目　　次

第2章
一般的な乱数生成法

本章では，主に区間 [0,1]，[0,1)，(0,1) の一様乱数を基に任意の確率分布に従う乱数 (統計的な特徴を持った乱数) を生成するための一般的な方法について説明します．本章で紹介する方法は，各種確率分布に従う乱数を生成するための基礎にもなります．任意の確率分布に従う乱数の一般的な生成法として，逆関数法，合成法，重畳法，棄却採択法について見ていきます．

2.1　逆関数法 (Inverse Transform method)

任意の確率分布に従う乱数を生成するためには，乱数が従う確率分布の特徴が必要になります．確率分布は，分布関数，または確率密度 (連続型の場合) か確率関数 (離散型の場合) により特徴付けられます[†2-1]．連続型及び離散型の確率分布を特徴付ける分布関数は，定理 1.7 より広義単調増加関数[†2-2]かつ $0 \leq \mathrm{F}(x) \leq 1$ の性質を持ちます．そのため，$U = \mathrm{F}(X)$ とおくと F は 1 価関数[†2-3]で値域が [0,1] となるため，確率変数 X が分布関数 F を持つとき確率変数 U は区間 [0,1] で一様に分布します．つまり，分布関数はその確率分布に従う確率変数を区間 [0,1] の (連続型) 一様分布に従う確率変数に変換している関数と考えられます．本節で説明する逆関数法では，分布関数の逆の変換を行うことで一様乱数を直接所望の確率分布に従う乱数に変換します．

§ 2.1.1　連続型確率分布に対する逆関数法

連続型確率分布では，分布の形状を直感的にわかりやすく表現している確率密度 f で定義されることが多いため，まずは分布関数 F を求める必要があります．

$$\mathrm{F}(x) = \int_{-\infty}^{x} \mathrm{f}(x)dx \tag{2.1}$$

その上で，分布関数 F の逆変換により一様乱数を任意の確率分布に従う乱数に変換することを考えます．ここで，分布関数に対して，狭義単調増加関数[†2-4]であり $0 < \mathrm{F}(x) < 1$，$\lim_{x \to -\infty} \mathrm{F}(x) = 0$,

[†2-1]確率分布，分布関数，確率密度 (連続型の場合) または確率関数 (離散型の場合) の 3 者は，いずれかのうち，どれか 1 つが与えられれば他は一意的に決まります．従って，連続型の確率分布は分布関数か確率密度，離散型の確率分布は確率関数か分布関数のいずれかにより表現されます．

[†2-2]広義単調増加関数 (monotonic increasing function, increasing function) は，$x_1 < x_2 \Rightarrow \mathrm{F}(x_1) \leq \mathrm{F}(x_2)$ を満たす関数として定義され，単調非減少関数 (non-decreasing function) とも呼ばれます．逆に，広義単調減少関数 (monotonic decreasing function, decreasing function) は $x_1 < x_2 \Rightarrow \mathrm{F}(x_1) \geq \mathrm{F}(x_2)$ を満たす関数として定義され，単調非増加関数 (non-increasing function) とも呼ばれます．

[†2-3]1 価関数 (single-valued function) は，関数 f を $y = \mathrm{f}(x)$ と表したとき，独立変数 x に対し従属変数 y が 1 つ定まるように規則付ける関数を指します．各 x に対して y が 2 つ以上定まるような規則を持った関数は，多価関数 (multi-valued function) と呼ばれます．

[†2-4]狭義単調増加関数 (strictly increasing function) は，$x_1 < x_2 \Rightarrow \mathrm{F}(x_1) < \mathrm{F}(x_2)$ を満たす関数として定義されます．単に単調増加関数とも呼ばれます．逆に，$x_1 < x_2 \Rightarrow \mathrm{F}(x_1) > \mathrm{F}(x_2)$ を満たす関数として定義されるのは，狭義単調減少関数 (strictly decreasing function) 又は単に単調減少関数と呼ばれます．

$\lim_{x\to\infty} \mathrm{F}(x) = 1$ を満たすと仮定します[†2-5]．$U = \mathrm{F}(X)$ とおくと，U は F により X から一意に決まり区間 (0,1)($0 < U < 1$) の範囲で値を採り得ます．このとき，F に関して X と U は 1 対 1 に対応する[†2-6]ため，逆関数が存在します．F の逆関数を F^{-1} と書くと，

$$X = \mathrm{F}^{-1}(U) \tag{2.2}$$

と表すことができます．式 (2.2) は，U が区間 (0,1) でランダムな値を採れば (U が区間 (0,1) の一様乱数であれば)，X は分布関数 $\mathrm{F}(x)$ の確率分布に従う乱数となることを表しています (図 2.1)．従って，アルゴリズム 2.1 により分布関数 $\mathrm{F}(x)$ を持つ乱数 X が生成できます．

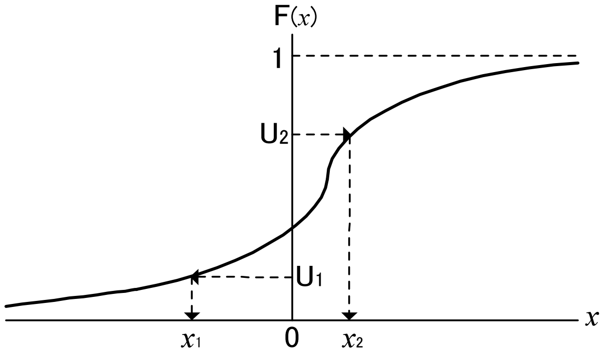

図 2.1: 連続型確率分布に対する逆関数法.

アルゴリズム 2.1: 連続型確率分布に対する逆関数法.

前提 生成しようとする乱数の分布関数 $\mathrm{F}(x)$ が，狭義単調増加関数 ($x_1 < x_2 \Rightarrow \mathrm{F}(x_1) < \mathrm{F}(x_2)$) かつ $0 < \mathrm{F}(x) < 1$ の条件 ($\lim_{x\to-\infty} \mathrm{F}(x) = 0, \lim_{x\to\infty} \mathrm{F}(x) = 1$) を満たす.

Step1. 区間 (0,1) の一様乱数 U を発生させる.

Step2. $X = \mathrm{F}^{-1}(U)$ を所望の乱数として計算する.

アルゴリズム 2.1 の X が所望の分布関数 F を持つ乱数であることは次のように証明できます.

連続型確率分布に対する逆関数法 (アルゴリズム 2.1) の証明　任意の実数 x に対して，$\mathrm{P}(X \le x) = \mathrm{F}(x)$ が成り立つことを示せば良いです[†2-7]．F に逆関数が存在することを踏まえると，

$$\mathrm{P}(X \le x) = \mathrm{P}\left(\mathrm{F}^{-1}(U) \le x\right) = \mathrm{P}\left(U \le \mathrm{F}(x)\right) = \mathrm{F}(x).$$

2 つ目の等号は，分布関数 F が狭義単調増加関数であることから成り立ちます．最後の等号は，U が区間 $(0, 1)$ の (連続型) 一様分布に従い，$0 < \mathrm{F}(x) < 1$ を満たしていることから成り立ちます． ■

[†2-5]定理 1.7 より，分布関数は広義単調増加関数 ($x_1 < x_2 \Rightarrow \mathrm{F}(x_1) \le \mathrm{F}(x_2)$) かつ $0 \le \mathrm{F}(x) \le 1$ ですが，まずは説明のために 1 対 1 に対応する (脚注 †2-6) 狭義単調増加関数 ($x_1 < x_2 \Rightarrow \mathrm{F}(x_1) < \mathrm{F}(x_2)$) かつ $0 < \mathrm{F}(x) < 1$ の条件付 ($\lim_{x\to-\infty} \mathrm{F}(x) = 0, \lim_{x\to\infty} \mathrm{F}(x) = 1$) で考えます．分布関数が広義単調増加関数かつ $0 \le \mathrm{F}(x) \le 1$ の場合 ($x \to -\infty$ でなくても $\mathrm{F}(x) = 0$ となる x が存在する場合や $x \to \infty$ でなくても $\mathrm{F}(x) = 1$ となる x が存在する場合など 1 対 1 に対応しない場合) は，2.1.3 節で取り上げます.

[†2-6]関数 f について 1 対 1 に対応する (1 対 1 の関数，one-to-one function) とは，$x_1 \ne x_2 \Rightarrow \mathrm{f}(x_1) \ne \mathrm{f}(x_2)$ となることを指します．つまり，x_1 と x_2 が異なれば $\mathrm{f}(x_1)$ と $\mathrm{f}(x_2)$ は異なることを意味します.

[†2-7]連続型の確率分布は，実数 x について確率変数 X が $X \le x$ となる確率を表す分布関数と 1 対 1 に対応します．$X \le x$ となる確率が分布関数 $\mathrm{F}(x)$ と一致すれば X は分布関数 $\mathrm{F}(x)$ に対応する確率分布に従います．従って，$X \le x$ となる確率が所望の確率分布に対応する分布関数 $\mathrm{F}(x)$ と一致することを示せば X が所望の分布関数 F を持つ乱数であることが証明されます.

以上から，乱数を生成したい連続型確率分布の分布関数 F に対する逆関数 F^{-1} がわかれば，区間 $(0,1)$ の一様乱数 U に対して $X = \mathrm{F}^{-1}(U)$ を計算することで所望の乱数 X が得られます．区間 (0,1) の一様乱数 U を基に確率密度 f を持つ乱数 X を生成するには，次の手順を踏むことになります．

連続型確率分布に対する逆関数法の手順

Step1. 発生させたい連続型確率分布の確率密度 f を積分して分布関数 F を求める．

$$\mathrm{F}(x) = \int_{-\infty}^{x} \mathrm{f}(t)dt$$

Step2. 分布関数 F の逆関数 F^{-1} を求める．

Step3. 区間 (0,1) の一様乱数 U を発生させ，$X = \mathrm{F}^{-1}(U)$ を計算する．

Step1.,**Step2.** では，手計算や数式処理ソフトにより分布関数の逆関数 (一様乱数からの変換式) を求めます (プログラムのソースを記述するための準備)．**Step3.** では，乱数生成器から区間 (0,1) の一様乱数を発生させ，**Step1.**,**Step2.** で求めた分布関数の逆関数 (一様乱数からの変数変換式) に代入する計算をプログラムに実装 (プログラムのソースに記述) します．ここまでの説明で，区間 (0,1) の一様乱数から逆関数法により所望の分布に従う乱数を生成する手順がわかりましたので，分布関数の逆関数導出とプログラミングができれば乱数を生成させることができます．

[例 2.1] 指数分布 (Exponential distribution) に従う乱数

指数分布 (Exp(θ) と表記) の確率密度 $\mathrm{f}_{\mathrm{Exp}(\theta)}(x)$ は 181 頁の式 (3.129) で与えられます．確率密度 $\mathrm{f}_{\mathrm{Exp}(\theta)}(x)$ を x について積分して指数分布の分布関数を求めます．

$$\mathrm{F}_{\mathrm{Exp}(\theta)}(x) = \int_0^x \mathrm{f}_{\mathrm{Exp}(\theta)}(t)dt = \int_0^x \frac{1}{\theta}\exp\left(-\frac{t}{\theta}\right)dt = 1 - \exp\left(-\frac{x}{\theta}\right),\quad (x \geq 0)$$

$u = \mathrm{F}_{\mathrm{Exp}(\theta)}(x)$ とおいて x について変形すると，逆関数

$$\mathrm{F}_{\mathrm{Exp}(\theta)}{}^{-1}(u) = -\theta \ln(1-u),\quad (0 \leq u < 1) \tag{2.3}$$

が得られます．従って，区間 (0,1) の一様乱数 U を発生させ[†2-8]，

$$X = -\theta \ln U \tag{2.4}$$

を計算することで指数分布 Exp(θ) に従う乱数 X が生成できます[†2-9]．式 (2.4) により指数分布 Exp(4) に従う乱数を生成した結果の割合ヒストグラム[†2-10]と確率密度を図 2.2 に示します[†2-11]．

[†2-8] ここではわかりやくするため区間 (0,1) の一様乱数から変換していますが，指数分布は定義域が $[0,\infty)$ であるため，厳密には区間 [0,1) の一様乱数を逆関数の式 (2.3) に適用する必要があります．詳しくは，2.1.3 節で取り上げます．なお，理論的には指数分布で値 0 が現れる確率は 0 ですので，値 0 が出現しなくても問題ない場合は区間 (0,1) の一様乱数 U で十分役割は果たせます．

[†2-9] この場合は，$1-U$ が区間 (0,1) の一様乱数であるため，$1-U$ を区間 (0,1) の一様乱数 U に置き換えることができます．ただし，どんな場合でも $1-U$ を U に置き換えることができるとは限りません (置き換えられない場合として 68 頁の例 2.6 参照)．

[†2-10] 連続量を適当な同じ幅の小区間に分割し，各小区間 (階級) に何個のデータが入るか (各階級に入るデータ数 : 度数) をカウントして表にしたものを度数分布表 (frequency table) と呼び，度数分布表を柱状のグラフで表現したものをヒストグラム (histogram) と呼びます．割合ヒストグラム (proportional histogram) は，ヒストグラムの各階級について度数を総データ数で割った相対度数により表現したグラフです．全面積 ($(-\infty,\infty)$ での積分値) が 1 となる確率密度と比較するため，生成した乱数の結果を相対度数の総和が 1 となる (総面積が 1 となる) 割合ヒストグラムにより表しています．

[†2-11] 区間 [0,20) を 100 の短区間 (階級) に分割し，乱数を 10000 個生成した場合の割合ヒストグラムです．確率密度と割合ヒストグラムの関係は付録 B を参照してください．

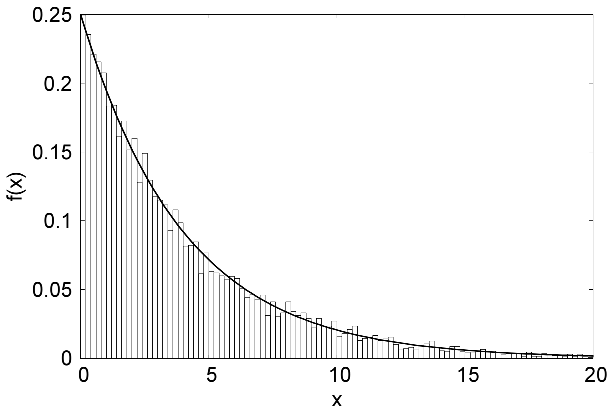

図 2.2: 逆関数法により生成した指数分布 Exp(4) に従う乱数の割合ヒストグラムと確率密度.

[例 2.2] 指数指数分布 (Exponential-exponential distribution) に従う乱数

指数指数分布 (EExp(μ,η) と表記) の確率密度は次式で与えられます.

$$\mathrm{f}_{\mathrm{EExp}(\mu,\eta)}(x) = \frac{1}{\eta}\exp\left(\frac{x+\mu}{\eta}\right)\exp\left\{-\exp\left(\frac{x+\mu}{\eta}\right)\right\}, \quad (-\infty < x < \infty, -\infty < \mu < \infty, \eta > 0) \tag{2.5}$$

ここで，μ は位置母数 (location parameter)，η は尺度母数 (scale parameter) と呼ばれます．式 (2.5) を積分して分布関数を求めると，

$$\mathrm{F}_{\mathrm{EExp}(\mu,\eta)}(x) = \int_0^x \mathrm{f}_{\mathrm{EExp}(\mu,\eta)}(t)dt = 1 - \exp\left\{-\exp\left(\frac{x+\mu}{\eta}\right)\right\}, \quad (-\infty < x < \infty, -\infty < \mu < \infty, \eta > 0) \tag{2.6}$$

となります．式 (2.6) の分布関数から逆関数を求めると次のようになります.

$$\mathrm{F}^{-1}_{\mathrm{EExp}(\mu,\eta)}(u) = -\mu + \eta\ln\{-\ln(1-u)\}, \quad (0 < u < 1, -\infty < \mu < \infty, \eta > 0) \tag{2.7}$$

区間 $(0,1)$ の一様乱数 U に対して $1-U$ も区間 $(0,1)$ の一様乱数ですから，U に対して

$$X = -\mu + \eta\ln(-\ln U) \tag{2.8}$$

を計算することで指数指数分布 EExp(μ,η) に従う乱数 X が得られます.

指数指数分布に従う乱数は，指数分布に従う乱数を基にしても生成できます．$\mu = 0$，$\eta = 1$ の指数指数分布 EExp$(0,1)$ は標準指数指数分布と呼ばれます．式 (2.5) で与えられる指数指数分布 EExp(μ,η) は，標準指数指数分布 EExp$(0,1)$ の確率変数 Y に対して

$$X = -\mu + \eta Y \tag{2.9}$$

と変換することで得られます．このことは，標準指数指数分布 EExp$(0,1)$ の確率密度

$$\mathrm{f}_{\mathrm{EExp}(0,1)}(y) = \exp\{y - \exp(y)\}, \quad (-\infty < y < \infty) \tag{2.10}$$

に対して，確率変数の変換

$$Y = \phi(X) = \frac{X+\mu}{\eta} \tag{2.11}$$

を行うことで確認できます．$\phi'(x) = 1/\eta$ より，変換後の確率密度は

$$\mathrm{g}(x) = \mathrm{f}_{\mathrm{EExp}(0,1)}\left(\phi(x)\right)\left|\phi'(x)\right| = \frac{1}{\eta}\exp\left\{\frac{x+\mu}{\eta} - \exp\left(\frac{x+\mu}{\eta}\right)\right\}$$

となり ($\because$21 頁の式 (1.33))，式 (2.5) と一致します．従って，標準指数指数分布 $\mathrm{EExp}(0,1)$ に従う Y に対し，式 (2.9) の計算により指数指数分布 $\mathrm{EExp}(\mu,\eta)$ に従う X が得られます．

標準指数指数分布 $\mathrm{EExp}(0,1)$ に従う Y は，標準指数分布 $\mathrm{Exp}\,(1)$ に従う Z に対して

$$Y = \ln Z \tag{2.12}$$

から得られます．式 (2.12) は，標準指数分布の確率密度 (184 頁の式 (3.153)) に

$$\mathrm{f}_{\mathrm{Exp}(1)}\,(z) = \exp\,(z)$$

確率変数の変換

$$Z = \psi\,(Y) = \exp\,(Y) \tag{2.13}$$

を行うことで確認できます．$\psi'(y) = \exp\,(y)$ となるため，

$$\mathrm{g}\,(y) = \mathrm{f}_{\mathrm{Exp}(1)}\,(\psi(y))\left|\psi'(y)\right| = \exp\left\{y - \exp\,(y)\right\}$$

となり ($\because$21 頁の式 (1.33))，式 (2.10) と一致します．従って，標準指数分布 $\mathrm{Exp}\,(1)$ に従う乱数 Z に対して式 (2.12) を計算することで，標準指数指数分布に従う乱数 Y が得られます．ここで，式 (2.12) で Y が発散しないように乱数 Z は 0 を含まないようにする必要があります．指数指数分布に従う乱数はアルゴリズム 2.2 の手順により生成できます．

アルゴリズム 2.2: 指数指数分布に従う乱数の生成.

目的 指数指数分布 $\mathrm{EExp}(\mu,\eta)$ に従う乱数 X を生成する．

Step1. 標準指数分布 $\mathrm{Exp}\,(1)$ に従う乱数 Z を $z > 0$ の範囲で生成する．

Step2. $Y = \ln\,(Z)$ を計算する．

Step3. $X = -\mu + \eta Y$ を所望の乱数として計算する．

*指数分布に従う乱数の生成法は例 2.1 又は 3.6 節参照．

*標準指数指数分布 $\mathrm{EExp}\,(0,1)$ に従う乱数を生成する場合は，**Step3.** で Y を所望の乱数とする．

アルゴリズム 2.2 について，**Step1.** で標準指数乱数を生成するのに逆関数法を適用する場合，式 (2.8) の逆関数法により区間 (0,1) の一様乱数 U から指数指数乱数を生成することと同じです．標準指数分布 $\mathrm{Exp}\,(1)$ に従う乱数 Z を $z > 0$ の範囲で逆関数法により生成するとき，式 (2.4) から区間 (0,1) の一様乱数 U に対して

$$Z = -\ln U$$

を計算します．式 (2.9) 及び式 (2.12) の関係から，アルゴリズム 2.2 の処理内容は

$$X = -\mu + \eta Y = -\mu + \eta \ln Z = -\mu + \eta \ln\,(-\ln U)$$

となり，式 (2.8) の計算と一致します．指数指数分布 EExp$(-5, 2)$ に従う乱数を式 (2.8) の逆関数法により生成した結果の割合ヒストグラム[†2-12]と確率密度を図 2.3 に示します．

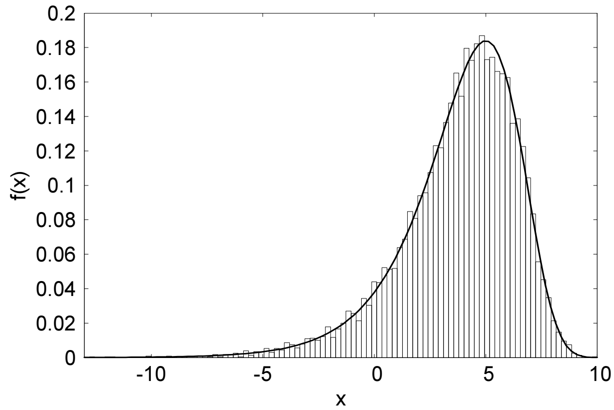

図 2.3: 逆関数法で生成した指数指数分布 EExp$(-5, 2)$ に従う乱数の割合ヒストグラムと確率密度．

連続型確率分布に対する逆関数法について確率論の概念を基にした説明は上記の通りですが，わかりやすくするために直感的に見ていきます．連続型確率分布の確率密度 $\mathrm{f}(x)$ は，各 x についてその付近の値を観測値が採る可能性の高さを表しています．確率密度 $\mathrm{f}(x)$ の値が大きい x 付近では観測値が多く，確率密度 $\mathrm{f}(x)$ の値が小さい x 付近では観測値が少なくなると予想できます．

例 2.2 で取り上げた指数指数分布 EExp$(-5, 2)$ の確率密度は図 2.4，分布関数は図 2.5 のようになります．図 2.4 から，$x = 5$ 付近の方が $x = 0$ 付近に比べて多くの観測値が得られると予想できます．確率密度 $\mathrm{f}(x)$ の積分が分布関数 $\mathrm{F}(x)$ であること ($\mathrm{F}(x) = \displaystyle\int_{-\infty}^{x} \mathrm{f}(t)dt$) を踏まえると，$\mathrm{f}(x)$ は各 x について $\mathrm{F}(x)$ の傾きを表していると考えることができます．従って，$\mathrm{f}(x)$ の値が大きい x では $\mathrm{F}(x)$ の傾きが急になり，$\mathrm{f}(x)$ の値が小さい x では $\mathrm{F}(x)$ が平坦になります．その結果，$\mathrm{f}(x)$ の値が大きい x 付近に対応する $\mathrm{F}(x)$ の範囲が，$\mathrm{f}(x)$ の値が小さい x 付近に対応する $\mathrm{F}(x)$ の範囲よりも広くなります．図 2.4 及び図 2.5 を見ると，$\mathrm{f}(x)$ の値が大きい $x = 5$ 付近に対応する $\mathrm{F}(x)$ の範囲は，$\mathrm{f}(x)$ の値が小さい $x = 0$ 付近に対応する $\mathrm{F}(x)$ の範囲よりも広くなっています．

逆関数法では，区間 (0,1) の一様乱数が分布関数の縦軸 $\mathrm{F}(x)$ 上に一様に散らばります．各 $\mathrm{F}(x)$ の値に散らばった一様乱数 U は，逆関数 F^{-1} により $\mathrm{F}(x)$ の値から対応する x の値に変換されます (変換の概念は図 2.1 を参照)．図 2.5 をみると，$x = 5$ の付近に対応する $\mathrm{F}(x)$ の範囲の方が $x = 0$ の付近に対応する $\mathrm{F}(x)$ の範囲よりも広いため，$x = 5$ 付近に変換される一様乱数の方が $x = 0$ 付近に変換される一様乱数よりも多くなると考えられます．多数の乱数を生成すれば，確率密度の値が大きい x 付近の値に変換される一様乱数は多く，確率密度の値が小さい x 付近の値に変換される一様乱数は少なくなります．従って，逆関数法では，本質的に一様乱数 U を確率密度 $\mathrm{f}(x)$ を持つ分布に従う X に変換していることになります．

[†2-12] 区間 [-13,10) を 100 の短区間 (階級) に分割し，乱数を 10000 個生成した場合の割合ヒストグラムです．確率密度と割合ヒストグラムの関係は付録 B を参照してください．

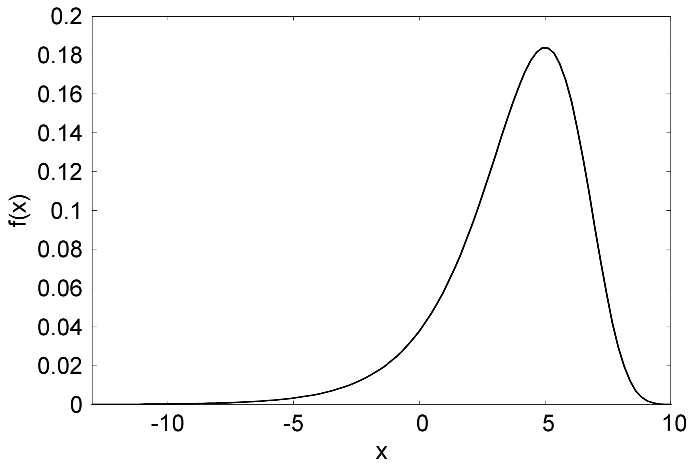

図 2.4: 指数指数分布 EExp$(-5, 2)$ の確率密度.

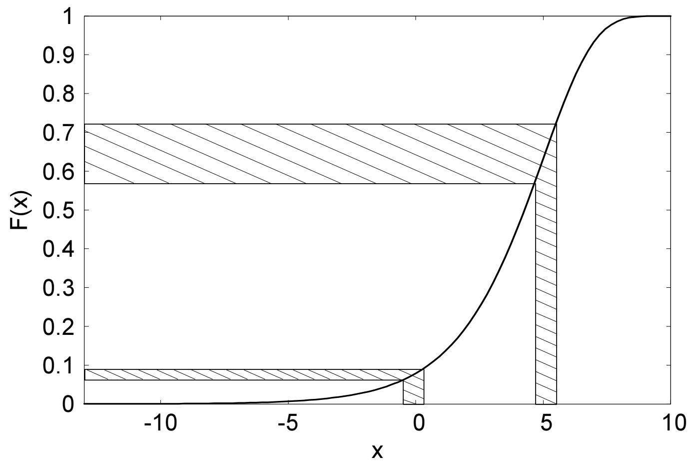

図 2.5: 指数指数分布 EExp$(-5, 2)$ の分布関数.

§ 2.1.2　離散型確率分布に対する逆関数法

逆関数法は，確率変数 X が離散型の場合も考えることができます．離散型の確率分布は，確率関数又は分布関数により表現され (53 頁の脚注 †2-1)，分布の様子を捉えやすい確率関数で定義されます．ところが，発生させたい離散型確率分布の乱数に変換する一様乱数は連続型であるため，連続型の確率変数と共通の表現形式である分布関数を起点にして考える必要があります.

離散型確率分布に対する分布関数は次のように与えられます.

$$\mathrm{F}(x) = \mathrm{P}(X \leq x) = \sum_{x_i \leq x} \mathrm{p}(x_i) \tag{2.14}$$

式 (2.14) について，p は確率関数であり，確率変数 X は $x_1, x_2, \ldots, (x_1 < x_2 < \cdots)$ をとり得るとします．式 (2.14) で与えられる離散型確率分布の分布関数は $x_1 < x_2 \;\Rightarrow\; \mathrm{F}(x_1) < \mathrm{F}(x_2)$ かつ $0 \leq \mathrm{F}(X) \leq 1$ の条件を満たします．そこで，離散型確率分布に対する逆関数法では，区間 [0,1] の一様乱数 U を基に[†2-13]アルゴリズム 2.3 の手順で生成させます.

[†2-13]離散型確率分布の分布関数が $0 \leq \mathrm{F}(X) \leq 1$ であるため，生成させる一様乱数は 0 と 1 を含めています．ただし，区間 [0,1) や区間