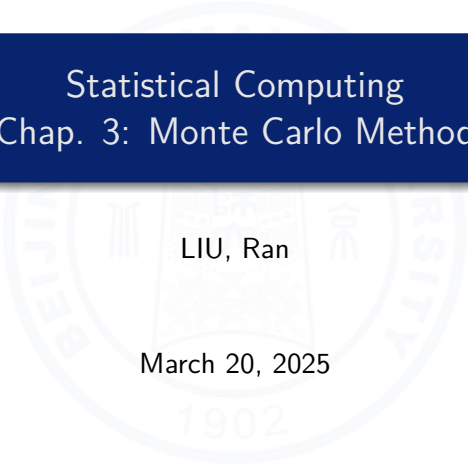




Statistical Computing

Chap. 3: Monte Carlo Method

LIU, Ran

March 20, 2025

LIU, Ran - Department of Statistics @BNU

Summary

Introduction

Transformation Sampling and Normalizing Flow

Inverse Transform Sampling

Accept-Reject Sampling

Importance Sampling

LIU, Ran - Department of Statistics @BNU

蒙特卡洛方法的诞生

20 世纪 40 年代，在科学家诺伊曼、乌拉姆和梅特罗波利斯于洛斯阿拉莫斯国家实验室 (Los Alamos National Laboratory) 为核武器计划工作时 (中子的运动)，发明了蒙特卡洛方法。(据传，乌拉姆的叔叔经常在摩纳哥的蒙特卡洛赌场赌博，所以该方法以蒙特卡洛命名。)



John von Neumann



Stanisław Marcin Ulam



Nicholas Metropolis

概述

为了解决某确定性问题，把它变成一个概率模型的求解问题，然后产生符合模型的大量随机数，对产生的随机数进行分析从而求解问题，这种方法叫做随机模拟方法，又称为蒙特卡洛 (Monte Carlo) 方法。

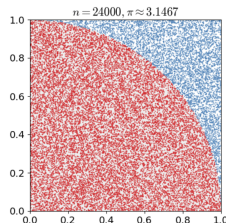
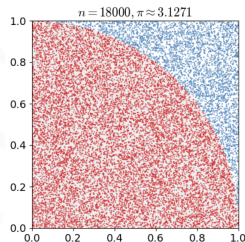
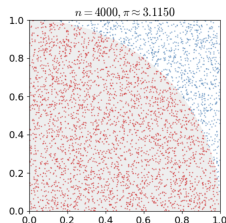
随机数定义：设 X 是具有分布函数 $F(x)$ 的随机变量，从分布 $F(x)$ 中随机抽样得到的序列 $\{x_i, i = 1, 2, \dots\}$ 称为该分布的随机数序列， x_i 称为分布 $F(x)$ 的随机数。

Liu, Ran - Department of Statistics @BNU

例子 1: 估算 π

如果向正方形 $D = \{(x, y) : x \in [0, 1], y \in [0, 1]\}$ 内随机等可能投点, 落入四分之一圆 $C = \{(x, y) : x^2 + y^2 \leq 1, x > 0, y > 0\}$ 的概率为面积之比 $p = \frac{\pi}{4}$ 。如果独立重复地投了 n 个点, 落入 C 中的点的个数为 ξ , 则我们有:

$$\frac{\xi}{n} \approx \frac{\pi}{4}, \quad \pi \approx \hat{\pi} = \frac{4\xi}{n}.$$



随机模拟方法会引入所谓随机模拟误差，在这个例子中落入 C 中的点的个数 ξ 服从 $\text{Binomial}(n, \frac{\pi}{4})$ 分布，则

$$\text{Var}(\hat{\pi}) = \frac{\pi(4 - \pi)}{n}.$$

由中心极限定理， $\hat{\pi}$ 近似服从 $N\left(\pi, \frac{\pi(4-\pi)}{n}\right)$ 分布，所以随机模拟误差的幅度大约在 $\pm 2\sqrt{\frac{\pi(4-\pi)}{16n}}$ (随机模拟误差 95% 以上落入此区间)。

LIU, Ran - Department of Statistics @BNU

例子 2: 求积分

为了计算 $Q = \int_a^b h(x)dx$, 我们将他转化为求期望。取 $U \sim U(a, b)$, 则

$$Q = (b - a) \int_a^b h(u) \frac{1}{b - a} du = (b - a) E[h(U)].$$

若取 $\{U_i, i = 1, \dots, N\}$ 独立同 $U(a, b)$ 分布, 并设 $Y_i = h(U_i), i = 1, 2, \dots, N$ 是 iid 随机变量列, 由强大数律,

$$\bar{Y} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N h(U_i) \rightarrow Eh(U) = \frac{Q}{b - a}, \quad \text{a.s. } (N \rightarrow \infty).$$

于是

$$\hat{Q} = (b - a) \bar{Y} = \frac{b - a}{N} \sum_{i=1}^N h(U_i).$$

由中心极限定理有

$$\sqrt{N}(\hat{Q} - Q) \xrightarrow{d} N\left(0, (b-a)^2 \text{Var}(h(U))\right),$$

$$\text{Var}[h(U)] = \int_a^b [h(u) - Eh(U)]^2 \frac{1}{b-a} du.$$

$\text{Var}[h(U)]$ 可以用模拟样本 $\{Y_i = h(U_i)\}$ 估计为

$$\text{Var}(h(U)) \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (Y_i - \bar{Y})^2.$$

LIU, Ran - Department of Statistics @BNU

使用步骤

- ① 将实际问题转化为求期望，并定义要采样的随机变量。

$$\int h(x)dx = \int \frac{h(x)}{p(x)}p(x)dx = E_{x \sim p(x)}\left(\frac{h(x)}{p(x)}\right)$$

- ② 计算机模拟采样过程（伪随机），处理产生的随机数得到期望。

蒙特卡洛方法的理论基础是大数定律。样本数量越多，则随机数的平均值就越接近期望，也就是要计算的真实值。

LIU, Ran - Department of Statistics @BNU

Summary

Introduction

Transformation Sampling and Normalizing Flow

Inverse Transform Sampling

Accept-Reject Sampling

Importance Sampling

LIU, Ran - Department of Statistics @BNU

变换采样 (Transformation Sampling)

如果随机变量 η 不容易抽样，但是存在另一个容易抽样的随机变量 ξ 和随机变量 η 间具有一一对应关系，即 $\eta = h(\xi)$ 或 $\xi = h^{-1}(\eta)$ ，同分布。

那么可以先产生随机变量 ξ ，再由函数关系 $h(\cdot)$ 得到随机变量 η ，这种产生随机数的方法称为变换抽样法。

这种方法在 normalizing flow（归一化流）中得到了广泛的应用，其通过一系列可逆变换学习复杂分布。

Liu, Ran - Department of Statistics @BNU

定理

设随机变量 ξ 具有概率密度函数 $f(x)$ (易采样的随机变量), 另有一函数 $h(\cdot)$ 严格单调, 其反函数记为 $h^{-1}(\cdot)$ 且导函数存在, 则 $\eta = h(\xi)$ 是随机变量 ξ (难以采样的随机变量) 的函数, 其概率密度函数为:

$$p(z) = f(h^{-1}(z)) \cdot \left| \frac{d}{dz} h^{-1}(z) \right|. \quad (1)$$

证明: 先求随机变量 η 的分布函数:

$$P(\eta \leq z) = P(h(\xi) \leq z) = P(\xi \leq h^{-1}(z)) = \int_{-\infty}^{h^{-1}(z)} f(x) dx.$$

令 $y = h(\xi)$, 则 $x = h^{-1}(y)$, 两边求导得 $dx = \left(\frac{d}{dy} h^{-1}(y) \right) \cdot dy$, 代入积分表达式:

$$P(\eta \leq z) = \int_{-\infty}^z f(h^{-1}(y)) \cdot \left| \frac{d}{dy} h^{-1}(y) \right| dy.$$

对 z 求导, 得到 η 的概率密度函数:

$$p(z) = f(h^{-1}(z)) \cdot \left| \frac{d}{dz} h^{-1}(z) \right|.$$

多元的情况：如果 $z = h_\theta(x)$ 是一个可逆变换，其逆映射为 $x = h_\theta^{-1}(z)$ ，则 z 的概率密度由 Jacobian 矩阵的行列式计算：

$$p_\eta(z) = p_\xi(x) \left| \det \frac{dh_\theta^{-1}(z)}{dz} \right|$$

等价地，我们也可以用正向变换 $z = h_\theta(x)$ 来表示：

$$p_\eta(z) = p_\xi(x) \left| \det \frac{dh_\theta(x)}{dx} \right|^{-1}$$

其中：

- $p_\xi(x)$ 是已知的简单分布（如标准正态）。
- $\frac{dh_\theta(x)}{dx}$ 是变换 h_θ 的 Jacobian 矩阵。
- 这个公式允许我们建模复杂分布的概率密度，可用于最大似然训练。

在 Normalizing Flow 中，我们使用一系列可逆变换 h_k 逐步将一个简单分布映射到复杂分布：

$$z = h_K \circ h_{K-1} \circ \cdots \circ h_1(x)$$

其中：

- $x \sim p_\xi(x)$ 是来自简单分布（如标准正态）的样本；
- $z \sim p_\eta(z)$ 是目标复杂分布；
- 每个 h_k 都是一个可逆变换，使得整体变换仍然可逆。

通过变换公式递归计算密度：

$$p_\eta(z) = p_\xi(x) \prod_{k=1}^K \left| \det \frac{dh_k}{dz_{k-1}} \right|^{-1}$$

训练 Normalizing Flow 需要最大化观测数据的对数似然。

- ① 目标：最大化对数似然给定数据 $\{z^{(i)}\}_{i=1}^N$ ，优化目标为：

$$\mathcal{L}(\theta) = \sum_{i=1}^N \log p_{\eta}(z^{(i)})$$

结合变换公式展开：

$$\mathcal{L}(\theta) = \sum_{i=1}^N \left[\log p_{\xi}(x^{(i)}) - \sum_{k=1}^K \log \left| \det \frac{dh_k}{dz_{k-1}} \right| \right]$$

② 训练方法

- 由于流模型可逆，我们可以从数据集中采样 z ，通过 h_{θ}^{-1} 计算 x ，并优化目标函数，其中 p_{ξ} 已知。
- 训练时，我们对变换 h_{θ} 进行参数化，并使用梯度下降优化。

简单实例

用变换抽样法产生分布为 $N(\mu, \sigma^2)$ 的随机数。

解 若 $\xi \sim N(0, 1)$, 则 $\eta = \mu + \sigma \cdot \xi \sim N(\mu, \sigma^2)$ 。因此, 随机变量 η 与 ξ 间的函数关系为

$$\eta = h(\xi) = \mu + \sigma \cdot \xi. \quad (2)$$

因此, 只需产生标准正态分布的随机数, 代入式 (2) 可得正态分布 $N(\mu, \sigma^2)$ 的随机数。

VAE 和 DDPM 中用了这种技巧, 使每次采样只需要标准正态分布, 并且使梯度下降能反向传递。

Liu, Ran - Department of Statistics @BNU

Summary

Introduction

Transformation Sampling and Normalizing Flow

Inverse Transform Sampling

Accept-Reject Sampling

Importance Sampling

LIU, Ran - Department of Statistics @BNU

逆变换采样

假设 X 为一个连续随机变量，其累积分布函数为 F_X 。此时，可证明随机变量 $Y = F_X(X)$ 服从区间 $[0,1]$ 上的均匀分布。

逆变换采样即是将该过程反过来进行。我们有以下定理：

定理

设连续型随机变量 η 的分布函数 $F(x)$ 是连续且严格单调上升的分布函数，其反函数存在且记为 $F^{-1}(x)$ 。则有

- (1) 随机变量 $F(\eta)$ 服从 $(0,1)$ 上的均匀分布，即 $F(\eta) \sim U(0,1)$ ；
- (2) 对于随机变量 $U \sim U(0,1)$ ， $F^{-1}(U)$ 的分布函数为 $F(x)$ 。(逆变换采样)

Liu, Ran - Department of Statistics @BNU

证明

① 设随机变量 $F(\eta)$ 的分布函数为 $G(u) = P(F(\eta) \leq u)$ 。

① 当 $u \in [0, 1]$ 时, $G(u) = P\{\eta \leq F^{-1}(u)\} = F(F^{-1}(u)) = u$;

② 当 $u \in (-\infty, 0)$ 时, $G(u) = P\{F(\eta) \leq u\} = 0$;

③ 当 $u \in (1, \infty)$ 时, $G(u) = P\{F(\eta) \leq u\} = 1$ 。

因此, 随机变量 $F(\eta)$ 服从 $U(0, 1)$ 。

② 设随机变量 $F^{-1}(U)$ 的分布函数为 $H(x)$, 则

$$H(x) = P\{F^{-1}(U) \leq x\} = P\{U \leq F(x)\}.$$

因为 $U \sim U(0, 1)$, 对任意 $F(x) \in [0, 1]$, 有

$$P\{U \leq F(x)\} = F(x).$$

因此, $F^{-1}(U)$ 的分布函数为 $F(x)$ 。

采样步骤

当随机变量 η 的分布函数 $F(x)$ 的反函数存在，且容易计算时，可通过产生均匀分布的随机数来产生 η 的随机数序列 $\{\eta_i, i = 1, 2, \dots\}$ 。这种产生非均匀分布随机数的方法称为逆变换法或反函数法。

具体步骤

- ① 产生 $U(0, 1)$ 的随机数序列 $\{u_i, i = 1, 2, \dots\}$;
- ② η 的随机数序列为

$$\eta_i = F^{-1}(u_i), i = 1, 2, \dots \quad (3)$$

公式(3)称为逆变换法的抽样公式。

Liu, Ran - Department of Statistics @BNU

例

产生概率密度函数为 $f(x)$ 的随机数，其中

$$f(x) = \begin{cases} \frac{x}{\sigma^2} e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}, & x > 0; \\ 0, & x \leq 0. \end{cases}$$

步骤：

① 求分布函数

$$F(x) = \int_0^x f(z) dz.$$

② 采样随机数 $U \sim U(0, 1)$ ，则 $F^{-1}(U)$ 即为我们想要的分布的随机数。

解 设随机变量 η 具有概率密度函数 $f(x)$, 其概率分布函数为

$$F(x) = \begin{cases} 1 - e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}, & x > 0; \\ 0, & x \leq 0. \end{cases}$$

其反函数为

$$F^{-1}(u) = \sqrt{-2\sigma^2 \log(1-u)}, \quad 0 < u < 1.$$

首先产生均匀分布随机数 $\{u_i, i = 1, 2, \dots\}$, 随机变量 η 的随机数可根据下式产生:

$$\eta_i = \sqrt{-2\sigma^2 \log(1-u_i)}, \quad i = 1, 2, \dots$$

Liu, Ran - Department of Statistics @BNU

例

产生分布函数为 $F(x)$ 的随机数 η , 其中

$$F(x) = \frac{x^2 + x}{2}, \quad 0 \leq x \leq 1.$$

解 根据 $F(x)$ 的定义知, 利用二次方程的求根公式得到其反函数为

$$F^{-1}(u) = \frac{-1 + \sqrt{(1 + 8u)}}{2}, \quad 0 < u < 1.$$

根据定理, 随机数 η_i 的抽样公式为

$$\eta_i = \frac{-1 + \sqrt{(1 + 8u_i)}}{2}, \quad i = 1, 2, \dots$$

Liu, Ran - Department of Statistics @BNU

逆变换法是一个常用的方法，对于连续随机变量，要应用逆变换法，首先必须求得其分布函数的反函数 $F^{-1}(x)$ 。

但是有些分布函数的反函数不能用初等函数表出，如正态分布和 Gamma 分布等，故随机数抽样公式也不能精确表出。

LIU, Ran - Department of Statistics @BNU

Summary

Introduction

Transformation Sampling and Normalizing Flow

Inverse Transform Sampling

Accept-Reject Sampling

Importance Sampling

LIU, Ran - Department of Statistics @BNU

接受拒绝采样 (舍选抽样)

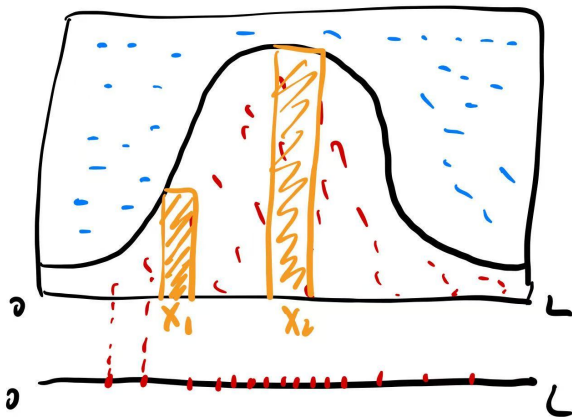
拒绝抽样是基于以下观察而提出的：

- ① 要在一维中抽样一个随机变量，可以对二维笛卡尔图进行随机抽样。
- ② 将样本保留在其密度函数图形下的区域中。
- ③ 密度函数图形以外的区域舍弃，这样能保证样本在 x 方向上的坐标满足密度函数分布。

LIU, Ran - Department of Statistics @BNU

为了可视化拒绝抽样的动机，想象将一个随机变量的密度函数绘制在一个大矩形板上，并向其投掷飞镖。假设这些飞镖在整个板上均匀分布。

现在移除所有落在曲线下方以外区域的飞镖。剩下的飞镖将在曲线下方的区域内均匀分布，并且这些飞镖的 x 坐标将按照随机变量的密度分布。这是因为在曲线最高的地方，也就是概率密度最大的地方，飞镖着陆的空间最多。

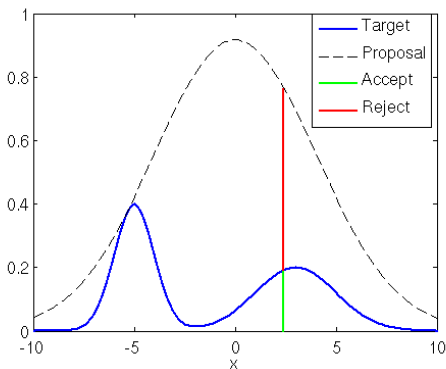


- 刚刚描述的可视化等同于拒绝抽样的一种特殊形式，其中的“提议分布”是均匀的（因此其图形是一个矩形）。
- 拒绝抽样的一般形式假设板子的形状不一定是矩形，而是根据某个提议分布的密度来确定（该分布不一定归一化为 1）。通常情况下，我们可以将其视为某个已知的分布的倍数（我们知道如何从中进行抽样）。
- 我们知道如何从提议分布中进行抽样，并且在每个点上至少与我们想要抽样的分布一样高，以便前者完全包围后者。（否则，我们想要抽样的曲线区域中的某些部分可能永远无法到达。）

LJU, Ran - Department of Statistics @BNU

拒绝抽样的工作原理如下：

- 1 从提议分布中在 x 轴上抽样一个点。
- 2 在该 x 位置上画一条竖直线，直到提议分布的概率密度函数的 y 值。
- 3 在这条线上从 0 到提议分布的概率密度函数的 y 值之间均匀抽样。如果抽样值大于该竖直线所需分布的密度函数值，则拒绝该 x 值并返回第 1 步；否则，该 x 值就是所需分布的一个样本。



该算法可以用于从任何曲线下方进行抽样，无论函数是否积分为 1。

事实上，通过常数缩放函数对抽样的 x 位置没有影响。

因此，该算法可以用于从归一化常数未知的分布中进行抽样，这在计算统计学中很常见。

LIU, Ran - Department of Statistics @BNU

采样步骤

为了从密度为 f 的分布 X 中获取样本，利用容易采样的密度函数为 g 的分布 Y 。我们将 g 称为提案分布 (proposal distribution)。

设 M 为似然比 $f(x)/g(x)$ 的上界，即一个常数满足 $1 \leq M < \infty$ 。换句话说， M 必须满足 $f(x) \leq Mg(x)$ 对任意 x 都成立。请注意这隐含说明 Y 分布的支撑要包含 X 的支撑。

- ① 从分布 Y 获取样本 $y \sim g$ ，并从 $Unif(0, 1)$ (单位区间上的均匀分布) 获取样本 u 。
- ② 检查是否 $u < f(y)/Mg(y)$. ($M \geq 1$)
 - ① 如果成立，则接受 y 作为从 f 中抽取的样本；
 - ② 如果不成立，则拒绝 y 的值并返回到采样步骤 1.

* 构造时，需要 $Mg(y)$ 包络 $f(y)$ 。

注意某保留样本不大于值 y 的概率为(黑板推导)

$$\begin{aligned}
 P[X \leq y] &= P\left[Y \leq y \mid U \leq \frac{f(Y)}{Mg(Y)}\right] \\
 &= P\left[Y \leq y \text{ and } U \leq \frac{f(Y)}{Mg(Y)}\right] / P\left[U \leq \frac{f(Y)}{Mg(Y)}\right] \\
 &= \int_{-\infty}^y \int_0^{f(z)/Mg(z)} du \, g(z) dz / \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{f(z)/Mg(z)} du \, g(z) dz \\
 &= \int_{-\infty}^y f(z)/M dz / \int_{-\infty}^{\infty} f(z)/M dz \\
 &= \int_{-\infty}^y f(z) dz,
 \end{aligned}$$

其中 $P\left[U \leq \frac{f(Y)}{Mg(Y)}\right] = 1/M$ 为接受率. 接受率越大, 采样效率越高.

问题: 哪一步需要包络? 为什么 $M \geq 1$?

该算法也可适用于差一个比例常数的密度 f ，具体的采样步骤以及接受率完全一样。

因为接受样本所需要的次数满足几何分布 $\xi \sim GE(p)$ ，参数为 $p = 1/M$ ，密度函数为 $p(\xi = k) = (1 - p)^{k-1}p$ ，其中 $k = 1, 2, \dots$ 。所以该算法平均需要 $E\xi = M$ 次迭代才能获得样本。

所以我们想 M 越小越好，即包络线越贴近目标分布越好，可设置

$$M = \max_x \frac{f(x)}{g(x)}.$$

LIU, Ran - Department of Statistics @BNU

例

试用接受拒绝采样产生服从均值为 0，方差为 1 的半正态分布的随机数 η ，该分布的概率密度函数为

$$p(z) = \begin{cases} \sqrt{2/\pi} e^{-\frac{z^2}{2}}, & z \geq 0; \\ 0, & z < 0. \end{cases}$$

LIU, Ran - Department of Statistics @BNU

首先我们有 $f(z) = \sqrt{2/\pi}e^{-\frac{z^2}{2}}$, 我们的提案分布 (proposal distribution) 设为 $\text{Exp}(1)$, 即 $g(x) = e^{-x}$ 。我们计算 M 的最小取值:

$$\begin{aligned} M &= \max_z \frac{f(z)}{g(z)} = \max_z \sqrt{\frac{2}{\pi}} \exp\left\{-\frac{z^2 - 2z}{2}\right\} \\ &= \max_z \sqrt{\frac{2e}{\pi}} \exp\left\{-\frac{(z-1)^2}{2}\right\} = \sqrt{\frac{2e}{\pi}} \end{aligned}$$

产生半正态分布随机数的步骤

- ① 独立生成 $X \sim \text{Exp}(1)$ 和 $Y \sim U(0, 1)$;
- ② 直到 X, Y 满足 $Y \leq e^{-(X-1)^2/2}$ 时, 令 $\eta = X$, 并输出 η 。

此时的接受率为 $1/M = \sqrt{\frac{\pi}{2e}}$.

Summary

Introduction

Transformation Sampling and Normalizing Flow

Inverse Transform Sampling

Accept-Reject Sampling

Importance Sampling

LIU, Ran - Department of Statistics @BNU

重要性采样

重要性采样是使用蒙特卡洛方法估算积分 (期望) 时, 提高对积分计算重要区域的抽样, 从而达到减少方差的目的。

$$\mu = E_{X \sim f}(h(X)) = \int h(x)f(x)dx = \int h(x)\frac{f(x)}{g(x)}g(x)dx$$

或若 $\int f(x) \neq 1$, 也就是只知道分布成比例于某个函数, 差一个归一化常数, 则

$$\mu = E_{X \propto f}(h(X)) = \int h(x)\frac{f(x)}{\int f(x)dx}dx = \frac{\int h(x)\frac{f(x)}{g(x)}g(x)dx}{\int \frac{f(x)}{g(x)}g(x)dx}.$$

其中 g 是另一个密度函数, 称之为重要性抽样函数或者包络。

上式建议用来估计 $Eh(X)$ 的一种 Monte Carlo 方法是: 从 g 中抽取独立同分布的样本 $X_1, \dots, X_n$, 并采用估计

$$\hat{\mu}_{IS}^* = \frac{1}{n} \sum_i h(x_i) \frac{f(x_i)}{g(x_i)} \rightarrow E_{X \sim g} \left(h(x) \frac{f(x)}{g(x)} \right)$$

可以写成

$$\hat{\mu}_{IS}^* = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n h(X_i) w^*(X_i),$$

其中 $w^*(X_i) = f(X_i)/g(X_i)$ 是为未标准化权重, 称为重要性比率. 若是差一个比例常数的 f , 则

$$\hat{\mu}_{IS} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n h(X_i) w(X_i),$$

其中 $w(X_i) = w^*(X_i) / \sum_{i=1}^n w^*(X_i)$ 是标准化权重.

我们来看估计值的方差是

$$\begin{aligned}
 \text{Var}(\hat{\mu}) &= \frac{1}{n} \text{Var} \frac{h(X)f(X)}{g(X)} \\
 &= \frac{1}{n} \int \left(\frac{h(x)f(x)}{g(x)} - \mu \right)^2 g(x) dx \\
 &= \frac{1}{n} \left\{ \int \frac{h^2(x)f^2(x)}{g(x)} dx - \mu^2 \right\}. \tag{4}
 \end{aligned}$$

如果 $h(x)^2 f^2(x)/g^2(x) = \mu^2$ ，可得 $\text{Var}(\hat{\mu}) = 0$ ，也就是方差达到最小。

LIU, Ran - Department of Statistics @BNU

所以我们有

$$g(x) = \frac{|h(x)|f(x)}{\mu} = \frac{|h(x)|f(x)}{\int |h(x)|f(x)dx}.$$

密度函数 $g(x)$ 的最佳选择就是和被积函数 $|h(x)|f(x)$ 具有相同的形状。对积分值贡献越大的区域，希望以较大的概率抽取到随机数。

在实际中， μ 是未知量，因此无法选取 $g(x)$ ，使得 $\text{Var}(\hat{\mu}) = 0$ 。通常情况下，我们会选取一个形状接近 $|h(x)|f(x)$ 的函数作为 $g(x)$ 。

Liu, Ran - Department of Statistics @BNU

$$\mu = \int h(x)f(x)dx = \int h(x)\frac{f(x)}{g(x)}g(x)dx$$

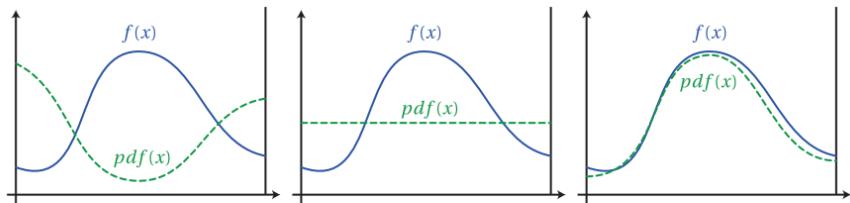


Figure A.2: Comparison of three probability density functions. The PDF on the right provides variance reduction over the uniform PDF in the center. However, using the PDF on the left would significantly increase variance over simple uniform sampling.

Liu, Ran - Department of Statistics @BNU

例

用重要抽样法估计 $\mu = \int_0^1 xf(x)dx = \int_0^1 e^x dx$ 的估计值。

根据重要抽样法的想法，从和被积函数 e^x 形状类似的密度函数中产生随机数。

根据 Taylor 展开， $e^x = \sum_{i=0}^{\infty} x^i/i!$ 。由于 $x \in [0, 1]$ ， e^x 的 Taylor 展开前两项 $1 + x$ 标准化之后得到 $g(x) = 2(1 + x)/3$ ，作为和 e^x 形状近似的密度函数。此时，

$$\mu = \int_0^1 \frac{e^x}{g(x)} g(x) dx = E \frac{e^Y}{g(Y)},$$

这里随机变量 Y 的密度函数为 $g(x) = 2(1 + x)/3$ 。

关于密度函数 $g(x)$ 的随机数, 注意到

$R = \int_0^3 \frac{2}{3}(1+x)dx = (2Y + Y^2)/3$, 可得 $Y = \sqrt{3R+1} - 1$. 产生 $[0, 1]$ 上的均匀随机数 $R_1, \dots, R_n$, 计算 $Y_i = \sqrt{3R_i+1} - 1$, 则 μ 的重要抽样法估计为

$$\hat{\mu}_2 = \frac{3}{2n} \sum_{i=1}^n \frac{e^{Y_i}}{1+Y_i}.$$

根据式 (4), 估计的方差为

$$\begin{aligned} & \frac{1}{n} \left\{ \int \frac{y^2 f^2(y)}{g(y)} dy - \mu^2 \right\} = \frac{1}{n} \left(\frac{3}{2} \int_0^1 \frac{e^{2y}}{1+y} dy - \mu^2 \right) \\ &= \frac{1}{n} \left(\frac{3}{2e^2} \int_0^1 \frac{e^{2(y+1)}}{1+y} dy - \mu^2 \right) = \frac{1}{n} \left(\frac{3}{2e^2} \int_2^4 \frac{e^t}{t} dt - \mu^2 \right). \end{aligned}$$

期权

看涨期权是一种金融工具, 它给持有者权利 (而不是义务) 在特定的到期日或之前, 以特定的价格购买特定数量的金融资产. 在欧式看涨期权中, 期权只能在到期日执行. 执行价格是指期权执行时完成交易的价格. 令 $S^{(t)}$ 表示基本金融资产 (比如, 股票) 在时刻 t 的价格. 记执行价格为 K , 并令 T 表示到期日.

- 当时刻 T 到达时, 如果 $K > S^{(T)}$, 看涨期权的持有者不希望执行他的期权, 因为他在公开市场能更便宜地得到股票.
- 当 $K < S^{(T)}$ 时期权就有价值了, 因为他能以低价 K 购得股票并且立即以更高的市场价格 $S^{(T)}$ 卖掉它.

重要的是要确定该看涨期权的购买者在到期日 T 和执行价格 K 下, 在时刻 $t = 0$ 应该花费多少钱购买该期权.

期权的合理价格就是在时刻 $t = 0$ 时付的钱能准确平衡在到期日的预期盈余. 我们将考虑最简单的情况: 一个无分红股票的欧式看涨期权. 该期权的合理价格能在 Black-Scholes 模型下解析确定, 但通过 Monte Carlo 方法得到的合理价格的估计是一个有益的起始点. 根据 Black-Scholes 模型, 在 T 日的股票价值可以由

$$S^{(T)} = S^{(0)} \exp \left\{ \left(r - \frac{\sigma^2}{2} \right) \frac{T}{365} + \sigma Z \sqrt{\frac{T}{365}} \right\}$$

模拟得到, 其中 r 是无风险回报率 (通常是在 $T - 1$ 日到期的美国短期国库券的回报率), σ 是股票的波动率 (一个按年计算的 $\log(S^{(t+1)}/S^{(t)})$ 的标准差的估计), Z 是满足标准正态的随机数. 如果我们知道在 T 日的股票价格等于 $S^{(T)}$, 那么看涨期权的合理价格就是

$$C = \exp\{-rT/365\} \max\{0, S^{(T)} - K\},$$

折算盈余到现值.

因为 $S^{(T)}$ 对于期权的购买者是未知的, 在 $t = 0$ 时购买的合理价格就是折算盈余的期望值, 即 $E\{C\}$. 因此, 在 $t = 0$ 时购买的合理价格的 Monte Carlo 估计是

$$\bar{C} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n C_i,$$

其中 $C_i, i = 1, \dots, n$, 是由从标准正态分布的一个独立同分布的样本 $Z_1, \dots, Z_n$ 模拟得到的.

LIU, Ran - Department of Statistics @BNU