Sept. 24, 2015@ELC秋学校(岐阜)

Exploring the
Limits of
Computation

乱択の技法

2. 高度モンテカルロ法

来嶋秀治

九州大学 大学院システム情報科学研究院

2. マルコフ連鎖モンテカルロ法

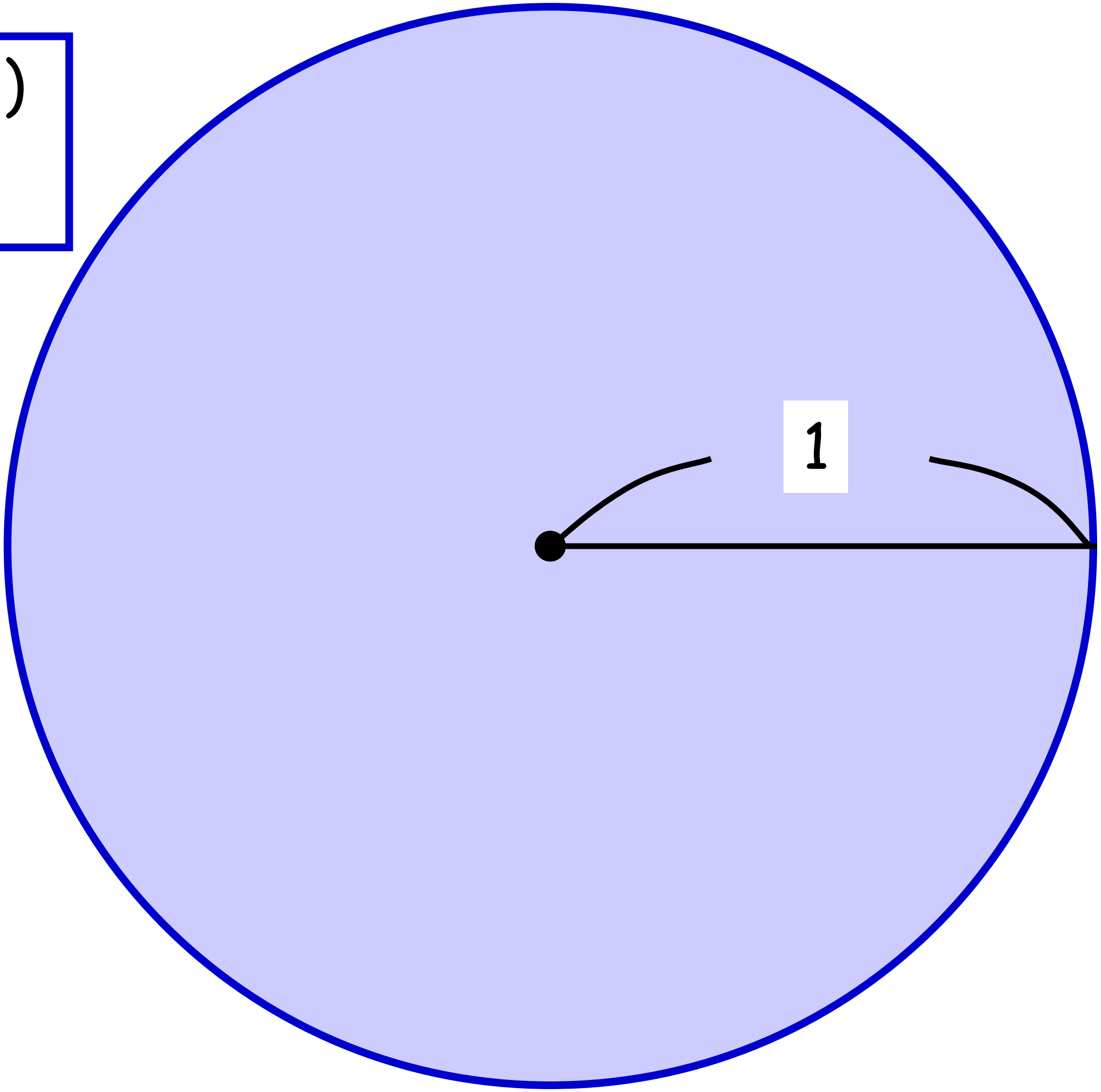
(MCMC: Markov chain Monte Carlo)

2.1. モンテカルロ法

モンテカルロ法 - 円周率の計算を例に

円周率 π の値 (=3.141...)
を求めよ。

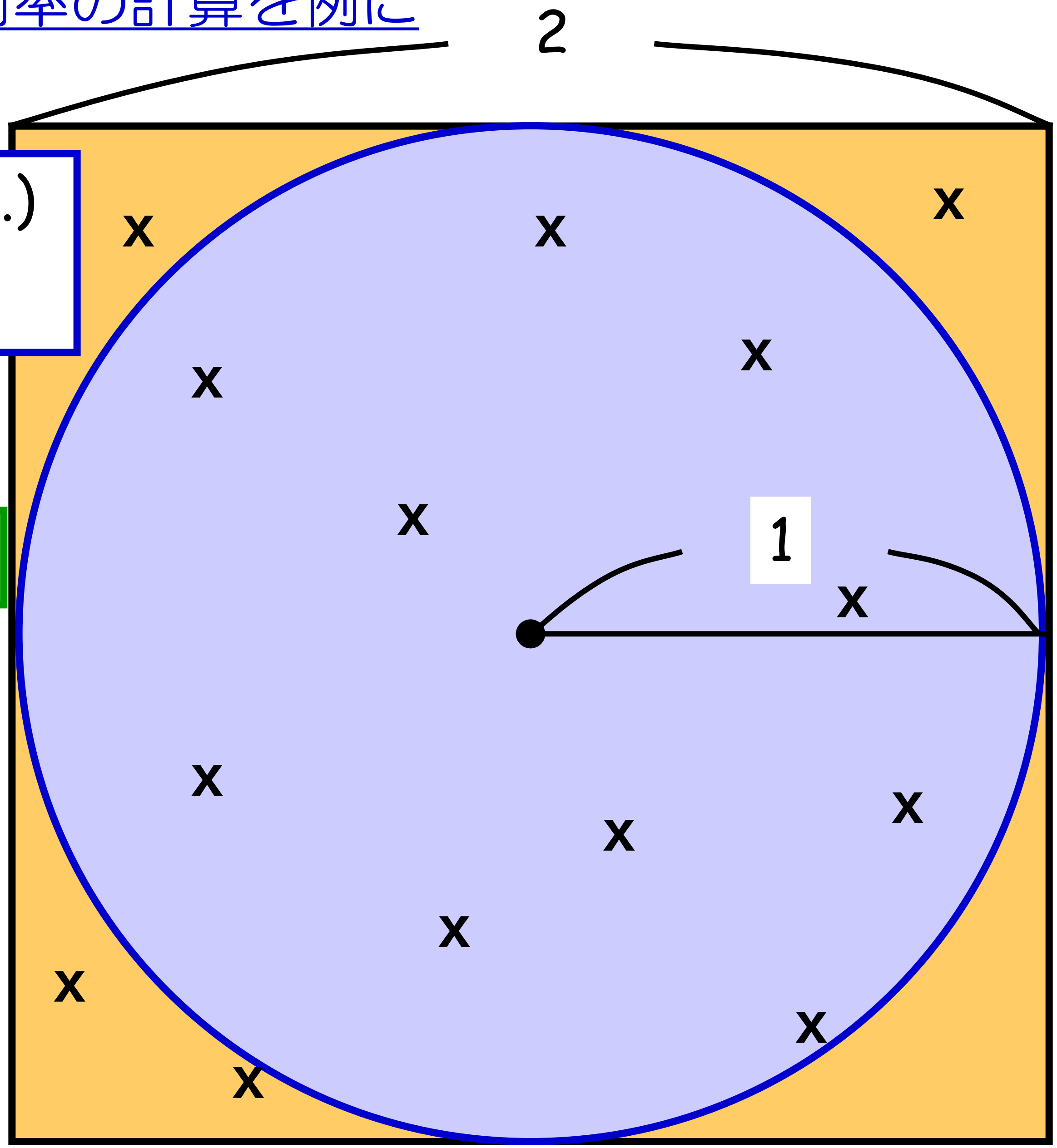
π = (半径1の円の面積)



モンテカルロ法 - 円周率の計算を例に

円周率 π の値 (=3.141...)
を求めよ。

π = (半径1の円の面積)

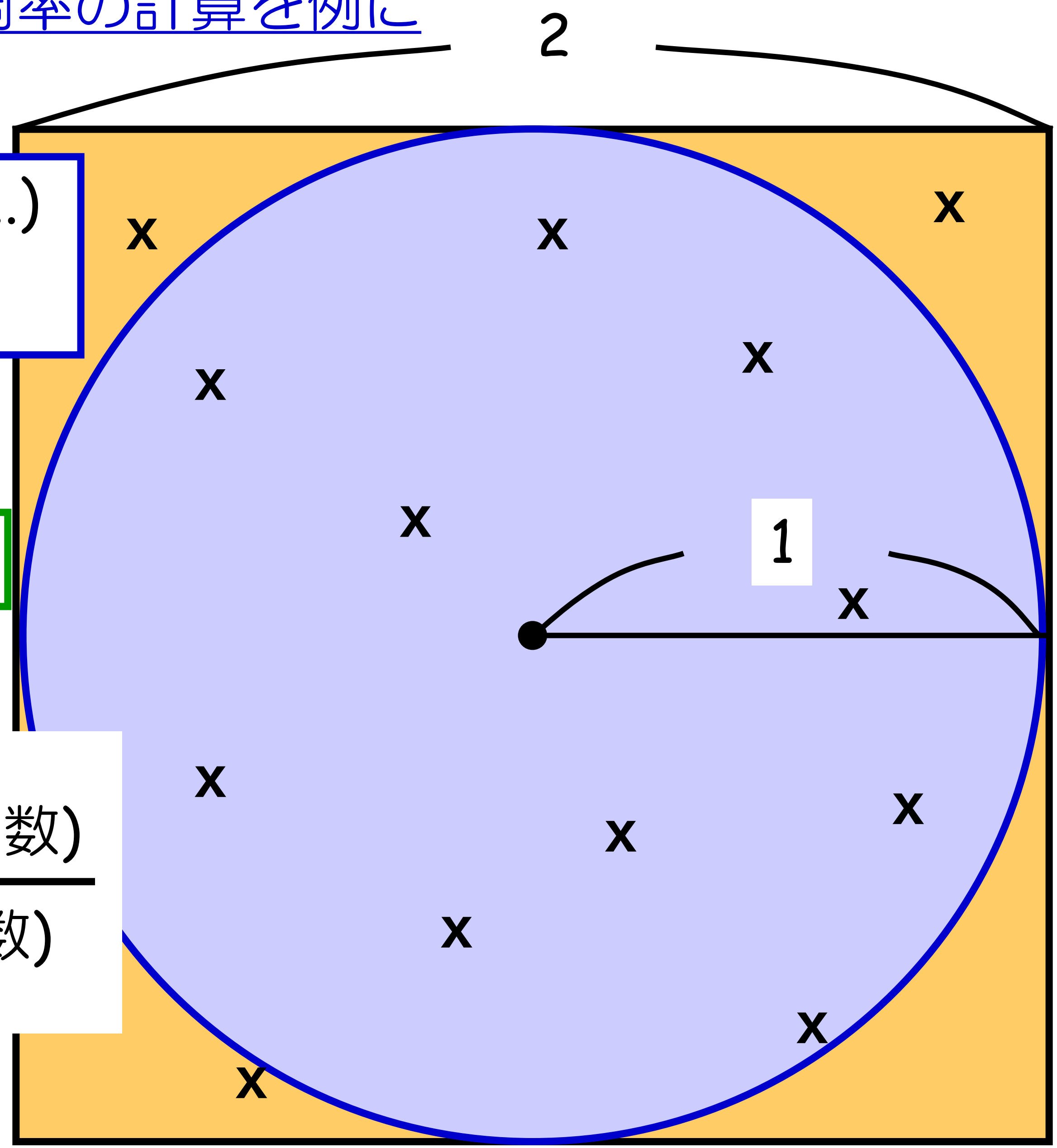


モンテカルロ法 - 円周率の計算を例に

円周率 π の値 (=3.141...) を求めよ.

π = (半径1の円の面積)

$$\pi = 4 \times \frac{(\text{円の中の点の数})}{(\text{打った点の数})}$$

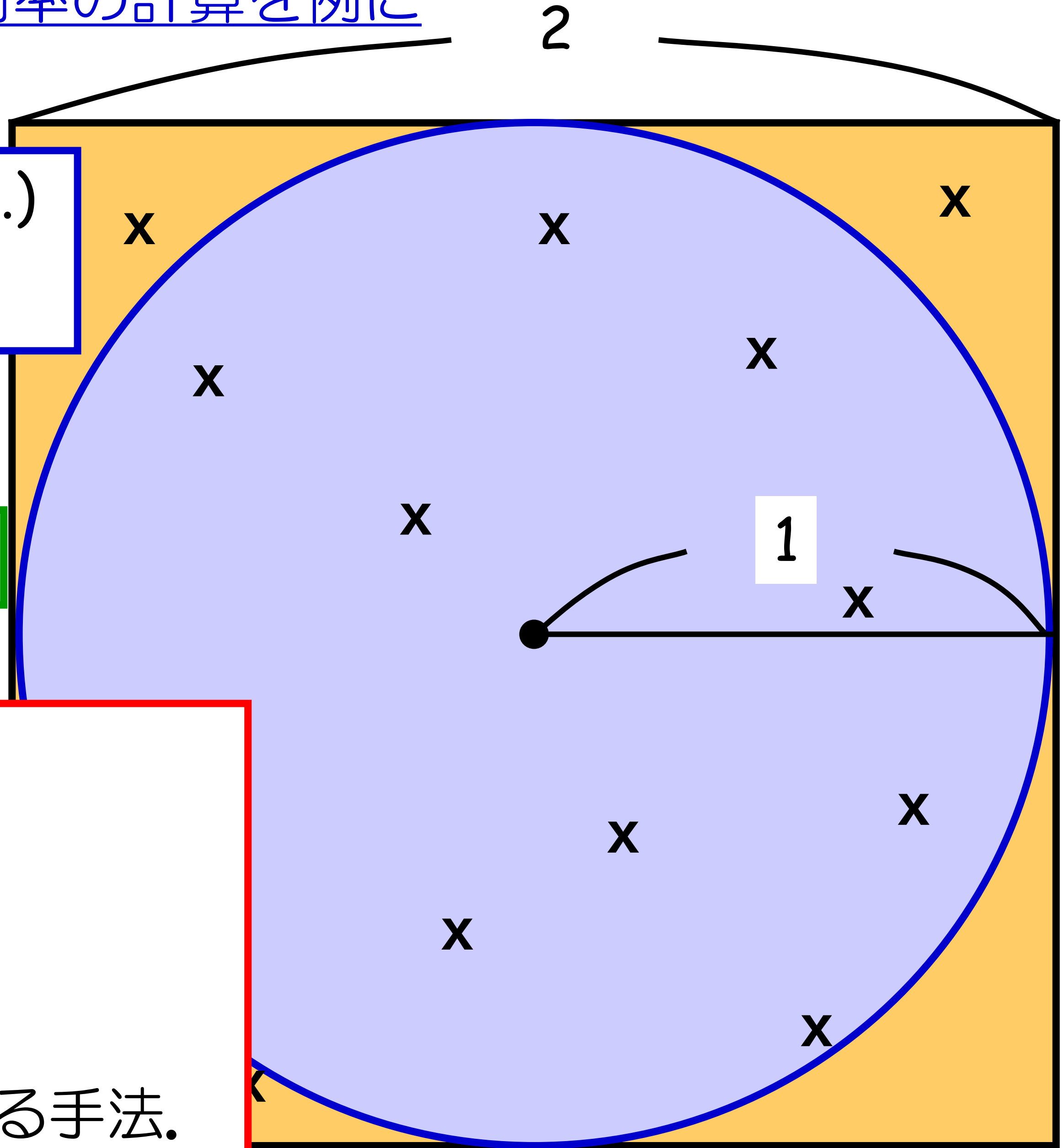


モンテカルロ法 - 円周率の計算を例に

円周率 π の値 (=3.141...)

を求めよ.

π = (半径1の円の面積)



モンテカルロ法

乱数を使用して,

- 比
- 平均

などを近似的に計算する手法.

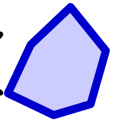
2次元領域の面積計算

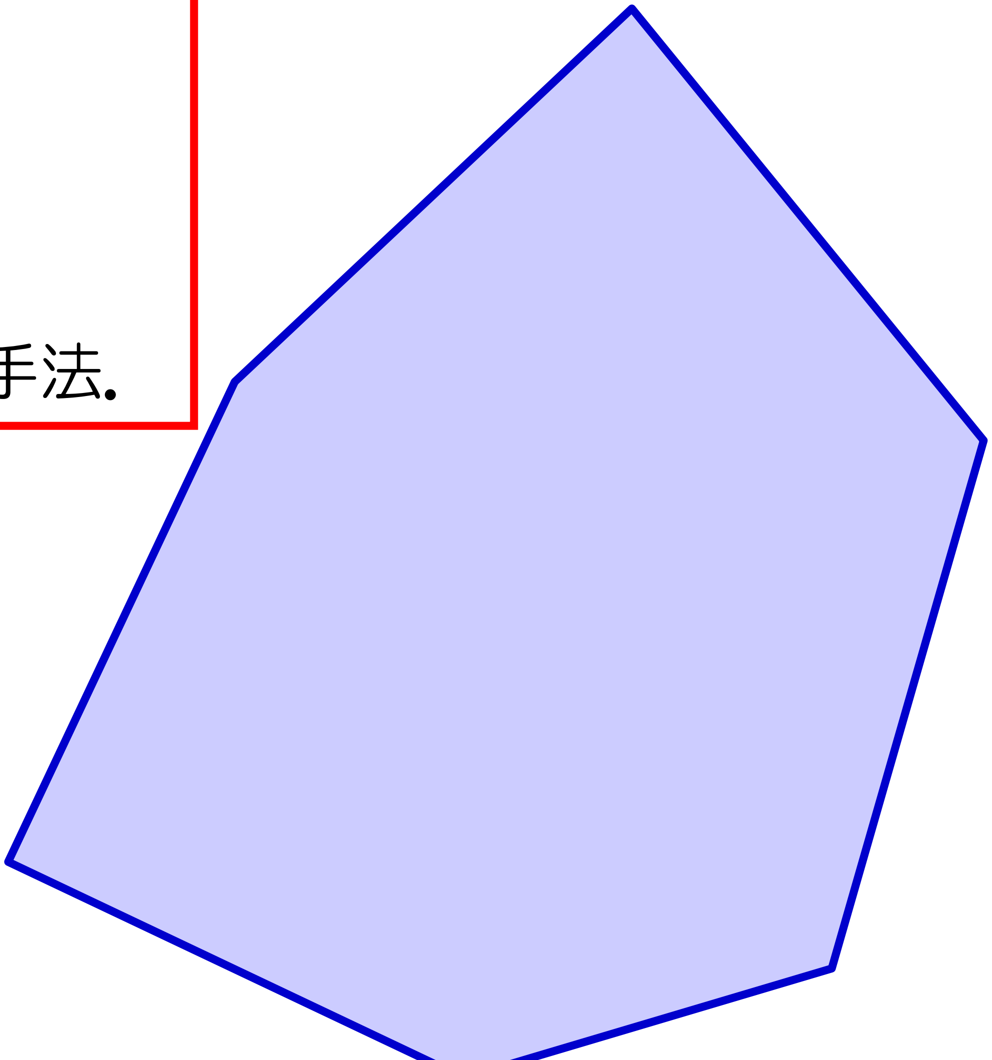
モンテカルロ法

乱数を使用して,

- 比
- 平均

などを近似的に計算する手法.

( の面積) =



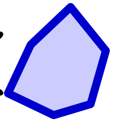
2次元領域の面積計算

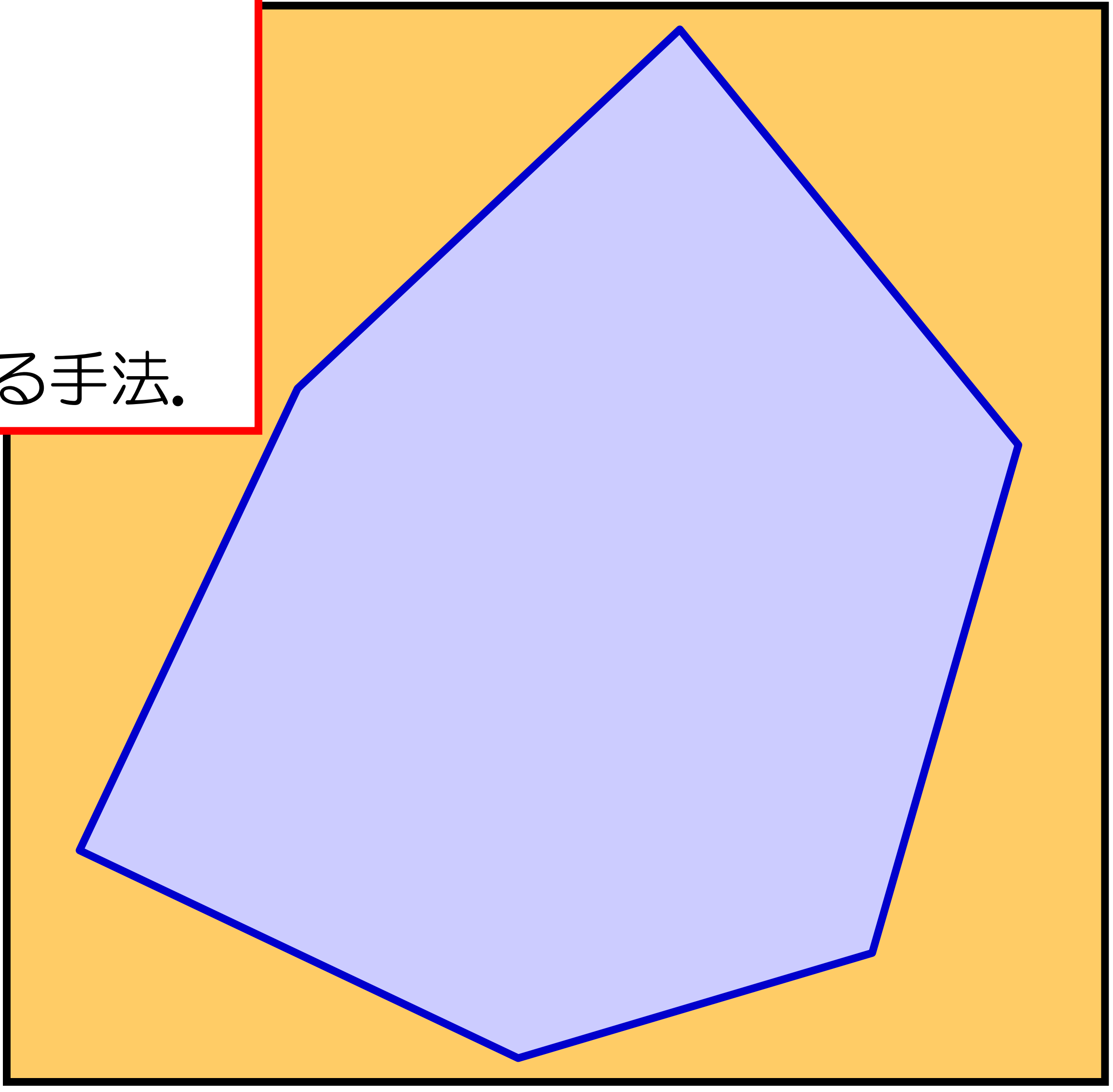
モンテカルロ法

乱数を使用して,

- **比**
- **平均**

などを近似的に計算する手法.

( の面積) =



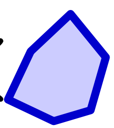
2次元領域の面積計算

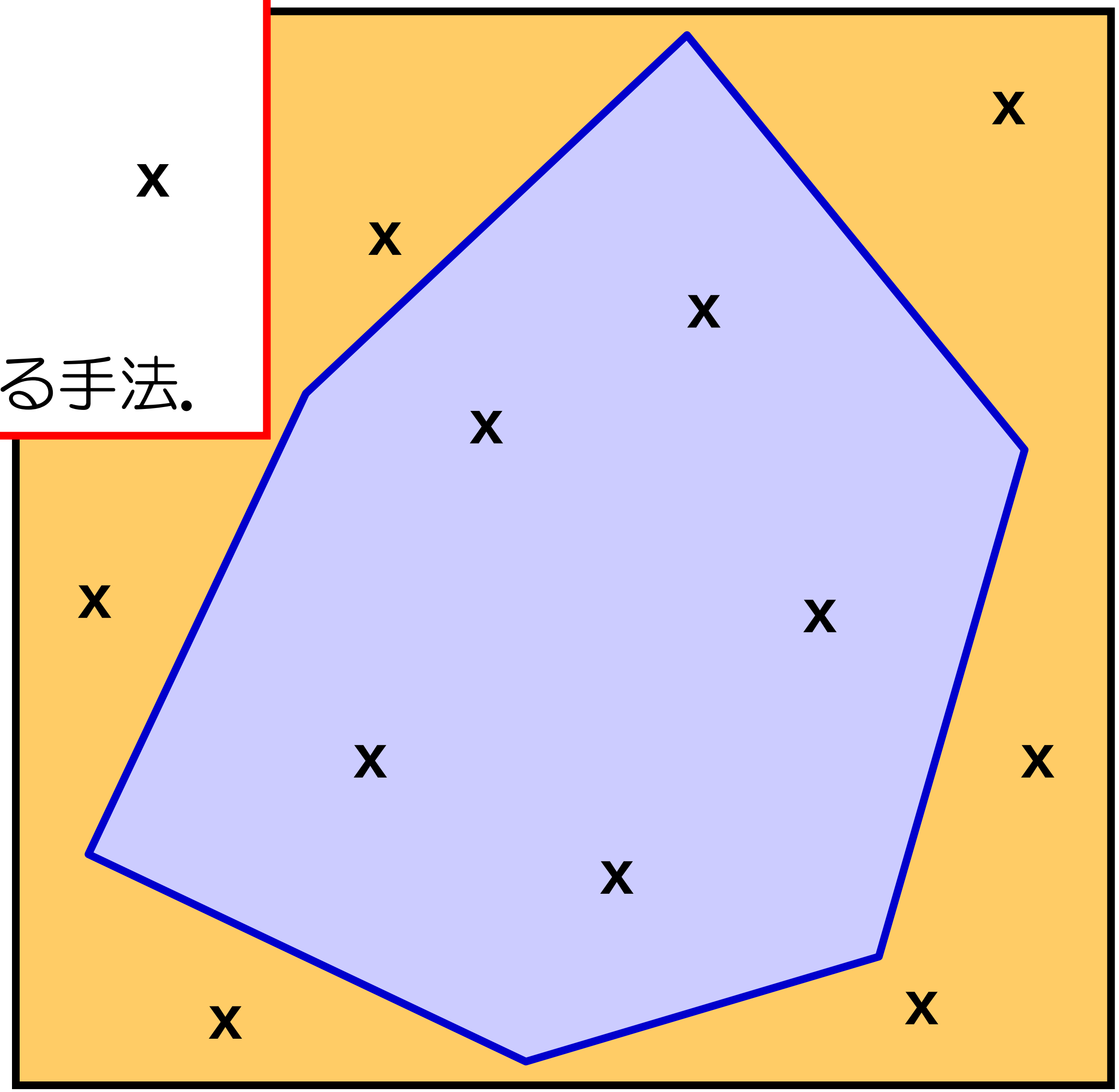
モンテカルロ法

乱数を使用して,

- 比
- 平均

などを近似的に計算する手法.

( の面積) =



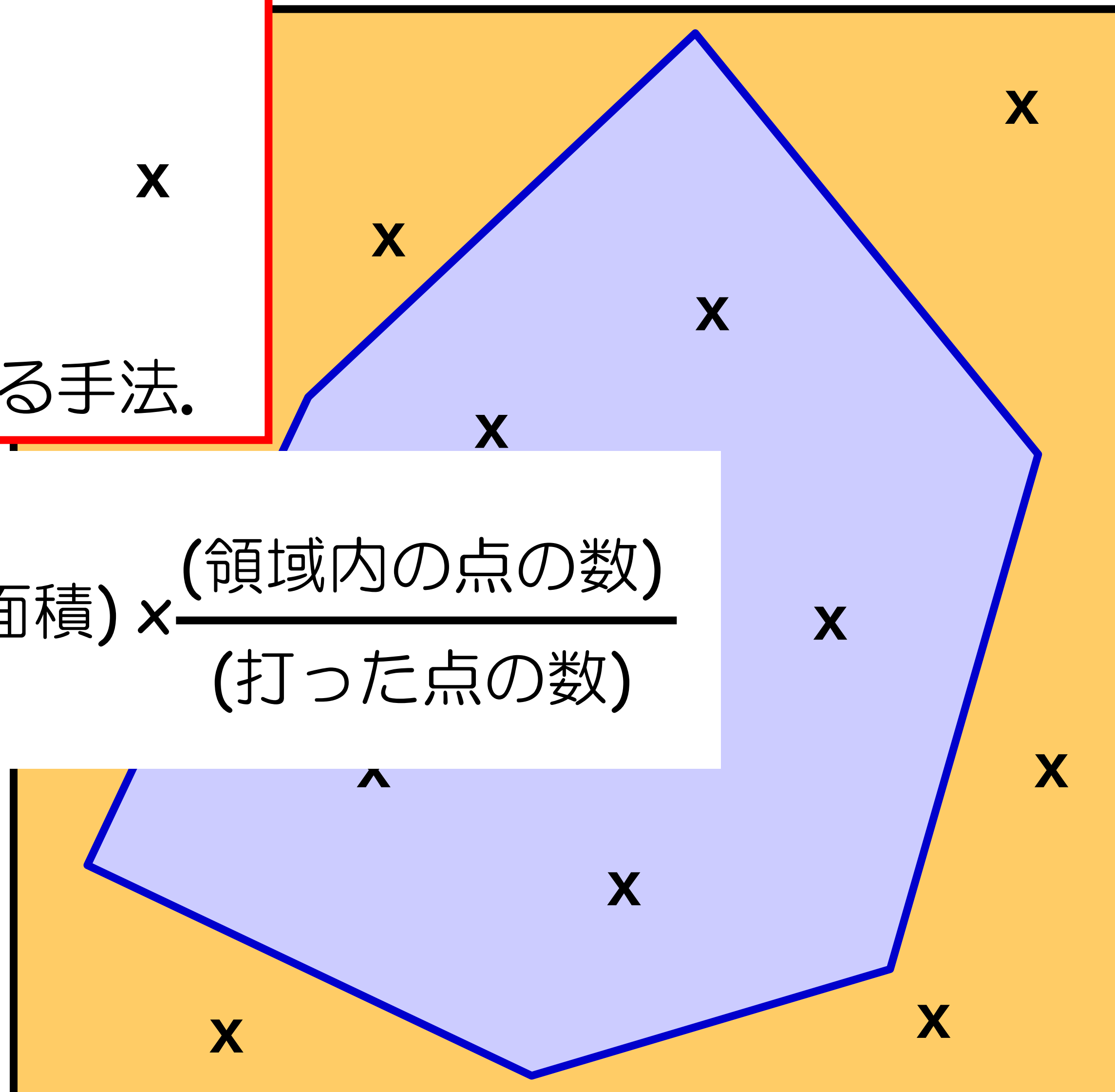
2次元領域の面積計算

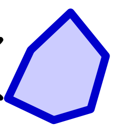
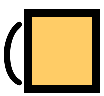
モンテカルロ法

乱数を使用して,

- **比**
- **平均**

などを近似的に計算する手法.



( の面積) = ( の面積) × $\dfrac{\text{(領域内の点の数)}}{\text{(打った点の数)}}$

2次元領域の面積計算

モンテカルロ法

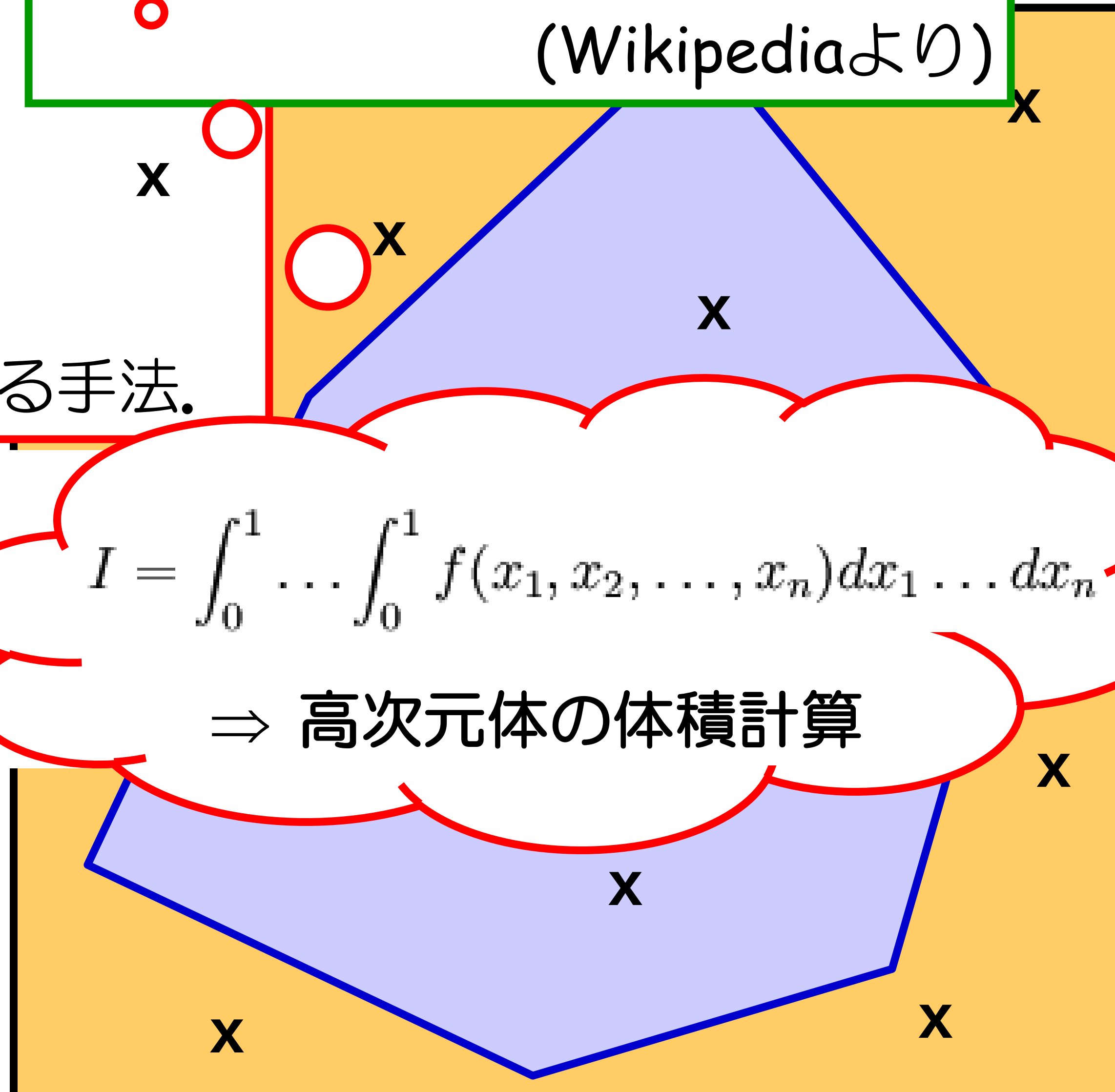
乱数を使用して,

- 比
- 平均

などを近似的に計算する手法.

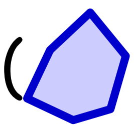
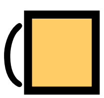
重積分に強いという特徴がある.

(Wikipediaより)



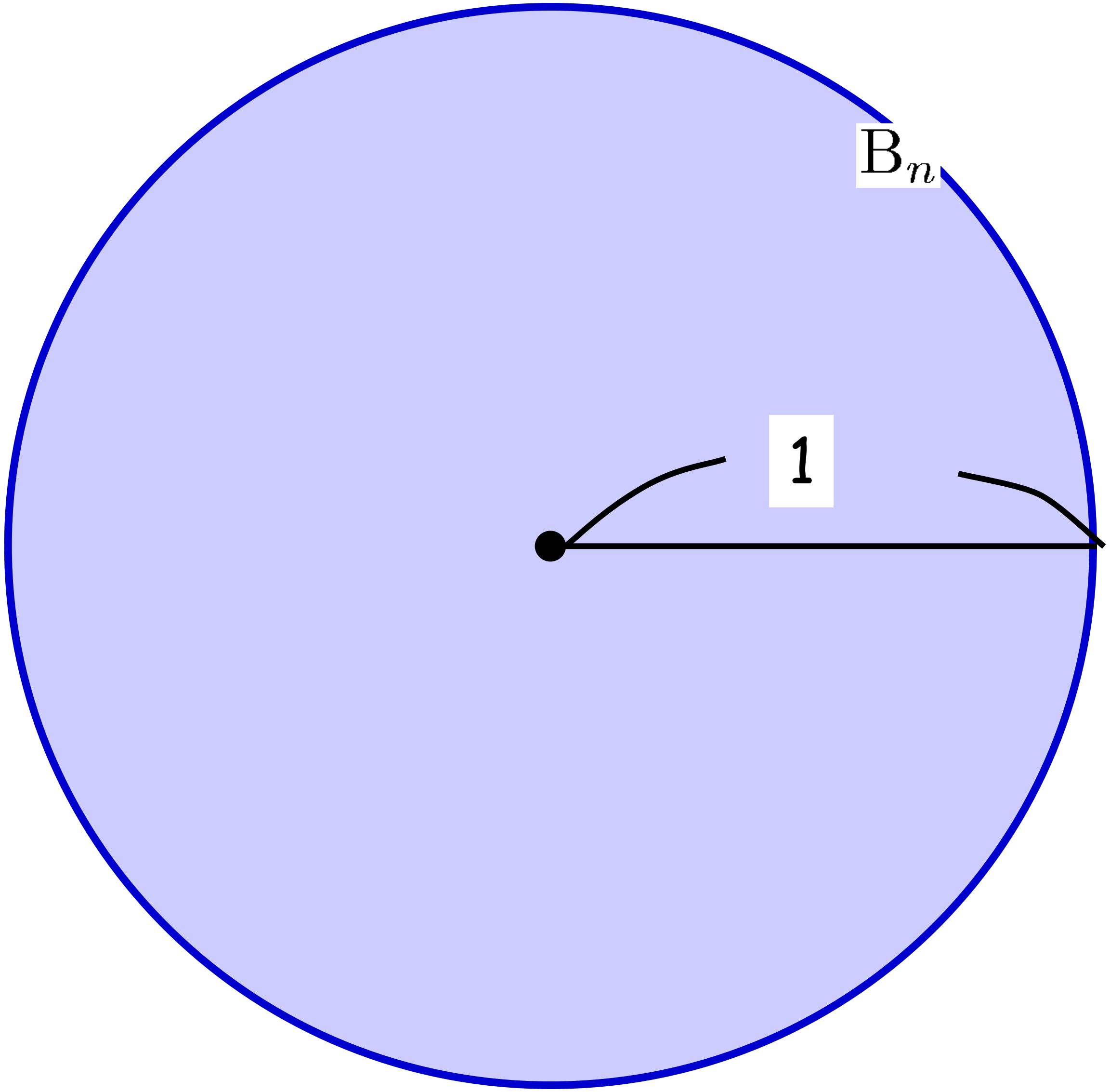
$$I = \int_0^1 \cdots \int_0^1 f(x_1, x_2, \ldots, x_n) dx_1 \ldots dx_n$$

$\Rightarrow$ 高次元体の体積計算

( の面積) = ( の

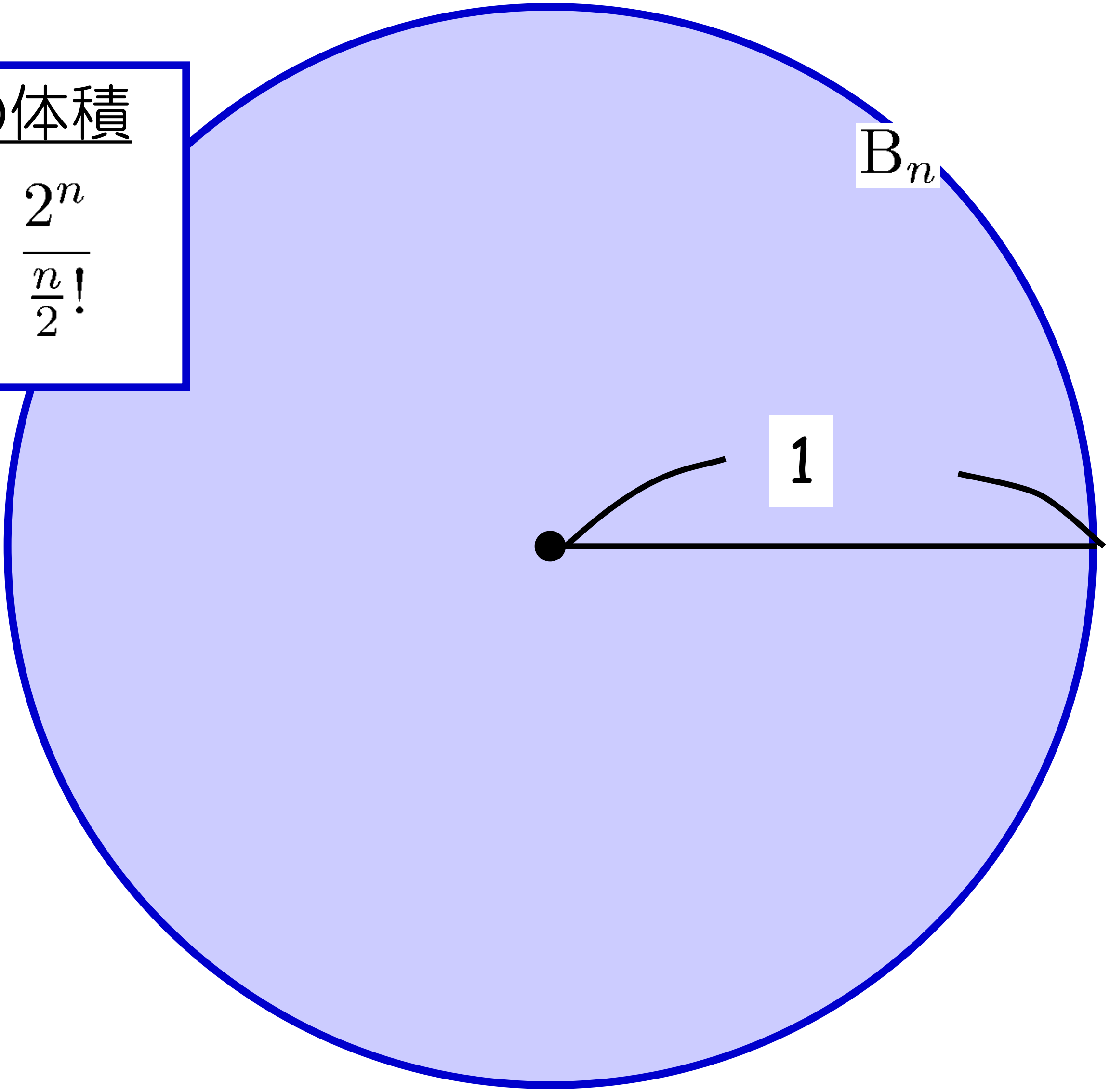
高次元の呪い - 球を例に

n次元球 B_n の体積



高次元の呪い - 球を例に

n次元球 B_n の体積



n次元ユークリッド球の体積

$$\mathrm{V}(\mathrm{B}_n) = \frac{\pi^{\frac{n}{2}}}{\Gamma(\frac{n}{2}+1)} < \frac{2^n}{\frac{n}{2}!}$$

高次元の呪い - 球を例に

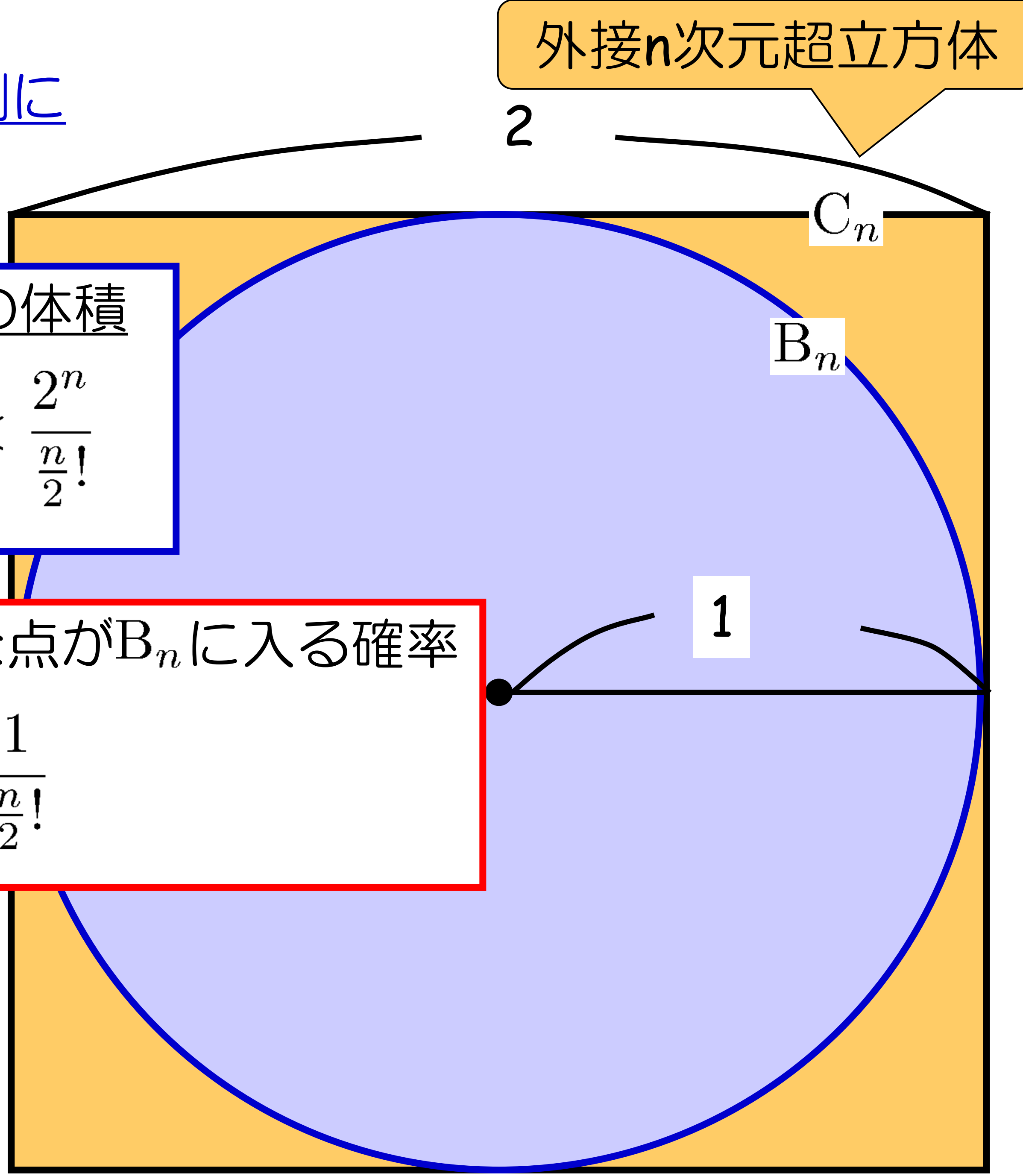
n次元球 B_n の体積

n次元ユークリッド球の体積

$$\mathrm{V}(\mathrm{B}_n) = \frac{\pi^{\frac{n}{2}}}{\Gamma(\frac{n}{2}+1)} < \frac{2^n}{\frac{n}{2}!}$$

C_n上の一様ランダムな点がB_nに入る確率

$$\frac{\mathrm{V}(\mathrm{B}_n)}{\mathrm{V}(\mathrm{C}_n)} = \frac{\mathrm{V}(\mathrm{B}_n)}{2^n} < \frac{1}{\frac{n}{2}!}$$



高次元の呪い - 球を例に

n次元球 B_n の体積

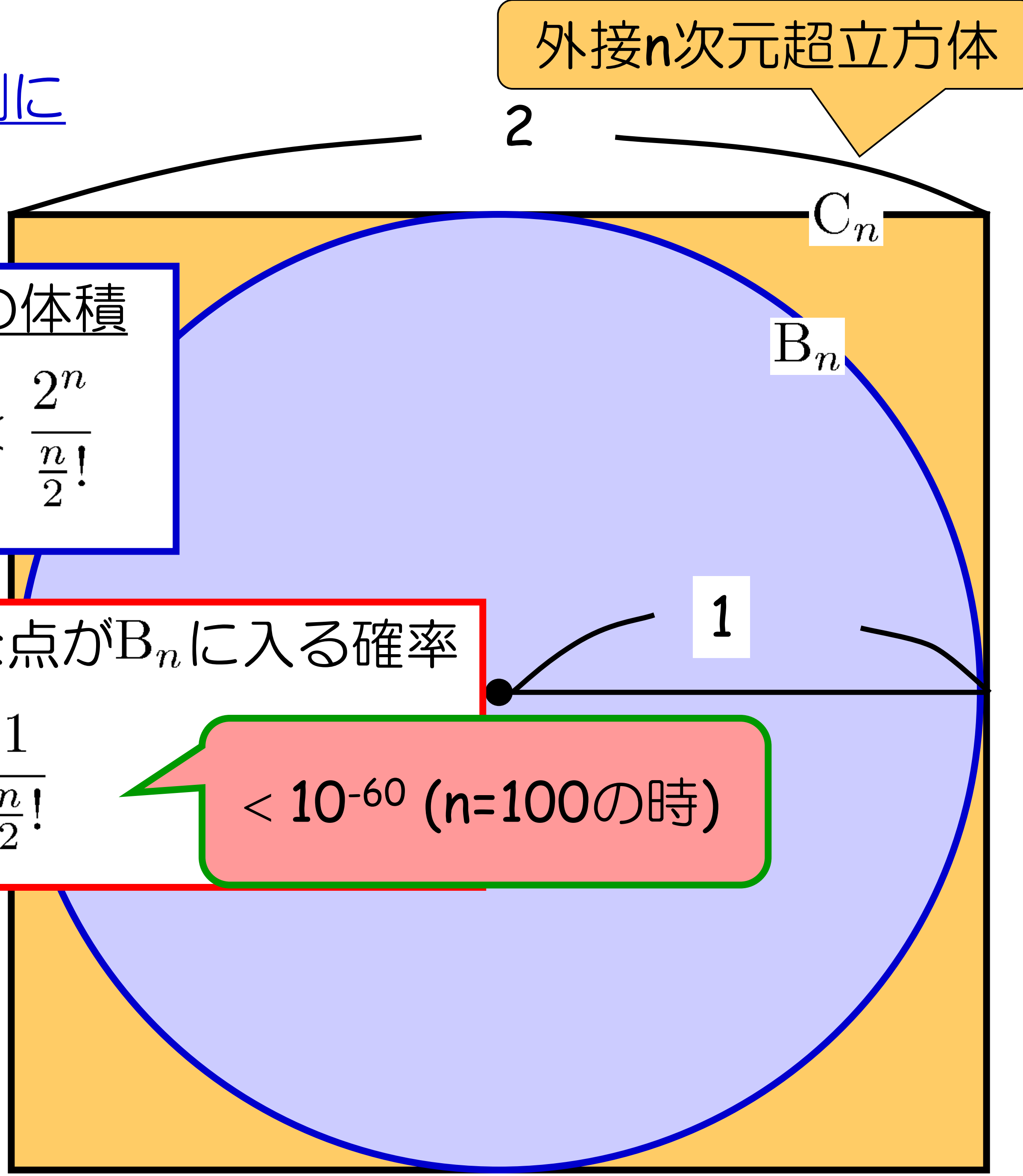
n次元ユークリッド球の体積

$$\mathrm{V}(\mathrm{B}_n) = \frac{\pi^{\frac{n}{2}}}{\Gamma(\frac{n}{2}+1)} < \frac{2^n}{\frac{n}{2}!}$$

C_n上の一様ランダムな点がB_nに入る確率

$$\frac{\mathrm{V}(\mathrm{B}_n)}{\mathrm{V}(\mathrm{C}_n)} = \frac{\mathrm{V}(\mathrm{B}_n)}{2^n} < \frac{1}{\frac{n}{2}!}$$

$< 10^{-60}$ (n=100の時)



高次元の呪い - 球を例に

n次元球 B_n の体積

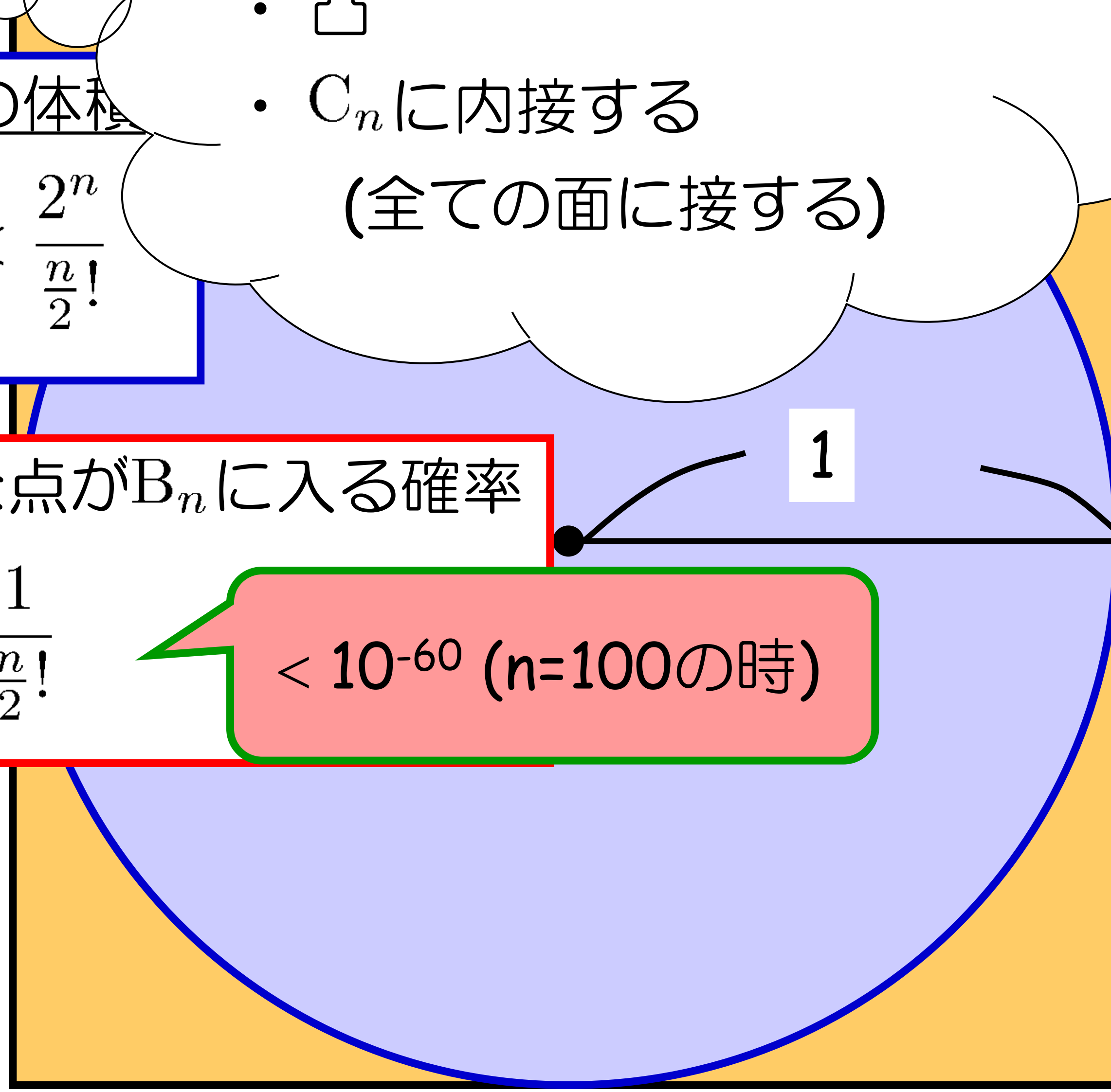
n次元ユークリッド球の体積

$$\mathrm{V}(\mathrm{B}_n) = \frac{\pi^{\frac{n}{2}}}{\Gamma(\frac{n}{2}+1)} < \frac{2^n}{\frac{n}{2}!}$$

C_n上の一様ランダムな点がB_nに入る確率

$$\frac{\mathrm{V}(\mathrm{B}_n)}{\mathrm{V}(\mathrm{C}_n)} = \frac{\mathrm{V}(\mathrm{B}_n)}{2^n} < \frac{1}{\frac{n}{2}!}$$

$< 10^{-60}$ (n=100の時)

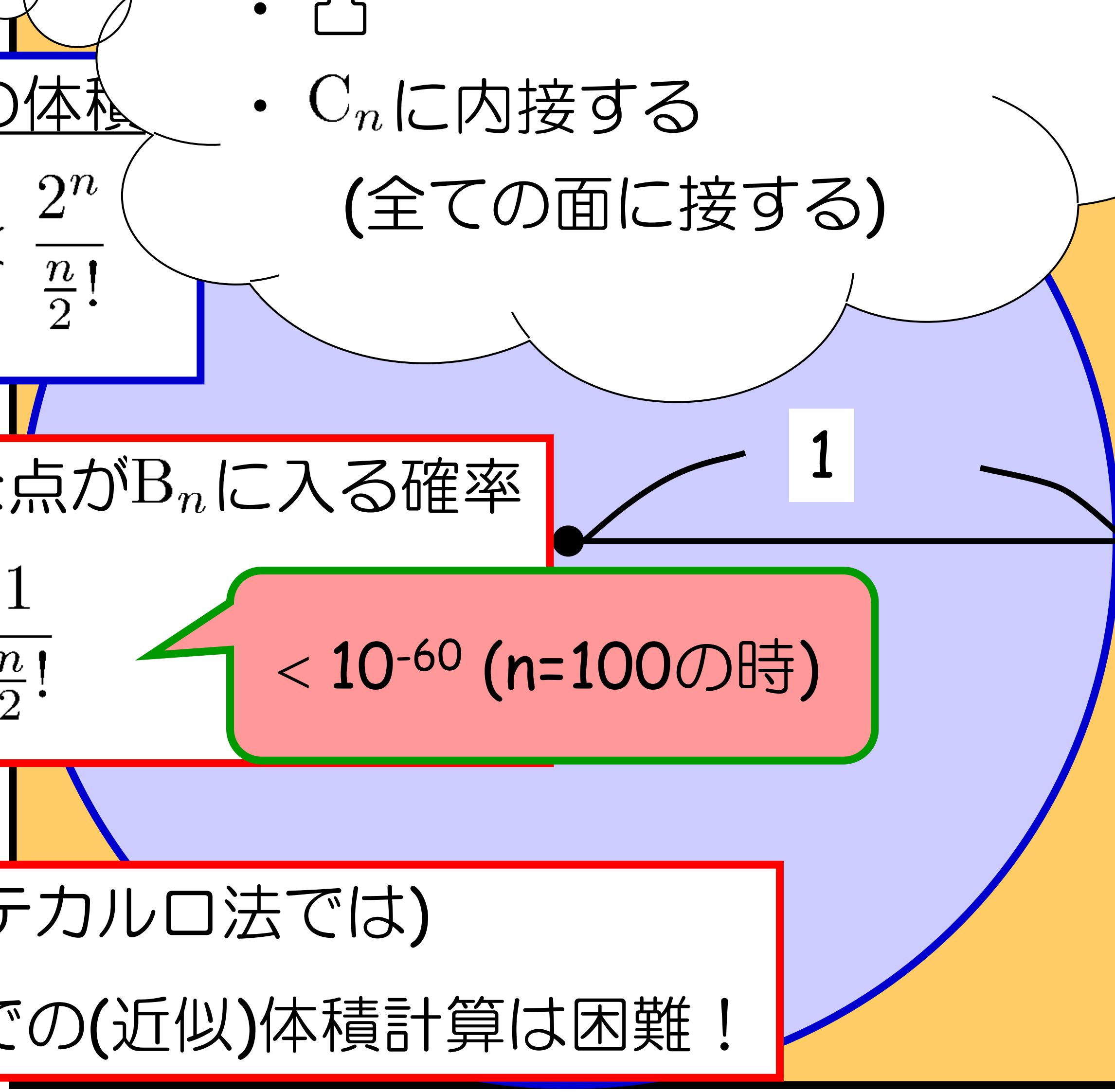


⇒ ふっくらした高次元体

- 凸
- C_nに内接する
  (全ての面に接する)

高次元の呪い - 球を例に

n次元球 B_n の体積



⇒ ふっくらした高次元体

- 凸
- C_nに内接する
  (全ての面に接する)

n次元ユークリッド球の体積

$$V(B_n) = \frac{\pi^{\frac{n}{2}}}{\Gamma(\frac{n}{2}+1)} < \frac{2^n}{\frac{n}{2}!}$$

C_n上の一様ランダムな点がB_nに入る確率

$$\frac{V(B_n)}{V(C_n)} = \frac{V(B_n)}{2^n} < \frac{1}{\frac{n}{2}!}$$

$< 10^{-60}$ (n=100の時)

⇒ (素朴なモンテカルロ法では)

多項式時間での(近似)体積計算は困難！

数え上げ，積分の計算困難性

n次元凸体の体積の計算 => #P困難

#P: 数え上げ問題に対する
計算量クラス.
#P困難 ⊂ NP困難

数え上げ，積分の計算困難性

n次元凸体の体積の計算 => #P困難

#P: 数え上げ問題に対する計算量クラス.
#P困難 ⊂ NP困難

乱択近似
(randomized approximation)

FPRAS (Fully Polynomial-time Randomized Approximation Scheme)
(全多項式時間乱択近似計算法)

A: 真の値
Z: 近似値

$$\Pr\left[\frac{|Z-A|}{A} \leq \varepsilon\right] \geq 1-\delta$$

cf. FPTAS

数え上げ，積分の計算困難性

n次元凸体の体積の計算 => #P困難

#P: 数え上げ問題に対する計算量クラス.
#P困難 ⊂ NP困難

乱択近似
(randomized approximation)

FPRAS (Fully Polynomial-time Randomized Approximation Scheme)
(全多項式時間乱択近似計算法)

cf. FPTAS

A: 真の値
Z: 近似値

$$\Pr\left[\frac{|Z-A|}{A} \leq \varepsilon\right] \geq 1-\delta$$

MCMC法による解決

マルコフ連鎖を用いたランダム生成法 + モンテカルロ法

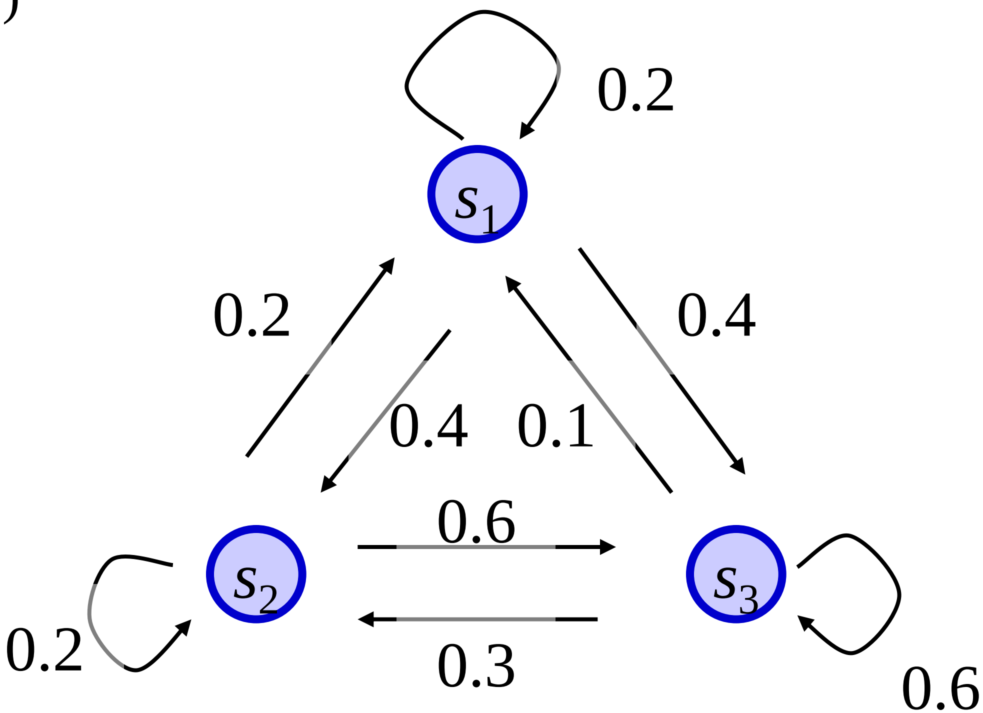
閑話休題

2.2. マルコフ連鎖を用いたランダム生成法

マルコフ連鎖の定常分布

- マルコフ連鎖 M（エルゴード的）
  - ➢ 状態空間 : Ω（有限）
  - ➢ 推移規則 : 推移確率行列 P によって推移する

$$P_{ij} = \Pr(\text{推移 } i \to j) = P(i, j)$$



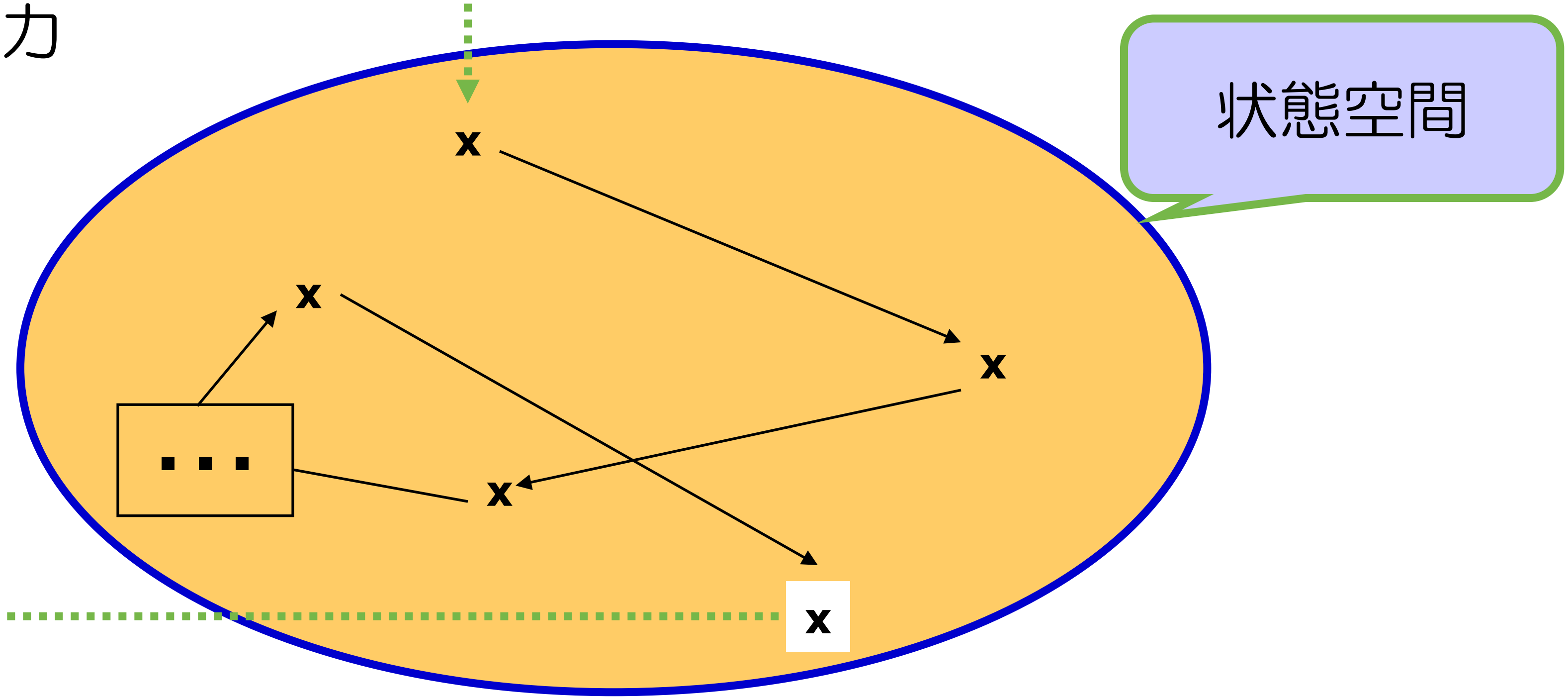
状態遷移図

マルコフ連鎖の極限分布

任意の初期状態

推移を繰り返す

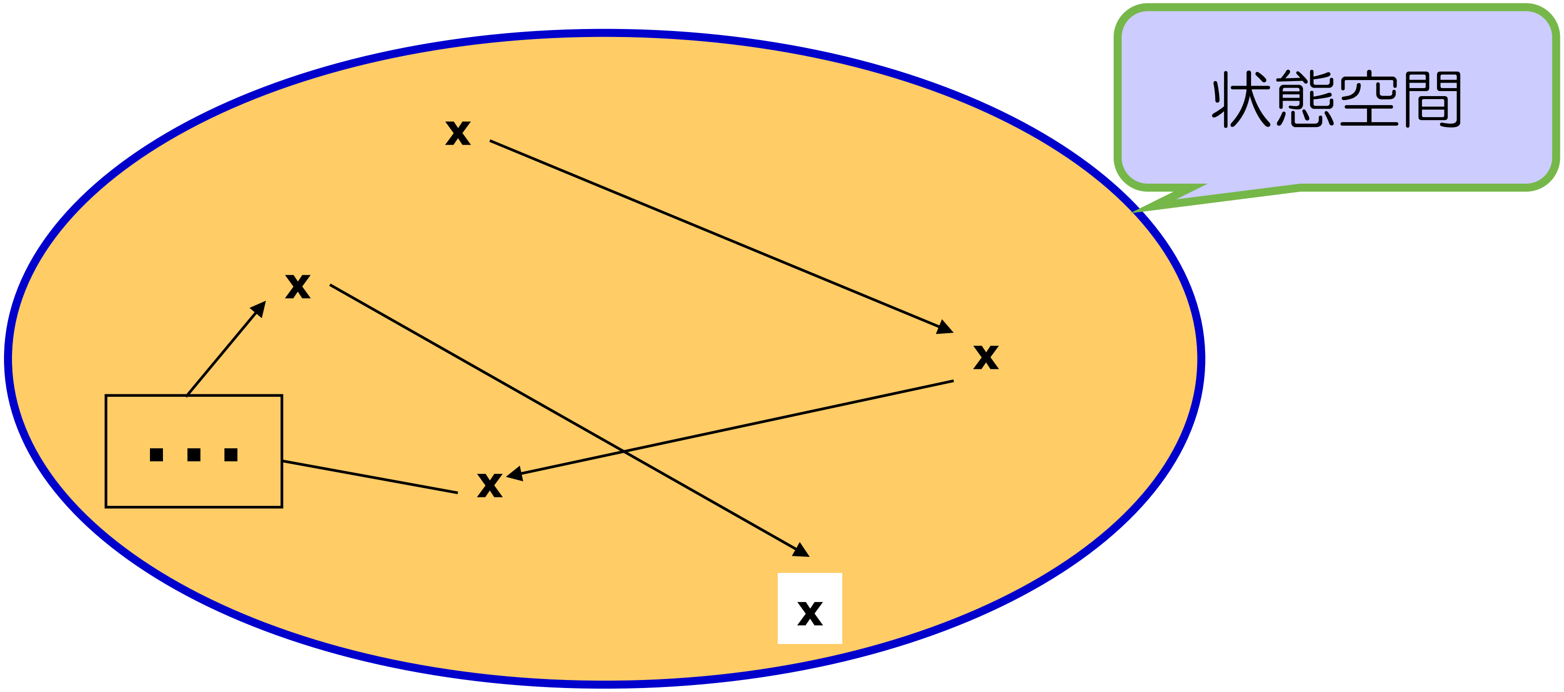
状態を出力



漸近的に定常分布

「マルコフ連鎖を用いたサンプリング法」のアイデア

1. 目的の分布を定常分布にもつマルコフ連鎖を設計する。
2. 十分な回数推移させて、定常分布からサンプリングする。



漸近的に定常分布

2.3. 高次元凸体の体積計算

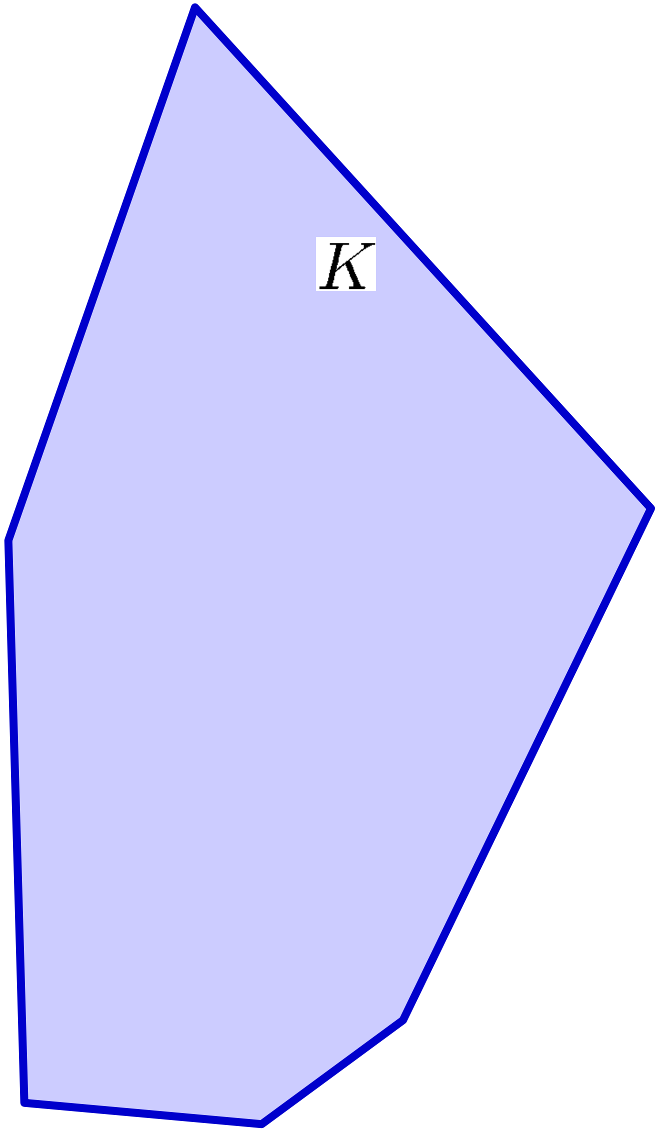
[Dyer, Frieze, Kannan 1991]

再帰的なモンテカルロ法

問題: 高次元凸体の体積計算

K: n次元凸体

体積V(K)を計算



仮定: ふっくらとした凸体

K: n次元凸体

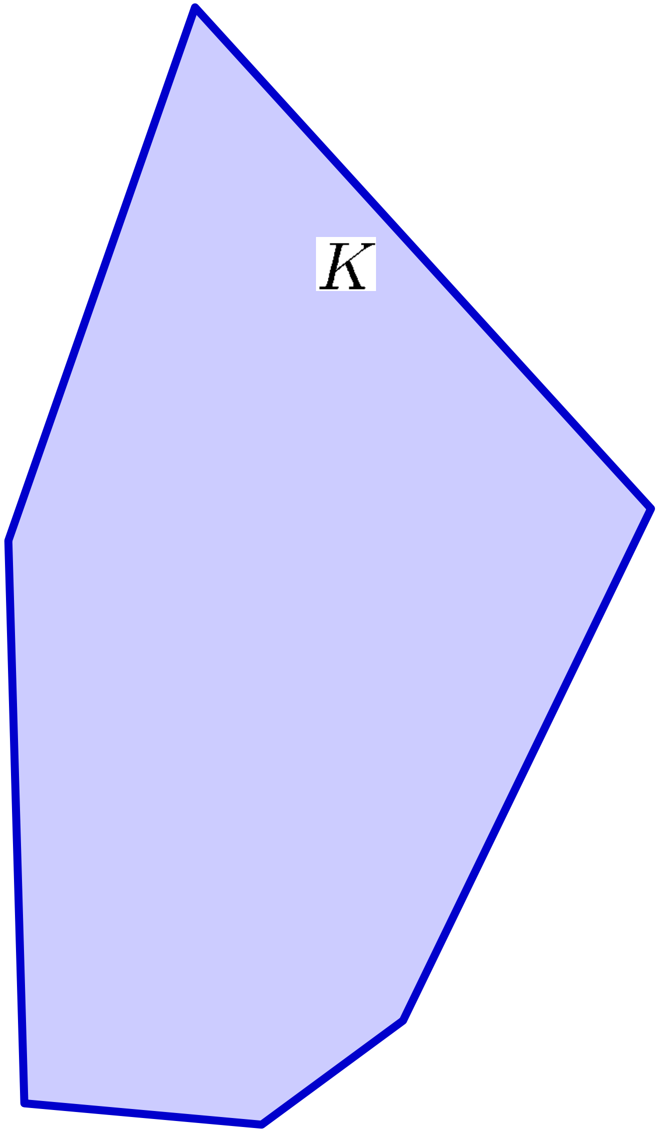
体積V(K)を計算

仮定

Kはふっくらとしている

$$\mathrm{B}_n(\mathbf{0}, R) \subseteq K \subseteq \mathrm{B}_n(\mathbf{0}, R)$$

$\left[R = O(n^c)\right]$



仮定: ふっくらとした凸体

K: n次元凸体

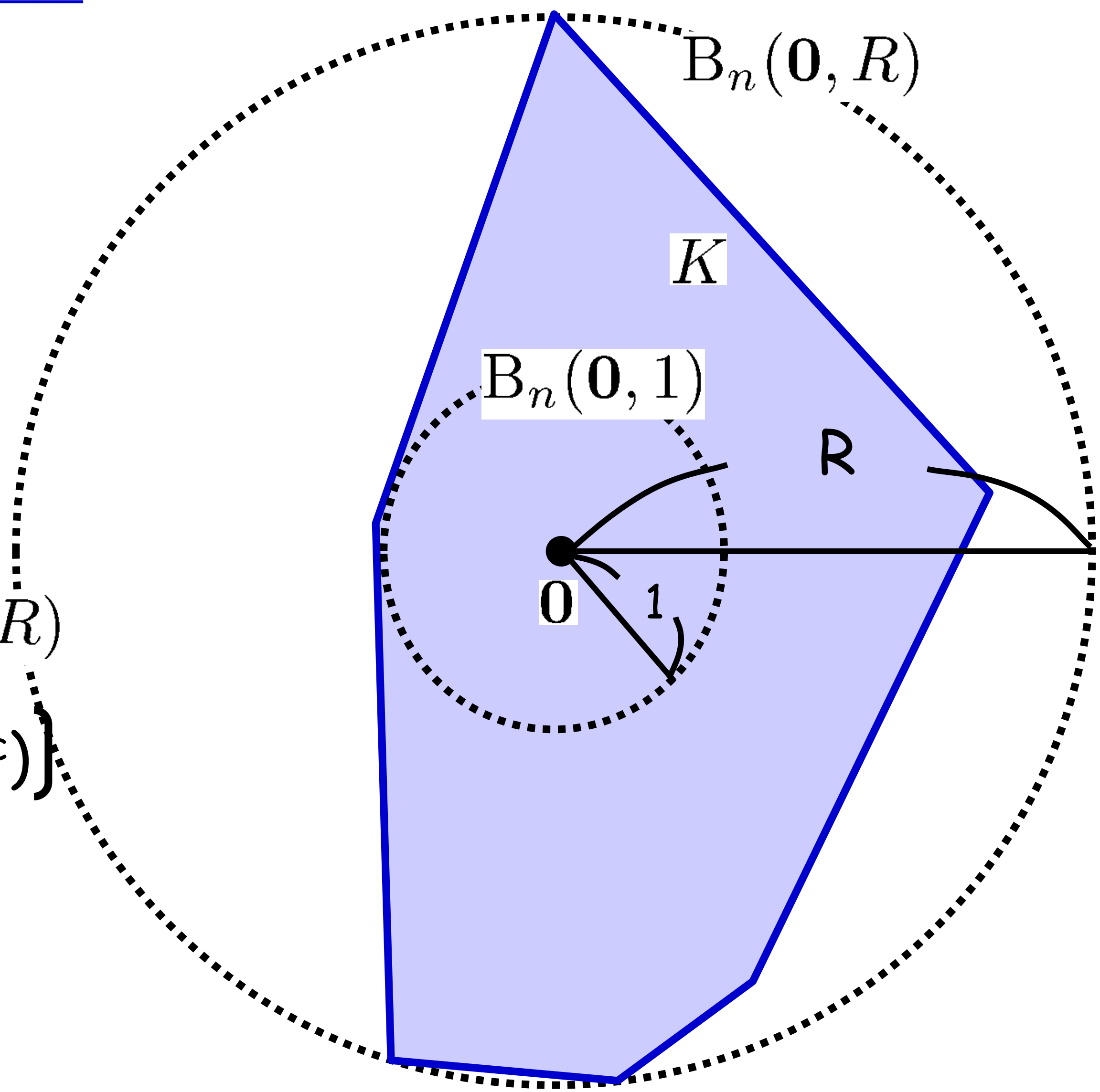
体積V(K)を計算

仮定

Kはふっくらとしている

$\mathrm{B}_n(\mathbf{0}, R) \subseteq K \subseteq \mathrm{B}_n(\mathbf{0}, R)$

$\{R = O(n^c)\}$



[Kannan, Lovasz, Simonovitz 1993]

K上の一様ランダム生成 - Ball walk

Bal-walk

X: 現在の点

X': 次の時刻の点

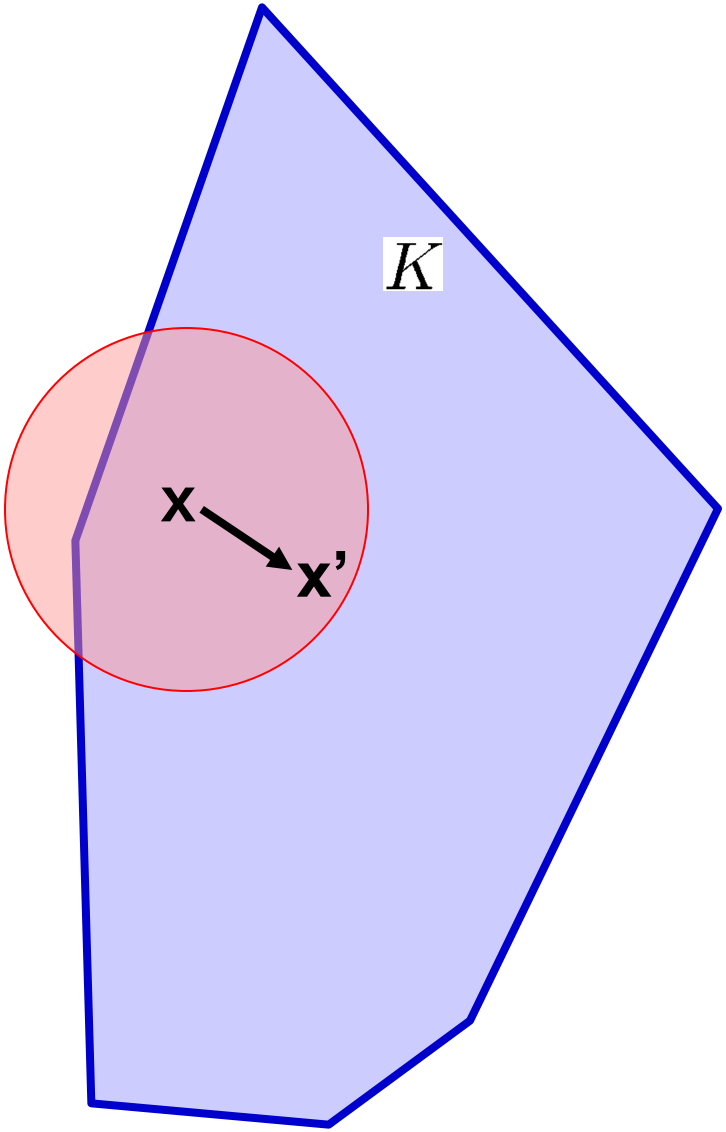
Step 1.

Y : $\mathrm{B}_n(X, a)$ 中の

一様ランダムな点を選ぶ.

Step 2.

$$X' = \begin{cases} Y & (Y \in K) \\ X & (Y \notin K) \end{cases}$$



定常分布はK上の一様分布

K上の一様ランダム生成

(ふっくらとした凸体に対して)

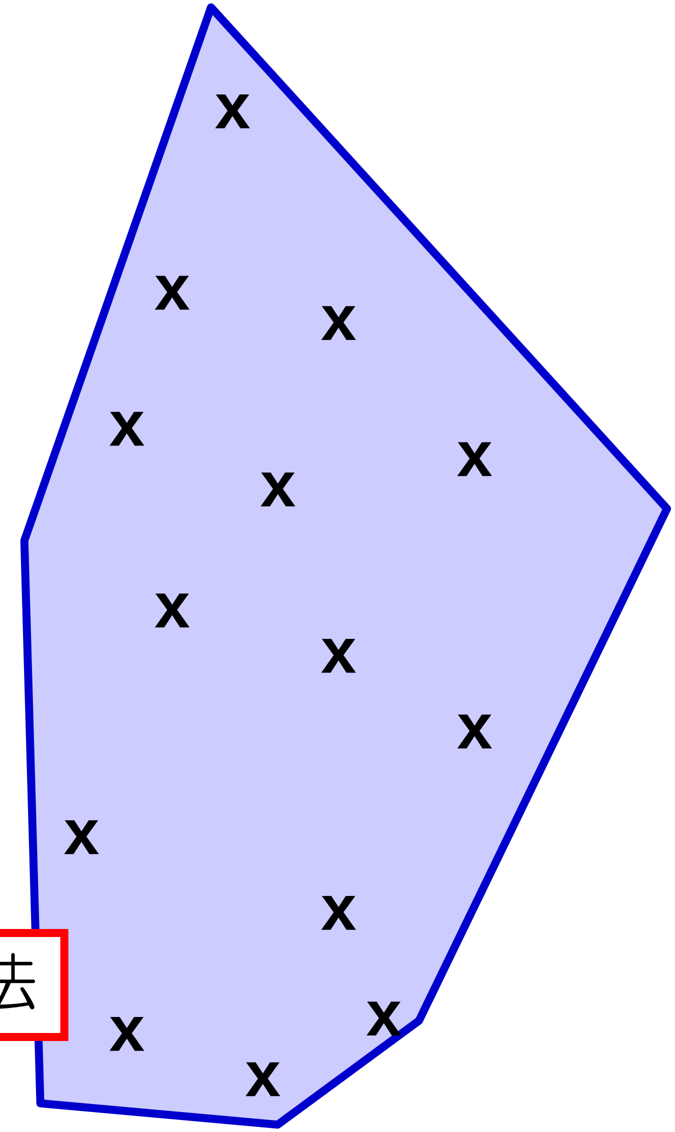
Ball-walkを用いて,

一様ランダムサンプリング可能

どうやって,

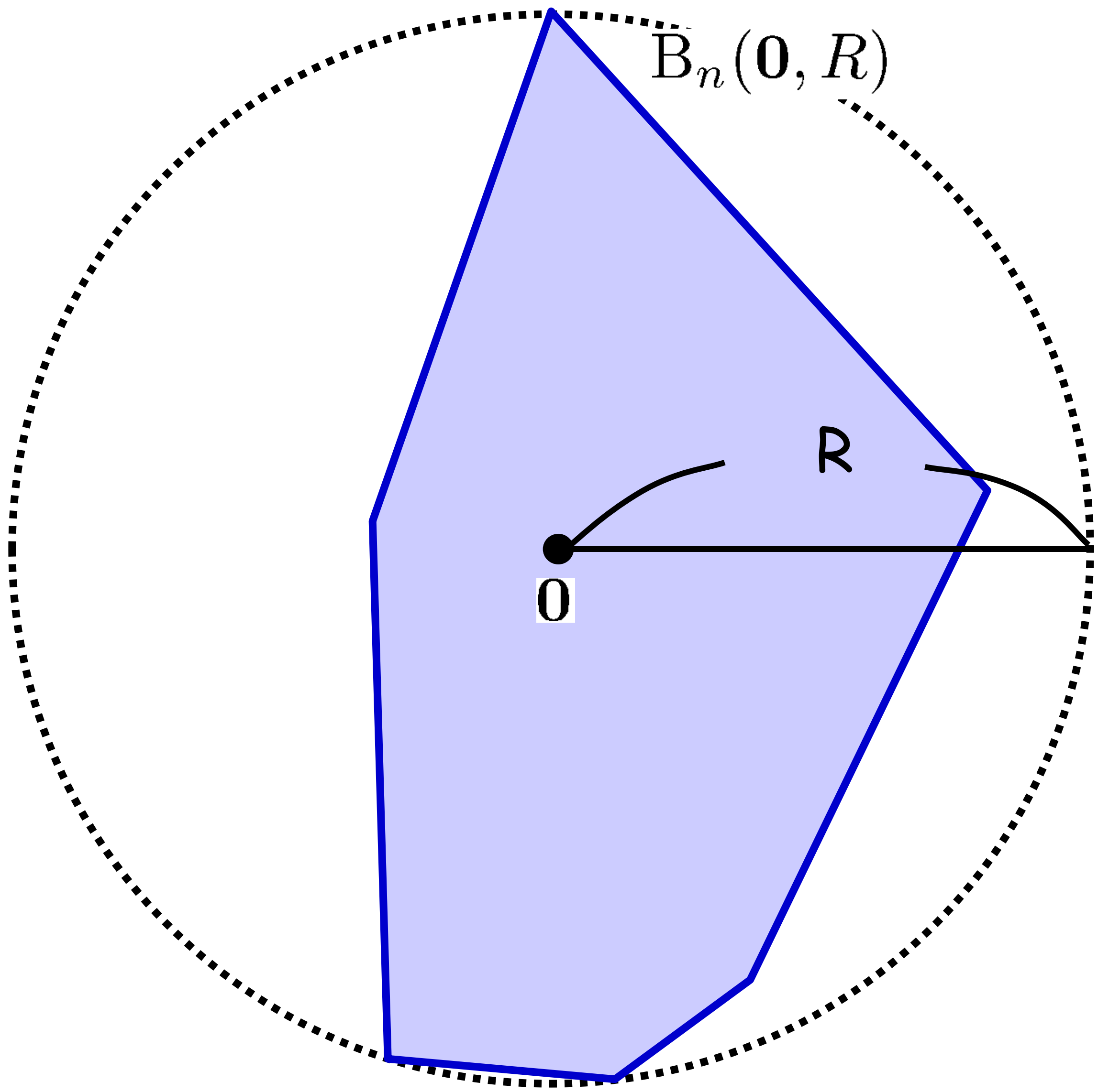
体積を計算するのか？

再帰的アルゴリズム + モンテカルロ法



再帰のアイデア

K: n次元凸体
体積V(K)を計算

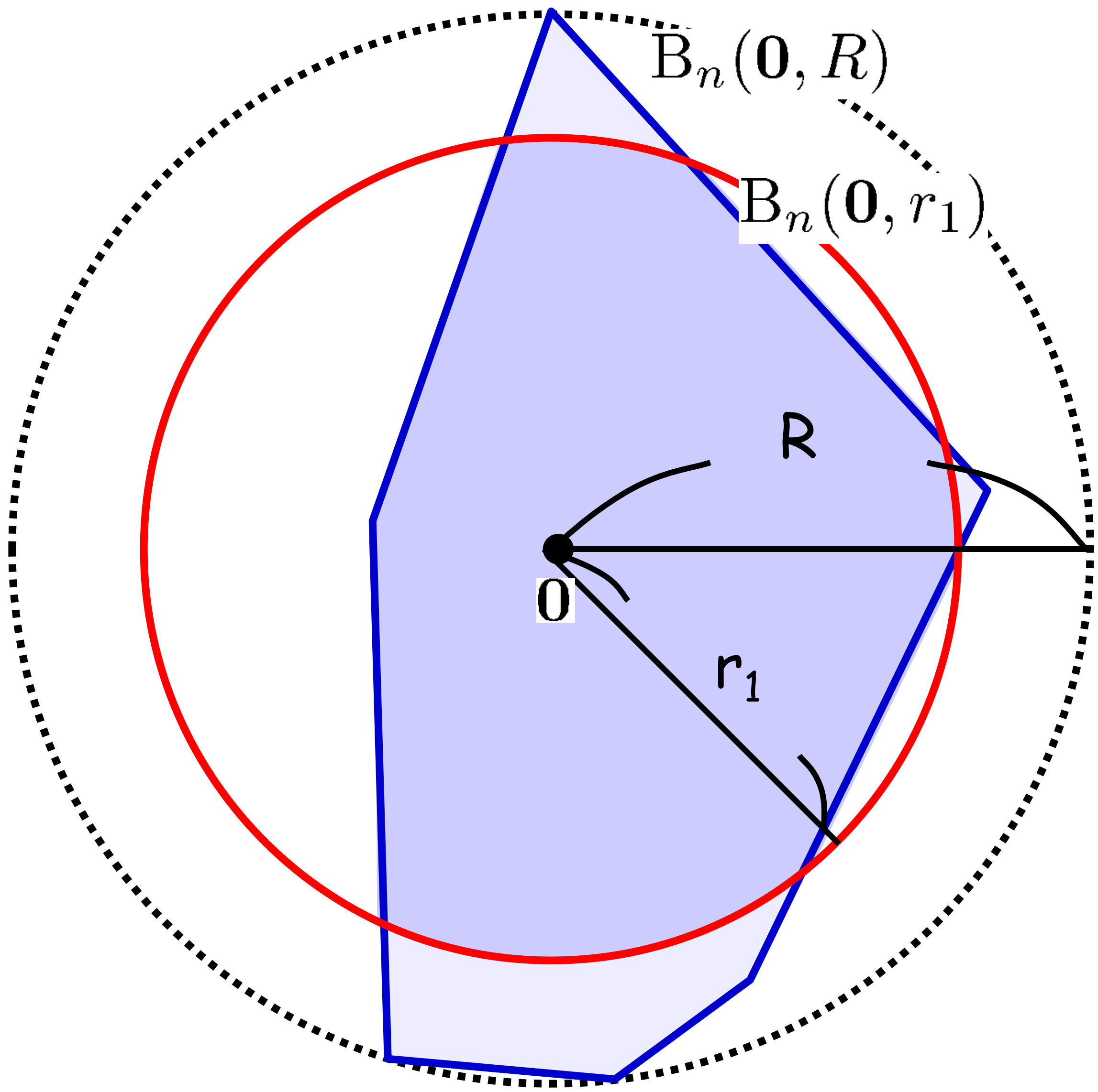


再帰のアイデア

K: n次元凸体
体積V(K)を計算

$$K_1 \stackrel{\text{def.}}{=} K \cap \mathrm{B}_n(\mathbf{0}, r_1)$$

$$\mathrm{V}(K) = \frac{\mathrm{V}(K)}{\mathrm{V}(K_1)} \cdot \mathrm{V}(K_1)$$



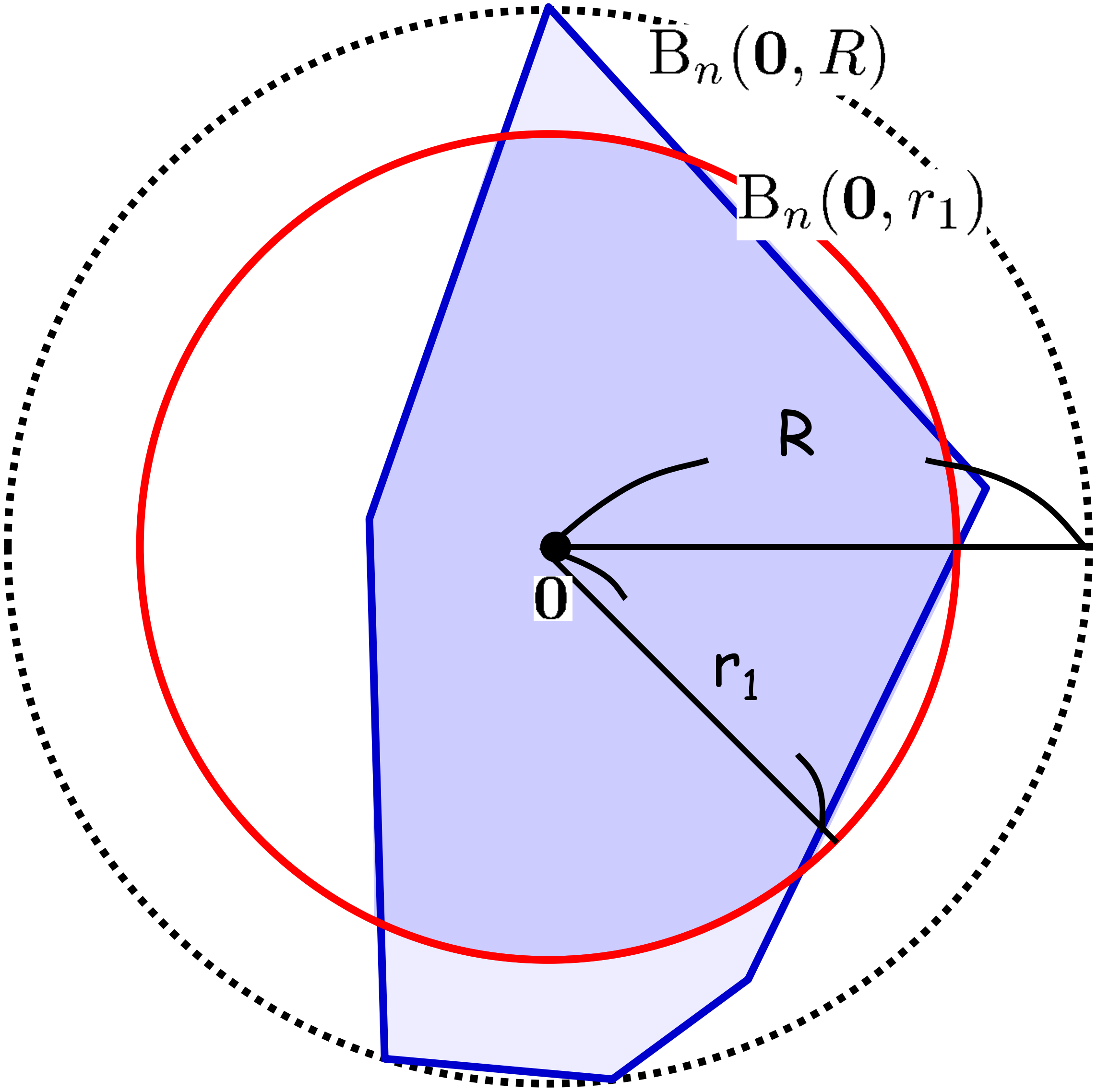
再帰のアイデア

K: n次元凸体
体積V(K)を計算

$$K_1 \stackrel{\text{def.}}{=} K \cap \mathrm{B}_n(\mathbf{0}, r_1)$$

$$\mathrm{V}(K) = \frac{\mathrm{V}(K)}{\mathrm{V}(K_1)} \cdot \mathrm{V}(K_1)$$

モンテカルロ法で計算



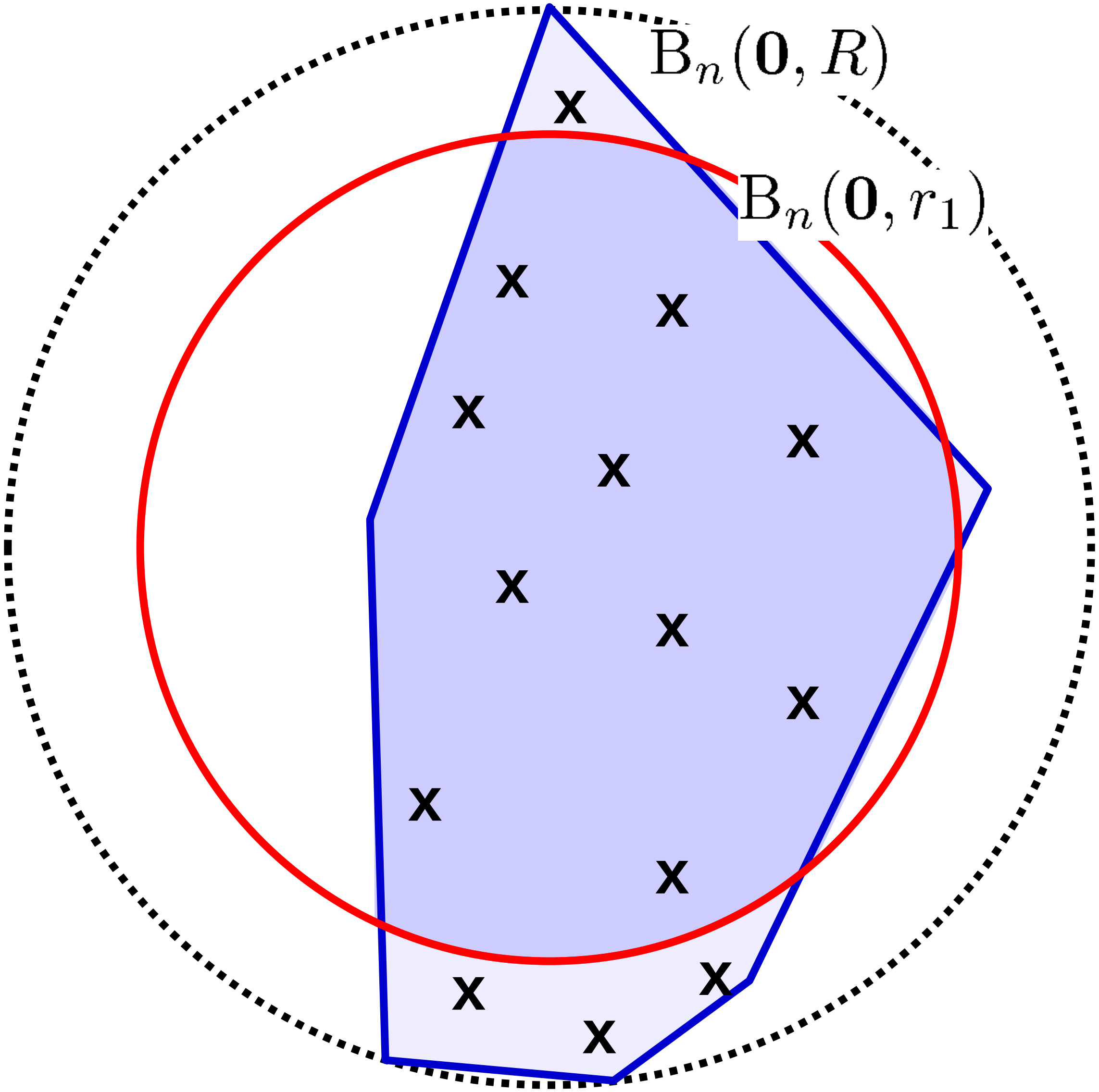
再帰のアイデア

K: n次元凸体
体積V(K)を計算

$$K_1 \stackrel{\text{def.}}{=} K \cap \mathrm{B}_n(\mathbf{0}, r_1)$$

$$\mathrm{V}(K) = \frac{\mathrm{V}(K)}{\mathrm{V}(K_1)} \cdot \mathrm{V}(K_1)$$

モンテカルロ法で計算



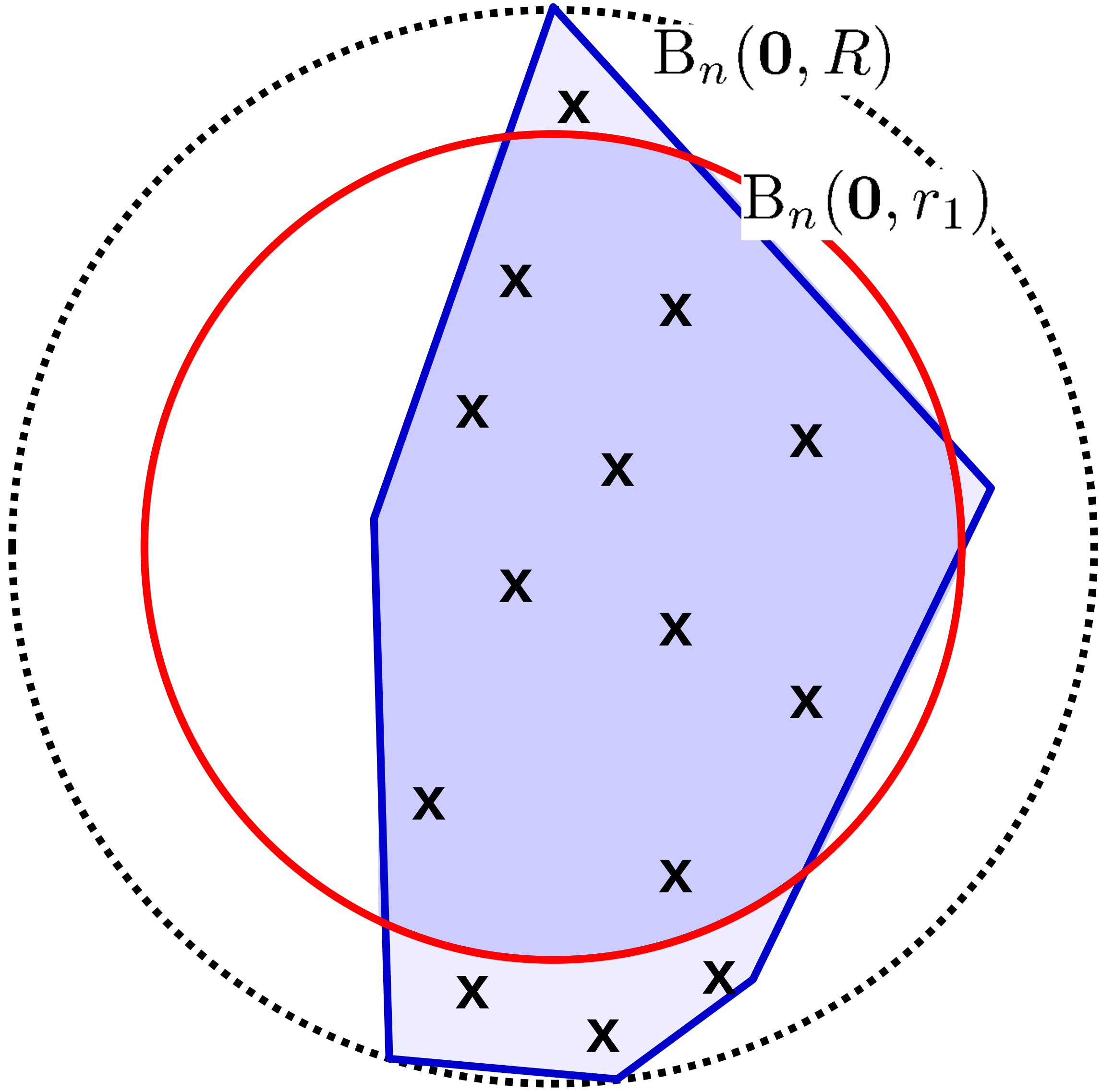
再帰のアイデア

K: n次元凸体
体積V(K)を計算

$$K_1 \stackrel{\text{def.}}{=} K \cap \mathrm{B}_n(\mathbf{0}, r_1)$$

$$\mathrm{V}(K) = \frac{\mathrm{V}(K)}{\mathrm{V}(K_1)} \cdot \mathrm{V}(K_1)$$

モンテカルロ法で計算



K_1: n次元凸体
体積$V(K_1)$を計算

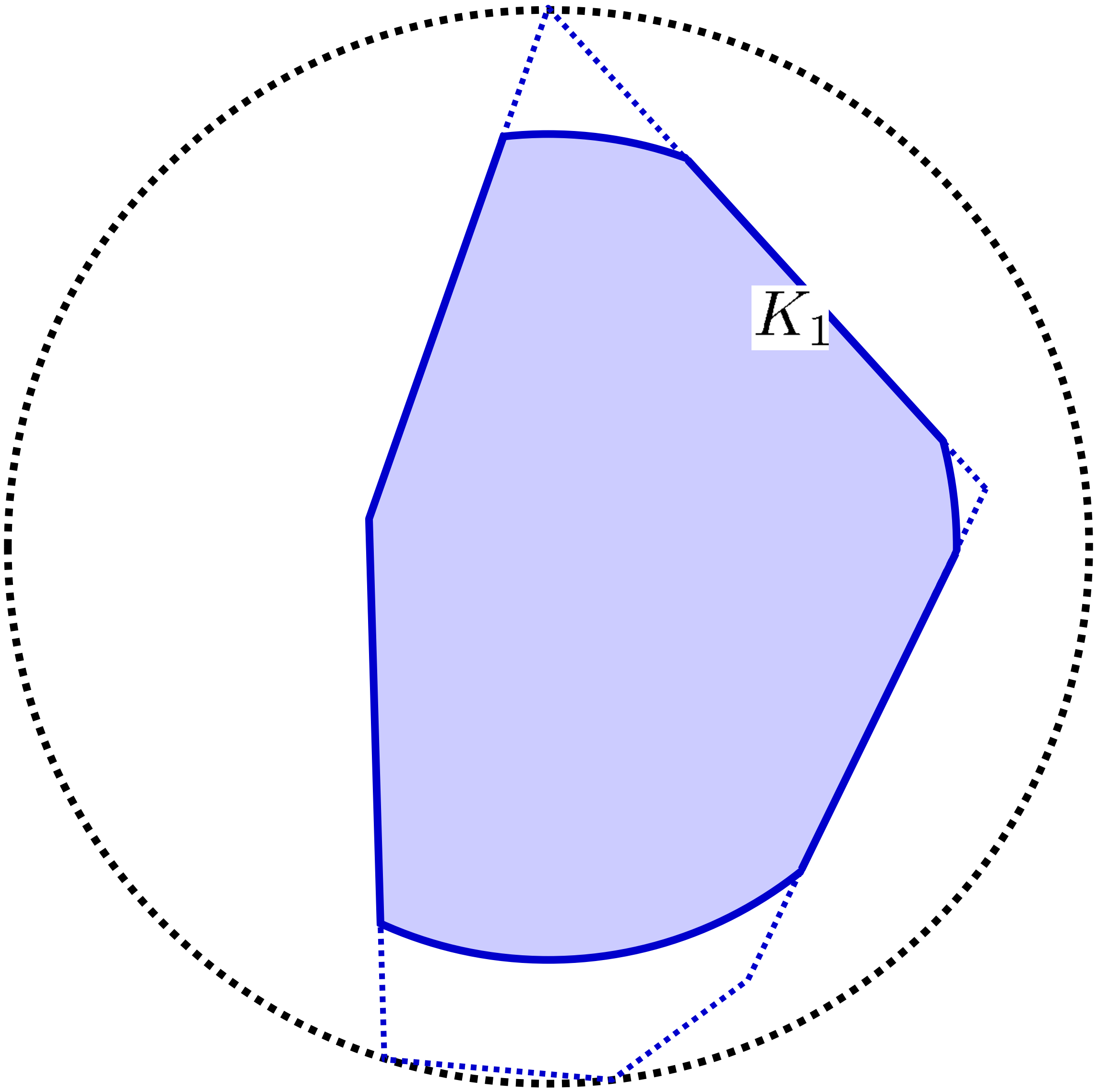
再帰のアイデア

K: n次元凸体
体積V(K)を計算

$$K_1 \stackrel{\text{def.}}{=} K \cap \mathrm{B}_n(\mathbf{0}, r_1)$$

$$\mathrm{V}(K) = \frac{\mathrm{V}(K)}{\mathrm{V}(K_1)} \cdot \mathrm{V}(K_1)$$

モンテカルロ法で計算



K_1: n次元凸体
体積V(K_1)を計算

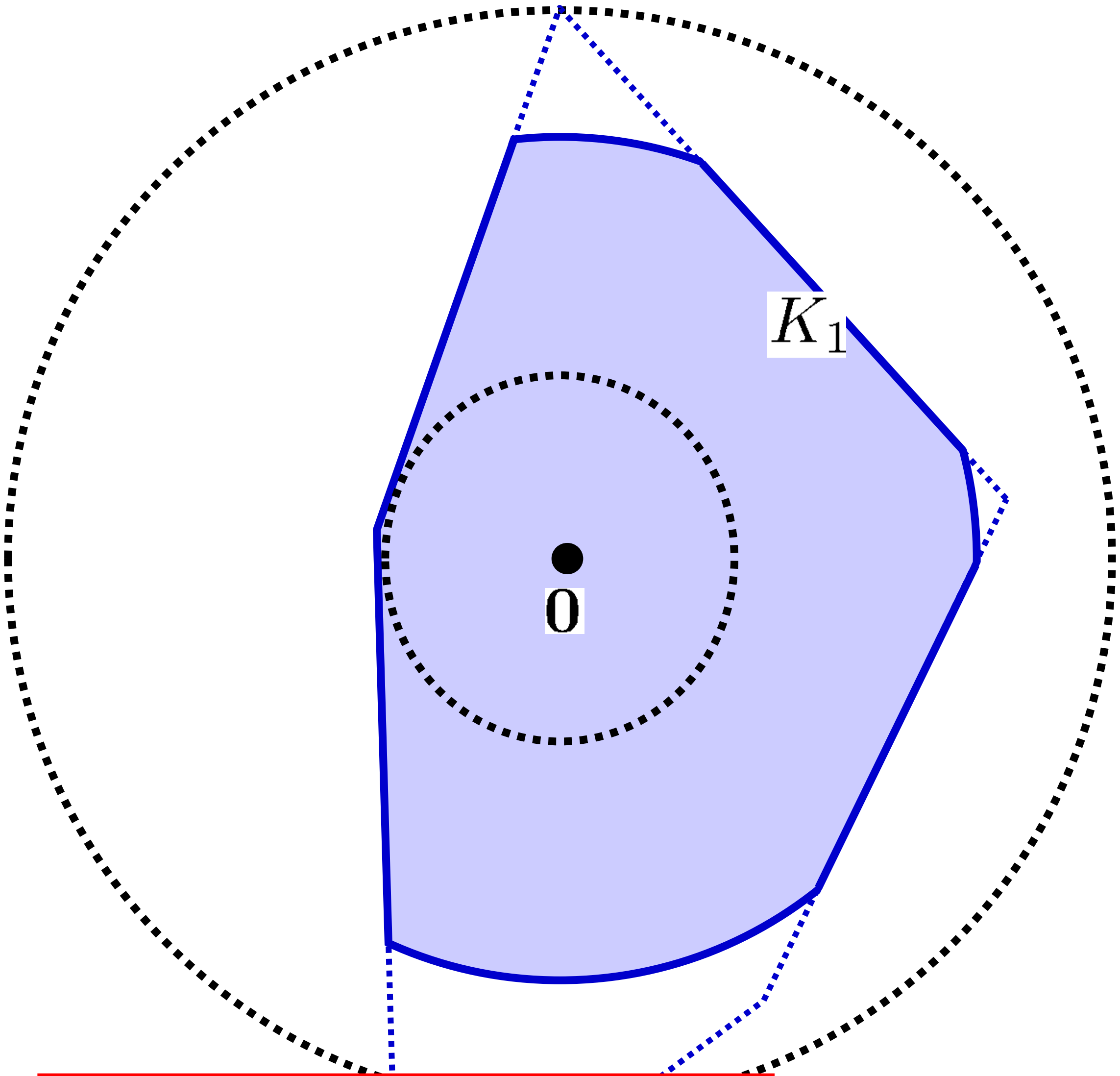
再帰のアイデア

K: n次元凸体
体積V(K)を計算

$$K_1 \stackrel{\text{def.}}{=} K \cap \mathrm{B}_n(\mathbf{0}, r_1)$$

$$\mathrm{V}(K) = \frac{\mathrm{V}(K)}{\mathrm{V}(K_1)} \cdot \mathrm{V}(K_1)$$

モンテカルロ法で計算

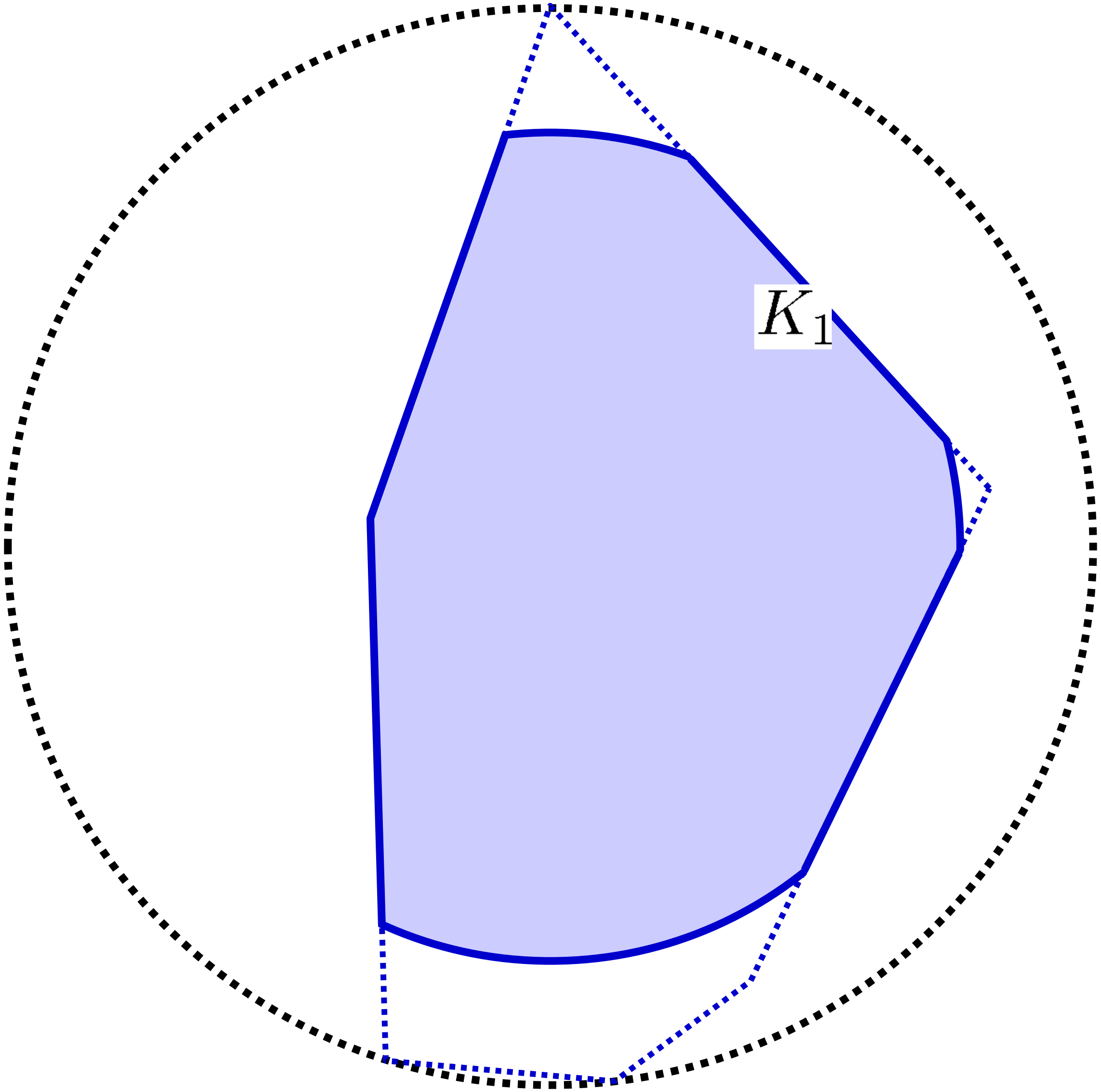


K_1: n次元凸体
体積$V(K_1)$を計算

K_1はふっくらとしている

再帰のアイデア

K_1: n次元凸体
体積$V(K_1)$を計算

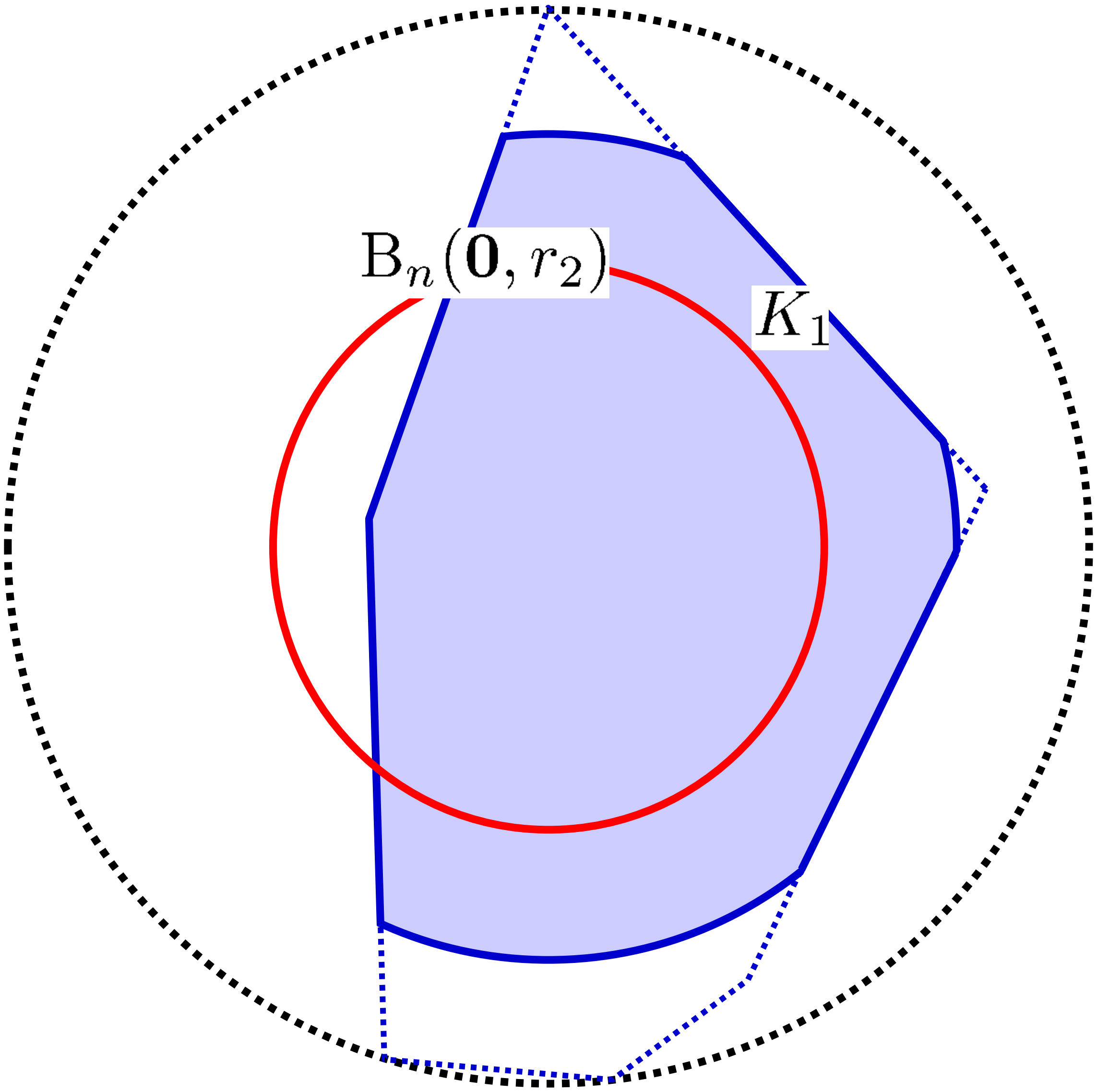


再帰のアイデア

K_1: n次元凸体
体積$V(K_1)$を計算

$$K_2 \overset{\text{def.}}{=} K \cap \mathrm{B}_n(\mathbf{0}, r_2)$$

$$\mathrm{V}(K_1) = \frac{\mathrm{V}(K_1)}{\mathrm{V}(K_2)} \cdot \mathrm{V}(K_2)$$



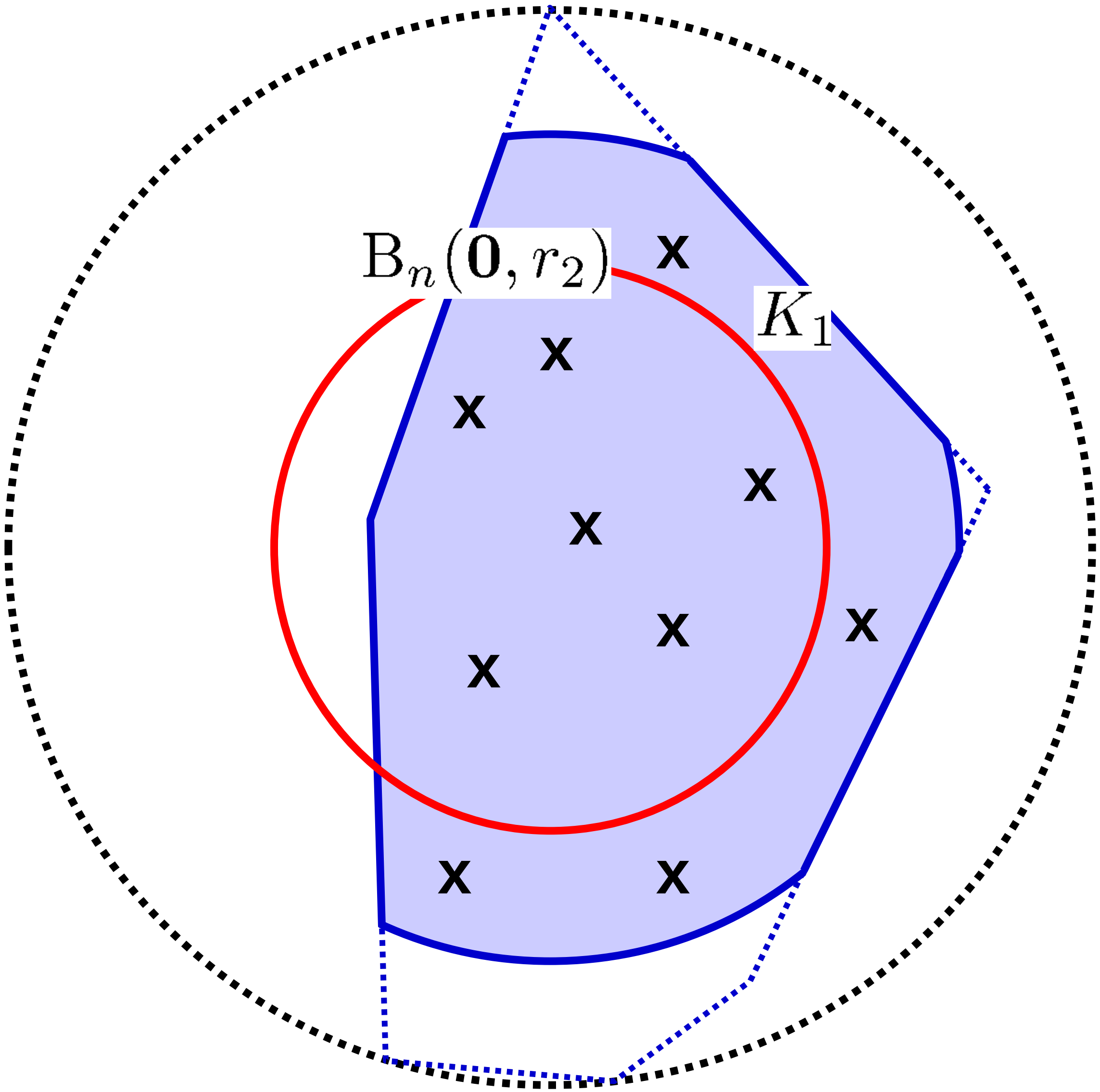
再帰のアイデア

K₁: n次元凸体
体積V(K₁)を計算

$$K_2 \stackrel{\text{def.}}{=} K \cap \mathrm{B}_n(\mathbf{0}, r_2)$$

$$\mathrm{V}(K_1) = \frac{\mathrm{V}(K_1)}{\mathrm{V}(K_2)} \cdot \mathrm{V}(K_2)$$

モンテカルロ法で計算



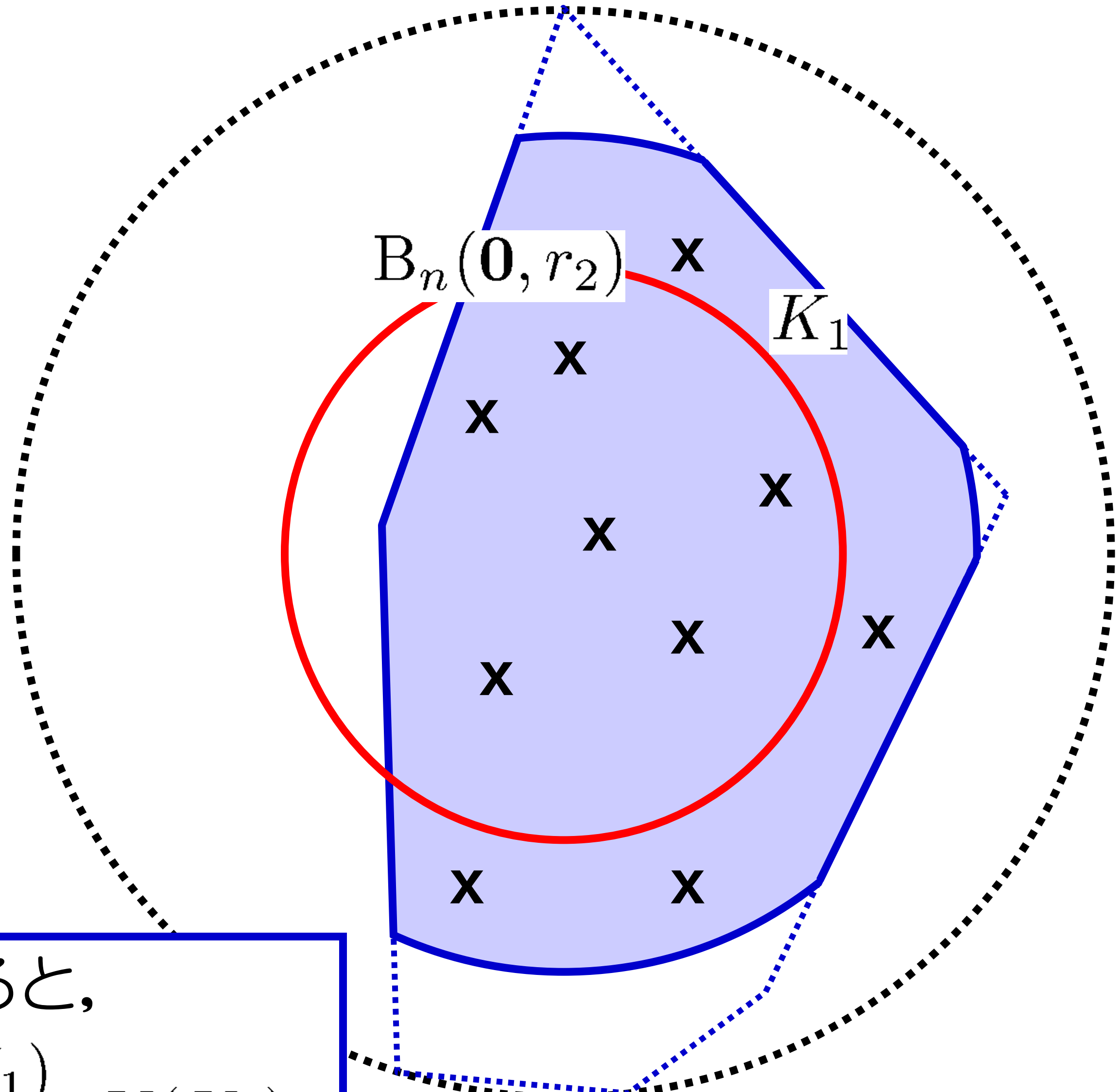
再帰のアイデア

K_1: n次元凸体
体積$V(K_1)$を計算

$$K_2 \stackrel{\text{def.}}{=} K \cap \mathrm{B}_n(\mathbf{0}, r_2)$$

$$\mathrm{V}(K_1) = \frac{\mathrm{V}(K_1)}{\mathrm{V}(K_2)} \cdot \mathrm{V}(K_2)$$

モンテカルロ法で計算



先程の再帰式に代入すると,

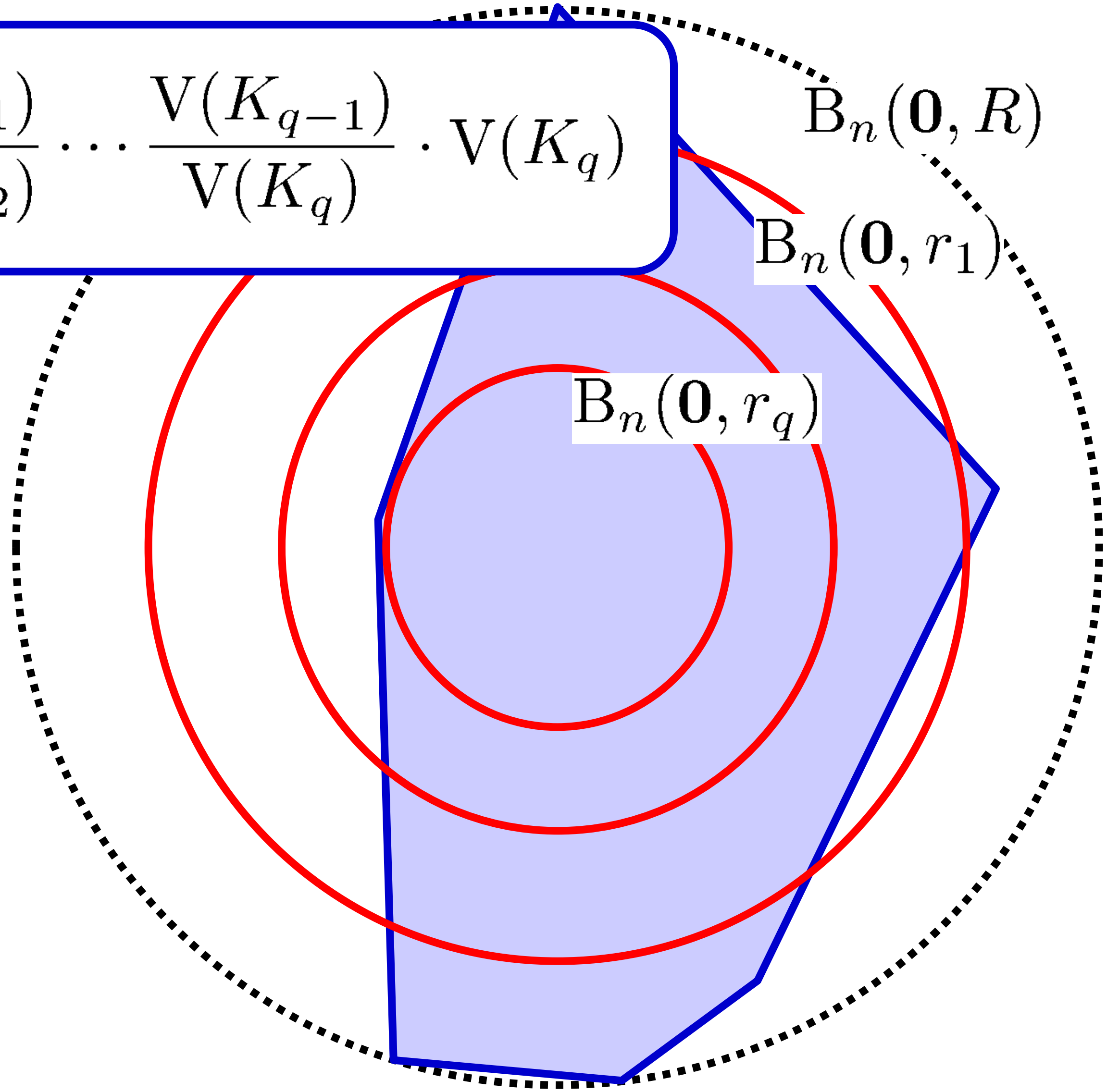
$$\mathrm{V}(K) = \frac{\mathrm{V}(K)}{\mathrm{V}(K_1)} \cdot \frac{\mathrm{V}(K_1)}{\mathrm{V}(K_2)} \cdot \mathrm{V}(K_2)$$

再帰式

$$K_i \overset{\text{def.}}{=} K \cap \mathrm{B}_n(\mathbf{0}, r_i)$$

$$\mathrm{V}(K) = \frac{\mathrm{V}(K)}{\mathrm{V}(K_1)} \cdot \frac{\mathrm{V}(K_1)}{\mathrm{V}(K_2)} \cdots \frac{\mathrm{V}(K_{q-1})}{\mathrm{V}(K_q)} \cdot \mathrm{V}(K_q)$$

(ただし， $r_q = 1$)



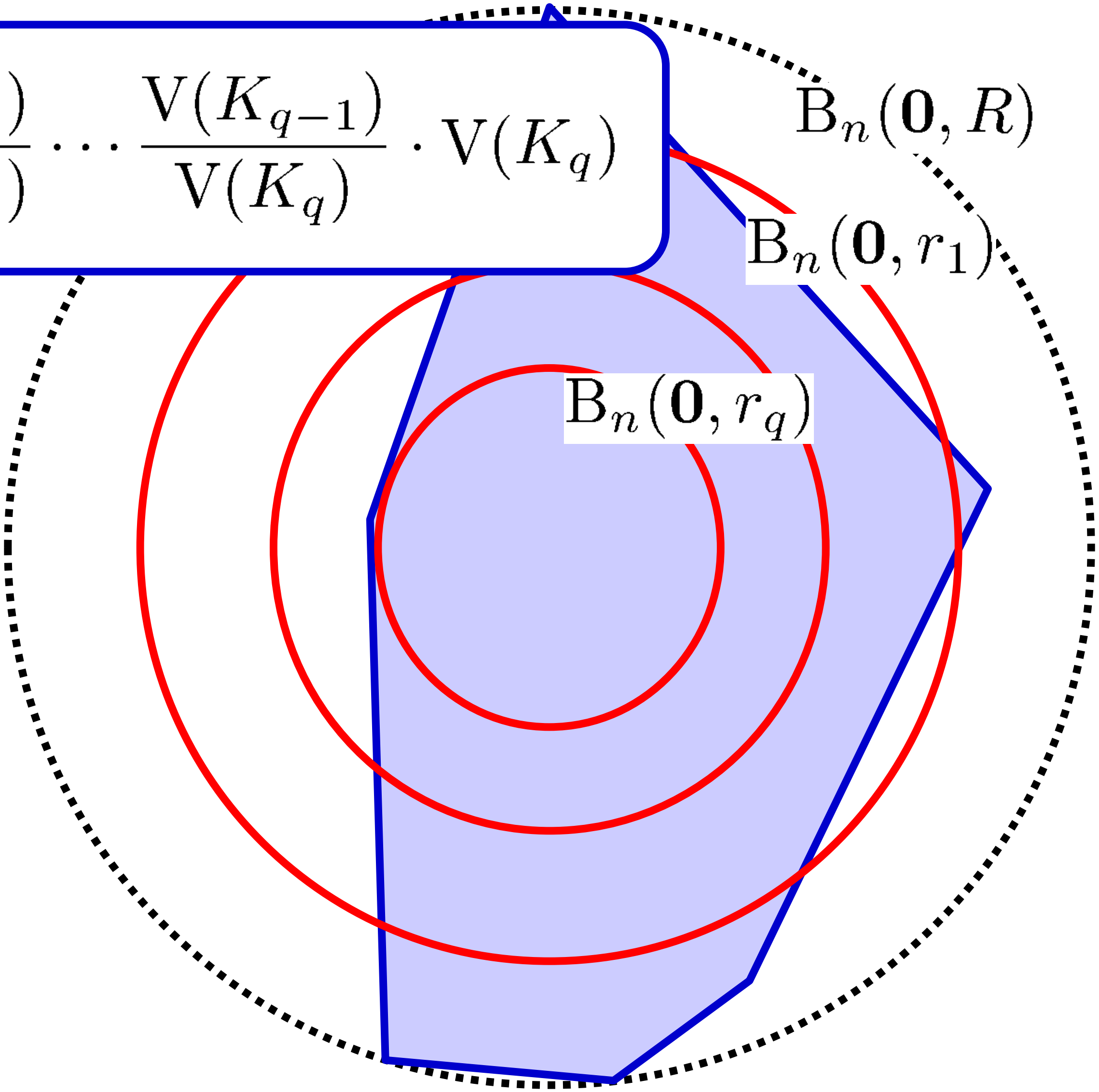
$$K_i \stackrel{\text{def.}}{=} K \cap \mathrm{B}_n(\mathbf{0}, r_i)$$

再帰式

$$\mathrm{V}(K) = \frac{\mathrm{V}(K)}{\mathrm{V}(K_1)} \cdot \frac{\mathrm{V}(K_1)}{\mathrm{V}(K_2)} \cdots \frac{\mathrm{V}(K_{q-1})}{\mathrm{V}(K_q)} \cdot \mathrm{V}(K_q)$$

(ただし，$r_q = 1$)

$$\begin{aligned} K_q &= \mathrm{B}_n(\mathbf{0}, r_q) \\ &= \mathrm{B}_n(\mathbf{0}, 1) \end{aligned}$$



$$K_i \stackrel{\text{def.}}{=} K \cap \mathrm{B}_n(\mathbf{0}, r_i)$$

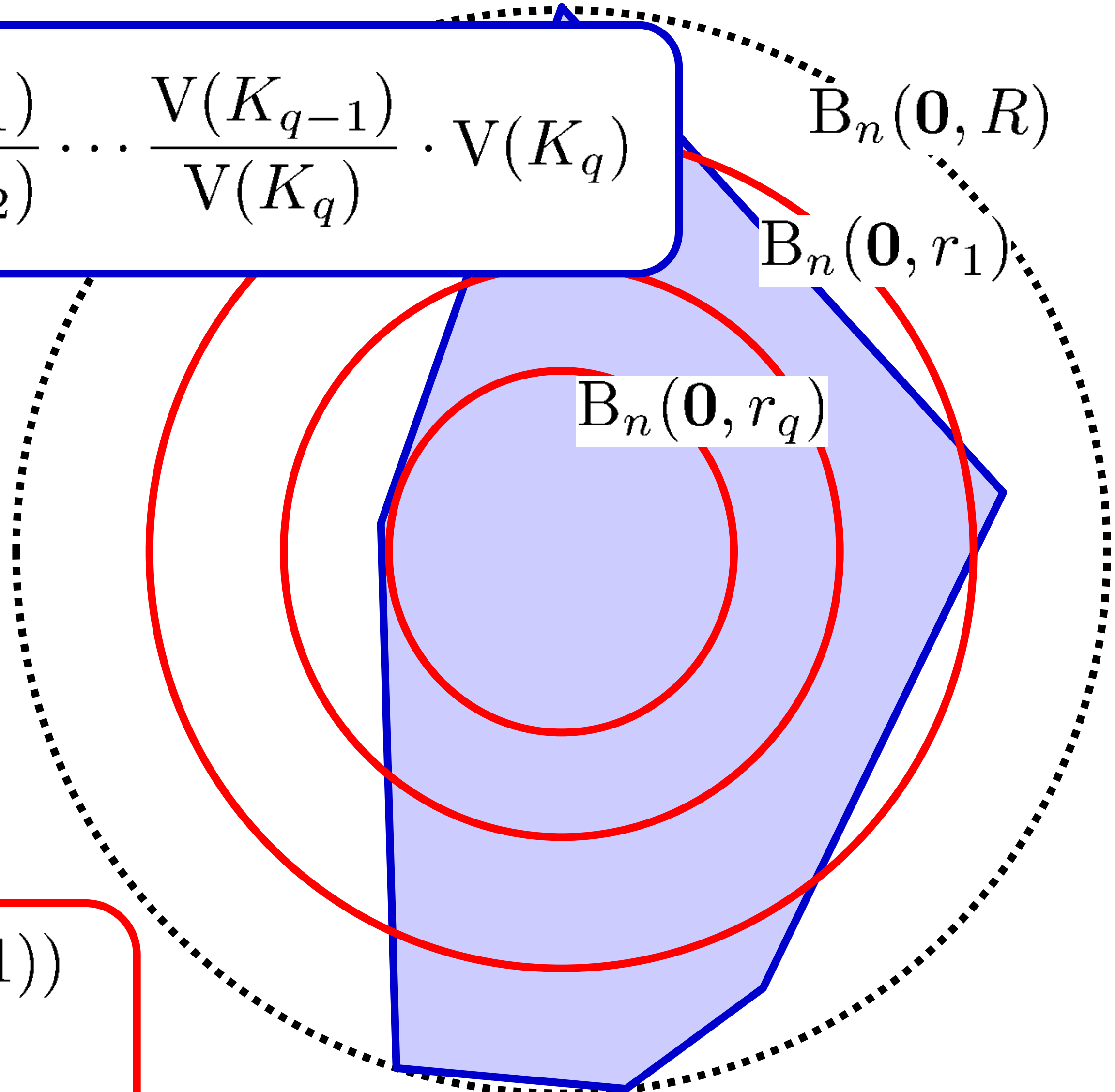
再帰式

$$\mathrm{V}(K) = \frac{\mathrm{V}(K)}{\mathrm{V}(K_1)} \cdot \frac{\mathrm{V}(K_1)}{\mathrm{V}(K_2)} \cdots \frac{\mathrm{V}(K_{q-1})}{\mathrm{V}(K_q)} \cdot \mathrm{V}(K_q)$$

(ただし, $r_q = 1$)

$$\begin{aligned} K_q &= \mathrm{B}_n(\mathbf{0}, r_q) \\ &= \mathrm{B}_n(\mathbf{0}, 1) \end{aligned}$$

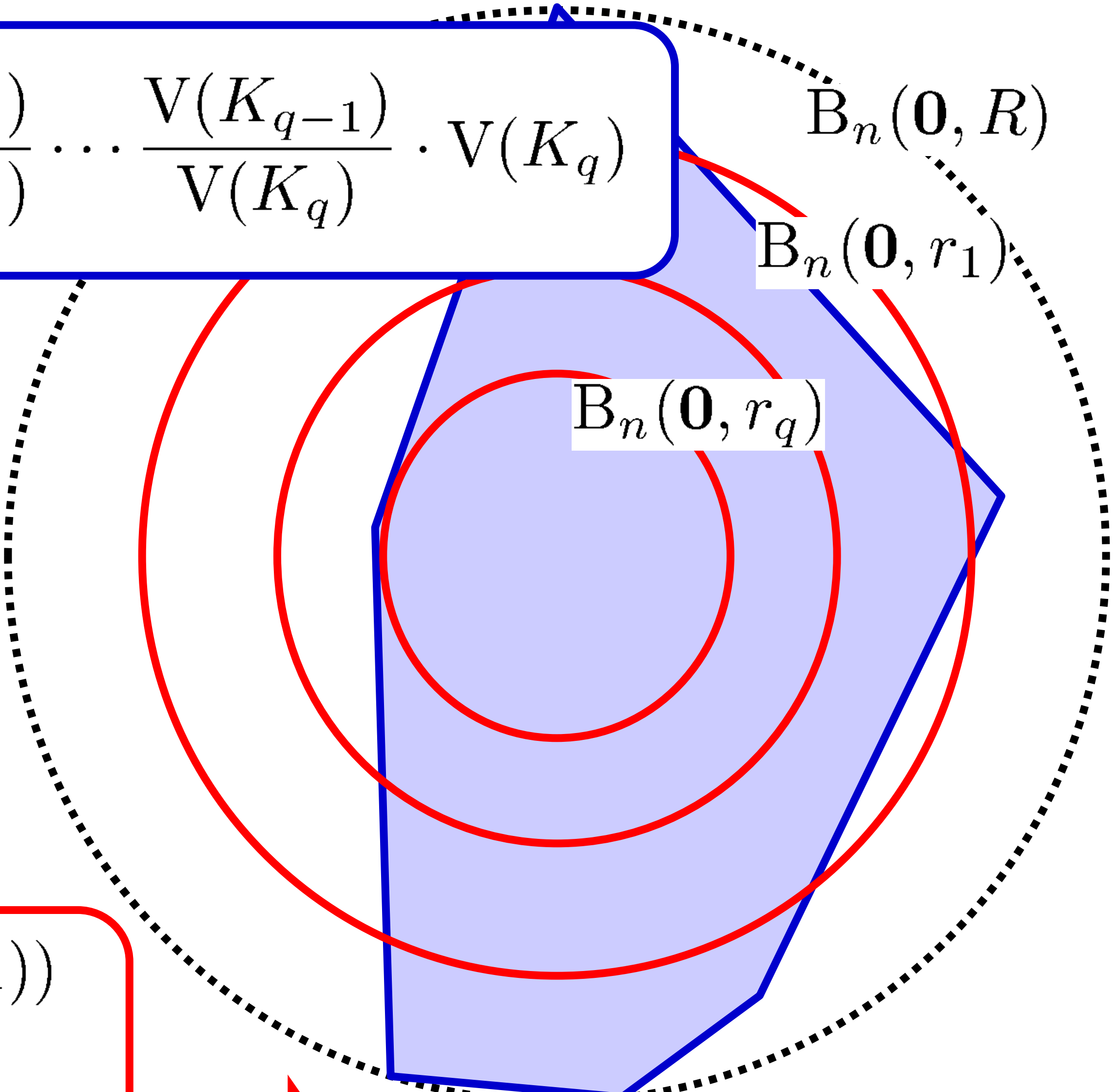
$$\begin{aligned} \mathrm{V}(K_q) &= \mathrm{V}(\mathrm{B}_n(\mathbf{0}, 1)) \\ &= \frac{\pi^{\frac{n}{2}}}{\Gamma(\frac{n}{2}+1)} \end{aligned}$$



再帰式

$$K_i \overset{\text{def.}}{=} K \cap \mathrm{B}_n(\mathbf{0}, r_i)$$

$$\mathrm{V}(K) = \frac{\mathrm{V}(K)}{\mathrm{V}(K_1)} \cdot \frac{\mathrm{V}(K_1)}{\mathrm{V}(K_2)} \cdots \frac{\mathrm{V}(K_{q-1})}{\mathrm{V}(K_q)} \cdot \mathrm{V}(K_q)$$



(ただし，$r_q = 1$)

$$\begin{aligned} K_q &= \mathrm{B}_n(\mathbf{0}, r_q) \\ &= \mathrm{B}_n(\mathbf{0}, 1) \end{aligned}$$

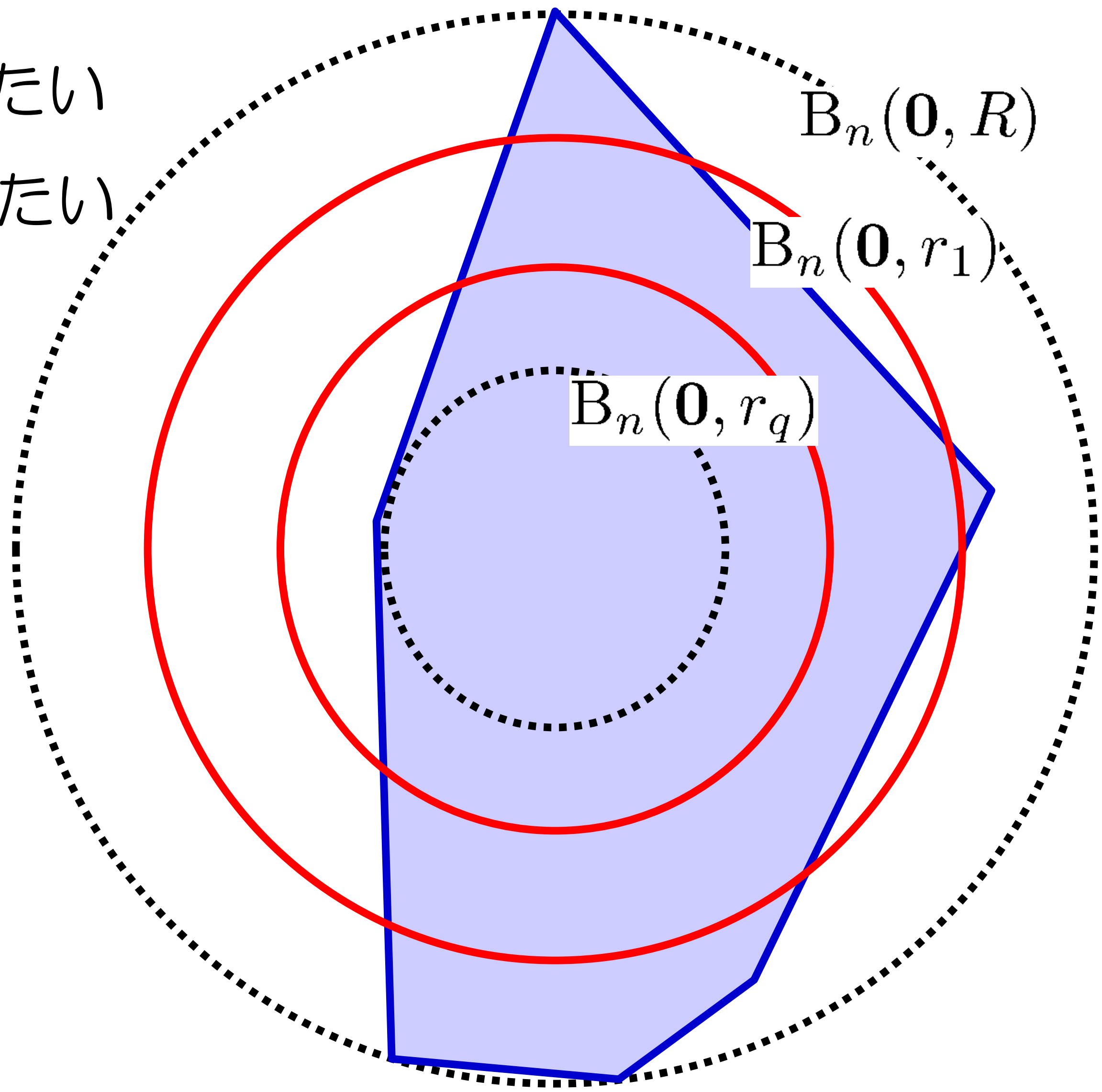
$$\begin{aligned} \mathrm{V}(K_q) &= \mathrm{V}(\mathrm{B}_n(\mathbf{0}, 1)) \\ &= \frac{\pi^{\frac{n}{2}}}{\Gamma(\frac{n}{2}+1)} \end{aligned}$$

$\mathrm{V}(K)$ が求まる！

再帰の回数

再帰の回数 => 少なくしたい

比 => 大きくしたい



再帰の回数

再帰の回数 => 少なくしたい

比 => 大きくしたい

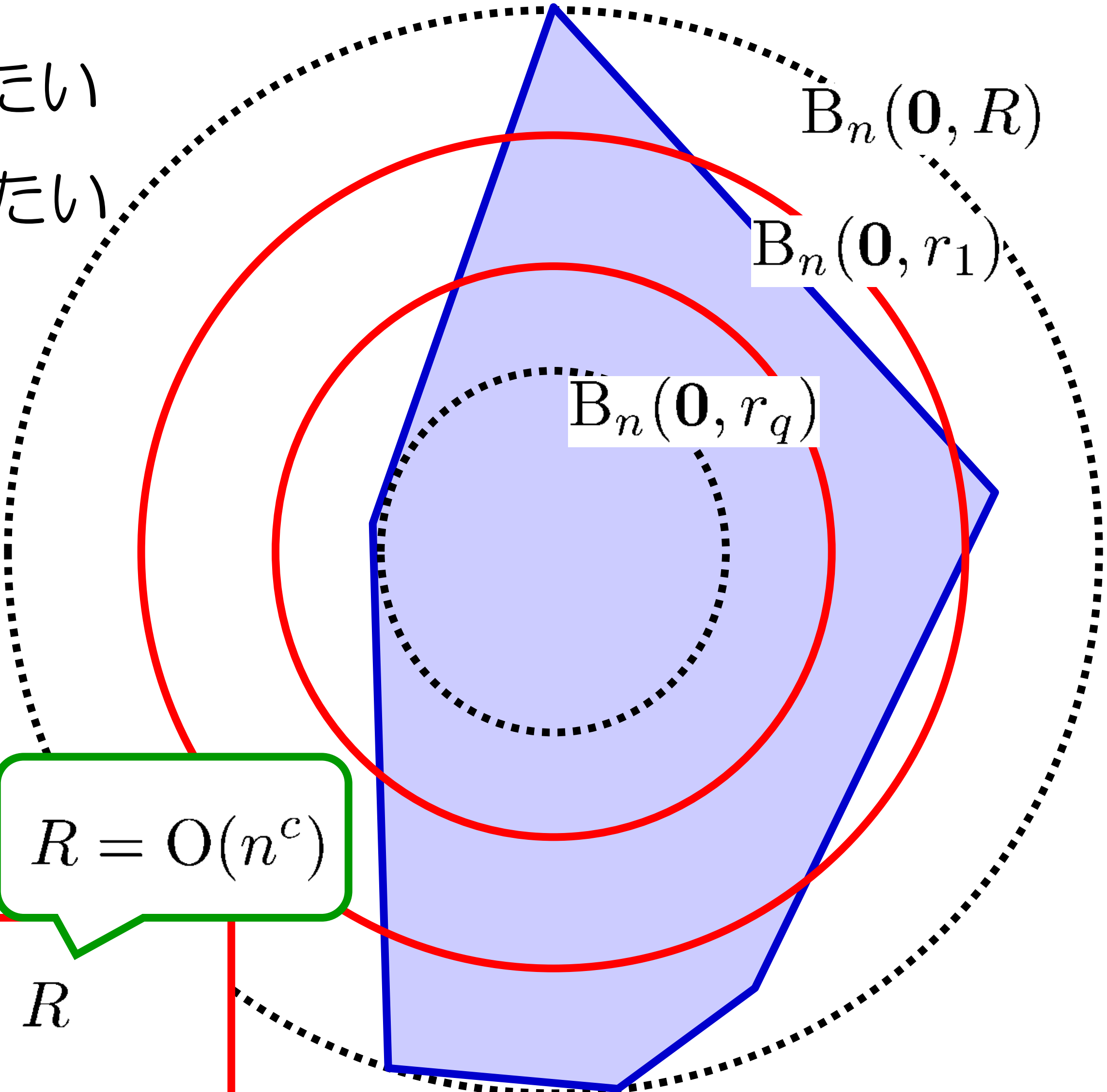
$$\frac{r_i}{r_{i-1}} = \frac{1}{\sqrt[n]{2}}$$

比

$$\frac{V(K_i)}{V(K_{i-1})} \geq \frac{1}{2}$$

$$R = \mathrm{O}(n^c)$$

$$(\text{再帰の回数}) = \log_{2^{\frac{1}{n}}} R = c \cdot n \log_2 n$$



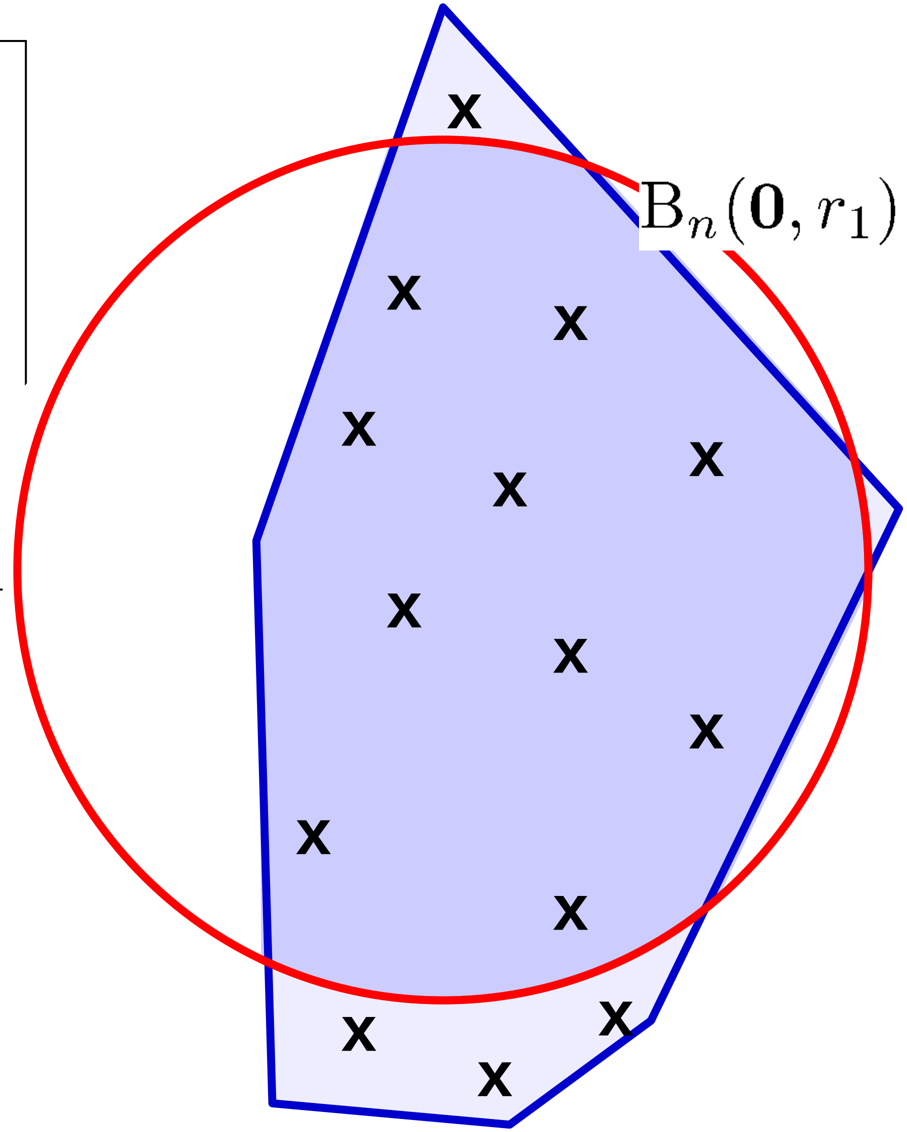
理論的な近似精度保証に向けて

真の比 $\rho_1 = \frac{V(K_1)}{V(K)}$ (unknown).

M個の一様サンプルのうち,

X_1個が$\mathrm{B}_n(\mathbf{0}, r_1)$内に落ちた.

誤差 $\left|\frac{X_1}{M} - \rho_1\right|$はどのくらい?



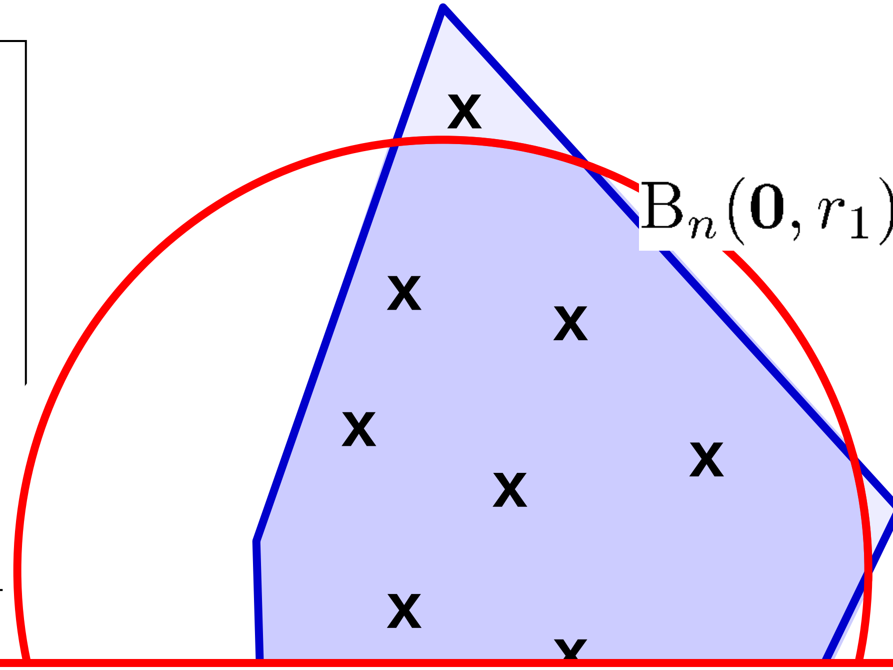
理論的な近似精度保証に向けて

真の比 $\rho_1 = \frac{V(K_1)}{V(K)}$ (unknown).

M個の一様サンプルのうち,

X_1個が$\mathrm{B}_n(\mathbf{0}, r_1)$内に落ちた.

誤差 $\left|\frac{X_1}{M} - \rho_1\right|$はどのくらい?



定理

K_i $(i = 1,2, \dots, R)$ の一様サンプリング・オラクルを用いると,

任意の ε $(0 < \varepsilon \leq 0.5)$, δ $(0 < \delta < 1)$に対して, $\mathrm{poly}(n, \varepsilon^{-1}, \log \delta^{-1})$時間で

$$\Pr\left[(1-\varepsilon) \cdot V(K) \leq V(K_q) \prod_{i=1}^{R} \frac{M}{X_i} \leq (1+\varepsilon) \cdot V(K)\right] \geq 1 - \delta$$

が成り立つ.

Chernoff bound

同一分布でなくて良い.

定理 [Chernoff]

$X_1, X_2, \ldots, X_n$は相互に独立な {0,1}確率変数とし,

$X := X_1 + \cdots + X_n$の期待値をμとすると,

$$\Pr[X \geq (1+\varepsilon)\mu] < \left(\frac{\mathrm{e}^{\varepsilon}}{(1+\varepsilon)^{(1+\varepsilon)}}\right)^{\mu}$$

$$\Pr[X \leq (1-\varepsilon)\mu] < \left(\frac{\mathrm{e}^{\varepsilon}}{(1-\varepsilon)^{(1-\varepsilon)}}\right)^{\mu}$$

系

$0 < \varepsilon \leq 1$ の場合,

$$\Pr[X \geq (1+\varepsilon)\mu] \leq \exp\left(-\frac{\varepsilon^2\mu}{3}\right)$$

$$\Pr[X \leq (1-\varepsilon)\mu] \leq \exp\left(-\frac{\varepsilon^2\mu}{2}\right)$$

証明の方針(パラメータ調整前)

サンプルサイズMを十分大きな値にしておけば，Chernoff boundより，

$$\Pr[X_1 \geq (1+\varepsilon)M\rho_1] \leq \exp\left(-\frac{\varepsilon^2 M\rho_1}{3}\right) \leq \delta$$

$$\Pr[X_1 \leq (1-\varepsilon)M\rho_1] \leq \exp\left(-\frac{\varepsilon^2 M\rho_1}{2}\right) \leq \delta$$

つまり $\Pr\left[(1-\varepsilon)\rho_1 \leq \frac{X_1}{M} \leq (1+\varepsilon)\rho_1\right] \geq 1 - 2\exp\left(-\frac{\varepsilon^2 M\rho_1}{3}\right)$

証明の方針(パラメータ調整前)

サンプルサイズMを十分大きな値にしておけば，Chernoff boundより，

$$\Pr[X_1 \geq (1+\varepsilon)M\rho_1] \leq \exp\left(-\frac{\varepsilon^2 M\rho_1}{3}\right) \leq \delta$$

$$\Pr[X_1 \leq (1-\varepsilon)M\rho_1] \leq \exp\left(-\frac{\varepsilon^2 M\rho_1}{2}\right) \leq \delta$$

δは小さくする必要がある．

[Union bound]

すべてのiに対して$(1-\varepsilon)\rho_i \leq \frac{X_i}{M} \leq (1+\varepsilon)\rho_i$となる

確率は$1-2\delta$以上．つまり

$$\Pr\left[(1-\varepsilon)^R \prod_{i=1}^{R} \rho_i \leq \prod_{i=1}^{R} \frac{X_i}{M} \leq (1+\varepsilon)^R \prod_{i=1}^{R} \rho_i\right] \geq 1-2R\delta$$

Recall

$$V(K_q)\prod_{i=1}^{n}\frac{1}{\rho_i} = V(K)$$

すなわち，

$$\Pr\left[\frac{V(K_q)}{(1-\varepsilon)^R}\prod_{i=1}^{R}\frac{1}{\rho_i} \geq V(K_q)\prod_{i=1}^{R}\frac{X_i}{M} \geq \frac{V(K_q)}{(1+\varepsilon)^R}\prod_{i=1}^{R}\frac{1}{\rho_i}\right] \geq 1-2R\delta$$

証明の方針(パラメータ調整前)

(承前)

$$\Pr\left[\frac{V(K_q)}{(1-\varepsilon)^R}\prod_{i=1}^{R}\frac{1}{\rho_i} \geq V(K_q)\prod_{i=1}^{R}\frac{M}{X_i} \geq \frac{V(K_q)}{(1+\varepsilon)^R}\prod_{i=1}^{R}\frac{1}{\rho_i}\right] \geq 1-2R\delta$$

$$\Pr\left[\frac{V(K)}{(1-\varepsilon)^R} \geq V(K_q)\prod_{i=1}^{R}\frac{M}{X_i} \geq \frac{V(K)}{(1+\varepsilon)^R}\right] \geq 1-2R\delta$$

$$\frac{1}{(1-\varepsilon)^R} \simeq (1+\varepsilon)^R \simeq 1+R\varepsilon$$

正確には

$$\frac{1}{(1-\varepsilon)^R} \leq (1+2\varepsilon)^R \leq 1+4R\varepsilon$$

if $\varepsilon < \frac{1}{2}$

$$\frac{1}{(1+\varepsilon)^R} \simeq (1-\varepsilon)^R \simeq 1-R\varepsilon$$

正確には

$$\frac{1}{(1+\varepsilon)^R} \geq (1-\varepsilon)^R \geq 1-R\varepsilon$$

⇒ パラメータ設定(like ε-δ): $\varepsilon \to \frac{\varepsilon'}{4R}$, $\delta \to \frac{\delta'}{2R}$

証明の方針(パラメータ調整後)

サンプルサイズMを十分大きな値にしておけば，Chernoff boundより，

$$\Pr\left[X_1 \geq \left(1+\frac{\varepsilon'}{4R}\right)M\rho_1\right] \leq \exp\left(-\frac{\left(\frac{\varepsilon'}{4R}\right)^2 M\rho_1}{3}\right) \leq \frac{\delta'}{2R}$$

$$\Pr\left[X_1 \leq \left(1-\frac{\varepsilon'}{4R}\right)M\rho_1\right] \leq \exp\left(-\frac{\left(\frac{\varepsilon'}{4R}\right)^2 M\rho_1}{2}\right) \leq \frac{\delta'}{2R}$$

[Union bound]

$$\Pr\left[\left(1-\frac{\varepsilon'}{4R}\right)^R \prod_{i=1}^{R}\rho_i \leq \prod_{i=1}^{R}\frac{X_i}{M} \leq \left(1+\frac{\varepsilon'}{4R}\right)^R \prod_{i=1}^{R}\rho_i\right] \geq 1-2R\frac{\delta'}{2R} = 1-\delta'$$

すなわち，

$$\Pr\left[\frac{V(K_q)}{\left(1-\frac{\varepsilon'}{4R}\right)^R}\prod_{i=1}^{R}\frac{1}{\rho_i} \geq V(K_q)\prod_{i=1}^{R}\frac{X_i}{M} \geq \frac{V(K_q)}{\left(1+\frac{\varepsilon'}{4R}\right)^R}\prod_{i=1}^{R}\frac{1}{\rho_i}\right] \geq 1-\delta'$$

証明の方針(パラメータ調整後)

サンプルサイズ$M = 3\left(\frac{4R}{\varepsilon'}\right)^2 \ln\left(\frac{2R}{\delta'}\right)$とすると，Chernoff boundより，

$$\Pr\left[X_1 \geq \left(1+\frac{\varepsilon'}{4R}\right)M\rho_1\right] \leq \exp\left(-\frac{\left(\frac{\varepsilon'}{4R}\right)^2 M\rho_1}{3}\right) \leq \frac{\delta'}{2R}$$

$$\Pr\left[X_1 \leq \left(1-\frac{\varepsilon'}{4R}\right)M\rho_1\right] \leq \exp\left(-\frac{\left(\frac{\varepsilon'}{4R}\right)^2 M\rho_1}{2}\right) \leq \frac{\delta'}{2R}$$

[Union bound]

$$\Pr\left[\left(1-\frac{\varepsilon'}{4R}\right)^R \prod_{i=1}^{R}\rho_i \leq \prod_{i=1}^{R}\frac{X_i}{M} \leq \left(1+\frac{\varepsilon'}{4R}\right)^R \prod_{i=1}^{R}\rho_i\right] \geq 1-2R\frac{\delta'}{2R} = 1-\delta'$$

すなわち，

$$\Pr\left[\frac{V(K_q)}{\left(1-\frac{\varepsilon'}{4R}\right)^R}\prod_{i=1}^{R}\frac{1}{\rho_i} \geq V(K_q)\prod_{i=1}^{R}\frac{X_i}{M} \geq \frac{V(K_q)}{\left(1+\frac{\varepsilon'}{4R}\right)^R}\prod_{i=1}^{R}\frac{1}{\rho_i}\right] \geq 1-\delta'$$

証明の方針(パラメータ調整後)

(承前)

$$\Pr\left[\frac{V(K_q)}{\left(1-\frac{\varepsilon'}{4R}\right)^R}\prod_{i=1}^{R}\frac{1}{\rho_i} \geq V(K_q)\prod_{i=1}^{R}\frac{M}{X_i} \geq \frac{V(K_q)}{\left(1+\frac{\varepsilon'}{4R}\right)^R}\prod_{i=1}^{R}\frac{1}{\rho_i}\right] \geq 1-\delta'$$

$$\Pr\left[\frac{V(K)}{\left(1-\frac{\varepsilon'}{4R}\right)^R} \geq V(K_q)\prod_{i=1}^{R}\frac{M}{X_i} \geq \frac{V(K)}{\left(1+\frac{\varepsilon'}{4R}\right)^R}\right] \geq 1-\delta'$$

$$\frac{1}{\left(1-\frac{\varepsilon'}{4R}\right)^R} \leq \left(1+2\frac{\varepsilon'}{4R}\right)^R \leq 1+4R\frac{\varepsilon'}{4R} = 1+\varepsilon'$$

$$\frac{1}{\left(1+\frac{\varepsilon'}{4R}\right)^R} \geq \left(1-\frac{\varepsilon'}{4R}\right)^R \geq 1-R\frac{\varepsilon'}{4R} \geq 1-\varepsilon'$$

$$\Pr\left[(1+\varepsilon')\cdot V(K) \geq V(K_q)\prod_{i=1}^{R}\frac{M}{X_i} \geq (1-\varepsilon')\cdot V(K)\right] \geq 1-\delta'$$

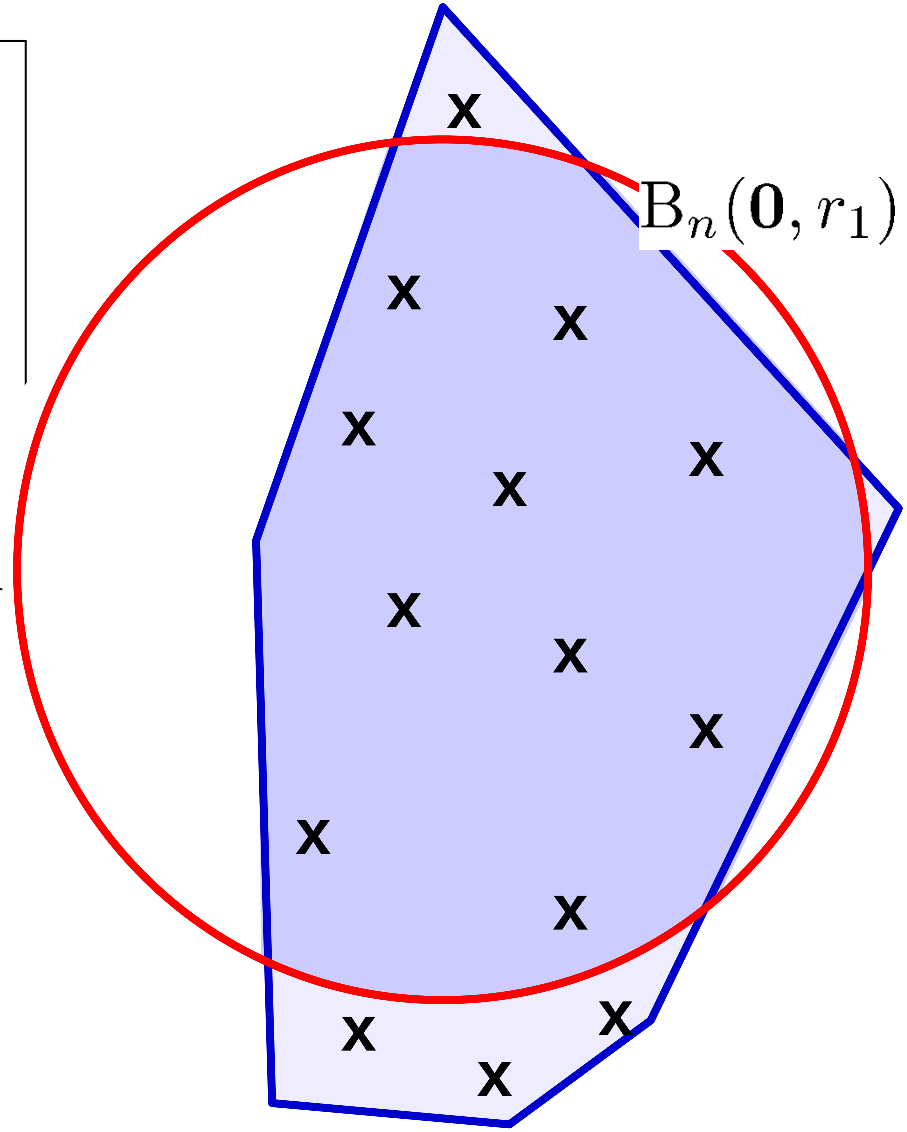
理論的な近似精度保証に向けて

真の比 $\rho_1 = \frac{V(K_1)}{V(K)}$ (unknown).

M個の一様サンプルのうち,

X_1個が$\mathrm{B}_n(\mathbf{0}, r_1)$内に落ちた.

誤差 $\left|\frac{X_1}{M} - \rho_1\right|$はどのくらい？



理論的な近似精度保証に向けて

真の比 $\rho_1 = \frac{V(K_1)}{V(K)}$ (unknown).

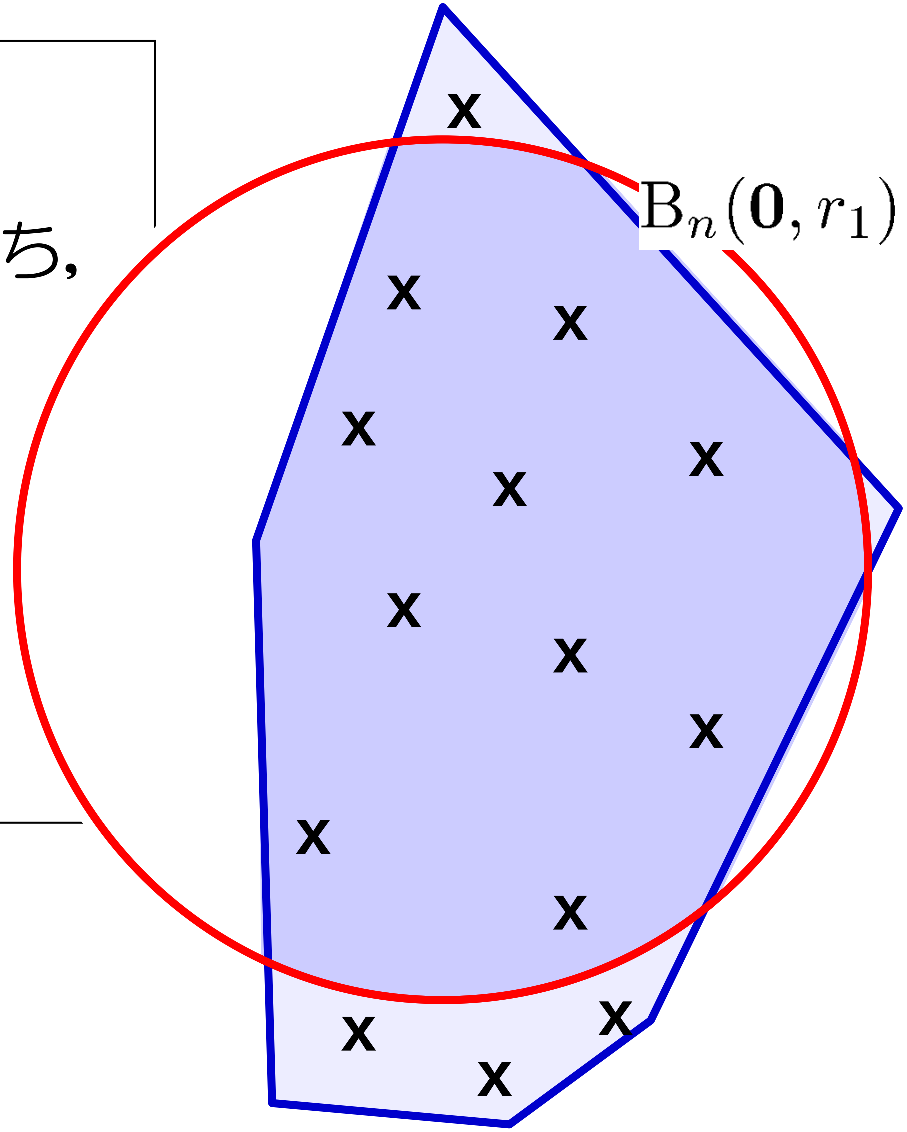
M個の近似一様サンプルのうち,

X_1個が$\mathrm{B}_n(\mathbf{0}, r_1)$内に落ちた.

誤差 $\left|\frac{X_1}{M} - \rho_1\right|$はどのくらい?

ただし$|\rho_1 - \widehat{\rho_1}|$は

かなり小さくできると仮定.



Chernoff bound

同一分布でなくて良い.

定理 [Chernoff]

$X_1, X_2, \ldots, X_n$は相互に独立な{0,1}確率変数とし,
$X \coloneqq X_1 + \cdots + X_n$の期待値を$\mu$とすると,

$$\Pr[X \geq (1+\varepsilon)\mu] < \left(\frac{\mathrm{e}^{\varepsilon}}{(1+\varepsilon)^{(1+\varepsilon)}}\right)^{\mu}$$

$$\Pr[X \leq (1-\varepsilon)\mu] < \left(\frac{\mathrm{e}^{\varepsilon}}{(1-\varepsilon)^{(1-\varepsilon)}}\right)^{\mu}$$

系

$0 < \varepsilon \leq 1$ の場合,

$$\Pr[X \geq (1+\varepsilon)\mu] \leq \exp\left(-\frac{\varepsilon^2\mu}{3}\right)$$

$$\Pr[X \leq (1-\varepsilon)\mu] \leq \exp\left(-\frac{\varepsilon^2\mu}{2}\right)$$

証明の方針(パラメータ調整前)

サンプルサイズMを十分大きな値にしておけば，Chernoff boundより，

$$\Pr[X_1 \geq (1+\varepsilon)M\widehat{\rho_1}] \leq \exp\left(-\frac{\varepsilon^2 M\widehat{\rho_1}}{2}\right) \leq \delta$$

$$\Pr[X_1 \leq (1-\varepsilon)M\widehat{\rho_1}] \leq \exp\left(-\frac{\varepsilon^2 M\widehat{\rho_1}}{2}\right) \leq \delta$$

つまり $\Pr\left[(1-\varepsilon)\widehat{\rho_1} \leq \frac{X_1}{M} \leq (1+\varepsilon)\widehat{\rho_1}\right] \geq 1 - 2\exp\left(-\frac{\varepsilon^2 M\widehat{\rho_1}}{3}\right)$

<u>Remark</u>

$|\rho_1 - \widehat{\rho_1}| \leq \gamma \ll 1$とすると，$\rho_1 \geq \frac{1}{2}$の仮定の下

$$\widehat{\rho_1} \geq \rho_1 - \gamma \geq (1-2\gamma)\rho_1$$

これを代入すると，

$$\Pr[X_1 \geq (1+\varepsilon)(1-2\gamma)M\rho_1] \leq \exp\left(-\frac{\varepsilon^2 M(\rho_1-\gamma)}{3}\right) \leq \delta$$

$$\Pr[X_1 \leq (1-\varepsilon)(1+2\gamma)M\rho_1] \leq \exp\left(-\frac{\varepsilon^2 M(\rho_1-\gamma)}{3}\right) \leq \delta$$

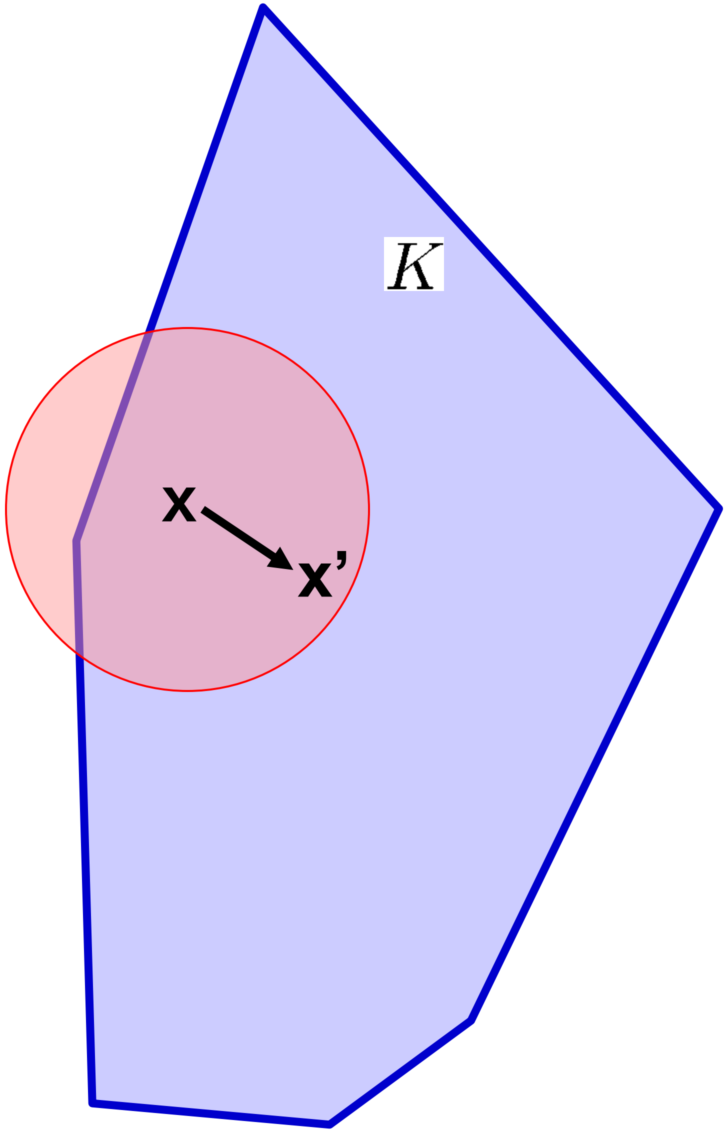
以下、パラメータ調整(略)

理論的な近似精度保証に向けて

Ball-walk

=> 定常分布は一様

十分な回数の推移は何回？



理論的な近似精度保証に向けて

Ball-walk

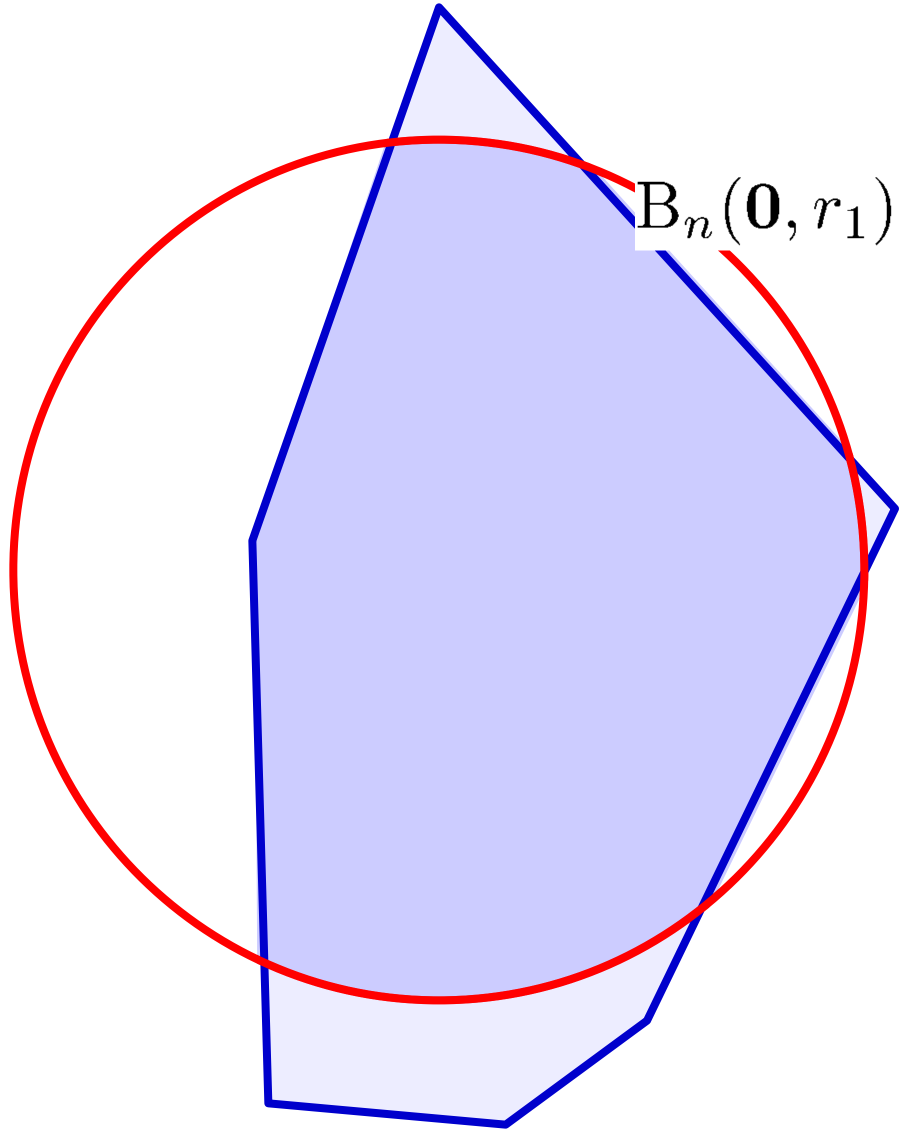
=> 定常分布は一様

十分な回数の推移は何回？

モンテカルロ法

- 真の比 ρ
- 近似比 $\hat{\rho}$ (分布の誤差に起因)

$|\hat{\rho} - \rho| < \gamma$



理論的な近似精度保証に向けて

Ball-walk

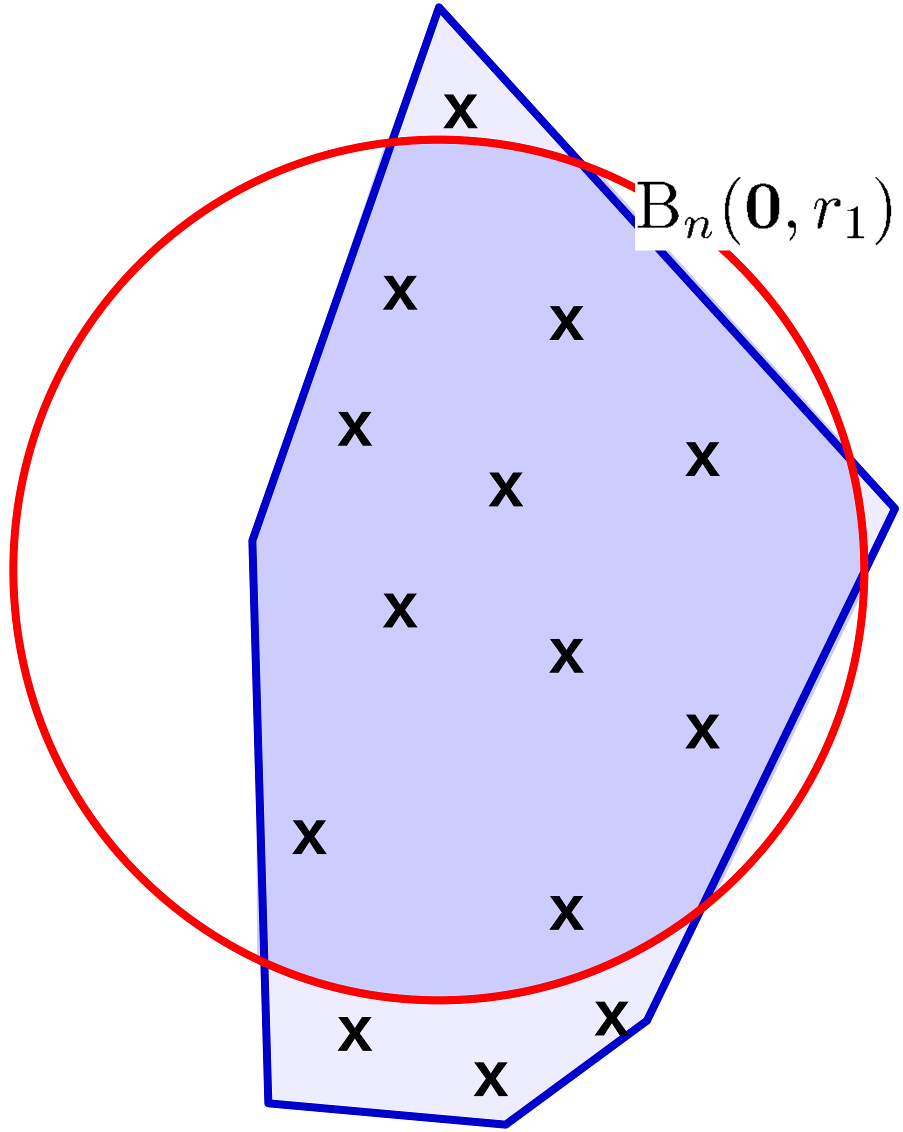
=> 定常分布は一様

十分な回数の推移は何回？

モンテカルロ法

- 真の比 ρ
- 近似比 $\hat{\rho}$ (分布の誤差に起因)

$|\hat{\rho} - \rho| < \gamma$



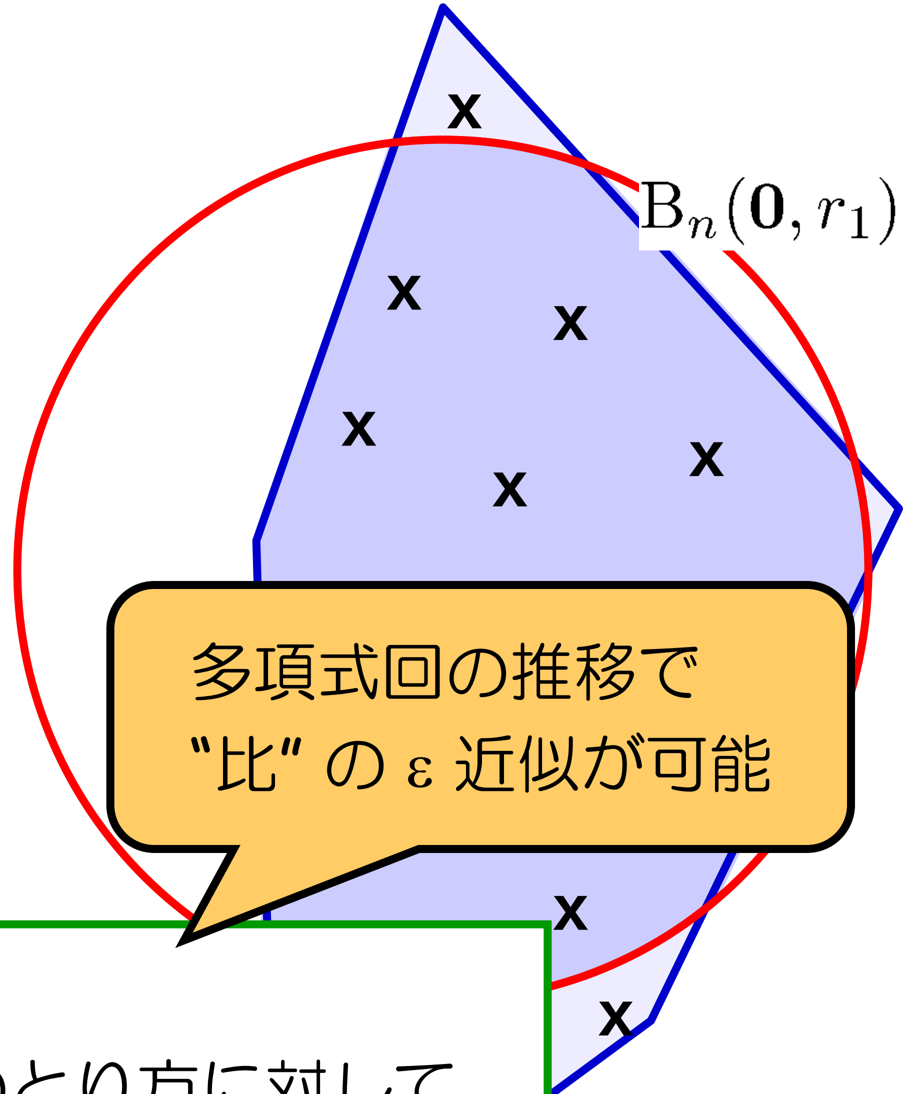
[Kannan, Lovasz, Simonovitz 1993]

理論的な近似精度保証に向けて

Ball-walk

=> 定常分布は一様

十分な回数の推移は何回？



多項式回の推移で
“比” の ε 近似が可能

モンテカルロ法

- 真の比 ρ
- 近似比 $\hat{\rho}$ (分布の誤差に起因)

$|\hat{\rho} - \rho| < \gamma$

mixing time:

誤差が最大となる部分集合のとり方に対して,

誤差 γ が保証される推移の回数.

2章のまとめ

効率的な再帰的モンテカルロ法を設計するには？

1. 帰着先の割合が大きい
2. 再帰の回数が小さい
3. 帰着先のランダムサンプリングが容易

The end

Thank you for the attention.