Метод Монте-Карло для вычисления матричной экспоненты

Павловский Евгений Николаевич, гр. 522

Санкт-Петербургский государственный университет
Математико-механический факультет
Кафедра статистического моделирования

Научный руководитель: д.ф.-м.н. Ермаков С.М.
Рецензент: аспирант Самахова М.А.

Санкт-Петербург
2008г.

Постановка задачи:

- построить и исследовать алгоритм Монте-Карло вычисления матричной экспоненты
- рассмотреть приложения к системам дифференциальных уравнений и уравнениям в частных производных

План изложения:

- вычисление аналитических функций от матриц
- вычисление матричной экспоненты
- системы дифференциальных уравнений
- уравнения в частных производных (метод “прямых”)

Вычисление аналитических функций от матриц

Задача: построить несмещенные оценки для функционалов $\langle u; f(\mathbf{A})v\rangle$

- аналитическая функция $f(\lambda) = \sum\limits_{n=0}^{\infty} c_n \lambda^n$
- $\mathbf{A} = \| \, a_{i,j} \, \|_{i,j=1}^{d}$ — матрица $d \times d$
- векторы $u = (u_1, \ldots, u_d)^{\mathrm{T}}$, $v = (v_1, \ldots, v_d)^{\mathrm{T}}$

Условие мажорированной сходимости: сходимость ряда $\bar{f}(\bar{\mathbf{A}})$

- аналитическая функция $\bar{f}(\lambda) = \sum\limits_{n=0}^{\infty} |c_n| \lambda^n$
- $\bar{\mathbf{A}} = \| \, |a_{i,j}| \, \|_{i,j=1}^{d}$ — матрица $d \times d$

Однородная цепь Маркова: $\xi_0, \xi_1, \ldots, \xi_n, \ldots$

- $\{1, \ldots, d+1\}$ — состояния цепи
- $\pi = (\pi_1, \ldots, \pi_d, 0)$ — начальное распределение
- $\mathcal{P} = \| \, p_{i,j} \, \|_{i,j=1}^{d+1}$ — переходная матрица
- $p_{d+1,d+1} = 1$; $g_i = p_{i,d+1}$, $i = 1, 2, \ldots, d$
- $\tau + 1 = \min\{n \geq 1 : \xi_n = d+1\}$ — время “жизни” цепи; $\mathbf{P}(\tau < \infty) = \mathbf{1}$

Несмещенные оценки

1. Аналог оценки "по поглощению":

$$\zeta_{abs} = c_\tau \frac{u_{\xi_0}}{\pi_{\xi_0}} \frac{a_{\xi_0\xi_1} \dots a_{\xi_{\tau-1}\xi_\tau}}{p_{\xi_0\xi_1} \dots p_{\xi_{\tau-1}\xi_\tau}} \frac{v_{\xi_\tau}}{g_{\xi_\tau}}$$

   Условия согласования:
   - $p_{ij} > 0$, если $a_{ij} \neq 0$
   - $\pi_i > 0$, если $u_i \neq 0$
   - $g_i > 0$, если $v_i \neq 0$

2. Аналог оценки "по столкновениям":

$$\zeta_{coll} = \sum_{k=0}^{\tau} c_k \frac{u_{\xi_0}}{\pi_{\xi_0}} \frac{a_{\xi_0\xi_1} \dots a_{\xi_{k-1}\xi_k}}{p_{\xi_0\xi_1} \dots p_{\xi_{k-1}\xi_k}} v_{\xi_k}$$

   Условия согласования:
   - $p_{ij} > 0$, если $a_{ij} \neq 0$
   - $\pi_i > 0$, если $u_i \neq 0$

Основные результаты:

- найдена явная формула для дисперсии оценок "по поглощению"

$$\mathbf{D}\zeta_{abs} = \langle u_\pi ; \widetilde{f}\,(\mathbf{A}_\mathcal{P}) v_g \rangle - \langle u; f(\mathbf{A}) v \rangle^2$$

- найдено достаточное условие конечности дисперсии оценок "по столкновениям" — сходимость ряда $\widetilde{f}\,(\mathbf{A}_\mathcal{P})$

Обозначения:

- аналитическая функция $\widetilde{f}\,(\lambda) = \sum\limits_{n \geq 0} c_n^2 \lambda^n$
- $\mathbf{A}_\mathcal{P} = \|\, a_{ij}^2 / p_{ij} \,\|_{i,j=1}^{d}$ — матрица $d \times d$
- векторы $u_\pi = (u_1^2/\pi_1, \ldots, u_d^2/\pi_d)^{\mathrm{T}}$, $v_g = (v_1^2/g_1, \ldots, v_d^2/g_d)^{\mathrm{T}}$

Вычислительная задача: построение несмещенных оценок $\langle u; \exp(\mathbf{A}t)v\rangle$

1.
- оценка: $\zeta = \dfrac{t^\tau}{\tau!}\dfrac{u_{\xi_0}}{\pi_{\xi_0}}\dfrac{a_{\xi_0\xi_1}\cdots a_{\xi_{\tau-1}\xi_\tau}}{p_{\xi_0\xi_1}\cdots p_{\xi_{\tau-1}\xi_\tau}}\dfrac{v_{\xi_\tau}}{g_{\xi_\tau}}$
- второй момент: $\mathbf{E}\zeta^2 = \langle u_\pi; J_0\left(2\sqrt{-\mathbf{A}_{\mathcal{P}}t}\right)v_g\rangle$

2.
- оценка: $\eta = e^s \dfrac{t^\mu}{s^\mu}\dfrac{u_{\xi_0}}{\pi_{\xi_0}}\dfrac{a_{\xi_0\xi_1}\cdots a_{\xi_{\mu-1}\xi_\mu}}{p_{\xi_0\xi_1}\cdots p_{\xi_{\mu-1}\xi_\mu}}v_{\xi_\mu}I_{\{\tau\geq\mu\}}$
- второй момент: $\mathbf{E}\eta^2 = e^s\langle u_\pi; \exp(\dfrac{t^2}{s}\mathbf{A}_{\mathcal{P}})v^2\rangle$

  μ имеет распределение Пуассона с параметром s

Было выяснено:

- условие мажорированной сходимости всегда выполнено
- дисперсии оценок всегда конечны
- асимптотика вторых моментов при $t\to\infty$ (экспоненциальный рост)

- Система: $\dfrac{dx}{dt} = \mathbf{A}(t)x + f(t), \quad x|_{t=0} = x_0$
- Результат: получены несмещенные оценки для $\langle u; x(t)\rangle$
- Достоинство: меньшая трудоемкость при больших размерностях
- Недостаток: экспоненциальный рост дисперсии при $t \to \infty$

Рекуррентный алгоритм Монте-Карло

Система: $\frac{dx}{dt} = \mathbf{A}x, \; x|_{t=0} = x_0$ Обозначения: $x_k = \exp(\mathbf{A}t_k)x_0, \; t_k = k\Delta t$

- ξ_k — решение системы $\frac{dx}{dt} = \mathbf{A}x, \; x|_{t=0} = \xi_{k-1}$ методом Монте-Карло (количество независимых испытаний N_k), $\xi_0 = x_0$
- $\varepsilon_k = \xi_k - x_k$ – ошибка вычисления x_k

Определение

Если найдется $M > 0$, что выполняется условие $\sup_n \|\mathbf{Cov}\,(\varepsilon_\mathbf{n})\| \leq M$, то алгоритм называется *стохастически устойчивым.*

Результаты:

- $\|\exp(\mathbf{A}\Delta t)\| < 1$ — критерий стохастической устойчивости
- можно считать, что $N_k = 1, k \in \mathbb{N}$
- построены и исследованы на стохастическую устойчивость рекуррентные процедуры для систем неоднородных уравнений

Система: $\frac{d^2x}{dt^2} + \mathbf{A}x = f(t), \quad x|_{t=0} = x_0, \quad \left.\frac{dx}{dt}\right|_{t=0} = \dot{x}_0$

Результаты:

1. получены несмещенные оценки для $\langle u; x(t) \rangle$
2. получены формулы для второго момента оценок
3. рекуррентный алгоритм, вычисляющий на каждом шаге решение и его производную стохастически неустойчив

Метод "прямых": дискретизация

- Граничная задача:

$$u_t = \mathcal{L}(u) + f(x;t), \quad G = \{0 \le x \le 1, t \ge 0\} \subset \mathbb{R}^2$$
$$u(x;0) = \varphi(x), u(0;t) = \psi_0(t), u(1;t) = \psi_1(t)$$
$$\mathcal{L}(u) = a(x;t)u_{xx} + b(x;t)u_x + c(x;t)u$$

- Дискретизация: аппроксимация производных u_{xx} и u_x разностями в точках $x_n = nh, \quad n = 1, \ldots, N-1; \quad N \in \mathbb{N}, \quad Nh = 1$
- Итог: сведение к решению системы вида

$$\frac{dy}{dt} = \mathbf{B}(t;h)y + g(t)$$

- Аппроксимация системы: Δt — шаг по времени, $t_k = k\Delta t$
  На k-м шаге решается система

$$\frac{dy}{dt} = \mathbf{B}(t_{k-1};h)y + g(t)$$

Условия стохастической устойчивости

1. Общее достаточное условие:
   - $\inf\limits_{G} a(x;t) \geq a > 0$
   - $\sup\limits_{G} c(x;t) \leq -c < 0$
   - $\sup\limits_{G} |b(x;t)| \leq M$
2. Постоянные коэффициенты. Критерий:
   - $4ac - b^2 < 4\pi^2 a^2$
   - $a > 0$
3. Коэффициенты не зависят от x. Достаточное условие:
   - $\inf\limits_{t} a(t) \geq a > 0$
   - $\sup\limits_{t} \left(c(t) - \pi^2 a(t) - \frac{b^2(t)}{4a(t)} \right) < 0$

Выводы

1. Выявлены особенности обобщения схемы Неймана-Улама на случай вычисления матричного ряда
2. Для случая вычисления матричной экспоненты:
   - построены и исследованы оценки, отличные от аналогов оценок схемы Неймана-Улама
   - выявлены особенности стохастического алгоритма
   - предложены и исследованы способы преодоления сложностей, возникающих при использовании стохастического алгоритма
3. Впервые был построен и исследован стохастический метод “прямых”