逆関数法とボックス・ミュラー法

逆関数法

実数の一様乱数から，確率分布 $f(x)$（a≦x≦b）に従う乱数を発生させる方法を考える。

$$F(x) = \int_a^x f(t)dt$$

とし， $s = F(x)$ とおく。$F(x)$ は累積密度関数であり，

$$F(a) = \int_a^a f(x)dx = 0\text{，}\quad F(b) = \int_a^b f(x)dx = 1$$

が成り立つから，0≦s≦1 である。

a＜x＜b において $f(x) > 0$ とすると， $F(x)$ は増加関数であるから，逆関数 $F^{-1}(x)$ が存在し

$x = F^{-1}(s)$ （0≦s≦1）

となる。さらに， $s = \int_a^x f(t)dt$ の両辺を x で微分すると

$$\frac{ds}{dx} = f(x) \quad \text{であるから} \quad ds = f(x)dx$$

よって， s の区間幅 $ds = f(x)dx$ の乱数が，x の区間幅 dx の乱数になる。

したがって，s が区間 0≦s≦1 における一様乱数であるとき，$x = F^{-1}(s)$ は確率分布 $f(x)$ に従う乱数となる。

例　逆関数法を用いて，一様分布に従う乱数から指数分布に従う乱数を発生させてみよう。

指数分布の確率密度関数 $f(x)$ は

$f(x) = \lambda \exp(-\lambda x)$

であるから，累積密度関数 $F(x)$ は

$$F(x) = \int_0^x f(t)dt = \int_0^x \lambda \exp(-\lambda t)dt = \left[-\exp(-\lambda t)\right]_0^x = 1 - \exp(-\lambda x)$$

である。よって， $s = F(x)$ とおくと

$$x = F^{-1}(s) = -\frac{1}{\lambda}\log(1-s)$$

したがって， $x = -\frac{1}{\lambda}\log(1-s)$ の s に，区間 0≦s＜1 において一様分布に従う乱数を入力すると，x は指数分布 $\lambda \exp(-\lambda x)$ に従う乱数になる。

C 言語によるサンプルコード

```
double sisuu(double r){
    double x=rand()/((double)RAND_MAX+1.0);
    return -log(1.0-x)/r;
}
```

ボックス・ミュラー法

逆関数法を用いて，標準正規分布に従う乱数を発生させてみよう。

x，y が共に標準正規分布 N(0,1)に従うとする。xy 平面上において，微小領域 x〜x+dx，y〜y+dy の範囲の値を取る確率 dp は

$$dp = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\exp(-\frac{x^2}{2})dx \cdot \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\exp(-\frac{y^2}{2})dy$$

$$= \frac{1}{2\pi}\exp(-\frac{x^2+y^2}{2})dx\,dy$$

よって，xy 平面上の微小領域の面積を dS とすると

$$dp = \frac{1}{2\pi}\exp(-\frac{x^2+y^2}{2})dS$$

$x = r\cos\theta$， $y = r\sin\theta$ とおくと

$$x^2 + y^2 = r^2$$

$$dS = \begin{vmatrix} \frac{\partial x}{\partial r} & \frac{\partial x}{\partial \theta} \\ \frac{\partial y}{\partial r} & \frac{\partial y}{\partial \theta} \end{vmatrix} drd\theta = \begin{vmatrix} \cos\theta & -r\sin\theta \\ \sin\theta & r\cos\theta \end{vmatrix} drd\theta = rdrd\theta$$

であるから，微小領域 r～$r+dr$， θ ～ $\theta+d\theta$ の範囲の値を取る確率 dp は

$$dp = \frac{1}{2\pi}\exp(-\frac{r^2}{2})rd\theta\,dr$$

ここで

$$\int_0^r \exp\left(-\frac{t^2}{2}\right)tdt = \left[-\exp\left(-\frac{t^2}{2}\right)\right]_0^r = 1-\exp\left(-\frac{r^2}{2}\right)$$

$$\int_0^\theta \frac{1}{2\pi}dt = \frac{\theta}{2\pi}$$

であるから

$$s = 1-\exp(-\frac{r^2}{2}) \cdots ①,\quad t = \frac{\theta}{2\pi} \cdots ②$$

とおくと，$0 \leqq s < 1$，$0 \leqq t < 1$ であり

$$ds = r\exp(-\frac{r^2}{2}),\quad dt = \frac{d\theta}{2\pi}$$

である。よって

$$dp = \exp(-\frac{r^2}{2})rdr \cdot \frac{d\theta}{2\pi} = ds\,dt$$

したがって，s，t は共に $0 \leqq s < 1$，$0 \leqq t < 1$ の範囲で一様分布に従う。

①より $r = \sqrt{-2\log(1-s)}$，②より $\theta = 2\pi t$ であるから

$$x = r\cos\theta = \sqrt{-2\log(1-s)}\cos 2\pi t \cdots ③$$

$$y = r\sin\theta = \sqrt{-2\log(1-s)}\sin 2\pi t \cdots ④$$

また　　$dp = dsdt$， $dp = \frac{1}{2\pi}\exp(-\frac{x^2+y^2}{2})dxdy$

よって，st 平面（$0 \leqq s < 1$，$0 \leqq t < 1$）の微小領域は③，④によって xy 平面に写像され，それぞれの微小領域の面積を dT， dS とすると

$$dT = \frac{1}{2\pi}\exp(-\frac{x^2+y^2}{2})dS$$

が成り立つ。

ゆえに，st 平面（0≦s＜1，0≦t＜1）の一様乱数は，写像③，④によって xy 平面の 2 次元標準正規分布に従う乱数となるから，x，y はそれぞれ標準正規分布 N(0,1)に従う独立な乱数になる。

C 言語によるサンプルコード

```
void seiki(double *px,double *py){
	double a,b,r,kaku;
	a=rand()/((double)RAND_MAX+1.0);
	b=rand()/((double)RAND_MAX+1.0);
	r=sqrt(-2.0*log(1.0-a));
	kaku=6.2831853071795864769*b;
	*px=r*cos(kaku);
	*py=r*sin(kaku);
	return;
}
```