Véletlenszám-generátorok

5. rész

– egy MATLAB® alapú megközelítés –

Baja Zsolt, Vas Orsolya

Matematika és Informatika Intézet, Babeş–Bolyai Tudományegyetem, Kolozsvár, Románia

(bajazsolt98@gmail.com, vas.orsolya@yahoo.com)

5. labor / 2022. október 31. – november 4.

- Az elutasítás módszerének alapértelmezett változata azt feltételezte, hogy az $f : \mathbb{R}^d \to [0,1]$ sűrűségfüggvényű $X : \Omega \to \mathbb{R}^d$ valószínűségi vektor esetén létezik egy olyan $g : \mathbb{R}^d \to [0,1]$ sűrűségfüggvény és egy olyan $c \geq 1$ elutasítási konstans, amelyek esetén teljesül az
$$f(x) \leq cg(x), \forall x \in \mathbb{R}^d \quad (1)$$
egyenlőtlenség.
- A 4. labor számgenerátoraiban, az (1)-es egyenlőtlenségre épülő elutasítás módszerének alkalmazása során, az $\frac{f}{cg}$ arányt N-szer értékeltük ki, ahol az N geometriai eloszlású valószínűségi változó a bemutatott algoritmusok **ismételd–ameddig** ciklusainak lépésszámát mérte. Azt is kimutattuk, hogy az N várható értékét éppen az elutasítási konstans határozza meg, azaz
$$E(N) = c.$$
- Általában az $\frac{f}{cg}$ arány kiértékelése egy lassú és költséges művelet, mert az f sűrűségfüggvény alakja feltehetően bonyolult, ellenben találtunk volna más módszert is ilyen sűrűségfüggvényű valószínűségi változók mintavételezésére. Mi több előfordulhat, hogy az f explicit alakja nem ismert, mert vagy integrálalakban, vagy valamilyen nemlineáris egyenlet megoldásaként adott. Ilyen esetekben célszerű hatékonysági szempontok miatt az $\frac{f}{cg}$ tört kiértékelését vagy teljesen elkerülni, vagy használatát minimálisra csökkenteni.
- Ebben a részben a George Marsaglia által bevezetett [Marsaglia, 1977] közrefogás módszerét ismertetjük, amely elkerüli az $\frac{f}{cg}$ arány nagy valószínűséggel történő kiértékelését.

- A módszer valójában abból áll, hogy egy adott $f : \mathbb{R}^d \to [0, 1]$ sűrűségfüggvény esetén találjunk két olyan könnyen kiértékelhető $h_1, h_2 : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ függvényt, amelyre fennáll a

$$0 \leq h_1(x) \leq f(x) \leq h_2(x) \leq cg(x), \forall x \in \mathbb{R}^d \tag{2}$$

  egyenlőtlenség.
- Ha a (2)-es feltételt sikerül biztosítani, akkor az alábbi algoritmushoz hasonlóan járhatunk el f sűrűségfüggvényű valószínűségi változók generálására.

1. Algoritmus (A közrefogás módszere)

- *Bemenet:* a (2)-es feltételt kielégítő $f, g : \mathbb{R}^d \to [0, 1]$ sűrűségfüggvények és a $h_1, h_2 : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ határoló függvények, valamint az $n \geq 1$ természetes szám, amely a kimeneti mintavétel méretét határozza meg.
- *Kimenet:* az f sűrűségfüggvényű valószínűségi változónak egy n-elemű független $\{X_i\}_{i=1}^n$ mintavétele.

Minden $i = 1, 2, \ldots, n$ index esetén **végezd el**:

    ismételd:

        generáld az $U \sim \mathcal{U}([0, 1])$, valamint az ettől független g sűrűségfüggvényű Y valószínűségi változót

        $W \leftarrow Ucg(Y)$

        $L \leftarrow [W \leq h_1(Y)]$

        ha $[L == \text{hamis}]$

            akkor ha $W \leq h_2(Y)$, **akkor** $L \leftarrow [W \leq f(Y)]$

    ameddig $[L == \text{igaz}]$

$X_i \leftarrow Y$.

- Az 1. algoritmusban egy L nevű logikai változót vezettünk be arra számítva, hogy igaz értéket legtöbbször a $W \leq h_1(Y)$ összehasonlítás (úgynevezett *gyors elfogadási lépés*) során vesz fel. A fennmaradt esetekben az úgynevezett *gyors elutasítási lépést* ($W > h_2(Y)$) használjuk, továbbá csak azon ritka esetekben értékeljük ki a költséges $W \leq f(Y)$ összehasonlítást, amikor $h_1(Y) \leq W \leq h_2(Y)$.
- A gyors elfogadási és gyors elutasítási lépések elhagyásával a klasszikus elutasítás módszeréhez jutunk vissza a $W = Ucg(Y) \leq f(Y)$ leállási feltétel alkalmazásával. Vegyük észre, hogy minden egyes minta generálása várhatóan $E(N) = c$ lépésig tart, akárcsak a klasszikus elutasítás módszerére alapuló algoritmusok esetén!
- A továbbiakban az N_f valószínűségi változót tanulmányozzuk, mely azt számolja, hogy hány alkalommal értékeltük ki a költséges f sűrűségfüggvényt egy minta generálásakor.

- Jelölje W_j egy adott minta generálásakor az **ismételd–ameddig** ciklus j-edik iterációjában ($j = 1, 2, \ldots, N$) kapott W valószínűségi változót, valamint legyen Y_j az ugyanebben az iterációban generált g sűrűségfüggvényű Y valószínűségi változó!
- Ekkor az

$$N_f = \sum_{j=1}^{N} \mathbb{1}_{[h_1(Y_j)<W_j<h_2(Y_j)]} \tag{3}$$

egyenlőséget kapjuk, ahol $\mathbb{1}_A : \Omega \to \{0, 1\}$ az A eseményhez tartozó indikátor függvényt jelöli, azaz

$$\mathbb{1}_A(\omega) = \begin{cases} 1, & \text{ha } \omega \in A, \\ 0, & \text{ha } \omega \notin A. \end{cases}$$

- A továbbiakban a következőképpen gondolkodhatunk:

$$\begin{aligned}
E\left(N_f\right) &= E\left(N\right) E\left(\mathbb{1}_{[h_1(Y_1)<W_1<h_2(Y_1)]}\right) \\
&= E\left(N\right) P\left(h_1\left(Y_1\right) < W_1 < h_2\left(Y_1\right)\right) \\
&= E\left(N\right) \int_{\mathbb{R}^d} P\left(h_1\left(Y_1\right) < W_1 < h_2\left(Y_1\right) \middle| \, Y_1 = y\right) g\left(y\right) \mathrm{d}y \\
&= c \int_{\mathbb{R}^d} P\left(h_1\left(y\right) < Ucg\left(y\right) < h_2\left(y\right)\right) g\left(y\right) \mathrm{d}y \\
&= c \int_{\mathbb{R}^d} \frac{h_2\left(y\right) - h_1\left(y\right)}{cg\left(y\right)} g\left(y\right) \mathrm{d}y \\
&= \int_{\mathbb{R}^d} \left(h_2\left(y\right) - h_1\left(y\right)\right) \mathrm{d}y,
\end{aligned}$$

ahol az utolsó előtti lépésében felhasználtuk a (2)-es egyenlőtlenséget, valamint azt a tényt, hogy az U valószínűségi változó egyenletes eloszlású a $[0, 1]$ intervallumon.

- Amennyiben $h_1(x) \equiv 0$ és $h_2(x) \equiv cg(x)$, vagyis az f sűrűségfüggvényt nem fogjuk közre, akkor
$$E(N_f) = E(N) = c,$$
mert a klasszikus elutasítás módszeréhez kerülünk vissza.
- Ha viszont csak egy gyors elfogadási lépésünk van, azaz ha
$$0 \leq h_1(x) \leq f(x) \leq h_2(x) = cg(x), \forall x \in \mathbb{R}^d,$$
akkor
$$E(N_f) = c - \int_{\mathbb{R}^d} h_1(x)\,\mathrm{d}x.$$

- Egy $f:\mathbb{R}\to[0,1]$ alakú sűrűségfüggvény közrefogásához szükséges könnyen kiértékelhető alsó és felső becslőfüggvények szerkesztéséhez például az f Taylor-féle sorbafejtését használhatjuk.
- Ha az f sűrűségfüggvény n-szer folytonosan deriválható, akkor

$$f(x)=f(0)+\frac{x}{1!}f^{(1)}(0)+\frac{x^2}{2!}f^{(2)}(0)+\ldots+\frac{x^{n-1}}{(n-1)!}f^{(n-1)}(0)+\frac{x^n}{n!}f^{(n)}(\xi), \quad (4)$$

  ahol ξ az x paraméter előjelének függvényében egy $[0,x]$, vagy $[x,0]$ intervallumbeli szám, és $f^{(r)}(x)=\frac{\mathrm{d}^r}{\mathrm{d}x^r}f(x)$, $r=0,1,\ldots,n$.
- A (4)-es sorbafejtés utolsó tagját tanulmányozva, az f sűrűségfüggvény számára polinomiális alsó és felső becslőfüggvényeket szerkeszthetünk.

- Példaként térjünk vissza a standard normális eloszlás

$$f_{\mathcal{N}(0,1)}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{x^2}{2}},\ x \in \mathbb{R}$$

sűrűségfüggvényéhez!

- Vegyük észre, hogy az

$$e^{-x} = 1 - x + \frac{x^2}{2!} - \ldots + (-1)^{n-1} \frac{x^{n-1}}{(n-1)!} + (-1)^n \frac{x^n}{n!} e^{-\xi}$$

függvény minden $x \geq 0$ érték esetén a jól ismert

$$e^{-x} = \sum_{j=0}^{\infty} (-1)^j \frac{x^j}{j!}$$

sorbafejtés két egymás utáni tagja között húzódik!

- Ezért sajátosan teljesül az

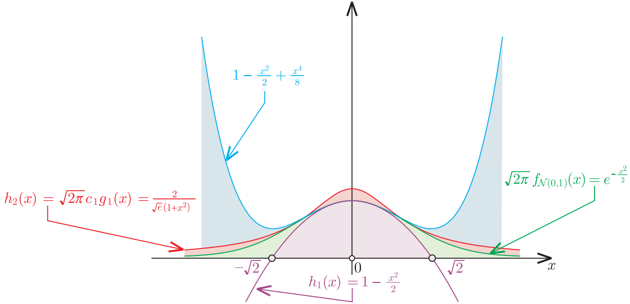
$$1 - x \leq e^{-x} \leq 1 - x + \frac{x^2}{2},\ \forall x \geq 0$$

egyenlőtlenség is, amit a standard normális eloszlás sűrűségfüggvényének az

$$1 - \frac{x^2}{2} \leq \sqrt{2\pi} f_{\mathcal{N}(0,1)}(x) \leq 1 - \frac{x^2}{2} + \frac{x^4}{8},\ \forall x \geq 0 \tag{5}$$

alakú közrefogására használhatunk fel (az x paramétert az $\frac{x^2}{2}$ törttel helyettesítettük).

- Tekintsük a $c_1 = \sqrt{\frac{2\pi}{e}}$ optimális elutasítási konstanst és a $\theta = 1$ paraméterű Cauchy-féle $g_1(x) = \frac{1}{\pi(1+x^2)}$, $x \in \mathbb{R}$ sűrűségfüggvényt, amelyeket a 4. labor 5. algoritmusához szerkesztettünk!
- Tanulmányozzuk az 1. ábrát és a $W = \sqrt{2\pi} c_1 U g_1(Y)$ valószínűségi változót, ahol Y Cauchy-eloszlású $\theta = 1$ paraméterrel, U pedig egyenletes eloszlású a $[0, 1]$ intervallumban!



1. ábra. Az (5)-ös egyenlőtlenségben, valamint a $W = \sqrt{2\pi} c_1 U g_1(Y)$ valószínűségi változóban szereplő függvények alakja.

- Az 1. ábrán feltüntetett függvények alakjából következik, hogy a

$$1 - \frac{x^2}{2} + \frac{x^4}{8} \leq \sqrt{2\pi} c_1 g_1(x)$$

egyenlőtlenség nem teljesül minden $x \in \mathbb{R}$ esetén, így a közrefogási módszer által igényelt h_2 függvényt csak a

$$h_2(x) = \sqrt{2\pi} c_1 g_1(x),\ x \in \mathbb{R}$$

alakban választhatjuk meg, vagyis a közrefogás algoritmusból hiányozni fog a $W > h_2(Y)$ gyors elutasítási lépés.

- A $W \leq h_1(Y)$ gyors elfogadási lépéshez szükséges h_1 függvényt viszont megválaszthatjuk a

$$h_1(x) = 1 - \frac{x^2}{2}$$

alakban, amennyiben $|x| \leq \sqrt{2}$.

- Tehát a 4. labor 5. algoritmusához képest a közrefogás módszerével egy valamivel gyorsabb standard normális eloszlású számgenerátort implementálhatunk az 1. algoritmus alábbi módosított változatával.

2. Algoritmus (Közrefogás módszerén alapuló $\mathcal{N}(0,1)$-eloszlású számgenerátor)

- *Bemenet:* az $n \geq 1$ természetes szám, amely a kimeneti mintavétel méretét rögzíti.
- *Kimenet:* az $X \sim \mathcal{N}(0,1)$ valószínűségi változónak egy n-elemű független $\{X_i\}_{i=1}^{n}$ mintavétele.

1. $\alpha \leftarrow \dfrac{1}{\sqrt{e}}$, $\beta \leftarrow \dfrac{1}{2}$, $\gamma \leftarrow \sqrt{2}$
2. **Minden** $i = 1, 2, \ldots, n$ index esetén **végezd el**:
3.   **ismételd:**
4.   generáld a független $U \sim \mathcal{U}([0,1])$ és $V \sim \mathcal{U}([0,1])$ valószínűségi változókat
5. $Y \leftarrow \tan(\pi V)$
6. $S \leftarrow \beta Y^2$
7. $W \leftarrow \dfrac{\alpha U}{\beta + S}$

2. Algoritmus (folytatás)

ha $|Y| > \gamma$
    akkor $L \leftarrow$ hamis
    máskülönben $L \leftarrow [W \leq 1 - S]$
ha $[L ==$ hamis$]$, **akkor** $L \leftarrow \left[W \leq e^{-S}\right]$
ameddig $[L ==$ igaz$]$
$X_i \leftarrow Y$.

- Ekkor minden egyes mintavételi érték generálásakor a standard normális eloszlás $f_{\mathcal{N}(0,1)}$ sűrűségfüggvényét várhatóan

$$c_1 - \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{|x| \leq \sqrt{2}} \left(1 - \frac{x^2}{2}\right) \mathrm{d}x = \sqrt{\frac{2\pi}{e}} - \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \approx 0,76809$$

alkalommal értékeljük ki.

- Megjegyezzük, hogy számos más véletlenszám-generátor is létezik, és ezek változó hatékonyságú algoritmusai más és más elméleti eredményekre épülhetnek.
- A mostani és az előző laborokon ismertetett inverziós, elutásítás és közrefogás módszererén alapuló algoritmusokkal csak egy rövid bepillantást szerettünk volna nyújtani a nemegyenletes eloszlású diszkrét és folytonos valószínűségi változók mintavételezésébe.
- Az érdeklődő hallgatók számára a [Devroye, 1986, W.H. Press et al., 2007] munkákat ajánlhatjuk.

1. feladat

- Implementáljátok a közrefogás módszerét használó 2. algoritmust és teszteljétek, hogy hány lépés alatt fogadunk el egy mintát, illetve, hogy hányszor értékeljük ki a standard normális eloszlás sűrűségfüggvényét!

Opcionális feladat (+1 pont elméleti megoldással együtt)

- Határozzátok meg az $\alpha > 0$ paraméter értékét úgy, hogy az

$$f_X(x) = \begin{cases} \frac{\alpha}{2}\left(1 - \cos^2(2x)\right), & x \in \left[0, \frac{\pi}{2}\right], \\ 0, & x \notin \left[0, \frac{\pi}{2}\right] \end{cases}$$

  leképezés egy abszolút folytonos (kompakt tartományon értelmezett) valószínűségi változó sűrűségfüggvénye legyen, majd alkalmazzátok a közrefogás módszerét az adott valószínűségi változó mintavételezésére. Hasonlítsátok össze az így kapott mintavétel hisztogramát a korrigált sűrűségfüggvény alakjával!
- Az algoritmusotok várhatóan hányszor értékeli ki a mintavételezett valószínűségi változó sűrűségfüggvényét egy-egy minta generálásakor?

G. Marsaglia, **1977**.
The squeeze method for generating gamma variates,
Computers and Mathematics with Applications, **3**(4):321–325.

L. Devroye, **1986**.
Non-Uniform Random Variate Generation,
Springer-Verlag New York Inc.

W.H. Press, S.A. Teukolsky, W.T. Vetterling, B.P. Flannery, **2007**.
Numerical recipes. The art of scientific computing, 3rd Edition,
Cambridge University Press.