

不偏推定値について

阪大理

菊池誠

On unbiased estimations in computer simulations

Dept. of Physics, Osaka Univ.,

Macoto Kikuchi

はじめに

計算機の進歩のおかげで、計算機シミュレーションもいよいよ精密科学となりつつあり、それにとまって統計処理の重要さが改めて認識されるようになってきた。ちょっと前なら、なんとなくこんなところかなと言って決めていた統計誤差なども、かなり注意深い処理をする習慣が定着しつつあるようで、結構なことである。こうして、統計誤差も精密に扱われ、得られる値の信頼性が上がってきたことにより、統計誤差とは違う意味の誤差——偏差が問題になりつつある。本講演では、この偏差の問題を概説したい。なお、本講演の内容は、東大工・伊藤伸泰氏および都立大理・岡部豊氏との共同研究に基づくものである。

誤差と偏差

周知の通り、統計誤差は問題とする物理量の平均値の分散から見積もられる。これをあいまいさなく行なうには、多数回の独立なシミュレーションを実行すればよい。独立なシミュレーションの代わりに一回の run をいくつかの区間に分割し、その間での分散から見積もるという便法が往々にしてとられるが、その場合は分割した区間同士での相関に注意する必要がある。いずれにせよ、ここで暗黙のうちに期待しているのは、平均値そのものが求めようとする物理量の真の値を中心として分布していることである。つい忘れがちなのだが、実はそのためには、計算された平均値が物理量の不偏推定値であると保証されていなければならない。はっきりさせるために、スピン系の言葉を使おう。たとえば、磁化の平均値は明かに真の値の不偏推定値となっている。あるいはエネルギーであってもよいし、それらの任意のモーメントであってもよい。そういった量については、我々は安心してシミュレーションで得られた平均値を真の値の推定値とできる。

一方、帯磁率や比熱はどうか。これらが、不偏推定値になっていないことを指摘したのは、知る限り、Ferrenberg, Landau, and K. Binder[1] が最初である（もしかしたら、とくに他の誰かが指摘していたのかもしれないが、知らない）。問題は帯磁率や比熱がそれぞれ磁化あるいはエネルギーの 2 次のキュムラント（分散）であることに起因する。物理量 Q について n 個の統計的に独立な測定値があるとき、分散の不偏推定値はよく知られているとおり、

$$\sigma^2 = \frac{n}{n-1} \langle (Q^2 - \langle Q \rangle^2)^2 \rangle = \frac{n}{n-1} (\langle Q^2 \rangle - \langle Q \rangle^2).$$

で与えられる。言い換えると、推定値として $\langle (Q^2 - \langle Q \rangle^2)^2 \rangle$ をとったのでは、 $(n-1)/n$ だけ真の値より必ず小さいほうへずれてしまう。補正が必要となる理由は簡単で、 $\langle Q \rangle$ の項が真の値ではなく計算で得られた推定値を用いているからである。当然、帯磁率や比熱についてもこの補正を考慮しなければ、得られる結果は真の値からずれたものとなるだろう。統計誤差の場合は真の値を中心とした分布から生ずるものなので実害はなかった。独立なシミュレーションの数を増やせば、真の値に近づくからである。ところが、今考えている偏差は、ずれの方向が決まっている系統誤差なので、独立なシミュレーションの数を増やしても解消しない。「とうけいごさ」と「けいとうごさ」の違いは、ただひっくり返しただけではないのである。

さて、それでは上で見たように $n/(n-1)$ のファクターをかけて補正してやればいいのかというと、残念ながらことはそう簡単ではない。シミュレーションで得られた時系列中のデータが互いに相関を持っているからである。シミュレーションによって N 個のデータを得たとしても、それらが統計的に独立でない限り、上の式に含まれる測定値の数 n とは同一視できない。したがって、正しい不偏推定値を得るには、統計的自由度つまり独立なデータの数を見積もる必要が生ずる。Ferrenberg らは、独立なデータの数が測定値の数を緩和時間 ($\times 2$) で割ったもので与えられるとした。実はこの処方箋は長時間極限で漸近的に正しいものの、比較的短い時間の測定に対しては正しくないことが我々の研究により明らかになっている。ちなみ

に、比較的短い、と書いたのは当然ながら緩和時間に比べての話であって、シミュレーションの実ステップ数の問題ではない。臨界点近傍やランダム系などの緩和時間が長い問題に対しては、いくら実ステップ数が長くても統計的自由度としては高々数百程度といった小さい値しか得られない場合が往々にしてあることを注意しておきたい。

統計的依存時間

我々は以前、データ間の統計的な独立性の尺度を与える量として統計的依存時間 τ_{dep} を導入した。[2,3] 簡単のために単一モードの指数型緩和を仮定すると、 τ_{dep} は緩和時間 τ と $\Lambda \equiv \exp(-1/\tau)$ を用いて

$$\tau_{\text{dep}} \equiv \frac{1}{2} \left[\frac{1 + \Lambda}{1 - \Lambda} - \frac{2\Lambda(1 - \Lambda^N)}{n(1 - \Lambda)^2} \right]$$

という関係で結ばれており、 $N \rightarrow \infty$ で τ に漸近する。平均値 $\langle Q \rangle$ の分散の期待値は、 Q の分散 σ^2 と測定値の数 N 、それに τ_{dep} により

$$E\{(\langle Q \rangle - q)^2\} = \frac{2\tau_{\text{dep}}}{N} \sigma^2$$

で与えられる。 q は Q の真の値である。測定値が無相関なら、 $N/2\tau_{\text{dep}}$ を独立なデータの数で置き換えれば周知の関係式となる。従って、 $1/2\tau_{\text{dep}}$ が相関による統計的自由度の減少係数を与える。あるいは、統計的に独立なデータの時間間隔が $2\tau_{\text{dep}}$ ステップであるとも解釈できる。従来の解釈では 2τ ステップ毎にひとつの独立なデータが得られると考えられていたが、上の結果は、この時間間隔が全ステップ数 N に依存して変わることを示している。ともかく、統計的自由度としては $N/2\tau_{\text{dep}}$ を用いればよいことが明らかになった。

実例

3次元イジングモデルのシミュレーションからとったふたつの実例をあげる。図1は、臨界点での帯磁率をさまざまなステップ数とサイズで計算したものである(データは文献1からとった)。[3] 臨界点では有限サイズスケールングがなりたつので、有限ステップ数で求められた帯磁率については

$$\chi(L, N) = aL^{\gamma/\nu} \left(1 - \frac{2\tau_{\text{dep}}}{N} \right).$$

というスケールング則がなりたつと期待される。実際、図で明らかとなっており、さまざまなサイズの系がひとつの曲線上にのっている。実線は、統計的依存時間を用いて計算したスケールング関数 $a(1 - 2\tau_{\text{dep}}/N)$ を表す。データとスケールング関数はステップ数の全領域にわたって極めてよく一致し、我々の予想が確かめられた。なお、破線は τ_{dep} のかわりに τ を用いたもので、漸近的にのみ正しい。

実は帯磁率是对称性から単に2次のモーメント $\langle m^2 \rangle$ として計算すればよく、その場合は偏差の問題は生じないはずなので、問題はたいして深刻ではないと言えそうである。一方、比熱はそういった対称性が使えないので、分散を正直に計算せざるを得ず、偏差の問題を逃れるわけにはいかない。図2は、エネルギーの分散をさまざまなステップ数で計算したものである。[4] ステップ数による系統的なずれがはっきりと見られる。同じデータを統計的依存時間 τ_{dep} を用いて補正したのが図3である。短いステップ数でも偏差の効果を正しく補正できていることがわかるだろう。

さて

以上、物理量の偏差の問題を分散を例として概観した。話は高次のキュムラントについても同様なので、よく用いられる4次のキュムラントの計算でも偏差は問題になると思われる。講演では他の量についても触れる予定である。分散についての偏差の大きさは漸近的に $2\tau/N$ であり、ゆっくりとしか小さくならない。したがって、どんなに長いシミュレーションをしても安心できるわけではなく、常に普遍推定値を求めるなんらかの手続きを踏むべきであろう。過去に行なわれた高精度の計算についても、キュムラントに

基づくものは再検討すべきかもしれない。なお、統計的依存時間についての詳細は文献 2-4 を参照していただきたい。

文献

1. A. M. Ferrenberg, D. P. Landau, and K. Binder: J. Stat. Phys. **63** (1991) 867.
2. M. Kikuchi and N. Ito: J. Phys. Soc. Jpn. **62** (1993) 3052.
3. M. Kikuchi, N. Ito, and Y. Okabe: in "Computer Simulations in Condensed Matter Physics (Springer, 1994) 44.
4. 伊藤伸泰、「応用数理」出版予定