УДК 519.676 ; УДК 519.245

Вероятностная оценка точности определения экстремума функции методом Монте-Карло

Д.В. Рубан[1,2], Е.А. Цветков[2]

[1]Московский физико-технический институт (государственный университет)

[2]Центральный научно-исследовательский институт химии и механики

Ненаправленный случайный поиск (метод Монте-Карло) заключается в многократном случайном выборе допустимых вариантов решений и запоминании наилучшего из них[1].

Пусть требуется найти максимум функции *f(x)* на ограниченном множестве $X \in R^d$. При этом функция удовлетворяет условию Липшица на множестве X

$$\exists L : \forall x_1, x_2 \in X \rightarrow \left| f(x_1) - f(x_2) \right| \le L \cdot \left| x_1 - x_2 \right| \;. \tag{1}$$

Тогда для поиска экстремума можно применить следующий алгоритм:

1. $x_i = \xi_i, i = \overline{1, N}$, где ξ_i - независимая реализация случайной величины с равномерным распределением на X .
2. Полагаем $M = max\left\{ f\left(x_i\right) \right\}$.
3. В качестве приближения к точке истинного минимума x^* выбираем точку с номером *m*, в которой $f\left(x_m\right) = \max\left(f\left(x_1\right), f\left(x_2\right), ..., f\left(x_n\right) \right)$.
4. Разбиваем множество X на m d -мерных кубов $a_k, k = \overline{1, m}$ со стороной δ .
5. Тогда с некоторой вероятностью P, больше или равной вероятности события, что в каждый куб a_k попала хотя бы одна случайная точка $\forall a_k \exists \xi_i : \xi_i \in a_k$, верна следующая оценка:
$$\left| f\left(x_m\right) - f\left(x^*\right) \right| \le L \cdot \left| x_m - x^* \right| \le L \cdot 2\delta\sqrt{d} \tag{2}$$

При разбиении множества X на m кубов и требовании на попадание в каждый куб $a_k, k = \overline{1, m}$ хотя бы по одной случайной точке, можно утверждать что расстояние между двумя любыми точками не более чем $2\delta\sqrt{d}$ и, следовательно, из условия Липшица (1) следует оценка (2).

Однако, так как x_i выбираются случайным образом, оценка верна лишь с некоторой вероятностью P, которая ограничена снизу вероятностью события, что в каждый куб a_k

попала хотя бы одна точка. Таким образом данная задача сводится к известной классической задаче о размещении N неразличимых дробинок по m ящикам. Данная задача была широко исследована в работах [3,4]

Согласно 1 вероятность события, что после случайного размещения N дробинок по m ящикам, если вероятность попадания дробинки в каждый ящик одинакова и равна $\frac{1}{m}$, нет ни одного пустого ящика, задается формулой [2]

$$P(N,m) = \sum_{\alpha=0}^{m} (-1)^{\alpha} \binom{N}{\alpha} \left(1 - \frac{\alpha}{m}\right)^{N}. \tag{2}$$

Формула (2) неудобна для вычислений, но для больших значений N и m справедливо приближение [3]

$$P(N,m) \geq 1 - e^{-\frac{N}{m}}. \tag{3}$$

При этом, согласно [4],

$$\rho\left(\frac{N}{m}\right) = \left| P(N,m) - e^{-\frac{N}{m}} \right| = \sqrt{\frac{2}{\pi e}} \frac{N}{m} e^{-\frac{N}{m}}.$$

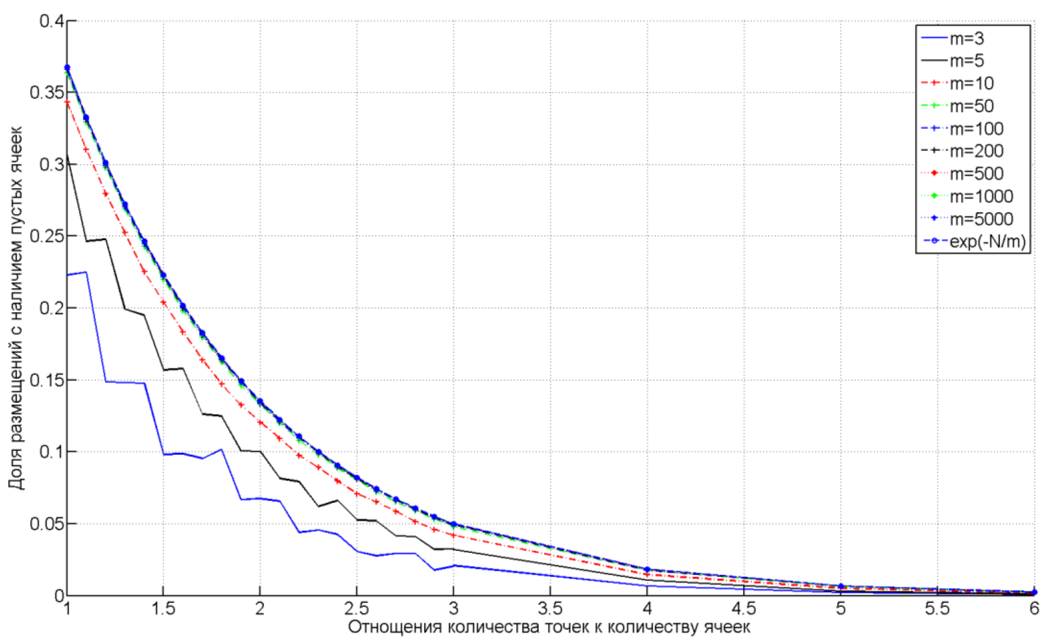

Рис. 1 Доля исходов размещений N точек по m ячейкам с наличием хотя бы одной пустой ячейки при фиксированном m и различном отношении $\frac{N}{m}$.

На Рис. 1 представлен результат прямого статистического моделирования, заключавшегося в многократном распределении N случайных точек по m ячейкам и подсчетом доли исходов в которых присутствовала хотя бы одна пустая ячейка. Усреднение проводилось по 10^5 исходам для каждого набора $(m, \frac{N}{m})$. Как видно из Рис.1, при больших значениях m вероятность появления пустой ячейки хорошо аппроксимируется функцией $e^{-\frac{N}{m}}$.

Пусть требуется оценить максимум с заранее заданной точностью ε на множестве $X \in R^d : X = X_1 \times \ldots \times X_d = [a_1, \mathrm{b}_1] \times \ldots \times [a_d, \mathrm{b}_d]$, то есть определить, какие необходимо подобрать параметры, чтобы получить оценку $\left| f\left(x_m\right) - f\left(x^*\right) \right| \le \varepsilon$ с заданной вероятностью γ. Из вышесказанного следует, что

$$\frac{N}{m} = -\ln \gamma$$

$$N = -m \ln \gamma$$

$$\varepsilon = L \cdot 2\delta\sqrt{d}$$

$$m = \frac{[a_1, \mathrm{b}_1] \times \ldots \times [a_d, \mathrm{b}_d]}{\delta^d} = [a_1, \mathrm{b}_1] \times \ldots \times [a_d, \mathrm{b}_d] \cdot \left(\frac{2L\sqrt{d}}{\varepsilon} \right)^d$$

$$N = -[a_1, \mathrm{b}_1] \times \ldots \times [a_d, \mathrm{b}_d] \cdot \left(\frac{2L\sqrt{d}}{\varepsilon} \right)^d \ln(1-\gamma)$$

Литература

1. *Жиглявский А.А.* Математическая теория глобального случайного поиска. – Л.:Изд-во Ленингр. ун-та, – 1985. – 296 с.
2. *Феллер В.* Введение в теорию вероятностей и ее приложения. Пер.с англ./ Предисл. А.Н. Колмогорова. Изд. 2-е. – М.:Книжный дом "ЛИБРОКОМ". – 2010. – Т.1. – 528 с.
3. *Колчин В.Ф. ,Чистяков В. П.* Комбинаторные задачи теории вероятностей // Итоги науки и техн. Сер. Теор. вероятн. Мат. стат. Теор. кибернет., М.: ВИНИТИ. – 1974. – Т.11. – 5–45.

4. *Колчин В. Ф.*, Скорость приближения к предельным распределениям в классической задаче о дробинках // Теория вероятностей и её применения, – Т.11. № 1. – 1966. – 144—156.