Metody Obliczeniowe w Nauce i Technice

Obliczanie całek metodami Monte Carlo

Marian Bubak, Katarzyna Rycerz

Department of Computer Science
AGH University of Science and Technology
Krakow, Poland
kzajac@agh.edu.pl
dice.cyfronet.pl

Contributors
Maciej Trzebiński
Mikołaj Biel
Kamil Doległo

Outline

Przegląd zastosowań

- ogólnie: symulacja procesow losowych (np. bładzenie internauty, page rank itp.)
- obliczanie całek (zwłaszcza wielowymiarowych),
- jeden ze sposobów opisu ukladow fizycznych w stanie rownowagi termodynamicznej
- symulacja topnienia krysztalów, układy magnetyczne
- rozwiązywanie równań różniczkowych cząstkowych - przez wprowadzenie błądzenia przypadkowego,
- symulacje typu „transport promieniowania",
- symulacje typu „systemy obsługi masowej"

Dlaczego MC i całki?

a) Niech $y = g(x)$ to pewna zmienna losowa, której wartości losujemy zgodnie z rozkładem ciągłym $p(x)$
$x \in (a, b)$
Wartość oczekiwana $Y : E\{Y\} = \int_a^b g(x)p(x)dx \qquad (*)$

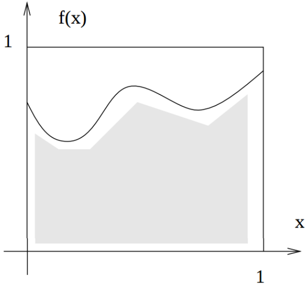
Dlaczego MC i całki?

b) chcemy obliczyć całkę: $I = \int_a^b f(x)dx$
niech $p : p(x) > 0$ dla $x \in (a, b)$, $\int_a^b p(x)dx = 1$
$p(x)$ - spełnia warunki, aby być gęstością rozkładu pewnej zmiennej losowej przyjmującej wartości z (a, b)
$I = \int_a^b \frac{f(x)}{p(x)} p(x)dx = \int_a^b g(x)p(x)dx \qquad \leftarrow$ całka postaci $(*)$
Obliczanie całki można zawsze przedstawić jako zagadnienie obliczania wartości oczekiwanej pewnej zmiennej losowej ciągłej.

(suma szeregu - zmienna losowa dyskretna)

Całkowanie metodą „orzeł-reszka”

Szukamy $I = \int_0^1 f(x)dx; 0 \leqslant f(x) \leqslant 1$



(X, Y) - dwuwymiarowa zmienna losowa o rozkładzie równomiernym na kwadracie: $(0 \leqslant x \leqslant 1; 0 \leqslant y \leqslant 1)$
Prawdopodobieństwo, że (X, Y) przyjmie wartość z zakreskowanej części rysunku jest równe tej powierzchni, czyli wartości całki I.

Metoda

N - eksperymentów: obserwacji (X, Y)
M - liczba eksperymentów, w których (X, Y) poniżej $f(x)$

Jeżeli obserwacje niezależne - to M ma rozkład dwumianowy

$$\boxed{P\{M = m\} = \binom{N}{m} I^m (1 - I)^{N-m}}$$

Metoda

W rozkładzie dwumianowym oszacowanie:
średniej $\hat{I} = \frac{M}{N}$ (używamy do obliczenia wartości całki)
wariancji $S^2(\hat{I}) = \frac{1}{N}\frac{M}{N}\left(1 - \frac{M}{N}\right)$ (używamy do obliczenia błedu całkowania)

Metoda:

- prosta,
- łatwe uogólnienie na n-D
- mało efektywna

Metoda podstawowa

$$I = \int_a^b f(x)dx = (b-a)\int_a^b f(x)\frac{1}{b-a}dx = (b-a)\int_a^b f(x)p(x)dx$$

$p(x) = \frac{1}{b-a}$ - gęstość prawdopodobieństwa dla rozkładu równomiernego na (a, b)

Bez utraty ogólności wystarczy rozpatrywać:

$$I = \int_0^1 f(x)dx = E\{Y\}$$

$Y = f(X)$, przy czym X - zmienna losowa o rozkładzie równomiernym $(0, 1)$

Oszacowanie $E\{Y\}$ - średnia z N niezależnych obserwacji:

$$\boxed{\hat{I} = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{n} f(x_i) \quad (**)}$$

Metoda podstawowa - procedura

Procedura

1. wylosować $x_1, x_2, ..., x_N$ wg rozkładu równomiernego na $(0, 1)$
2. obliczyć $f(x_1), f(x_2), ..., f(x_N)$
3. średnia $(**)$

Metoda podstawowa - wariancja

Wariancja

Korzystam z własności: $\sigma^2(aX) = a^2\sigma^2(X)$

$$\sigma^2(\hat{I}) = \sigma^2\left(\frac{1}{N}\left[\sum_{i=1}^{n} f(x_i)\right]\right) = \frac{1}{N^2}\sum_{i=1}^{N}\sigma^2[f(x_i)] = \frac{1}{N^2}N\sigma^2[f(x)]$$

Korzystam z własności: $\sigma^2(X) = E\{X^2\} - (E\{X\})^2$

$$\frac{1}{N}\sigma^2[f(x)] = \frac{1}{N}\left[\int_0^1 f^2(x)dx - I^2\right]$$

Estymator wariancji

$$\sigma^2(\hat{I}) = \frac{1}{N}\sigma_f^2; \sigma_f^2 = \frac{1}{N-1}\sum_{i=1}^{N}[f(x_i) - \hat{I}]^2$$

$\sigma^2(\hat{I}_1) - \sigma^2(\hat{I}_2) > 0$ 1 - orzeł/reszka; 2 - podstawowa

Metoda średniej ważonej

Gdy $f(x)$ jest stała to w metodzie podstawowej - pojedynczy punkt to wynik dokładny
Stąd wniosek: jeśli $f(x)$ gładkie to liczba losowań - mała

Metoda średniej ważonej $I = \int_0^1 \frac{f(x)}{p(x)} p(x) dx = \int_0^1 g(x) p(x) dx$
Chcemy wybrać takie $p(x)$ żeby:

1. $p(x)$ - ciągła, $x \in [0, 1]$
2. $p(x) > 0, x \in [0, 1]$
3. $\int_0^1 p(x) dx = 1$
4. $\frac{f(x)}{p(x)}, x \in (0, 1)$ - znacznie gładsza niż $f(x)$
5. $p(x)$ - dana prostym wzorem analitycznym

Metoda średniej ważonej

1. wybieramy $p_1(x) > 0$ dla $x \in (0, 1)$ - 1-sza propozycja,
2. dobieramy stałą - $p(x) = \alpha p_1(x); \alpha \int_0^1 p_1(x)dx = 1$
3. liczymy analitycznie dystybuantę $P(x) = \int_0^x p(x')dx'$
4. losujemy z rozkładem równomiernym: $y_1 \in (0, 1), i = 1, ..., N$
5. stosujemy metodę odwrotnej dystybuanty $P^{-1}(y_i) = x_i \Rightarrow x_i, i = 1, ..., N$
6. przybliżamy wartość całki: $I \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} g(x_i) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \frac{f(x_i)}{p(x_i)}$

Literatura I

R. Zieliński
Metody Monte Carlo
WNT, 1970

S.M. Jermakow
Metoda Monte Carlo i zagadnienia pokrewne
PWN 1976

J.M. Hammersley, D.C. Handscomb
Monte Carlo Methods
1964

J. Spanier, E.M. Gelbard
Monte Carlo principles and transport problems
Addison - Wesley, 1969

Literatura II

- K. Binder (Ed.)
  Monte Carlo Methods in Statistical Physics
  Springer - Verlag, 1979
- K. Binder (Ed.)
  Applications of the MC Methods in Statistical Physics
  Springer - Verlag, 1984
- K. Binder
  Applications of the MC Methods in Statistical Physics; Topics in Current Physics
  Springer - Verlag, 1987

Literatura III

D.E. Knuth
The Art of Computer Programming, vol. 2: Seminumerical Algorithms
Addison - Wesley, 1981

M.H. Kalos, P.A. Whitlock
Monte Carlo Methods
Wiley, New York, 1986

P. Bratley, B.L. Fox, E.L. Schrage
A Guide to Simulation
Springer Verlag, New York, 1983