Случайные квадратурные формулы и метод квази Монте-Карло

Антонов Антон Александрович, 522-я группа

Санкт-Петербургский Государственный Университет
Математико-механический факультет
Кафедра статистического моделирования

Научный руководитель — д.ф.-м.н., проф. **С. М. Ермаков**
Рецензент — к.ф.-м.н., асс. **А. И. Коробейников**

СтатМод

Санкт-Петербург
2011г

Численное интегрирование, метод Монте-Карло

Необходимо найти приближённое значение интеграла

$$J = \int\limits_{\mathfrak{D}} f(\mathbf{x})d\mathbf{x}, \qquad \text{где} \quad \mathbf{x} = (x_1, \ldots, x_s) \in \mathbb{R}^s, s \in \mathbb{N}.$$

- $\mathfrak{D} = [0,1]^s$ — s-мерный единичный гиперкуб, объём 1;
- $\mathfrak{D} = [-1,1]^s$ — s-мерный симметризованный гиперкуб, объём 2^s;

Оценка по методу Монте-Карло:

$$J \approx S_N[f] := \sum_{n=1}^{N} A_n(\mathcal{Q}) f(\mathbf{x}_{(n)}), \qquad R_N[f] := \left| J - S_N[f] \right|,$$

где $S_N[f]$ — квадратурная формула (сумма), $R_N[f]$ — остаток, $\mathcal{Q} = (\mathbf{x}_{(1)}, \ldots, \mathbf{x}_{(N)})$ — с.в., распределённая по закону $U(\mathcal{Q})$.
Типичные требования:

- Несмещённость $\int S_N[f] U(d\mathcal{Q}) = \int\limits_{\mathfrak{D}} f(\mathbf{x}) d\mathbf{x}$;
- Конечность дисперсии $\mathsf{D}\, S_N[f] < +\infty \quad \forall f(\mathbf{x}) \in L_2(d\mathbf{x})$.

Недостатки метода Монте-Карло:

1. вероятностная сходимость остатка порядка $O(1/\sqrt{N})$;
2. большая дисперсия получаемых оценок;
3. затраты на моделирование.

Пусть все N узлов получены из одного при помощи циклической группы преобразований: $x_n = T^n(x_1), n = 2, \dots, N; T^N = T^0 \neq T^n$ при $n < N$.
Тогда $S_N[f]$ — формула с одним свободным узлом.
Для такого класса формул существуют необходимые и достаточные условия несмещённости (Ермаков, Грановский, 1970).
В рамках этой теории рассматривается задача построения формулы, которая была бы точной для семейства функций
$\varphi_1(\mathbf{x}) = 1, \varphi_2(\mathbf{x}) = x_1^2, \dots, \varphi_{s+1}(\mathbf{x}) = x_s^2.$

Утверждение

Не существует формулы с одним свободным узлом, обладающей заданным свойством.

Вывод: необходимо увеличить количество свободных узлов.

Шеститочечная формула

Построена и исследована шеститочечная формула с двумя свободными узлами, точная для константы, первых и вторых степеней по каждой координате:

$$S_6[f] = \frac{2^s}{6}\left(f(\alpha) + f(\beta) + f(\gamma) + f(-\alpha) + f(-\beta) + f(-\gamma)\right),$$

где $\forall\, i$ выполнено $\alpha_i^2 + \beta_i^2 + \gamma_i^2 = 1$.

Свойства формулы:

1. найдена в явном виде совместная плотность распределения свободных узлов;
2. доказана несмещённость оценок;
3. доказана конечность дисперсии оценок для $f(\mathbf{x}) \in L_2(d\mathbf{x})$.

Для набора точек $\mathbf{P} = \{\mathbf{x}_{(1)}, \dots, \mathbf{x}_{(N)}\} \in [0,1]^s$ вводится считающая функция $A([\mathbf{0}, \mathbf{x}), N, \mathbf{P}) := \sum\limits_{n=1}^{N} \chi_{[\mathbf{0},\mathbf{x})}(\mathbf{x}_{(n)})$.

Основные понятия квази Монте-Карло:

- Функция дискрепанса (discrepancy function) $\Delta_{\mathbf{P}} : [0,1]^s \to \mathbb{R}$,
$$\Delta_{\mathbf{P}}(\mathbf{x}) = \frac{A([\mathbf{0}, \mathbf{x}), N, \mathbf{P})}{N} - \prod_{i=1}^{s} \mathbf{x}_{(i)};$$
- $*$-дискрепанс (star discrepancy) $D_N^*(\mathbf{P}) := \sup\limits_{\mathbf{x} \in [0,1]^s} \left|\Delta_{\mathbf{P}}(\mathbf{x})\right|;$

Неравенство Коксмы-Хлавки (Koksma, 1950; Hlawka, 1961)

Если f — функция ограниченной в смысле Харди-Краузе вариации $V(f)$, то $\forall\, \mathbf{x}_{(1)}, \dots, \mathbf{x}_{(N)} \in [0,1]^s$

$$\left| \int\limits_{[0,1]^s} f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} - \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} f(\mathbf{x}_{(n)}) \right| \leqslant V(f) D_N^*(\mathbf{x}_{(1)}, \dots, \mathbf{x}_{(N)}).$$

- L_2-дискрепанс (L_2-discrepancy) $L_{2,N}(\mathbf{P}) := \left(\int\limits_{[0,1]^s} \left|\Delta_{\mathbf{P}}(\mathbf{x})\right|^2 d\mathbf{x} \right)^{1/2}$;

Теорема об L_2-дискрепансе (Warnock, 1972)

Для произвольного набора точек в $[0,1]^s$ выполнено

$$(L_{2,N}(\mathbf{P}))^2 = \frac{1}{3^s} - \frac{2}{N} \sum_{n=1}^{N} \prod_{i=1}^{s} \frac{1 - \mathbf{x}_{(n)i}^2}{2} + \frac{1}{N} \sum_{m,n=1}^{N} \prod_{i=1}^{s} \min(1 - \mathbf{x}_{(m)i}, 1 - \mathbf{x}_{(n)i}).$$

Особенности метода:

- детерминированная сходимость остатка порядка $O(\frac{\log^s N}{N})$ (например, точки Холтона, используемые в работе);
- несовместимость с схемами Монте-Карло, основанными на неравномерном распределении.

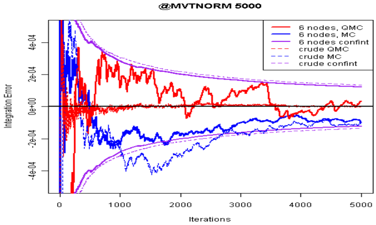
Вывод: необходимо разработать алгоритм моделирования для шеститочечной формулы, совместимый с квазислучайными точками.

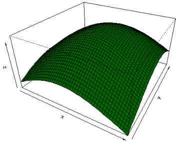
Предложен алгоритм:

1. Монте-Карло: ξ_1, $\xi_2 \sim U[0,1]$ и независимы;
   квази Монте-Карло: $\xi_1 \sim Halton(p_i)$, $\xi_2 \sim Halton(p_j)$, $i \neq j$;
2. $z = 2\xi_1 - 1$, $\varphi = 2\pi\xi_2$;
3. $r = \sqrt{1 - z^2}$;
4. $x = r\cos\varphi$, $y = r\sin\varphi$.

Обнаружен “эффект правильной размерности”: если размерность выбранных квазислучайных точек меньше, чем размерность совместного распределения в схеме Монте-Карло, то оценка интеграла расходится.

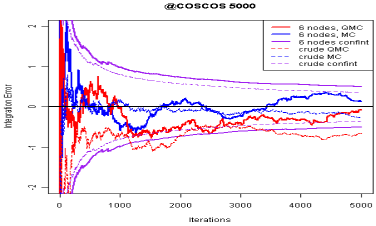
Вычислительные результаты

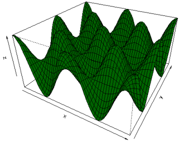




Пример 1: полусумма двух нормальных плотностей

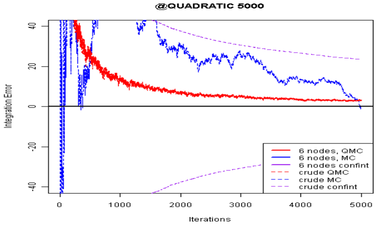
s, N	10, 30000	
R_N	QMC	QMC6
$L_{2,N}$	QMC6	MC6



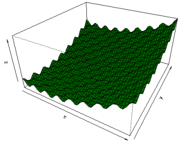


Пример 2: прямое произведение косинусов

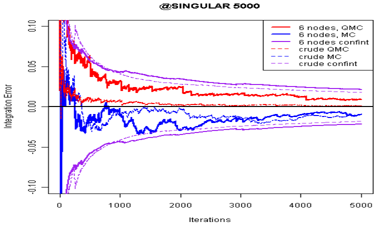
s, N	10, 30000	
R_N	QMC6	MC6
$L_{2,N}$	QMC6	MC6



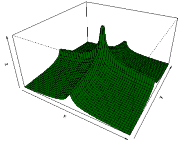
Пример 3: квадратичная функция с периодикой



s, N	10, 30000	
R_N	QMC6	MC6
$L_{2,N}$	QMC6	MC6



Пример 4: функция с полюсом



s, N	3, 30000	
R_N	QMC	QMC6
$L_{2,N}$	QMC	QMC6

Результаты первой части работы

1. Построена шеститочечная формула с двумя свободными узлами для метода Монте-Карло;
2. исследованы свойства формулы (матожидание и дисперсия оценок, точность и пр.);
3. разработан алгоритм моделирования, совместимый с методом квази Монте-Карло;
4. проведены серии тестов, выработаны рекомендации по использованию формулы;
5. обнаружен и сформулирован “эффект правильной размерности”.

Вторая часть работы посвящена изучению этого эффекта в рамках основных методов моделирования распределений.

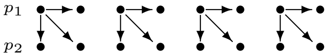
Моделирование: метод обратной функции

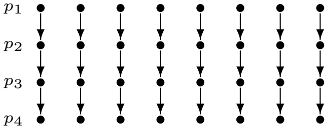
Алгоритм моделирования двумерного нормального распределения (ξ, η) с нулевым средним и единичной ковариационной матрицей:

$$\xi = \sqrt{-2\log\alpha_1}\cos\alpha_2, \qquad \eta = \sqrt{-2\log\alpha_1}\sin\alpha_2, \qquad \text{где } \alpha_1, \alpha_2 \sim U[0,1].$$

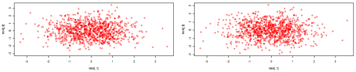
Если $s = 4$, то возможные варианты формирования координат на основе квазислучайных точек таковы:

- Размерность 1: 

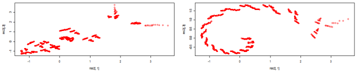
- Размерность 2: 

- Размерность 4: 

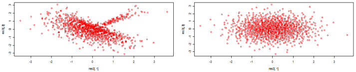
Результаты моделирования, $N = 1000$



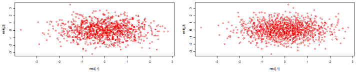
MC



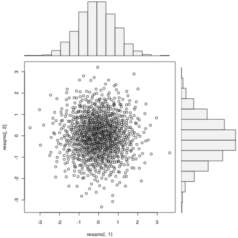
QMC, размерность 1



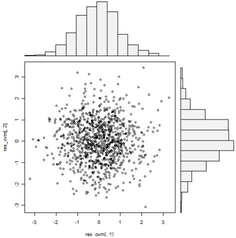
QMC, размерность 2



QMC, размерность 4



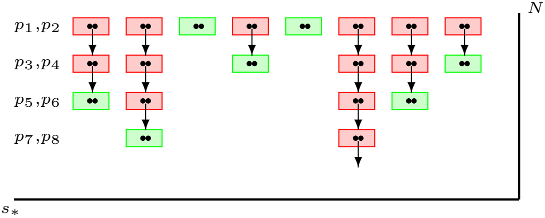
QMC, “правильная размерность”



“Средняя выборка” MC

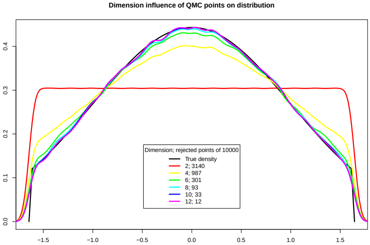
Моделирование: метод отбора

Предложен метод, использующий “эффект правильной размерности”: каждый раз при отсеивании точки берётся пара из новых холтоновских размерностей.

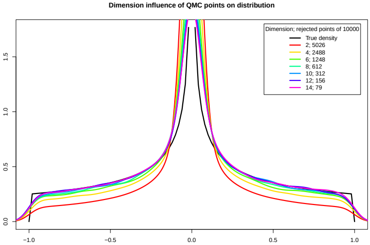


Ограничивающая размерность s_* подбиралось таким образом, чтобы количество оборванных цепочек было не слишком велико.
Помимо проверки предложенного метода, также исследована зависимость результатов моделирования от ограничивающей размерности.

Параметры: $N = 10000$, $s_* = 2, 4, \ldots, 14$. Критерии качества: оценки плотности и критерий хи-квадрат.



Сужение нормальной плотности



Симметричное бета-распределение

	$s_* = 2$	$s_* = 4$	$s_* = 6$	$s_* = 8$	$s_* = 10$	$s_* = 12$	$s_* = 14$
$g(x), \chi^2$	7.0e-4	570.0	1333.2	1701.2	1991.1	2160.1	2205.2
$g(x)$, p	1	0	0	0	0	0	0
$f(x), \chi^2$	2003.6	504.6	115.7	39.0	10.0	2.3	1.6
$f(x)$, p	0	0	0	7.1e-8	0.04041	0.6819	0.8085

Зависимость результатов от s_*, критерий хи-квадрат, $df = 4$

Рассмотрен специальный метод моделирования распределения, задаваемого плотностью

$$f(x) = \begin{cases} \lambda(x) e^{-\int\limits_0^x \lambda(t)\,dt}, & x \geqslant 0, \\ 0, & x < 0, \end{cases}$$

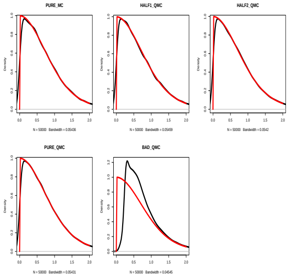
где $\lambda(t)$ — неотрицательная, интегрируемая на любом конечном промежутке вида $[0, T]$ функция, такая что $\lim\limits_{T \to +\infty} \int\limits_0^T \lambda(t)\,dt = +\infty$.

Алгоритм:

1. Ищем A, такое, что $\lambda(x) \leqslant A$; ξ — случайная величина, заданная плотностью $g(x) = A \exp(-Ax), x \geqslant 0$;
2. $\xi_1, \xi_2, \ldots$ и $\alpha_1, \alpha_2, \ldots \sim U[0, 1]$ независимы;
3. Для величин $\eta_i = \sum\limits_{j=1}^{i} \xi_j$ проверяем $A\alpha_i \leqslant \lambda(\eta_i)$;
4. Если τ — первый момент, когда неравенство выполнено, то величина η_τ имеет искомое распределение.

Сравнивались следующие варианты:

- Обычный MC;
- Гибрид MC и QMC, квазислучайные точки использованы для реализаций α;
- Гибрид MC и QMC, квазислучайные точки использованы для реализаций ξ;
- QMC с соблюдением правильной размерности;
- QMC без соблюдения правильной размерности.



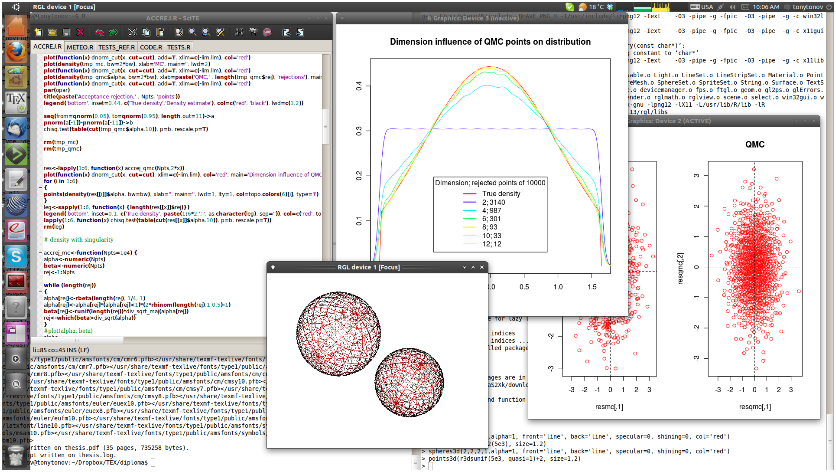
Моделирование показательного распределения с переменным параметром, $N = 10000$.

Результаты второй части работы

Исследован обнаруженный “эффект правильной размерности”, а именно:

1. предложен переход к квази Монте-Карло в методах обратной функции и отбора;
2. в рамках метода отбора введено и исследовано понятие “ограничивающей размерности”;
3. разобран специальный метод моделирования показательного распределения с непостоянным параметром;
4. предложенный переход проверен в сочетании с различными моделируемыми распределениями.

R framework



2.11.0-2.13.0 + 'randtoolbox', 'rgl', 'nortest', 'UsingR', 'mvtnorm'