

Kratka ponovitev Monte Carlo metode

Če uporabimo slučajno spremenljivko z gostoto $p(x)$, potem je formula za matematično upanje

$$E[f] = I[f] = \int f(x)p(x)dx.$$

Cenilka je

$$I_N[f] = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f[X_i],$$

kjer so $X_1, \dots, X_N$ neodvisne slučajne spremenljivke z gostoto $p(x)$.

Posledica KZVŠ je $P\left(\lim_{N \rightarrow \infty} I_N[f] = I[f]\right) = 1$.

Za napako

$$\epsilon_N[f] = I[f] - I_N[f]$$

velja, da je

$$\epsilon_N[f] \approx N^{-1/2} \sigma[f],$$

kjer je

$$\sigma^2[f] = \int (f(x) - I[f])^2 p(x) dx.$$

Redukcija variance 1

Prva metoda za redukcijo variance je *porazdelitev po pomembnosti* (importance sampling). Integral zapišemo kot

$$I[f] = \int f(x) dx = \int \frac{f(x)}{p(x)} p(x) dx$$

in si to predstavljamo kot integral z gostoto p . Sedaj za neodvisne spremenljivke $X_1, \dots, X_N$, porazdeljene z gostoto p , dobimo Monte Carlo cenilko

$$I_N[f] = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \frac{f(X_k)}{p(X_k)}$$

za $I[f]$. Za napako $\epsilon_N[f] = I[f] - I_N[f]$ sedaj velja

$$\epsilon_N[f] \approx \sigma_p N^{-1/2},$$

kjer je

$$\sigma_p^2 = \int \left(\frac{f(x)}{p(x)} - I[f] \right)^2 p(x) dx.$$

Če je $\sigma_p \ll \sigma[f]$, smo pomembno zmanjšali napako. Metoda deluje, če je f/p skoraj konstanta.

Redukcija variance 2

Pri *metodi kontrolnih vrednosti* (control variates) predpostavimo, da poznamo g , ki ima podobno obliko kot f , integral $I[g] = \int g(x)dx$ pa znamo analitično izračunati. Pišemo

$$\int f(x)dx = \int (f(x) - g(x))dx + \int g(x)dx$$

in uporabimo Monte Carlo metodo za izračun integrala $f - g$. Dobimo

$$I_N[f] = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N (f(X_k) - g(X_k)) + I[g].$$

Za napako $\epsilon_N[f] = I[f] - I_N[f]$ sedaj velja

$$\epsilon_N[f] \approx \sigma_{f-g} N^{-1/2},$$

kjer je

$$\sigma_{f-g}^2 = \int \left(\overline{f}(x) - \overline{g}(x) \right)^2 dx$$

in $\overline{f}(x) = f(x) - I[f]$, $\overline{g}(x) = g(x) - I[g]$.

Če je $\sigma_{f-g} \ll \sigma[f]$, smo pomembno zmanjšali napako. Metoda deluje, če je $f - g$ skoraj konstanta.

Redukcija variance 3

Naslednja je *metoda nasprotnih spremenljivk* (antithetic variables). Tu poiščemo dve cenilki, ki sta negativno korelirani in ju seštejemo.

Denimo, da računamo $I[f] = \int_0^1 f(x)dx$. Prva cenilka je

$$I_N[f] = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f[X_i],$$

kjer so $X_1, \dots, X_N$ neodvisne slučajne spremenljivke porazdeljene po $U(0, 1)$. Za drugo cenilko vzamemo nasprotne spremenljivke $X'_i = 1 - X_i$ in dobimo

$$I'_N[f] = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f[X'_i].$$

Njuno povprečje označimo z $C[f] = (I_N[f] + I'_N[f])/2$.

Če je f monotona sta $I_N[f]$ in $I'_N[f]$ negativno korelirana in $C[f]$ ima manjšo varianco kot pa $I_{2N}[f]$ (Rubinstein 1981).

Metodo preprosto posplošimo za računanje integralov po $[0, 1]^d$.

Redukcija variance 4

Naslednja metoda je *razslojevanje* (stratification). V primeru $\Omega = [0, 1]$ območje, po katerem integriramo, razdelimo na M slojev

$$\Omega_k = \left[\frac{k-1}{M}, \frac{k}{M} \right], \quad k = 1, \dots, M.$$

Sedaj za vsak Ω_k definiramo

$$E_k[f] = \frac{1}{|\Omega_k|} \int_{\Omega_k} f(x) dx.$$

Za vsak k izberemo $N_k = N/M$ neodvisnih nasključnih vrednosti $X_{k,i}$ porazdeljenih po $U(\Omega_k)$. Približek za integral je

$$I_S[f] = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^M \sum_{i=1}^{N_k} f(X_{k,i}).$$

Za napako $\epsilon_S[f] = I[f] - I_S[f]$ velja $\epsilon_S[f] \approx N^{-1/2} \sigma_S[f]$, kjer je

$$\sigma_S[f]^2 = \sum_{k=1}^M \int_{\Omega_k} (f(x) - E_k[f])^2 dx.$$

Ker velja $\sigma_S[f] \leq \sigma[f]$, je razslojeno pravilo vedno boljše od navadnega.

Dokaz: Za vsak k je minimum

$$\min_c \int_{\Omega_k} (f(x) - c)^2 dx$$

dosežen pri $c = E_k[f]$. Zato za vsak k velja

$$\int_{\Omega_k} (f(x) - E_k[f])^2 dx \leq \int_{\Omega_k} (f(x) - E[f])^2 dx$$

in potem

$$\sum_{k=1}^M \int_{\Omega_k} (f(x) - E_k[f])^2 dx \leq \sum_{k=1}^M \int_{\Omega_k} (f(x) - E[f])^2 dx = \sigma[f]^2.$$

Nadaljne izboljšave razslojevanja so:

- uporabimo sloje različnih mer in N točk razporedimo po slojih glede na Ω_k ,
- na vsakem sloju Ω_k uporabimo drugačno porazdelitev,
- več točk uporabimo na delih, kjer je f bolj živahna,
- končni rezultat je adaptivna metoda za razslojevanje.

Redukcija variance 5

Pri *metodi prilagojenih momentov* (matching moments) upoštevamo, da je napaka Monte Carlo metode delno tudi posledica tega, da porazdelitev vzorca $X_1, \dots, X_N$ odstopa od porazdelitve z gostoto p . To vidimo tako, da primerjamo prva in druga momenta:

$$m_1 = \int x p(x) dx \quad \neq \quad \mu_1 = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N X_k,$$

$$m_2 = \int x^2 p(x) dx \quad \neq \quad \mu_2 = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N X_k^2.$$

S korekcijo lahko dosežemo, da bosta momenta enaka. Če vzamemo

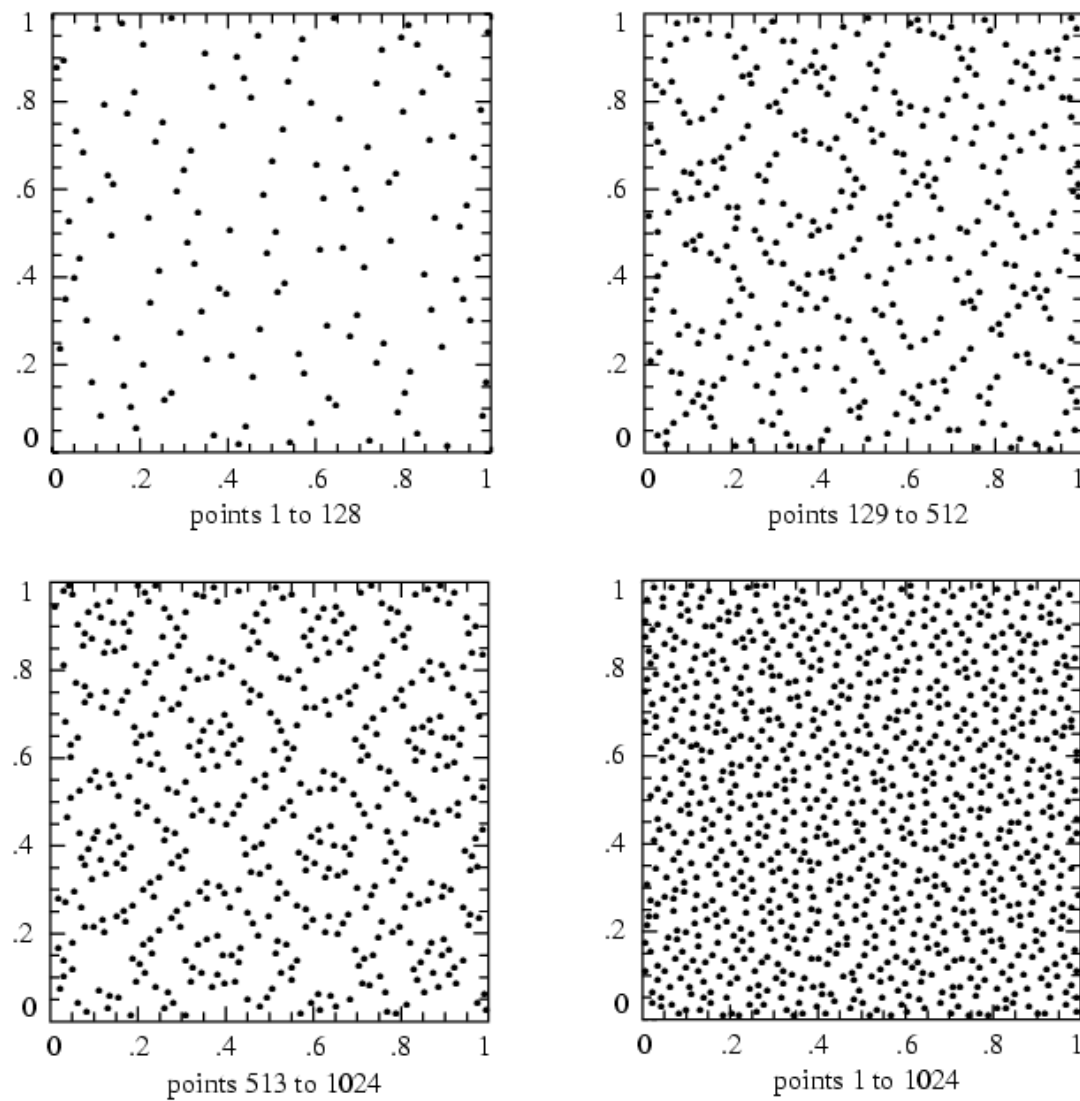
$$Y_k = (X_k - \mu_1) + m_1, \quad k = 1, \dots, N,$$

se ujemata prva momenta, pri

$$Y_k = (X_k - \mu_1) \sqrt{\frac{m_2 - m_1^2}{\mu_2 - \mu_1^2}} + m_1, \quad k = 1, \dots, N,$$

pa prva in druga. Pri uporabi moramo biti pozorni, saj sedaj cenilke niso več nepristranske in ne moremo več uporabiti CLI.

Kvazi naključna števila



Zgornje slike predstavljajo zaporedje točk Sobol'a v $[0, 1]^2$.

Nedoslednost

Merilo za enakomernost zaporedja točk je *nedoslednost* (discrepancy). Za zaporedje N točk $X_1, \dots, X_N$ znotraj $[0, 1]^d$ in $J \subset [0, 1]^d$ definiramo

$$R_N(J) = \frac{\text{število } X_i \in J}{N} - |J|.$$

Sedaj se omejimo le na pravokotnike $J = J(\mathbf{x}, \mathbf{y})$, kjer sta $\mathbf{x}$ in $\mathbf{y}$ antipodni oglišči. Definiramo ∞ in L_2 nedoslednost:

$$D_N = \sup_{\mathbf{x}, \mathbf{y} \in [0, 1]^d} |R_N(J(\mathbf{x}, \mathbf{y}))|,$$

$$T_N^2 = \int_{(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \in [0, 1]^{2d}, x_i < y_i} R_N(J(\mathbf{x}, \mathbf{y}))^2 d\mathbf{x} d\mathbf{y}.$$

Za neskončno zaporedje točk $\{X_i\}$ pravimo, da je *enakomerno porazdeljeno*, če je $\lim_{N \rightarrow \infty} D_N = 0$ in *kvazi naključno*, če je

$$D_N \leq c(\log N)^k N^{-1},$$

kjer sta konstanti c, k neodvisni od N (lahko pa odvisni od dimenzije d).

Če se omejimo na pravokotnike z enim ogliščem v 0, dobimo

$$D_N^* = \sup_{\mathbf{x} \in [0,1]^d} |R_N(J(0, \mathbf{x}))|,$$

$$T_N^{*2} = \int_{[0,1]^d} R_N(J(0, \mathbf{x}))^2 d\mathbf{x}.$$

Velja ocena (Koksma-Hlawka)

$$\epsilon_N[f] \leq V[f] D_N^*,$$

kjer je $V[f]$ variacija f (v eni dimenziji je to kar $\int |f'(x)| dx$).

Izkaže se, da je ocena zelo slaba ($V[f]$ je lahko tudi ∞), nedoslednost pa je dobro merilo za napako integrala.

- Kljub imenu kvazi naključna števila sploh niso naključna.
- Načrtovana so tako, da so po območju razporejena enakomernejše od naključnih števil.
- Primerna so za numerično integriranje, ne pa tudi za simulacijo in optimizacijo.
- Če uporabimo kvazi naključna števila, dobimo *kvazi Monte Carlo metodo*.
- Z njimi lahko dosežemo red konvergence $\mathcal{O}((\log N)^k N^{-1})$ za nek k .

Generiranje kvazi naključnih števil

Najpreprostejši primer je Van der Corputovo enodimenzionalno zaporedje. X_k dobimo tako, da k zapišemo v dvojiški bazi, potem pa cifre prezrcalimo čez decimalno piko.

$$k = (a_m a_{m-1} \cdots a_1 a_0)_2,$$
$$X_k = (0.a_0 a_1 \cdots a_{m-1} a_m)_2.$$

Nekaj prvih števil je:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2}, \\ & \frac{1}{4}, \frac{3}{4}, \\ & \frac{1}{8}, \frac{5}{8}, \frac{3}{8}, \frac{7}{8}, \\ & \frac{1}{16}, \frac{9}{16}, \frac{5}{16}, \frac{13}{16}, \frac{3}{16}, \frac{11}{16}, \frac{7}{16}, \frac{15}{16}. \end{aligned}$$

Posplošitev za d dimenzij je Haltonovo zaporedje, kjer za j -to komponento X_k namesto 2 uporabimo j -to praštevilo. Za nedoslednost Haltonovega zaporedja velja

$$D_N \leq c_d (\log N)^d N^{-1},$$

kjer je konstanta c_d odvisna od d .

Omejitve kvazi Monte Carlo metod

- Ne obstaja nobena teorija za oceno natančnosti $I_N[f]$ kot npr. CLI pri MC metodah.
- Metode so uporabne le za integriranje, ne tudi za simulacijo kakšnega naključnega procesa.
- Če je d velik, KMC metode niso več tako učinkovite. Razlog za to je, da člen $(\log N)^d$ ni več tako zanemarljiv v primerjavi z N^{-1} . Veljati mora

$$N > 2^d.$$

- KMC metode niso tako učinkovite za funkcije, ki niso gladke.
- Neučinkovitost KMC pomeni v praksi le, da se ne obnaša bolje od standardne MC metode.