離散数理工学　第 12 回

離散確率論：乱択データ構造とアルゴリズム (発展)

岡本 吉央
okamotoy@uec.ac.jp

電気通信大学

2023 年 1 月 17 日

最終更新：2023 年 1 月 7 日　14:00

今日の目標

典型的な乱択アルゴリズムの設計と解析ができるようになる

- 確率の推定 (中央値トリック)

目次

不公平な硬貨

設定

- 硬貨が 1 つある
- 投げたとき，表が出る確率はいつも変わらない
- その確率が分からない
- 目標：表が出る確率を知りたい
- 可能な操作：硬貨を投げる (ことのみ)

不公平な硬貨

設定

- 考えている硬貨について

$$\Pr(\text{表}) = p$$

ただし，$0 \leq p \leq 1$

- 目標：p を知りたい

応用例：モンテカルロ法

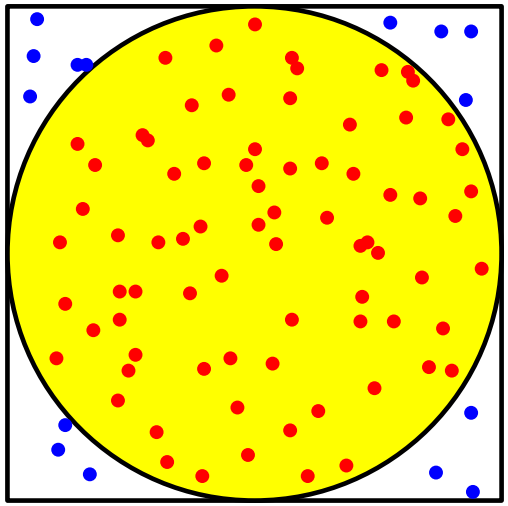
モンテカルロ法：(実際には用いられない) 例

円周率の計算のために次を行う

1. $[-1,1]^2$ 内の点 (x,y) を一様分布に従って発生させる
2. $x^2+y^2 \leq 1$ ならば，1 を出力，そうでなければ 0 を出力

このとき，この方法が 1 を出力する確率 $=\pi/4$

つまり，$p=\pi/4$ とした不公平な硬貨を考えていることになる



モンテカルロ法は，次の「単純なアルゴリズム」を実行する

単純なアルゴリズム

単純なアルゴリズム

硬貨を何度も投げてみる

- n 回投げるとする (独立な試行)
- 確率変数 X_i を次で定義 $(i \in \{1, \ldots, n\})$

$$X_i = \begin{cases} 0 & (i \text{ 回目に投げたとき裏が出る}) \\ 1 & (i \text{ 回目に投げたとき表が出る}) \end{cases}$$

- 次の量を出力

$$\frac{X_1 + X_2 + \cdots + X_n}{n}$$

期待値の解析

- 出力の期待値は

$$\begin{aligned}
\mathsf{E}\left[\frac{X_1 + X_2 + \cdots + X_n}{n}\right] &= \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\mathsf{E}[X_i] \\
&= \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(0\cdot(1-p)+1\cdot p) \\
&= p
\end{aligned}$$

期待値は正しい「推測」になっている (不偏推定)

問題点

必ず「p」を出力するわけではない $\rightsquigarrow$ 誤差が出る

n を大きくすれば，誤差は小さくなりそう

誤差の解析 (1)

以後，$X = X_1 + X_2 + \cdots + X_n$ とする

- 真の値 p から出力 $\frac{X}{n}$ がどれだけずれるか？
- そのずれが ε 未満である確率を知りたい
- その確率は次のように書ける

$$\Pr\left(\left|\frac{X}{n} - p\right| < \varepsilon\right)$$

- 計算

$$\Pr\left(\left|\frac{X}{n} - p\right| < \varepsilon\right) = 1 - \Pr\left(\left|\frac{X}{n} - p\right| \geq \varepsilon\right),$$

$$\Pr\left(\left|\frac{X}{n} - p\right| \geq \varepsilon\right) \leq \frac{\mathsf{E}\left[\left|\frac{X}{n} - p\right|\right]}{\varepsilon} \quad \text{(マルコフの不等式)}$$

しかし，$\mathsf{E}\left[\left|\frac{X}{n} - p\right|\right]$ はどう計算したらいいか分からない

誤差の解析 (2)

$$\Pr\left(\left|\frac{X}{n}-p\right|\geq\varepsilon\right)=\Pr\left(\left|\frac{X}{n}-p\right|^2\geq\varepsilon^2\right)\leq\frac{\mathsf{E}\left[\left|\frac{X}{n}-p\right|^2\right]}{\varepsilon^2}$$

$\mathsf{E}\left[\left|\frac{X}{n}-p\right|^2\right]$ を計算してみる

誤差の解析 (3)

$$\mathsf{E}\left[\left|\frac{X}{n}-p\right|^2\right]=\mathsf{E}\left[\left(\frac{X}{n}\right)^2-2p\frac{X}{n}+p^2\right]=\frac{1}{n^2}\mathsf{E}[X^2]-\frac{2p}{n}\mathsf{E}[X]+p^2$$

ここで,

$$\mathsf{E}[X] = \mathsf{E}[X_1+\cdots+X_n]=\sum_{i=1}^{n}\mathsf{E}[X_i]=pn$$

$$\mathsf{E}[X^2] = \mathsf{E}[(X_1+\cdots+X_n)^2]=\sum_{i=1}^{n}\mathsf{E}[X_i^2]+\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1,(i\neq j)}^{n}\mathsf{E}[X_iX_j]$$

誤差の解析 (4)

任意の $i \in \{1, \ldots, n\}$ に対して

$$\mathsf{E}[X_i^2] = (1-p) \cdot 0^2 + p \cdot 1^2 = p$$

したがって，

$$\sum_{i=1}^{n} \mathsf{E}[X_i^2] = pn$$

任意の異なる $i, j \in \{1, \ldots, n\}$ に対して，X_i と X_j は独立なので，

$$\mathsf{E}[X_i X_j] = \mathsf{E}[X_i]\mathsf{E}[X_j] = p \cdot p = p^2$$

したがって，

$$\sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1,(i \neq j)}^{n} \mathsf{E}[X_i X_j] = p^2 n(n-1)$$

誤差の解析 (5)

ここまで，まとめると

$$
\begin{aligned}
\mathsf{E}\left[\left|\frac{X}{n}-p\right|^2\right] &= \frac{1}{n^2}\mathsf{E}[X^2]-\frac{2p}{n}\mathsf{E}[X]+p^2 \\
&= \frac{1}{n^2}(pn+p^2n(n-1))-\frac{2p}{n}pn+p^2 \\
&= \frac{p}{n}+\frac{p^2(n-1)}{n}-p^2 \\
&= \frac{p-p^2}{n} \\
&= \frac{p(1-p)}{n}
\end{aligned}
$$

誤差の解析 (6)

すなわち，

$$\Pr\left(\left|\frac{X}{n}-p\right|\geq\varepsilon\right) \leq \frac{\mathsf{E}\left[\left|\frac{X}{n}-p\right|^2\right]}{\varepsilon^2} = \frac{1}{\varepsilon^2}\frac{p(1-p)}{n}$$

- この不等式はチェビシェフの不等式そのもの
- この右辺を δ 以下にするには，$n \geq \frac{1}{\varepsilon^2}\frac{p(1-p)}{\delta}$ とすればよい

結論

誤差が ε 以上になる確率を δ 以下とするためには，

$$n \geq \frac{1}{\varepsilon^2}\frac{p(1-p)}{\delta}$$

とすればよい

疑問

単純なアルゴリズム

硬貨を何度も投げてみる

- n 回投げるとする (独立な試行)
- 確率変数 X_i を次で定義 ($i \in \{1, \ldots, n\}$) (標示確率変数)

$$X_i = \begin{cases} 1 & (i \text{ 回目に投げたとき表が出る}) \\ 0 & (i \text{ 回目に投げたとき裏が出る}) \end{cases}$$

- 次の量を出力

$$\frac{X_1 + X_2 + \cdots + X_n}{n}$$

疑問

この「単純なアルゴリズム」よりもよいアルゴリズムは無いのか？

目次

中央値トリック (median trick)

中央値トリック

- n 回投げるとする (独立な試行)
- $n = (2k-1)t$ とする (k, t は自然数)
- 確率変数 X_i を次で定義 ($i \in \{1, \ldots, n\}$)

$$X_i = \begin{cases} 0 & (i \text{ 回目に投げたとき裏が出る}) \\ 1 & (i \text{ 回目に投げたとき表が出る}) \end{cases}$$

- 確率変数 Y_j を次で定義 ($j \in \{1, \ldots, 2k-1\}$)

$$Y_j = \frac{X_{(j-1)t+1} + \cdots + X_{(j-1)t+t}}{t}$$

- 次の量を出力

$$Y = \mathrm{med}\{Y_1, \ldots, Y_{2k-1}\}$$

med は中央値：$\mathrm{med}\{5, 1, 6, 2, 4\} = 4$

中央値トリック：誤差の解析 (1)

- 次が成り立つために n が満たす条件を見つけたい

$$\Pr(|Y - p| \geq \varepsilon) \leq \delta$$

- 今までの議論から，任意の $j \in \{1, \ldots, 2k-1\}$ に対して

$$\Pr\left(|Y_j - p| \geq \varepsilon\right) \leq \frac{1}{\varepsilon^2} \frac{p(1-p)}{t}$$

- $t \geq \dfrac{8p(1-p)}{\varepsilon^2}$ とすると，$\dfrac{1}{t} \leq \dfrac{1}{8} \dfrac{\varepsilon^2}{p(1-p)}$ なので，

$$\Pr\left(|Y_j - p| \geq \varepsilon\right) \leq \frac{1}{8}$$

中央値トリック：誤差の解析 (2)

- このとき，合併上界から

$$\Pr\left(k \text{ 個の } j \text{ に対して}, |Y_j - p| \geq \varepsilon\right) \leq \binom{2k-1}{k} \left(\frac{1}{8}\right)^k$$

性質：合併上界

任意の事象 A, B に対して

$$\Pr(A \cup B) \leq \Pr(A) + \Pr(B)$$

中央値トリック：誤差の解析 (3)

- 二項係数に対する上界を用いて，右辺を整理すると

$$\binom{2k-1}{k}\left(\frac{1}{8}\right)^k \leq \left(\frac{\mathrm{e}(2k-1)}{k}\right)^k \left(\frac{1}{8}\right)^k < \left(\frac{2\mathrm{e}}{8}\right)^k < \left(\frac{3}{4}\right)^k$$

二項係数：簡単な評価 (第 1 回講義より)

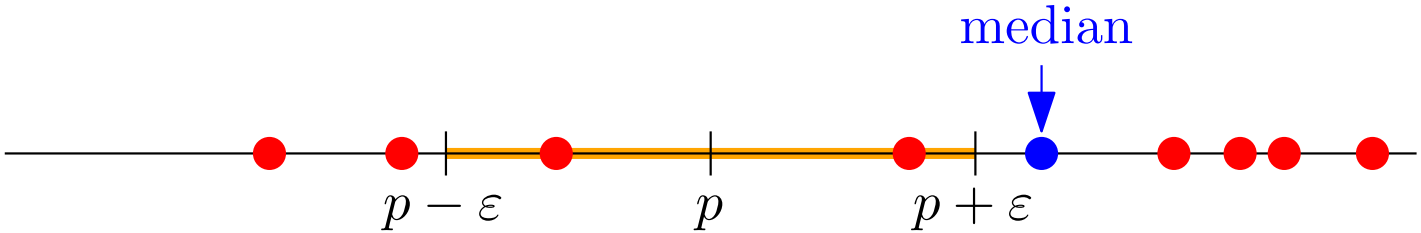
任意の自然数 $a \geq 1$ と任意の自然数 $b \geq 1$ に対して，$a \geq b$ であるとき，

$$\left(\frac{a}{b}\right)^b \leq \binom{a}{b} \leq \left(\frac{\mathrm{e}a}{b}\right)^b$$

中央値トリック：誤差の解析 (4)

- したがって (演習問題)，

$$\begin{aligned}\Pr\left(|Y-p|\geq\varepsilon\right) &\leq \Pr\left(k\text{ 個の }j\text{ に対して，}|Y_j-p|\geq\varepsilon\right)\\ &< \left(\frac{3}{4}\right)^k\end{aligned}$$



- $k \geq \log_{3/4}\delta$ とすると

$$\Pr\left(|Y-p|\geq\varepsilon\right) < \left(\frac{3}{4}\right)^k \leq \delta$$

中央値トリック：誤差の解析 (まとめ)

中央値トリック：誤差の解析 (まとめ)

- $t \geq \dfrac{8p(1-p)}{\varepsilon^2}$，$k \geq \log_{3/4} \delta$ とすると
  誤差が ε 以上になる確率を δ 以下にできる
- このとき，硬貨を投げる回数 n は

$$n = (2k-1)t \geq \Omega\left(\frac{p(1-p)}{\varepsilon^2} \log \frac{1}{\delta}\right)$$

補足：単純なアルゴリズムにて，硬貨を投げる回数 n は

$$n \geq \frac{p(1-p)}{\varepsilon^2} \frac{1}{\delta}$$

つまり，中央値トリックにより，硬貨を投げる回数が減った

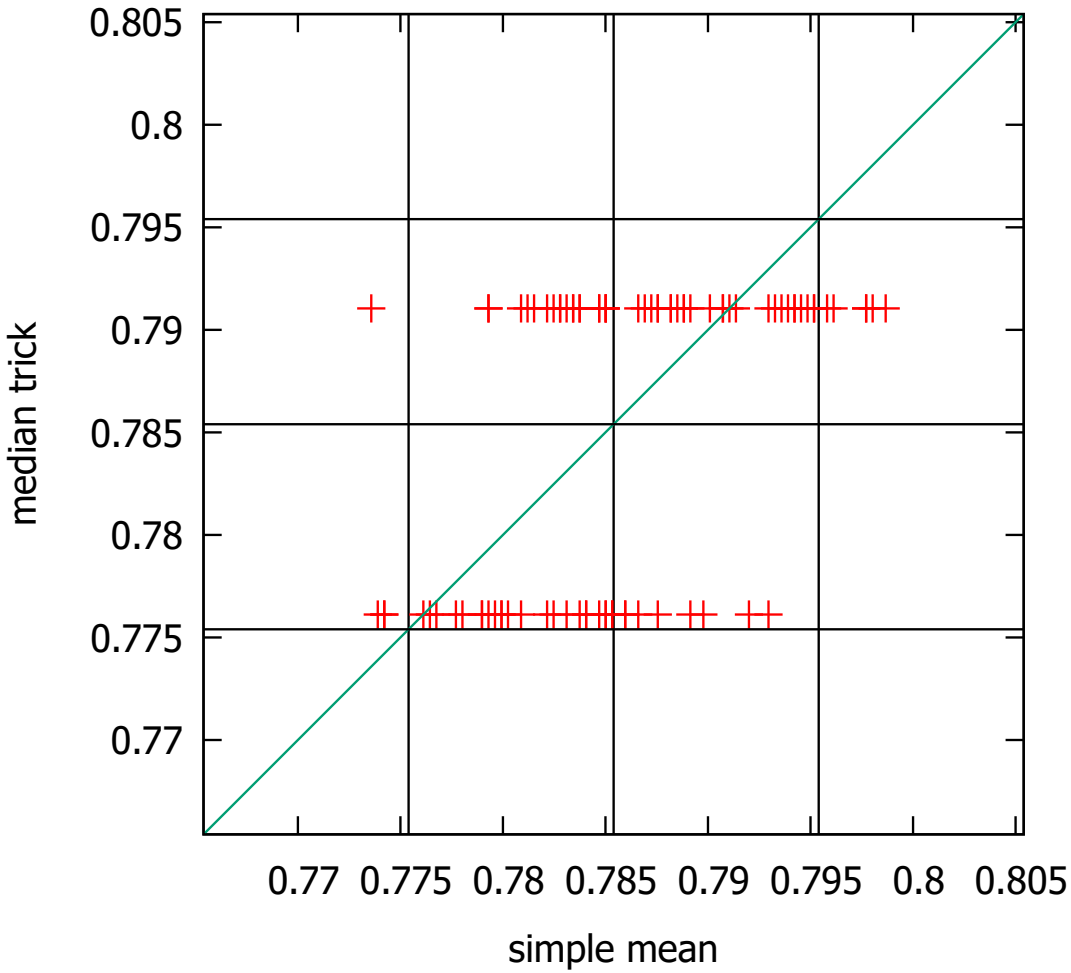
実験してみた

- パラメータ
  - $p = \pi/4 \approx 0.785398$
  - $\varepsilon = 0.1$
  - $\delta = 10^{-3}, 10^{-11}, 10^{-19}$
  - $t = \left\lceil \dfrac{8p(1-p)}{\varepsilon^2} \right\rceil$
  - $k = \left\lceil \log_{3/4} \delta \right\rceil$
  - $n = (2k-1)t$
- 各アルゴリズムを 100 回実行
- 横軸が単純なアルゴリズム，縦軸が中央値トリックの結果 (同じ乱数による)

注意：このパラメータ設定はとても恣意的なので，
他のパラメータ設定で追試をしてみるとよい

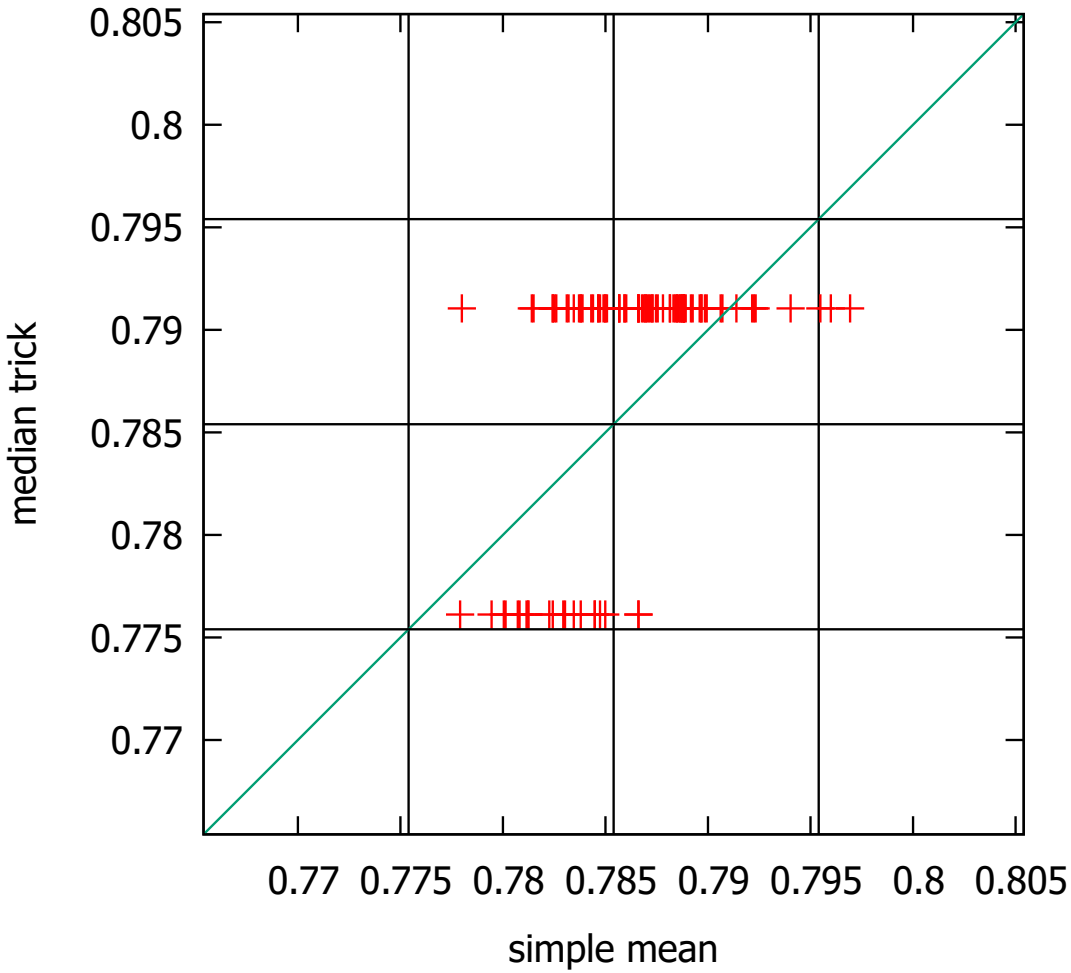
実験してみた：結果 1

$\delta = 10^{-3}$, $n = 3149$



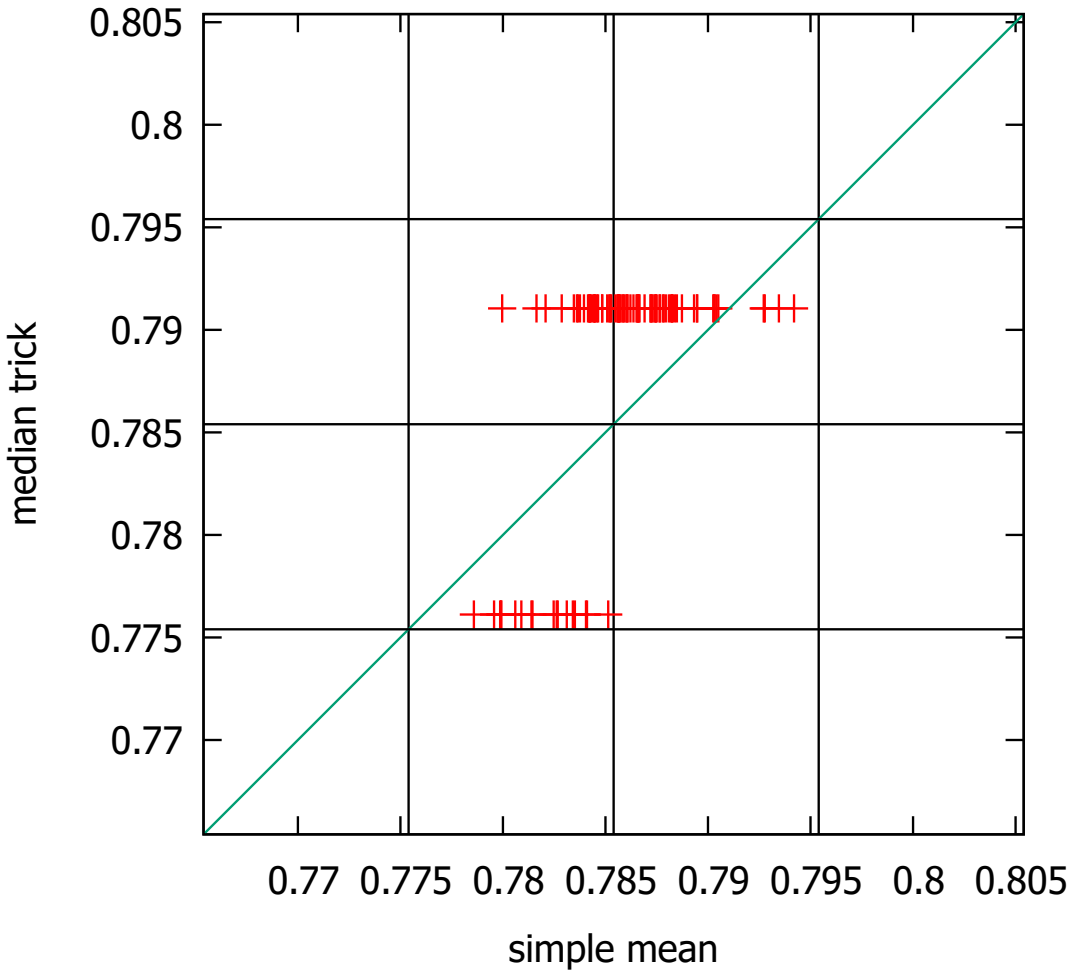
実験してみた：結果 2

$\delta = 10^{-11}$, $n = 11725$



実験してみた：結果 3

$\delta = 10^{-19}$, $n = 20301$



中央値トリック：注意

注意

- 単純なアルゴリズムの出力 X/n に対して，
$$\mathsf{E}[X/n] = p \text{ が成り立つ}$$
- 中央値トリックの出力 Y に対して，
$$\mathsf{E}[Y] = p \text{ が成り立つとは限らない}$$

X/n は不偏推定量であるが，Y はそうではない

どういうことか？

- n を大きくすると，X/n は p に近づいていく
- n を大きくすると，Y は p の近似値に近づいていく

目次

今日の目標

今日の目標

典型的な乱択アルゴリズムの設計と解析ができるようになる

- 確率の推定 (中央値トリック)

目次