離散空間{0,1}ⁿと内部の球からπを求めるモンテカルロ法

The Monte Carlo Method for Calculating π with the Discrete Space $\{0,1\}^n$ and a Sphere in it

大槻 正伸

福島工業高等専門学校、電気工学科

Masanobu Ohtsuki

Fukushima National College of Technology, Department of Electrical Engineering

（平成20年９月12日受理）

It is well known that we can calculate π with square $[0,1]^2$ and its inscribed circle and many points which are scattered at random in $[0,1]^2$. Such an algorithm is called the "Monte-Carlo Method algorithm with square and circle". In general, extending the dimension of the space, we can construct the Monte-Carlo Method algorithm with k-cube $[0,1]^k$ and its inscribed k-dimensional sphere.

In this paper we show that when n is large we can also construct an algorithm for calculating π with the discrete space $\{0,1\}^n$ and a "sphere" in it ,and with many points scattered at random in $\{0,1\}^n$.

Then we approximate the efficiency of this algorithm and conclude that it is more efficient than the Monte-Carlo Method with 9-dimensional cube and its inscribed 9-dimensional sphere, when n=100.

Key words: Monte Carlo Method, efficiency, π, random number

1. はじめに

正方形とその内接円を用いて、正方形内にランダムに点をばらまくことにより円周率πを推定計算するモンテカルロ法アルゴリズムはよく知られている（Fig. 1）。これは、ランダムに正方形内に点をばらまくときその点が円内に入る確率は$\frac{\pi}{4}$であるから、m個点をランダムに正方形内に投げ入れる試行実験をしてs個の点が円内に入ったものとすれば$\frac{s}{m} \fallingdotseq \frac{\pi}{4}$より、円周率$\pi$は$\pi \fallingdotseq \frac{4s}{m}$により推定計算できる。

πを求めるモンテカルロ法は空間の次元を上げて、実k次元立方体$[0,1]^k$とその内接k次元球を用いても同様に考えることができる[3)4)]（Fig. 1）。 これらのモンテカルロ法のアルゴリズムは、その誤差が$\frac{1}{\sqrt{m}}$に比例する程度にしか小さくならず、したがって他の様々な級数展開による方法よりは効率が悪く、これで円周率πを精密計算し小数点何桁も求めるというのには適していない。

しかし、これらの効率のよくないモンテカルロ法アルゴリズム群の効率を計測・比較する方法があり、k次元の立方体と球によるモンテカルロ法アルゴリズムをMC(k)とすると、

MC(2)＜MC(4)<MC(3)＜MC(5)＜MC(6)＜…

となり効率のよい次元の順序は３と４のみで逆転していることが示されている[3)]。ここで「A<B」は「アルゴリズムAの方がアルゴリズムBよりも効率がよい（同一の情報量のもとで誤差が小さい）」ことを表す。

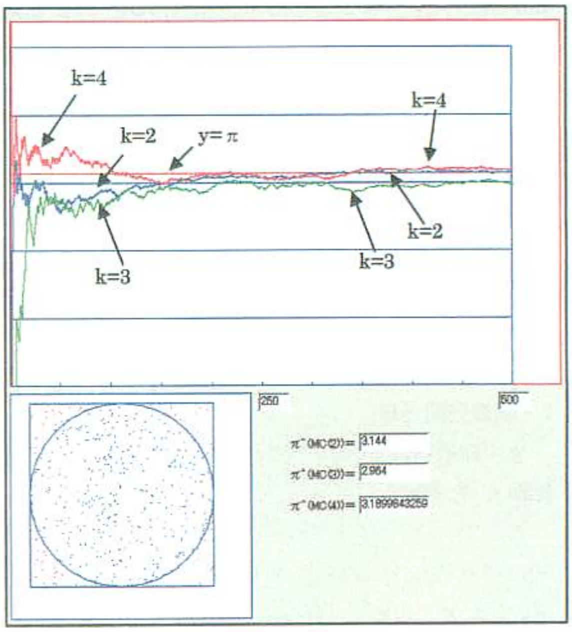

Fig.1 An example of the experiments with $[0,1]^k$ and k-sphere(x-axis : the number of scattered points)

本論文の目的は、円周率πの高速な精密計算を目指すものではなく、今後の、乱数のもつ情報量と数値（例えば円周率π）の近似効率との関係を明らかにする研究に資するために、乱数を用いてπを近似計算するモンテカルロ法の興味深い実例、特に情報量の計測しやすい離散空間上の点をランダムに選ぶ確率現象から円周率πを求めるものをみつけその効率について解析するものである。

今回は以下で詳しく述べるように、$\{0,1\}^n$という離散空間を用いてπを求めるモンテカルロ法を構築し、その効率の解析をして、従来知られている上記MC(2),MC(4),MC(3),MC(5),…と比べて、どの程度の効率のよさになるかを調べる。

乱数のもつ情報量（有限ビット列の情報量）と数値近似計算の効率との関係についての解析は今後の課題として残されている。

以下では、離散空間$<\{0,1\}^n, d_H>$という距離空間を考える。ここで距離d_HはHamming距離である。$S(\frac{1}{2}n)$を$S(\frac{1}{2}n)=\{x\in\{0,1\}^n ; d_H(0,x)=\frac{1}{2}n\}$を、点$0=[0,0,\cdots,0]$を中心とする半径$\frac{1}{2}n$の「球（球面）」とする。この球は「球」とはいうものの離散的な点集合である。中心は点$0=[0,0,\cdots,0]$でなくとも以下のモンテカルロ法アルゴリズムは構成できるが、簡単のため中心は0としておく。

本論文ではnを大きくとると、この空間$\{0,1\}^n$と球$S(\frac{1}{2}n)$から、点をランダムに$\{0,1\}^n$内にばらまき、$S(\frac{1}{2}n)$に入った点を数えることにより、円周率πを求めるモンテカルロ法アルゴリズムが構成できることを示す。

さらに本論文では、この離散空間を用いてπを求めるモンテカルロ法のアルゴリズムの効率を計測し、その効率は、n=100のとき実8次元空間によるモンテカルロ法と実9次元空間のモンテカルロ法の間の程度の効率であることなどが示される。

2. 離散空間と球

まず離散空間$\{0,1\}^n$とこれに導入されたHamming距離d_Hを考える。

ここで、

$\{0,1\}^n=\{[x_1,x_2,\ldots,x_n];\ x_i\in\{0,1\}\quad(i=1,2,\ldots,n)\}$

$d_H([x_1,x_2,\ldots,x_n],[y_1,y_2,\ldots,y_n])=d_H(x,y)=|\{x_i\neq y_i\ (i=1,2,\ldots,n)\}|$（ベクトルx,yの異なっている成分の個数）である。

これが、以下で考える$<\{0,1\}^n, d_H>$であるが、これを図示するとFig.2、Fig.3のようになる。ただしFig.2、Fig.3ではHamming距離1となっている点同士を一本の線で結んである。Fig.2からわかるように$\{0,1\}^n$という空間はn次元立方体の頂点の集合と解釈することもできる。Fig.3は「立方体」をあまり意識せずに、Hamming距離1の点同士のつながり具合を重視して描いた図である。

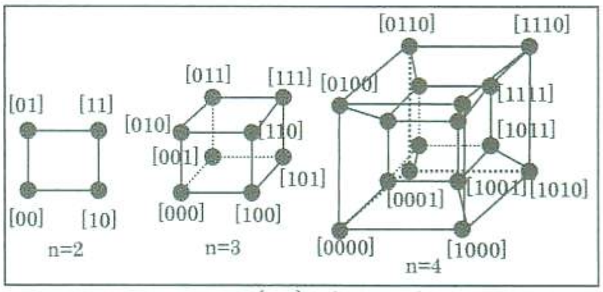

Fig.2 $\{0,1\}^n$ (n=2,3,4)

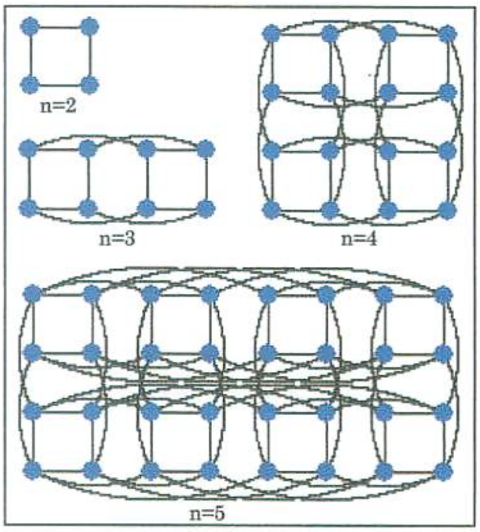

Fig.3 $\{0,1\}^n$ (n=2,3,4,5)

さて、ここで$S_n(c,r)=\{x ; x\in\{0,1\}^n\ d_H(c,x)=r\}$とする。

すなわち、$S_n(c,r)$は、離散n次元空間中の、中心を$c\in\{0,1\}^n$とする、半径rの球（球面）である。ただし距離は導入されているHamming距離とする。

以下では中心cは$[0,0,\cdots,0]$にとり、$S_n(c,r)$を単に$S_n(r)$、あるいは、次元nが明らかなときは$S(r)$と書くこととする。

$S_n(r)$は原点$[0,0,\cdots,0]$を中心とした球、すなわち$[0,0,\cdots,0]$とのHamming距離rの点すなわち「重み」rの点集合となる。

ここで$x=[x_1,x_2,\ldots,x_n]\in\{0,1\}^n$の重み$w(x)$とは、$w(x)=|\{x_i;\ x_i\neq 0\}|$、すなわち0でない成分の個数（それは成分「1」の個数）のことである。

さて、この「球」$S_n(r)$であるが、図示するとFig.4のような点集合（◎で示された点の集合）となる。

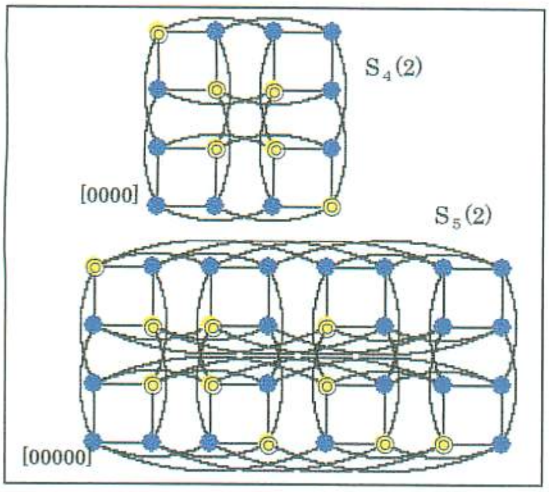

Fig.4 $S_4(2)$ and $S_5(2)$

以下で、ランダムに $\{0,1\}^n$ から点をとったとき、その点が球 $S_n(r)$ に入る確率を $p(n,r)$ で表す。

一般に

$$p(n,r)=\frac{|S_n(r)|}{|\{0,1\}^n|}=\frac{\binom{n}{r}}{2^n}=\frac{n!}{2^n r!(n-r)!}$$

となる。

Fig. 4 のように、離散空間 $\{0,1\}^n$ においては「球」とはいうものの、それは離散的な点集合であり、n= 4 のときは $p(4,2)=\frac{6}{16}=\frac{3}{8}$, $p(5,2)=\frac{10}{32}=\frac{5}{16}$ となり、これでは円周率 π との関係はなく π を推定計算するモンテカルロ法アルゴリズムを構成することは期待できない。

しかし、以下で示すように、この離散空間の次元 n を大きくとると、円周率 π を求めるモンテカルロ法アルゴリズムが構成できるという興味深い結果が得られる。

ここで $p(n,r)$ を評価する。これは本論文の主題「離散空間から π を求めるモンテカルロ法」の基礎となるものである。ただし、n, r がともに大きなところで考えたいため、r を定数でなく $r=\alpha n$ $(0<\alpha<1)$ としておく。この $P(n,r)$ を正確に評価するため、いくつか補題を用意する。

【定義１】($O(g(n))$ オーダー記号)[2)]

$$h(n)=O(g(n)) \overset{\text{def}}{\Leftrightarrow} \exists c\ (\text{定数});$$

ほとんどすべての $n\in\mathbb{N}$ に対し、 $h(n)\leqq c\,g(n)$

□（定義１）

例えば $2n^2+5n^3=O(n^3)$ 、 $\frac{2}{n^2}+\frac{5}{n^3}=O(\frac{1}{n^2})$

$3+\frac{2}{n^2}+\frac{5}{n^3}=3+O(\frac{1}{n^2})$ 等々。

【補題 A】（Stirling の公式）[2)]

$$n!=\sqrt{2\pi n}\left(\frac{n}{e}\right)^n\varepsilon(n)$$

ここで $\varepsilon(n)=1+\frac{1}{12n}+\frac{1}{288n^2}-\frac{139}{51840n^3}+O(\frac{1}{n^4})$

□（補題 A）

【補題 B】

$$p(n,\alpha n)=\frac{1}{\sqrt{2\pi n}\{2\alpha^\alpha(1-\alpha)^{1-\alpha}\}^n\sqrt{\alpha(1-\alpha)}}\times\frac{\varepsilon(n)}{\varepsilon(\alpha n)\varepsilon((1-\alpha)n)}$$

＜証明＞

$$p(n,r)=\frac{|S_n(r)|}{|\{0,1\}^n|}=\frac{\binom{n}{r}}{2^n}=\frac{n!}{2^n r!(n-r)!}$$

$$\therefore\ p(n,\alpha n)=\frac{n!}{2^n(\alpha n)!((1-\alpha)n)!}$$

これに補題 A（Stirling の公式）を適用する。

□（補題 B）

さて、ここで $\{2\alpha^\alpha(1-\alpha)^{1-\alpha}\}^n$ であるが、$\alpha=\frac{1}{2}$ 以外では、$2\alpha^\alpha(1-\alpha)^{1-\alpha}>1$ となり n が大きくなると $p(n,\alpha n)$ が 0 に近い値となり、モンテカルロ法が構成しにくくなる。したがって以下では $\alpha=\frac{1}{2}$ として議論を進めることとする。

($\because$ $\alpha^\alpha(1-\alpha)^{1-\alpha}$ に対して $-\log_2$ をとると、
$-\log_2\alpha^\alpha(1-\alpha)^{1-\alpha}=H(\alpha)$ [エントロピー関数[1)]]。
したがって $-\log_2\alpha^\alpha(1-\alpha)^{1-\alpha}\leqq 1$、
$\therefore\alpha^\alpha(1-\alpha)^{1-\alpha}\geqq\frac{1}{2}$)

以下では補題 B で $\alpha=\frac{1}{2}$ とした結果、

$$p=p(n,\tfrac{1}{2}n)=\frac{2}{\sqrt{2\pi n}}\times\frac{\varepsilon(n)}{\varepsilon(\frac{n}{2})^2}$$

を用いる。(n は偶数をとることとする)。

【補題 C】 $E(n)=\frac{\varepsilon(n)}{\varepsilon(\frac{n}{2})^2}$ とおくと、

(a) $E(n)=1-\frac{1}{4n}+\frac{1}{32n^2}+O(\frac{1}{n^3})$

(b) $\frac{1}{E(n)}=1+\frac{1}{4n}+\frac{1}{32n^2}+O(\frac{1}{n^3})$

＜証明＞

$x=\frac{1}{n}$ とすると、

$$(1+a_1x+a_2x^2+O(x^3))(1+b_1x+b_2x^2+O(x^3))=$$

$$1+(a_1+b_1)x+(a_2+a_1b_1+b_2)x^2+O(x^3) \quad \cdots(1)$$

$$\frac{1}{1+a_1x+a_2x^2+O(x^3)}=1-a_1x+(a_1^2-a_2)x^2+O(x^3) \quad \cdots(2)$$

が成り立つから、$\varepsilon(\frac{n}{2})^2=\varepsilon(\frac{n}{2})\times\varepsilon(\frac{n}{2})$に対して(1)を、$\frac{1}{\varepsilon(\frac{n}{2})^2}$に対して(2)を、さらに$\varepsilon(n)\times\frac{1}{\varepsilon(\frac{n}{2})^2}$に対して(1)を適用すると(a)が得られる。また E(n)全体の評価が求まったら、さらに(2)を適用すると(b)が得られる。□（補題C）

3. モンテカルロ法アルゴリズムの構成

補題 B により、$p(n,\frac{1}{2}n)$が円周率πを含んでいることが示されたから、離散空間$\{0,1\}^n$とその内部の球$S(\frac{1}{2}n)$からπを求めるモンテカルロ法が次のように構成できる。ただし次元 n を大きい偶数とする。

$\{0,1\}^n$と$S(\frac{1}{2}n)$からπを求めるモンテカルロ法

```
begin
  read(m); {*m:ランダムにとる点の個数*}
  s:=0;
  for i:=1 to m do
    begin
      x:= bottom_n ((2^n*random[0,1]) _2) ;
      if w(x)=n/2  then s:=s+1
    end;
  p:=s/m;
  pi:=(2/(p*p*n))*E(n)*E(n);
  write(pi)
end.
```

ここで random[0,1]は区間[0,1]から一様分布により選ぶ乱数、$(a)_2$は実数 a の2進表現、$\mathrm{bottom}_n(a)$は実数 a の整数化（小数点以下切捨て）したものの n ビット表現、w(x)は、2進表現の整数をベクトル$x\in\{0,1\}^n$とみなしたときの重みとする。

例えばn＝5 で、選ばれた乱数が 0.45 であれば、その2進表現は 0.0111001…、2^5=32 をかけた値は 14.4。この小数点以下切り捨ての2進5ビット表現は$(01110)_2$となり、x＝[01110]、w(x)は3である。

実際にこれによりπを求める試行実験をコンピュータ上で行った結果が Fig.5 である。

収束は遅いが確かにπに近づく様子が見てとれる。

4. モンテカルロ法アルゴリズムの誤差解析

4.1 基本的な考え方と効率量

本節では前節で構成したモンテカルロ法アルゴリズムの誤差を解析する。解析の方法は文献3),4)で提案されているとおりである。

ここでは、簡単にその考え方を述べる。

ある事象 E（ここでは E=「ランダムにばらまいた点が球の内部に入る」という事象）の生起する確率が Pr[E]＝p＝p(π)と円周率πを陽に含むものとする。

したがって、m回試行実験を行い、s 回事象Eが生起したものとすると、$p(\pi)\fallingdotseq\frac{s}{m}$ より、

$\pi\fallingdotseq p^{-1}(\frac{s}{m})=\phi(\frac{s}{m})$。

により推定計算される。

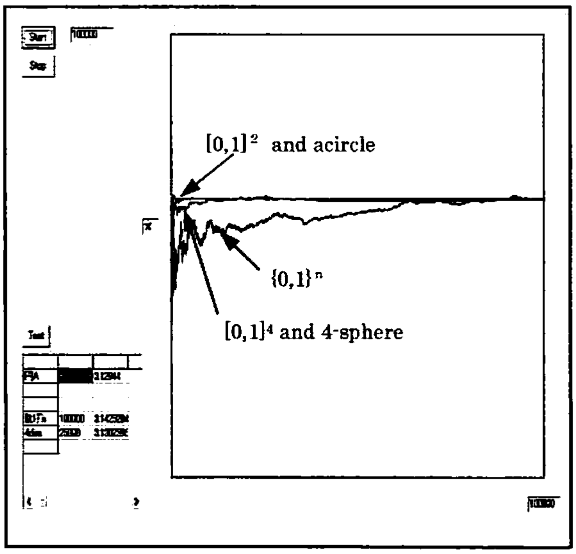

Fig.5 An example of the Monte Carlo Method for calculating π with $\{0,1\}^n$ and S(n/2) (n =200, x-axis : the number of random numbers)

例えば、Fig. 1 の正方形と円によるモンテカルロ法の場合、事象 E は「ランダムにばらまいた点が円の内部に入る」という事象であり、$P(\pi)=\frac{\pi}{4}$．

$\phi(\frac{s}{m})=\frac{4s}{m}$、すなわち$\phi(x)$＝4x となる。

後の議論のために、3次元立方体と内接球による場合と4次元立方体と内接4次元球による場合の例も見ておく。

3次元の場合、$p(\pi)=\frac{\pi}{6}$，$\phi(x)=6x$　となる。

4次元の場合、$p(\pi)=\frac{\pi^2}{32}$，$\phi(x)=\sqrt{32x}$ である[3),4)]。

一般にk次元立方体$[0,1]^k$と内接するk次元球の場合、立方体のk次元体積は1、半径rのk次元球のk次元体積は$C(k)\pi^{D(k)}r^k$

であるから、$p(\pi)=\frac{C(k)\pi^{D(k)}}{2^k}$ 、$\phi(x)=(\frac{2^k x}{c(k)})^{1/D(k)}$ となる[3),4)]。

ここで、$C(k)=\frac{2^{\lceil k/2\rceil}}{k!!}$, $D(k)=\left\lfloor\frac{k}{2}\right\rfloor$

$$k!!=\begin{cases}1\times3\times5\times\ldots\times k & (\text{kが奇数の場合})\\ 2\times4\times6\times\ldots\times k & (\text{kが偶数の場合})\end{cases}$$

さて、$\phi(\frac{s}{m})$ により π を計算する場合の誤差は次のように考えられる。

まず、X_i を「i 回目にばらまいた点が球に入ったとき1、入らなかったとき0をとる確率変数」とする。

$Pr[X_i=1]=p$, $Pr[X_i=0]=1-p$ である。そうするとアルゴリズム中の s は $S=X_1+X_2+\cdots+X_m$ という確率変数の実現値である。

$E[\frac{S}{m}]=p$ より、$p(\pi)\fallingdotseq\frac{s}{m}$、したがって $\pi\fallingdotseq\phi(\frac{s}{m})$ で推定することは自然である。

しかし、確率変数 $\frac{S}{m}$ はその標準偏差 $\sigma=\sigma(\frac{S}{m})=\sqrt{\frac{p(1-p)}{m}}$ の（平均値 p との）誤差は避けようがない。したがって、アルゴリズムの誤差としては、

$|\phi(\frac{S}{m})-\pi|=|\phi(p\pm\sigma)-\phi(p)|$

$\fallingdotseq|\phi'(p)|\sigma=|\phi'(p)|\sqrt{\frac{p(1-p)}{m}}$

程度が見込まれる。

基本的にはこの誤差 $|\phi'(p)|\sigma$ の大きさで π を求めるモンテカルロ法の効率を計測すればよい。すなわち、「モンテカルロ法の効率がよい」とは、「誤差 $|\phi'(p)|\sigma$ が小さいこと」と定義する。そうすると自然に「誤差が大きい程効率が悪い」「誤差が小さい程効率がよい」ということになる。

ただし、ここで注意しなくてはいけないことは、1つの点をランダムにばらまく場合、次元によって、発生させる区間[0,1]上の一様分布乱数の個数が異なるという事実である。

すなわち、N個の乱数を発生させて点をランダムにばらまく場合、ばらまける点の個数は2次元では $\left\lfloor\frac{N}{2}\right\rfloor$ 個とれるが、3次元では $\left\lfloor\frac{N}{3}\right\rfloor$ 個、一般に k 次元では $\left\lfloor\frac{N}{k}\right\rfloor$ 個しかとれないということである。

したがって、モンテカルロ法の効率は、同じ個数Nだけ乱数をとることにして乱数の情報量を統一し、そこでの $|\phi'(p)|\sigma$ で比べなくてはならない。

そこで、ばらまく点の個数mを $m=\frac{N}{k}$ （k：1点をばらまくのに必要な乱数の個数（＝実 k 次元空間のモンテカルロ法の場合空間の次元 k となる）とし、次の「効率量」の概念が生まれる。

【定義２】（効率量）

あるモンテカルロ法Mは1つの点をばらまくのに u 個の乱数が必要であり（$m=\left\lfloor\frac{N}{u}\right\rfloor$ までしか点をとれない）、それがある図形に入る確率は $p=p(\pi)$、$\pi=\phi(p)$ とする。

このとき、「効率量 e_M」を次で定義する。

$e_M=|\phi'(p)|\sqrt{up(1-p)}$　　□（定義２）

以上の議論により、効率量の小さいモンテカルロ法ほど同じ情報量のもとで効率がよいと判断される。

4.2 k次元球による π を求めるモンテカルロ法の効率量

k＝4 の場合を例に効率量を計算してみる。

4次元の場合、$p=p(\pi)=\frac{\pi^2}{32}$, $\phi(p)=\sqrt{32p}$ である。MC(k)で「k 次元により π を求めるモンテカルロ法」を表すことにすると、

$$e_{MC(4)}=\frac{1}{2}\frac{\sqrt{32}}{\sqrt{p}}\sqrt{4p(1-p)}\ =4.70429\cdots$$

と計算できる。

同様に、各次元の球により π を求めるモンテカルロ法の効率量を計算すると Table1 のようになる[3),4)]。

Table 1　The values of $e_{MC(k)}$(k=2.3.....)

Dimension k	$e_{MC(k)}$
2	2.32239...
4	4.70429...
3	5.19036...
5	7.91599...
6	8.65491...
7	14.15224...
8	17.50211...
9	29.26063...
10	39.76530...
11	68.67345...
12	100.44193...
:	:

4.3 離散空間によるモンテカルロ法の効率量

【定理1】離散空間{0, 1}^{n}とS($\frac{1}{2}$n)によりπを求めるモンテカルロ法の効率量e$_{\{0,1\}^n}$は次で与えられる。

$$e_{\{0,1\}^n}=\sqrt{\sqrt{8\pi^5 n}\{1+\frac{1}{4n}+\frac{1}{32n^2}+O(\frac{1}{n^3})\}-4\pi^2}$$

＜証明＞

$$p=p(n,\ \frac{1}{2}n)=\frac{2}{\sqrt{2\pi n}}\times E(n)$$

$$\phi(p)=\frac{2E(n)^2}{p^2 n}より\phi'(p)=\frac{-4E(n)^2}{p^3 n}$$

$e_M=|\phi'(p)|\sqrt{up(1-p)}$　でu＝1であるから、補題C(b)を用いて効率量が上記のように計算できる。□（定理1）

定理の式の数値計算をすることにより、次の系が得られる。

【系1】e$_{\{0,1\}^n}$の値は次のTable2のようになる。（ただし、Table2では計算上はO($\frac{1}{n^3}$)は無視した。）

Table 2 The values of e$_{\{0,1\}^n}$

Dimension n	e$_{\{0,1\}^n}$
100	21.3670…
200	25.7125…
300	28.6048…
400	30.8337…
500	32.6719…

したがって、n＝100, 200, 300の場合、MC(9)（実9次元空間でのモンテカルロ法）より効率がよく、MC(8)より悪くなる。　□（系1）

5. 結言および今後の課題

円周率とは直接関係のなさそうな{0, 1}^{n}という離散空間とHamming距離により定義される球から、円周率πを求めるモンテカルロ法アルゴリズムが構成できることを示した。

またその効率のよさを計測し、通常の実k次元空間（k次元立方体とk次元球）のモンテカルロ法との効率を比較した。

今後の課題として、

(1) 情報量[1]（0か1が確率$\frac{1}{2}$で出現する場合の情報量は1[bit]である）と、πの近似値に関する情報の変換に関して調べること、特に、ランダムな系で得られる情報量に対する、πの近似値に関する情報の下界について考察すること

(2) 一般的にランダムな系で得られる情報量に対する、ある数値の近似値に関する情報の下界について考察すること

があげられる。

参考文献

1) アブラムソン（宮川訳），情報理論入門、好学社、1969年

2) R.L.グレアム,D.E.クヌース（有澤、安村、荻野、石畑訳），コンピュータの数学 pp408－420，共立出版，1993年

3) 大槻 正伸，n次元球によりπを求めるモンテカルロ法，福島高専研究紀要，第25巻pp9-16,1989年

4) 大槻 正伸，モンテカルロ法の効率に関する性質とπを計算するモンテカルロ法，福島高専研究紀要，第26巻pp13-18,1990年