 |

# M系列法(線形最大周期列法)

- $c_p = c_q$=1
- $c_i$=0 ($i \neq p, q$)
- $\Rightarrow R_n = R_{n-p} \oplus R_{n-q}$
- $p$=5, $q$=3
- 1ビット



# M系列法の例

- $R_n = R_{n-p} \oplus R_{n-q}$
- $p=5, q=3$
- 3ビット

初期乱数: 1, 5, 2, 7, 6

| | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|
| **1** | 001 | **0** | 000 | **6** | 110 |
| **5** | 101 | **3** | 011 | **0** | 000 |
| **2** | 010 | **2** | 010 | **0** | 000 |
| **7** | 111 | **7** | 111 | **3** | 011 |
| **6** | 110 | **5** | 101 | **1** | 001 |
| **3** | 011 | **2** | 010 | **6** | 110 |
| **2** | 010 | **4** | 100 | **3** | 011 |
| **4** | 100 | **7** | 111 | **1** | 001 |
| **4** | 100 | **5** | 101 | **5** | 101 |
| **4** | 100 | **1** | 001 | **2** | 010 |
| **7** | 111 | **5** | 101 | **7** | 111 |
| **6** | 110 | **1** | 001 | **6** | 110 |

# M系列法の実装例

$R_n = R_{n-p} \oplus R_{n-q}$

- 周期は$2^p-1$で比較的長い。
- 演算が単純⇒高速
- 結晶構造にならない。

| $p$ | $q$ |
|---|---|
| 89 | 38 |
| 127 | 1, 7, 15, 30, 63 |
| **250** | **103** |
| 521 | 32, 48, 158, 168 |
| 607 | 105, 147, 273 |

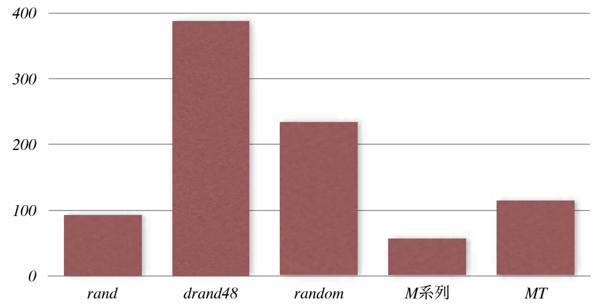
# Mersenne-Twister法

$$x_{n+p} = x_{n+q} \oplus x_{n+1}B \oplus x_n A$$

- 松本-西村 1997
- $B, A$はある特別な$w \times w$行列
- $p, q$はある特別な整数
- 周期は　$2^{19937}-1$
- 623次元空間で均等に分布

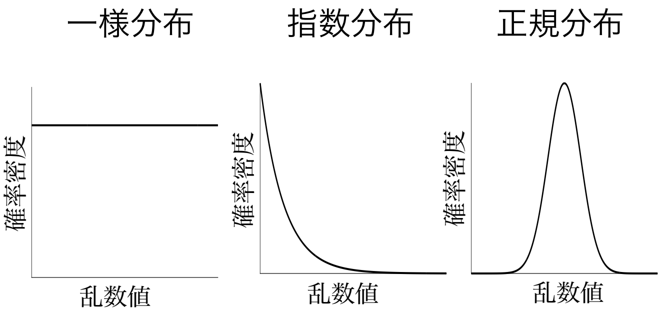
# 一様乱数の生成法

- $2^{31}$個の乱数生成に要する時間（秒）




| 周期 | $2^{31}$ | $2^{48}$ | $2^{62}$ | $2^{250}-1$ | $2^{19937}-1$ |
|---|---|---|---|---|---|

# 分布をもった乱数




# 指数分布

- 逆関数法

$\{u_i\} \quad (0 \le u_i < 1)$ : 一様乱数

$$x_i = -\frac{1}{\lambda} \ln u_i$$

$\{x_i\}$: $f(x) \propto e^{-\lambda x}$ の指数分布に従う乱数

# 正規分布

- 極座標法(Box-Muller 法)

$\{u_i\},\{v_i\} \quad (0 \le u_i, v_i < 1)$ : 一様乱数

$$x_i = \sqrt{-2\ln u_i}\cos(2\pi v_i)$$
$$y_i = \sqrt{-2\ln u_i}\sin(2\pi v_i)$$

$\{x_i\},\{y_i\}$ : 平均0, 標準偏差1の正規分布に従う乱数

# 正規分布

- 中心極限定理

$\{u_i\} \quad (0 \le u_i < 1)$ : 一様乱数

$$x_k = (u_{12k} + u_{12k+1} + u_{12k+2} + u_{12k+3} + \cdots + u_{12k+11}) - 6$$

$\{x_k\}$ : 平均0, 標準偏差1の正規分布に従う乱数