

UNIVERZITA KOMENSKÉHO V BRATISLAVE
FAKULTA MATEMATIKY, FYZIKY A INFORMATIKY

GENEROVANIE REALIZÁCIÍ ROVNOMERNÉHO
ROZDELENIA PRAVDEPODOBNOSTI NA
MNOHOROZMERNÝCH POLYÉDROCH
BAKALÁRSKA PRÁCA

2018
SLAVOMÍR HANZELY

UNIVERZITA KOMENSKÉHO V BRATISLAVE
FAKULTA MATEMATIKY, FYZIKY A INFORMATIKY

GENEROVANIE REALIZÁCIÍ ROVNOMERNÉHO
ROZDELENIA PRAVDEPODOBNOSTI NA
MNOHOROZMERNÝCH POLYÉDROCH
BAKALÁRSKA PRÁCA

Študijný program: Informatika
Študijný odbor: Informatika
Školiace pracovisko: Katedra aplikovanej matematiky a štatistiky
Školiteľ: doc. Mgr. Radoslav Harman, PhD.

Bratislava, 2018
Slavomír Hanzely



Univerzita Komenského v Bratislave
Fakulta matematiky, fyziky a informatiky

ZADANIE ZÁVEREČNEJ PRÁCE

Meno a priezvisko študenta: Slavomír Hanzely
Študijný program: informatika (Jednoodborové štúdium, bakalársky I. st., denná forma)
Študijný odbor: informatika
Typ záverečnej práce: bakalárska
Jazyk záverečnej práce: slovenský
Sekundárny jazyk: anglický

Názov: Generovanie realizácií rovnomerného rozdelenia pravdepodobnosti na mnohorozmerných polyédroch

Random sampling from the uniform distribution on multidimensional polyhedra

Anotácia: V Monte-Carlo metódach výpočtu pravdepodobností a v znáhodnených optimalizačných metódach je často potrebné generovať realizácie z rovnomerného rozdelenia na mnohorozmerných polyédroch. Tieto polyédre môžu byť zadané buď systémom konečného počtu lineárnych nerovníc (takzvaná H-reprezentácia), alebo ako konvexný obal konečnej množiny bodov (takzvaná V-reprezentácia). V prípade oboch typov reprezentácií je rovnomerné generovanie vo vnútri všeobecného polyédra netriviálna úloha, kombinujúca techniky a poznatky z matematiky, štatistiky a informatiky.

Cieľ: Cieľom bakalárskej práce je: Po prvé vypracovať prehľad existujúcich prístupov generovania realizácií z rovnomerného rozdelenia na polyédroch (priame generovanie pre špeciálne polyédre, zamietacie algoritmy, MCMC algoritmy a iné); po druhé vypracovať a programovo implementovať vlastnú metódu založenú na elipsoide najmenšieho objemu obsahujúceho zadaný polyéder.

Vedúci: doc. Mgr. Radoslav Harman, PhD.
Katedra: FMFI.KAMŠ - Katedra aplikovanej matematiky a štatistiky
Vedúci katedry: prof. RNDr. Daniel Ševčovič, DrSc.
Dátum zadania: 14.10.2018

Dátum schválenia: 24.10.2018

doc. RNDr. Daniel Olejár, PhD.
garant študijného programu

.....
študent

.....
vedúci práce

Pod'akovanie:

Abstrakt

Klíčové slova:

Abstract

Keywords:

Obsah

Úvod	1
1 Metódy generovania vnútri polyédru	3
1.1 Metropolis–Hastings metódy	3
1.1.1 Všeobecný Metropolis–Hastings algoritmus	3
1.1.2 Hit–and–Run generátor	4
1.1.3 Gibbsov generátor	5
1.2 Zamietacie metódy	6
1.2.1 Použitie na generovanie bodu vnútri polyédru	7
1.3 Rovnomerné generovanie bodov v polyédri pomocou MVEE elipsoidu	9
2 Metódy na riešenie problému optimálneho návrhu	11
2.1 Základné metódy na riešenie problému optimálneho návrhu	12
2.1.1 Subspace Ascend Method	13
2.1.2 Vertex Exchange Method	13
2.2 Radomized Exchange Algoritmus	14
3 Porovnanie metód	17
3.1 Generovanie polyédrov	18
3.1.1 Definícia náhodných polyédrov	18
3.1.2 Reprezentácia generovania polyédra	19
3.2 Inicializácia algoritmov	22
3.3 Porovnanie rýchlostí generovania	22
3.4 Najrýchlejší generátor	22
Záver	23
Príloha	25
3.5 Zdrojový kód najrýchlejšieho generátora	25

Úvod

V rámci tejto práce sa budeme zaoberať metódami na generovanie z rovnomerného rozdelenia vo veľarozmernom polyédri (konvexnom mnohostene). Rovnomernosť rozdelenia znamená, že pravdepodobnosť, že pri generovaní dostaneme bod vnútri ľubovoľnej oblasti polyédra je lineárne závislá iba od objemu danej časti. Predstavíme si známe algoritmy z tried Markov Chain Monte Carlo a zamietacích metód, ktoré možno použiť na rovnomerné generovanie a ako ich špeciálny prípad generovanie v polyédri.

Vo všeobecnosti možno polyéder reprezentovať viacerými spôsobmi, napríklad ako konvexný obal bodov (V-reprezentácia) alebo ako sústavu lineárnych nerovníc (H-reprezentácia). Obidve spomenuté reprezentácie možno v prípade potreby previesť na tú druhú. Prevod medzi nimi síce nie je jednoduchý, no daný výpočet je nutné spraviť len raz pred začatím generovania.

Rovnomerné generovanie bodu v polyédre je problém s prirodzeným uplatnením v praxi. Mnoho algoritmov, napríklad z triedy Monte Carlo alebo z triedy znáhodnených optimalizačných metód, je závislých na rovnomernom generovaní bodov spĺňujúcich určité požiadavky. Generovanie bodov v polyédre možno vnímať ako generovanie bodov, ktoré spĺňajú sústavu lineárnych obmedzení H-reprezentácie polyédru.

Cieľom tejto práce je jednak poskytnúť prehľad známych metód, ktoré je možné použiť na rovnomerné generovanie v polyédroch a na základe porovnania implementovať čo najefektívnejší generátor.

V prvej kapitole sa budeme zaoberať známymi metódami, ktoré možno použiť na generovanie na polyédroch. Medzi ne patria Metropolis–Hastings metódy (z triedy Markov Chain Monte Carlo), ktoré sa snažia simulovať realizácie z komplexných rozdelení vhodne konštruovanou “náhodnou prechádzkou”. To možno použiť aj v našom prípade, keď je cieľné rozdelenie uniformné. V triede Metropolis–Hastings metód sa špecificky zameriame na Hit–and–Run generátor a Gibbsov generátor, ktoré možno jednoducho implementovať práve pre generovanie na mnohorozmerných polyédroch. Okrem toho sa budeme zaoberať aj zamietacími metódami, ktoré namiesto generovania bodov priamo v polyédri vygenerujú bod na jednoduchšej nadmnožine polyédra rovnomerne náhodne. Po vygenerovaní bodu overia, či leží v polyédre. Ak nie, tak generujú znovu.

Druhá kapitola je venovaná problému optimálneho návrhu experimentov (optimal design problem), pomocou ktorého predstavíme algoritmus Randomized Exchange Al-

gorithm. Daný algoritmus vieme použiť aj na nájdenie elipsoidu s minimálnym objemom obaľujúci zadaný polyéder. Tento elipsoid možno jednak priamo použiť ako nadmnožinu pri zamietacej metóde, no taktiež možno použiť jeho vlastnosti využiť na zistenie natočenia polyédra v priestore a obalenie polyédra kvádrom s malým objemom.

Tretia kapitola bude obsahovať porovnania algoritmov spomenutých v prvej kapitole a zdrojový kód čo najrýchlejšieho algoritmu na generovanie bodov vnútri polyédru.

TODO doplniť po dopísaní porovnania

Kapitola 1

Metódy generovania vnútri polyédru

V tejto kapitole sa budeme zaoberať známymi metódami na generovanie z určitého rozdelenia, ktoré je v našom prípade rovnomerné vnútri polyédra a nulové mimo polyédra. V prvej podkapitole sa budeme zaoberať triedou Metropolis–Hastings algoritmov, v druhej podkapitole sa budeme zaoberať zamietacími metódami.

1.1 Metropolis–Hastings metódy

V tejto sekcii si predstavíme triedu Metropolis–Hastings algoritmov na generovanie bodov z ľubovoľného rozdelenia. Na postupnosť bodov generovaných algoritmi z triedy Metropolis–Hastings sa dá pozeráť ako na postupnosť stavov markovovských reťazcov (Markov Chain Monte Carlo, ďalej MCMC). Pri použití vhodného nastavenia parametrov algoritmu bude s rastúcim počtom vygenerovaných bodov rozdelenie vygenerovaných bodov konvergovať ku žadanému rozdeleniu.

V nasledujúcej časti stručne predstavíme všeobecný (abstraktný) Metropolis–Hastings algoritmus, podrobnejšie vysvetlenie viete nájsť napríklad v [3]. V následných častiach predstavíme Hit–and–Run generátor a Gibbsov generátor ako jeho konkrétne realizácie.

1.1.1 Všeobecný Metropolis–Hastings algoritmus

Majme cieľovú hustotu Q z ktorej chceme generovať, v prípade rovnomerného generovania vnútri polyédra je rovnomerná v polyédri a nulová mimo neho.

Metropolis–Hastings algoritmus [3] sa nachádza v stave $\mathbf{x}^{(i)}$ reprezentovanom bodom v polyédri, stav určuje *kandidátsku hustotu* $Q_{\mathbf{x}^{(i)}}$ závislú na $\mathbf{x}^{(i)}$. Táto kandidátska hustota (angl. “proposal density”) je volená tak, aby z nej bolo možné jednoducho generovať ďalšie body. Môže byť značne odlišná od cieľovej hustoty Q , avšak je nutné, aby limitné rozdelenie vygenerovaných bodov konvergovalo ku Q .

Algoritmus postupuje iteratívne, v jednom kroku vygeneruje ďalší potenciálny stav \mathbf{y} podľa hustoty $Q_{\mathbf{x}^{(i)}}$. Ďalší stav algoritmu $\mathbf{x}^{(i+1)}$ bude \mathbf{y} s pravdepodobnosťou $\alpha(\mathbf{y}|\mathbf{x}^{(i)})$

(algoritmus sa pohne), inak to bude $\mathbf{x}^{(i)}$ (ostane stáť). Funkcia α sa označuje ako *pomer akceptovania* (angl. “acceptance ratio”), je definované ako

$$\alpha(\mathbf{y}|\mathbf{x}) = \frac{Q(\mathbf{x})}{Q_{\mathbf{x}}(\mathbf{y})}$$

Pravdepodobnosť $\alpha(\mathbf{y}|\mathbf{x}^{(i)})$ môže byť vo všeobecnosti zložitá. V prípade, že je hustota Q rovnomerná a postupnosť stavov markovovského reťazca časovo reverzibilná, t.j.

$$Q_{\mathbf{x}^{(i)}}(\mathbf{x}^{(i+1)}) = Q_{\mathbf{x}^{(i+1)}}(\mathbf{x}^{(i)}),$$

tak je daná pravdepodobnosť pohybu konštante jedna, $\alpha(\mathbf{y}|\mathbf{x}^{(i)}) = 1$. Tieto predpoklady budú splnené pri ďalej spomínaných algoritmoch (Hit-and-Run generátore a Gibbsovom generátore).

Algorithm 1 Všeobecný Metropolis–Hastings algoritmus [3]

```

1: inicializuj  $\mathbf{x}^{(0)}$ 
2: for  $i = 0, 1, \dots, N$  do
3:   Vygeneruj bod  $\mathbf{y}$  z  $Q_{\mathbf{x}^{(i)}}$ 
4:   Vygeneruj  $u$  z  $U(0, 1)$ .
5:   if  $u \leq \alpha(\mathbf{y}|\mathbf{x}^{(i)})$  then
6:     Nastav  $\mathbf{x}^{(i+1)} = \mathbf{y}$ 
7:   else
8:     Nastav  $\mathbf{x}^{(i+1)} = \mathbf{x}^{(i)}$ 
9: Vráť  $\mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(2)}, \dots, \mathbf{x}^{(N)}$ .
```

Môžeme si všimnúť, že v Metropolis–Hastings algoritmoch, je hustota bodu $\mathbf{x}^{(i)}$ závislá od predchádzajúceho bodu $\mathbf{x}^{(i-1)}$. Podľa [3] je pri vhodnej voľbe kandidátskej hustoty $Q_{\mathbf{x}^{(i)}}$ a pravdepodobnosti α možné dokázať, že napriek závislosti po sebe idúcich bodov je pre $N \rightarrow \infty$ limitné rozdelenie náhodného vektora $\mathbf{x}^{(N)}$ rovné Q . Potrebná veľkosť N na dosiahnutie dostatočne presného odhadu hustoty Q sa nazýva burn-in period.

V ďalších častiach si ukážeme niekoľko konkrétnych realizácií Metropolis–Hastings algoritmu. Každá z tých metód obsahuje určité predpoklady na distribúciu, z ktorej chceme generovať, no dá použiť aj na rovnomerné generovanie bodov v polyédri.

1.1.2 Hit-and-Run generátor

Ako jedna z možností na realizáciu Metropolis–Hastings algoritmu prichádza do úvahy Hit-and-Run generátor. Algoritmus je analogický s algoritmom Metropolis–Hasting.

Označme si S zadaný polyéder. Kandidátska hustota $Q_{\mathbf{x}^{(i)}}$ je určená priamkou \mathbf{d}_i s náhodným smerom cez bod $\mathbf{x}^{(i)}$. Hustota $Q_{\mathbf{x}^{(i)}}$ je rovnomerná na úsečke $S \cap \mathbf{d}_i$ a nulová inde. Pri danej hustote je markovovský reťazec časovo reverzibilný, t.j. $Q_{\mathbf{x}^{(i)}}(\mathbf{x}^{(i+1)}) = Q_{\mathbf{x}^{(i+1)}}(\mathbf{x}^{(i)})$, [2] preto je funkcia α konštantne 1. Algoritmus sa teda každým krokom pohne do ďalšieho bodu.

Hit-and-Run generátor funguje nasledovne:

Algorithm 2 Hit-and-Run generátor [2]

```

1: Inicializuj  $\mathbf{x}^{(0)}$ 
2: for  $i = 0, \dots, N - 1$  do
3:   Vygeneruj smer  $\mathbf{d}_i$  z distribúcie  $D$  na povrchu sféry
4:   Nájdi množinu  $S_i(\mathbf{d}_i, \mathbf{x}^{(i)}) = \{\lambda \in \mathbb{R}; \mathbf{x}^{(i)} + \lambda \mathbf{d}_i \in S\}$ 
5:   Vygeneruj  $\lambda_i \in S_i$  podľa hustoty  $Q_i(\lambda | \mathbf{d}_i, \mathbf{x}^{(i)})$ 
6:   Nastav  $\mathbf{x}^{(i+1)} = \mathbf{x}^{(i)} + \lambda_i \mathbf{d}_i$ 
7: Vráť  $\mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(2)}, \dots, \mathbf{x}^{(N)}$ .
```

Použiteľnosť Hit-and-Run generátora závisí od toho, ako rýchlo vieme generovať smery \mathbf{d}_i z rozdelenia D . Ak by dimenzia priestoru bola príliš veľká, nebolo by možné generovať rýchlo z rozdelenia D a preto celý algoritmus by bol pomalý.

Na rovnomerné vygenerovanie d -rozmerného smerového vektoru vygenerujeme bod v d -rozmernom centrálne symetrickom rozdelení a následne ho zobrazíme na jednotkovú sféru. Takto dostaneme rovnomerné rozdelenie na d -rozmernej sfére. Takto zložitosť vygenerovania smeru rastie len asymptoticky lineárne s dimenziou, preto aj rýchlosť generovania bodov rastie len lineárne s dimenziou.

Podľa [5] ako d -rozmerné centrálne symetrické rozdelenie možno zvoliť mnoho-rozmerné normálne rozdelenie so zložkami z nezávislých jednorozmerných normálnych rozdelení s priemerom 0 a výchylkou 1.

1.1.3 Gibbsov generátor

V tejto podsekcii sa budeme zaoberať Gibbsovým generátorom, metódou generovania z triedy MCMC vhodnou na generovanie vo viacrozmernom priestore. Našou úlohou je generovať z d -rozmernej distribúcie Q , pričom z Q nevieme generovať priamo. Predpokladajme, že nevieme použiť Hit-and-Run generátor, lebo $Q_{\mathbf{x}^{(i)}} = Q_{(x_1^{(i)}, x_2^{(i)}, \dots, x_d^{(i)})}$ je kvôli veľkému rozmeru priestoru príliš zložitá na generovanie. Pred podrobným popisom vlastností algoritmu si najprv ukážme, ako Gibbsov generátor funguje.

Gibbsov generátor určí kandidátsku hustotu $Q_{\mathbf{x}^{(i)}}$ tak, že bude možné generovať z $Q_{\mathbf{x}^{(i)}}$ po súradniciach. Gibbsov generátor bude generovať bod $\mathbf{x}^{(i+1)} = (x_1^{(i+1)}, x_2^{(i+1)}, \dots, x_d^{(i+1)})$

postupne po súradniciach, j -tú súradnicu $x_j^{(i+1)}$ vygeneruje z kandidátskej hustoty

$$Q_{x_1^{(i+1)}, x_2^{(i+1)}, \dots, x_{j-1}^{(i+1)}, x_{j+1}^{(i)}, x_{j+2}^{(i)}, \dots, x_d^{(i)}}(x_j^{(i+1)}).$$

Označme si cieľový polyéder S a $\mathbf{d}_{i,j}$ priamku rovnobežnú s j -tou osou prechádzajúcou cez bod $(x_1^{(i+1)}, \dots, x_j^{(i+1)}, x_{j+1}^{(i)}, \dots, x_d^{(i)})$. V prípade rovnomerného generovania na polyédroch je pre Gibbsov generátor kandidátska hustota $Q_{x_1^{(i+1)}, \dots, x_{j-1}^{(i+1)}, x_{j+1}^{(i)}, \dots, x_d^{(i)}}(x_j^{(i+1)})$ rovnomerná na úsečke $\mathbf{d}_{i,j} \cap S$ a nulová inde.

Gibbsov generátor funguje nasledovne:

Algorithm 3 Gibbsov generátor [8]

- 1: inicializuj $\mathbf{x}^{(0)} = (x_1^{(0)}, x_2^{(0)}, \dots, x_d^{(0)})$
 - 2: **for** $i = 0, \dots, N - 1$ **do**
 - 3: **for** $j = 0, 1, \dots, n$ **do**
 - 4: $x_j^{(i)} \sim Q_{x_1^{(i+1)}, \dots, x_{j-1}^{(i+1)}, x_{j+1}^{(i)}, \dots, x_d^{(i)}}(x_j^{(i+1)})$
 - 5: $\mathbf{x}^{(i+1)} = (x_1^{(i+1)}, x_2^{(i+1)}, \dots, x_d^{(i+1)})$
 - 6: Vráť $\mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(2)}, \dots, \mathbf{x}^{(N)}$.
-

Gibbsov generátor predpokladá, že možno rýchlo generovať jednotlivé súradnice z rozdelenia $Q_{x_1^{(i+1)}, \dots, x_{j-1}^{(i+1)}, x_{j+1}^{(i)}, \dots, x_d^{(i)}}(x_j^{(i+1)})$.

V prípade rovnomerného generovania v polyédri je daný predpoklad splnený, vďaka linearite nerovníc pri H-reprezentácii polyédra možno ľahko generovať na úsečke $\mathbf{d}_{i,j} \cap S$. Hraničné body úsečky vieme zo systému nerovností $Ax \geq b$ vypočítať priamo bez lineárneho programovania, čiže generovať z týchto rozdelení je obzvlášť jednoduché.

Ako špeciálny prípad Metropolis–Hastings algoritmu má Gibbsov generátor podobné vlastnosti ako Metropolis–Hastings algoritmus. Jeho hlavnou výhodou je, že je jednoduchý a neobsahuje žiadne parametre. Môžeme si všimnúť, že generovanie bodu z $Q_{\mathbf{x}}$ trvá lineárne dlho od rozmeru priestoru, preto pri zväčšovaní počtu rozmerov priestoru rastie čas potrebný na vygenerovanie bodu asymptoticky kvadraticky. Preto očakávame, že v porovnaní s Hit–and–Run generátorom bude Gibbsov generátor pomalší.

1.2 Zamietacie metódy

Zamietacie metódy nám poskytujú jeden zo spôsobov rovnomerného generovania bodov na určitej množine. Myšlienka za nimi je nasledovná: Označme si X množinu, na ktorej chceme rovnomerne náhodne generovať prvky. Predpokladajme, že nevieme priamo rovnomerne generovať body na X (X je veľarozmerná alebo komplikovane zadaná), no vieme rovnomerne generovať na množine S , $X \subset S$.

Náš generátor G_S bude pracovať nasledovne:

Algorithm 4 Zamietacia metóda

```

1: for  $i = 1, \dots, N$  do
2:   repeat Vygeneruj bod  $\mathbf{x}^{(i)} \in S$  rovnomerne náhodne
3:   until  $\mathbf{x}^{(i)} \in X$ 
4: Vráť  $\mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(2)}, \dots, \mathbf{x}^{(N)}$ 

```

Generátor G_S vygeneruje bod $\mathbf{x} \in S$ rovnomerne náhodne, ak je ten bod aj z X , tak ho vráti ako výstup, inak vygeneruje nový bod $\mathbf{x} \in S$. Všimnime si, že generátor G_S je závislý iba od S a že generuje body na $X \cap S = X$ rovnomerne náhodne.

Označme si $\lambda(M)$ objem množiny M . Očakávaná rýchlosť generovania závisí od toho, koľkokrát G_S vygeneruje bod mimo X . Z rovnomernosti G_S je tá pravdepodobnosť rovná $\frac{\lambda(S-X)}{\lambda(S)} = 1 - \frac{\lambda(X)}{\lambda(S)}$. Označme si p_k pravdepodobnosť, že G_S vygeneruje bod z X na k -ty pokus, t.j. najprv $k-1$ krát vygeneruje bod mimo X a potom vygeneruje bod z X . Platí $p_k = (1 - \frac{\lambda(X)}{\lambda(S)})^{k-1} \frac{\lambda(X)}{\lambda(S)}$, preto p_k patrí geometrickému rozdeleniu pravdepodobnosti. Očakávaný počet generovaní G_S je $E(G_S) = \sum_0^\infty k p_k = \frac{\lambda(X)}{\lambda(S)} \sum_0^\infty k (1 - \frac{\lambda(X)}{\lambda(S)})^{k-1} = \frac{\lambda(X)}{\lambda(S)} \frac{1}{(1 - \frac{\lambda(X)}{\lambda(S)})^2} = \frac{\lambda(S)}{\lambda(X)}$.

Táto metóda generovania je vhodná, ak je $\frac{\lambda(S)}{\lambda(X)}$ dostatočne malé, t.j. ak je obal S relatívne malý oproti polyédru X . Ak je $\frac{\lambda(S)}{\lambda(X)} \sim \infty$, tak je táto metóda nepoužiteľná.

Navyše, ak poznáme objem S , tak táto metóda nám ako vedľajší produkt poskytne aj štatistické intervaly spoľahlivosti pre objem X .

TODO v prípade potreby rozpísať

1.2.1 Použitie na generovanie bodu vnútri polyédru

Zamyslime sa nad tým, ako by sme vedeli použiť túto metódu na generovanie bodu vnútri polyédru. Ako množinu možných S , $X \subset S$ môžeme použiť najmenší kváder so stranami rovnobežnými s osami. Vypočítať súradnice kvádra je ľahké, stačí nám to spraviť raz pred (začatím generovania) pomocou lineárneho programovania.

Žiaľ, pre takúto množinu S môže byť podiel $\frac{\lambda(S)}{\lambda(X)}$ byť ľubovoľne veľký. Ako príklad na takú množinu X uveďme kváder s obsahom k pozdĺž diagonály kocky $[0, 1]^n$, dotýkajúci sa každej steny kocky $[0, 1]^n$. Zrejme najmenšia množina S (kváder so stranami rovnobežnými s osami) obaľujúca X je kocka $[0, 1]^n$, ktorá má obsah 1. Platí $\frac{\lambda(S)}{\lambda(X)} = \frac{1}{k}$. Keďže vieme nájsť kváder taký, že sa dotýka stien kocky $[0, 1]^n$ a k je ľubovoľne malé, tak očakávaná dĺžka generovania touto metódou (pre danú množinu S) je ľubovoľne veľká.

Ako ďalšia možná množina S prichádza do úvahy elipsoid obaľujúci polyéder. Keďže

chceme, aby bol podiel $\frac{\lambda(S_{MVEE})}{\lambda(X)}$ čo najmenší, budeme skúmať elipsoid s najmenším obsahom obaľujúci polyéder — Minimum Volume Enclosing Elipsoid (ďalej MVEE). Môžeme si všimnúť, že MVEE elipsoid obsahuje veľa informácie o tom, ako vyzerá polyéder. Keďže elipsoid je jednotková guľa zobrazená lineárnou transformáciou, možno generovať body vnútri elipsoidu ako obrazy bodov vygenerovaných vnútri jednotkovej gule v lineárnej transformácii. Nájsť daný elipsoid rýchlo vieme pomocou REX algoritmu, ktorému je venovaná ďalšia kapitola.

Pre túto metódu vieme dokonca odhadnúť rýchlosť generovania. Na odhadnutie veľkosti $\lambda(S_{MVEE})$ možno využiť fakt, že ku každému konvexnému telesu C existuje (unikátny) vpísaný elipsoid s najväčším objemom (takzvaný Johnov elipsoid). Podľa [1] Johnov elipsoid pre konvexné d -rozmerné teleso C (v našom prípade polyéder X) zobrazený rovnoľahlosťou so stredom s centre elipsoidu a koeficientom d obsahuje celé teleso C . Tým pádom objem MVEE elipsoid je nanajvyš d -krát väčší ako objem Johnovho elipsoidu, preto je nanajvyš d -krát väčší ako objem telesa C .

$$\frac{\lambda(S_{MVEE})}{\lambda(X)} \leq \frac{d\lambda(S_{JE})}{\lambda(X)} < \frac{d\lambda(X)}{\lambda(X)} = d,$$

kde S_{JE} je Johnov elipsoid prislúchajúci ku polyéдру X . Očakávaný počet generovaní pomocou nadmnožiny S_{MVEE} je teda najviac počtu rozmerov.

Keďže najjednoduchšia množina S , v ktorej vieme generovať, je kváder, ako ďalšiu uvažovanú množinu S možno zvážiť najmenší kváder obaľujúci MVEE elipsoid (bez podmienky, že jeho strany sú rovnobežné s osami sústavy). Zrejme osi kvádra budú zhodné s osami MVEE elipsoidu. Označme si daný kváder S_K a metódu generovania založenú na S_K kvádru metóda. Pre S_K platí, že je obrazom kocky $[0, 1]^n$ v zobrazení, ktoré zobrazí jednotkovú guľu na MVEE elipsoid.

Avšak, keďže tento kváder S_K nie je rovnobežný s osami sústavy, ako prirodzený spôsob rovnomerného generovania vnútri tohoto kvádra možno použiť generovanie vnútri kvádra (resp. kocky) s osami rovnobežnými s osami sústavy a následne zobrazené lineárnou transformáciou.

Tento prístup je analogický prístupu s MVEE elipsoidom. Dokonca, lineárne zobrazenia pri S_K a S_{MVEE} sú rovnaké. Rozdiel je jedine v tom, že pri S_{MVEE} rovnomerne generujeme na N -rozmernej jednotkovej guli (kde N je dimenzia priestoru), čo následne zobrazujeme lineárnym zobrazením. Pri S_K rovnomerne generujeme na N -rozmernej jednotkovej kocke (obaľujúcej N -rozmernú jednotkovú guľu), čo zobrazujeme lineárnym zobrazením na kváder S_K obaľujúci MVEE elipsoid.

Ukážme si, že pri dostatočne rýchlom rovnomernom generovaní bodov v guli kvádru metóda nie je rýchlejšia ako MVEE metóda. Porovnajme očakávaný čas týchto prístupov. Označme si t_z očakávaný čas výpočtu lineárneho zobrazenia, S_G N -rozmernú

jednotkovú guľu a t_G očakávaný čas vygenerovania bodu v nej, S_K N -rozmernú jednotkovú kocku a t_K očakávané čas vygenerovanie bodu v nej. Nakoniec si označme S_P množinu bodov hľadaného polyédra.

Očakávaný čas na vygenerovanie bodu pomocou MVEE elipsoidu je $\frac{\lambda(S_G)}{\lambda(S_P)} t_z t_G = \frac{t_z}{\lambda(S_P)} t_G \lambda(S_G)$, očakávaný čas na vygenerovanie pomocou obaľujúceho kvádra $\frac{\lambda(S_K)}{\lambda(S_P)} t_z t_K = \frac{t_z}{\lambda(S_P)} t_K \lambda(S_K)$. Podiel očakávaných časov je

$$\frac{\text{očakávaný čas kvádrovej metódy}}{\text{očakávaný čas MVEE metódy}} = \frac{\frac{\lambda(S_K)}{\lambda(S_P)} t_z t_K}{\frac{\lambda(S_G)}{\lambda(S_P)} t_z t_G} = \frac{\lambda(S_K) t_K}{\lambda(S_G) t_G}.$$

Ak použijeme metódu na rovnomerné generovanie bodov vnútri gule s očakávaným časom $t_G \leq \frac{\lambda(S_K) t_K}{\lambda(S_G)}$, tak podiel očakávaných trvaní metód bude menší-rovný ako jedna, teda kvádrová metóda bude pomalšia.

Všimnime si, že zamietacia metóda na generovanie bodov v S_G pomocou nadmnožiny S_K má očakávaný počet generovaní rovný $\frac{\lambda(S_K) t_K}{\lambda(S_G)}$, preto očakávané trvanie vygenerovania bodu pomocou nej je $\frac{\lambda(S_K) t_K}{\lambda(S_G)}$. Týmto sme ukázali, že ak by sme pri generovali body v polyédri pomocou MVEE metódy, pričom rovnomerné generovanie bodov v S_G by sme realizovali pomocou zamietacej metódy s nadmnožinou S_K , dostali by sme presne rýchlosť kvádrovej metódy. Keďže existujú aj rýchlejšie metódy rovnomerného generovania vnútri gule, kvádrová metóda je pomalšia ako MVEE metóda. Ďalej sa ňou nebudeme zaoberať.

1.3 Rovnomerné generovanie bodov v polyédri pomocou MVEE elipsoidu

V tejto podkapitole sa budeme bližšie zaoberať MVEE metódou, ako pomocou už vypočítaného MVEE elipsoidu možno rovnomerne generovať body vnútri zadaného polyédra. Budeme používať zamietaciu metódu, vygenerujeme bod v elipsoide a overíme, či je daný bod tiež v polyédre.

Nakoľko každý elipsoid je jednotková guľa zobrazená lineárnym zobraznením, na rovnomerné generovanie v MVEE elipsoide najprv rovnomerne vygenerujeme bod v jednotkovej guli a následne ho zobrazíme daným lineárnym zobraznením do bodu v MVEE elipsoide. Rovnomernosť generovania sa zachová **TODO prečo**.

Na rovnomerné generovanie bodu \mathbf{x} v d -rozmernej jednotkovej guli so stredom v nule najprv vygenerujeme d -rozmerný smerový vektor rovnomerne náhodne a následne vygenerujeme vzdialenosť bodu \mathbf{x} od nuly tak, aby mali oblasti rôzne vzdialené od 0 rovnakú pravdepodobnosť na vygenerovanie.

Na rovnomerné vygenerovanie d -rozmerného smerového vektoru vygenerujeme bod v d -rozmernom centrálne symetrické rozdelenie a následne ho zobrazíme na jednotkovú sféru (rovnako ako pri generovaní smeru Hit-and-Run generátora). Následne vygenerujeme vzdialenosť od nuly podľa rozdelenia daného hustotou $h : [0, 1] \rightarrow [0, 1]$:

$$h(\mathbf{x}) = \frac{\mathbf{x}^d}{\int_0^1 y^d dy}$$

Pri generovaní z danej hustoty získame rovnomerné rozdelenie na guli. Zobrazenie bodu \mathbf{x} z d -rozmernej sféry do d -rozmernej gule možno vyjadriť pomocou generátora $U(0, 1)$ z rovnomerného rozdelenia na $(0, 1)$ ako

$$f(\mathbf{x}) = \mathbf{x} \cdot U(0, 1)^{\frac{1}{d}}$$

.

Pri danej funkcii má generovaný bod \mathbf{x} rovnakú pravdepodobnosť, že padne do ľubovoľne vzdialenej oblasti s rovnakým obsahom, dané rozdelenie je rovnomerné.

Kapitola 2

Metódy na riešenie problému optimálneho návrhu

V tejto kapitole si predstavíme Randomized exchange algoritmus [4] (ďalej REX) ako metódu na riešenie problému optimálneho návrhu (optimal design problem). Táto kapitola je čerpaná z článku [4].

Cieľom problému optimálneho riadenia je nájsť návrh minimalizujúci kritérium optimality. Pri návrhoch experimentov to zodpovedá nájdeniu návrhu experimentov minimalizujúceho výchylku parametrov.

Vďaka ekvivalencii problému D -optimálneho návrhu a minimum volume enclosing elipsoidu (MVEE) možno optimálny návrh vhodného modelu experimentov využiť aj na riešenie MVEE problému. Ak vrcholy polyédra P vo V -reprezentácii stotožníme s lineárnymi regressormi v probléme D -optimálneho návrhu, z riešenia D -optimálneho návrhu pre dané regressory môžeme vypočítať MVEE elipsoid prislúchajúci k polyéдру P .

Zavedme si označenia využívané pri probléme optimálneho riadenia. Označme si množinu pozorovaných bodov návrhov \mathfrak{X} . Označme návrh ako n -rozmerný vektor \mathbf{w} s nezápornými prvkami so súčtom 1. Pri probléme optimálneho návrhu, komponent w_x vektoru \mathbf{w} predstavuje počet pokusov v bode $x \in \mathfrak{X}$. Označme si $\mathbf{f}(x) \in \mathbb{R}^n$ lineárny regresor prislúchajúci ku x . Predpokladajme, že model je nesingulárny v zmysle, že $\{\mathbf{f}(x) | x \in \mathfrak{X}\}$ generuje \mathbb{R}^n . Označme nosič návrhu \mathbf{w} ako $\text{supp}(\mathbf{w}) = \{x \in \mathfrak{X} | w_x > 0\}$. Množina všetkých návrhov tvorí pravdepodobnostný simplex v \mathbb{R}^n , označme ju Ξ (je kompaktná a konvexná). Označme si $\mathbf{M}(\mathbf{w})$ informačnú maticu prislúchajúcu k návrhu \mathbf{w} , platí

$$\mathbf{M}(\mathbf{w}) = \sum_{x \in \mathfrak{X}} w_x \mathbf{f}(x) \mathbf{f}'(x).$$

Taktiež si označme výchilku \mathbf{w} ako $\mathbf{d}(\mathbf{w})$ s komponentmi

$$d_x(\mathbf{w}) = \mathbf{f}'(x)\mathbf{M}^{-1}(\mathbf{w})\mathbf{f}(x), x \in \mathfrak{X}.$$

Z predpokladu, že model je nesingulárny vyplýva, že \mathbf{M}^{-1} existuje. Označme si $\Phi_D : S_+^m \rightarrow \mathbb{R} \cup \{-\infty\}$, kritérium D -optimality,

$$\Phi_D(\mathbf{w}) = (\det(\mathbf{M}))^{1/n}.$$

Cieľom problému optimálneho návrhu je maximalizovať $\Phi_D(\mathbf{M}(\mathbf{w}))$ vzhľadom na \mathbf{w} , t.j. nájsť optimálny návrh

$$\mathbf{w}^* = \arg \max_{\mathbf{w} \in \Xi} \{\Phi_D(\mathbf{M}(\mathbf{w}))\}.$$

Podľa [4], pre verziu D -optimality Ψ splňujúcu $\Psi(\mathbf{M}) = \log \det(\mathbf{M})$ platí, že

$$d_x(\mathbf{w}) = \lim_{\alpha \rightarrow 0_+} \frac{\Psi[(1-\alpha)\mathbf{M}(\mathbf{w}) + \alpha\mathbf{M}(\mathbf{e}_x)] - \Psi(\mathbf{M}(\mathbf{w}))}{\alpha} + n,$$

kde \mathbf{e}_x je singulárny návrh v x . Z tohoto tvaru vidno, že pri iteratívnom spôsobe rátania D -optimality možno použiť \mathbf{d} na určenie smeru, v ktorom hľadať ďalší návrh.

Pre polyéder v H -reprezentácii zadaný bodmi $\{\mathbf{z}_1, \dots, \mathbf{z}_n\}$ ($\mathbf{z}_i \in \mathbb{R}^m$ pre $i = 1, \dots, n$) je možno MVEE vypočítať ako

$$P(\bar{\mathbf{H}}, \bar{\mathbf{z}}) = \{\mathbf{z} \in \mathbb{R}^m | (\mathbf{z} - \bar{\mathbf{z}})' \bar{\mathbf{H}} (\mathbf{z} - \bar{\mathbf{z}}) \leq 1\},$$

kde $\bar{\mathbf{z}} = \sum_{i=1}^n w_i^* \mathbf{z}_i$, $\bar{\mathbf{H}} = \frac{1}{m} [\sum_{i=1}^n w_i^* (\mathbf{z}_i - \bar{\mathbf{z}})(\mathbf{z}_i - \bar{\mathbf{z}})']^{-1}$, pričom \mathbf{w}^* je D -optimálny návrh pre regressory $\mathbf{f}_i = (1, \mathbf{z}_i')'$ pre $i = 1, \dots, n$.

Vzhľadom na dôležitosť MVEE elipsoidu pre túto prácu a kvôli lepšiemu pochopeniu REX algoritmu sa najprv pozrieme na jednoduchšie metódy riešenia problému optimálneho návrhu.

2.1 Základné metódy na riešenie problému optimálneho návrhu

Najprv si predstavíme metódu Subspace Ascend Method (ďalej SAM) ako všeobecnú iteratívnu metódu na riešenie problému optimálneho návrhu a Vertex Exchange Method (VEM) ako jej konkrétnu realizáciu. Následne sa pozrieme na REX algoritmus ako na špeciálny prípad SAM, ktorý kombinuje VEM metódu s pažravým prístupom.

2.1.1 Subspace Ascend Method

SAM algoritmus postupuje iteratívne. V každej iterácii si vyberie podpriestor v ktorom sa bude hýbať a následne spraví optimálny krok v danom podpriestore:

Algorithm 5 Subspace Ascend Method (SAM) [4]

- 1: Zvoľ regulárny n rozmený návrh $\mathbf{w}^{(0)}$
 - 2: **while** $\mathbf{w}^{(k)}$ nespĺňa podmienky zastavenia **do**
 - 3: Zvoľ podmnožinu bodov $S_k \subset \mathfrak{X}$
 - 4: Nájdí aktívny podpriestor Ξ ako $\Xi_k \leftarrow \{\mathbf{w} \in \Xi | \forall x \notin S_k, w_x = w_x^{(k)}\}$
 - 5: Vypočítaj $\mathbf{w}^{(k+1)}$ ako riešenie $\max_{\mathbf{w} \in \Xi_k} \Phi_D(\mathbf{M}(\mathbf{w}))$ spĺňajúce $\Phi_D(\mathbf{M}(\mathbf{w}^{(k+1)})) \geq \Phi_D(\mathbf{M}(\mathbf{w}^{(k)}))$ **TODO nie je tá podmienka vždy splnená aj bez explicitného overenia?**
 - 6: Nastav $k \leftarrow k + 1$
 - 7: Vráť \mathbf{w}
-

SAM algoritmus každým krokom nezmenší funkciu Φ_D , teda sa hýbe smerom k optimu.

2.1.2 Vertex Exchange Method

Algoritmus VEM možno vnímať ako konkrétnu realizáciu SAM algoritmu, postupuje taktiež iteratívne. V kroku z návrhu \mathbf{w} nájde index k minimalizujúci $\text{supp}(\mathbf{w})$, l minimalizujúci \mathfrak{X} . Ako ďalší návrh \mathbf{w}' zvolí návrh z úsečky $[w_k w_l]$ maximalizujúci $\Phi_D(\mathbf{M}(\mathbf{w}'))$.

Algorithm 6 Vertex Exchange Method (VEM) [4]

- 1: Zvoľ regulárny n rozmerný návrh \mathbf{w}
 - 2: **while** \mathbf{w} nespĺňa podmienky zastavenia **do**
 - 3: Vypočítaj $k \leftarrow \arg \min_{u \in \text{supp}(\mathbf{w})} \{d_u(\mathbf{w})\}$
 - 4: Vypočítaj $l \leftarrow \arg \max_{v \in \mathfrak{X}} \{d_v(\mathbf{w})\}$
 - 5: Vypočítaj $\alpha^* \leftarrow \arg \max_{\alpha \in [-w_l, w_k]} \{\Phi_D(\mathbf{M}(\mathbf{w} + \alpha \mathbf{e}_l - \alpha \mathbf{e}_k))\}$
 - 6: Nastav $w_k \leftarrow w_k - \alpha^*$
 - 7: Nastav $w_l \leftarrow w_l + \alpha^*$
 - 8: Vráť \mathbf{w}
-

Krok VEM algoritmu sa označuje ako leading Bohning exchange (ďalej LBE). Dvojica (k, l) sa označuje ako pár LBE.

2.2 Radomized Exchange Algorithmus

V tejto podkapitole popíšeme randomized exchange algoritmus (REX) predstavený v [4]. Dá sa na neho pozeráť ako na špeciálny prípad SAM algoritmu. REX algoritmus kombinuje kroky VEM algoritmu a pažravých algoritmov. Podľa [4] je REX algoritmus v praxi rýchlejší ako všetky porovnané state-of-the-art algoritmy na riešenie problému optimálneho riadenia. Na uvedenie predstavy o rýchlosti REX algoritmu, medzi známe algoritmy na riešenie problému optimálneho riadenia patria algoritmy konvergujúce v lineárnom čase (napr. Khachiyanov algoritmus [7]). Konvergencia v lineárnom čase znamená, že do vzdialenosti ϵ od optima dôjdu v čase $\mathcal{O}(\log(\frac{1}{\epsilon}))$

Nech \mathbf{w} je regulárny návrh, nech $\mathbf{d}(\mathbf{w})$ je n -rozmerný vektor s komponentami $d_x(\mathbf{w})$. Hlavná myšlienka REX algoritmu je počnúc inicializovaným regulárnym návrhom \mathbf{w} iteratívne vyberať niekoľko návrhov (ich počet sa bude líšiť v rámci iterácii) a v náhodnom poradí vykonať optimálnu výmenu váh medzi vybranými bodmi. Optimálna výmena váh je analogická LBE kroku VEM algoritmu. Voľba návrhov závisí na $\mathbf{d}(\mathbf{w})$. Kroky REX algoritmu budú nasledovné:

- **Krok LBE.** Pri danom návrhu \mathbf{w} , vypočítaj $\mathbf{d}(\mathbf{w})$ a urob LBE krok daný nasledovne:

$$\alpha^* \leftarrow \arg \max_{\alpha \in [-w_l, w_k]} \{\Phi_D(\mathbf{M}(\mathbf{w} + \alpha \mathbf{e}_l - \alpha \mathbf{e}_k))\},$$

kde $k \in \arg \min_{u \in \text{supp}(\mathbf{w})} \{d_u(\mathbf{w})\}$, $l \in \arg \max_{v \in \mathfrak{X}} \{d_v(\mathbf{w})\}$. Optimálny krok $\alpha_{k,l}^*(\mathbf{w})$ nazvime *nulujúci*, ak je rovný buď $-w_l$ alebo w_k . To zodpovedá prípadu, keď sme sa optimálnym krokom pohli do niektorého z návrh w_l alebo w_k .

- **Výber aktívneho podpriestoru.** Podpriestor $S \subset \mathfrak{X}$, v ktorom sa pohneme bude zvolený ako zjednotenie dvoch množín. Jednou vybranou pažravým procesom (S_{greedy}) a druhou ako nosič návrhu \mathbf{w} (S_{support}).

- **Pažravá množina.** Nech $L = \min(\gamma m, n)$ je počet návrhov, ktoré vyberieme. Potom zvoľ S_{greedy} ako

$$S_{\text{greedy}} = \{l_1^*, \dots, l_L^*\} \subset \mathfrak{X},$$

kde l_i^* je najväčšia zložka vektoru $\mathbf{d}(\mathbf{w})$. Platí $L = |S_{\text{greedy}}|$.

- **Nosič.** Nastav

$$S_{\text{support}} = \text{supp}(\mathbf{w}).$$

Označme K veľkosť nosiča, $K = |\text{supp}(\mathbf{w})| = |S_{\text{support}}|$.

- **Aktívny podpriestor.** Aktívny podpriestor S je definovaný ako

$$S = S_{\text{greedy}} \cup S_{\text{support}}.$$

Váhy návrhov mimo aktívneho podpriestoru nebudú upravované v tejto iterácii.

- **Krok v aktívnom podpriestore.** Teraz vykonáme krok, v ktorom aktualizujeme hodnoty w_v pre $v \in S$. Návrhy w_v pre $v \notin S$ ostnú nezmenené.

- **Tvorba párov.** Nech (k_1, \dots, k_K) je uniformne náhodná permutácia S_{support} a nech (l_1, \dots, l_L) je uniformne náhodná permutácia S_{greedy} . Potom postupnosť aktívnych dvojíc návrhov, na ktorých budú vykonané optimálne výmeny váh je

$$(k_1, l_1), (k_2, l_1), \dots, (k_1, l_L), (k_2, l_L), \dots, (k_K, l_L).$$

- **Aktualizácia.** Vykonaj postupne všetky Φ_D -optimálne LBE kroky medzi návrhmi z $(k_1, l_1), \dots, (k_K, l_L)$ s prisluchajúcimi aktualizáciami \mathbf{w} a $\mathbf{M}(\mathbf{w})$.

REX algoritmus vyzerá nasledovne:

Algorithm 7 REX algoritmus [4]

```

1: Zvoľ regulárny  $n$ -rozmerný návrh  $\mathbf{w}$ 
2: while  $\mathbf{w}$  nespĺňa podmienky zastavenia do
3:   Urob LBE krok vo  $\mathbf{w}$ 
4:   Nech  $k$  je vektor zodpovedajúci náhodnej permutácii prvkov  $\text{supp}(\mathbf{w})$ 
5:   Nech  $l$  je vektor zodpovedajúci náhodnej permutácii  $L = \min(\gamma m, n)$  indexov
      prvkov  $\mathbf{d}(\mathbf{w})$ 
6:   for  $l = 1 \dots L$  do
7:     for  $k = 1 \dots K$  do
8:        $\alpha^* \leftarrow \arg \max_{\alpha \in [-w_l, w_k]} \{\Phi_D(\mathbf{M}(\mathbf{w} + \alpha \mathbf{e}_l - \alpha \mathbf{e}_k))\}$ 
9:       if LBE krok bol nulujúci alebo  $\alpha^* = -w_l$  alebo  $\alpha^* = w_k$  then
10:         $w_k \leftarrow w_k - \alpha^*$ 
11:         $w_l \leftarrow w_l + \alpha^*$ 
12: Vráť  $\mathbf{w}$ 

```

Poznámka: popísali sme REX algoritmus vzhľadom na kritérium D -optimality. Podľa [4] REX algoritmus funguje aj vzhľadom na A -optimalitu pri nahradení funkcie d_x funkciou a_x definovanou ako

$$a_x(\mathbf{w}) = \mathbf{f}'(x) \mathbf{M}^{-2}(\mathbf{w}) \mathbf{f}(x), x \in \mathfrak{X}.$$

a nahradení funkcie Φ_D funkciou Φ_A definovanou ako

$$\Phi_A(\mathbf{w}) = (\text{tr}(\mathbf{M})^{-1})^{-1}.$$

Pri tejto verzii problému však článok [4] nedokazuje konvergenciu algoritmu. Pre účely tejto práce to nie je podstatné.

TODO prečo M ostáva regulárne?

Kapitola 3

Porovnanie metód

Táto kapitola obsahuje praktické porovnania Metropolis–Hastings algoritmov spomenutých v prvej kapitole so zamietacou metódou pomocou MVEE elipsoidu. Porovnania boli naprogramované v jazyku Julia a spustené na počítači s procesorom Intel Core i5-6200U s frekvenciou 2.3GHz a RAM pamäťou veľkosti 8 GB pod systémom Linux.

Ako základ náhody bude náš generátor bodu v polyédre používať rovnomerný generátor čísel na $[0, 1]$ (ďalej $U[0, 1]$). Pomocou $U[0, 1]$ možno triviálne generovať bod na $[0, k]$ (prenásobením konštantou k), tiež možno generovať bod na $[a, b]$ (vygenerovaním bodu na $[0, -a + b]$ a pripočítaním konštanty a , alebo bod na $[0, 1]^n$ (postupným vygenerovaním súradníc). Treba podotknúť, že generovanie na iných polyédroch, najmä v priestoroch vysokej dimenzie, je však vo všeobecnosti netriviálny problém.

Okrem generátora $U[0, 1]$ budeme používať generátor z jednorozmerného normálneho rozdelenia $N(\mu, \sigma)$ s priemerom $\mu = 0$ a odchýlkou $\sigma = 1$. Vďaka rotačnej symetrickosti normálneho rozdelenia možno generovaním po zložkách pomocou $N(\mu, \sigma)$ získať d -rozmerné viacrozmerné normálne rozdelenie. Keďže viacrozmerné normálne rozdelenie je centrálné symetrické, možno ho použiť na generovanie na d -rozmernej sfére ako bolo popísané v 1.3.

Ako možné parametre porovnania možno uvažovať rýchlosť generovania bodov a vierohodnosť vygenerovaného rozdelenia (ako sa rozdelenie vygenerovaných bodov podobá rovnomernému rozdeleniu v polyédri). Nakoľko v praxi pri generovaní malého počtu bodov nezáleží na efektivite generátora, možno použiť hocijakú zo spomenutých metód. Keďže tento prípad je v praxi nezaujímavý, v rámci testovania budeme porovnávať generovanie veľkého počtu bodov.

Pozrime sa na vierohodnosť vygenerovaných bodov. Zamietacie metódy, špeciálne aj MVEE metóda, generujú presne rovnomerné rozdelenia v polyédri. Metropolis–

Hastings metódy sú v tomto smere nepresnejšie, generujú postupnosť, ktorá sa limitne blíži rovnomernému rozdeleniu v polyédri. Nakoľko uvažujeme generovanie veľkého počtu bodov, postupnosť vygenerovaných bodov sa bude aj pre Metropolis–Hastings metódy blížiť rovnomernému rozdeleniu v polyédri. Preto ak náhodne preusporiadame postupnosť takto vygenerovaných bodov, dostaneme rozdelenie bodov podobné rovnomernému rozdeleniu v polyédri, kde navyše po sebe idúce body nie sú korelované (ako pri postupnosti priamo vygenerovaných bodov). Preto možno predpokladať, že vierohodnosť vygenerovanej postupnosti bodov bude v oboch prístupoch vysoká. Ďalej sa ňou nebudeme zaoberať, budeme porovnávať výlučne rýchlosť generovania veľkého počtu bodov. Taktiež, keďže nás zaujíma generovanie veľkého počtu bodov, do rýchlosti generovania nebudeme zarátavať rýchlosť inicializácie algoritmu, v prípade zamietacej metódy pomocou MVEE elipsoidu nebudeme brať do úvahy rýchlosť počítanie MVEE elipsoidu.

Pred spustením testovania sme predpokladali, že najrýchlejší generátor bude generátor pomocou zamietacej metódy využívajúcej MVEE elipsoid, táto práca bude obsahovať implementáciu REX algoritmu ako rýchly nástroj na hľadanie MVEE elipsoidu (namiesto hľadania elipsoidu inou pomalšou, no jednoduchšou metódou).

3.1 Generovanie polyédrov

Metódy boli porovnávané na veľarozmerných polyédroch. Nakoľko predpokladáme, že v praxi pri generovaní bodov vnútri polyédrov sa štruktúra polyédrov od problému k problému líši, v rámci tejto práce sme na testovanie algoritmov zvolili množinu polyédrov ako množinu náhodne vygenerovaných polyédrov. Týmto sme sa vyhli patologickým prípadom polyédrov.

3.1.1 Definícia náhodných polyédrov

Zadeinovať náhodný polyéder je samo o sebe zaujímavý problém. Ako jeden z možných spôsobov definovania prichádza do úvahy definovanie cez V –reprezentáciu polyédru, ako konvexný obal náhodných bodov v priestore. Táto definícia je síce nepresná, no poskytuje návod, ako aj možno takto definovaný polyéder generovať — vygenerovať množinu bodov V –reprezentácie a následne, v prípade záujmu o zlepšenie efektivity, možno z danej množiny vyhodíť body neležiace na obale polyédra. Nepresnosť spomenutej definície spôsobuje dva zásadné problémy. Po prvé, nie je jasné, koľko bodov polyédru je potrebné vygenerovať. Ak sa obmedzíme na vygenerovanie v bodov, tak potom takto nemožno vygenerovať polyédre s viac ako v vrcholmi. Na odstránenie tohto problému by bolo nutné generovať číslo v z nejakého, pravdepodobne zložitého rozdelenia. Ao druhý, závažnejší problém je, že nemožno generovať body v priestore

rovnomerne náhodne. Už jednorozmerný prípad je problematický — nemožno rovnomerne náhodne generovať reálne čísla. To súvisí s tým, že pri rovnomernom generovaní reálnych čísel na $(-\infty, \infty)$ majú sú všetky intervaly (a, b) nulovú hustotu.

Ako iný možný spôsob možno definovať náhodný polyéder pomocou H-reprezentácie, ako množinu bodov splňujúcu náhodnú množinu lineárnych obmedzení (nadrovín), pomocou náhodnej matice A a náhodného vektoru b . Táto definícia nám tiež dáva návod, ako generovať polyédre. Stačí náhodne vygenerovať lineárne nerovnosti — maticu A a vektor b , polyéder bude množina bodov splňujúce nerovnosť $Ax \geq b$. Podobne ako pri predchádzajúcom pokuse o definovanie náhodných polyédrov, aj tu nepresnej definícii spôsobujú problémy. Prvý problém je, že nie je jasné, koľko nerovností je potrebné vygenerovať. Analogický problém predchádzajúcej definície, ak sa obmedzíme na vygenerovanie h nadrovín, tak potom takto nemožno vygenerovať polyédre s viac ako h stenami. Ďalší netriviálny problém je, ako náhodne zvoliť nadroviny? Nadrovina je definovaná otočením (prislúchajúcim riadkom matice A) a posunutím (daným prislúchajúcim prvkom vektoru b). Na to, aby sme dostali náhodné otočenie nadroviny s rovnakou pravdepodobnosťou, stačí vygenerovať prvky matice nezávisle A z normálneho rozdelenia, vďaka rotačnej symetrii normálneho rozdelenia bude každá nadrovina cez počiatok sústavy rovnako pravdepodobná. Avšak náhodne vygenerovať posunutie nadroviny od počiatku sústavy je úloha ekvivalentná rovnomernému vygenerovaniu reálneho čísla. Ako ďalší problém tohoto prístupu je, že možno ľahko vygenerovať prázdny polyéder (množina bodov splňujúcich $Ax \geq b$ vie byť ľahko prázdna).

Keďže zameranie práce nie na generovanie polyédrov ako také, ďalej v práci upustíme od formálne presnej definície náhodného polyédra, uspokojíme sa s menšími nepresnosťami.

3.1.2 Reprezentácia generovania polyédra

Na generovanie bodov pomocou Metropolis–Hastings metód potrebujeme mať polyéder zadaný v H-reprezentácii, no REX algoritmus na nájdenie MVEE elipsoidu potrebuje ako vstup polyéder vo V-reprezentácii. Preto je nutné v rámci generovania vygenerovať polyéder zároveň v H-reprezentácii aj vo V-reprezentácii. Potrebujeme vygenerovať polyéder v jednej reprezentácii a previesť ho do druhej. Daný prevod nie je súčasťou žiadnej metódy generovania bodov v polyédri, nebude súčasťou nášho generátora. Keďže bude pre každý polyéder spravený len raz, nie je nutné, aby bol rýchly.

Ako alternatíva ku generovaniu polyédrov v jednej reprezentácii a prevádzaniu do druhej reprezentácie možno porovnávať metódy aj inak. Predpokladajme, že máme ge-

nerátor G_H polyédrov v H-reprezentácii a generátor G_V polyédrov vo V-reprezentácii, pričom G_H a G_V generujú z rovnakého rozdelenia polyédrov. Ak by sme testovali Metropolis–Hastings metódy na veľkom množstve polyédrov vygenerovaných pomocou G_H a zamietaciu metódu pomocou MVEE elipsoidu na veľkom množstve polyédrov vygenerovaných pomocou G_V , výsledky budú podobné ako keby sme spomínané metódy testovali na rovnakých polyédroch. Nakoľko nájdenie generátorov G_H a G_V s rovnakým rozdelením polyédrov je potenciálne ťažší problém (už len zabezpečenie rovnakého rozdelenia obsahov polyédrov je netriviálne), tomuto alternatívnemu prístupu sa z dôvodu obmedzenému časovému rámcu práce venovať nebudeme.

Podme sa zamyslieť, v akej reprezentácii sa nám oplatí generovať polyéder. Teoreticky by mohlo byť možné, že pre nejakú triedu polyédrov je jedna ich reprezentácia exponenciálne väčšia ako ich druhá reprezentácia. T.j., že by mali jednu reprezentáciu veľkosti n a druhú veľkosti $\mathcal{O}(2^n)$. Polyédre z danej triedy by mohli byť pri testovaní problematické, nakoľko algoritmy využívajúce spomenutú reprezentáciu by boli značne znevýhodnené. Zišlo by sa nám ukázať, že niečo také nemôže nastať, t.j., že možno vzájomne polynomiálne odhadnúť veľkosti reprezentácii.

Keďže topologickú štruktúru polyédra možno zapísať ako planárny graf, možno jednoducho ukázať, že minimálna množina nerovností (stien) v H-reprezentácii a minimálna množina vrcholov vo V-reprezentácii sú asymptoticky rovnako veľké. Presnejšie, medzi počtom stien F a počtom vrcholov V v polyédra platí vzťah $F + V = E - 2$, kde E je počet hrán polyédra. Keďže E možno odhadnúť pomocou vzťahu $E \leq 3V - 6$ (pre $V > 2$), platí $F = E - 2 - V \leq 2V - 6$, preto $F \leq 2V - 6$. Taktiež, keďže v nedegenerovanom polyédri majú vrcholy stupňa aspoň 3, E možno odhadnúť pomocou súčtov stupňov vrcholov polyédra ako $E \geq \frac{3}{2}V$, z čoho získavame odhad $F = E - 2 - V \geq \frac{1}{2}V - 2$, preto $F \geq \frac{V}{2} - 2$.

Týmto sme ukázali, že pre ľubovoľný nedegenerovaný polyéder sú H-reprezentácia a V-reprezentácia asymptoticky rovnako veľké, až na lineárny faktor 2. Preto v rámci porovnania metód by nie je podstatné, či najprv náhodne vygenerujeme polyéder v H-reprezentácii, ktorú prevedieme do V-reprezentácie alebo či najprv vygenerujeme V-reprezentáciu, ktorú prevedieme do H-reprezentácie. V oboch prípadoch dostaneme asymptoticky rovnako veľké reprezentácie.

Ak máme danú aj stenovú aj vrchovú reprezentáciu polyédra, ktoré nie sú nutne minimálne (vzhľadom na počet vrcholov vo V-reprezentácii a počet stien v H-reprezentácii), môžeme jednoducho dané reprezentácie minimalizovať odstránením prebytočných nadrovín a vrcholov. Z H-reprezentácie možno odstrániť tie nadroviny, ktoré neprechádzajú aspoň tromi vrcholmi V-reprezentácie. Z V-reprezentácie možno odstrániť tie vrcholy, ktoré neležia na aspoň troch nadrovinách z H-reprezentácie. Takto získané represen-

tácie sú s pravdepodobnosťou 1 minimálne. Overiť, či bod x leží na nadrovine danej vektorom a a konštantou c je triviálne, stačí overiť rovnosť $a^T x = c$.

Generovanie polyédru vo H-reprezentácii

V rámci tejto práce je použitý algoritmus na generovanie náhodných polyédrov popísaný v [9]. Výstupom algoritmu je polyéder v H-reprezentácii, taký, že každý bod má rovnakú pravdepodobnosť byť vnútri.

Algoritmus využíva prístup Monte Carlo, funguje nasledovne: Najprv náhodne zvolí m nadrovín p_1, \dots, p_m , tie rozdeľujú priestor na niekoľko nie nutne ohraničených oblastí. Následne rovnomerne náhodne vygeneruje bod c v priestore, ako polyéder P_c zvolí algoritmus oblasť vymedzenú priamkami p_i , v ktorej leží c . Na záver overí, či je vygenerovaný polyéder P_c ohraničený vopred zvolenou hyperkockou. Ak áno, tak vráti P_c . Ak nie je, tak daný polyéder zahodí a generuje znovu.

Algorithm 8 Generátor náhodných polyédrov [9]

```

1: Náhodne vyber bez návratu  $n$  z  $m + 2n$  indexov obmedzení  $i_1, i_2, \dots, i_n$ 
2: Nastav  $B = [p^{i_1}, p^{i_2}, \dots, p^{i_n}]^T$ , zrejme  $B^{-1}$  existuje s pravdepodobnosťou 1
3: Nastav  $V = B^{-1}[\|p^{i_1}\|^2, \dots, \|p^{i_n}\|^2]^T$ 
4: Náhodne zvol'  $c \in \mathbb{R}^n$ 
5: Nastav  $y = c^T B^{-1}$ , zvol' nerovnosti  $P_c$  nasledovne:
6: for  $i = 0, 1, \dots, n$  do
7:   if  $y_i > 0$  then
8:     Nastav  $i$ -tu nerovnosť na  $\geq$ 
9:   else
10:    Nastav  $i$ -tu nerovnosť na  $\leq$ 
11: if  $P_c$  nie je celý v hyperkocke then
12:   Zamietni polyéder  $P_c$ , vráť sa na 1
13: else
14:   Odstráň obmedzenia hyperkocky, vráť  $P_c$ 
```

Môžeme si všimnúť, že bod c je vygenerovaný z rovnomerného rozdelenia v polyédri. Tento bod použijeme na inicializáciu Hit-and-Run generátora a Gibbsovo generátora.

Pri takomto generovaní v rámci P_c získame nadroviny p_i , ktoré neobsahujú žiadnu stenu polyédra. Tieto nadroviny sú zrejme nadbytočné, preto ich môžeme odtiaľ odstrániť postupom popísaným vyššie.

Prvky matice A a vektoru b boli generované z nezávislých normálnych rozdelení $N(0, 1)$. Na získanie V-reprezentácie z H-reprezentácie použili knižničné funkcie kniž-

níc Polyhedra a CDDLib (v jazyku Julia).

V rámci testovania dané generovanie polyédrov trvalo príliš dlho, preto sme kvôli zrýchleniu programu namiesto overenia, či je polyéder ohraničený jednotkovou hyperkockou (riadok 11 algoritmu) overili iba, či je polyéder ohraničený. Táto zmena spôsobuje, že náš generátor polyédrov taktiež vraca ohraničené polyédre, ktoré nie sú celé v jednotkovej hyperkocke. To spôsobuje, že bod c je generovaný z rovnomerného rozdelenia na prieniku polyédra a jednotkovej hyperkocky. Týmto už nevraciam polyéder taký, že každý bod má rovnakú pravdepodobnosť byť vnútri. Túto nepresnosť považujeme vzhľadom na problematickosť definície náhodného polyédra za nepodstatnú.

3.2 Inicializácia algoritmov

Na inicializáciu Metropolis–Hastings metód (Hit–and–Run generátora a aj Gibbsovho generátora) je potrebný akurát počiatočný bod vnútri polyédra. Ako počiatočný bod sme zvolili bod c určený pri generovaní polyédra, ktorý je vygenerovaný v polyédri rovnomerne náhodne. Na inicializáciu zamietacej metódy pomocou MVEE elipsoidu je potrebné vypočítať MVEE elipsoid. Pri inicializácii REX algoritmu je potrebné zvoliť počiatočný nosič tak, aby bola informačná matica M regulárna. V rámci práce bol nosič počiatočného návrhu zvolený ako $n + 4$ náhodných vrcholov. Vzhľadom na náhodnosť polyédra, dané vrcholy budú s pravdepodobnosťou 1 určovať regulárnu maticu M .

3.3 Porovnanie rýchlostí generovania

3.4 Najrýchlejší generátor

Záver

TODO

- výsledky práce
- prehľad použiteľných metód spolu s ich výsledkom praktického porovnania
- vlastný prínos
- možné rozšírenia práce

Táto kapitola je nedokončená.

Príloha

3.5 Zdrojový kód najrýchlejšieho generátora

Literatúra

- [1] Keith Ball. Ellipsoids of maximal volume in convex bodies. *arXiv:math/9201217*, September 1990. arXiv: math/9201217.
- [2] Ming-Hui Chen and Bruce W. Schmeiser. General Hit-and-Run Monte Carlo sampling for evaluating multidimensional integrals. *Operations Research Letters*, 19(4):161–169, October 1996.
- [3] Siddhartha Chib and Edward Greenberg. Understanding the Metropolis-Hastings Algorithm. *The American Statistician*, 49(4):327–335, November 1995.
- [4] Radoslav Harman, Lenka Filová, and Peter Richtárik. A Randomized Exchange Algorithm for Computing Optimal Approximate Designs of Experiments. *arXiv:1801.05661 [stat]*, January 2018. arXiv: 1801.05661.
- [5] Radoslav Harman and Vladimír Lacko. On decompositional algorithms for uniform sampling from n-spheres and n-balls. *Journal of Multivariate Analysis*, 101(10):2297–2304, November 2010.
- [6] Radoslav Harman and Vladimír Lacko. On decompositional algorithms for uniform sampling from n-spheres and n-balls. *Journal of Multivariate Analysis*, 101(10):2297–2304, November 2010.
- [7] Leonid G. Khachiyan and Michael J. Todd. On the complexity of approximating the maximal inscribed ellipsoid for a polytope. *Mathematical Programming*, 61(1):137–159, August 1993.
- [8] D. J. C. Mackay. Introduction to Monte Carlo Methods. In Michael I. Jordan, editor, *Learning in Graphical Models*, NATO ASI Series, pages 175–204. Springer Netherlands, Dordrecht, 1998.
- [9] Jerrold H. May and Robert L. Smith. Random polytopes: Their definition, generation and aggregate properties. *Mathematical Programming*, 24(1):39–54, December 1982.

- [10] Gareth O. Roberts and Jeffrey S. Rosenthal. Convergence of Slice Sampler Markov Chains. *Journal of the Royal Statistical Society: Series B (Statistical Methodology)*, 61(3):643–660, January 1999.