# Integracija z metodo Monte Carlo

2. 3. 2022

# Opomnik iz verjetnosti in statistike:

v 1D

Imejmo naključno spremenljivko $X$, ki je v vzorčnem prostoru (definicijsko območje) $D_X = [a,b]$ porazdeljena po zvezni verjetnostni porazdelitvi $p(x)$.

Velja:

$$\int_{D_X = [a,b]} p(x)\,dx = \int_a^b p(x)\,dx = 1$$

(Porazdelitev je normirana)

Verjetnost, da je $c < X < d$ kjer $a < c < d < b$:

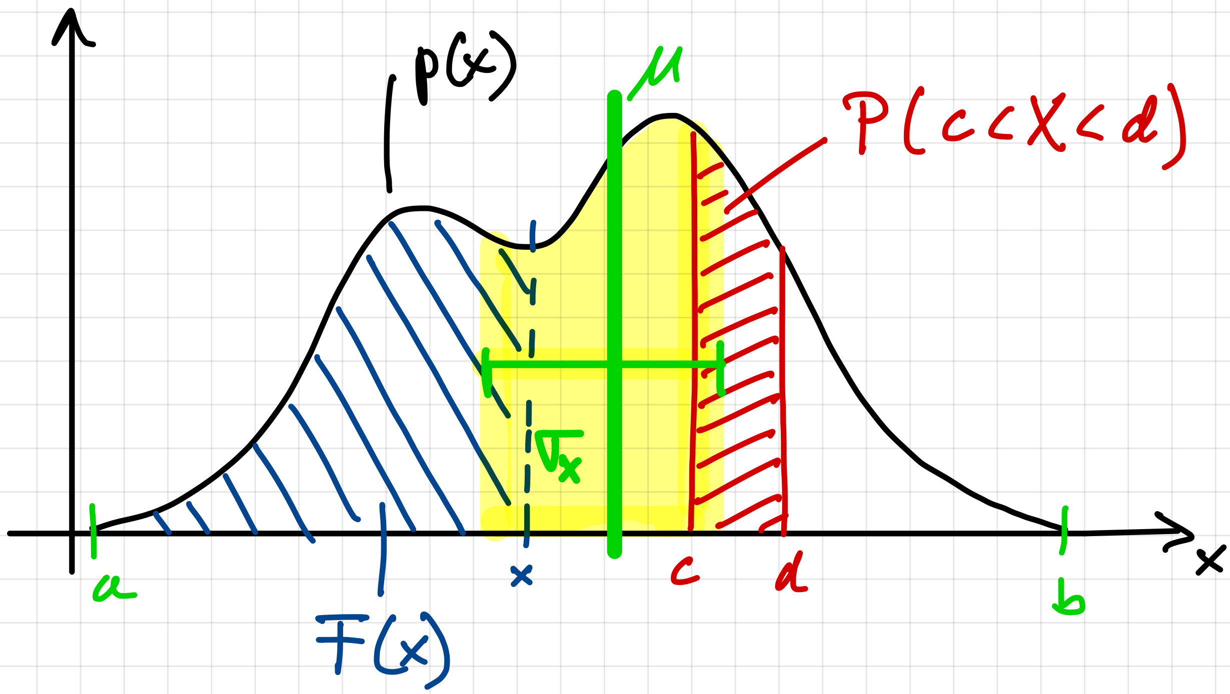
$$P(c < X < d) = \int_c^d p(x)\,dx$$

Kumulativna porazdelitvena funkcija:

Naključna spremenljivka

Neka vrednost

$$F(x) = P(X < x) = \underbrace{\int_{-\infty}^{x} p(x)\,dx}_{\text{V splošnem}} = \int_a^x p(x)\,dx$$




Vpeljimo momente porazdelitve – to so izbrane vrednosti naključne spremenljivke X, ki so značilne za porazdelitev p(x).

1. moment (povprečje)

$$\mu = E[X] = \int_a^b x \cdot p(x)\, dx$$

Pričakovana vrednost (ang. expected value)

2. moment (varianca)

$$\sigma^2 = Var[X] = E[X^2] - E[X]^2 =$$
$$= \int_a^b (x-\bar{x})^2 p(x)\, dx$$

## Standardni odklon (karakteristična širina porazdelitve)

$$\sigma_X = \sqrt{Var[X]}$$

## Primeri porazdelitev in njihovih momentov

(Devroye, str. 7.)

**Some univariate densities.**

| $f(x)$ | $E(X)$ | $Var(X)$ | Mode$(X)$ | $F(x)$ |
|---|---|---|---|---|
| Normal$(\mu,\sigma^2)$ $\frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}}e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}}$ | $\mu$ | $\sigma^2$ | $\mu$ | $\int_{-\infty}^{x} f(y)\ dy$ |
| Gamma$(a,b)$ $\frac{1}{\Gamma(a)b^a}x^{a-1}e^{-\frac{x}{b}}$ $(x>0)$ | $ab$ | $ab^2$ | $(a-1)b$ | $\int_{-\infty}^{x} f(y)\ dy$ |
| Exponential$(\lambda)$ $\lambda e^{-\lambda x}$ $(x>0)$ | $\frac{1}{\lambda}$ | $\frac{1}{\lambda^2}$ | 0 | $1-e^{-\lambda x}$ |
| Cauchy$(\sigma)$ $\frac{\sigma}{\pi(x^2+\sigma^2)}$ | does not exist | does not exist | 0 | $\frac{1}{2}+\frac{1}{\pi}\arctan(\frac{x}{\sigma})$ |
| Pareto$(a,b)$ $\frac{ab^a}{x^{a+1}}$ $(x>b)$ | $\frac{ab}{a-1}$ $(a>1)$ | $\frac{ab^2}{(a-2)(a-1)^2}$ $(a>2)$ | $b$ | $1-\frac{b}{x}^{a}$ |
| Beta$(a,b)$ $\frac{\Gamma(a+b)}{\Gamma(a)\Gamma(b)}x^{a-1}(1-x)^{b-1}$ $(x\in[0,1])$ | $\frac{a}{a+b}$ | $\frac{ab}{(a+b)^2(a+b+1)}$ | $\frac{a-1}{a+b-2}$ $(a,b>1)$ | $\int_{-\infty}^{x} f(y)\ dy$ |

**Statistika:** Empirično določanje verjetnostnih porazdelitev in njihovih značilnih parametrov.

Iz vzorčnega prostora naberemo vzorec vrednosti naključnih spremenljivk $X_i = x_i$

$$\{ x_i \; ; \; i = 1, \dots n \}$$ Vzorec velikosti $n$

Povprečje in varianca porazdelitve bi radi ocenili iz vzorca, ki ga imamo. Vpeljimo vzorčno povprečje in vzorčno varianco.

Tem količinam rečemo statistike

Vzorčno povprečje:

$$\overline{X} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} X_i$$

Vzorčna varianca:

$$s_x^2 = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^{n} (X_i - \overline{X})^2$$

To lahko izračunamo za vsak vzorec, ki ga imamo na voljo. Za vsak vzorec je druga vrednost $\Rightarrow$ VZORČNE PORAZDELITVE

Za vzorčno statistiko lahko izračunamo pričakovane vrednosti:

$$E[\bar{X}] = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} E[X_i] = \frac{1}{n}\cdot n\cdot \mu = \mu$$

$$E[S_X^2] = \ldots\ldots\ldots\ldots = \sigma^2$$

Na enak način (Glej Širca, VF, str 157)

Preverimo, da sta $\bar{X}$ in $S_X^2$ nepristranski cenilki: Če bi imeli "$\infty$" število vzorcev (da bi postopek ponavljali), in bi izračunali povprečje $\bar{X}$ in $S_X^2$ bi dobili prave momente porazdelitve.

<u>Velja tudi</u>:

$$Var[\bar{X}] = Var\left[\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} X_i\right] = \frac{1}{n^2}\sum_{i=1}^{n} Var[X_i] =$$

$$= \frac{1}{n^2}\cdot n\cdot\sigma^2 = \frac{\sigma^2}{n}$$

$\downarrow$ Za vzorec pa potem velja: $(\sigma^2 \to s^2)$

$$s_{\bar{X}}^2 = \frac{s_X^2}{n} = \frac{1}{n(n-1)}\sum_{i=1}^{n}(X_i - \bar{X})^2$$

oziroma: $\quad s_{\bar{X}} = \frac{s_X}{\sqrt{n}}$

Mi imamo seveda en sam vzorec zato le na podlagi tega vzorca sklepamo na povprečje in varianco:

$$\overline{x} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} x_i$$

(malo x)

$$S_x^2 = \frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}(x_i - \overline{x})^2$$

$$S_{\overline{x}}^2 = \frac{1}{n(n-1)}\sum_{i=1}^{n}(x_i - \overline{x})^2 = \frac{S_{\overline{x}}^2}{n}$$

To so sedaj naše cenilke.

Pravo povprečje potem ocenimo kot:

$$\boxed{\mu = \overline{x} \pm \frac{S_x}{\sqrt{n}}}$$

# Generiranje naključnih števil:

Literatura: Širca, RMF, NRC, Devroye, Non-Uniform Random Variate Generation.

## Motivacija:

Za integracijo po metodi Monte Carlo, za simuliranje statističnih procesov, ..., potrebujemo (dolge) nize naključnih števil. Takšne nize ustvarjamo z generatorji naključnih števil.

## Težava:

Računalnik je deterministični stroj – izvaja ukaze, ki mu jih damo – ne more generirati pravih naključnih števil.

Kar zna, je računanje "posebnih" zaporedij, ki so navidezno naključna

Takšne nize imenujemo PSEVDONAKLJUČNA ŠTEVILA.

Stopnjo naključnosti ugotavljamo s posebnimi statističnimi testi: Preizkus s testom $\chi^2$, preizkus s polnjenjem celic, "Pijančev" test, Kolmogorov–Smirnov, ...! Širca, RMF, dodatek C.

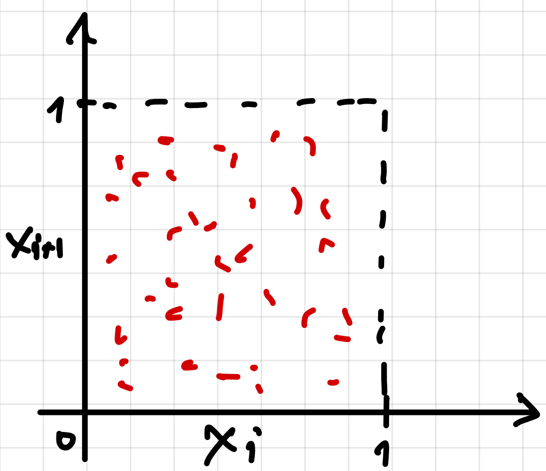
**Opomba:** Algoritmi s katerimi običajno razpolagamo v programskih jezikih navadno generirajo števila, ki so enakomerno porazdeljena na intervalu $[0, 1]$.

## Kaj pričakujemo od dobrega generatorja? (*)

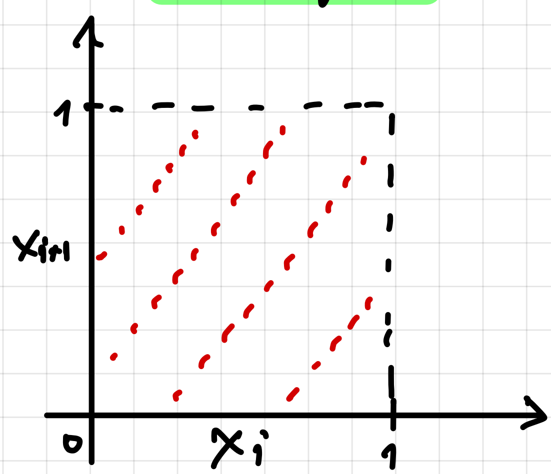
- da so generirana zaporedja števil števil $\{x_i\}$ med sabo med sabo nekorelirana → da so poljubna podzaporedja $\{x_i, x_{i+1}, \ldots x_{i+k}\}$ za vsak $k$ čim bolj šibko korelirana.

**Npr:**

Dober gen.




Slab gen.




Če bomo takšen generator uporabili za M.C. integracijo pri določitvi ploščine kroga, bomo imeli težave.

**Primer:**

$x_i = 3x_{i-1} \bmod 31$

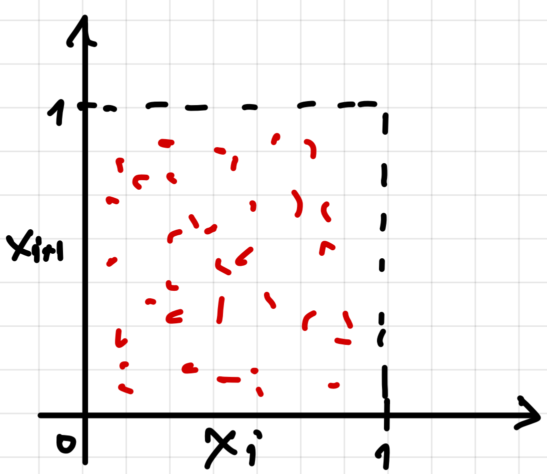
$x_0 = 9.$

– Želimo, da imajo čim daljšo periodo, da se čim kasneje ponavljajo. Glede na to, da lahko z računalnikom predstavimo le končno mnogo števil, se bodo števila prej ali slej ponavljala.

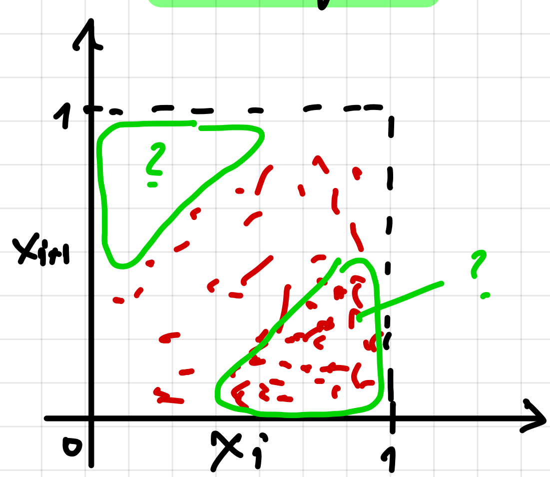
– Želimo enakomernost in nepristranskost: Zahtevamo enakomerno porazdelitev točk $v_i^{(k)} = (x_i, x_{i+1}, \dots, x_{i+k-1})$ v hiperkocki s čim večjo dimenzijo $k$.

Npr.: za 2D ($k=2$)

Dober gen.




Slab gen.




– Želimo da je računsko učinkovit. Če bomo izvajali M.C. integracijo z $10^9$ točk ne želimo, da bi se to računalo v nedogled!

- Večina naključnih generatorjev je zasnovana na celoštevilski aritmetiki. Vračajo števila na intervalu $[0, m-1]$, kjer je $\underbrace{m = 2^{32}}_{\text{int}}$ ali $\underbrace{2^{64}}_{\text{long}}$

- Realna števila na $[0, 1]$ potem dobimo s transformacijo:

$$x_i = \frac{z_i}{m-1}$$

Opomba: Tu se lahko stvar še malo zaplete z "gostoto" generiranih števil, saj je možnih generiranih števil lahko manj, kot jih podpira mantisa realnega podatkovnega tipa! Glej, Širca, RMF, str. 604.

# Linearni kongruenčni generatorji (LCG)

(Linearna kongruenca je problem iskanja $z \in \mathbb{Z}$, da velja $a z \equiv b \pmod{m}$, kjer $a, b \in \mathbb{Z}$ in $m \in \mathbb{N}$.)

Najbolj pogosto uporabljeni generatorji so linearni kongruenčni generatorji, ki jih predstavimo z enačbo:

$$\boxed{z_{i+1} = (\underbrace{a}_{\text{multiplikator}} z_i + \underbrace{c}_{\text{prenos}}) \bmod \underbrace{m}_{\text{modul generatorja}}} \qquad 0 \le z_i \le m$$

$z_0 \equiv$ začetna vrednost – SEME. To si izberemo. Za isto seme dobimo vedno isto sekvenca števil.

Narediti dober generator pomeni dobro izbrati $a, c, m$, da kar najbolje zadosti kriterijem (*)

Za $m$ se uporablja čim večja praštevila oblike $m = 2^p - 1$ (t.j. Mersenne primes)

Za več glej: Širca, RMF ali NRC, str 274)

Zgled: Generator RANO iz HRC

$$z_{i+1} = (7^5 \cdot x_i + 0) \bmod (2^{31} - 1)$$

Opomba: Obstajajo tudi drugi tipi generatorjev:

- nelinearni kongruenčni generatorji
- generatorji tipa "Feedback Shift Register"
- posplošeni FSR - GFSR
- twisted GFSR.

Tega tipa je trenutno najboljši generator z imenom MERSENNE TWISTER, ki temelji na Mersennovem praštevilu $2^{19937} - 1$.

# Kvazi naključna števila:

- Kvazinaključna števila so niz $n$ števil $(x_1, \ldots, x_n)$, ki čim bolj enakomerno pokrijejo / izpolnijo $n$-dimenzionalni prostor — bolj enakomerno od naključnih števil.

- To niso naključna števila, pač pa s posebnim pravilom generiramo izbrani niz števil — točke se izogibajo druga drugi, da se ne ponavljajo in bolj enakomerno izpolnjujejo prostor. Števila med sabo niso neodvisna
(to je pomembno za nas!)

- Uporabne pri določenih aplikacijah, kjer zagotavljajo hitrejšo konvergenco. — npr. določitev momentov porazdelitvenih funkcij.

- Primeri: Haltonova sekvenca, Sobolova sekvenca...
(za več, glej NRC, str. 309.)

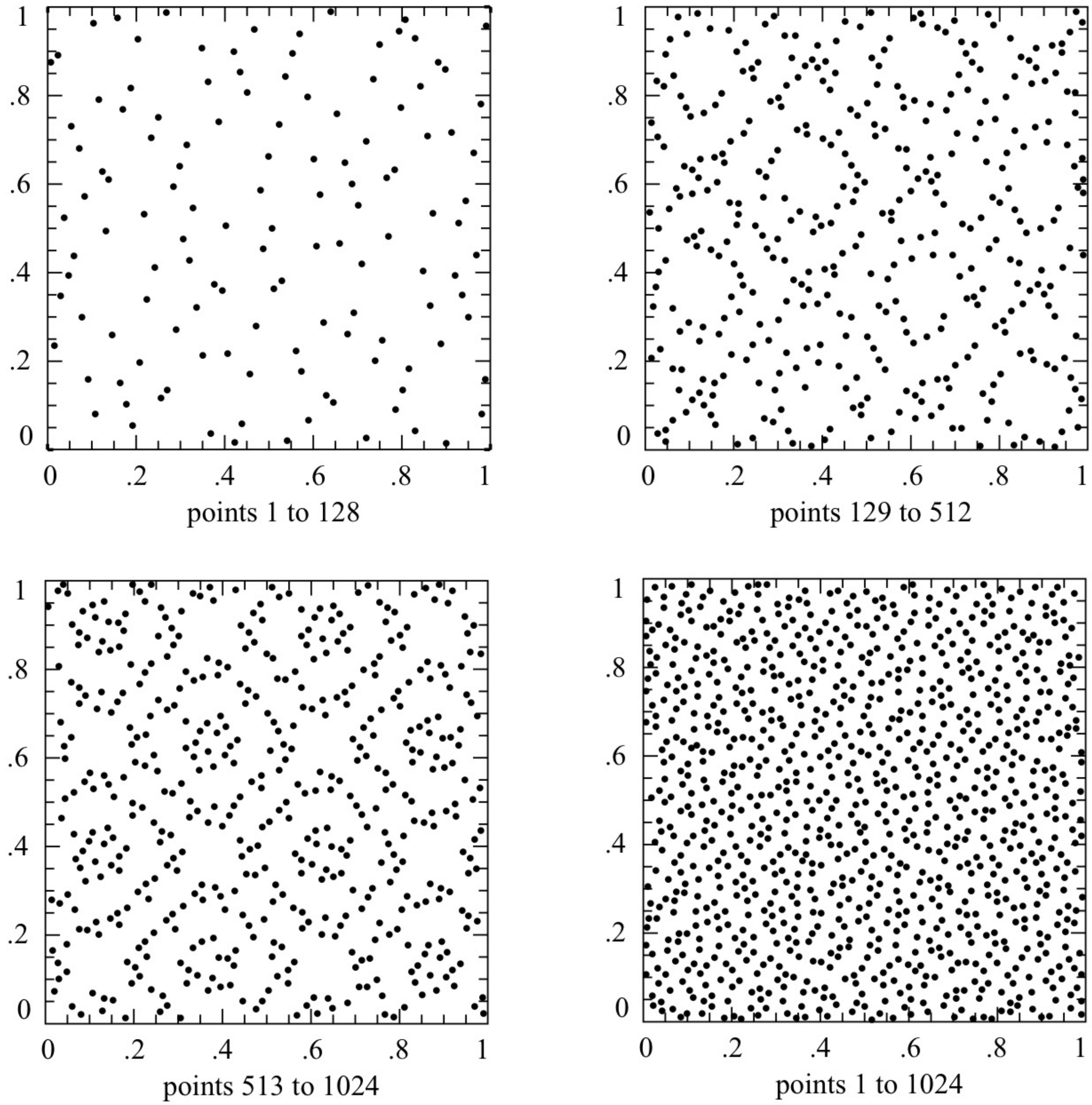



Figure 7.7.1. First 1024 points of a two-dimensional Sobol' sequence. The sequence is generated number-theoretically, rather than randomly, so successive points at any stage "know" how to fill in the gaps in the previously generated distribution.

# Prava naključna števila:

Uporabiti se da tudi prava naključna števila. Generatorji pravih naključnih števil največkrat slonijo na opazovanju radioaktivnih razpadov, za katere vemo, da se res dogajajo naključno!

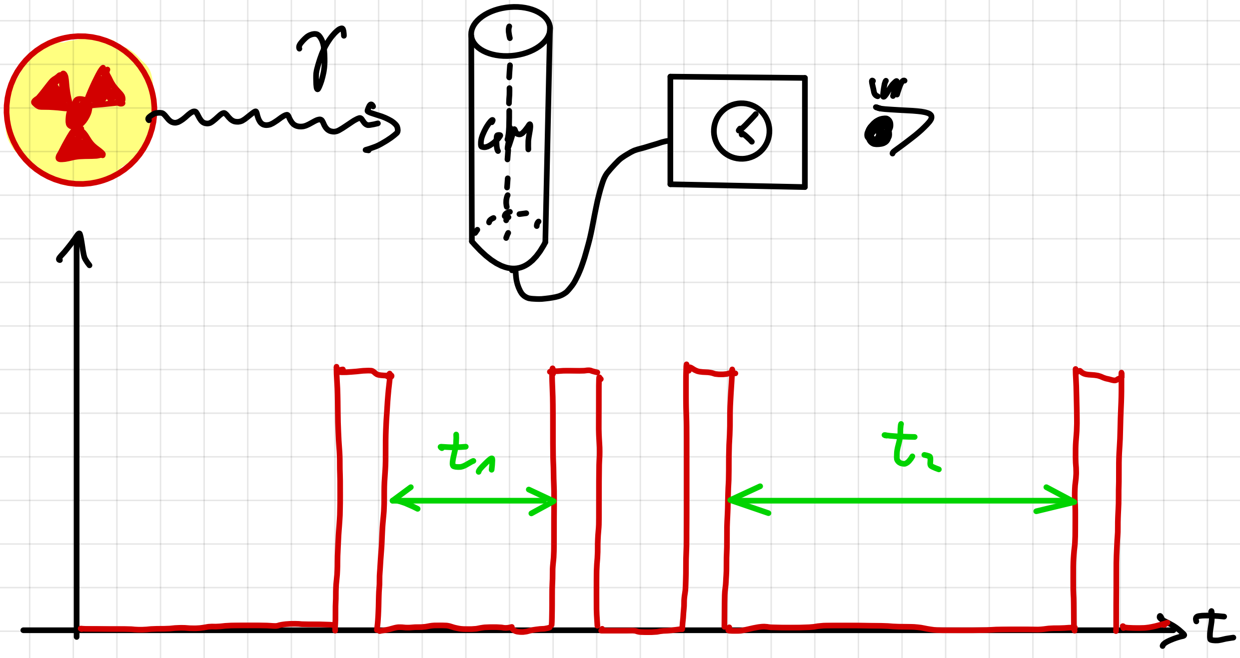
Takšna naključna števila najdemo na spletni strani: http://www.fourmilab.ch/hotbits.

Spletna stran opazuje zaporedne čase razpadov $^{137}Cs$.

$$^{137}Cs \rightarrow {}^{137}Ba^{*} + e^{-} + \bar{\nu}_e$$

$$^{137}Ba^{*} \rightarrow {}^{137}Ba + \gamma$$

Iz radioaktivnega vzorca izhajajo žarki $\gamma$ z energijo 667 keV, ki jih zaznamo z G.M. det.



Iz primerjave zaporednih časov tvorijo zaporedne bite $b_i$:

$$b_i = \begin{cases} 1 \,; & t_{2i} > t_{2i-1} \\ 0 \,; & t_{2i} \leq t_{2i-1} \end{cases}$$

Dobimo sekvenco naključnih bitov:

0 1 0 1 1 0 1 0 1 0 1 1 0 0 0 1 0 1 0 0 1 . . . . . .

byte (8 bitov)

short (16 bitov)

int (32 bitov)

Long (64 bitov)

S povezovanjem bitov dobimo potem naključna cela števila, iz njih pa potem tudi realna.

(Glej zgled!)

# Naključna števila porazdeljena po drugih neenakomernih porazdelitvah.

Znamo generirati $x$, ki so porazdeljena po enakomerni porazdelitvi $f(x) = U(0,1)$. Iz teh števil bi sedaj radi s predpisom $y = y(x)$ generirali naključna števila $y$, ki bodo porazdeljena po poljubni drugi porazdelitvi $g(y)$:

$$g(y) > 0 \quad \text{in} \quad \int_{D_y} g(y)\,dy = 1$$

## Metoda z inverzom kumulativne funkcije:

Ohranitev verjetnosti zahteva:

$$dP = \underbrace{|f(x)\,dx| = |g(y)\,dy|}_{\displaystyle g(y) = f(x) \cdot \left|\frac{dx}{dy}\right|}$$

Ker je $f(x) = 1$ za $x \in [0,1]$, je zgornja enačba enaka diferencialni enačbi:

$$\boxed{\frac{dx}{dy} = g(y)}$$

Rešitev te enačbe je:

$$\underline{x(y)} = \int_{-\infty}^{y} g(y)\,dy = \underline{F_Y(y)}$$

kumulativna porazdelitvena funkcija!

Od tod sledi, da je transformacija, ki enakomerno porazdelitev preslika v tako, kot jo želimo, je:

$$\boxed{y(x) = F_Y^{-1}(x)}$$

Glej zglede.

To je inverz kumulativne funkcije, ki ni recipročna vrednost!

Komentar:

Če inverz funkcije $F_Y(y)$ ni analitično izračunljiv, potem izžrebamo $x \sim U(0,1)$ nato pa pripadajoči $y$ poiščemo z numeričnim reševanjem enačbe:

$$w(y) = x - F_Y(\underline{y}) = 0$$

To iščemo!

Ničlo funkcije $w(y)$ poiščemo z npr. bisekcijo!

Zgledi porazdelitev, pripadajočih kumulativnih funkcij in njihovih inverzov (Devroye)



$F^{-1}(U)$ can be simplified, by noting for example that $1-U$ is distributed as $U$.

| Density $f(x)$ | $F(x)$ | $X=F^{-1}(U)$ | Simplified form |
|---|---|---|---|
| Exponential($\lambda$) $\lambda e^{-\lambda x}\ ,\ x \geq 0$ | $1-e^{-\lambda x}$ | $-\frac{1}{\lambda}\log(1-U)$ | $-\frac{1}{\lambda}\log(U)$ |
| Cauchy($\sigma$) $\frac{\sigma}{\pi(x^2+\sigma^2)}$ | $\frac{1}{2}+\frac{1}{\pi}\arctan(\frac{x}{\sigma})$ | $\sigma\tan(\pi(U-\frac{1}{2}))$ | $\sigma\tan(\pi U)$ |
| Rayleigh($\sigma$) $\frac{x}{\sigma}e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}\ ,\ x \geq 0$ | $1-e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}$ | $\sigma\sqrt{-\log(1-U)}$ | $\sigma\sqrt{-\log(U)}$ |
| Triangular on$(0,a)$ $\frac{2}{a}(1-\frac{x}{a})\ ,\ 0 \leq x \leq a$ | $\frac{2}{a}(x-\frac{x^2}{2a})$ | $a(1-\sqrt{1-U})$ | $a(1-\sqrt{U})$ |
| Tail of Rayleigh $xe^{\frac{a^2-x^2}{2}}\ ,\ x \geq a > 0$ | $1-e^{\frac{a^2-x^2}{2}}$ | $\sqrt{a^2-2\log(1-U)}$ | $\sqrt{a^2-2\log U}$ |
| Pareto$(a,b)$ $\frac{ab^a}{x^{a+1}}\ ,\ x \geq b > 0$ | $1-(\frac{b}{x})^a$ | $\frac{b}{(1-U)^{1/a}}$ | $\frac{b}{U^{1/a}}$ |

**Zgled:** Iz enakomerno porazdeljenih števil $x \sim U(0,1)$ želimo generirati naključna števila $y$, ki so porazdeljena po eksponentni porazdelitvi:

$$g(y) = \frac{1}{\lambda} \cdot e^{-\lambda y} \quad ; \quad y \in [0, \infty)$$

$$F_Y(y) = \int_0^y \frac{1}{\lambda} e^{-\lambda y} = -e^{-\lambda y}\Big|_0^y = 1 - e^{-\lambda y} = x$$

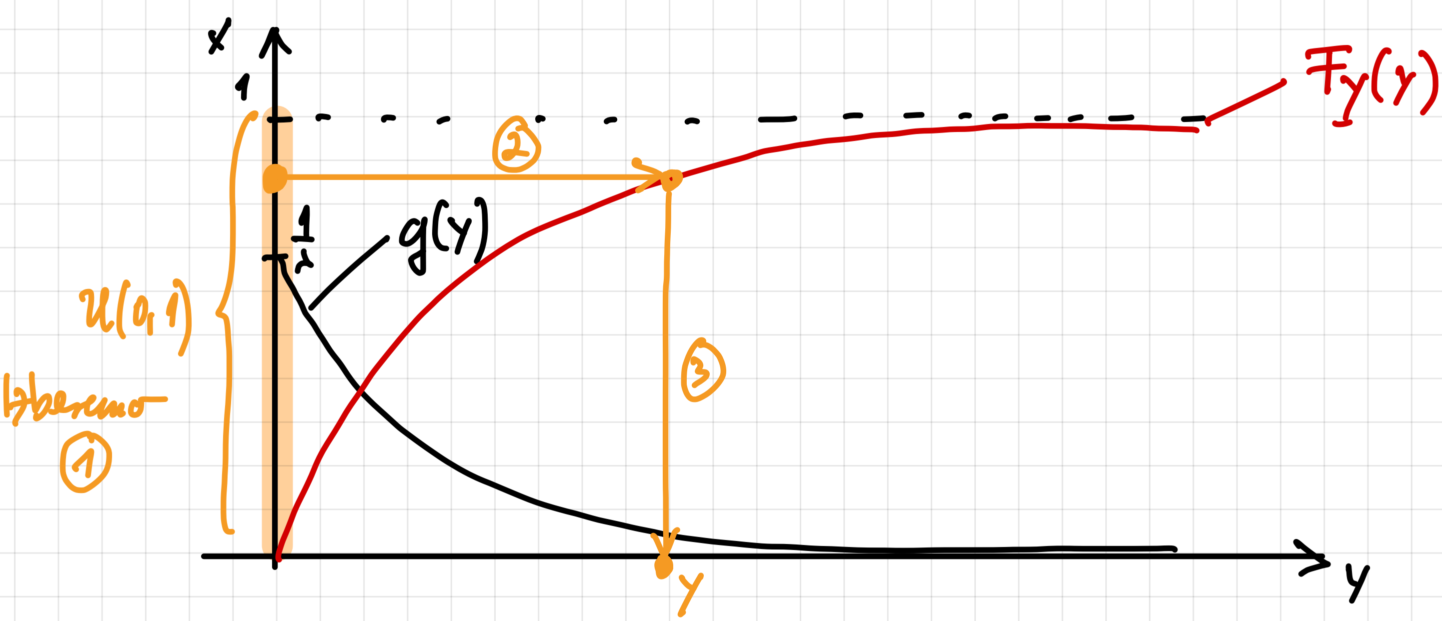
$$e^{-\lambda y} = 1 - x$$

$$y(x) = -\frac{1}{\lambda} \cdot \ln(1-x)$$

$$= -\frac{1}{\lambda} \ln x$$

To je enako, ker je $x$ enako porazdeljen kot $(1-x)$

(Poenostavljena oblika)



## Zgled #2: Generiranje gaussovsko porazdeljenih števil $y$ s širino $\sigma = 1$:

$$g(y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{y^2}{2}} \quad ; \quad y \in (-\infty, \infty)$$

$$F(y) = \int_{-\infty}^{y} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{y'^2}{2}} dy' = \frac{1}{2}\left[1 + \mathrm{Erf}\left(\frac{y}{\sqrt{2}}\right)\right] = x$$

Vemo od zadnjič

Inverza $F(y)$ ne znamo analitično izračunati, zato enačbo $F(y) - x = 0$ za dani $x \sim U(0,1)$ izvrednimo numerično.

## Boljša metoda (Box-Muller)

Glej, Širca, VF.

Metoda se zanaša na transformacijo v 2D in deluje precej bolje, kot zgornja metoda.

Izžrebamo $x_1, x_2 \sim U(0,1)$ in tvorimo:

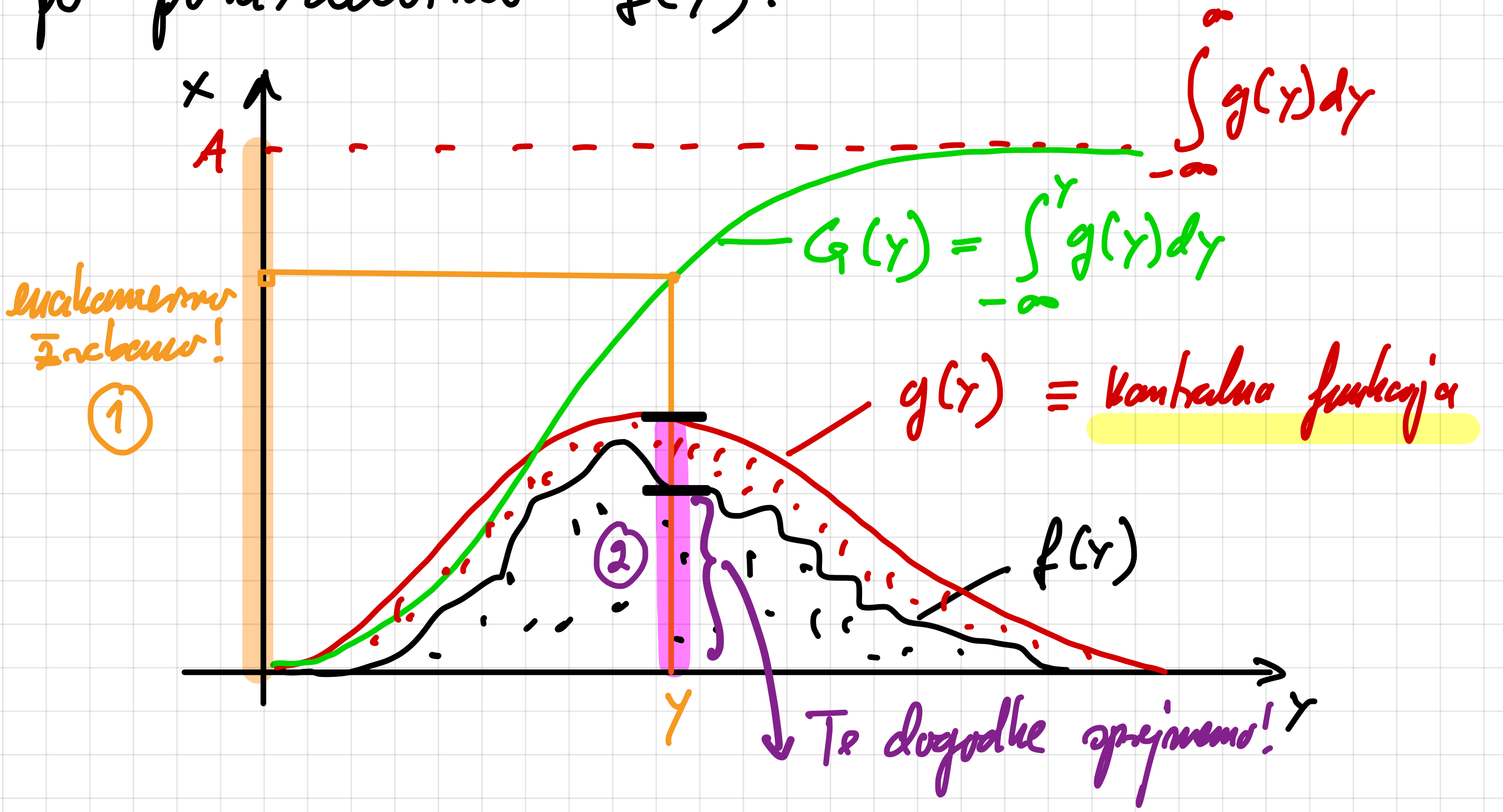
$$y_1 = \sqrt{-2 \ln x_1} \cos 2\pi x_2$$

$$y_2 = \sqrt{-2 \ln x_2} \sin 2\pi x_1$$

$y_1$ in $y_2$ sta porazdeljena gaussovsko $\underset{\mu,\,\sigma}{\mathcal{N}(0,1)}$

# Metoda z zavračanjem:

Generirati želimo števila $y$, ki so porazdeljena po porazdelitvi $f(y)$.




Izberemo funkcijo $g(y)$ ki v celoti leži nad porazdelitvijo $f(y)$ in jo dobro poznamo: znamo izračunati kumulativno funkcijo $G(y)$ in njen inverz $G^{-1}(x)$. Metoda ima dva koraka.

1.) Najprej naključno generiramo točke v ravnini $(y, x)$, ki so enakomerno porazdeljene po površini pod funkcijo $g(y)$.

2.) Če je točka tudi pod $f(y)$ jo sprejmemo, drugače jo zavržemo! Koordinate $y$ sprejetih točk, so porazdeljene po $f(y)$.

1.) Točke enakomerno porazdeljene pod $g(y)$ dobimo tako da izberemo $x_1 \sim A \cdot U(0,1)$. Nato preko kumulativne funkcije dobimo porazdelitev $y$. Rešimo enačbo:

$$\xi = F(y) \quad \text{oziroma:} \quad y = F^{-1}(\xi)$$

Nato generiramo drugo koordinato kot $x \sim g(y) \cdot U(0,1)$

Točke $(y, x)$ so enakomerno porazdeljene pod $g(y)$.

2.) Točka sprejmemo, če velja $y < f(x)$.

**Limitni primer:**

$g(y)$ je konstantna funkcija z vrednostjo $g_0$:

$$g(y) = \begin{cases} g_0 ; & y \in D_f = [a,b] \\ 0 ; & \text{sicer} \end{cases} \quad \text{(definicijsko območje } f\text{)}$$

Integral kontrolne funkcije: $A = \int_a^b g(y)\, dy = g_0 (b-a)$

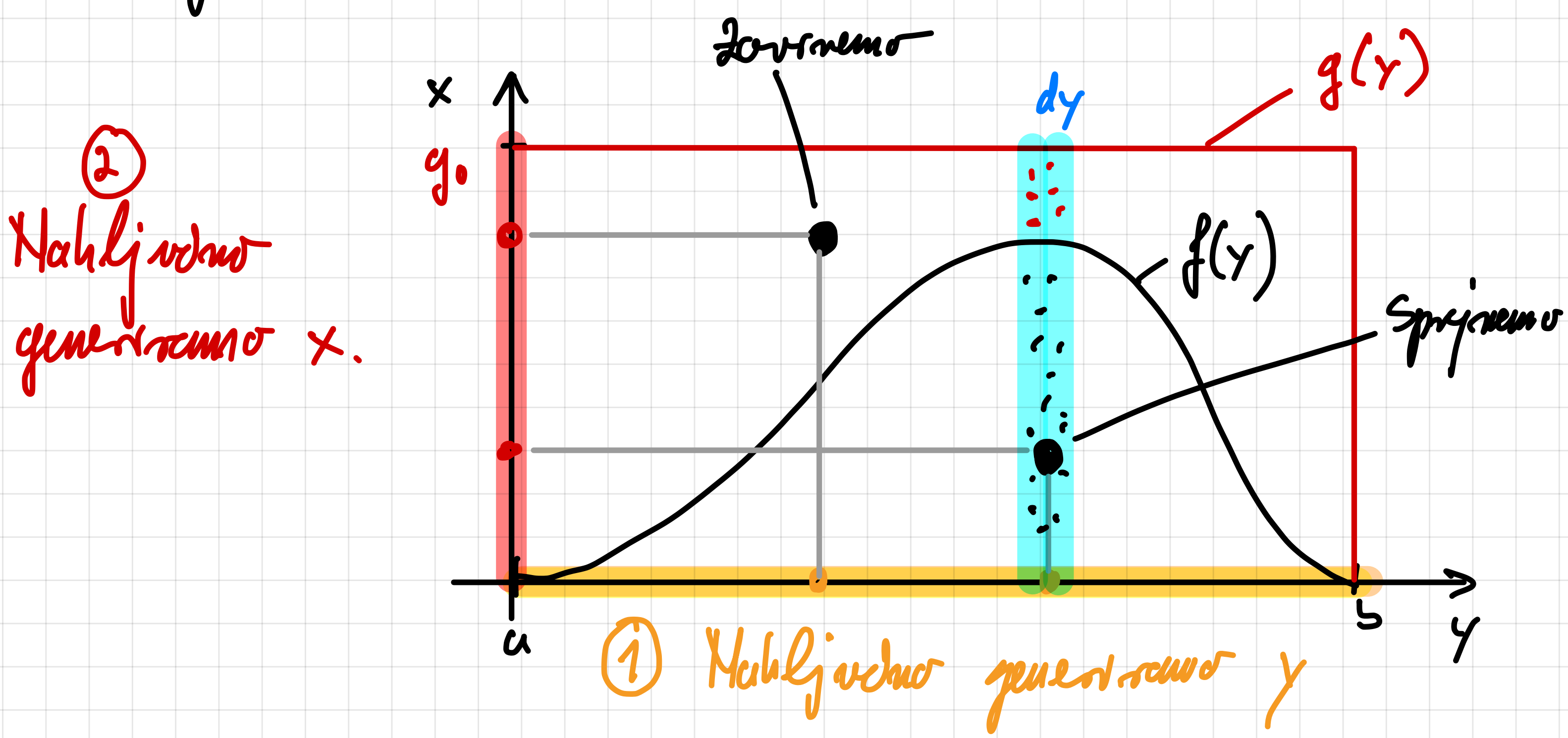
Kumulativna funkcija za določitev y:

$$G(y) = \int_a^y g_0\,dy = \underbrace{g_0(y-a) = \xi}\sim A\cdot U(0,1)$$

$$y = \frac{\xi}{g_0} + a$$

y je v tem primeru tudi enakomerno porazdeljen med [a,b].

Generiramo še $x \sim g_0 \cdot U(0,1)$. Če je par $(y,x)$ velja, da je $x < f(y)$, potem y sprejmemo, drugače zavrnemo!




Komentar: Ideja, ki je skrita zadaj, je ta, da na intervalu širine dy pri y delež sprejetih točk enak verjetnosti

$$dP = f(y)\,dy$$

**Recept:** (za metodo "hit and miss")

1.) Izberemo $g_0 > f(y)$ za $\forall y \in [a,b]$.

2.) Po enakomerni porazdelitvi $U(a,b)$ izžrebamo $y$:

Ekvivalentno.

$$y = (a-b)\,U(0,1) + a$$

3.) Po enakomerni porazdelitvi $U(0,g_0)$ izžrebamo $x$:

$$x = g_0\, U(0,1)$$

4.) Če je $y < f(x)$, potem $y$ sprejmemo, drugače ga zavržemo

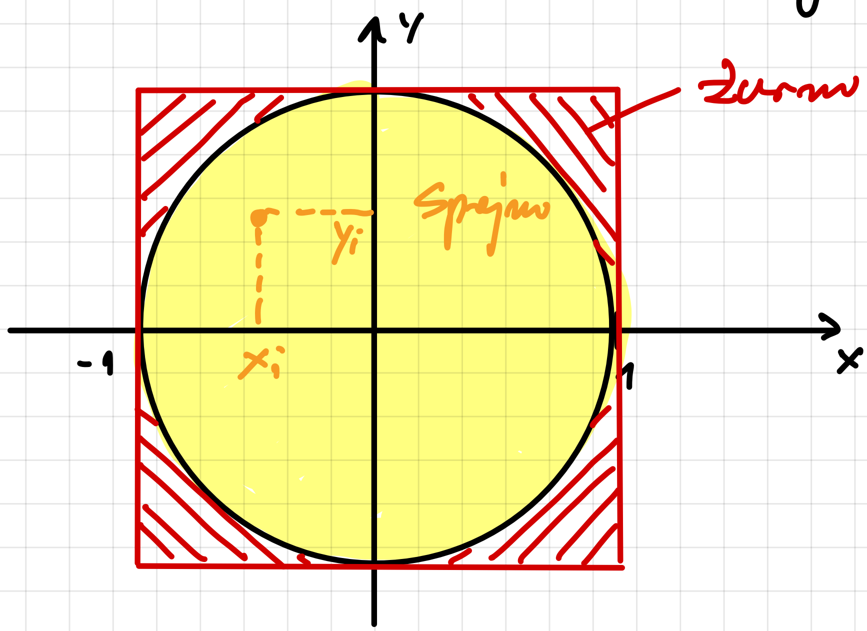
5.) Ponovimo.

**Pozor:** Metoda je zelo enostavna, a zelo potratna. Ne deluje dobro, ko $a,b \to \pm\infty$.

## Dodatek: Žrebanje števil na enotskem krogu:

Kako izžrebati točke, ki so enakomerno porazdeljene po notranjosti enotskega kroga.

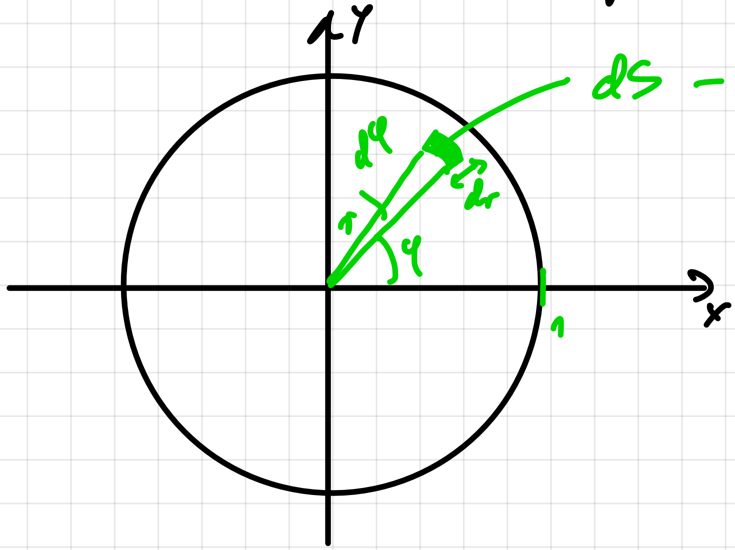
1.) Lahko postopamo po vzoru metode "hit and miss". Generiramo pare na kvadratu, ki ovije enotski krog in zavržemo točke, ki so zunaj kroga:




$$x_i = 2 \cdot \mathcal{U}(0,1) - 1$$
$$y_i = 2\, \mathcal{U}(0,1) - 1$$

Par $(x_i, y_i)$ obdržimo, če $x_i^2 + y_i^2 \le 1$

B.) Lahko pa postopamo tudi drugače in računamo v polarnih koordinatah.




dS – ploščina enega infinitezimalnega koščka.

Izhajamo iz verjetnostnega računa:

$$\frac{dP}{dS} = \frac{1}{S} = \frac{1}{\pi \cdot 1^2} = \frac{dP}{r\,dr\,d\varphi} = \frac{dP}{d(r^2)\frac{1}{2}d\varphi}$$

Hočemo enakomerno porazdelitev.

$$dP = 1 \cdot \underbrace{d(r^2)}\,\underbrace{d\left(\frac{\varphi}{2\pi}\right)}$$

To mora biti porazdeljeno po enakomerni porazdelitvi!

Sledi: $u_1, u_2$ generiramo po $U(0,1)$

$$r = \sqrt{u_1}\,, \quad \varphi = 2\pi u_2$$

# Integracija z metodo Monte Carlo

Izračunati želimo določen integral:

$$I = \int_a^b f(x)\,dx$$

Iz verjetnosti in statistike uporabimo naslednji trik: Imejmo naključno spremenljivko $X$, ki je porazdeljena po znani porazdelitvi $p(x)$. Zanima nas pričakovana vrednost izbrane funkcije $g(X)$. Velja:

$$E[g(X)] \equiv \int_{D_p} g(x)\,p(x)\,dx$$

Glej del o verjetnosti. Tam smo to vpeljali.

Če rečemo, da je $p(x)$ enakomerna porazdelitev na intervalu $[a,b]$:

$$p(x) = U(a,b) = \begin{cases} \frac{1}{b-a} & ; a \le x \le b \\ 0 & ; \text{sicer} \end{cases}, \quad (*)$$

potem velja:

$$E[g(X)] = \frac{1}{b-a} \int_a^b g(x)\, dx$$

Če še rečemo, da je $g(X) = f(X)$, potem:

$$E[f(X)] = \frac{1}{b-a} \int_a^b f(x)\, dx = \frac{I}{b-a}$$

Oziroma:

$$\boxed{I = (b-a) \cdot \underbrace{E[f(X)]}_{}}$$

Tega ne znamo izračunati, znamo pa oceniti v okviru statistične analize, kjer smo pričakovano vrednost spremenljivke aproksimirali z vzorčnim povprečjem:

ocena za int.

$= \bar{f}$ vzorčno povprečje.

$$\boxed{I \doteq \hat{I} = (b-a) \cdot \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} f(x_i),}$$

!

kjer so $x_i$ naključne vrednosti, izžrebane skladno z enakomerno porazdelitvijo $U(a,b)$. (*)

Kaj smo s tem dosegli? Problem računanja integrala smo prevedli na statistični problem ocenjevanja pričakovane vrednosti $E[f(X)]$, ki jo ocenjujemo z vzorčnim povprečjem $\bar{f}$.

- Ocena $\hat{I}$ je nepristranska:

$$E[\hat{I}] = E\left[(b-a)\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{n} f(X_i)\right] = (b-a)\frac{1}{N}\cdot N\cdot E[f(X)]$$

$$= (b-a)\cdot E[f(X)] \longleftarrow \text{Glej nazaj}$$

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

- Varianca $\hat{I}$ pa je:

$$Var[\hat{I}] = \frac{(b-a)^2}{n^2}\cdot\sum_{i=1}^{n} Var[f(X_i)] = \frac{(b-a)^2}{n}\cdot Var[f(X)]$$

$$= \frac{(b-a)^2}{n}\cdot\int_a^b \Big(f(x) - \underbrace{E[f(X)]}_{\text{povprečje}}\Big)^2\cdot\underbrace{\frac{1}{b-a}}_{\text{porazdelitev.}}\cdot dx$$

- Vzorčna varianca je potem:

$$s_{\hat{I}}^2 = \frac{s_f^2}{n}(b-a)^2 = \frac{(b-a)^2}{n(n-1)}\cdot\left(\sum_{i=1}^{n} f(x_i)^2 - \sum_{i=1}^{n}\bar{f}\right)$$

$$s_{\hat{I}}^2 = \frac{(b-a)^2}{n-1}\cdot\left(\overline{f^2} - \bar{f}^2\right)$$

# Od tod dobimo oceno integrala z napako

$$I = \hat{I} \pm \sqrt{s_I^2}$$

$$\int_a^b f(x)\,dx = (b-a)\cdot\overline{f} \pm \frac{(b-a)}{\sqrt{n-1}}\cdot\sqrt{\left(\overline{f^2} - \overline{f}^2\right)}$$

↓ Napaka pada s korenom! To pomeni, da če želimo statistično napako prepoloviti, rabimo 4x večji vzorec!

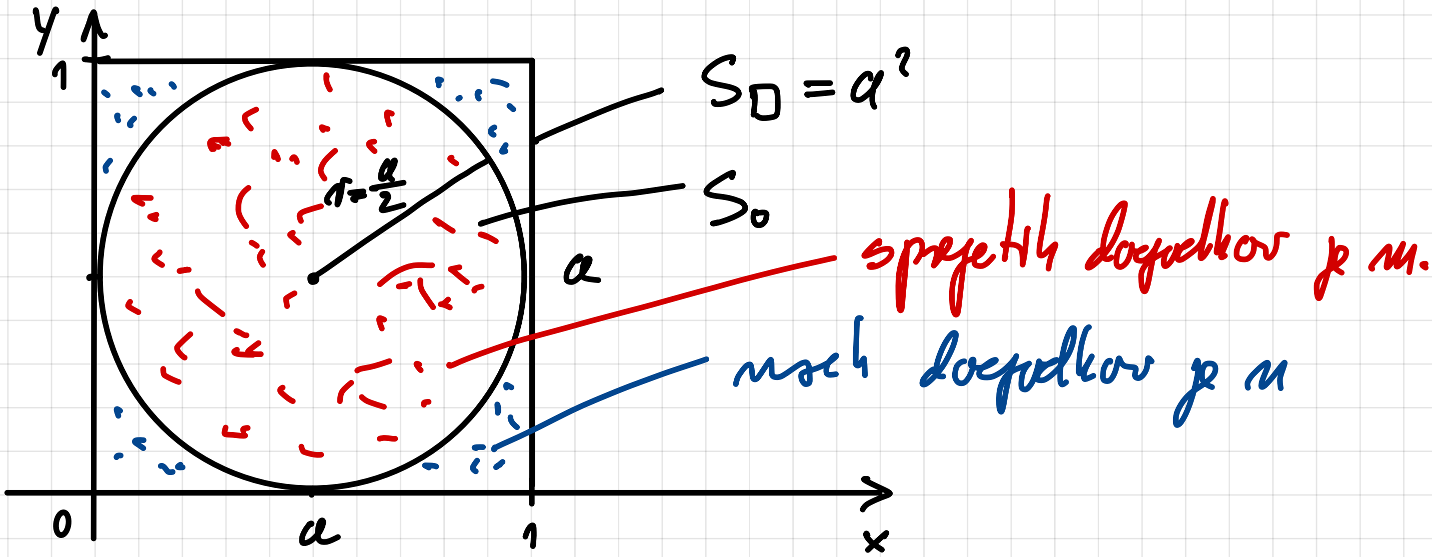
To je velikost naše domene $D$, ki je v 1D daljica. V več dimenzijah pa $D$ zamenjamo s ploščino $S$, volumnom $V$, .... V splošnem zapišemo:

$$\boxed{\int_V f\,dV = V\cdot\underbrace{\overline{f}}_{\text{povprečje po volumnu.}} \pm \underbrace{\frac{V}{\sqrt{n-1}}\cdot\sqrt{\overline{f^2} - \overline{f}^2}}_{\varepsilon}} \quad (**)$$

$\sigma_1$

Ta formula je osnova vseh M.C. metod.

**Zgled:** Izračunaj ploščino kroga s premerom $a = 1$ z metodo Monte Carlo.




Ploščino kroga izračunamo:

$$S_\circ = \int_{S_\circ} 1 \cdot dS = \left| \begin{array}{l} \text{Prevedemo na} \\ \text{integral po} \\ \text{površini } S_\square \end{array} \right| = \int_{S_\square} f(x,y)\, dS$$

Funkcija $f(x,y)$ pove, ali smo znotraj kroga, ali ne.

$$f(x,y) = \begin{cases} 1\,; & \left(x - \frac{a}{2}\right)^2 + \left(y - \frac{a}{2}\right)^2 \le \left(\frac{a}{2}\right)^2 \\ 0\,; & \text{sicer} \end{cases}$$

Izberemo enakomerno porazdelitev v 2D $p(x,y)$, ki je enakomerna po površini kvadrata s površino $S_{\square} = a^2$.

$$p(x,y) = \begin{cases} \frac{1}{a^2} & ; \quad 0 \le x,y \le a \\ 0 & ; \quad \text{sicer.} \end{cases}$$

Potem sklepamo z (**) lahko zapišemo:

$$\int_{S_{\square}} f(x,y)\, dS = \int_0^a \int_0^a f(x,y)\, dS = \overset{V}{a^2} \cdot \frac{1}{n} \overbrace{\underbrace{\sum_{i=1}^{n} \cdot f(x_i,y_i)}_{m}}^{\bar{f}} = a^2 \overset{p}{\frac{m}{n}}$$

Razmerje uspešnih vs. vseh dogodkov.

$$\overline{f^2} = \frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^{n} f^2(x_i) = \frac{m}{n} = p \qquad f(x_i) = \begin{cases} 0 \\ 1 \end{cases}$$

$$\sigma_1^2 = a^4 \cdot \left( \overline{f^2} - \bar{f}^2 \right) = a^2 \cdot \left( \frac{m}{n} - \frac{m^2}{n^2} \right) =$$

$$= \underbrace{a^4 p (1-p)}$$

To je napaka binomske porazdelitve, kar smo pričakovali.

Od tod dobimo:

$$\varepsilon = \frac{a^2 \cdot \sqrt{p(1-p)}}{\sqrt{n-1}}$$

# Opombe:

- problem se da prevesti na računanje konstante $\pi$:

$$S_o = \pi \frac{a^2}{4} = a^2 \cdot \frac{m}{n} \pm \frac{a^2 \cdot \sqrt{\frac{m}{n}\left(1-\frac{m}{n}\right)}}{\sqrt{n-1}} \quad \Big| : a^2 \cdot 4$$

Dobimo:

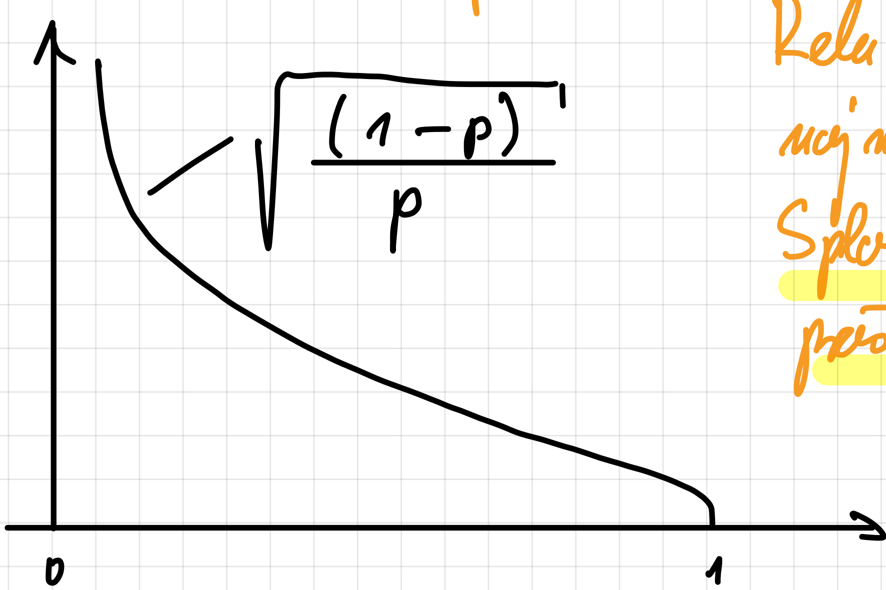
$$\pi = 4 \cdot \frac{m}{n} \pm \frac{4 \cdot \sqrt{\frac{m}{n}\left(1-\frac{m}{n}\right)}}{\sqrt{n-1}}$$

- problem se da enostavno razširiti na računanje volumna krogle: $a^2 \to a^3$.

- Relativna napaka:

$$\delta = \frac{\sqrt{\frac{m}{n}\left(1-\frac{m}{n}\right)}}{\sqrt{n-1}\;\frac{m}{n}} = \frac{1}{\sqrt{n-1}} \sqrt{\frac{(1-p)}{p}}$$

$\frac{m}{n}$ " $p$

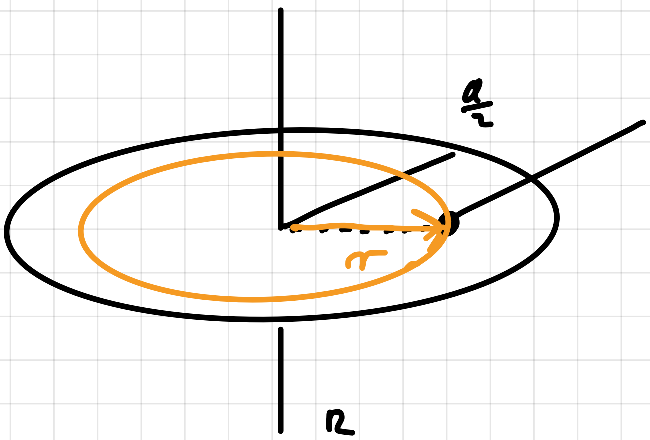



Relativna napaka bo najmanjša, ko $p \to 1$. Splača se, da je vzorčni prostor čim bolj podoben volumnu telesa, ki ga obravnavamo!

## Zgled #2:

Izračunaj vztrajnostni moment diska z maso $m = 1$ in polmerom $R = \frac{a}{2}$ in $a = 1$.

**Vemo:**




Za obroč velja:

$$dJ = r^2\, dm = r^2 \cdot \frac{m}{S_0}\, dS$$

$$= r^2 \frac{m}{\cancel{\pi} R^2} \cdot 2\cancel{\pi} r\, dr$$

$$= \frac{m}{R^2} \cdot 2r^3\, dr$$

$$J = \int dJ = \frac{2m}{R^2} \cdot \int_0^R r^3\, dr = \frac{2m}{R^2} \cdot \frac{R^4}{4} = \frac{mR^2}{2} = \underline{\underline{\frac{1}{8}}}$$

**Metoda Monte Carlo:** Postopamo analogno, kot pri računanju ploščine kroga.

$$J = \frac{m}{\pi R^2} \int_{S_0} r^2\, dS = \frac{\overset{=1}{m}}{\underset{\frac{1}{4}}{\pi R^2}} \cdot \int_{S_\square} \underbrace{\sqrt{x^2 + y^2}}_{\text{Tak zapis je bolj uporaben!}} \cdot f(x,y)\, dx\, dy$$

To je naš faktor

$$J = \frac{4}{\pi} \cdot \frac{1}{N} \cdot \sum_{i=1}^{N} \left[ \sqrt{x_i^2 + y_i^2} \cdot f(x_i, y_i) \right] \pm \underbrace{\frac{1}{\sqrt{N}}}_{\text{Glavni trend}} \cdot \xi$$

# Ocenimo čas računanja z metodo M.C.

Napaka, ki jo naredimo je: $\varepsilon = \frac{\sigma_1}{\sqrt{n}}$

Velikost vzorca oziroma število žrebanj oziroma korakov računalnika, za dosego izbrane natančnosti $\varepsilon$ (npr. $10^{-9}$) je potem enaka:

$$n = \frac{\sigma_1^2}{\varepsilon^2} = \left(\sim 10^{18}\right)$$

[na tisto z ker samo posledice)

Čas računanja $T_{MC} = \overset{\text{const}}{\gamma}\, n = \frac{\sigma_1^2}{\varepsilon^2}\gamma$.

- Kakšen pa ti čas v primerjavi s časom kvadraturnih formul $T_Q$?

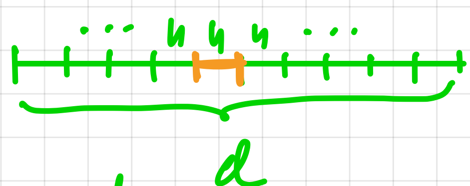
$$T_Q \sim n = h \left(\frac{1}{h}\right)^d$$

$d$ ← dimenzija prostora/integrala!

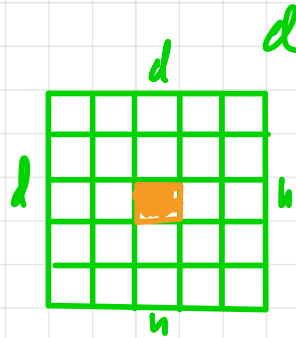
$n$ ← Število računskih operacij

$h$ ← Velikost koraka.

E.g.:

1D: 

$\Rightarrow n = \frac{d}{h} \propto \frac{1}{h}$

2D: 

$\Rightarrow n = \frac{d^2}{h^2} \propto \frac{1}{h^2}$

Napaka kvadraturne formule ima zapisalo kot

$$\varepsilon = O(\underbrace{h^k \dots}_{\text{odvodi}}) = \beta \cdot h^{k}$$

Red kvadraturne formule.

Trapezna : $k = 2$

Simpson : $k = 4$.

Glede na red moramo za dosego željene natančnosti prilagoditi korak:

$$h = \left(\frac{\varepsilon}{\beta}\right)^{\frac{1}{k}}$$

Čas računanja je potem enak:

$$T_Q = \xi \cdot \left(\frac{\varepsilon}{\beta}\right)^{-\frac{d}{k}}$$

Primerjava metod:

$$\frac{T_{MC}}{T_Q} = \frac{\gamma \cdot \frac{\sigma_1^2}{\varepsilon^2}}{\xi \left(\frac{\varepsilon}{\beta}\right)^{-\frac{d}{k}}} \propto \frac{\varepsilon^{\frac{d}{k}}}{\varepsilon^2} = \varepsilon^{\frac{d}{k} - 2}$$

Ker je $\varepsilon \ll 1$ velja:

- če je $\frac{d}{k} > 2$, potem $T_{MC} < T_Q$.
- če je $\frac{d}{k} < 2$, potem $T_{MC} > T_Q$.

Za probleme v več dimenzijah ($d \gtrsim 6$) metoda Monte Carlo postane superiorna metoda, hitrejša od kvadraturnih formul, nakljub razmeroma počasni konvergenci. $\left(\sim \frac{1}{\sqrt{n}}\right)$.

Npr:

Primerjava Trapezne metode in metode M.C. pri računanju integrala v 1D z natančnostjo $10^{-9}$.

$d = 1$,
$k = 2$
$\varepsilon = 10^{-9}$

$$T_{MC} = T_Q \cdot \left(10^{-9}\right)^{\frac{1}{2} - 2} = 3 \cdot 10^{13} T_Q$$

To se ne splača.

Primerjava Trapezne metode in M.C. pri računanju volumna 4D krogle. z natančnostjo $10^{-9}$.

$d = 4$
$k = 2$
$\varepsilon = 10^{-9}$

$$T_{MC} = T_Q \cdot \left(10^{-9}\right)^{0} = T_Q.$$

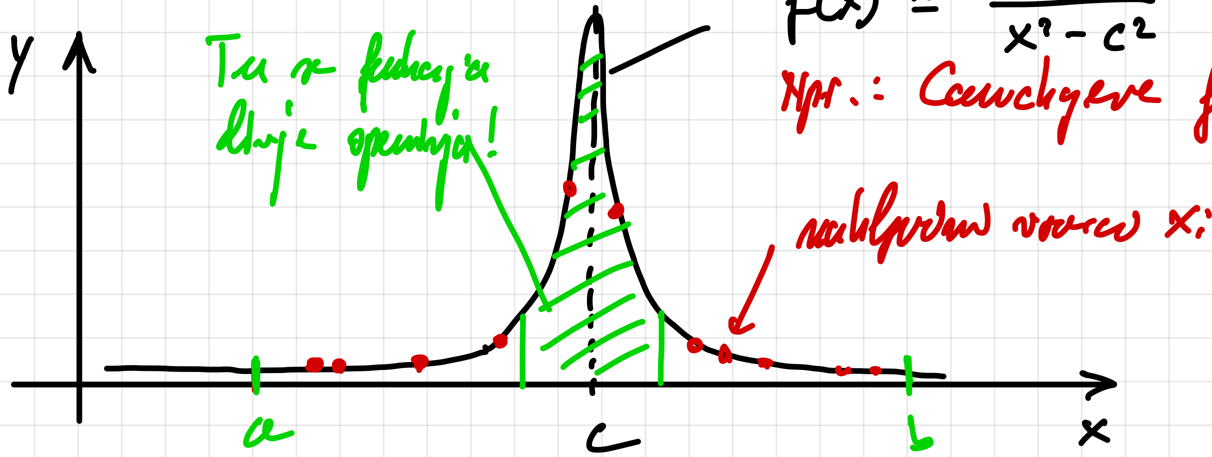
M.C. je lažje sprogramirati!

# Prednostno vzorčenje (ang. Importance sampling)

Izračunati želimo integral funkcije $f(x)$, ki se zelo spreminja le na majhnem delu definicijskega območja, drugod pa se spreminja le počasi.

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

Npr.: Cauchyeve funk.




Če $[a,b]$ vzorčimo enakomerno, potem bomo premalokrat vzorčili na območju, kjer se funkcija spreminja in znatno prispeva k integralu. Posledično dobimo z metodo M.C. nezanesljivo vrednost. Težavo rešimo s prednostnim vzorčenjem:

$$I = \int_a^b f(x)\,dx = (b-a)\cdot \int_a^b f(x)\cdot \underbrace{u(x)}_{\text{enakomerna porazdelitev.}}\,dx$$

To smo prevedli na ocenjevanje parametrov porazdelitev.

$$I = \int_a^b \underbrace{(b-a)}_{=\frac{1}{u(x)}} f(x)\, u(x)\, dx \doteq \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} (b-a) f(x_i)$$

Naša ocena na končnem vzorcu!

$x_i$ smo vzorčili po enakomerni porazdelitvi!

Ideja pomembnostnega vzorčenja je ta, da $u(x)$ zamenjamo s porazdelitvijo $w(x)$, ki je bolj podobna $f(x)$. Seveda mora veljati:

$$w(x) \geq 0 \text{ za } \forall x \in D_w \quad \text{in} \quad \int_{D_w} w(x)\, dx = 1.$$

Zapišemo:

$$I = \int_a^b f(x)\, dx = \int_a^b \underbrace{\frac{f(x)}{w(x)}}_{\equiv g(x)} \cdot w(x)\, dx$$

$$= \int_a^b g(x)\, w(x)\, dx \doteq \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} g(x_i) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \frac{f(x_i)}{w(x_i)}$$

Tu so sedaj $x_i$ porazdeljeni po porazdelitvi $w(x)$. S tem dobimo več vzorcev tam, kjer jih potrebujemo.

Zahteva:

$$g(x) = \frac{f(x)}{w(x)} < \infty$$

## (Vzorčna) varianca integrala:

$$s_I^2 = \frac{1}{n-1}\cdot\left(\overline{g^2} - \overline{g}^2\right) = \frac{1}{n-1}\cdot\left[\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} g(x_i)^2 - \left(\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} g(x_i)\right)^2\right]$$

Da se pokazati, da varianca tem manjša tem bolj je $w(x)$ podobna $\frac{f(x)}{I}$.

To je prava vrednost integrala, ki je sicer ne poznamo!

Zapišemo varianco, nato pa z variacijsko metodo in uporabo Lagrangevega multiplikatorja določimo tak $w(x)$, da je varianca minimalna.
Glej Širca, RMF.

V limiti $w(x) = \frac{f(x)}{I}$ : $g(x) = \frac{f(x)}{f(x)}\cdot I$

$$s_I^2 = \frac{1}{n-1}\cdot\left[\frac{1}{n}\underbrace{\sum_{i=1}^{n} I^2}_{n I^2} - \left(\underbrace{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} I}_{\frac{1}{n}\cdot n I}\right)^2\right] = \frac{1}{n-1}\left[I^2 - I^2\right] = \underline{\underline{0}}$$

Če bi poznali $I$ in bi izbrali dogodke po $w(x)$, ki ima enak oblik kot $f(x)$, bi M.C. integracija dala varianco 0.

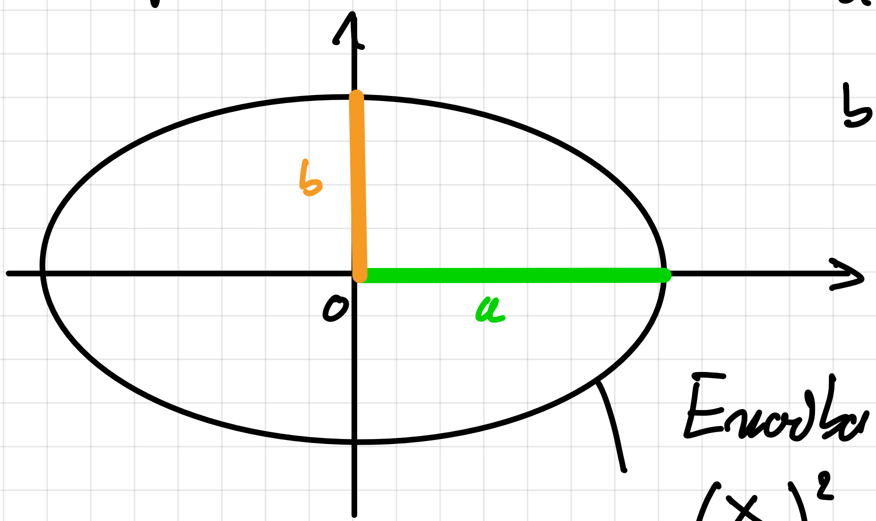
**Opomba:** Opazimo, da varianca pada, ko $w(x) \to f(x)/I$, pri računanju ploščine, kjer je bila varianca nič v primeru, da je bilo območje žrebanja dogodkov enako površini loka ($p = 1$).

# Napomene za Zadaću #3:

## 1.) Elipsa:

$a \equiv$ "Velika poluos"

$b =$ "Mala poluos"

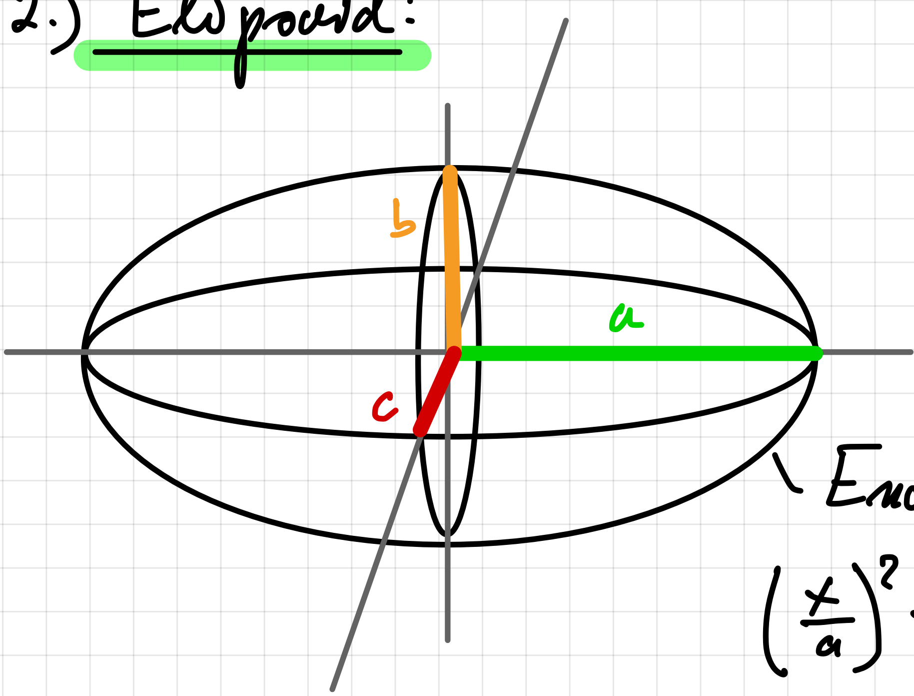



Jednačina elipse:

$$\left(\frac{x}{a}\right)^2 + \left(\frac{y}{b}\right)^2 = 1$$

Površina: $S = \pi \cdot a \cdot b$

## 2.) Elipsoid:




Jednačina elipsoida:

$$\left(\frac{x}{a}\right)^2 + \left(\frac{y}{b}\right)^2 + \left(\frac{z}{c}\right)^2 = 1$$

Volumen:

$$V = \frac{4}{3}\pi abc$$