Моделирование, метод Монте-Карло. Короткий обзор

Нина Эдуардовна Голяндина
к.ф.-м.н., доцент кафедры статистического моделирования

Санкт-Петербургский государственный университет
1 декабря 2020, Санкт-Петербург

Введение

- Многие события случайные и часто нужно имитировать их поведение, чтобы на основе многих случайных имитаций понять, какие характеристики могут быть в результате. Например, риск проиграть, время простоя в порту, ...
- Есть другой класс задач, когда нужно посчитать что-то неслучайное, но аналитически результат не получить. В этом случае применяются численные методы. Если задача сложная или если нужно простое решение, то применяется статистическое моделирование
- В любом случае, нужен некий источник случайности. Он называется Датчик псевдослучайных чисел. Метод моделирование — это метод, который на вход получает то, что генерирует датчик, а на выходе дает результат с нужным распределением.

Генератор псевдослучайных чисел

- Датчик (генератор) псевдослучайных числе генерирует равномерно распределенные на $[0,1]$ числа. Т.е. если вам нужно независимо бросать на [0,1] точки, то можно воспользоваться таким датчиком.
- Последовательность чисел такая, что очень похожа на независимую повторную выборку их р.р. на $[0,1]$. Соответственно, качество датчика измеряется тем, насколько похожа.
- Последовательность не случайная. Т.е. если задать конкретное начальное значение (set.seed(1) в R), будете получать одну и ту же последовательность. Более того, последовательность состоит из целых чисел на $[0, 2^d - 1]$, где d — разрядность системы (например, 64), которые потом делятся на 2^d, чтобы получилось вещественное число на $[0,1]$.
- Так как исходно строится последовательность целых чисел, где следующее число строится на основе предыдущих, то последовательность неминуемо с какого-то момента начнет повторяться. Поэтому период (число значений без повторения) тоже является характеристикой датчика.

Генератор псевдослучайных чисел

- Один из лучших современных генераторов — 'Вихрь Мерсенна' `https://en.wikipedia.org/wiki/Mersenne_Twister` Обычно именно он используется в пакетах для генерации.
- Самый простой датчик случайных чисел — мультипликативный генератор: $U_{i+1} = M \cdot U_i \mod (2^d)$. Здесь M — параметр датчика, мультипликатор, т.е. предыдущее значение умножается на M и берется остаток от деления на 2^d, где d — размерность системы. Результат работы датчика — $\alpha_i = U_i/2^d$.
- Понятно, что U_0 задает все дальнейшее поведение датчика. Оно должно быть нечетное.
- Пример плохого мультипликатора — 2. Пример хорошего — 663608941 (для разрядности 32).

Что такое моделирование заданного распределения?

- Алгоритм моделирования на основе обращений к датчику псевдослучайных чисел выдает результаты с необходимыми свойствами. Для получения теоретических свойств результата предполагается, что датчик выдаёт независимые случайные величины, равномерно распределенные на $[0, 1]$.
- Пример: метод обратных функций.
  Пусть нужно сгенерировать случайную величину со строго монотонной функцией распределения $F(x) = \mathsf{P}(\xi < x)$. Тогда $\xi = F^{-1}(\alpha)$ будет иметь нужное распределение.
  Действительно,
  $\mathsf{P}(\xi < x) = \mathsf{P}(F^{-1}(\alpha) < x) = \mathsf{P}(\alpha < F(x)) = F(x)$, так как по условию α имеет равномерное распределение на $[0, 1]$.
  Методом обратных функций промоделировать экспоненциальное распределение.
- Равномерное распределение в области можно генерировать методом отбора — описать вокруг фигуры прямоугольник $[a, b] \times [c, d]$, разыгрывать точки как $(a + \alpha_1(b - a), c + \alpha_2(d - c))$, но брать из них только те, которые попадают внутрь фигуры.

Моделирование дискретного распределения

Пусть нам нужно генерировать дискретное распределение, заданное таблицей

$$\xi \sim \begin{pmatrix} v_1 & v_2 & \dots & v_k \\ p_1 & p_2 & \dots & p_k \end{pmatrix}$$

где $\sum_{i=1}^{k} p_i = 1$

Алгоритм

- Считаем накопленные вероятности $f_m = \sum_{i=1}^{m} p_i$, $m = 1, \dots, k$ ($f_k = 1$). Эти числа разбивают отрезок $[0, 1]$ на k частей, каждая длины p_m.
- Получаем α. Результат (ξ) — номер отрезка, куда попало α.

Как выглядит этот метод для моделирования испытания Бернулли с вероятностью успеха p?

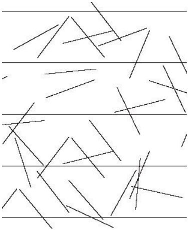
Примеры имитационного моделирования

- Моделировать поведение цен акций и определять, насколько успешна стратегия (покупать-продавать)
- Моделировать движение транспорта в городе, чтобы определять узкие места, пробки и прочее.
- Моделировать поток частиц в газе, чтобы понимать, как распределится температура на поверхности самолета при его полете.
- Моделировать выбросы в атмосфере, предсказывать озоновые дыры, просчитывать проследствия от повышения температуры.
- Строить экономические модели, рассчитывать вероятности кризиса, стагнации, роста, ...

Метод Монте-Карло: игла Бюффона

Одно из первых использований метода Монте-Карло (вычисление числовых характеристик с помощью статистического моделирования) является оценка числа π.

Бросается игла длины L на разлинованную бумагу с расстоянием между линиями r, $r \geq L$, случайным образом:



Тогда вероятность того, что игла пересечет линию, равна $\dfrac{2L}{r\pi}$.

Вычисление интегралов методом Монте-Карло

Есть реальные задачи, когда нужно считать, например, интегралы, а аналитически их невозможно сосчитать.

Пример: есть данные по скорости $v(t)$, нужно сосчитать расстояние, которое машина проехала за время $[0, T]$. Ответ — $\int_0^T v(t)dt$.

Простейший метод Монте-Карло для $I = \int_0^1 v(t)dt$:

- Параметр N — число реализаций.
- Генерируем $\alpha_1, \ldots, \alpha_N$ р.р. на $[0, 1]$.
- Оценка интеграла $\hat{I} = \sum_{i=1}^N v(\alpha_i)/N$.

Свойства оценки:

- Несмещенность: $\mathsf{E}\hat{I} = I$ Докажите несмещенность.
- Состоятельность в средне-квадратическом: $\mathsf{D}\hat{I} \sim \sigma^2/N$ (если $\int_0^1 v^2(t)dt < \infty$)).
- Асимптотическая нормальность, отсюда можно построить доверительный интервал.

Метод Монте-Карло: уменьшение трудоемкости

Размер асимптотического доверительного интервала для интересующего нас интеграла имеет вид $(\hat{I} \pm c_\gamma \sigma/\sqrt{N})$, где константа в дисперсии σ^2 зависит от метода оценки, $\mathrm{D}\hat{I} \sim \sigma^2/N$.
Какое взять N, чтобы размер доверительного интервала был равен ε?

Метод Монте-Карло: уменьшение трудоемкости

Размер асимптотического доверительного интервала для интересующего нас интеграла имеет вид $(\hat{I} \pm c_\gamma \sigma/\sqrt{N})$, где константа в дисперсии σ^2 зависит от метода оценки, $\mathrm{D}\hat{I} \sim \sigma^2/N$. Какое взять N, чтобы размер доверительного интервала был равен ε?

Если хотим получить размер доверительного интервала ε, то $2c_\gamma \sigma/\sqrt{N} = \varepsilon$. Отсюда N берем равным $(2c_\gamma)^2\sigma^2/\varepsilon^2$. В наших руках — константа у дисперсии σ^2, которая определяется алгоритмом.

Трудоемкость равна числу слагаемых N (которое пропорционально дисперсии), умноженному на сложность вычисления одного слагаемого. Если считать, что вычисление слагаемых имеет примерно одинаковую сложность, то получаем задачу уменьшения дисперсии.

Метод Монте-Карло: уменьшение трудоемкости

Класс алгоритмов для оценки $\int_0^T v(t)dt$:

- Параметр N — число реализаций.
- Генерируем $\xi_1, \ldots, \xi_N$ с плотностью $p(t)$ на $[0, T]$.
- Оценка интеграла $\hat{I} = \left(\sum_{i=1}^N v(\xi_i)/p(\xi_i)\right)/N$.

Вычисление площади фигуры — частный случай, когда $p(t)$ — равномерное распределение на описанном вокруг фигуры прямоугольнике.

Метод уменьшения дисперсии: выбирать больше точек там, где больше (по модулю) подинтегральная функция (например, с плотностью $p(t) = v(t)/\int_0^T v(s)ds$, если $v(t)$ неотрицательная; но на практике такое не реализуемо, так как нужно уметь считать интеграл, который мы хотим оценить, так как не умеем считать. Поэтому берут что-то близкое, от чего умеют считать интеграл).
Задание: как посчитать интеграл $\int_0^\infty \exp(-x - x^2)dx$?

Прием, который используется в методе оптимизации «стохастический градиентный метод».

Пусть есть огромная сумма слагаемых:
$S_N = \sum_{i=1}^{N} f(x_i)/N$, где x_i имеют одинаковое распределение с плотностью $p(x)$, N — объем выборки.
Как мы знаем, S_N является хорошей оценкой $I = \int_{\mathbb{R}} f(t)p(t)dt$.

Идея: так как S считать ооочень долго, рассмотреть оценку похуже.

Возьмем k случайных номеров слагаемых $I_k = \{\tau_1, \ldots, \tau_k\}$ и рассмотрим сумму $S_k = \sum_{i \in I_k} f(x_i)/k$. Это будет несмещенной оценкой того же самого интеграла, но менее точной с дисперсией порядка $O(k)$.
Стандартно берется вообще $k = 1$. Оценка получается несмещенной, быстро считается, но с большой дисперсией.

Пусть теперь x_i не случайные, тогда S_N — просто число. Точно так же, $S_k = \sum_{i \in I_k} f(x_i)/k$ является несмещенной оценкой S_N.
Докажите несмещенность $f(x_\tau)$ для $k = 1$, τ р.р. в $\{1, 2, \ldots, N\}$.

Бонус: случайный поиск в оптимизации

$\mathcal{D} \subset \mathbb{R}^k$ — область, $f(\mathbf{x})$ — *целевая функция*, $f : \mathcal{D} \to \mathbb{R}$.
Задача минимизации функции:

$$f^* = \min_{\mathbf{x} \in \mathcal{D}} f(\mathbf{x}).$$

Она же, в виде поиска точки минимума:

$$\mathbf{x}^* = \operatorname*{argmin}_{\mathbf{x} \in \mathcal{D}} f(\mathbf{x}).$$

Про свойства функции ничего не знаем. Выход: Случайный поиск.

Алгоритм (параметры p и δ)
Строится последовательность точек, такая что

1. $\mathbf{x}_0$ — некая начальная точке
2. $\mathbf{y}$ моделируется с вероятностью p в δ-окрестности $\mathbf{x}_i$ и с вероятностью $1 - p$ во всей области до тех пор, пока $f(\mathbf{y})$ не станет меньше $f(\mathbf{x}_i$.
3. $\mathbf{x}_{i+1} = \mathbf{y}$; увеличиваем i и переходим на пункт 2.