Monte-Carlo-Integration

von Dietmar Herrmann, Anzing

Kurzfassung: An Hand eines einfachen Beispiels wird gezeigt, daß jedes Integral als Erwartungswert einer reellen Zufallsgröße aufgefaßt werden kann. Neben einer asymptotischen Fehlerabschätzung werden 4 Methoden zur Reduktion der Varianz diskutiert: Verfahren der wesentlichen Stichprobe, Geschichtete und antithetische Zufallszahlen, Control-Variate-Methode.

1. Ein einführendes Beispiel

$$I = \int_0^{\pi/2} \sin x \, dx \tag{1}$$

Der exakte Wert des Integrals ist bekanntlich 1. Da die Riemannsche Summe des Integrals nicht von der speziellen Zerlegung des Integrationsintervalls abhängt, kann man die Funktionswerte an zufälligen Abszissen auswerten und so erhält man einen *Monte-Carlo (MC)*-Schätzwert des Integrals. Um Zufallszahlen aus dem Bereich [0;1[verwenden zu können, wird das Integral [a;b] mit Hilfe der Transformation

$$u = \frac{x-a}{b-a} \tag{2}$$

auf das Einheitsintervall [0;1[transformiert. Die Substitution (2) $u = \frac{2}{\pi} x \Rightarrow dx = \frac{2}{\pi} du$ transformiert (1) zu

$$I = \int_0^{\pi/2} \sin x \, dx \quad = \quad \frac{\pi}{2} \int_0^1 \sin(\frac{\pi}{2} u) \, du \tag{3}$$

Durch Auslosen der Zufallszahlen ξ ergibt sich aus (3) die Berechnungsformel

$$I \cong \frac{\pi}{2N} \sum_{i=1}^{N} \sin(\frac{\pi}{2} \xi_i) \tag{4}$$

Durch eine andere Wahl der verwendeten Zufallszahlen ändert sich auch der numerische Wert von (4) stochastisch. Um nicht von den Zufallszahlen einer Tabelle oder eines Rechners abhängig zu sein, werden hier die ersten 20 (Pseudo-)Zufallszahlen $x_1,..., x_{20}$ des einfachen Zufalsszahlen-Generators

$$x_0 = 0.7; \quad x_i = \mathrm{e}^{\,x_{i-1} + \pi} - [\,\mathrm{e}^{\,x_{i-1} + \pi}\,]; \quad i \in \{1, \ ..., \ 20\}$$

verwendet, der auch bequem mit dem elektronischen Taschenrechner auszuwerten ist. Mit diesen Zufallszahlen ergibt sich die Berechnung von (4) aus Tabelle 1.

Der (absolute) Fehler beträgt hier also 0.0651.

Tabelle 1

ξ	$\pi/2 \sin(\pi/2\ \xi)$
0.5996	1.2703
0.1496	0.3657
0.8748	1.5405
0.4997	1.1102
0.1413	0.3457
0.6514	1.3412
0.3907	0.9047
0.2031	0.4926
0.3511	0.8230
0.8730	1.5396
0.3980	0.9192
0.4515	1.0231
0.3481	0.8167
0.7754	1.4741
0.2510	0.6035
0.7442	1.4457
0.7048	1.4049
0.8225	1.5102
0.6748	1.3703
0.4396	1.0006
Mittel	1.0651

2. Eine stochastische Interpretation des Integrals

Ist X eine im Intervall $[0;\pi/2]$ gleichverteilte Zufallsgröße mit der Dichtefunktion p, so ist ihr Erwartungswert definiert durch

$$E(X) = \int_0^{\pi/2} x\, p(x)\, dx \tag{5}$$

Das gegebene Integral $I = \int_0^{\pi/2} f(x)\, dx$ läßt sich somit als Erwartungswert einer Zufallsvariablen $Y = \frac{f(X)}{p(X)}$ schreiben.

$$E(Y) = I = \int_0^{\pi/2} \frac{f(x)}{p(x)} p(x)\, dx \tag{6}$$

Der Verschiebungssatz $Var\,(Y) = E(Y^2) - E^2(Y)$ liefert damit die Varianz

$$Var(Y) = \int_0^{\pi/2} \frac{f^2(x)}{p(x)} dx - I^2 \tag{7}$$

Auf dem Intervall $[0;\pi/2]$ stellt die Funktion $p(x) = \frac{2}{\pi}$ (sonst 0) wegen $\int_0^{\pi/2} \frac{2}{\pi} dx = 1$ eine Dichtefunktion dar. Damit kann für eine Zufallszahl $\xi \in [0;1[$ ein Wert der Zufallsgröße X ausgelost werden.

$$\int_0^X \frac{2}{\pi} dx = \xi \Rightarrow X = \frac{\pi}{2}\xi$$

Für ein Integral ergibt sich damit die Näherung

$$I = E(Y) \cong \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} Y_i = \frac{\pi}{2N}\sum_{i=1}^{N} f(X_i) \tag{8}$$

für eine hinreichend große Zahl N von Werten X_i. Für Beispiel (1) folgt daraus

$$I \cong \frac{\pi}{2N}\sum_{i=1}^{N} \sin(\frac{\pi}{2}\xi_i) \tag{9}$$

3. Eigenschaften der MC-Integration

Ist f eine auf $[a;b]$ definierte Funktion und Y eine Zufallsvariable mit

$$E(Y) = \int_a^b f(x)dx = I; \quad Var(Y) < \infty$$

und sind Y_1, Y_2, ..., Y_N stochastisch unabhängige Realisierungen von Y, so heißt

$$\overline{Y} = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} Y_i$$

das MC-Integral von f. $\overline{Y}$ hat die Eigenschaften (vgl. Frühwirth und Regler 1983, 135):

(1) $\overline{Y}$ ist erwartungstreue Schätzung von I

(2) $\overline{Y}$ ist konsistente Schätzung von I; d.h. mit Wahrscheinlichkeit 1 gilt

$$\lim_{N\to\infty} P(|\overline{Y} - I| > \varepsilon) = 0; \quad \forall \varepsilon > 0$$

(3) $\overline{Y}$ ist asymptotisch normalverteilt

(4) $Var(\overline{Y}) = \frac{Var(Y)}{N}$

4. Auswahl der Dichtefunktion

Wie bei Gleichung (7) ersichtlich, läßt sich durch geeignete Auswahl der Dichtefunktion p die Varianz reduzieren. Es läßt sich zeigen, daß die Varianz $Var(Y)$ minimal wird, wenn $p(x)$ proportional zu $|f(x)|$ ist. Ein Beweis dazu findet sich bei Sobol (1971, 70).

Da die Sinusfunktion in der Nähe des Ursprungs wegen sin $x \approx x$ etwa linear verläuft, ist für die Dichtefunktion der Ansatz $p(x) = Cx$ naheliegend. Integration auf $[0;\pi/2]$ liefert

$$\int_0^{\pi/2} C\,x\,dx = 1 \quad \Rightarrow \quad C = \frac{8}{\pi^2}$$

Damit wurde die lineare Dichtefunktion $p(x) = \frac{8}{\pi^2}x$ gefunden. Auslosen von X mit Hilfe einer Zufallszahl ξ

$$\int_0^X \frac{8}{\pi^2} x\,dx = \xi \quad \Rightarrow \quad X = \frac{\pi}{2}\sqrt{\xi}$$

ergibt für das Integral die Näherung

$$I \cong \frac{\pi^2}{8N} \sum_{i=1}^{N} \frac{\sin(\frac{\pi}{2}\sqrt{\xi})}{\frac{\pi}{2}\sqrt{\xi}} \tag{10}$$

Einsetzen der gegebenen Zufallszahlen in (10) liefert die Werte in Tabelle 2. Wie zu erwarten war, liefert die monoton steigende Dichtefunktion eine kleinere Varianz. Der Fehler ist noch 0.0093. Die Varianz-Reduktion mittels einer geeigneten Dichtefunktion wird die *Methode der wesentlichen Stichprobe* genannt.

Tabelle 2

ξ	$\frac{\pi^2}{8}\frac{\sin(\pi/2\sqrt{\xi})}{\pi/2\sqrt{\xi}}$
0.5996	0.9512
0.1496	1.1592
0.8748	0.8354
0.4997	0.9954
0.1413	1.1633
0.6514	0.9288
0.3907	1.0448
0.2031	1.1332
0.3511	1.0632
0.8730	0.8361
0.3980	1.0415
0.4515	1.0170
0.3481	1.0645
0.7754	0.8763
0.2510	1.1102
0.7442	0.8893
0.7048	0.9060
0.8225	0.8567
0.6748	0.9187
0.4396	1.0224
Mittel	0.9907

5. Fehlerabschätzung

Um einen Überblick über den asymptotischen Fehler zu erhalten, soll Gleichung (7) für die konstante Dichtefunktion $p(x) = \frac{2}{\pi}$ abgeschätzt werden:

$$\begin{aligned} Var(Y) &= \int_0^{\pi/2} \frac{f^2(x)}{p(x)} dx - I^2 = \frac{\pi}{2}\int_0^{\pi/2} \sin^2 x\,dx - 1 \\ &= \frac{\pi^2}{8} - 1 = 0.234 \end{aligned}$$

Die Standardabweichung $\sigma_{\overline{Y}} = \sqrt{\frac{Var(Y)}{N}}$ verhält sich daher wie $\frac{0.484}{\sqrt{N}}$. Der zentrale Grenzwertsatz, der bei N=20 nur approximativ gilt, liefert für den Ein-Sigma-Bereich (dem Fehler im Sinne der Meßtechnik) die Fehlerwahrscheinlichkeit

$$P(|E(Y) - I| < \sigma_{\overline{Y}}) = 0.683$$

Mit 68.3% Wahrscheinlichkeit gilt somit für die Fehler-Schranke

$$I = 1.065 \pm 0.108$$

Diese Abschätzung ist, verglichen mit dem empirischen Fehler 0.065 etwas pessimistisch; dies gilt aber für viele Ergebnisse, die aus Grenzwertsätzen resultieren. Die (Stichproben-)Streuung σ von Tabelle 1 ist 0.398. dies liefert den Fehler $\frac{0.398}{\sqrt{20}} = 0.089$.

6. Geschichtete Zufallszahlen

Eine weitere Varianz-Reduktion erhält man durch die Verwendung von geschichteten Zufallszahlen. Dies bedeutet, daß die Zufallszahlen aus Teilintervallen von [0;1[ausgelost werden. Teilt man [0;1[in 10 gleich große Teilintervalle, so müssen sich bei 20 Zufallszahlen je zwei Zahlen in einen Teilintervall befinden. Dies geschieht am einfachsten durch Transformation: Ist $[a;a+1[$ das jeweilige Intervall, so wird die Zufallszahl ξ transformiert zu

$$\xi \to a + \frac{\xi}{10}$$

Dies liefert mit den gewählten Zufallszahlen die Tabelle 3. Der Fehler ist nur noch 0.0015; die Varianz wurde also wesentlich reduziert.

Tabelle 3

ξ	$\pi/2 \sin(\pi/2\ \xi)$
0.05996	0.1477
0.01496	0.0369
0.18748	0.4559
0.14997	0.3666
0.21413	0.5184
0.26514	0.6355
0.33907	0.7976
0.32031	0.7574
0.43511	0.9919
0.48730	1.0883
0.53980	1.1779
0.54515	1.1866
0.63481	1.3194
0.67754	1.3736
0.72510	1.4266
0.77442	1.4732
0.87048	1.5384
0.88225	1.5440
0.96748	1.5687
0.94396	1.5647
Mittel	0.9985

7. Verwendung von antithetischen Zufallszahlen

Auf dem Intervall [0;1[wird der Zufallszahl ξ mittels $\xi \to 1-\xi$ ihre antithetische Zahl zugeordnet. Für streng monotone Funktionen kann durch Verwendung von antithetischen Zufallszahlen die Varianz verkleinert werden. Mit der ersten Hälfte der gewählten Zufallszahlen ergibt sich Tabelle 4.

Tabelle 4

ξ	$1-\xi$	$\pi/2 \sin(\pi/2\ \xi)$	$\pi/2 \sin(\pi/2\ (1-\xi))$
0.5996	0.4004	1.2703	0.9240
0.1496	0.8504	0.3657	1.5276
0.8748	0.1252	1.5405	0.3070
0.4997	0.5003	1.1102	1.1112
0.1413	0.8587	0.3457	1.5323
0.6514	0.3486	1.3412	0.8177
0.3907	0.6093	0.9047	1.2841
0.2031	0.7969	0.4926	1.4916
0.3511	0.6489	0.8230	1.3380
0.8730	0.1270	1.5396	0.3114
		Mittel	1.0189

8. Die Control-Variate-Methode

Die Control-Variate-Methode kann eingesetzt werden, wenn das Integral einer approximierenden Funktion $\phi(x)$ bekannt ist. Das gesuchte Integral kann dann zerlegt werden in

$$\int_a^b f(x)dx = \int_a^b \phi(x)dx + \int_a^b \big(f(x) - \phi(x)\big)dx \tag{11}$$

Wählt man etwa im gegebenen Beispiel das kubische Taylor-Polynom $\phi(x) = x - \frac{x^3}{6}$ der Sinus-Funktion, so gilt

$$\int_0^{\pi/2} \phi(x)dx = \left[\frac{1}{2}x^2 - \frac{1}{24}x^4\right]_0^{\pi/2} = \frac{\pi^2}{8} - \frac{\pi^4}{384} = 0.9800 \tag{12}$$

Mit Hilfe der gegebenen 20 Zufallszahlen wird das zweite Integral in (11) über die Differenzfunktion geschätzt zu

$$\int_0^{\pi/2} \big(f(x) - \phi(x)\big)dx = 0.0151 \tag{13}$$

Die Summe aus (12) und (13) liefert gemäß (11) den Wert I = 0.9951. Der Fehler ist hier 0.0049

9. Zusammenfassung

Die Monte-Carlo-Integration ist eine interessante Anwendung für das Rechnen mit Zufallszahlen. Es ergeben sich hierbei zahlreiche Betätigungsfelder für Schülerarbeiten, Referate u.ä. Sie liefert insbesondere praktische Anwendungen zu den Varianz- und Grenzwertsätzen.

Verglichen mit der Genauigkeit, die bei numerischer Integration erzielt werden kann, ist die MC-Methode wenig effektiv. Jedoch kann, wie gezeigt wurde, mit einfachen Mitteln die Varianz reduziert werden. Hinzu kommt, daß die angegebenen Methoden der Varianz-Reduktion auch miteinander kombiniert werden können.

In der Praxis wird die MC-Integration eingesetzt, wenn nur eine geringe Genauigkeit verlangt wird oder wenn mehrdimensionale Integrale zu berechnen sind. Bei manchen physikalischen Simulationen stellt sie sogar die einzige Integrationsmethode dar, da die Stützstelle-Methoden der Numerik dort versagen. Ein Beispiel für ein einfaches mehrdimensionales Integral ist

$$\int_0^1 \int_0^1 \int_0^1 e^{x+y+z}\, dxdydz = e^3 - 3e^2 + 3e - 1 = 5.0732$$

Die MC-Methode liefert hier bei 40 Funktionsauswertungen des Integranden (also mit den ersten 120 Zufallszahlen des angegebenen Generators) den Wert 4.9879.

Den beiden Gutachtern danke ich für die wertvollen Hinweise.

Literatur

Hengartner, W.; Theodorescu, R. (1978): *Einführung in die Monte-Carlo-Methode*. München: Hanser

Ermakow, S.M. (1975): *Die Monte-Carlo-Methoden und verwandte Fragen*. München: Oldenbourg

Frühwirth, R.; Regler, M. (1983): *Monte-Carlo-Methoden*. Mannheim: Bibliographisches Institut

Sobol, I.M. (1971): *Die Monte-Carlo-Methode*. Berlin: VEB Deutscher Verlag der Wissenschaften