Aula 8

Roteiro

- *Rejection Sampling* (amostragem por rejeição)
- Exemplos
- *Importance Sampling* (amostragem por importância)
- Exemplos
- Generalização

Aula passada

- Gerando amostras de v.a. discretas
- Gerando Geométrica
- Método da transformada inversa
- Gerando Binomial
- Gerando permutações

Rejection Sampling

- Técnica fundamental para geração de amostras aleatórias
  - usada em Markov Chain Monte Carlo (veremos depois)
- **Ideia:** usar distribuição simples para gerar amostras de outra distribuição mais complicada
- Seja p_x e q_x duas distribuições de probabilidade para uma v.a. X
  - $p_x = P_p[X = x]$, $q_x = P_q[X = x]$
- Assuma que $q_x <= c\ p_x$ para alguma constante c e todo x
  - ou seja, $c\ p_x$ é uma *função envelope* para q_x
- Supor que sabemos gerar amostras para X a partir de p_X
- Como gerar amostras para X com distribuição q_X a partir das amostras acima?

Rejection Sampling

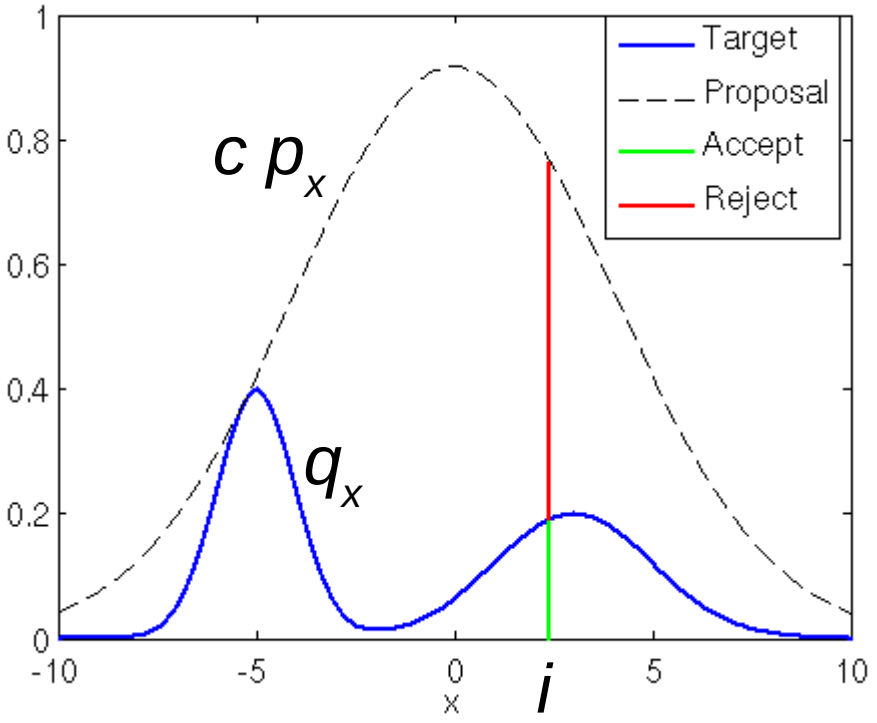
- Algoritmo (proposto por von Neumann)

  (1) Gerar valor para *i* a partir de p_x

  (2) Gerar *u* Uniforme(0, $c\ p_i$) contínua, usando o *i* gerado

  (3) Se $u < q_i$, retorna *i*, caso contrário vai para (1)

- Graficamente



- Algoritmo pode *rejeitar* amostra de X várias vezes
  - *rejection sampling*
- Aceita com probabilidade dada pela razão entre de q_x *e* $c\ p_x$

Rejection Sampling Funciona

- Mostrar que algoritmo gera amostra *i* com probabilidade q_i
  - $P[Y=i]=P[X=i|aceitar]$, por equivalência de eventos
- Considere um valor *i* e o evento *aceitar*
  - $P[X=i,aceitar]=P[X=i]P[aceitar|X=i]=p_i q_i/(c\,p_i)=q_i/c$
- Probabilidade de aceitar (por prob. Total)
  - $P[aceitar]=\sum_i P[X=i,aceitar]=\sum_i \frac{q_i}{c}=\frac{1}{c}$
- Ao final de cada rodada, algoritmo aceita com prob. 1/c
- Temos então
  - $P[X=i|aceitar]=\frac{P[X=i,aceitar]}{P[aceitar]}=q_i$

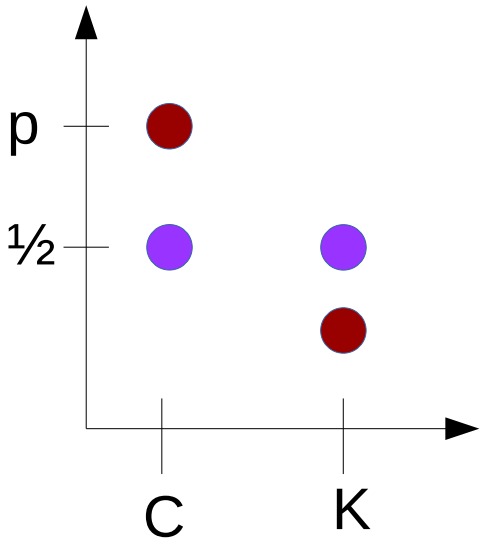
Rodadas de *Rejection Sampling*

- A cada rodada, algoritmo aceita com prob. 1/c
- Número de rodadas até aceitar é aleatório. Distribuição?
  - Geométrica com parâmetro 1/c
  - valor esperado = c
  - complexidade de caso médio para cada amostra
- Escolha do valor para c é muito importante
  - menor valor tal que $q_x <= c\ p_x$ para todo x
- Valor depende da “distância” entre q_x e p_x
  - se muito diferentes, pode demandar c muito grande

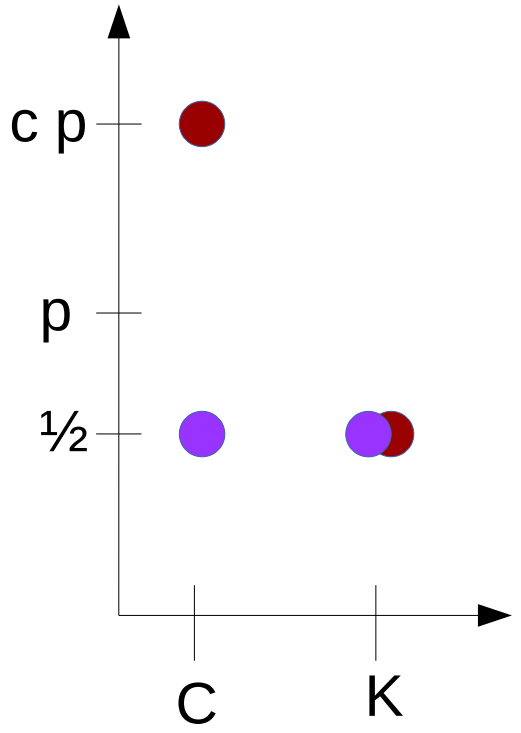
Técnica funciona também com v.a. contínua

Exemplo

- Dado moeda enviesada, cara com prob p > ½
- Como gerar moeda sem viés?



- Moeda enviesada
- Moeda honesta
  - Encontrar constante *c* tal que $q_x <= c\ p_x$
  - $c(1-p) = ½ \rightarrow c = 1/(2(1-p))$



(1) Gerar valor para *i* = {C, K} a partir de p_x *(moeda enviesada)*

(2) Gerar *u* uniforme(0, $c\ p_i$) contínua, usando o *i* gerado

(3) Se $u < q_i$, retorna *i*, caso contrário vai para (1)

Exemplo 2

- Gerar amostras da v.a. *Y* contínua com densidade $f_Y(x) = 20x(1-x)^3$, $0<=x<=1$
- Usando método da rejeição, qual distribuição proponente?
  - uniforme[0,1], $g_X(x) = 1$, $0<=x<=1$
- Determinar c tal que f(x) <= c g(x) para 0<=x<=1
- **Ideia:** encontrar máximo de f(x)/g(x)
  - derivar, igualar a zero, resolver para x, encontrar valor
  - máximo em x = ¼, c = 135/64

(1) Gerar valor para *x* a partir de *g(x)* (uniforme[0,1])

(2) Gerar *u* uniforme(0, *c*) contínua (note que *g(x)* = 1)

(3) Se *u* < *f*(x), retorna *x*, caso contrário vai para (1)

Cenário Problemático

- Algoritmo de Monte Carlo é estimador universal
  - média amostral converge para valor esperado
- **Problema:** variância do estimador pode ser muito alta!
  - muitas, muitas amostras serão necessárias
- Exemplo

$$G_N = \sum_{i=1}^{N} g(i) \qquad M_n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} g(X_i) \quad , X_i \sim \text{Unif}(1,N)$$

- $g(i)$ é desprezível (ou zero) para muitos valores de i, e grande para poucos valores
- Teremos que gerar muitas amostras para “acertar” os valores importantes de $g(i)$
- Ideias para atacar o problema?

Importance Sampling

- Amostrar com probabilidade diferente da original
  - uniforme no exemplo anterior
- Amostrar com maior probabilidade região mais importante para o problema em questão
  - *importance sampling*
- Compensar pelo aumento desta probabilidade
- Usar método de Monte Carlo em problema reformulado
  - com novas funções de distribuição
- **Objetivo:** reduzir a variância do estimador
  - isto nem sempre ocorre, pois se exagerar demais vai ter que compensar com mais amostras
  - técnica tem que ser usada com cuidado

Importance Sampling

- Seja *X* uma v.a. uniforme(1,N)

$$E[g(X)] = \sum_{i=1}^{N} P[X=i]\, g(i) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} g(i) = \frac{G_N}{N}$$

- Seja *Y* v.a. com distribuição dada por h(i) > 0 para todo i

$$E_h\left[\frac{g(Y)}{h(Y)}\right] = \sum_{i=1}^{N} \frac{g(i)}{h(i)} h(i) = \sum_{i=1}^{N} g(i) = G_N$$

- Podemos estimar G_N estimando o valor esperado através da média amostral
  - Monte Carlo aplicado a outro valor esperado
- Usar *h* para reduzir variância!

Importance Sampling

- Seja Y_i uma sequência iid de v.a. com distribuiição $h(i)$

$$M_n = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\frac{g(Y_i)}{h(Y_i)}$$

- Média e variância do novo estimador

$$E_h[M_n] = E_h\left[\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\frac{g(Y_i)}{h(Y_i)}\right] = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}E_h\left[\frac{g(Y_i)}{h(Y_i)}\right] = G_N$$

$$Var_h[M_n] = \frac{\sigma^2_{g/h}}{n}$$ ← Variância da v.a. g(Y)/h(Y)

- M_n converge para $E_h[\, g(Y) / h(Y)\,] = G_N$
- Variância do estimador depende da variância de g(Y)/h(Y)

Variância da Nova v.a.

- Temos g(Y)/h(Y), onde *Y* possui distribuição *h*, com $h_i > 0$ para todo *i*

$$\sigma^2_{g/h} = Var_h\left[\frac{g(Y)}{h(Y)}\right] = E_h\left[\left(\frac{g(Y)}{h(Y)}\right)^2\right] - E_h\left[\frac{g(Y)}{h(Y)}\right]^2$$

$= G_N$

- Segundo momento

$$E_h\left[\left(\frac{g(Y)}{h(Y)}\right)^2\right] = \sum_{i=1}^{N}\left(\frac{g(i)}{h(i)}\right)^2 h(i) = \sum_{i=1}^{N}\frac{g(i)^2}{h(i)}$$

- E_h[g(Y)/h(Y)] não depende de *h*, mas segundo momento depende
  - reduzir variância de M_n é reduzir seu segundo momento

Exemplo

- Dado *N*, calcular $G_N = \sum_{i=1}^{N} g(i)$ onde $g(i) = i \log i$
- Seja Y_i seq iid de v.a. com distribuição $h(i) > 0$ para todo i
- **Opção 1**: $h(i) = 1/N$ para todo i, ou seja, h(i) é uniforme(1,N)
  - o que temos feito até agora
- Segundo momento?

$$\sum_{i=1}^{N} \frac{g(i)^2}{h(i)} = N \sum_{i=1}^{N} g(i)^2 = N \sum_{i=1}^{N} i^2 \log^2 i$$

- Como reduzir segundo momento?
- **Ideia:** escolher h(i) proporcionalmente a g(i)
  - maiores valores tem maior probabilidade (com cuidado)

Exemplo

- **Opção 2**: h(i) = i / K_2 , ou seja linearmente proporcional a *i*
  - onde K_2 = 1+2+...+N = N(N+1)/2
- Segundo momento?

$$\sum_{i=1}^{N} \frac{g(i)^2}{h(i)} = K_2 \sum_{i=1}^{N} \frac{g(i)^2}{i} = K_2 \sum_{i=1}^{N} i \log^2 i$$

- **Opção 3**: h(i) = i^3 / K_3 , ou seja cúbica em *i*
  - onde K_3 = $1^3+2^3+...+N^3$ = $N^2(1 + N)^2/4$

$$\sum_{i=1}^{N} \frac{g(i)^2}{h(i)} = K_3 \sum_{i=1}^{N} \frac{g(i)^2}{i^3} = K_3 \sum_{i=1}^{N} \frac{\log^2 i}{i}$$

Exemplo

- Qual das três opções é melhor?
- A que tiver menor segundo momento
- Com N=1000, vamos calcular!

Opção 1

$$E_h\left[\left(\frac{g(Y)}{h(Y)}\right)^2\right] = 1.44\,x\,10^{13}$$

Opção 2

$$E_h\left[\left(\frac{g(Y)}{h(Y)}\right)^2\right] = 1.03\,x\,10^{13}$$

Opção 3

$$E_h\left[\left(\frac{g(Y)}{h(Y)}\right)^2\right] = 2.75\,x\,10^{13}$$

- Melhor estimador é a **opção 2** (possui menor variância)
  - menos amostras para um mesmo erro
  - erro menor para um mesmo número de amostras
- Qual seria a melhor h(i) possível?

O Melhor *h*(*i*) Possível

- h(i) que induz variância zero é o melhor possível!

$$\sigma^2_{g/h} = E_h\left[\left(\frac{g(Y)}{h(Y)} - \mu_{g/h}\right)^2\right] = \sum_{i=1}^{N}\left(\frac{g(i)}{h(i)} - \mu_{g/h}\right)^2 h(i)$$

E[g(Y)/h(Y)] = G_N

- Se $h(i) = \frac{g(i)}{\mu_{g/h}}$ para todo *i*, então variância é zero!

- A princípio, podemos escolher qualquer *h*(*i*), então qual o problema então?
- Não temos $\mu_{g/h}$ que é justamente o que queremos estimar!
- **Ideia**: tentar aproximar esta relação com heurísticas

Generalização

- Calcular **valor esperado** da função *g(X)*, onde *X* tem distribuição dada por *f*

$$\mu_f = E_f[g(X)] = \sum_{i=1}^{N} g(i) f(i) \quad \longleftarrow \quad f(i) = P[X = i]$$

- Três possíveis complicações
  - *N* pode ser muito grande (ex. 10^{30}); usar Monte Carlo
  - Gerar amostras de X pode ser computacionalmente custoso
  - Variância do estimador por ser muito alta
- **Solução:** usar outra distribuição *h* para gerar amostras e definir outra média amostral
- Seja *h* distribuição para *X*, tal que *f*(*i*) > 0 então *h*(*i*) > 0

$$\mu_f = \sum_{i=1}^{N} \frac{g(i) f(i)}{h(i)} h(i) = E_h\left[\frac{g(X) f(X)}{h(X)}\right]$$

Estimador com Importance Sampling

- Temos dois estimadores de Monte Carlo para μ_f
- Gerar sequência de amostras X_i com distribuição f

$$M_n^f = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} g(X_i) \longrightarrow Var_f[M_n^f] = \frac{Var_f[g(X)]}{n}$$

- Gerar sequência de amostras X_i com distribuição h

$$M_n^h = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} \frac{g(X_i) f(X_i)}{h(X_i)} \longrightarrow Var_h[M_n^h] = \frac{1}{n} Var_h\left[\frac{g(X) f(X)}{h(X)}\right]$$

- Podemos escolher qualquer distribuição h para M_n^h
  - h que seja computacionalmente eficiente (mais amostras)
  - h que induza uma menor variância do estimador

Algoritmo

- Monte Carlo para estimar $\mu_f = E_f[g(X)] = E_h[g(X)f(X)/h(X)]$

  S = 0

  para *i* = 1,…,n

    Gerar amostra *x* com distribuição h

    S = S + g(x)f(x)/h(x)

  retorna *S*/*n*

- Algoritmo calcula média amostral usando amostras de *h* e não de *f*
- Se *h* for bem escolhida, variância do estimador pode ser muito menor que estimador usando f
  - principal razão para utilizar Importance Sampling

Generalização 2

- Tudo vale para o caso de v.a. contínua
  - trocar distribuição por densidade, somatório por integral
- Muitas aplicações no caso contínuo
  - *Monte Carlo Ray Tracing* não funciona sem *Importance Sampling*
  - Espaço de integração é muito grande para uniforme dar bons resultados
  - Muitas heurísticas são usadas nesta aplicação
- **Outro uso:** estimar eventos de baixa probabilidade
  - E[I(evento A)] = p_A , onde A é evento de interesse
  - Mesma ideia, reduzir variância do estimador, aumentar amostragem do evento de interesse (*evento raro*)