

HET TOEPASSEN VAN IMPORTANCE SAMPLING BIJ MONTE CARLO
SIMULATIE VAN REKENMODELLEN OP STATISTISCHE GRONDSLAG.

Eindhoven oktober 1982

Dr.Ir. A. de Kraker

THE rapport WE 82.11

Samenvatting:

In dit rapport wordt het toepassen van Importance Sampling bij Monte Carlo Simulatie van op de statistiek gebaseerde numerieke modellen geëvalueerd. Tevens worden globale wegen aangegeven om te komen tot een zo optimaal mogelijk gebruik van deze techniek.

	Pag.
<u>INHOUD:</u>	
Inleiding	1
1. Directe Monte Carlo simulatie	2
1.1 Numerieke resultaten	6
2. Monte Carlo simulatie met Importance Sampling	10
3. Keuze van de importance functie(s)	17
3.1 probleem I	17
3.2 probleem II	25
4. Automatische keuze van de importance functie	30
Literatuur	35

1.

Inleiding.

Bij de analyse van (dynamische) problemen binnen de werktuigbouwkunde heeft men in toenemende mate te maken met problemen waarbij de probleemvariabelen niet langer meer als deterministische variabelen mogen worden beschouwd maar waarbij het random karakter van deze variabelen in de beschouwing moet worden betrokken. Voorbeelden hiervan zijn bezwikkeld analyses van statisch belaste konstrukties en de analyse van de overdrachtsfuncties bij complexe dynamische problemen (FFT-technieken).

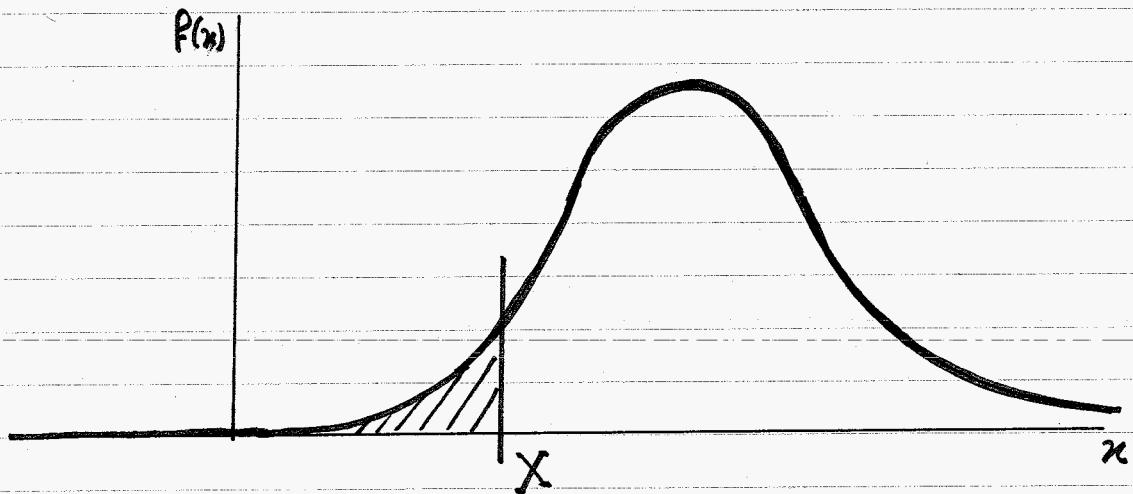
Bij al deze problemen speelt het werken met numerieke modellen een belangrijke rol. Slechts voor enkele zeer eenvoudige problemen kan daarbij gebruik gemaakt worden van oplossingen in gesloten vorm. In de meeste gevallen zullen alleen numerieke oplossingsmethoden uitkomst bieden. Een zo'n numerieke methode voor de analyse van deze op statistische grondslag gebaseerde rekenmodellen is de Monte Carlo methode. Het zonder meer toepassen van deze methode kan in veel gevallen tot grote rekentijden leiden waardoor de methode onpraktisch wordt. Uitkomst biedt in dat geval de zogenaamde Importance Sampling. Aan de hand van twee eenvoudige voorbeelden zal de Monte-Carlo simulatie methode en de Importance Sampling techniek worden toegelicht. Verder zal nagegaan worden op welke wijze een zo optimaal mogelijk gebruik van deze Importance Sampling techniek mogelijk is.

1. Directe Monte Carlo simulatie

Het toepassen van directe Monte-Carlo simulatie zal aan de hand van twee eenvoudige problemen worden toegelicht. Numerieke resultaten voor elk van deze twee twee problemen zullen worden gepresenteerd.

Probleem I

Het uitgangspunt voor dit probleem vormt de in figuur 1 geschatte kansdichtheidsfunctie $f(x)$:



Figuur 1. Kansdichtheidsfunctie $f(x)$.

Het probleem is het bepalen van de kans dat de random variabele x kleiner is dan een zekere grenswaarde X , dus:

$$P_p = P[x < X] = \int_{-\infty}^X f(x) dx = F(X) \quad (1.1)$$

(gearceerd oppervlak)

$F(x)$ is hierbij de kansverdelingsfunctie van de random variabele x .

-3-

Indien we voor $F(x)$ uitgaan van een normale kansdichtheidsfunctie met gemiddelde μ en standaarddeviatie σ waarbij $\mu = 10$, $\sigma = 2$ vinden we in tabellen:

$$X = 6.7 \rightarrow p_F = P[x \leq X] = 0.049471$$

$$X = 3.0 \rightarrow p_F = P[x \leq X] = 0.00023263$$

In het hiernavolgende zal aangegeven worden op welke wijze deze grootheden p_F bepaald kunnen worden indien we gebruik maken van Directe Monte Carlo simulatie.

We moeten bepalen:

$$p_F = \int_{-\infty}^X F(x) dx = \int_{-\infty}^X dF = F(X) \quad (1.2)$$

Indien we N realisaties x_i voor de random variabele x met kansdichtheidsfunctie $F(x)$ creëren kan p_F benaderd worden door:

$$\bar{p}_F = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \begin{cases} 1 & \text{als } x_i \leq X \\ 0 & \text{als } x_i > X \end{cases} \quad (1.3)$$

Definiëren we de stappunctie $U_X(x)$ zodanig dat

$$U_X(x) = \begin{cases} 1 & \text{als } x < X \\ 0 & \text{als } x > X \end{cases}$$

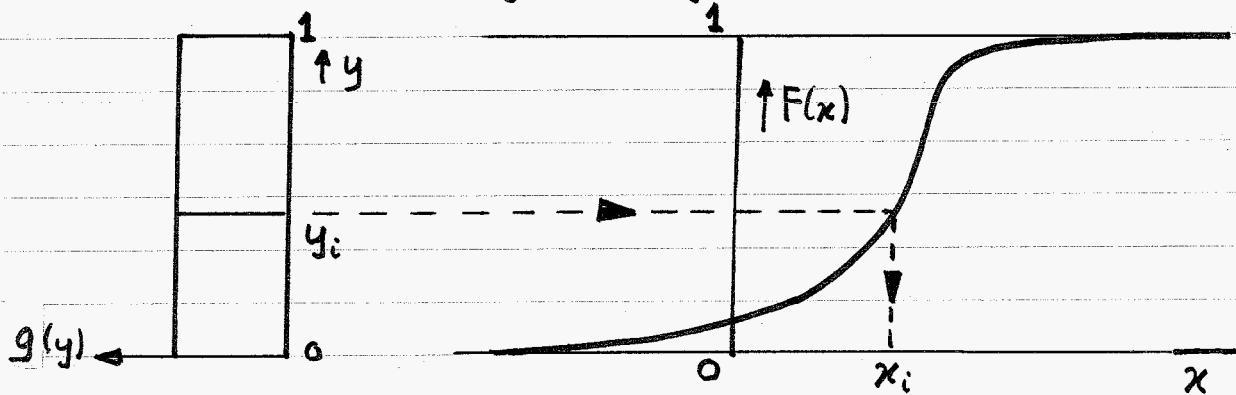
dan levert directe Monte Carlo simulatie dus de benadering:

$$\bar{p}_F = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N U_X(x_i) \quad (1.4)$$

In woorden : Creëer een aantal (N) realisaties voor de random variabele x en bepaal het gedeelte waarvoor geldt: $x \leq X$.

Intermezzo.

In de praktijk geschiedt het creëren van een realisatie voor de random variabele x met kansdichtheidsfunctie $f(x)$ veelal op de in Figuur 2 geschetste wijze.



Figuur 2. "Trekken" van random getallen.

We gaan uit van een uniforme kansdichtheidsfunctie $g(y)$. Een hierop gebaseerde random generator levert een waarde y_i in het interval $[0, 1]$. Via de inverse van de bij $f(x)$ behorende kansverdelingsfunctie $F(x)$ wordt de realisatie x_i bepaald. Voor deze inverse functie wordt over het algemeen gebruik gemaakt van een nauwkeurige polynoombenadering $x = x(F)$.

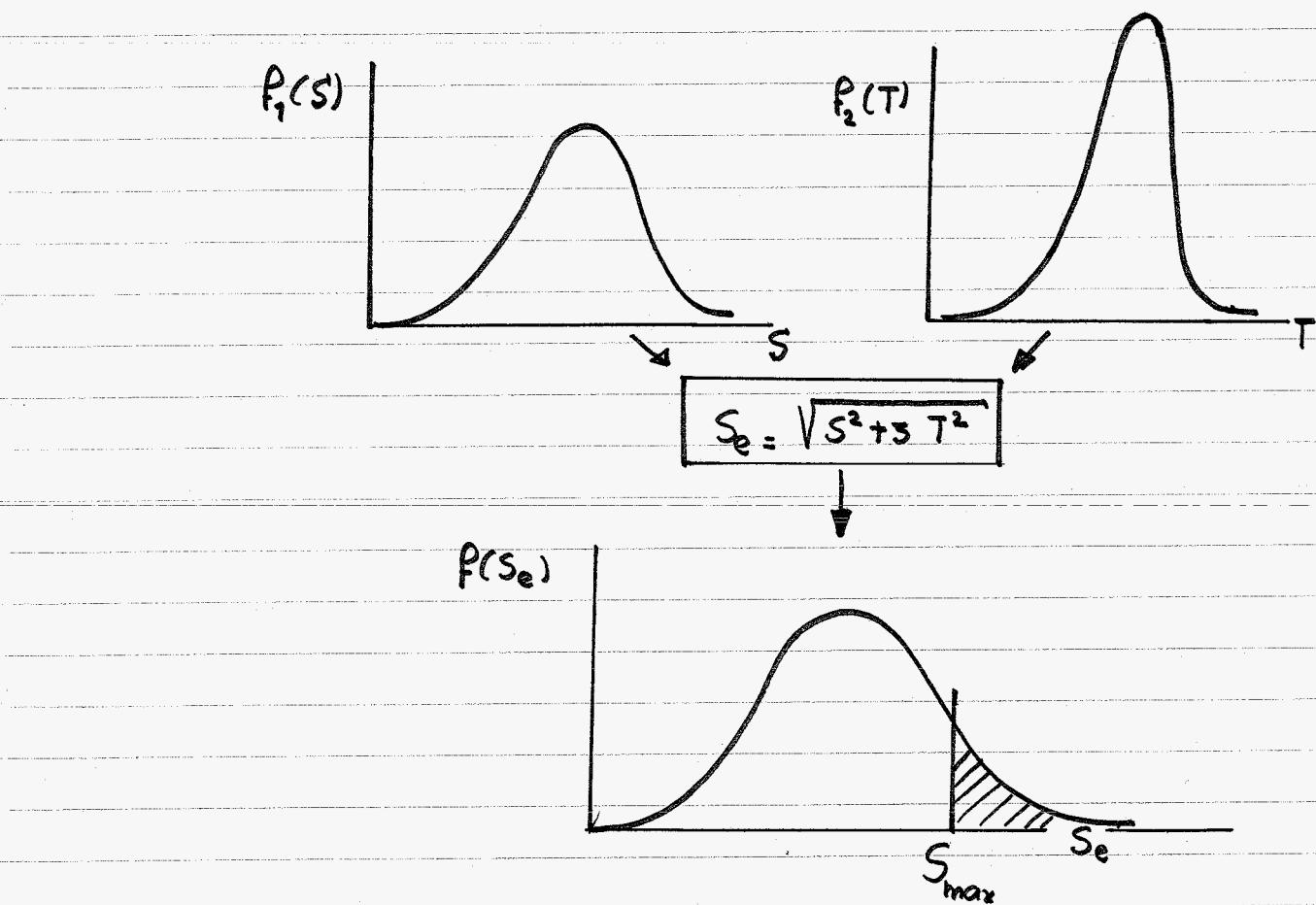
We keren terug naar probleem I. Voor $X=6.7$ is $p_p \approx 0.05$ dus voor een realisatie x_i geldt dat de kans dat $x_i \leq X$ is ongeveer $\frac{1}{20}$. Willen we via Monte Carlo simulatie voor het bereiken van voldoende nauwkeurigheid 100 treffers realiseren dan zullen we dus ca 2000 trekkingen moeten verrichten. Voor $X=3.0$ komt dit op ca $4.3 \cdot 10^6$ trekkingen !

Probleem II.

We beschouwen het volgende probleem :

$$S_e = \sqrt{S^2 + 3T^2} \quad (1.5)$$

n.l. het bepalen van een effectieve spanning S_e uit de normaalspanning S en de schuifspanning T . S en T zijn hierbij random variabelen met kansdichtheidsfuncties $f_1(S)$ respectievelijk $f_2(T)$. Ook S_e is dus een random variabele met kansdichtheidsfunctie $f(S_e)$.



Figuur 3. Bepaling effectieve spanning.

Gevraagd wordt de kans te bepalen dat de "konstuktie faalt" m.a.w. de kans dat S_e groter is dan een zekere toelaatbare spanning S_{max} :

$$p_p = P[S_e > S_{max}] = \int_{S_{max}}^{\infty} f(S_e) dS_e \quad (1.6)$$

Voor willekeurige kansdichtheidsfuncties $f_1(S)$, $f_2(T)$ is het over het algemeen niet eenvoudig de kansdichtheidsfunctie $P(S_e)$ te bepalen en daarmee p_p uit te rekenen. Monte Carlo simulatie biedt hierbij uitkomst.

Uitgaande van de kansdichtheidsfunctie $g_1(S)$ respectievelijk $g_2(T)$ worden N paar realisaties s_i, t_i getrokken. Via relatie 1.5 kunnen hieruit N realisaties $S_e(i)$ worden bepaald.

Een benadering voor p_p kan nu worden bepaald via:

$$\bar{p}_p = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N U_S[S_e(i)] \quad (1.7)$$

waarbij $U_S[S_e(i)] = \begin{cases} 1 & \text{als } S_e(i) > S_{\max} \\ 0 & \text{als } S_e(i) \leq S_{\max} \end{cases}$ (1.8)

1.1 Numerieke resultaten bij directe Monte Carlo simulatie.

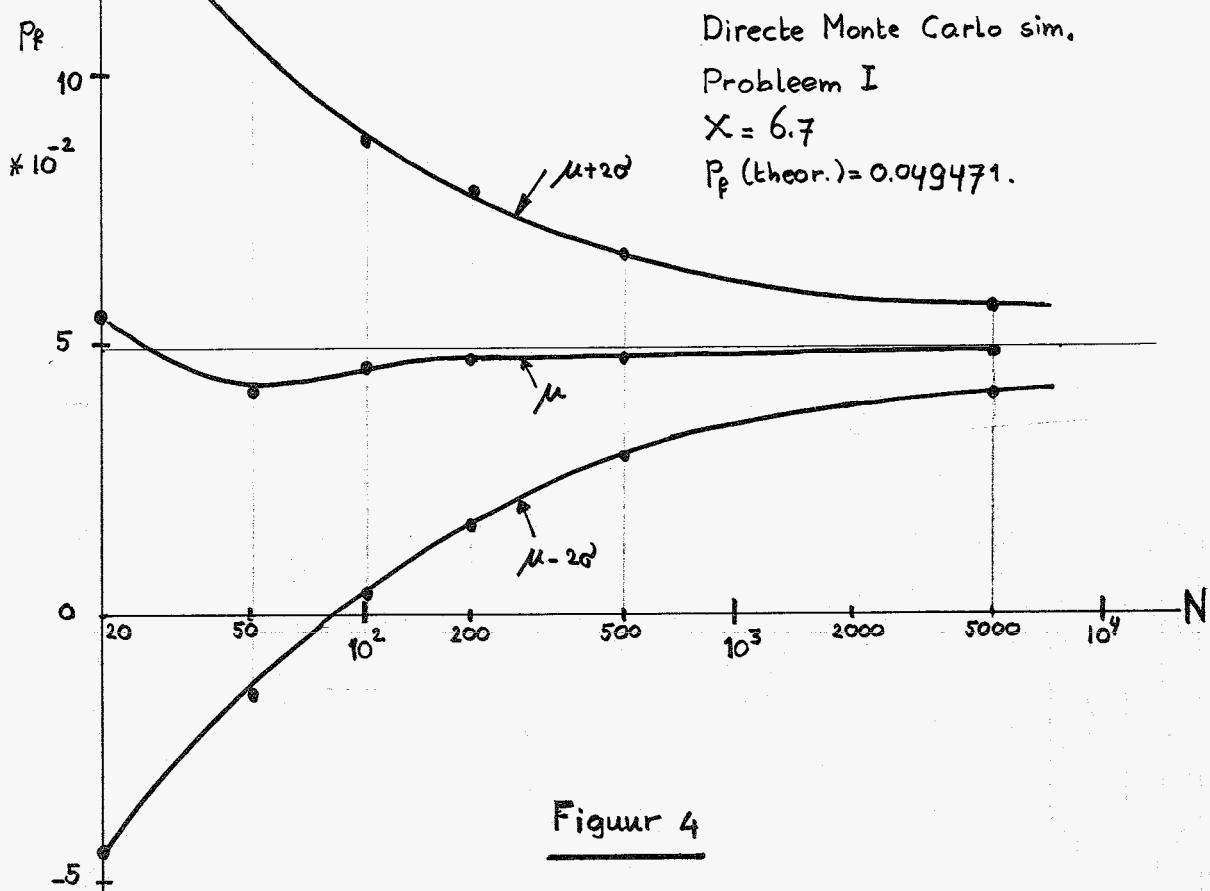
Probleem I

Via Monte Carlo simulatie is voor de gegeven normale kansdichtheidsfunctie $f(x)$ [$\mu = 10$, $\sigma = 2$] voor $X = 6.7$ en $X = 3.0$ de gevraagde grootheid p_p bepaald.

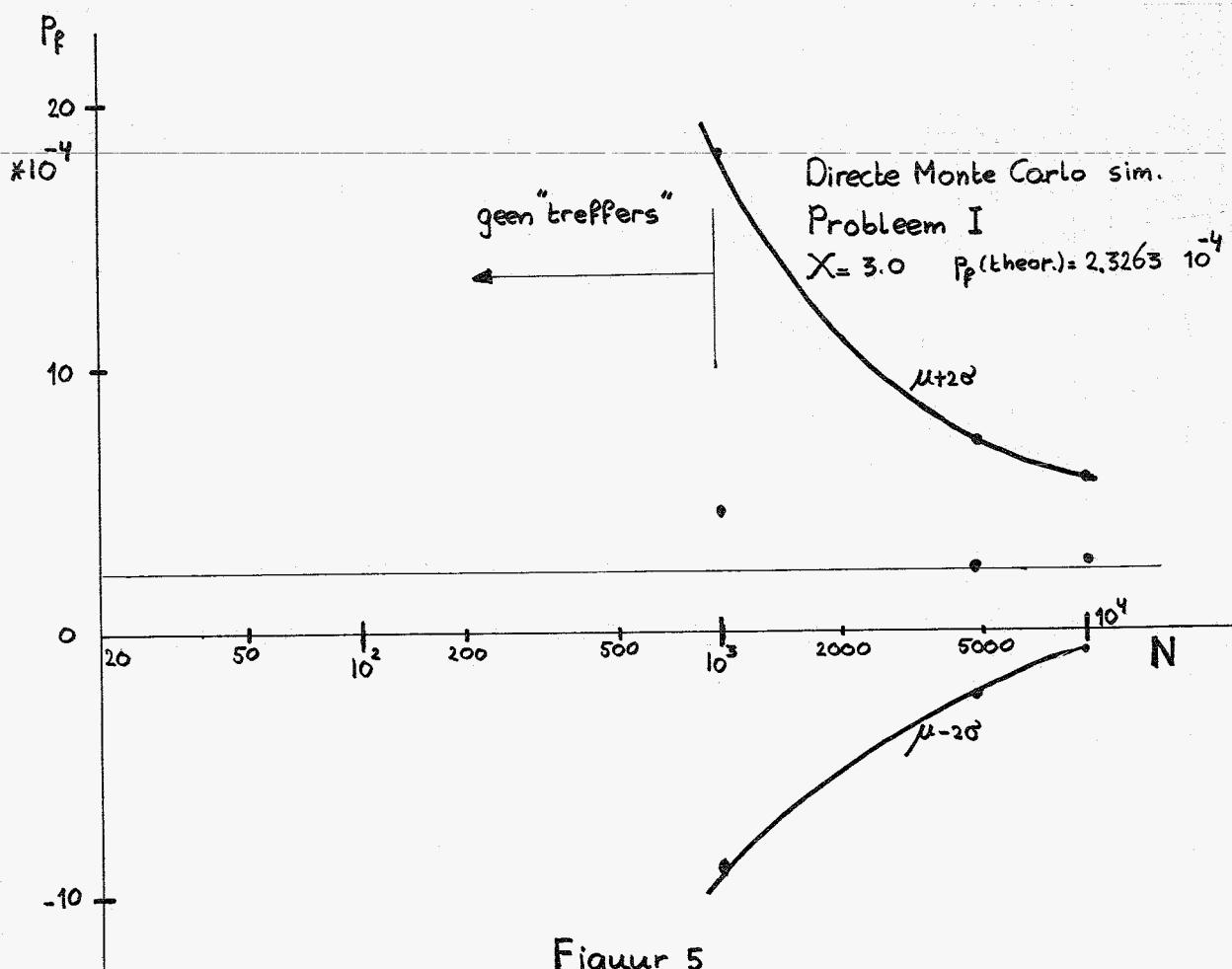
Dit is gebeurd voor verschillende waarden voor N (het aantal simulaties). Om de nauwkeurigheid in de verkregen benaderingen af te kunnen schatten is voor elke afzonderlijke N het gehele proces $40 \times$ uitgevoerd.

Van deze 40 uitkomsten is gemiddelde (μ) en standaarddeviatie (σ) bepaald. De 95% betrouwbaarheidsgrenzen zijn daarbij aangegeven door de $\mu - 2\sigma$ resp. $\mu + 2\sigma$ lijnen.

De resultaten zijn weergegeven in Fig. 4 ($X = 6.7$) en Fig. 5 ($X = 3.0$).



Figuur 4



Figuur 5

Uit de resultaten blijkt dat voor grote tot zeer grote N inderdaad een redelijk nauwkeurige benadering voor de gevraagde grootheid p_p kan worden bepaald via directe Monte Carlo simulatie. Voor $X = 6.7$ hadden we geschat: $N \approx 2000$ en voor $X = 3.0$ $N \approx 4.3 \cdot 10^5$. Dit laatste blijkt ook uit fig. 5. Voor $N < 10^3$ werd geen enkele combinatie voor S en T getrokken waarvoor geldt: $S_0 > S_{\max}$. Ook voor $N = 10^4$ zijn de resultaten nog zeer onnauwkeurig.

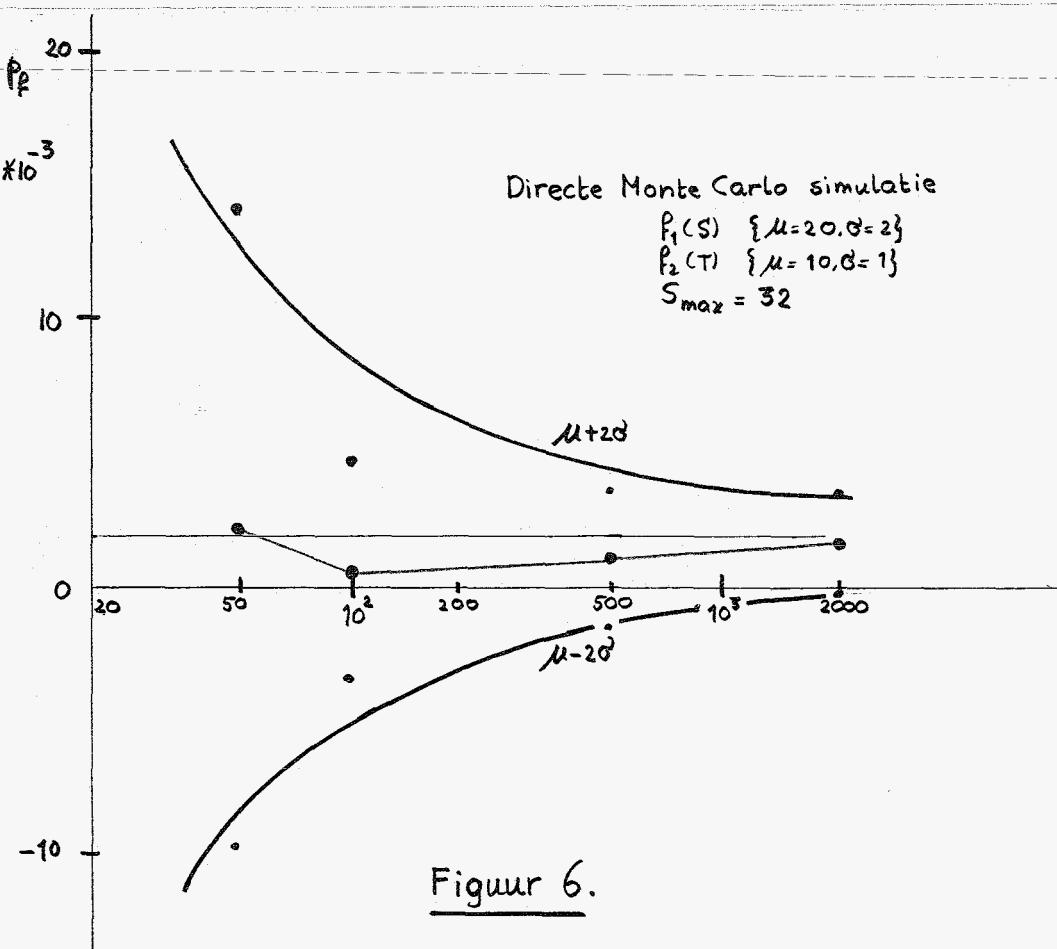
Probleem II

We gaan uit van $P_1(S) = \text{normale kansdichtheidsfunctie}$
 $\{\mu_1 = 20, \sigma_1 = 2\}$

$P_2(T) = \text{normale kansdichtheidsfunctie}$
 $\{\mu_2 = 10, \sigma_2 = 1\}$

$$S_{\max} = 32$$

De resultaten zijn weergegeven in figuur 6.



Ook uit deze resultaten blijkt dat voor voldoend grote N een goede benadering voor de faalkans kan worden bepaald. In de beide voorbeelden echter moet voor een voldoend nauwkeurige benadering N toch zeer groot zijn dus lange rekentijden vergend. Vandaar dat een methode om met veel geringer aantal simulaties een nauwkeuriger benadering te construeren in feite noodzakelijk is. Dit kan via zogenaamde "Importance Sampling". In het volgende hoofdstuk zal deze techniek aan de hand van de voorbeelden I en II worden toegelicht terwijl in hoofdstuk 3 enige theoretische onderbouwing van de methode zal worden aangereikt.

2. Monte-Carlo simulatie met Importance Sampling

Probleem I.

Gevraagd was te bepalen:

$$P_p = P[x \leq X] = \int_{-\infty}^X f(x) dx \quad (2.1)$$

We voeren in een tweede kansdichtheidsfunctie $g(x)$ met als enige beperking:

$$g(x) \neq 0 \quad x \in (-\infty, X]$$

Daarmee kan (2.1) geschreven worden als:

$$P_p = \int_{-\infty}^X \frac{f(x)}{g(x)} \cdot g(x) dx \quad (2.2)$$

Indien we nu, uitgaande van de nieuwe kansdichtheidsfunctie $g(x)$ een aantal (N) realisaties x_i construeren kan een benadering \bar{P}_p worden bepaald via:

$$\bar{P}_p = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left\{ U_X(x_i) * \frac{f(x_i)}{g(x_i)} \right\} \quad (2.3)$$

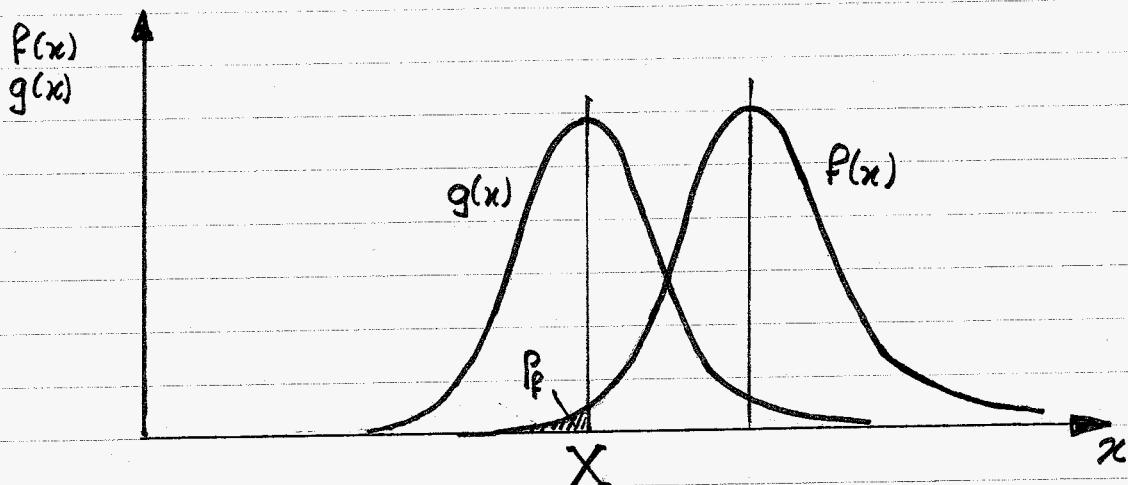
$U_X(x) =$ eerder gedefinieerde stapfunctie $\{=0 \text{ als } x > X; 1 \text{ als } x \leq X\}$

Numerieke uitwerking.

De methode gebaseerd op Importance sampling is getoetst aan de hand de volgende twee vraagstukken:

$$f(x) = \text{onveranderd} \quad \{ \mu_1 = 10, \sigma_1 = 2 \}$$

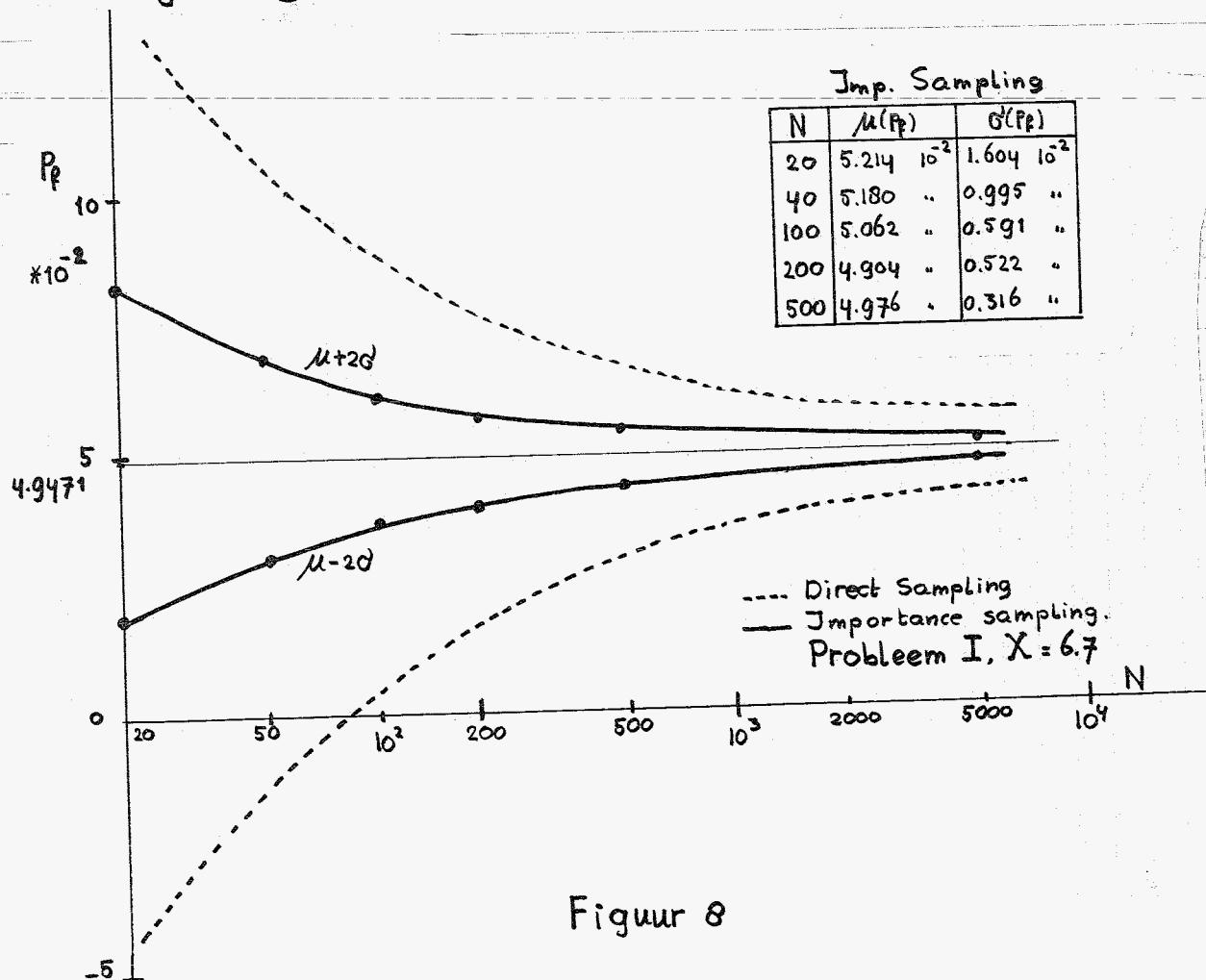
$g(x) = \text{Normale kansdichtheidsfunctie} \quad \{ \mu_2 = X, \sigma_2 = 2 \}$
en wel de beide gevallen $X = 6.7$ en $X = 3.0$

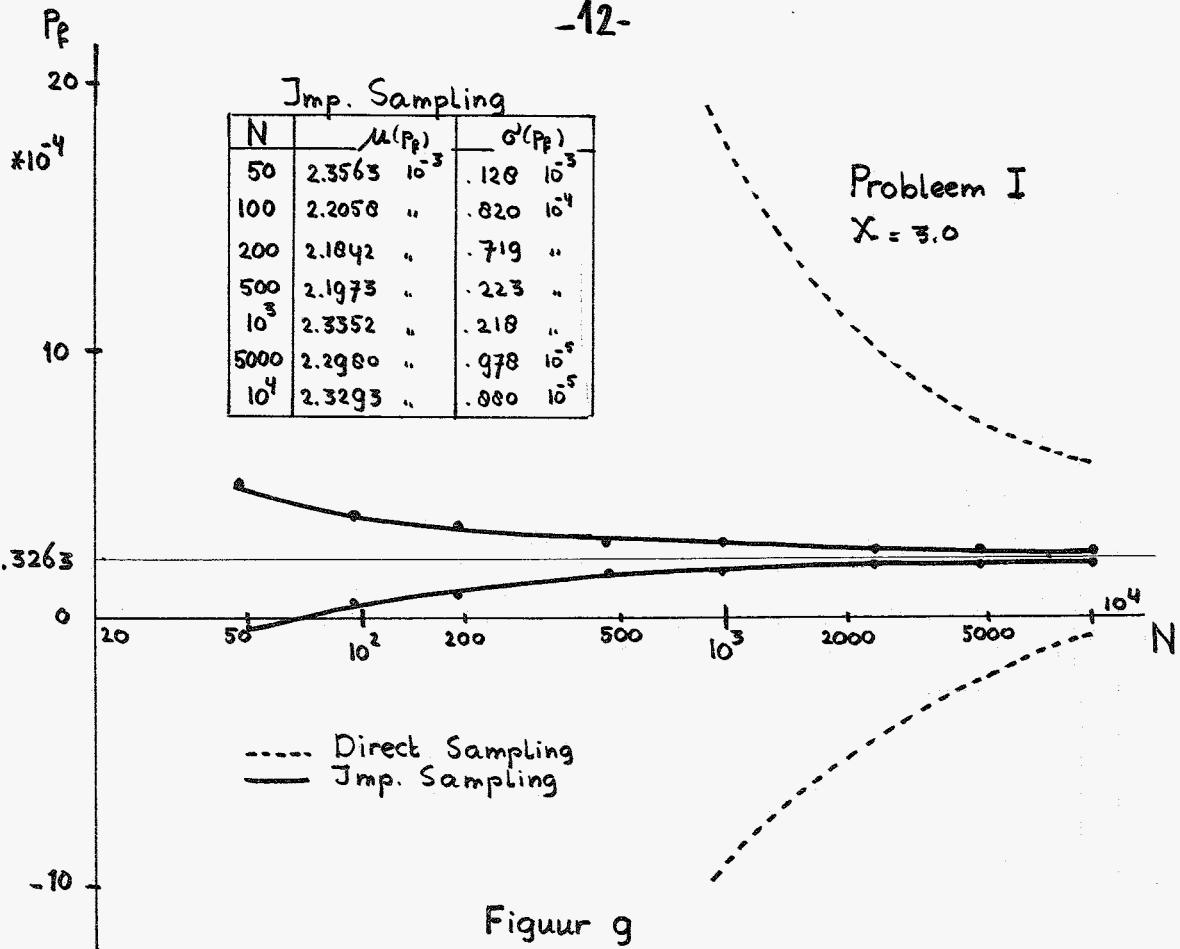


Figuur 7. Importance Functie $g(x)$

Ook nu weer zijn voor verschillende waarden voor het aantal simulaties (N) een aantal runs uitgevoerd (in dit geval 40) en hieruit zijn gemiddelde $\bar{\mu}$ en standaarddeviatie $\bar{\sigma}$ bepaald voor de schatter \bar{P}_p .

De resultaten zijn weergegeven in figuur 8 ($X = 6.7$) en figuur 9 ($X = 3.0$)





Gekonkludeerd kan worden dat het betrouwbaarheidsinterval voor een bepaald aantal simulaties veel smaller is in het geval van Importance sampling. Of anders gezegd: voor het verkrijgen van een benadering \hat{P}_f met een bepaalde betrouwbaarheid is ingeval van Importance sampling een veel geringer aantal simulaties noodzakelijk. Indien we bijvoorbeeld voor het geval $X = 6.7$ (fig 8) een maximale variatiecoëfficiënt $V = \mu/\sigma$ eisen van 0.1 zijn bij directe monte carlo simulatie ca 1950 trekkingen noodzakelijk terwijl bij de toepassing van Importance Sampling dit aantal reduceert tot ca 130 trekkingen. Nog veel sterker komt dit effect tot uitdrukking voor het geval $X = 3$. In plaats van de eerder geschatte 400.000 trekkingen wordt reeds bij $N = 500$ een variatiecoëfficiënt bereikt van 0.1, een reduktie van grofweg een factor 800!

Probleem II.

Het probleem was het bepalen van:

$$P_p = P[S_e > S_{max}] = P[\sqrt{S^2 + 3T^2} > S_{max}] \quad (2.4)$$

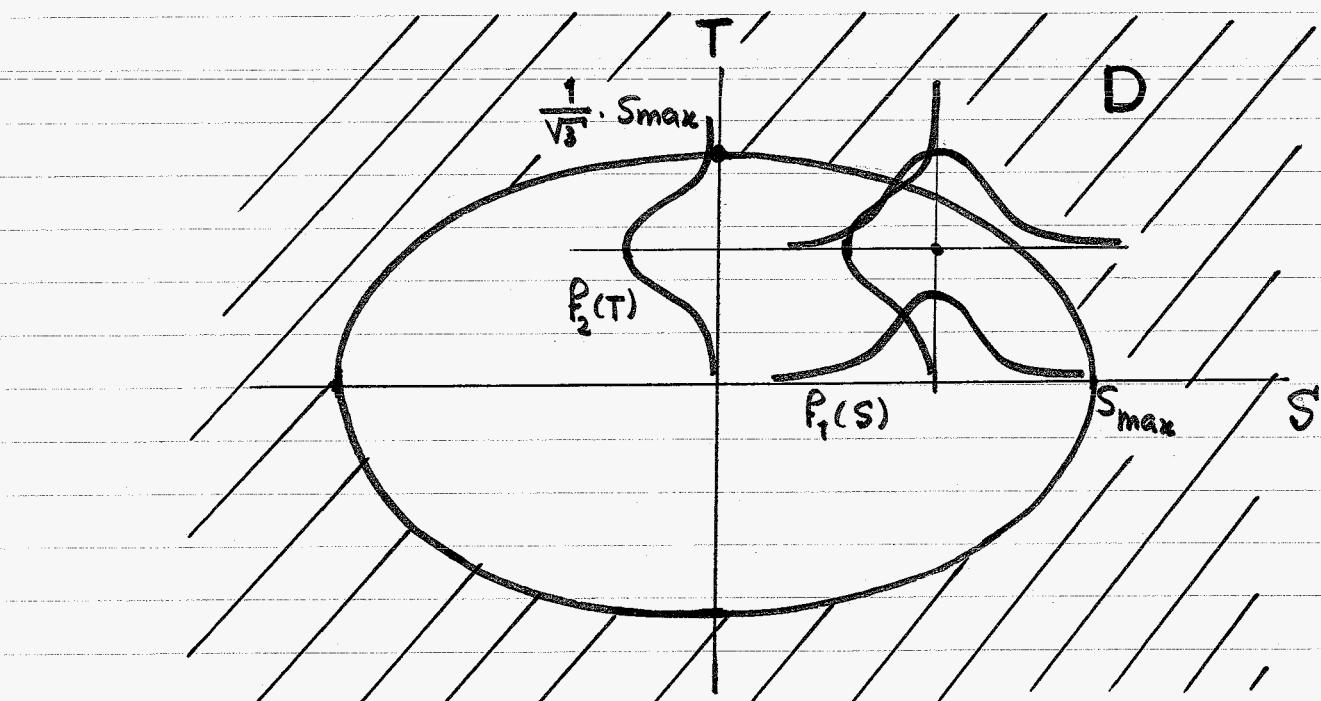
Hiervoor kan ook geschreven worden:

$$P_p = \iint_D f_{S,T}(S,T) dS dT \quad (2.5)$$

waarbij : * $f_{S,T}(S,T)$ = 2-dimensionale kansdichtheidsfunctie van S en T .

We veronderstellen dat S en T statistisch onafhankelijk zijn waardoor $f_{S,T}(S,T) = f_1(S) \cdot f_2(T)$.

* D = Domein waarvoor geldt: $\sqrt{S^2 + 3T^2} > S_{max}$
zie figuur 10.



Figuur 10. Integratie domein

Dus:

$$P_F = \iint_D f_1(S) \cdot f_2(T) dSdT \quad (2.6)$$

We voeren in de kansdichheidsfuncties $g_1(S)$ en $g_2(T)$ waarvoor moet gelden.

$g_1(S)$ en $g_2(T) \neq 0$ in het domein D

Daarmee schrijven we:

$$P_F = \iint_D \frac{f_1(S) \cdot f_2(T)}{g_1(S) \cdot g_2(T)} \cdot g_1(S) \cdot g_2(T) dSdT \quad (2.7)$$

Gebruik makend van de stapfunctie $U_S(S, T)$:

$$U_S(S, T) = \begin{cases} 1 & \text{als } \sqrt{S^2 + 3T^2} > S_{\max} \\ 0 & \text{als } \sqrt{S^2 + 3T^2} \leq S_{\max} \end{cases}$$

krijgen we tenslotte:

$$P_F = \iint_{-\infty}^{\infty} U_S(S, T) \frac{f_1(S) \cdot f_2(T)}{g_1(S) \cdot g_2(T)} \cdot g_1(S) \cdot g_2(T) dSdT \quad (2.8)$$

Het Monte Carlo proces met Importance Sampling gaat nu als volgt:

- * Trek N paar realisaties S_i, T_i uit $g_1(S)$ resp $g_2(T)$
- * Bepaal de benadering \bar{P}_F uit:

$$\bar{P}_F = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N U_S(S_i, T_i) \cdot \frac{f_1(S_i) \cdot f_2(T_i)}{g_1(S_i) \cdot g_2(T_i)} \quad (2.9)$$

Numerieke resultaten.

We gaan weer uit van

$$P_1(S) = \{ \mu_1 = 20, \sigma_1^2 = 2 \}$$

$$P_2(T) = \{ \mu_2 = 10, \sigma_2^2 = 1 \}$$

$$S_{\max} = 32.$$

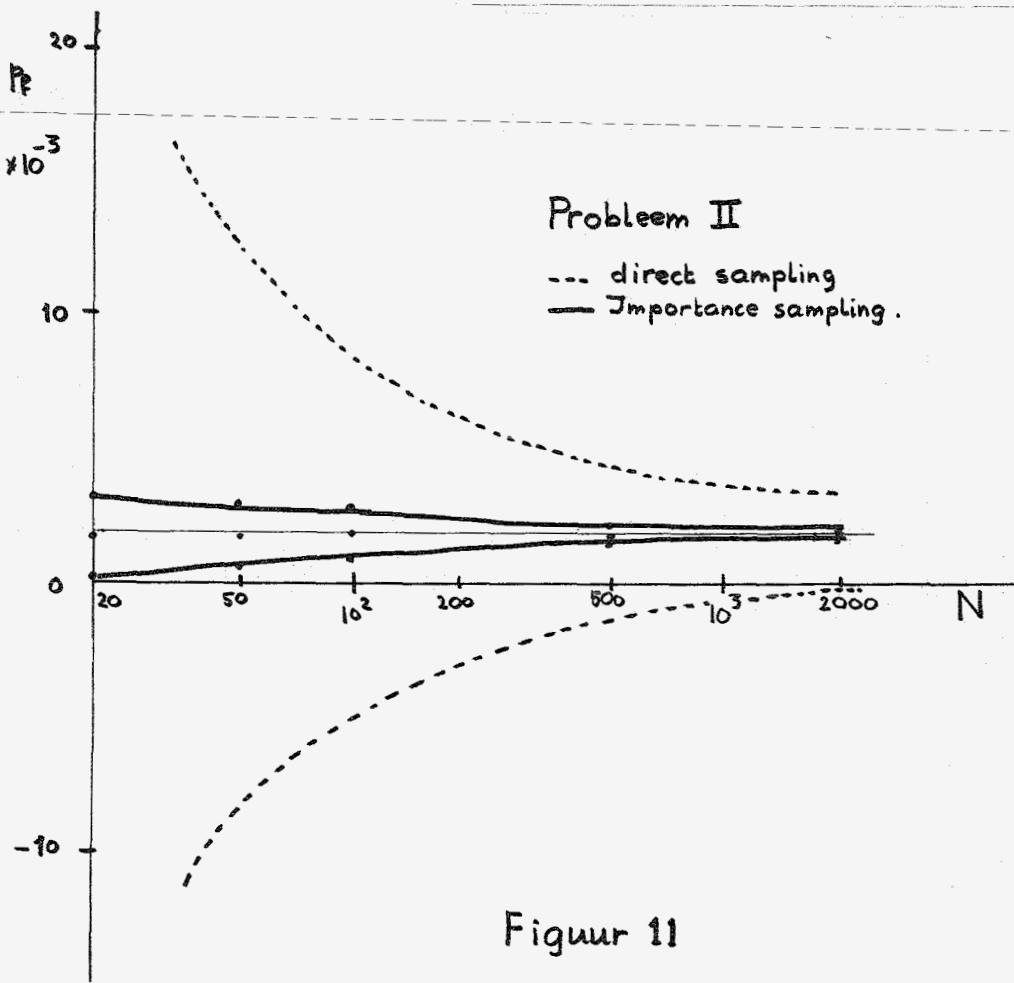
$$\begin{aligned} \text{Stel } S &= \mu_1 + 2\sigma_1^2 = 24 \\ T &= \mu_2 + 2\sigma_2^2 = 12 \end{aligned} \quad \left. \begin{aligned} S_e &= 31.75 \approx S_{\max} \end{aligned} \right\}$$

We kiezen daarom:

$$g_1(S) = \text{normale pdf } \{ \mu_3 = 24, \sigma_3^2 = 2 \}$$

$$g_2(T) = \text{„ „ } \{ \mu_4 = 12, \sigma_4^2 = 1 \}$$

Het resultaat is weergegeven in Figuur 11. Voor elke N werden in dit geval 20 runs uitgevoerd.



Resumerend kan gesteld worden dat Importance Sampling in feite een noodzakelijke factor is bij het toepassen van Monte Carlo simulatie. Op welke wijze daarbij zo optimaal mogelijke importance sampling functies gekozen moeten worden is nog een open vraag. In het volgende hoofdstuk zal enige onderbouwing voor het beantwoorden van die vraag worden gepresenteerd.

3. Keuze van de Importance Sampling functie(s).

In het voorgaande is aangetoond dat voor tamelijk willekeurige keuzes voor de importance sampling functie(s) het aantal noodzakelijke simulaties (N) sterk gereduceerd kan worden. In het hiernavolgende zal de achtergrond van deze techniek worden toegelicht en zullen een aantal globale eisen worden afgeleid waaraan deze importance functies moeten voldoen opdat een zo goed mogelijk resultaat wordt bereikt.

3.1 Probleem I.

Directe Monte Carlo simulatie

In hoofdstuk 1 is aangegeven dat via directe monte-carlo simulatie een benadering \bar{P}_p kan worden bepaald via:

$$\bar{P}_p = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N U_X(x_i) \quad (\text{vgl 1.4}) \quad (3.1)$$

De grootheid \bar{P}_p is een zogenaamde "unbiased estimator" voor P_p want:

$$E[\bar{P}_p] = E\left[\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N U_X(x_i)\right] = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N E[U_X(x_i)]$$

$$= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \int_{-\infty}^{\infty} U_X(x_i) \cdot P(x_i) dx_i = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N P_p = P_p$$

$$\text{Dus } E[\bar{P}_p] = P_p. \quad (3.2)$$

Opm: E = Estimator. (zie [1])

$$\begin{aligned} \text{Var}[U_X(x_i)] &:= \sigma_{U_X}^2 = E[U_X^2(x_i)] - E^2[U_X(x_i)] = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} U_X^2(x_i) \cdot f(x_i) dx_i - p_p^2 = \\ &= p_p - p_p^2 \end{aligned} \tag{3.3}$$

$$\text{Var}[\bar{p}_p] = \text{Var}\left[\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N U_X(x_i)\right] = \frac{1}{N^2} \text{Var}\left[\sum_{i=1}^N U_X(x_i)\right].$$

$U_X(x_i)$ en $U_X(x_j)$ zijn ongecorreleerde functies van de random variabele x dus:

$$\text{Var}[\bar{p}_p] = \frac{1}{N^2} \sum_{i=1}^N \text{Var}[U_X(x_i)] = \frac{1}{N^2} \cdot N \cdot (p_p - p_p^2)$$

$$\boxed{\text{Var}[\bar{p}_p] = \sigma_{\bar{p}_p}^2 = \frac{1}{N} [p_p - p_p^2]} \tag{3.4}$$

Dit betekent dat voor het verkrijgen van een nauwkeuriger benadering via directe monte carlo simulatie het enige middel is het vergroten van het aantal simulaties (N). De standaard deviatie $\sigma_{\bar{p}_p}$ is daarbij omgekeerd evenredig met \sqrt{N} (Halvering van de spreiding $\rightarrow 4 \times$ zoveel simulaties !)

Toetsing van relatie 3.4

Voor de beide geëvalueerde situaties voor probleem I, n.l. $X = 6.7$ en $X = 3.0$ kan relatie 3.4 vergeleken worden met de numerieke resultaten.

-1g-

$$X = 6.7$$

$$P_f \approx 0.05$$

$$X = 3.0$$

$$P_f \approx 0.23 \cdot 10^{-3}$$

N	$G_{\bar{P}_f}$		N	$G_{\bar{P}_f}$	
	(3.4)	tests (Fig 4)		(3.4)	tests (Fig 5)
20	0.049	0.049	1000	$4.8 \cdot 10^{-4}$	$3.5 \cdot 10^{-4}$
100	0.0218	0.023	5000	$2.14 \cdot 10^{-4}$	$1.25 \cdot 10^{-4}$
500	0.00975	0.0086	10^4	$1.52 \cdot 10^{-4}$	$0.95 \cdot 10^{-4}$

De theoretische voorspelling voor de standaarddeviatie van de benadering \bar{P}_f blijkt dus goed overeen te komen met de numerieke resultaten (40 runs).

Monte Carlo simulatie met importance sampling.

We hebben gezien dat we een benadering kunnen bepalen via (vgl 2.3) :

$$\bar{P}_f = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left\{ U_X(x_i) \cdot \frac{f(x_i)}{g(x_i)} \right\}$$

x_i = realisatie uit $g(x)$.

Voor de verwachte waarde van de schatter \bar{P}_f geldt:

$$\begin{aligned}
 E[\bar{P}_f] &= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N E\left[U_X(x_i) \cdot \frac{f(x_i)}{g(x_i)}\right] \\
 &= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \int_{-\infty}^{\infty} \left\{ U_X(x_i) \cdot \frac{f(x_i)}{g(x_i)} \cdot g(x_i) \right\} dx_i \\
 &= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N P_f = P_f \quad \text{dus } E[\bar{P}_f] = P_f. \quad (3.5)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \text{Var} \left[U_X(x_i) \cdot \frac{p(x_i)}{g(x_i)} \right] &= E \left[\left(U_X(x) \cdot \frac{p(x)}{g(x)} \right)^2 \right] - E^2 \left[U_X(x) \cdot \frac{p(x)}{g(x)} \right] \\
 &\equiv \int_{-\infty}^{\infty} U_X^2(x) \left[\frac{p(x)}{g(x)} \right]^2 g(x) dx - p_p^2 \\
 &= \int_{-\infty}^{\infty} U_X^2(x) \frac{p^2(x)}{g^2(x)} \cdot g(x) dx + p_p^2 \int_{-\infty}^{\infty} g(x) dx - 2 p_p \int_{-\infty}^{\infty} U_X(x) \frac{p(x)}{g(x)} \cdot g(x) dx \\
 &= \int_{-\infty}^{\infty} \left\{ U_X(x) \cdot \frac{p(x)}{g(x)} - p_p \right\}^2 g(x) dx \tag{3.6}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \text{Dus } \text{Var} [\bar{p}_p] &= \sigma_{\bar{p}_p}^2 = \text{Var} \left[\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left\{ U_X(x_i) \frac{p(x_i)}{g(x_i)} \right\} \right] \\
 &= \frac{1}{N^2} \cdot \sum_{i=1}^N \left[\int_{-\infty}^{\infty} \left\{ U_X(x) \cdot \frac{p(x)}{g(x)} - p_p \right\}^2 g(x) dx \right]
 \end{aligned}$$

$$\text{Var} [\bar{p}_p] = \frac{1}{N} \left[\int_{-\infty}^{\infty} \left\{ U_X(x) \frac{p(x)}{g(x)} - p_p \right\}^2 g(x) dx \right] \tag{3.7}$$

Uit deze relatie volgt dat de nauwkeurigheid van deze schatter vergroot kan worden op twee manieren n.l.

* N te vergroten

* $\int_{-\infty}^{\infty} \left\{ U_X(x) \frac{p(x)}{g(x)} - p_p \right\}^2 g(x) dx$ te verkleinen door een geschikte keuze van de sampling functie $g(x)$.

Ten aanzien van dit tweede punt kan dus globaal gesteld worden dat we bij de keuze van $g(x)$ er voor moeten zorgen dat in het zwaartepunt van deze pdf zo goed mogelijk voldaan is aan:

$$U_X(x) \frac{p(x)}{g(x)} \approx p_p \quad (\text{onbekend!})$$

Eén van de problemen is natuurlijk dat p_p niet bekend is. Deze moet nu juist berekend worden. Voor de keuze van $g(x)$ zal daarom wel een (grote) schatting voor de uiteindelijk te bepalen p_p gewerkt moeten worden.

Eerst zal nu de verkregen relatie 3.7 voor de eerder gekozen (normale) samplingfunctie $g(x)$ vergeleken worden met de numerieke resultaten. Daarna zal getracht worden de min of meer optimale samplingfunctie $g(x)$ te bepalen, uitgaande van relatie 3.7.

We waren uitgegaan van:

$g(x) = \text{normale kansdichtheidsfunctie } \{ \mu_2 = X, G_2 = 2 \}$
en beschouwen het geval $X = 6.7$ (fig 8)

$$\begin{aligned} \sigma_{p_p}^2 &= \frac{1}{N} \left[\int_{-\infty}^{\infty} \left\{ U_X(x) \frac{f(x)}{g(x)} - p_p \right\}^2 g(x) dx \right] \\ &= \frac{1}{N} \left[\int_{-\infty}^{\infty} \left\{ U_X(x) \frac{f^2(x)}{g^2(x)} \cdot g(x) \right\} dx - p_p^2 \right] \\ &= \frac{1}{N} \left[\int_{-\infty}^{X} \frac{f^2(x)}{g^2(x)} \cdot g(x) dx - p_p^2 \right] \quad (3.8) \end{aligned}$$

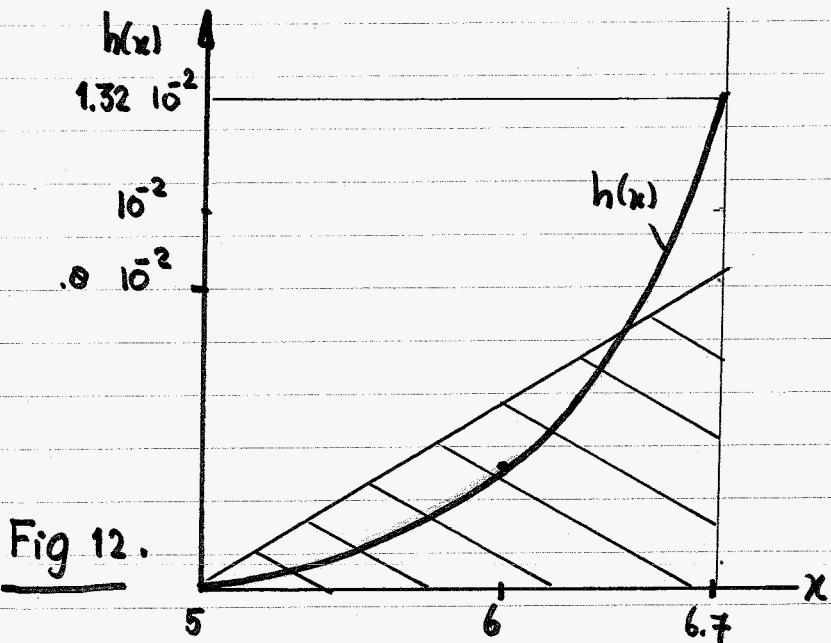
$f(x)$ en $g(x)$ zijn beide normale kansdichtheidsfuncties dus

$$h(x) = \frac{f(x)}{g(x)} \cdot f(x) = \frac{\frac{1}{G_2}}{G_1^2 \sqrt{2\pi}} e^{\left\{ \frac{(x-\mu_2)^2}{2G_2^2} - \frac{2(x-\mu_1)^2}{2G_1^2} \right\}}$$

$$\frac{1}{8} [(x-6.7)^2 - 2(x-10)^2]. \quad \mu_1 = \mu_2 = 2, \mu_1 = 10, \mu_2 = 6.7$$

$$h(x) = 0.2 e$$

zie figuur 12.



We benaderen

$$\int_{-\infty}^{6.7} h(x) dx \text{ door het}$$

gearceerde oppervlak

$$= 0.8 \cdot 10^{-2} \cdot \frac{(6.7 - 5)}{2}$$

$$= 6.8 \cdot 10^{-3}$$

p_f was ongeveer 0.05

$$\text{Dus } \sigma_{p_f}^2 = \frac{1}{N} [6.8 \cdot 10^{-3} - 0.05^2] = \frac{4.3 \cdot 10^{-3}}{N} \quad (3.9)$$

N	vgl (3.9)	$\sigma_{p_f}^2$	Tests (fig. 8)
20	$1.5 \cdot 10^{-2}$		$1.6 \cdot 10^{-2}$
100	$6.6 \cdot 10^{-3}$		$6.0 \cdot 10^{-3}$
500	$2.9 \cdot 10^{-3}$		$3.2 \cdot 10^{-3}$

Dus een goede overeenstemming.

Hoe dient de sampling functie $g(x)$ nu gekozen te worden opdat het betrouwbaarheidsinterval van de te berekenen grootheid p_f zo klein mogelijk is?

Daartoe gaan we terug naar (3.8) :

$$\begin{aligned} \sigma_{p_f}^2 &= \frac{1}{N} \left[\int_{-\infty}^{\infty} \left(U_X(x) \frac{p(x)}{g(x)} - p_f \right)^2 g(x) dx \right] \\ &= \frac{1}{N} \left[\int_{-\infty}^X \left(\frac{p(x)}{g(x)} - p_f \right)^2 g(x) dx + \int_X^{\infty} p_f^2 g(x) dx \right] \quad (3.10) \end{aligned}$$

Een goede functie $g(x)$ is dus een functie waarvoor :

* $g(x) \approx 0$ voor $x > X$

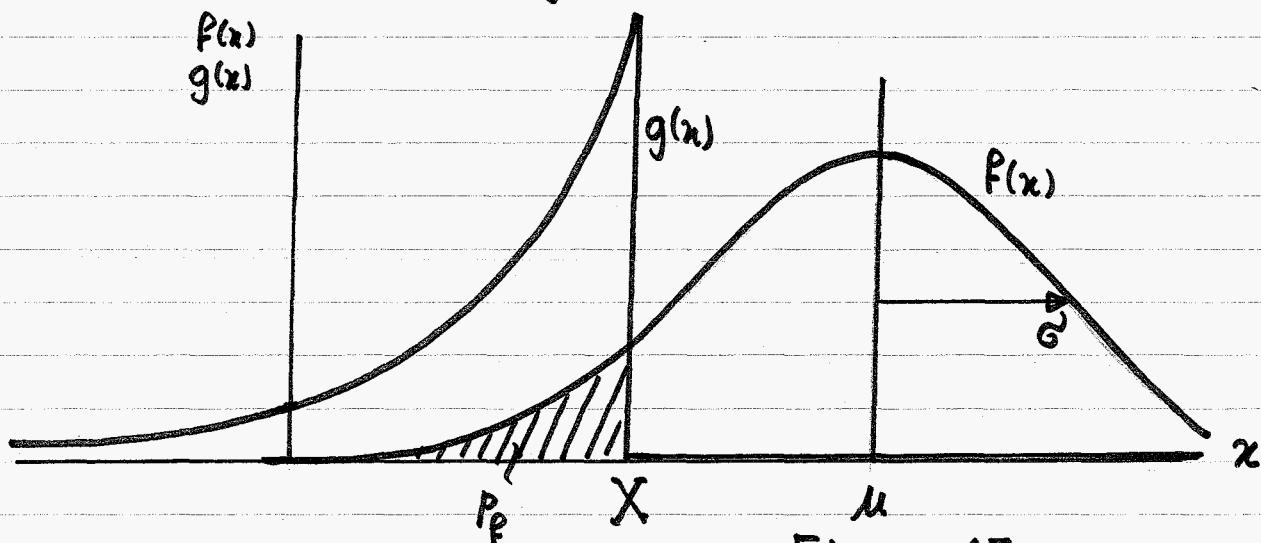
* $\frac{p(x)}{g(x)} \approx p_f$ voor $x \leq X$ in het zwaartepunt van $g(x)$

We kiezen de 1-parameter exponentiële Functie :

$$-a(X-\bar{x})$$

$$g(x) = \begin{cases} a e^{-a(x-\bar{x})} & x \leq \bar{x} \\ 0 & x > \bar{x} \end{cases} \quad (3.11)$$

zie onderstaande figuur.



Figuur 13.

Opgemerkt kan worden:

- * $g(x)$ voldoet aan de eisen voor een kansdichtheidsfunctie
- * $g(x) = 0$ voor $x > \bar{x}$

De nog onbekende parameter a zal nu zodanig bepaald worden dat zo goed mogelijk aan de tweede eis op pag 21 is voldaan.

De functie $g(\bar{x})$ levert een gemiddelde \bar{x} :

$$\bar{x} = \bar{X} - \frac{1}{a}$$

en we eisen dat voor $x = \bar{x}$: $\frac{F(x)}{g(x)} \approx P_F$

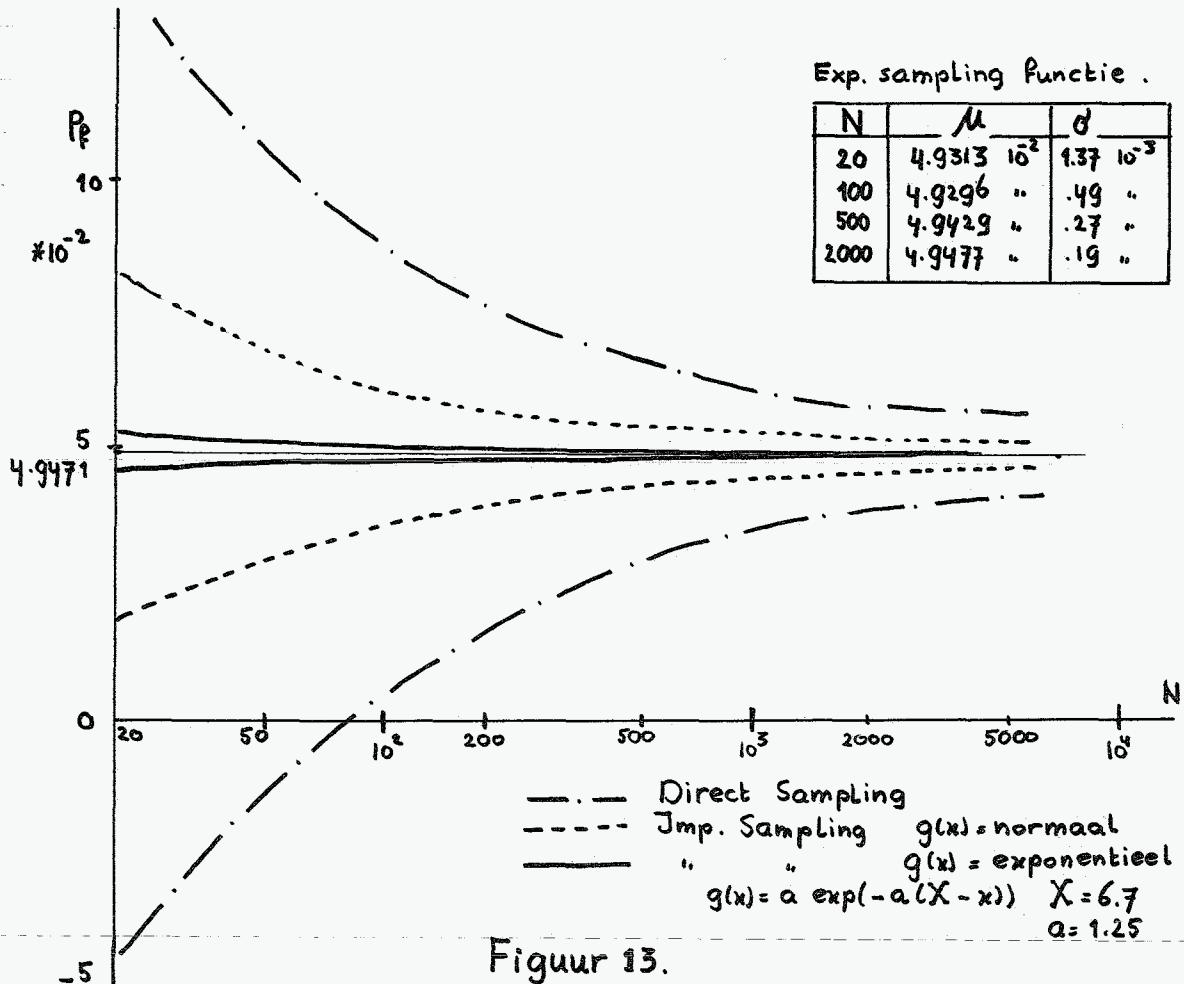
$$g(\bar{x}) = a e^{-1} \approx 0.37 a$$

$$f(\bar{x}) = \frac{1}{G\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(X-\bar{x}-\mu)^2}{2G^2}} = 0.2 e^{-\frac{(3.3+\frac{1}{a})^2}{2G^2}}$$

$\left\{ \begin{array}{l} \mu = 10 \\ G = 2 \end{array} \right.$

$$\frac{P(\bar{x})}{g(\bar{x})} = P_F = 0.05 \rightarrow a \approx 1.25$$

De numerieke resultaten voor deze importance functie zijn weergegeven in figuur 13.



Figuur 13.

Uit de resultaten blijkt dat de betrouwbaarheid in de schatter \bar{P}_p aanzienlijk is toegenomen door de keuze van deze exponentiële sampling functie. Reeds bij 20 Monte Carlo simulaties blijkt dat met 95% betrouwbaarheid geldt dat:

$$0.05205 \leq \bar{P}_p \leq 0.0467$$

3.2 Probleem II

Directe Monte Carlo simulatie

In hoofdstuk 1 is afgeleid dat een benadering \bar{p}_p gevonden kan worden via:

$$\bar{p}_p = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N U_s(s_i, t_i). \quad (3.12)$$

s_i = realisatie uit $P_1(s), t_i$ uit $P_2(t)$.

$$\begin{aligned} E[\bar{p}_p] &= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N E[U_s(s_i, t_i)] \\ &= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \iint_{-\infty -\infty}^{+\infty +\infty} U_s(s_i, t_i) f_1(s_i) f_2(t_i) ds_i dt_i \\ &= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \iint_D P_1(s) P_2(t) ds dt \end{aligned}$$

dus $E[\bar{p}_p] = p_p. \quad (3.13)$

$$\begin{aligned} \text{Var}[U_s(s_i, t_i)] &= E[U_s^2(s_i, t_i)] - E^2[U_s(s_i, t_i)] \\ &= \iint_{-\infty -\infty}^{+\infty +\infty} U_s^2(s_i, t_i) f_1(s_i) f_2(t_i) ds_i dt_i - p_p^2 \\ &= p_p - p_p^2. \end{aligned}$$

Dus $\text{Var}[\bar{p}_p] = \sigma_{\bar{p}_p}^2 = \frac{1}{N^2} \text{Var}\left[\sum_{i=1}^N U_s(s_i, t_i)\right]$

Aangenomen was dat de random variabelen S en T statistisch onafhankelijk waren dus:

$$\text{Var}[\bar{p}_p] = \sigma_{\bar{p}_p}^2 = \frac{1}{N} [p_p - p_p^2]. \quad (3.14)$$

Ook hier blijkt dus de enige remedie om de betrouwbaarheid te verhogen het vergroten van N te zijn.

Voor het konkrete probleem hadden we gevonden:

$$\bar{P}_p \approx 0.18 \cdot 10^2$$

We krijgen daarmee:

N	vgl (3.14)	$\sigma_{\bar{P}_p}$ tests (fig 11)
20	$9.4 \cdot 10^{-3}$	—
100	$4.2 \cdot ..$	$2.75 \cdot 10^3$
500	$1.9 \cdot ..$	$1.25 \cdot ..$
2000	$0.94 \cdot ..$	$0.85 \cdot ..$

(20 runs)

We vinden dus ook hier een aardige overeenstemming.

Monte Carlo Simulatie met Importance Sampling.

Voor de benadering \bar{P}_p hadden we gevonden:

$$\bar{P}_p = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N U_S(S_i, T_i) \frac{P_1(S_i) P_2(T_i)}{g_1(S_i) g_2(T_i)} \quad (3.15)$$

maar nu met S_i resp. T_i realisaties uit $g_1(S)$ resp. $g_2(T)$.

$$\begin{aligned} E(\bar{P}_p) &= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N E[U_S(S_i, T_i) \cdot \frac{P_1(S_i) P_2(T_i)}{g_1(S_i) g_2(T_i)}] \\ &= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} U_S(S_i, T_i) \cdot \frac{P_1(S_i) P_2(T_i)}{g_1(S_i) g_2(T_i)} dS_i dT_i \end{aligned}$$

$$\text{dus } E[\bar{P}_p] = P_p. \quad (3.16)$$

$$\begin{aligned} \text{Var}[U_S(S_i, T_i) \cdot \frac{P_1(S_i) P_2(T_i)}{g_1(S_i) g_2(T_i)}] &= E[\{U_S(S_i, T_i) \cdot \frac{P_1(S_i) P_2(T_i)}{g_1(S_i) g_2(T_i)}\}^2] \\ &\quad - E^2[U_S(S_i, T_i) \cdot \frac{P_1(S_i) P_2(T_i)}{g_1(S_i) g_2(T_i)}] = \end{aligned}$$

$$= \iint_{-\infty}^{\infty} U_g(s_i, t_i) \cdot \left\{ \frac{f_1(s_i) P_2(t_i)}{g_1(s_i) g_2(t_i)} \right\}^2 g_1(s_i) g_2(t_i) ds_i dt_i - \bar{p}_p^2$$

hetgeen gebruik maakt van:

$$W(s, t) = \frac{f_1(s) P_2(t)}{g_1(s) g_2(t)} \quad (3.17)$$

herleid kan worden tot:

$$\text{Var}[U_g(s_i, t_i) \cdot W(s_i, t_i)] = \iint_{-\infty}^{\infty} \{U(s, t) \cdot W(s, t) - \bar{p}_p\}^2 g_1(s) g_2(t) ds dt \quad (3.18)$$

Voor de grootheid \bar{p}_p vinden we nu:

$$\text{Var}[\bar{p}_p] = \sigma_{\bar{p}_p}^2 = \frac{1}{N} \left[\iint_{-\infty}^{\infty} \{U(s, t) \cdot W(s, t) - \bar{p}_p\}^2 g_1(s) g_2(t) ds dt \right] \quad (3.18a)$$

$$= \frac{1}{N} \left[\iint_D \{W(s, t) - \bar{p}_p\}^2 g_1(s) g_2(t) ds dt + \iint_{R_2 - D} \bar{p}_p^2 g_1(s) g_2(t) ds dt \right] \quad (3.18b)$$

$$= \frac{1}{N} \left[\iint_D W(s, t)^2 g_1(s) g_2(t) ds dt - \bar{p}_p^2 \right] \quad (3.18c)$$

Dus voor een nauwkeurige benadering dient het aantal simulaties zeer groot te zijn of moeten de sampling functies $g_1(s)$, $g_2(t)$ zodanig gekozen worden dat:

- * $\iint_{R_2 - D} g_1(s) g_2(t) ds dt$ zo klein mogelijk

- * $W(s, t) \approx \bar{p}_p$ in het zwaartepunt van $g_1(s), g_2(t)$ over D .

"Optimale" importance Functies $g_1(S)$ en $g_2(T)$.

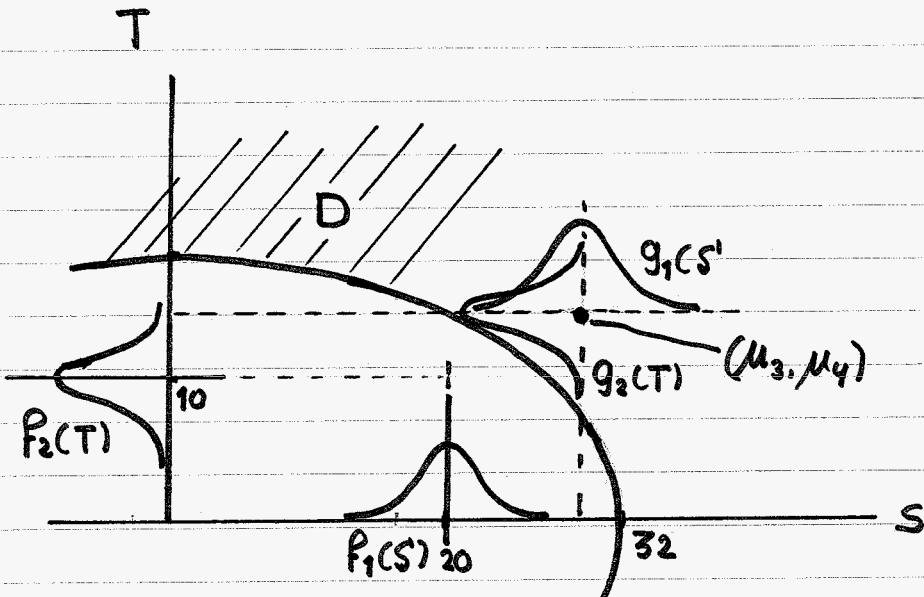


fig 14. Keuze van de importance functies $g_1(S)$ en $g_2(T)$.

We gaan uit van de importance functies :

$$g_1(S) = \text{normale pdf} : \{ \mu_3, \sigma_3 = \sigma_1 = 2 \}$$

$$g_2(T) = \text{normale pdf} : \{ \mu_4 = \frac{1}{2}\mu_3, \sigma_4 = \sigma_2 = 1 \}$$

De vraag is nu: wat is de optimale waarde voor μ_3 ?

We gaan uit van vgl (3.18 b) :

$$\begin{aligned} \text{Var}[\bar{p}_p] = \frac{1}{N} & \left[\iint_D \{ w(s, t) - p_p \}^2 g_1(s) g_2(t) ds dt \right. \\ & \left. + \iint_{R_2 - D} p_p^2 g_1(s) g_2(t) ds dt \right] \end{aligned}$$

Nemen we aan dat we het tweede deel (integratie over $R_2 - D$) mogen verwaarlozen dan resteert dat $w(s, t) \approx p_p$ in het zwaartepunt van $g_1(S), g_2(T)$ in D.

We bekijken $W(S, T)$ in het punt (μ_3, μ_4) .

$$W(S, T) = \frac{P_1(S) P_2(T)}{g_1(S) g_2(T)} = \frac{\sigma_3 \sigma_4}{\sigma_1 \sigma_2} e^{-\left[\frac{(S-\mu_1)^2}{2\sigma_1^2} + \frac{(T-\mu_2)^2}{2\sigma_2^2} + \frac{(S-\mu_3)^2}{2\sigma_3^2} + \frac{(T-\mu_4)^2}{2\sigma_4^2} \right]}$$

met $\mu_1 = 20, \mu_2 = 10, \sigma_1 = 2, \sigma_2 = 1, S = \mu_3 = 2\mu_4, T = \mu_4$
 $\sigma_3 = \sigma_1, \sigma_4 = \sigma_2$:

$$- \left[\frac{(2\mu_4 - 20)^2}{8} + \frac{(\mu_4 - 10)^2}{2} \right]$$

$$W(S, T) = e^{-\left[\frac{(2\mu_4 - 20)^2}{8} + \frac{(\mu_4 - 10)^2}{2} \right]} \approx p_f = 1.86 \cdot 10^{-3}$$

dit levert: $\mu_4 = \begin{cases} 7.5 & (\text{vervalt, binnen } D) \\ 12.5 \end{cases}$

Dus we vinden:

$g_1(S)$: normal pdf $\{ \mu = 25, \sigma = 2 \}$

$g_2(T)$: $\{ \mu = 12.5, \sigma = 1 \}$

Numerieke resultaten (20 runs)

N	μ_{p_f}	σ_{p_f}
20	$1.836 \cdot 10^{-3}$	$0.939 \cdot 10^{-3}$
100	$1.856 \cdot \text{..}$	$0.353 \cdot \text{..}$
500	$1.925 \cdot \text{..}$	$0.189 \cdot \text{..}$

Indien we deze resultaten vergelijken met de resultaten op basis van de oorspronkelijke keuze voor $g_1(S), g_2(T)$ zoals weergegeven in fig 11 dan blijkt dat bovengenoemde resultaten slechts een weinig beter zijn. Dit was ook wel te verwachten gezien de geringe verschillen in de importance functies.

4. Automatische keuze van de importance functie.

In het voorgaande is aangetoond dat bij de toe-passing van Monte-Carlo simulatie Importance Sampling een bijna noodzakelijke rol speelt. Tevens zijn enkele globale richtlijnen afgeleid waarmee het effect van een gekozen importance functie kan worden nagegaan en op basis waarvan tevens een min of meer optimale importance functie kan worden geselekteerd. Dit laatste bleek echter niet zo' eenvoudig te zijn vandaar dat al snel de behoefte ontstaat aan een methode waarmee min of meer systematisch een zo optimaal mogelijke importance functie uit een bepaalde klasse van functies kan worden gekozen.

Dit kan bijvoorbeeld via een zogenaamde "Multi-stage procedure for systematic variance reduction" zoals omschreven in [2]

Bij deze methode wordt een bepaalde importance functie aangenomen, deze functie bevat een aantal te optimaliseren parameters. Bij voorbeeld kan een normale kansdichtheidsfunctie worden aangenomen met te optimaliseren parameters: gemiddelde μ en standaard deviatie σ . Vervolgens wordt in een aantal "kleine runs" nagegaan voor welke waarde van deze parameters de standaard deviatie in de te benaderen grootheid zo klein mogelijk is.

Tenslotte wordt met deze "optimale parameters" de definitieve, uitgebreide Monte Carlo simulatie met Importance Sampling uitgevoerd.

De methode zal hierna aan de hand van Probleem I worden toegelicht. Centraal hierbij stond het bepalen van :

$$P_p = P[x \leq X] \quad X = 6.7$$

$$f(x) = \text{Normale pdf } \{\mu=10, \sigma^2=2\}.$$

Probleem I

We hadden gezien dat voor de variantie in de schatter \bar{p}_p op basis van Monte Carlo simulatie met Importance Sampling te schrijven was (zie (3.7)):

$$\text{Var}[\bar{p}_p] = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \int_{-\infty}^x \left[\frac{f(x)}{g(x)} \right]^2 dG(x) - \frac{\bar{p}_p^2}{N}. \quad (4.1)$$

We nemen nu aan dat de importance functie $g(x)$ gekozen is, maar nog afhankelijk is van een bepaalde functieparameter α , dus $g = g(x, \alpha)$. Omdat de gemiddelde waarde \bar{p}_p niet afhankelijk is van de keuze van $g = g(x, \alpha)$ kunnen we voor de α -afhankelijkheid van $\text{Var}[\bar{p}_p]$ dus volstaan met te kijken naar het kwadratisch moment van f/g rond 0.

$$\text{Stel } \tilde{\gamma} = \tilde{\gamma}(x, \alpha) = \frac{f(x)}{g(x, \alpha)} = \frac{dF(x)}{dG(x, \alpha)} \quad (4.2)$$

en er geldt:

$$\tilde{\gamma}(x, \alpha) = \frac{dF(x)}{dG(x, \bar{\alpha})} \cdot \frac{dG(x, \bar{\alpha})}{dG(x, \alpha)} = \tilde{\gamma}(x, \bar{\alpha}) \frac{dG(x, \bar{\alpha})}{dG(x, \alpha)}.$$

Hierbij is $\bar{\alpha}$ een willekeurige, doch vaste keuze voor de parameter α .

Voor het kwadratisch moment van $\tilde{\gamma}$ rond $x=0$ vinden we:

$$\int_{-\infty}^X \tilde{J}^2 \cdot dG(x, \alpha) = \int_{-\infty}^X \tilde{J}(x, \alpha) \cdot \tilde{J}(x, \bar{\alpha}) \frac{dG(x, \bar{\alpha})}{dG(x, \alpha)} \cdot dG(x, \alpha)$$

$$= \int_{-\infty}^X \tilde{J}(x, \alpha) \cdot \tilde{J}(x, \bar{\alpha}) dG(x, \bar{\alpha}). \quad (4.3)$$

Deze laatste relatie toont aan dat de α -afhankelijkheid van \tilde{p}_p op twee manieren kan worden bestudeerd. Uitgaande van het linkerdeel kunnen verschillende waarden α_i gekozen worden en voor elke keuze kan het hele Monte-Carlo proces met Importance Sampling worden uitgevoerd. Dit blijkt in de praktijk geen efficiënte methode op te leveren. Uitgaande van het rechterdeel van deze relatie hoeven we slechts een Monte Carlo simulatie met Importance sampling uit te voeren, uitgaande van één (geschikte) keuze $\bar{\alpha}$ voor α . De α -afhankelijkheid is analytisch weergegeven door de functie $\tilde{J}(\alpha)$. We vinden dus de α -afhankelijkheid van het kwadratisch moment door het middelen van $\tilde{J}(\alpha, x_i) \tilde{J}(\bar{\alpha}, x_i)$ over de verzameling trekkingen x_i uit $g(\bar{\alpha}, x)$.

De procedure gaat nu als volgt: Start met een eerste schatting α_0 en bepaal via bovenstaande weg de α -afhankelijkheid van $\text{Var}[\tilde{p}_p]$, uitgaande van een relatief gering aantal trekkingen. Kies die α_1 waarvoor deze variantie minimaal is en start opnieuw.

Na 2 of 3 cycli zal α_i niet veel meer veranderen en kan met deze α_i de uiteindelijke berekening beginnen met een voldoende groot aantal simulaties om de te bepalen grootheid voldoende nauwkeurig te benaderen.

Het is uiteraard mogelijk deze methode uit te breiden

naar meerdere te optimaliseren parameters α, β, \dots etc , uitgaande van een sampling functie $g = g(x, \alpha, \beta, \dots)$. Essentieel is echter wel dat de functie g vooraf gekozen moet worden , de parameters die in deze functie een rol spelen kunnen voor een specifiek probleem langs bovenstaande weg geoptimaliseerd worden.

Evaluatie aan de hand van voorbeeld I.

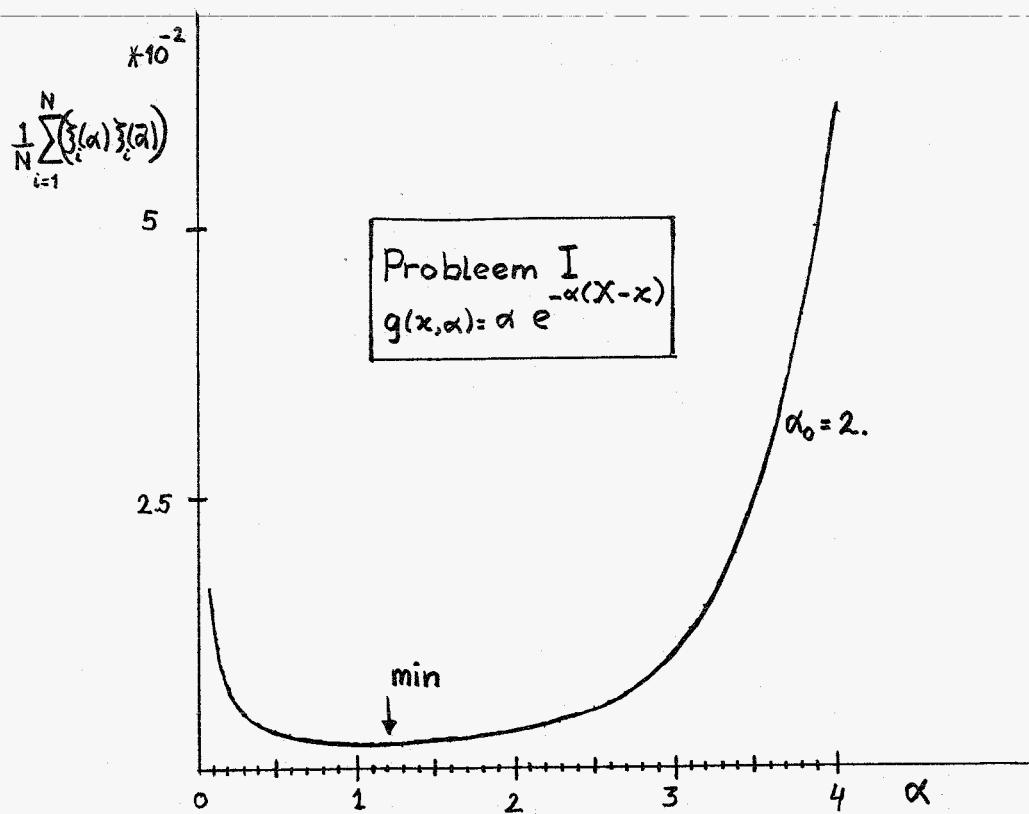
$$-\alpha(X - x)$$

Uitgegaan wordt van : $g(\alpha, x) = \alpha e^{-\alpha(X-x)}$

Deze is reeds eerder toegepast ($\alpha = 1.25$, Fig 13).

Nu beschouwen we α als de te optimaliseren parameter via de hiervoor beschreven methode.

We starten met $\alpha = \alpha_0 = 2$ en bepalen op basis van 200 Monte Carlo simulaties de afhankelijkheid van $\text{Var}[\bar{p}_p]$ van α . De resultaten zijn weergegeven in Fig 15.



Figuur 15. Minimalisatie van $\text{Var}[\bar{p}_p]$ naar parameter α .

Uit de resultaten blijkt dat de variantie een minimale waarde aanneemt voor $\alpha \approx 1.2$, hetgeen goed overeen komt met de eerdere (langs andere weg) bepaalde optimale waarde voor deze parameter. Het vlakke verloop van de kromme rond het optimum en het feit dat we gestart zijn met $\alpha_0 = 2$ geeft aan dat het in dit geval niet de moeite zal lopen om op basis van $\alpha_1 = 1.2$ nogmaals de gehele cyclus te doorlopen en opnieuw de optimale α te bepalen; $\alpha = 1.2$ vormt dus een heel goed uitgangspunt voor de definitieve simulatie zoals we ook in fig. 13 hebben kunnen zien.

Tenslotte dient opgemerkt te worden dat deze "iteratieve" methode voor variantie-reductie bij Monte Carlo simulatie één van de mogelijkheden is om met redelijke inspanningen tot betrouwbare resultaten te komen.

Literatuur

- [1] Benjamin, J.R; Cornell, C.A : Probability, Statistics, and Decision for Civil Engineers, Mc Graw-Hill book co., 1970.
- [2] Spanier, J.: A New Multistage Procedure for Systematic Variance Reduction in Monte Carlo, Jnl. Numer. Anal., Vol 8, no 3, sept 1971.
pp 540-554