数理解析研究所講究録
1032 巻 1998 年 152-156

Random Walk の Rare Events と Importance Sampling

志村 道夫
東邦大学 理学部

1 はじめに

注目している”希薄事象”(rare event) の小さな確率を Monte Carlo 法で数値解析するとき, 小さな確率に起因するデータ中の揺らぎの相対的上昇により能率の低下をきたすことは良く知られている. Importance Sampling とは, モデルの確率分布を, 取り扱いやすい分布族のなかで希薄事象に最もフィットした台をもつものに取り替えて Monte Carlo 法を実行することで能率の低下を押さえる技法といえよう.(Hammersley et al [3]) 本報告ではランダムウォークの Importance Sampling の事例としてまず Sample Mean Deviation について簡単に述べる. 次いで報告の主目的である”2 次元ランダムウォークの象限からの脱出確率の Importance Sampling” について, 問題の定式化と主たる結果を示す.(Shimura [5], [6])

2 Importance Sampling-Sample Mean の場合

本節では Bucklew et al [1] からその一部を紹介する. $X_0=0, X_1, X_2, \ldots$ を, 定常かつ独立な増分をもつ 1 次元ランダムウォークとする. $F(\cdot)$ でランダムウォークの増分 $X_j - X_{j-1}, (j \geq 1)$ の分布を表す. (以下特に言及しない場合確率空間は $(\Omega, \mathcal{F}, P)$ とする.) まず次の仮定を設ける.

仮定 2.1 $\lambda(\theta) := E(e^{\theta X_1}) < \infty$ *for all* $\theta \in \boldsymbol{R}$.

$$\Lambda(\theta) := \log \lambda(\theta),\ I(t) := \sup_{\theta \in R}(t\theta - \Lambda(\theta)) \tag{2.1}$$

とおく. Large Deviation Theory(例えば,Dembo et al [2] 参照) によれば次のことがいえる.
(*i*) $I(\cdot)$ は $\boldsymbol{R}$ 上ので非負の値をとる凸関数で, $\mu = E(X_1)$ で最小値 0 をとる.
(*ii*) J が μ を含まない区間, 例えば, $J=(a,\infty)$, $\mu < a < \infty$ のと,

$$(1/n)\log P((1/n)X_n > a) \to -I(a)\ (n \to \infty) \tag{2.2}$$

が成立する. これは $n \to \infty$ で 0 へ収束する $P((1/n)X_n > a)$ の主要項が $\exp\{-I(a)n\}$ であることを示している.

問題 2.1 $a > \mu, n \gg 1$ とする. $p_n := P((1/n)X_n > a)$ の値を *Monte Carlo* 法で求めたい. $p_n \approx 0$ なので通常のものは有効でない. この場合の *Impotance Sampling* はどのように与えたらよいか.

$\mathcal{G}$ で $\boldsymbol{R}$ 上の確率分布 $G(\cdot)$ で, $dG \gg dF$ を満たすものの集合とする. このとき密度関数を $f_G := dF/dG$ とおく. $G \in \mathcal{G}$ を任意に固定する. 確率を P から Q に取り替えた確率空間 $(\Omega, \mathcal{F}, Q)$ の上で, ランダムウォーク $X_0=0, X_1, X_2, \ldots,$ は増分の分布 G を持つものとする. 次の補題は定義から明らかである.

補題 2.1 (*i*) $\eta_n(G) := 1((1/n)X_n > a)\Pi_1^n f_G(X_j - X_{j-1})$ は確率Qに関するp_nの不偏推定量である, 即ち,$p_n = E^Q(\eta_n(G))$ が成立する. ここでE^Qは確率Qに関する期待値を表す.
(*ii*) 不偏推定量の2次モーメント $s_n(G) := E^Q(\eta_n(G)^2)$ に対して

$$\liminf_{n\to\infty}(1/n)\log s_n(G) \geq -2I(a) \tag{2.3}$$

が成立する.

$\eta_n(G)$の確率Qに関する分散が $s_n(G) - p_n^2$ で与えられることに注意する. 問題2.1の解を与える分布はこの分散を(漸近的に)最小化するものである.

定義 2.1 問題2.1において,$\mathcal{G} \ni G$(あるいは対応する*Random Walk*の確率Q)が *aymptotically efficient simulation distribution* とは(2.3)において等号が成り立つものをいう.

定理 2.1 (Bucklew et al [1]) αを方程式 $\Lambda'(\theta) = a$の唯一つの解とする. すると

$$G(dy) = \exp(\alpha y - \Lambda(\alpha))F(dy) \tag{2.4}$$

が問題2.1の唯一つの *asymptotically efficient simulation distribution*を与える.

注意 2.1 (2.4)の分布Gの期待値はaに等しい.

3 Importance Sampling - Exit Problem for Two-dimensional Random Walk from the Quadrant の場合

まず各増分の期待値μが負である1次元ランダムウォークを考える. $q_a := P(\sup_{n\geq 0}X_n \geq a)$ $(a \geq 0)$ とおく. 大数の強法則より $X_n \sim \mu n$ *a.s.* $(n \to \infty)$ なので, $q_a \to 0$ $(a \to \infty)$ が成立する. Lehtonen et al [4]は,$a \gg 1$における小さい確率q_aのImportance samplingについて論じた.

本節では1節のSample Meanの定式化も考慮しながら,Lehtonen et al[4]の問題を,Shimura [5],[6]をもとに本節の表題のものに拡張する. $Z_0 = 0, Z_1 = (X_1, Y_1), Z_2 = (X_2, Y_2), \ldots$ を2次元整数格子$\boldsymbol{Z}^2$上のRandom Walkで次の仮定を満たすものとする.

仮定 3.1 任意の$\boldsymbol{\theta} = (\theta_1, \theta_2) \in \boldsymbol{R}^2$に対して,$\lambda(\boldsymbol{\theta}) := E(e^{\boldsymbol{\theta}\cdot Z_1}) < \infty$, かつ

$$\boldsymbol{\mu} = E(Z_1) \in D_1, \text{かつ } P(Z_1 \in D_4) > 0$$

を満たす. ここで$\boldsymbol{\theta}\cdot\boldsymbol{z}$は$\boldsymbol{R}^2$の通常の内積を表し,また$D_i$は$\boldsymbol{R}^2$の第$i$象限(開集合)を示す.

仮定 3.2 *Random Walk*のy-成分過程は左連続,即ち,$P(Y_1 \in \{-1, 0, 1, 2, \ldots\}) = 1$ が成立する.

aとbは正の整数. 但しaは以下では(任意に)固定しておくので,必要な場合を除き表示から省略する.

$$\tau_b := \inf\{n \geq 0 | Z_n \notin D_1 - (a,b)\} \ (\inf\emptyset = \infty) \tag{3.1}$$
$$r_b := P(\tau_b < \infty, Z_{\tau_b} \in \overline{D}_4 - (a,b)) \tag{3.2}$$

とする. 大数の強法則より $Z_n \sim \boldsymbol{\mu} n$ *a.s.* $(n \to \infty)$ なので,仮定3.1の第2条件より $r_b \to 0$ $(b \to \infty)$ が成立する.

問題 3.1 $b \gg 1$とする. r_b の値を*Monte Carlo*法で求めたい. $r_b \approx 0$ なので通常のものは有効でない. この場合の*Impotance Sampling*はどのように与えたらよいか.

モーメント母関数の等高線 $\Theta := \{\boldsymbol{\theta} \in \boldsymbol{R}^2 | \lambda(\boldsymbol{\theta}) = 1\}$ を考える. もとのRandom Walkの遷移確率 $F(dz) := P(Z_1 \in dz)$ を調和関数 $\exp(\boldsymbol{\theta} \cdot *)$ $(\boldsymbol{\theta} \in \Theta)$ で調和変換した分布を

$$F^{(\boldsymbol{\theta})}(dz) := \exp(\boldsymbol{\theta} \cdot z) F(dz) \tag{3.3}$$

とおく. また$P^{(\boldsymbol{\theta})}(d\omega))$を,$F^{(\boldsymbol{\theta})}(dz)$をone stepの遷移確率とするRandom Walkの確率とする. この確率の族$\Pi := \{P^{(\boldsymbol{\theta})} | \boldsymbol{\theta} \in \Theta\}$に注目する. 以下,仮定 $\boldsymbol{\theta} \in \Theta$ を省略する. 簡単な考察より次の期待値についての公式と補題が示される.

$$\boldsymbol{\mu}^{(\boldsymbol{\theta})} := E^{(\boldsymbol{\theta})}(Z_1) = \nabla\lambda(\boldsymbol{\theta}). \tag{3.4}$$

補題 3.1 次の2条件は同値である.
(i) $P^{(\boldsymbol{\theta})}(\tau_b < \infty) = 1.$ (ii) $\nabla\lambda(\boldsymbol{\theta}) \notin D_1$.

補題 3.2 $1(\tau_b < \infty, Z_{\tau_b} \in \overline{D}_4 - (a,b)) \exp(-\boldsymbol{\theta} \cdot Z_{\tau_b}))$ は確率 $P^{(\boldsymbol{\theta})}$ に関するr_bの不偏推定量である.

不偏推定量の2次モーメントを

$$s_b(\boldsymbol{\theta}) := E^{(\boldsymbol{\theta})}(1(\tau_b < \infty, Z_{\tau_b} \in \overline{D}_4 - (a,b)) \exp(-2\boldsymbol{\theta} \cdot Z_{\tau_b})) \tag{3.5}$$

とおく.

定義 3.1 問題3.1において,$\Pi \ni P^{(\boldsymbol{\theta}_\star)}$が*asymptotically efficient simulation distribution*とは,パラメーター $\boldsymbol{\theta}_\star$が,任意の$\Theta \ni \boldsymbol{\theta}$に対して

$$\limsup_{b\to\infty} s_b(\boldsymbol{\theta}_\star)/s_b(\boldsymbol{\theta}) < \infty \tag{3.6}$$

を満たすものをいう.

Shwartzの不等式より $r_b^2 \le s_b(\boldsymbol{\theta}_\star)$ が成り立つ. そこでr_bと $s_b(\boldsymbol{\theta}_\star)$ の$b \to \infty$での0への減少の仕方について,次の二つの場合に注目する. $b \to \infty$のとき
Case 1. $r_b^2 \asymp s_b(\boldsymbol{\theta}_\star)$ *Case* 2. $r_b^2 = o(s_b(\boldsymbol{\theta}_\star))$

等高線Θは滑らかな凸曲線であることが示される. しかも仮定3.1より,原点の他に,θ_2軸の負の側と唯一つの交点,$\widetilde{\boldsymbol{\theta}} = (0, \widetilde{\theta}_2)$と表す,を持つことが示される. $\widetilde{\boldsymbol{\theta}}$における$\Theta$の接線$\widetilde{L}$の傾きが正であるか,非正であるかによって問題3.1の結果が違ったもになることを以下で紹介する. それに先立ち例と,以下の議論で必須となる補題を導入する.

例 3.1 次の *Random Walk*は$\widetilde{L}$の傾きが正である.
(i) x-成分とy-成分が互いに独立な*Random walk(Random Walk with independent components)*
(ii) *Bernoulli (Nearest Neighbour) Random Walk,* 即ち, Z_1 は4点(1,0), (-1,0), (0,1), (0,-1)にのみ正の確率で値をとるもの.

例 3.2 Z_1 は4点(1,2),(-1,1),(0,-1)にのみ各々正の確率 p, q, rで値をとる*Random Walk*とする. そのとき仮定4.1は $p > q$, $3p + 2q > 1$ かつ $r > 0$ と同値である. そのうえで$\widetilde{L}$の傾きが非正である必要十分条件は $(p+q)^2 \ge p - q^2$ である. ここで,例えば, $p = 0.6$, $q = 0.3$, $r = 0.1$ と取れば,$\widetilde{L}$の傾きは非正となる.

補題 3.3 (離散 *Dirichlet* 問題の解に対する *Cameron-Martin* 公式) 任意の $\boldsymbol{\theta}_1, \boldsymbol{\theta}_2 \in \Theta$, $\boldsymbol{\xi} \in R^2$ と停止時間 σ と Z^2 上で定義された非負値境界関数 q について

$$E^{(\boldsymbol{\theta}_1)}(\sigma < \infty; \exp(\boldsymbol{\xi} \cdot Z_\sigma)q(Z_\sigma)) = E^{(\boldsymbol{\theta}_2)}(\sigma < \infty; \exp\{(\boldsymbol{\xi} + \boldsymbol{\theta}_1 - \boldsymbol{\theta}_2) \cdot Z_\sigma\}q(Z_\sigma)) \tag{3.7}$$

が成立する.

$\widetilde{L}$ の傾きが正の場合, 補題3.3から次の結果が得られる.

定理 3.1 (Shimura [5]) $\theta_\star$ が $\widetilde{\boldsymbol{\theta}}$ で与えられる. この場合 *Case* 1 が実現し, しかも

$$r_b \sim K \exp(\widetilde{\theta}_2 b)(b \to \infty) \tag{3.8}$$

である. ここで K は F と a に依存した正の定数である.

$\widetilde{L}$ の傾きが非正の場合. この場合さらに次の仮定を設ける.

仮定 3.3 $\underline{\theta}_2 := \inf\{\theta_2 | \boldsymbol{\theta} \in \Theta\} > -\infty$.

仮定3.2と補題3.3より

$$r_b^2 = s_b(\widetilde{\boldsymbol{\theta}})P^{(\widetilde{\boldsymbol{\theta}})}(\tau_b < \infty, Z_{\tau_b} \in \overline{D}_4 - (a, b))$$

が導かれる. これと $\widetilde{L}$ の傾きが非正であることから $r_b^2 = o(s_b(\widetilde{\boldsymbol{\theta}}))$ $(b \to \infty)$ が示され, $\widetilde{L}$ の傾きが正の場合と違って, $\boldsymbol{\theta} = \widetilde{\boldsymbol{\theta}}$ において *Case* 2 が実現することに注意する. 以上の考察の後再び補題3.3と Random Walk の因数分解公式のいくつかの結果を用いて次の定理を得る.

定理 3.2 (Shimura [5]) 仮定3.1から仮定3.3のもとで次の上からの評価を得る. $b \to \infty$ に対して

$$r_b \lesssim b^{-3/2} \exp(\underline{\theta}_2 b), \quad s_b(\underline{\boldsymbol{\theta}}) \lesssim b^{-3/2} \exp(2\underline{\theta}_2 b) \tag{3.9}$$

が成立する. ここで二つの正数列 $\{r_b\}$ と $\{s_b\}$ について $r_b \lesssim s_b$ は $\limsup_{b \to \infty}(r_b/s_b) < \infty$ を表すものとする.

(3.9) に対応する下からの評価は, 次の特別の場合の他にはまだ解決されていないように思われる. $\nu_b := \inf\{n \geq 1 | Y_n \leq b\}$ $(\inf \emptyset = \infty)$ とおく. 次の仮定を導入する.

仮定 3.4 $E^{(\underline{\boldsymbol{\theta}})}(\nu_{-1}) = \exp\{\sum_1^\infty n^{-1} P^{(\underline{\boldsymbol{\theta}})}(Y_n \geq 0)\} < 6$.

定理 3.3 (Shimura [6]) 例3.2の *Random Walk* が仮定3.1から仮定3.4を満たすものとする. そのとき次の下からの評価が得られる.

$$r_b \gtrsim b^{-3/2} \exp(\underline{\theta}_2 b), \quad s_b(\underline{\boldsymbol{\theta}}) \gtrsim b^{-3/2} \exp(2\underline{\theta}_2 b) \tag{3.10}$$

が成立する.

定理3.1と定理3.2から次の問題3.1の一つの解が得られる.

定理 3.4 定理3.3の *Random Walk* について, $P^{(\underline{\boldsymbol{\theta}})}$ が問題3.1の *asymptotically efficient simulation distribution* を与える. この場合 *Case* 2 が実現し, しかも

$$r_b \asymp b^{-3/2} \exp(\underline{\theta}_2 b), \quad s_b(\underline{\boldsymbol{\theta}}) \asymp b^{-3/2} \exp(2\underline{\theta}_2 b)(b \to \infty) \tag{3.11}$$

となる.

参考文献

[1] Bucklew,J.A., Ney,P. and Sadowsky,J.S.. *Monte Carlo simulation and large deviations theory for uniformly recurrent Markov chains.* J.Appl.Probab.**27**,44-59(1990).

[2] Dembo,A. and Zeitouni,O.. *Large Deviations Technique and Applications.* Jones and Bartlett Publ.(1993)

[3] Hammersley,J.M. and Handscomb,D.C.. *Monte Carlo Methods.* Methuen & Co Ltd.(1964)

[4] Lehtonen,T. and Nyrhinen,H.. *Simulating level-crossing probabilities by imprtance sampling.* Adv.Appl.Probab.**24**,858-874(1992).

[5] 志村道夫. *2*次元 *Random Walk*の領域からの脱出確率と確率的条件付極値問題. 数理研講究録, - (1997).

[6] Shimura,M.. *Exit probability of two-dimensinal random walk from the quadrant.* 準備中 (1997)