ЕВРОПЕЙСКИ СЪЮЗ
ЕВРОПЕЙСКИ ФОНД ЗА
РЕГИОНАЛНО РАЗВИТИЕ

ОПЕРАТИВНА ПРОГРАМА
НАУКА И ОБРАЗОВАНИЕ ЗА
ИНТЕЛИГЕНТЕН РАСТЕЖ

BG05M2OP001-1.001-0003
„ЦЕНТЪР ЗА ВЪРХОВИ ПОСТИЖЕНИЯ ПО ИНФОРМАТИКА И ИНФОРМАЦИОННИ И КОМУНИКАЦИОННИ ТЕХНОЛОГИИ“
2018 - 2023

Монте Карло метод за оценка на екстремални собствени стойности с балансиране на стохастичната и систематичната грешка и някои приложения

научната конференция "Нови скалируеми алгоритми и приложения",
01.12.2021 г.

Силви-Мария Гюрова, ИИКТ-БАН

ИКТ

ЦЕНТЪР ЗА ВЪРХОВИ ПОСТИЖЕНИЯ ПО
ИНФОРМАТИКА И ИНФОРМАЦИОННИ И
КОМУНИКАЦИОННИ ТЕХНОЛОГИИ

Съдържание

1. Монте Карло метод
2. Пресмятане на екстремалните собствени стойности
   - Степенен метод
   - Резолвентен метод
3. Модификация на Монте Карло метода
4. Числови експерименти
5. Заключение и приложения
6. Q&A

Проект BG05M2OP001-1.001-0003 „Център за върхови постижения по Информатика и информационни и комуникационни технологии“, финансиран от Оперативна програма „Наука и образование за интелигентен растеж“, съфинансирана от Европейския съюз чрез Европейските структурни и инвестиционни фондове.

1. Монте Карло метод

Стохастичните числени методи (*Монте Карло методи*) се основават на симулация на случайни величини и случайни процеси. Конструира се случайна величина, чието математическо очакване съвпада с търсеното решение и се избира подходящ оценител.

Генерирането на случайна величина с желаното разпределение има две стъпки:

- ❑ Генериране на извадки от стандартно равномерно разпределение в [0,1].
- ❑ Трансформиране на извадките по подходящ начин за симулиране на желаното разпределение.

- ➢ Случайната величина с търсените характеристики не е единствена.

Грешка при пресмятания с Монте Карло метода

Стохастичната грешката има порядък $N^{-\frac{1}{2}}$ при размер на извадката *N*, т.е $\approx \sigma(\theta)\, N^{-\frac{1}{2}}$.

- Вероятностен резултат – няма абсолютна горна граница.
- Статистическото разпределение на грешката е нормално разпределена случайна величина.

- При Монте Карло метода грешката и броят на реализациите са свързани чрез:

$$\varepsilon = O(\sigma N^{-\frac{1}{2}}) \qquad N = O(\sigma/\varepsilon)^2$$

- Ускоряване на сходимостта

$$\varepsilon = O(\sigma\, N^{-\frac{1}{2}-\frac{1}{d}}) \xrightarrow{\quad\quad} d \to \infty\ O(\sigma N^{-\frac{1}{2}})$$

ИКТ

2. Пресмятане на екстремалните собствени стойности: Степенен метод

За дадена матрица $A = \{a_{ij}\}_{i,j=1}^{n}$ се разглежда задачата за намиране на собствени стойности:

$$Au = \boldsymbol{\lambda}(A)u,\ A \in R^{nxn},\ u \in R^{n},$$

$$|\underbrace{\lambda_n}_{\lambda_{min}}| < |\lambda_{n-1}| \leq |\lambda_{n-2}| \leq \ldots \leq |\lambda_2| < |\underbrace{\lambda_1}_{\lambda_{max}}|.$$

- Степенен метод:

$$u^{(m)} = \frac{Au^{(m-1)}}{\|Au^{(m-1)}\|} \qquad \lambda^{(m)} = \frac{(h, A^m f)}{(h, A^{m-1} f)} \to \lambda_{max},$$

където вектори $f = \{f_i\}_{i=1}^{n}$ и $h = \{h_i\}_{i=1}^{n}$ са произволни.

- ❑ Прилагаме МКМ за оценяване на матрично-векторни произведения.

ИКТ

2. Пресмятане на екстремални собствени стойности: Резолвентен метод

За оценка на най-малката собствена стойност на матрицата A разглеждаме резолвентна матрица: $R_q = [I - qA]^{-1} \epsilon R^{nxn}$.
Ако $|q\lambda|$<1, R_q се представя чрез биномната теорема

$$R_q^m = [I - qA]^{-m} = \sum_{i=0}^{\infty} q^i C_{i+m-1}^{i} A^i .$$

Съществува връзка между собствените стойности на матриците A и R_q, която е

$$\mu = \frac{1}{1-q\lambda} \begin{cases} q > 0 & \mu_{max} \text{ на } R_q \text{съответства на } \lambda_{max} \text{ на } A \\ q < 0 & \mu_{max} \text{ на } R_q \text{съответства на } \lambda_{min} \text{ на } A \end{cases}$$

и собствените вектори на двете матрици съвпадат.

Проект BG05M2OP001-1.001-0003 „Център за върхови постижения по Информатика и информационни и комуникационни технологии“, финансиран от Оперативна програма „Наука и образование за интелигентен растеж“, съфинансирана от Европейския съюз чрез Европейските структурни и инвестиционни фондове.

2. Пресмятане на екстремални собствени стойности: Резолвентен метод

Степенен метод за резолвентната матрица:

$$\mu^{(m)} = \frac{([I-qA]^{-m}f,h)}{([I-qA]^{-(m-1)}f,h)} \xrightarrow{\quad} m \to \infty \ \mu_{max} = \frac{1}{1-q\lambda}$$

$$\lambda = \frac{1}{q}(1\text{-}\ \frac{1}{\mu^{(m)}}) = \frac{\sum_{i=1}^{\infty} q^{i-1}-1C_{i+m-2}^{i-1}(h,A^i f)}{\sum_{i=0}^{\infty} q^i C_{i+m-1}^{i}(h,A^i f)}.$$

- При q < 0 получаване оценка за λ_{min} на матрицата A
- Прилагаме отново Монте Карло метода за оценяване на матрично-векторни произведения.

Проект BG05M2OP001-1.001-0003 „Център за върхови постижения по Информатика и информационни и комуникационни технологии“, финансиран от Оперативна програма „Наука и образование за интелигентен растеж“, съфинансирана от Европейския съюз чрез Европейските структурни и инвестиционни фондове.

Пресмятане на матрично-векторни произведения с МКМ

Оценяваме скаларното произведение: $(h, A^m f) = h^T A^m f$.

Дефинираме верига на Марков:

$$k_0 \to k_1 \to \cdots \to k_i \to \cdots \ (1 \le k_i \le n)$$

с начална преходна плътност $p = \{p_\alpha\}_{\alpha=1}^{n}$ и матрица на прехода

$P=\{p_{\alpha\beta}\}_{\alpha,\beta=1}^{n}$, където

$$p_\alpha = \begin{cases} \frac{1}{n}, \text{обикновен МК} \\ \frac{|h_\alpha|}{\sum_{\alpha=1}^{n} |h_\alpha|}, \text{п. опт. МК} \end{cases} \quad \text{и} \quad p_{\alpha\beta} = \begin{cases} \frac{1}{n}, \text{обикновен МК} \\ \frac{|a_{\alpha\beta}|}{\sum_{1}^{n} |a_{\alpha\beta}|}, \text{п. опт. МК} \end{cases}$$

Дефнираме сл.в. $\theta = \frac{h_{k_0}}{p_{k_0}} W_m f_{k_m}$, където $W_0 = \frac{h_{k_0}}{p_{k_0}}$ и $W_j = W_{j-1} \frac{a_{k_{j-1}k_j}}{p_{k_{j-1}k_j}}$, $j = \overline{1,m}$, чието математическо очакване е:

$$E[\theta] = h^T A^m f \approx \frac{1}{N} \sum_{l=1}^{N} (\theta)_l$$

ЕВРОПЕЙСКИ СЪЮЗ
ЕВРОПЕЙСКИ ФОНД ЗА РЕГИОНАЛНО РАЗВИТИЕ

3. Модификация на Монте Карло алгоритъма

ОПЕРАТИВНА ПРОГРАМА
НАУКА И ОБРАЗОВАНИЕ ЗА ИНТЕЛИГЕНТЕН РАСТЕЖ

$$|(h, A^m f) - \frac{1}{N}\sum_{s=1}^{N}(\theta^m)_s| \leq \varepsilon$$

- Стохастична грешка (от МКМ) се означава с $R_{m,N}$.

$$0(\sigma(\theta^m)N^{-1/2})$$

- Систематична грешка (от степенния метод) се означава с $R_{m,s}$.

$$0(|\frac{\mu_2}{\mu_1}|^m)$$

- Балансиране на двете грешки

$$R_{m,N} = R_{m,s} = \frac{\varepsilon}{2}$$

Новият алгоритъм комбинира Монте Карло алгоритъма за оценка на екстремалните собствени стойности с алгоритъма за балансиране на грешките.

Проект BG05M2OP001-1.001-0003 „Център за върхови постижения по Информатика и информационни и комуникационни технологии“, финансиран от Оперативна програма „Наука и образование за интелигентен растеж“, съфинансирана от Европейския съюз чрез Европейските структурни и инвестиционни фондове.

4. Числови експерименти

- Изчислителна формула

$$\boldsymbol{\lambda_1 \approx \{\mu_k\}_N := \frac{1}{\sum_{i=1}^{N} h_{\alpha_{m-1}}^{(i)}} \sum_{i=1}^{N} sign(a_{\alpha_{m-1}\alpha_m}^{(i)}) || a_{\alpha_{m-1}}^{(i)} || \, f_{\alpha_m}^{(i)}},$$

където с горният индекс (*i*) се дефинира *i*-та реализация от веригата на Марков, $f_{\alpha_{m-1}}^{(i)}$ е стойността на съответния елемент от вектора *f* след (*m*-1)-я скок в *i*-та верига на Марков, а $||a_{\alpha_{m-1}}^{(i)}||$ е съответната векторна норма на елемента от реда на матрицата *A*, който е последно посетен, използвайки *i* на брой реализации на веригата на Марков след *m-я* на брой скок и *N* на брой реализации.

Algorithm 1 Pseudocode for computing the Power MC method, Preprocessing

1: INPUT: $A \in R^{n\times n}, h, f \in R^n, N$ {Markov chain realisation}, $n, g^{(m)}, \epsilon$
2: COMPUTE: $p_\alpha = \frac{|h_\alpha|}{\sum_{\alpha=1}^{n} |h_\alpha|}; p_{\alpha\beta} = \frac{|a_{\alpha\beta}|}{\sum_{\beta=1}^{n} |a_{\alpha\beta}|}$
3: COMPUTE: $B \leftarrow \frac{A}{g^{(m)}}$
4: COMPUTE: $b_k \leftarrow \sum_{j=1}^{n} |b_{kj}|$
5: COMPUTE: $a \leftarrow \max_{1<k<n}\{row\ \mathrm{B}_k\}$
6: COMPUTE: m numbers of the jumbs for MC, (19)
7: Input: $WN1 = 0, WN2 = 0$

Проект BG05M2OP001-1.001-0003 „Център за върхови постижения по Информатика и информационни и комуникационни технологии“, финансиран от Оперативна програма „Наука и образование за интелигентен растеж“, съфинансирана от Европейския съюз чрез Европейските структурни и инвестиционни фондове.

4. Числови експерименти

Algorithm 2 Pseudocode: Main part

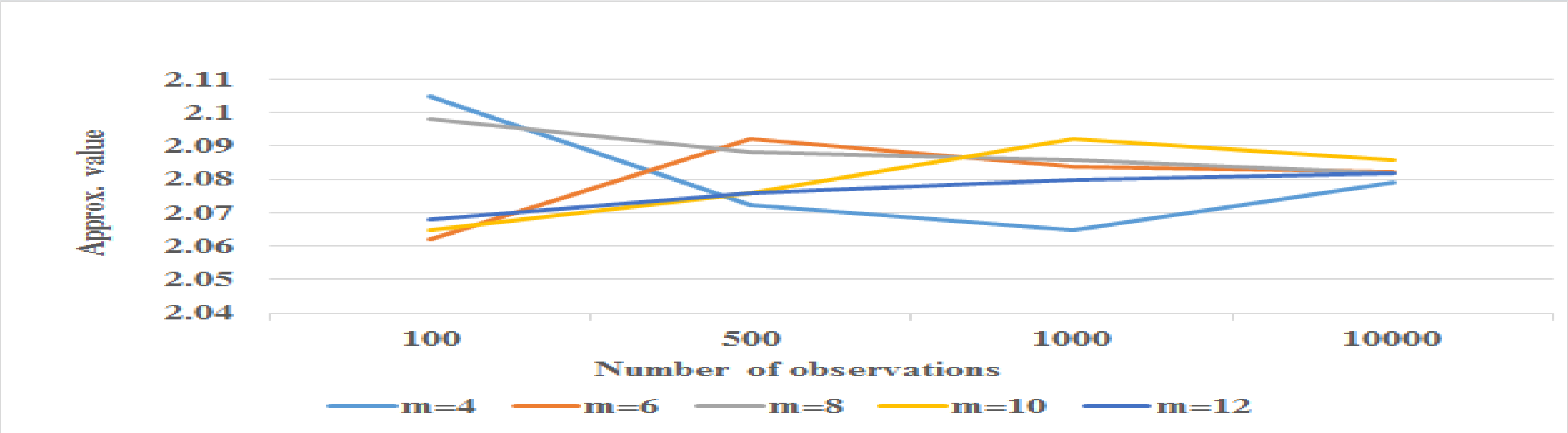
for i=1, N **do**
    Call rand(γ)
    if $\gamma > \sum_{j=1}^{k_0} p_j$ **then**
        $k = k_0$
    end if
    $W = 1, W1 = 1, W2 = 1$
    while $j \neq m$ **do**
        $k = k_0$
        Call rand(γ)
        if $\gamma > \sum_{l=1}^{k_0} P(K, l)$ **then**
            $k = k_0$
        end if
        $j = j + 1$
    end while
end for

Algorithm 3 Pseudocode: Main part

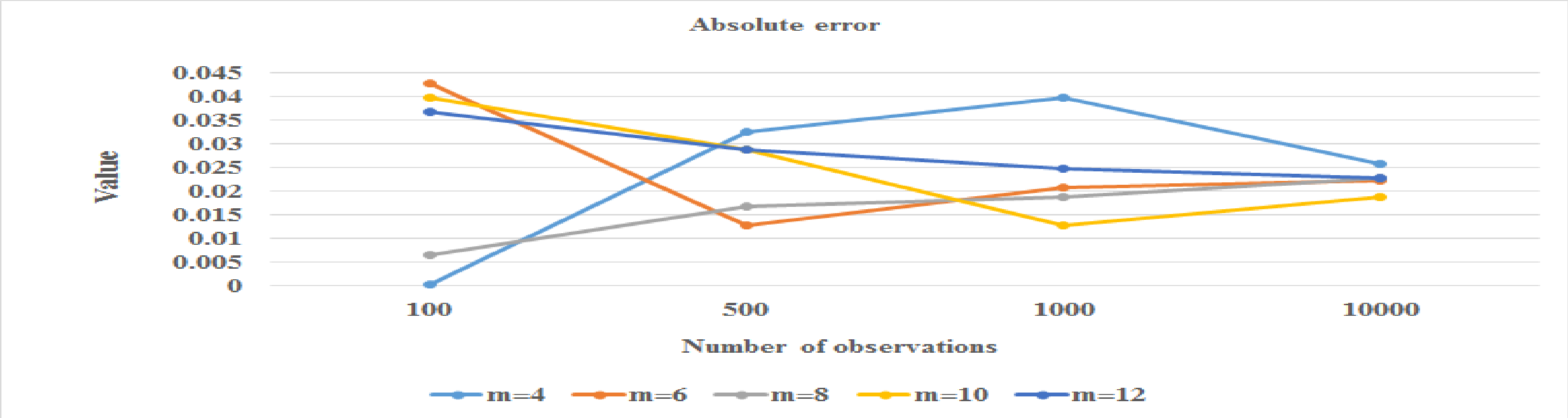
$W2 = f(k_0)$
$k1 = k_0$
Call rand(γ)
if $\gamma > \sum_{r=1}^{k_0} P(k1, r)$ **then**
k=k_0
end if
$W \leftarrow \text{sign } B(k1, k_0) \times b_k$
$W1 \leftarrow W \times f(k_0)$
$WN1 \leftarrow WN1 + W1$
$WN2 \leftarrow WN2 + W2$
END FOR
OUTPUT: $\lambda_1 = \frac{WN1}{WN2} \times g^{(m)}$

Проект BG05M2OP001-1.001-0003 „Център за върхови постижения по Информатика и информационни и комуникационни технологии“, финансиран от Оперативна програма „Наука и образование за интелигентен растеж“, съфинансирана от Европейския съюз чрез Европейските структурни и инвестиционни фондове.

4. Числови експерименти



Фиг. 1 Приближени собствени стойности



Фиг. 2 Абсолютната грешка зависи от броя на опитите и броя на скоковете във веригата на Марков

Проект BG05M2OP001-1.001-0003 „Център за върхови постижения по Информатика и информационни и комуникационни технологии“, финансиран от Оперативна програма „Наука и образование за интелигентен растеж“, съфинансирана от Европейския съюз чрез Европейските структурни и инвестиционни фондове.

5. Заключение и приложения

1) МК методите показват предимства при задачи с големи размерности, за които детерминистичните методи не са изчислително ефективни.
2) МК методите имат добра сходимост за плътни матрици (дисперсията нараства с увеличаването на размера на матрицата и степента й).
3) Балансираната грешка помага за определянето на оптималната дължина на веригата на Марков и за контрола на дисперисията.

❖ Приложения и бъдеща работа

- ✓ Алгоритъмът да се подобри чрез използване на редици с малък дискрепанс.
- ✓ Повече експерименти.
- ✓ Пресмятане на числото на обусловеност при проблеми за възстановяване на изображения.

Проект BG05M2OP001-1.001-0003 „Център за върхови постижения по Информатика и информационни и комуникационни технологии“, финансиран от Оперативна програма „Наука и образование за интелигентен растеж“, съфинансирана от Европейския съюз чрез Европейските структурни и инвестиционни фондове.

ACKNOWLEDGMENTS

This work has been accomplished with the financial support by the Bulgarian Ministry of Education and Science by the Grant No BG05M2OP001-1.001-0003, provided by the SESG Operational Program (2014-2020) and co-financed by the European Union through the European structural and Investment funds.

Q&A

Благодаря за вниманието! ☺