シミュレーションの数理的評価

逆瀬川　浩孝

1. はじめに

ちょっとした複雑な問題に直面すると，とりあえずシミュレーションをやって様子を見てみよう，というように，シミュレーションという考え方が気軽に扱われるようになったのはここ数年のことでしょうか．新聞やテレビなどを見ていても，シミュレーションという言葉は全く抵抗なく普通の記事や会話に飛び込んできます．当然，その適用分野は広く，受精のシミュレーションから葬式のシミュレーション（ゆりかごから墓場まで！），核分裂のシミュレーションから宇宙ビッグバンのシミュレーション（超ミクロ現象から超マクロ現象まで）というように，オペレーションズリサーチとは縁の薄い分野でも，この考え方の有効性が認められています（現状を数量モデル化し，モデルの動きを調べることによって現実を理解する，という考え方をオペレーションズリサーチだという主張をするならば，シミュレーションを適用するということはそこにオペレーションズリサーチの発想が持ち込まれているのだと主張することもできましょう）．

昨年，学会の40周年を記念して作られたOR事典のなかに「事例編」というオペレーションズリサーチの適用事例を集めた部分があります．手法別，適用分野別の分類がしてありますが，70近い事例が「シミュレーション手法」に分類されています．もちろんこの分類は「主として」使われている手法を基に分類されているものですから，シミュレーション「も」使いながら他のところに分類されている事例も少なくありませんし，また，問題解決のとっかかりとしてシミュレーションを活用した（書いたものとしては残されていない）事例は無数に存在することでしょう．

2. シミュレーションの数理

OR事典の様々な事例を見ても分かるように，シミュレーションと一口に言ってもその使われ方は実に多種多様です．シミュレーションとはもともと「まねをする」という意味ですから，どんなまねの仕方をするかで，その後の扱いが違ってきます．この特集でこのあと紹介されるいろいろな技法は，すべて「離散事象システム」とよばれるシステムが対象になっています．離散的に生じるランダム現象がシステムをどのように変えて行くのか，そこからどのような規則が導かれるのか，ということを考えようというものです．これを離散事象シミュレーションということがあります．簡単な例としてはコイン投げで賭をしたとき，先に破産する（チップを全部取られる）のはどっちか，という問題があります．

なんだばからしい，そんな遊びにつきあっている暇はない，と言わないでください．実はこれが離散事象シミュレーションの基本形なのです．ランダムな事象が起きること（「表が出る」か「裏が出る」か）によってシステムの状態（自分の持っているチップの数）がランダムに変動します．その結果としてあるときは相手が先に破産し，あるときは自分が先に破産するというように，ランダムな結果が得られます．問題は1回1回の結果そのものではなく，平均的に見たとき，ある特定の事象（「相手より先に自分が破産する」）がどれくらい起きやすいのか，言い換えればその事象の起きる確率を知ることです．

まだ「ばかばかしい」という意識が抜けない人のために，別の角度から問題に迫ってみましょう．チップの枚数の時間変化は「ランダムウォーク」とも呼ばれ，時間的に変化する確率モデル，すなわち確率過程モデルのもっとも中心的な役割を果たしています．日本でも最近になってようやく活性化してきた金融工学の世界ではこれなしにはやって行けないというほど基本中の基本のモデルです．驚かれるかもしれませんが，いま，その世界でもっとも幅を利かせているブラックショールズの公式は，コイン投げ（ランダムウォーク）が理論の中心にあります．一寸先は闇，何が起きるか

さかせがわ　ひろたか　早稲田大学 理工学部
〒169-8555 新宿区大久保3-4-1

分からないのだったらコイン投げで決めるしかない，それが公平で良いじゃないか，ということなのです．

パソコンでコインは投げられませんが，「模擬実験」をさせることは可能です．EXCELで「=RAND( )」と入力するとでたらめな数が表示されます．再計算させるとまた違った数が表示されます．このように一見でたらめに表示される数は擬似乱数と呼ばれ，コイン投げの代用として使うことができます．これを使ってコイン賭博の模擬実験をやってみましょう．最初は両者とも10枚ずつのチップを持ち，コインを1回投げるたびに自分が勝つ確率を0.52とします．どちらのチップがなくなるか，あるいは200回コインを投げたらおしまいにするという実験を10回繰り返し所持チップ数の推移をグラフ化したのが図1です．12回で負けてしまう（12回中1回しか表が出ない！）場合から，200回繰り返してもまだ勝負が付かない場合まで，実に多種多様な結果が得られます．このまとまりのない図を見て感じることは，いったい何をもってシミュレーションの結果というか，ということでしょう．

ランダム事象を対象にしてきちんとした量的な議論をするためには確率論が必要です．シミュレーションの1回の実験を確率変動する標本の1つと考えると，確率論をベースとした数理統計学の標本抽出の理論がそのまま使えます．たとえば，上の例ではとにかく勝負が付くまでコインを振り続け，勝ったら1，負けたら0という数字が1つの標本として得られるものにしますと，その標本平均を勝つ確率の推定値とすることに異論はないでしょう．

これを記号を使って表します．X_kはk回目の実験結果を表す確率変数とします．この場合は0か1の値しか取りません．実験の性質から，$X_1, X_2, \cdots$は互いに無関係（独立）です．勝負の回数（実験の回数）をnとすると，標本平均は次のようになります．

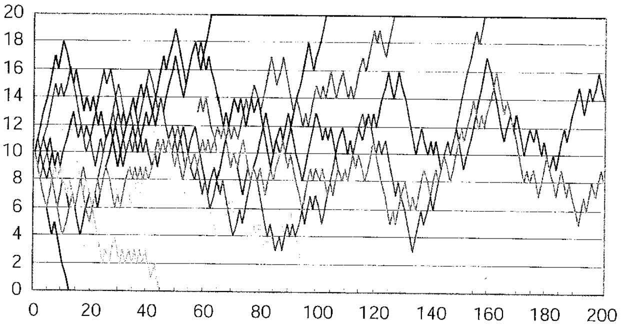

図1

$$\bar{X}=\frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} X_k \tag{1}$$

問題はここからです．

上の例では勝負のついた8例だけから計算すると8分の5，すなわち0.625が答えになります．あとの2回も勝負がつくまで続けたとして，その結果を組み込むと，可能性としては0.5，0.6，0.7のいずれかになります．たとえば0.5という結果を得たとして，それをそのままこたえとすることに抵抗はありませんか．明らかに勝つチャンスが大きいにもか拘わらず，結局は同じ，これくらいの違いはほとんど影響が出ないのさ，といって済ませていられますか．また，2回の結果次第で，勝つ確率が0.2も違ってしまうことに違和感はありませんか．この問題の正解は0.69です．勝つ確率を0.02増やしただけで，最終的な勝敗にこれだけの差がつくのは予想外かもしれません．しかしある程度優位であることは予想が付くでしょうから，シミュレーション結果の0.5をそのまま受け入れたくはないでしょう．

これほど状況がはっきりしていれば，シミュレーションの結果に疑問を持つことは容易ですが，多くのシミュレーションはほとんど何も分からない，あるいはせいぜい漠然とこうなるかもしれない，という程度の理解しかない問題に対して適用されるものです．したがって，(1)式で計算される値が真の値とどれくらい違う可能性があるのかを示す必要があります．この場合もやはり数理統計の理論が使われます．

$$S^2=\frac{1}{n-1}\sum_{k=1}^{n}(X_k-\bar{X})^2$$

としますと

$$\frac{\bar{X}-E[X]}{S/\sqrt{n}}$$

が自由度$n-1$のt分布にしたがっていることが分かっていますので，真の平均は$\bar{X}\pm t_{\alpha}^{(n-1)}S/\sqrt{n}$の間にあるという主張は$100(1-\alpha)$%正しい，ということがいえます．ここで$t_{\alpha}^{(n)}$は自由度$n$の$t$分布における，上側$100\times\alpha/2$パーセント点を表すものとします．$t_{\alpha}^{(n)}$は信頼係数と呼ばれることがあります．あるいはまた，

$$\left[\bar{X}-t_{\alpha}^{(n-1)}\frac{S}{\sqrt{n}},\ \bar{X}+t_{\alpha}^{(n-1)}\frac{S}{\sqrt{n}}\right]$$

を真の平均$E[X]$の$100(1-\alpha)$%信頼区間ともいいます．

この考え方を上の問題に適用してみましょう．200回でまだ勝負が付いていない2回分は両方とも負けた

ことにしましょう（両方とも勝った場合にどうなるか，計算してみてください）．そうすると $\bar{X}=0.5, S=0.53$，となりますので，95%信頼区間を計算すると（$t_{0.05}^{(9)}=2.26$ ですから）

$$[0.12, 0.88]$$

という結果になります．これでは「推定」の意味がありませんね．$S/\sqrt{n}$ は標準誤差といい，推定精度の指標として使われます．あるいは，信頼区間の半分の幅を指標とする場合もあります．直感的に理解できるように，この結果は実験の回数を重ねるにつれて改善される（区間の幅が狭くなる）と思われます．実際，S は標本の大きさにあまり影響されない量ですから，標準誤差は標本の大きさの平方根に反比例します．このことを平方根則ということがあります．具体的にいえば，標準誤差（信頼区間の幅）を半分にするためには標本の大きさを4倍にする必要があります．有効桁を1桁上げたければ標本の大きさを100倍取る必要があります．これがシミュレーションを非効率なものにしている元凶です．

また，ある程度標本データがたくさんある場合は t 分布の代わりに(1)式が正規分布にしたがっているとして計算しても構わないことは中心極限定理として良く知られています．

上の問題はあるランダム事象が起きる確率を推定する問題でした．しかし，(1)式に現れる確率変数 X_1, X_2, …の取りうる値が0か1であるという条件は，そのあとの議論ではどこにも使っていません．ということは，独立同分布でさえあれば，上の方法を使ってその期待値を推定することができます．

3. 計算の効率化

シミュレーションの精度を評価する指標としてあげた信頼区間の半幅は3つの要素から成り立っています．標準誤差を形成する標準偏差と標本の大きさ，それに標準誤差の係数です．係数を小さくすれば信頼区間の幅は狭くなり，見かけ上精度の良い推定が与えられたことになりますが，それは，その推定がはずれる危険性を大きくするという犠牲を伴っています．たとえば係数を半分にすればあたる確率は3分の2に減ってしまいます．どの程度の推定精度を求めるのかは意思決定者の問題で，シミュレーションの評価の問題ではありませんので，これをいじるのはやめましょう．

残りの2つ，標準偏差と標本の大きさのうち，直接コストに関わる標本の大きさについては，前章で効率化という点から貢献度が少ないことを説明しました．

そこで，最後に残された標準偏差を小さくする工夫を考えることにします．標準偏差の2乗は分散ですから，分散を小さくするといっても同じです．そこで，このような工夫を分散減少法といい，古くからいろいろな方法が提唱され，研究されています．

分散減少法を体系的に取り上げたのは Hammersley & Handscomb の古典的名著“Monte Carlo Method”(1964) が最初です．すでにそこで主要なアイディアはリストアップされています．最近特に注目を浴びているのは重点抽出法ですが，ここでは一通りの概説を試みることにしましょう．(1)式の分散を計算すると，各標本が独立であることから

$$\mathrm{var}(\bar{X})=\frac{1}{n}\mathrm{var}(X_1) \tag{2}$$

となります．あまり手間を増やさずにこの値をどれだけ小さくできるか，という問題です．

もし，X と負の相関を持ち，その期待値は $E[X]$ と同じ，分散の大きさも同じていどであるような確率変数 Y があれば，(2)となるべく同じ条件にするために $n/2$ ずつのサンプルをとって

$$\frac{\bar{X}+\bar{Y}}{2}=\frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n/2}(X_k+Y_k) \tag{3}$$

とすることによって，分散を減らすことが期待できます．なぜならば

$$\mathrm{var}\left(\frac{\bar{X}+\bar{Y}}{2}\right)$$
$$=\frac{1}{2n}(\mathrm{var}(X_1)+\mathrm{var}(Y_1)+2\,\mathrm{cov}(X_1, Y_1))$$

ですから，最後の3項めが負であるということから(3)式の分散は(2)式に比べて小さくなります．この方法は，負相関法，あるいは対照変量法と呼ばれます．

逆に，X と正の相関を持ち，その期待値が分かっているような確率変数 Y を使って

$$\bar{X}-\beta(\bar{Y}-E[Y])=\frac{2}{n}\sum_{k=1}^{n/2}(X_k-\beta Y_k)+\beta E[Y] \tag{4}$$

という推定を行うと，その分散は

$$\mathrm{var}(\bar{X}-\beta(\bar{Y}+E[Y])$$
$$=\frac{2}{n}(\mathrm{var}(X_1)+\beta^2\mathrm{var}(Y_1)-2\beta\,\mathrm{cov}(X_1, Y_1))$$
$$\geq\frac{2}{n}\mathrm{var}(X_1)(1-\rho_{XY}{}^2)$$

となります．ただし，ρ_{XY} は X と Y の相関係数を表します．この式から，Y をなるべく，X と似せることによって，分散の減少が期待できます．この方法を

制御変量法といいます．

あるいはまた，確率変数 Y_1 の値によって X_1 の条件付き振る舞いが大きく左右されるような状況を考えると，確率論で良く知られた公式

$$E[X]=E[E[X|Y]]$$

という公式を利用して，変化の緩やかなところと急激なところの推定の仕方を変えれば，ばらつきを押さえることができます．このような計算の工夫を条件付推定法といいます．層別抽出法も同じような考え方に基づいています．

4．稀な現象の生起確率を推定する

データ通信におけるビット誤り率とか，信頼性の高い機器の故障率，あるいは企業の倒産確率のように，限りなく0に近い確率をなるべく正確に知りたい，という状況が特別なものでなくなりつつあります．全体のシステムが複雑であれば，たとえ確率モデルを陽に作ったとしても，その解を求めることは容易ではありません．そこで乱数を使ったシミュレーションで何とかならないか，ということになります．

ある稀にしか起こらない事象を A とし，その事象が起きる確率を $P(A)$ とします．さて「稀にしか起こらない」という言葉を無視すれば，$P(A)$ を推定する問題は2章のコイン投げの問題と同じです．したがって，シミュレーションを繰り返し実行して，事象 A が起きた相対度数を求めれば，それが $P(A)$ の推定値で，標準誤差も計算することができます．

しかし事象が「稀にしか起こらない」となると話はやっかいになります．何回繰り返しても相対度数が0ということもあり得るからです．たとえば 10^{-6} くらいの確率でしか起きない事象だとすると，10^6 回の実験を繰り返してようやく1回起きるかどうか，という状況ですから，意味ある結果を得るためにはかなりの時間を費やさなければいけません．$P(A)$ を ξ と書きますと，ξ がほとんど0という場合は，n 回のシミュレーションによる標準誤差は大雑把に言って $\sqrt{\xi/n}$ となります．せめて1桁くらいは正しい値を求めたいとすると，

$$2\sqrt{\frac{\xi}{n}}<\frac{\xi}{10} \Leftrightarrow n>\frac{400}{\xi}$$

となり，ξ が 10^{-6} 程度だとしても4億回の実験が必要になります．

このように，まともに解こうとしてもほとんど不可能な問題に対して，有効な方法として最近よく話題にのぼるのが重点抽出法（importance sampling）です．乱数の取り方を工夫することにより起こりにくい事象を強制的に起こるようにモデルを作り替えて，あとでその起こり方の歪みを調整してやる，という考え方です．

事象 A が起きれば1，さもなければ0という値を取る確率変数を 1_A と書くことにします．このとき，事象 A の起きる確率は

$$\xi=E[1_A(X)]=\int_S 1_A(x)f(x)dx$$

と表すことができます．ただし，$f(x)$ は X の密度関数で，S は $f(x)$ の定義域です．確率変数 X はベクトルでも構いませんが説明を簡単にするためにここではスカラーとしておきます．この定積分をシミュレーションを使って「推定」するためには，密度関数 $f(x)$ にしたがう乱数 $x_1, x_2, \cdots$ をたくさん生成して，

$$\hat{\xi}=\frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n}1_A(x_k)$$

とします．これは相対度数に他なりません．もし事象 A が稀にしか起きない事象であれば，これはほとんど0になってしまいます．また相対標準誤差で考えると，

$$\sqrt{\frac{1}{n}\left(\frac{E[1_A(X)^2]-\xi^2}{\xi^2}\right)}\approx\sqrt{\frac{1}{n\xi}}$$

となり，事象の起こり方が稀になればなるほど，必要なシミュレーションの回数は増えて行くことがわかります．これでは具合が悪いので，どんなに稀な事象でも決められた標本サイズで推定できる方法を考えます．

$f(x)$ とは別の密度関数 $g(x)$ で，$f(x)>0$ ならば $g(x)>0$ であるようなものを選び（絶対連続といいます），

$$\xi=E[1_A(X)]=\int_S 1_A(x)\frac{f(x)}{g(x)}g(x)dx$$

$$\equiv\int_S 1_A(x)L(x)g(x)dx$$

という変形，つまり測度変換を考えます．L は尤度比といいます．最初の式と比べると，f の代わりに g，1_A のかわりに $1_A L$ となっただけですから，この定積分も同じ手順でシミュレーションを使って求めることができるはずです．ただし，今度使う乱数は f ではなく g にしたがう乱数 $y_1, y_2, \cdots$ ということになります．こうして得られる推定値

$$\hat{\xi}_{\mathrm{IS}}=\frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n}1_A(y_k)L(y_k)$$

が θ の不偏推定であることはすぐに確かめることができます．

f の値が小さいところ，つまり確率変数がその値を取りにくいところでの振る舞いが ξ に大きく依存するような場合，g としてその範囲に集中するようなものを取ってやれば，稀な事象を頻繁に起こすことができます．そのとき，L は非常に小さい値になりますから，その重み付き平均を取ることによって，偏りのない推定が可能になる，というのが理屈です．

よく例として引き合いに出されるのが，正規分布の裾の確率です．最近6シグマ，という言葉を良く耳にしますが，平均から6シグマ以上になる確率は上の方法を使ってかなり正確にオーダ評価することができます．EXCEL を使える人は試してみてください．この場合，f は標準正規分布，g はたとえば平均6，分散1の正規分布の密度関数とし，$A=[6,\infty)$ とします．

(2)式に比べて分散がどれくらい減るのかを計算してみましょう．2次モーメントは次の式で計算できます．

$$E[\hat{\xi}_{\mathrm{IS}}{}^2]=\frac{1}{n}E_g[1_A(Y)^2L(Y)^2]$$

$$=\frac{1}{n}E_f[1_A(X)L(X)]$$

期待値の下付き文字は期待値を取る際の密度関数を明記したものです．何も工夫しないシミュレーションの場合に比べて尤度比がかかっている点が異なっています．相対標準誤差で考えると，

$$\sqrt{\frac{1}{n}\left(\frac{E_f[1_A(X)L(X)]-\xi^2}{\xi^2}\right)}$$

となります．L がほぼ ξ のオーダだとすると，これは標本の大きさ n だけに依存し，ξ の値には無関係になります．

それでは，$g(x)$ として，どのような密度関数を取れば尤度比が ξ のオーダになるのでしょうか．最適な測度変換は

$$g(x)=\frac{1_A(x)f(x)}{\int_S 1_A(x)f(x)dx}$$

であることはすぐに分かります．なぜならば，この測度変換により相対標準誤差は0になるからです．そんなにおいしい話があるわけはありません！ $g(x)$ の式の分母は推定したい確率そのものですからこの方法は実現不可能なのです．

実現可能で，良い「推定」が得られる関数の代表として推奨されているのは大偏差（large deviation）原理に基づいた指数変換法を適用したものです．すなわち

$$g(x)=\frac{e^{\theta x}}{M(\theta)}f(x)$$

ただし，$M(\theta)$ は正規化定数で，f のモーメント母関数です．もちろんそれが存在することを仮定します．たとえば待ち行列モデルで，系内客数がある値を超える確率を知りたい場合に，この指数変換法を適用すると，変換されたモデルは，到着率とサービス率を入れ替えたものになります．その結果，システムは非定常となり，目的の事象が頻繁に起きることになりますが，尤度比のおかげで，推定値そのものは正確な値が得られるのです（逆瀬川 1999）．携帯電話の性能評価にこのような考え方を適用することもできます．

残念ながら，この指数変換法は万能ではありません．大きな理由の一つは，大偏差の理論は大数の法則と同様に，漸近的な話だからです．有限で打ち切ったときの性質については何も保証しません．あるいはまた，実際のデータ分析から，極端に裾が重い分布を扱う必要がありますが，その場合モーメント母関数が収束しない（存在しない）ということも考えられます．また，存在するとしても，指数変換した分布を使ったシミュレーションが何もしないシミュレーションの結果より良いという保証は一般には与えられていません．実際にはうまく行くことが多いのですが，ごく簡単な制約の下でも重点抽出法を適用したがために，単純なシミュレーションに比べて分散が大きくなってしまう例を作ることができる，ということが報告されています．したがって，与えられた問題状況を見ながら，その問題に対してうまく対応できる方法を提案する，という経験的なアプローチが必要です（Huang et al. 1999）．これでは安心してどうぞお使いくださいというわけには行きません．また，より複雑なシステムに対して適用した例はあまりなく，まだ，研究者の道具箱に納められた部品の一つ，という位置からは抜け出せていません．

最近，ファイナンスの世界でモンテカルロ法が盛んに適用されるようになっています．企業倒産のように比較的稀な現象の起きる確率を正確に求めることは，リスク管理の基本的な問題です．待ち行列モデルと違い，確率過程として考えると比較的標準的なモデルを使うことが多いので，あるいはこのような方法が，その分野で花を開かせるかもしれませんが，それは今後の研究課題です（Glasserman et al. 2000）．

5. おわりに

この小論では，特集の他の記事を読むための予備知識としてこれだけは知っていた方がよいという数理を中心に書きました．実際にどのようなやり方でモデルを作り，ランダム事象を擬似的に作り出すか，という点に関しては，参考書をご覧ください（たとえば[1~3]）．

数理的に大きな問題でありながら紙数の関係で触れることができなかった問題として擬似乱数があります．欠点を指摘されながらも，依然として多く使われているのは乗算合同法による擬似乱数のようです．シミュレーション専用プログラムがどのような乱数を使っているか，あまり詳しく書かれたものは見ることができませんが，コンピュータの高速化に伴い，乱数を大量に使うシミュレーションが可能になってきたため，今まで安心して使っていた乱数列も見直す必要があるでしょう．最近，といってももう数年経ちますが，M系列法に基づくメルセンヌツイスタと呼ばれる超長周期の擬似乱数が提案されています（松本　2000）．周期が長く，周期全体の数論的性質が良いという点では問題ないのですが，実際に使われる数はその中のほんの一部に過ぎませんから，その一部分の乱数としての性質についてどうか，ということになるといくつかの統計的な検定を適用して不都合なものを見つけ出すという，昔ながらの方法に頼らざるを得ません．

確率変数の期待値は定積分で表されますが，逆に，定積分を適当な確率変数の期待値と読み替えることも可能です．定積分はシンプソン公式などを使って近似値を計算することができますが，次元が増えるにしたがって計算量が指数的に増大するため，計算不能になります．このとき，定積分を期待値と読み替えて，上で説明したように「推定」する方法をモンテカルロ法といいます．モンテカルロ法では空間的になるべく一様に散らばっている点の集合が必要で，点列の順番は結果に影響を及ぼしません．このような点列を準乱数といい，準乱数を用いたモンテカルロ法を準モンテカルロ法といいます．準モンテカルロ法は単純なモンテカルロ法に比べて概ね収束が早い，といわれていますが，問題によってはそうとは言い切れないというケースも報告されており，有望ではあってもまだ研究途上の方法です．これについてはまた改めて説明する機会を待ちたいと思います．

参考文献

（一般的な解説書）

[1] Banks, J., (1998) *Handbook of Simulation.* Wiley-Interscience.

[2] Fishman, G. S., (1996) *Monte Carlo.* Springer.

[3] 森戸，逆瀬川（2000）「システムシミュレーション」朝倉書店

（重点抽出法）

[4] 逆瀬川（1999）待ち行列モデルのシミュレーション（稀な現象の生起確率の推定）「応用数理」9巻，24-34

（新しい流れ）

[5] Glasserman, P., Heiderberger, P., Shahabuddin, P., (2000) Variance reduction techniques for estimating value-at-risk. *Management Science* 46, 1349-1364

[6] Huang, C, Devetsikiotis, M., Lambadaris, I., Kaye, A. R., (1999) Fast simulation of queues with long-range dependent traffic. *Stochastic Models* 15, 429-460

（擬似乱数）

[7] 松本眞（2000）http://www.math.keio.ac.jp/~matumoto/mt.html