單元 9: 反轉換演算法
(課本 §5.1)

對應於離散隨機變數的生成方法, 可發展出類似的演算法來模擬連續隨機變, 如

(1) 反轉換演算法 (The Inverse Transform Algorithm, §5.1)

(2) 棄絕法 (The Rejection Method, §5.2)

(3) 生成常態隨機變數的極坐標演算法 (The Polar Method for Generating Normal Random variables, §5.3), 一種強有力的演算法

(4) 卜松過程的生成 (Generating a Poisson Process, §5.4)

(5) 非齊次卜松過程的生成 (Generating a Nonhomogeneous Poisson Process, §5.5)

本單元先探討最基本的反轉換法.

令 X 爲一連續隨機變數, 且其分布函數爲 $F(x)$, 記作

$$X \sim F(x)$$

問. 如何模擬 X? 亦即, 在已知分布函數 $F(x)$ 的條件下, 如何模擬出對應的隨機變數 X?

答. 可根據如下的

定理. 令隨機變數

$$U \sim \mathsf{unif}(0,1)$$

且 $F(x)$ 爲一連續分布函數.

定義

$$X \stackrel{\mathsf{def}}{=} F^{-1}(U)$$

則

$$X \sim F(x)$$

亦即, 所定義的隨機變數 X 的分布函數爲 $F(x)$, 如所求.

$<$證$>$ 令 $F_X(x)$ 表示 $X = F^{-1}(U)$ 的分布函數. 由定義知,

$$\begin{aligned} F_X(x) &= P(X \leq x) \\ &= P[F^{-1}(U) \leq x] \end{aligned} \qquad (1)$$

接著, 根據 $F(x)$ 爲單調遞增的 (假設) 性質, 得

$$a \leq b$$

乃等價於

$$F(a) \leq F(b)$$

並由 (2) 式及反函數的性質, 可導出

$$\begin{aligned} F_X(x) &= P[F(F^{-1}(U)) \leq F(x)] \\ &= P[U \leq F(x)] \end{aligned}$$

最後, 因爲 $U \sim \text{unif}(0, 1)$ 且 $0 \leq F(x) \leq 1$, 根據在 $(0, 1)$ 間均勻分布函數的性質, 上式相當於

$$F_X(x) = F(x)$$

得證.

因此, 對應的

演算法:

(1) 求 $F^{-1}(x)$.

(2) 生成一仿隨機數 U.

(3) 令 $X = F^{-1}(U)$.

並稱此種方法為連續反轉換法 (Continuous Inverse Transform Method, 簡稱 CIT 法).

例 1. 對於 $n > 0$, 令隨機變數

$$X \sim F(x) = x^n, \ 0 < x < 1$$

(自行驗證 $F(x)$ 確實為一分布函數). 則生成 X 的

演算法:

(1) 求 $F^{-1}(x)$: 令 $u = x^n$, 解 x, 得

$$x = u^{1/n}, \ 0 < u < 1$$

故,

$$F^{-1}(x) = x^{1/n}, \ 0 < x < 1$$

(2) 生成一仿隨機數 U.

(3) 令 $X = u^{1/n}$.

例 2. 令隨機變數

$$X \sim \text{exp}(1)$$

試模擬 X.

<解> 因爲 X 爲一連續隨機變數, 故根據連續反轉換法, 對應的

演算法:

(1) 求 $F^{-1}(x)$: 首先, 需求出 $F(x)$, 過程如下.

複習. 隨機變數

$$Y \sim \text{exp}(\lambda)$$

若且爲若 Y 的 pdf

$$g(y) = \lambda e^{-\lambda}, \ 0 < y < \infty$$

其中 λ 爲發生率 (rate), 表示單位時間內事件發生的次數; Y 表示產生一事件所需的時間. 根據隨機變數的期望值定義, 可導出

$$E(Y) = \frac{1}{\lambda}$$

與上述的意義相符.

故, 根據複習的內容, $X \sim \exp(1)$ 的 pdf

$$f(x) = e^{-x}, \ 0 < x < \infty$$

所以, 由 cdf 的定義, 對於 $0 < x < \infty$, X 的 cdf

$$\begin{aligned} F(x) &= \int_0^x e^{-t} dt \\ &= -e^{-t}\Big|_0^x = 1 - e^{-x} \end{aligned}$$

如圖示.

接著, 求 $F^{-1}(x)$, 如下述. 令

$$u = F(x) = 1 - e^{-x}, \ 0 < x < \infty$$

解 x, 得

$$e^{-x} = 1 - u, \ 0 < u < 1$$

兩邊取對數, 得

$$-x = \log(1-u), \ 0 < u < 1$$

亦相當於

$$x = -\log(1-u),\ 0 < u < 1$$

因此,

$$F^{-1}(x) = -\log(1-x),\ 0 < x < 1$$

(2) 生成一仿隨機數 U.

(3) 令

$$X = F^{-1}(U) = -\log(1-U) = -\log(U)$$

其中最後一個等號成立乃因爲

$$U \sim \text{uinf}(0,1)$$

乃相當於

$$1-U \sim \text{unif}(0,1)$$

故直接以 U 取代 $1-U$, 可省略乘以 -1 及加 1 的運算步驟.

例 3. 令隨機變數

$$Y \sim \exp(\lambda)$$

則生成 Y 的

演算法:

(1) 求 $F^{-1}(y)$: 對於 $0 < y < \infty$, Y 的 cdf

$$\begin{aligned} F(y) &= \int_0^y \lambda e^{-\lambda t} dt \\ &= -e^{-\lambda t}\Big|_0^y = 1 - e^{-\lambda y} \end{aligned}$$

令

$$u = 1 - e^{-\lambda y},\ 0 < y < \infty$$

解 y, 得

$$e^{-\lambda y} = 1 - u,\ 0 < u < 1$$

兩邊取對數, 得

$$-\lambda y = \log(1 - u),\ 0 < u < 1$$

最後, 將上式兩邊同除 $-\lambda$, 得

$$y = -\frac{1}{\lambda}\log(1 - u),\ 0 < u < 1$$

因此,

$$F^{-1}(y) = -\frac{1}{\lambda}\log(1 - y),\ 0 < y < 1$$

(2) 生成一仿隨機數 U.

(3) 令

$$\begin{aligned} Y &= F^{-1}(U) \\ &= -\frac{1}{\lambda}\log(1-U) = -\frac{1}{\lambda}\log(U) \end{aligned}$$

其中最後一個等號成立乃因爲

$$1-U \sim \text{unif}(0,1)$$

所致.

<另解> 若

$$X \sim \exp(1)$$

則根據變數變換, 對於 $0 < y < \infty$,

$$Y \overset{\text{def}}{=} \frac{1}{\lambda}X$$

的 pdf

$$g(y) = f(x) \cdot \left.\frac{dx}{dy}\right|_{x=\lambda y} \tag{2}$$

其中

$$f(x) = e^{-x},\ 0 < x < \infty$$

爲 X 的 pdf.

因此, 由 (2) 式, 得 Y 的 pdf

$$\begin{aligned} g(y) &= f(\lambda y) \cdot \lambda \\ &= \lambda e^{-\lambda y}, \ 0 < y < \infty \end{aligned}$$

亦即,

$$Y = \frac{1}{\lambda} X \sim \exp(\lambda) \tag{3}$$

最後, 根據例 2 所導出的模擬 X 的演算法

$$X = -\log(U)$$

以及 (3) 式, 得模擬 Y 的演算法爲

$$Y = -\frac{1}{\lambda} \log(U)$$

其中

$$U \sim \text{unif}(0, 1)$$

應用 1. 生成參數爲 λ 的卜松隨機變數.

複習. (請自行閱讀課本第27至第29頁). 一個發生率爲 λ 的卜松過程 (Poisson process), 簡記爲 PP(λ),

乃相當於一個計數過程 (counting process) $\{N(t),\ t \geq 0\}$, 其中 $N(t)$ 表示在時間區間 $[0,t]$ 內發生的事件總數, 其隨機機制乃由如下所定義的連續二事件的間隔時間 (interarrival time, 又稱作等候時間, waiting time) 所決定, 亦即, 令 $X_0 \stackrel{\text{def}}{=} 0$, 且對於 $i \geq 1$, $X_i \stackrel{\text{def}}{=}$ 由第 $(i-1)$ 個事件至第 i 個事件所需的時間, 則

$$X_i \stackrel{\text{iid}}{\sim} \exp(\lambda),\ i \geq 1$$

也就是說, 一個 PP(λ) 就是一個所有間隔時間都是發生率爲 λ 的獨立同分布指數隨機變數所形成的計數過程, 如圖示. 一個結果乃是, 對於 $t > 0$, 在 $[0,t]$ 內發生的事件總數

$$N(t) \sim \text{Poisson}(\lambda t)$$

因此, 當 $t = 1$ 時, 在 $[0,1]$ 內發生的事件總數

$$N(1) \sim \text{Poisson}(\lambda \cdot 1) = \text{Poisson}(\lambda)$$

故模擬發生率爲 λ 的卜松隨機變數 Poisson(λ) 就相當於模擬 $N(1)$, 過程如下.

對於 $n \geq 0$, $N(1) = n$ 乃相當於第 n 個事件發生的時間

$$\sum_{i=1}^{n} X_i \leq 1$$

且第 $(n+1)$ 個事件發生的時間

$$\sum_{i=1}^{n+1} X_i > 1$$

故

$$N(1) = \max\left\{n : \sum_{i=1}^{n} X_i \leq 1\right\} \tag{4}$$

其中定義

$$\sum_{i=1}^{0} X_i = 0$$

避免發生等號右邊爲空集合, 且在 $n = 0$ 時, 等號兩邊的是一致的. 因爲

$$X_i \overset{\text{iid}}{\sim} \exp(\lambda)$$

故由例 3 知,

$$X_i = -\frac{1}{\lambda}\log(U_i)$$

其中

$$U_i \overset{\text{iid}}{\text{unif}}\ (0,1)$$

代入 (4) 式, 得

$$N(1) = \max\left\{n : -\frac{1}{\lambda}\sum_{i=1}^{n} \log(U_i) \leq 1\right\}$$

將上式不等號的兩邊同乘以 $-\lambda$, 根據對數函數的性質化簡, 並取指數後, 得

$$\begin{aligned} N(1) &= \max\left\{n : \sum_{i=1}^{n} \log(U_i) \geq -\lambda\right\} \\ &= \max\{n : \log(U_1 U_2 \cdots U_n) \geq -\lambda\} \\ &= \max\left\{n : U_1 U_2 \cdots U_n \geq e^{-\lambda}\right\} \qquad (5) \end{aligned}$$

其中定義

$$\prod_{i=1}^{0} U_i = 1$$

與 (4) 式一致. 又此式乃課本第 43 頁習題 3.13 的推廣, 此時應該知道爲何習題 3.13 會有那些特殊的模擬結果.

接著, 由 (5) 式知, 對於 $n \geq N(1) + 1$,

$$U_1 U_2 \cdots U_n < e^{-\lambda}$$

故,

$$N(1) + 1 = \min\{n : U_1 U_2 \cdots U_n < e^{-\lambda}\}$$

因此, 得一個與 (5) 式等價的式子

$$N(1) = \min\{n : U_1 U_2 \cdots U_n < e^{-\lambda}\} - 1 \qquad (6)$$

練習題. 設 $X \sim$ Poisson(5). 試分別以 (5) 式及 (6) 模擬 X 及 $E(X)$, 並必較此二種模擬法及其結果.

應用 2. **生成參數爲 n 與 λ 的 gamma 隨機變數.**

令隨機變數

$$X \sim \text{gamma}(n, \lambda)$$

亦即, 其 pdf

$$f(x) = \lambda \frac{(\lambda x)^{n-1} e^{-\lambda x}}{(n-1)!}, \; 0 < x < \infty$$

問. 如何模擬 X?

<解一> 因爲 X 爲一連續隨機變數, 故根據連續反轉換法,

(1) 求 $F^{-1}(x)$: 根據定義, X 的 cdf

$$\begin{aligned} F(x) &= \int_0^x f(y)dy \\ &= \int_0^x \lambda \frac{(\lambda y)^{n-1} e^{-\lambda y}}{(n-1)!} dy \end{aligned}$$

但卻無法得一明確的表示式, 故無法求出 $F^{-1}(x)$, 而做不下去, 這乃連續反轉換法常碰到的弱點.

<解二> 首先,

複習. 若隨機變數

$$X \sim \text{gamma}(n, \lambda)$$

則可得

$$X = X_1 + X_2 + \cdots + X_n \tag{7}$$

其中

$$X_i \overset{\text{iid}}{\sim} \exp(\lambda), \ i = 1, 2 \ldots, n$$

又根據例 3, 對於 $0 \le i \le n$,

$$X_i = -\frac{1}{\lambda}\log(U_i) \tag{8}$$

其中

$$U_i \overset{\text{iid}}{\sim} \text{unif}(0, 1)$$

所以, 合併 (7) 式及 (8) 式, 並根據對數函數的性質, 得

$$\begin{aligned} X &= -\frac{1}{\lambda}[\log(U_1) + \log(U_2) + \cdots + \log(U_n)] \\ &= -\frac{1}{\lambda}\log(U_1 U_2 \cdots U_n) \end{aligned}$$

因此, 對應的

演算法:

(1) 生成仿隨機數 $U_1, U_2, \ldots, U_n$.

(2) 令

$$X = -\frac{1}{\lambda}\log(U_1 U_2 \cdots U_n)$$

練習題. 令隨機變數

$$X \sim \text{gamma}(n, \lambda)$$

試模擬

$$E(X) = \frac{n}{\lambda}$$