ΕΛΛΗΝΙΚΗ ΔΗΜΟΚΡΑΤΙΑ
ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΚΡΗΤΗΣ

Εισαγωγή σε μεθόδους Monte Carlo

Ενότητα 2: Ολοκλήρωση Monte Carlo, γεννήτριες τυχαίων αριθμών

Βαγγέλης Χαρμανδάρης

Τμήμα Μαθηματικών και Εφαρμοσμένων Μαθηματικών

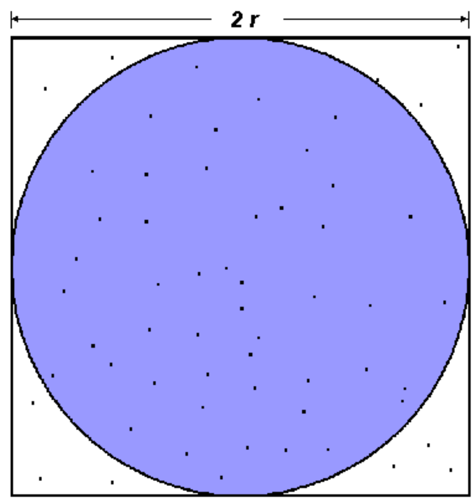
Introductory Examples: Calculate π

Calculation of number π with the following method:

➢ Περικλείουμε κύκλο με ένα τετράγωνο. Δημιουργούμε *m* τυχαία σημεία μέσα στο τετράγωνο.

➢ Βρίσκουμε τα σημεία που εμπεριέχονται και μέσα στον κύκλο, *n*.

➢ Αν $r = n/m$, τότε ο αριθμός π προσεγγίζεται ως $\pi \approx 4r$. Όσο περισσότερα τα σημεία *m* τόσο μεγαλύτερη ακρίβεια του υπολογισμού.



$$A_S = (2r)^2 = 4r^2$$
$$A_C = \pi r^2$$
$$\pi = 4 \times \frac{A_C}{A_S}$$

Introductory Examples: Calculate π

Algorithm:

```
npoints = 1000000
circle_count = 0
do j = 1, npoints
    generate 2 random numbers between 0 and 1
    xcoordinate = random1
    ycoordinate = random2
    if (xcoordinate, ycoordinate) inside circle then
      circle_count = circle_count + 1
end do
PI = 4.0*circle_count/npoints
```

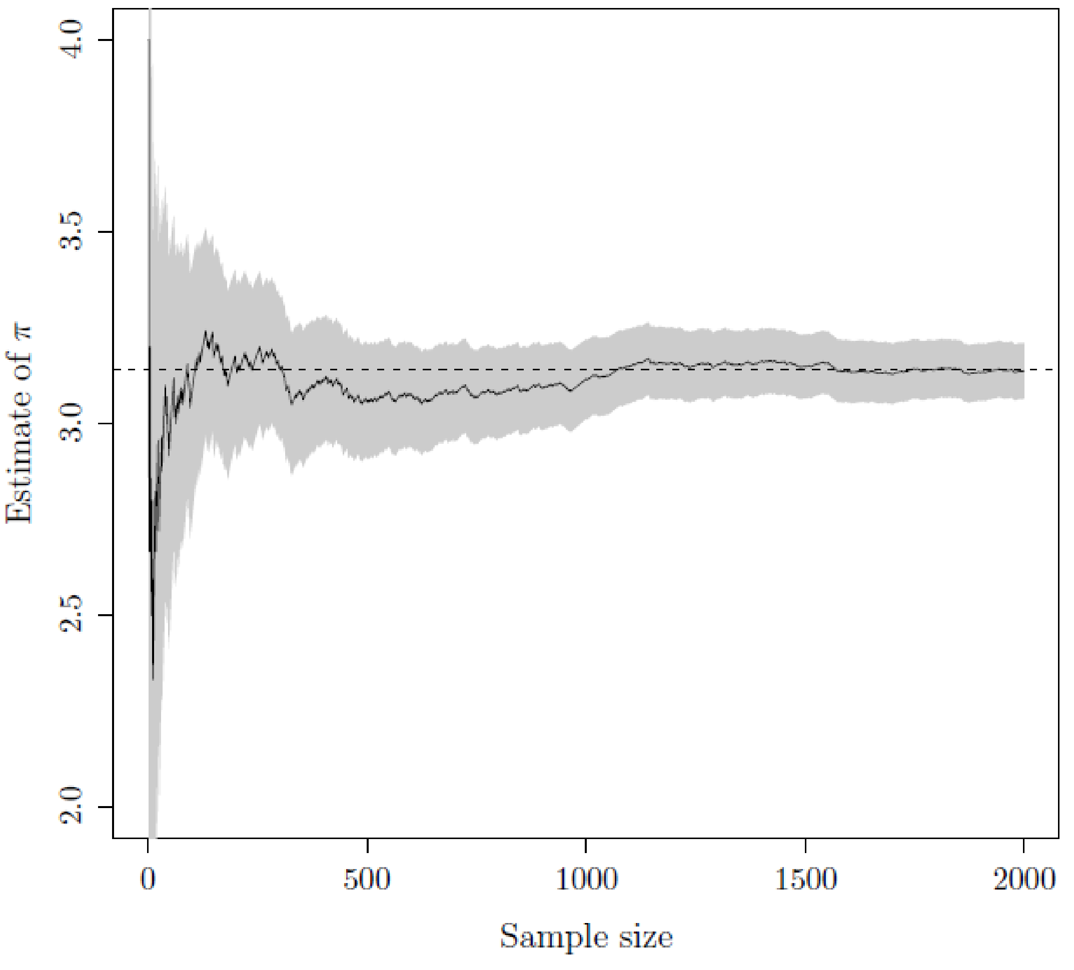
• Ο χρόνος υπολογισμού είναι κυρίως ο χρόνος εκτέλεσης της επαναληπτικής διαδικασίας (loop).

• Αυτό οδηγεί σε (σχεδόν) ‘τέλειο παραλληλισμό’ (**embarrassingly parallelism**):

- ➢ Εντατικοί υπολογισμοί.
- ➢Ελάχιστη επικοινωνία, ελάχιστο I/O.

Introductory Examples: Calculate π

- ❑ **Estimate *π* as a function of sample size:**



Monte Carlo Integration

- Two major classes of numerical problems that arise in statistical inference
  - *optimization* problems
  - *integration* problems
- Although optimization is generally associated with the likelihood approach, and integration with the Bayesian approach, these are not strict classifications

- Generic problem of evaluating the integral

$$\mathrm{E}_f[h(X)] = \int_{\mathcal{X}} h(x)\, f(x)\, dx \, .$$

- Based on previous developments, it is natural to propose using a sample $(X_1, \ldots, X_m)$ generated from the density f
- Approximate the integral by the empirical average
- This approach is often referred to as the *Monte Carlo method*

Monte Carlo Integration

Strong Law

- For a sample $(X_1, \ldots, X_m)$, the empirical average

$$\overline{h}_m = \frac{1}{m} \sum_{j=1}^{m} h(x_j) \ ,$$

converges almost surely to

$$\mathrm{E}_f[h(X)]$$

- This is the Strong Law of Large Numbers

Monte Carlo Integration

Central Limit Theorem

- Estimate the variance with
$$\mathrm{var}(\overline{h}_m) = \frac{1}{m}\int_{\mathcal{X}} \left(h(x) - \mathrm{E}_f[h(X)]\right)^2 f(x)dx$$
- For m large,
$$\frac{\overline{h}_m - \mathrm{E}_f[h(X)]}{\sqrt{v_m}}$$
is therefore approximately distributed as a $\mathcal{N}(0,1)$ variable
- This leads to the construction of a convergence test and of confidence bounds on the approximation of $\mathrm{E}_f[h(X)]$.

Monte Carlo Integration: Example

- **Example: Calculate the integral of a function h(x)**

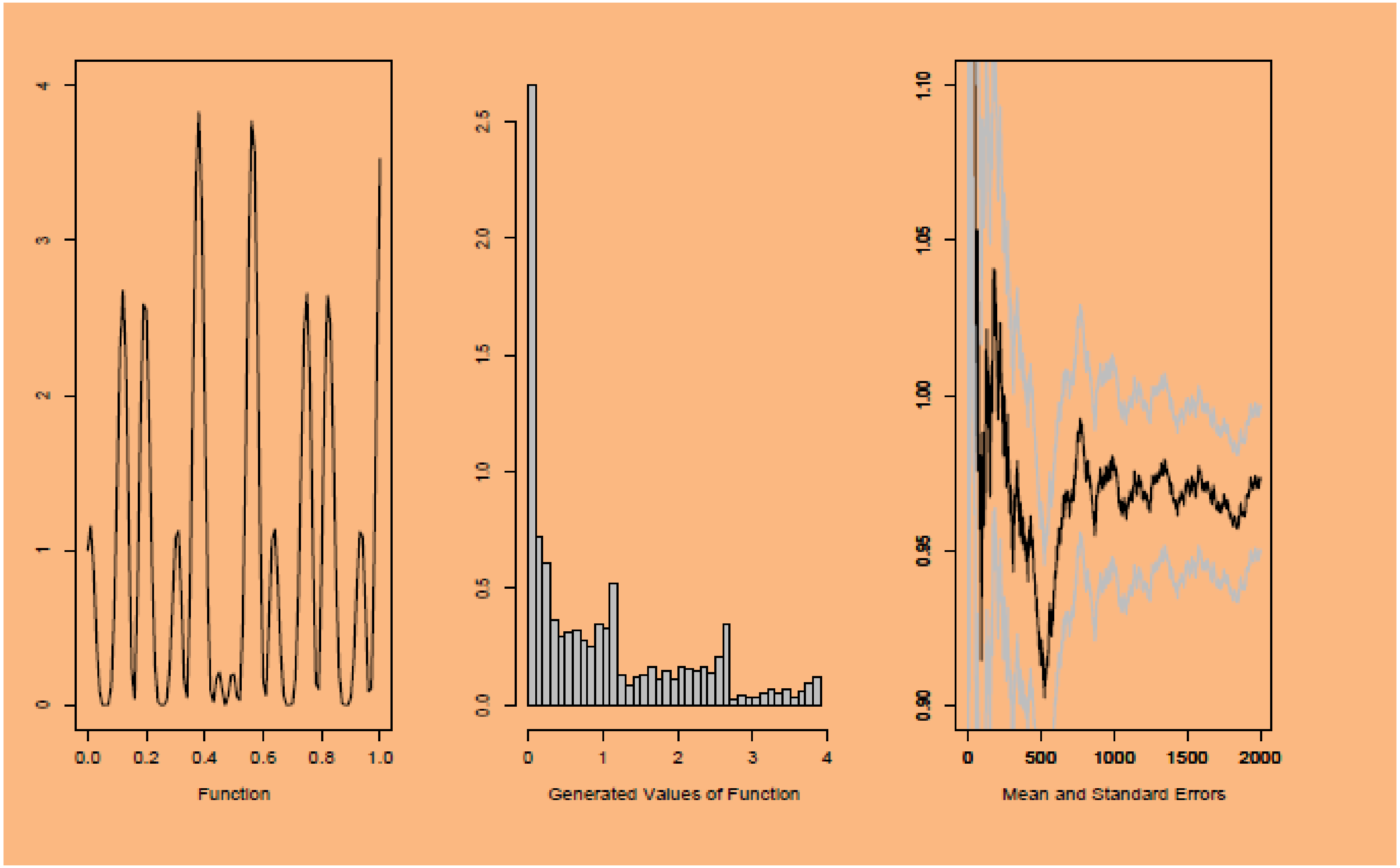
$$h(x) = [\cos(50x) + \sin(20x)]^2$$

.

- To calculate the integral, we generate $U_1, U_2, \ldots, U_n$ iid $\mathcal{U}(0,1)$ random variables, and approximate $\int h(x)dx$ with $\sum h(U_i)/n$.
- It is clear that the Monte Carlo average is converging, with value of 0.963 after $10,000$ iterations.

Monte Carlo Integration: Example

❑ **Example: Estimators**

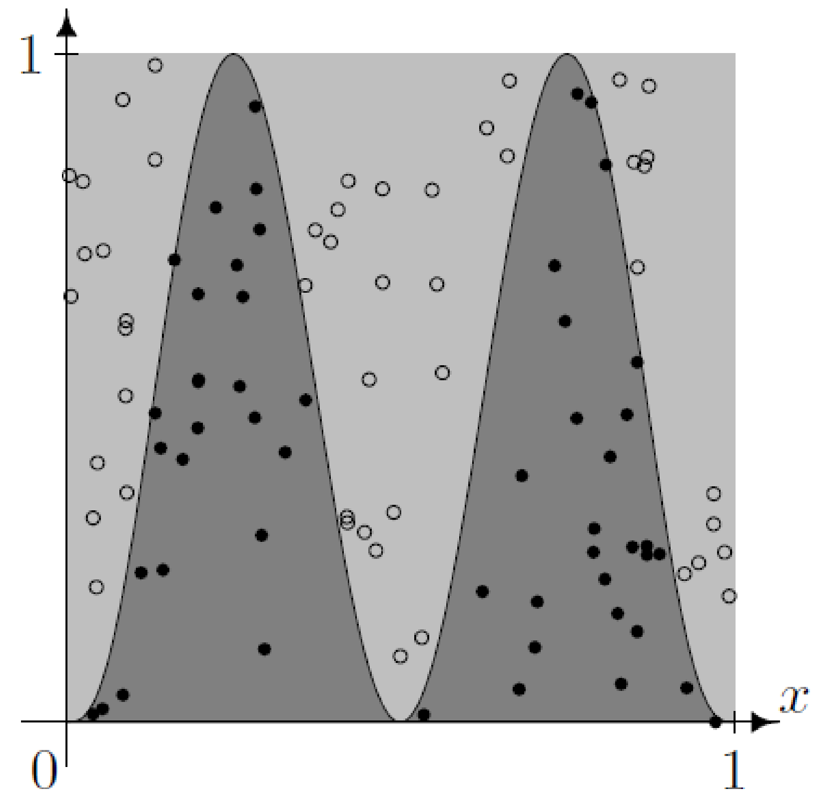


Monte Carlo Integration

❑ Generalization of Integration: **Riemann sums vs MC method** (see hand notes).

$$
\begin{aligned}
& \int_0^1 f(x)\,dx \\
= \; & \int_0^1 \int_0^{f(x)} 1\,dt\,dx \\
= \; & \iint_{\{(x,t):t\leq f(x)\}} 1 dt\,dx \\
= \; & \frac{\iint_{\{(x,t):t\leq f(x)\}} 1\,dt\,dx}{\iint_{\{0\leq x,t\leq 1\}} 1 dt\,dx}
\end{aligned}
$$

$f:\ [0,1] \to [0,1]$



Monte Carlo Integration

❑ **Comparison – Speed of Convergence:**

- Speed of convergence of Monte Carlo integration is $O_{\mathbb{P}}(n^{-1/2})$.
- Speed of convergence of numerical integration of a *one-dimensional* function by Riemann sums is $O(n^{-1})$.
- Does not compare favourably for one-dimensional problems.
- However:
  - Order of convergence of Monte Carlo integration is *independent* of the dimension.
  - Order of convergence of numerical integration techniqes like Riemann sums deteriorates with the dimension increasing.

$\leadsto$ Monte Carlo methods can be a good choice for high-dimensional integrals.

Random Number Generators

- Philosophical paradox:
  - We need to reproduce randomness by a computer algorithm.
  - A computer algorithm is deterministic in nature.

  $\rightsquigarrow$ "pseudo-random numbers"
- Pseudo-random number from $\mathrm{U}[0,1]$ will be our only "source of randomness".
- Other distributions can be derived from $\mathrm{U}[0,1]$ pseudo-random numbers using deterministic algorithms.

Pseudo-Random Number Generators

- A pseudo-random number generator (RNG) should produce output for which the U$[0,1]$ distribution is a suitable model.
- The pseudo-random numbers $X_1, X_2, \ldots$ should thus have the same *relevant* statistical properties as independent realisations of a U$[0,1]$ random variable.
  - They should reproduce independence ("lack of predictability"): $X_1, \ldots, X_n$ should not contain any discernible information on the next value X_{n+1}.This property is often referred to as the lack of predictability.
  - The numbers generated should be spread out evenly across $[0,1]$.

Pseudo-Random Number Generators

- **A simple example: Congruential pseudo-RNG.**

Algorithm 1.1: Congruential pseudo-random number generator

1. Choose $a, M \in \mathbb{N}$,$c \in \mathbb{N}_0$, and the initial value ("seed") $Z_0 \in \{1, \ldots M-1\}$.
2. For $i = 1, 2, \ldots$

   Set $Z_i = (aZ_{i-1} + c) \mod M$, and $X_i = Z_i / M$.

$Z_i \in \{0, 1, \ldots, M-1\}$, thus $X_i \in [0, 1)$.

Pseudo-Random Number Generators

Cosider the choice of $a = 81$, $c = 35$, $M = 256$, and seed $Z_0 = 4$.

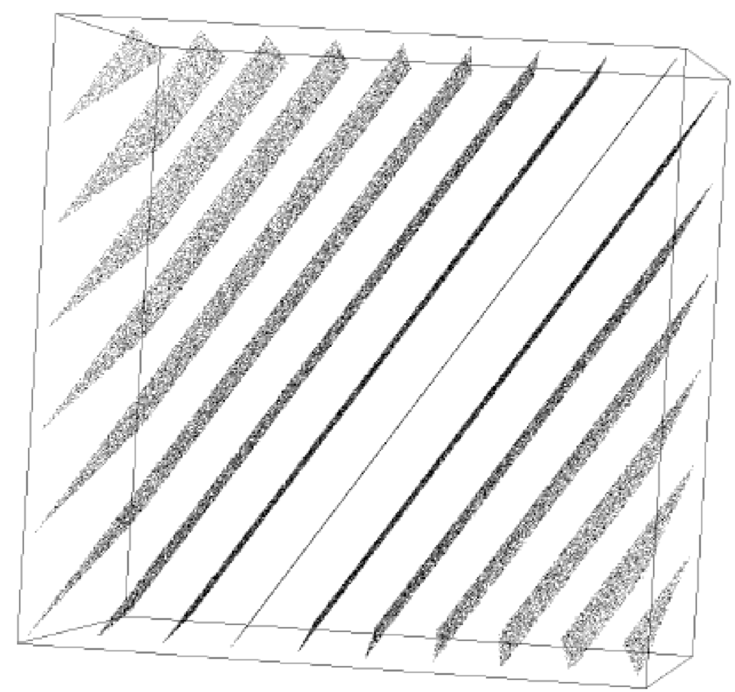
$$\begin{aligned} Z_1 &= (81 \cdot 4 + 35) \mod 256 = 359 \mod 256 = 103 \\ Z_2 &= (81 \cdot 103 + 35) \mod 256 = 8378 \mod 256 = 186 \\ Z_3 &= (81 \cdot 186 + 35) \mod 256 = 15101 \mod 256 = 253 \\ & \ldots \end{aligned}$$

The corresponding X_i are $X_1 = 103/256 = 0.4023438$, $X_2 = 186/256 = 0.72656250$, $X_1 = 253/256 = 0.98828120$.

Pseudo-Random Number Generators

❑ **RANDU: A typical poor choice of RNG.**

- Very popular in the 1970s (e.g. System/360, PDP-11).
- Linear congruential generator with $a = 2^{16} + 3$, $c = 0$, and $M = 2^{31}$.
- The numbers generated by RANDU lie on only 15 hyperplanes in the 3-dimensional unit cube!



According to a salesperson at the time: "We guarantee that each number is random individually, but we don't guarantee that more than one of them is random."

Pseudo-Random Number Generators

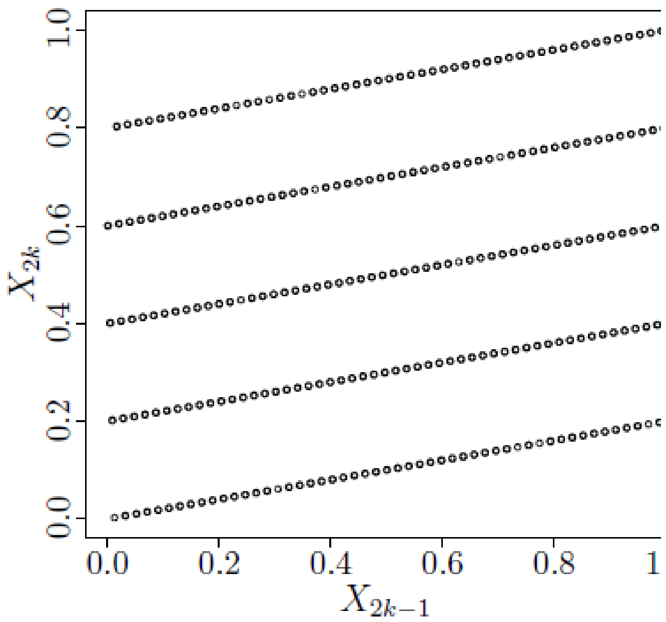
❑ Flaw of the linear congruential RNG.

- "Crystalline" nature is a problem for every linear congurentrial generator.
- Sequence of generated values $X_1, X_2, \ldots$ viewed as points in an n-dimension cube lies on a finite, and often very small number of parallel hyperplanes.
- Marsaglia (1968): "the points [generated by a congruential generator] are about as randomly spaced in the unit n-cube as the atoms in a perfect crystal at absolute zero."
- The number of hyperplanes depends on the choice of a, c, and M.
- For these reasons do not use the linear congurential generator! Use more powerful generators (like e.g. the *Mersenne twister*, available in GNU R).

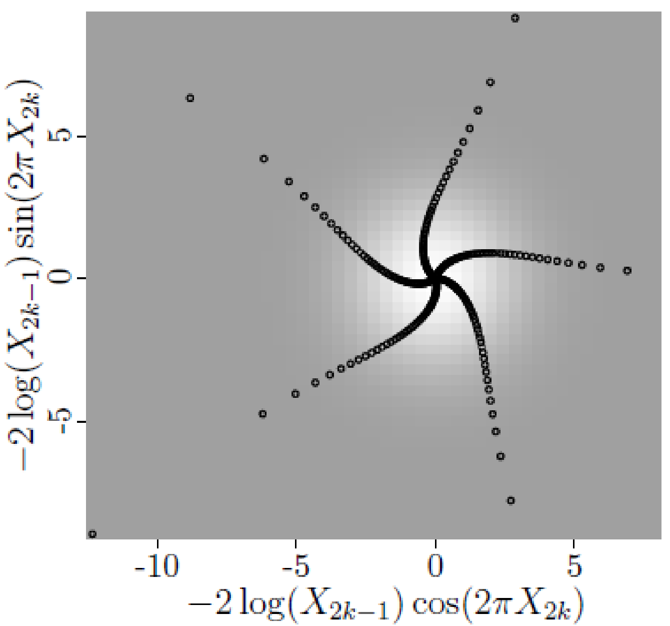
Pseudo-Random Number Generators

- **Another problematic example:**

Linear congruential generator with $a = 1229$, $c = 1$, and $M = 2^{11}$.



Pairs of generated values (X_{2k-1}, X_{2k})



Transformed by Box-Muller method

Bibliography

- *Monte Carlo Strategies in Scientific Computing*, J. Liu, Springer, New York, 2001.
- *Monte Carlo Statistical Methods*, C. Robert, G. Casella, Springer, New York, 2004.
- *Stochastic Methods: A Handbook for the Natural and Social Sciences,* C. Gardiner, Springer, New York, 2009.

Τέλος Ενότητας

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ & ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ, ΠΟΛΙΤΙΣΜΟΥ & ΑΘΛΗΤΙΣΜΟΥ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Χρηματοδότηση

- Το παρόν εκπαιδευτικό υλικό έχει αναπτυχθεί στα πλαίσια του εκπαιδευτικού έργου του διδάσκοντα.
- Το έργο «**Ανοικτά Ακαδημαϊκά Μαθήματα στο Πανεπιστήμιο Κρήτης**» έχει χρηματοδοτήσει μόνο τη αναδιαμόρφωση του εκπαιδευτικού υλικού.
- Το έργο υλοποιείται στο πλαίσιο του Επιχειρησιακού Προγράμματος «Εκπαίδευση και Δια Βίου Μάθηση» και συγχρηματοδοτείται από την Ευρωπαϊκή Ένωση (Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο) και από εθνικούς πόρους.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Σημειώματα

Σημείωμα αδειοδότησης

Σημείωμα Αναφοράς

Copyright Πανεπιστήμιο Κρήτης, Βαγγέλης Χαρμανδάρης 2015. «Εισαγωγή σε μεθόδους Monte Carlo. Ενότητα 2: Ολοκλήρωση Monte Carlo, Γεννήτριες τυχαίων αριθμών». Έκδοση: 1.0. Ηράκλειο 2015. Διαθέσιμο από τη δικτυακή διεύθυνση: https://opencourses.uoc.gr/courses/course/view.php?id=228.

Διατήρηση Σημειωμάτων

Οποιαδήποτε αναπαραγωγή ή διασκευή του υλικού θα πρέπει να συμπεριλαμβάνει:

- το Σημείωμα Αναφοράς
- το Σημείωμα Αδειοδότησης
- τη δήλωση Διατήρησης Σημειωμάτων
- το Σημείωμα Χρήσης Έργων Τρίτων (εφόσον υπάρχει)

μαζί με τους συνοδευόμενους υπερσυνδέσμους.