

7.5.2 Integrationsalgorithmen

Für ein 1-dimensionales Integral der Funktion $f(x)$ über dem Intervall $[0, 1]$ wird dieses Integral durch

$$\int_0^1 f(x) dx \approx \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n f(x_i)$$

angenähert. Dabei sind die x_i gleichverteilte Zufallszahlen aus dem Intervall $[0, 1]$. Der Fehler ist dabei $O(1/\sqrt{n})$. Dies ist nicht so gut wie gute Standardalgorithmen. Aber für höhere Dimensionen wird das besser. ZB ist

$$\int_0^1 \int_0^1 \int_0^1 f(x, y, z) dx dy dz \approx \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n f(x_i, y_i, z_i)$$

dabei sind die (x_i, y_i, z_i) gleichverteilte Zufallszahlen aus dem Einheitskubus.

Wir können zwei Zugänge zur MC–Integration unterscheiden (die natürlich zueinander in Relation stehen)

Stochastische Quadratur

Ein beliebiges Intervall $[a, b]$ teilen wir in N äquidistante Unterintervalle auf, so dass jedes dieser die Länge $\Delta x = (b - a)/N$ besitzt. Dann ist die Quadraturformel für eine Funktion $f(x)$

$$\int_a^b f(x) dx \approx \sum_{i=1}^N \Delta x_i f(x_i) = \sum_{i=1}^N \Delta x f(x_i) = \frac{b - a}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i) = (b - a) \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i)$$

Es ist also der Mittelwert der Funktion über die Stützstellen multipliziert mit der Intervalllänge. Da die Reihenfolge keine Rolle spielt, können wir die Stützstellen auch zufällig (gleichverteilt) im Bereich $[a, b]$ auswürfeln. Dabei muss gesichert sein, dass keine Stützstelle mehrfach erzeugt wird. (Das wird aber durch die Eigenschaft der Zufallszahlen abgesichert). Wenn die Zahl der Stützstellen gegen unendlich geht, dann werden auch die Intervalle Δx_i gleich lang werden. Bezeichnen wir die Menge der Zufallszahlen aus $[a, b]$ mit $\mathcal{X}_{[a,b]}$ dann erhalten wir

$$\int_a^b f(x) dx \approx (b - a) \frac{1}{N} \sum_{x_i \in \mathcal{X}_{[a,b]}} f(x_i)$$

Für höhere Dimensionen wird das verallgemeinert. Also zB

$$\int_0^5 f(x) dx \approx \frac{5}{n} \sum_{i=1}^n f(x_i), \quad x_i \in \mathcal{X}_{[0,5]}$$

$$\int_2^5 \int_1^6 f(x, y) dx dy \approx \frac{15}{n} \sum_{i=1}^n f(x_i, y_i), \quad x_i \in \mathcal{X}_{[2,5]}, y_i \in \mathcal{X}_{[1,6]}$$

Allgemein über ein Gebiet A in einem n -dimensionalen Raum

$$\int_A f(x) d^n x \approx (\text{Mass}(A)) \times (\text{Mittel von } f \text{ ueber } N \text{ Tupel von Zufallszahlen } \in A)$$

Pseudocode für ein mehrdimensionales Integral über ein Gebiet A

- Funktion $f(x_1, x_2, \dots, x_n)$
- Integrationsgebiet $A(x_1, x_2, \dots, x_n)$
- Größe des Gebietes A: $\mu(A)$ (Länge, Fläche, Volumen, ...)
- Zu berechnen ist $I(A) = \int_{A(x)} f(x_1, x_2, \dots, x_n) dx_1 dx_2 dx_3 \dots dx_n$ als MC Integral $I(A)_{MC}$
- nit: Zahl der Iterationen
- $\chi(A)$: Menge der Zufallszahlen, die in das Integrationsgebiet A fallen

```

sum = 0
do i = 1 to nit
     $(x_1, x_2, \dots, x_n) \in \chi(A)$ 
    sum = sum + f( $x_1, x_2, \dots, x_n$ )
end do
I(A)MC =  $\frac{\mu(A)}{nit}$  sum

```

Der Fehler (Standardabweichung) der MC–Integration über die Funktion f ist gegeben durch

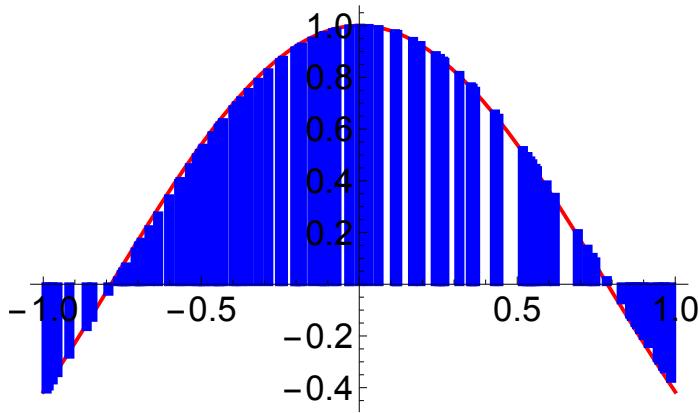
$$\sigma_f^2 = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (f(x_i) - I_f)^2$$

wobei die x_i die Zufallszahlen sind und

$$I_f = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n f(x_i)$$

das MC–Integral. Für den Fall eines Intervall $[a, b]$ gilt die entsprechende Verallgemeinerung. Damit ist der Fehler der MC–Integration $\propto 1/\sqrt{n}$, was diese für eindimensionale Integrationen unattraktiv macht. Da dieser aber unabhängig von der Dimension ist, wird dies bei hochdimensionalen Integrationen mehr als wettgemacht.

Die Grafik zeigt den Fall für $f(x) = \cos(2x)$ (rote Kurve). Berechnet werden soll das Integral $\int_{-1}^1 f(x) dx$. Zur Verdeutlichung wurden nur $n = 100$ Stützpunkte ausgewählt. Die resultierenden Rechtecke sind blau dargestellt.



Das exakte Resultat ist $\int_{-1}^1 \cos(2x) dx = 0.909297$. Für $n = 100.000$ erhalten wir

$$\int_{-1}^1 \cos(2x) dx \Big|_{MC} = 0.9128 \pm 0.0007$$

Integral als Fläche

Hier stellen wir uns auf den Standpunkt, dass das bestimmte Integral von a nach b über eine Funktion f die Fläche unterhalb der Funktionskurve ist. Wir bezeichnen diese Fläche mit \mathcal{A}_f :

$$\int_a^b f(x) dx = \mathcal{A}_f$$

Wir legen eine (möglichst einfache) die Funktion f umschliessende Fläche \mathcal{A}_{U_f} fest. Dann würfeln wir über diese Fläche N gleichverteilte Paare (x_i, y_i) aus. Die Zahl der Paare, für welche gilt

$$y_i \leq f(x_i)$$

sei N_f . Es gilt natürlich $N_f \leq N$. Dann erhalten wir im Limes $N \rightarrow \infty$

$$\frac{\mathcal{A}_{U_f}}{\mathcal{A}_f} = \frac{N}{N_f}$$

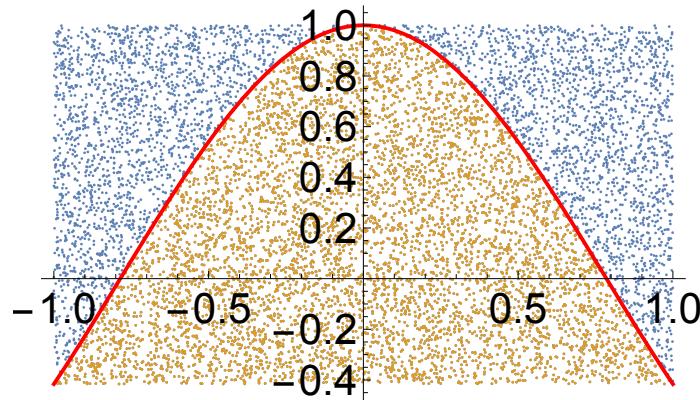
Wegen $\int_a^b f(x) dx = \mathcal{A}_f$ bekommen wir für endliches (aber möglichst großes) N

$$\int_a^b f(x) dx \approx \mathcal{A}_{U_f} \frac{N_f}{N}$$

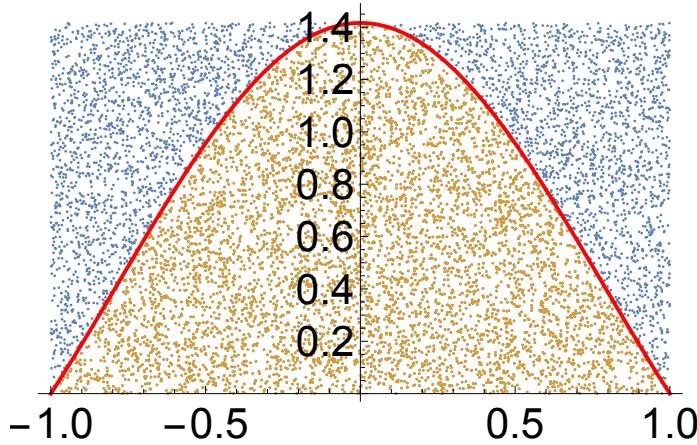
Die Grafik zeigt den Fall für $f(x) = \cos(2x)$ (rote Kurve) und das Integral $\int_{-1}^1 f(x) dx$. Die Fläche \mathcal{A}_{U_f} ist das Rechteck mit der linken unteren (rechten oberen) Ecke

$$((x_{min}, f(x)_{min}), (x_{max}, f(x)_{max})) = ((-1, \cos(-2)), (1, \cos(0))$$

. Die Gesamtzahl N der Punkte sind blau+braun, die braunen sind die N_f Punkte.



Eine Besonderheit ist hier, dass die Funktion negative Werte besitzt. Damit ist das Integral nicht die naive Fläche, sondern man muss die linken und rechten Bereiche abziehen. Man erreicht das, indem man die Funktion um den Wert $\Delta f = -\cos(-2)$ nach oben verschiebt



Nun hat man eine vollständig positive Funktion. Zu dem MC–Resultat muss man dann den Wert $(x_{max} - x_{min}) \times \Delta f$ wieder addieren. Das exakte Resultat ist ja $\int_{-1}^1 \cos(2x)dx = 0.909297$. Für $N = 100.000$ Punkte erhält man den Wert $\mathcal{A}_f = 0.911096$. Also einen relativen Fehler von etwa 0.8%.

Importance sampling

In Abhängigkeit von der zu integrierenden Funktion kann der Fehler der Berechnung sehr groß sein. Ein Beispiel ist die Integration über eine Funktion, die über einen scharfen peak verfügt. Die normale MC–Methode würde hier sehr viele Punkte verwenden, die nicht unter der Funktion liegen \Rightarrow Verschwendung von Rechenaufwand. Zudem wären die Schwankungen sehr groß !

In diesem Fall ist es weitaus günstiger aus einer Verteilung $p(x)$ auszuwählen, die der Form nach der Funktion $f(x)$ entspricht.

$$\int f(x) dx = \int \frac{f(x)}{p(x)} p(x) dx \quad (*)$$

Die Funktion $\frac{f(x)}{p(x)}$ ist nun relativ flach und damit besser integrierbar. Die Auswahl nach $p(x)$ geschieht aus einer Gleichverteilung wie oben dargelegt. Dann wird (*) zu

$$\int f(x) dx = \int \frac{f(x)}{p(x)} p(x) dx = \int \frac{f(x(y))}{p(x(y))} dy$$

wobei die Beziehung

$$p(x(y))dx = dy$$

verwendet wurde. Hier sind dann die y gleichverteilt.

Beispiel

$$f(x) = x^{-1/3} + x/10 \quad I_{ex} = \int_0^1 f(x) dx = 1.55$$

Wir nehmen als formgleiche WK-Verteilung

$$p(x) = \frac{2}{3}x^{-1/3}$$

Die nach $p(x)$ verteilten Zufallszahlen erhalten wir aus gleichverteilten y durch die Transformation

$$F(x) = \int_0^x p(x') dx' = x^{2/3}$$

Damit erhalten wir aus y die p -verteilten durch F^{-1}

$$x(y) = y^{3/2}$$

Das Integral wird nun berechnet

$$\begin{aligned} I &= \int_0^1 \frac{x(y)^{-1/3} + x(y)/10}{\frac{2}{3}x(y)^{-1/3}} dy \\ &\approx \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{x(y_i)^{-1/3} + x(y_i)/10}{\frac{2}{3}x(y_i)^{-1/3}} \end{aligned}$$

(s. notebook)

7.5.3 Ein Beispiel

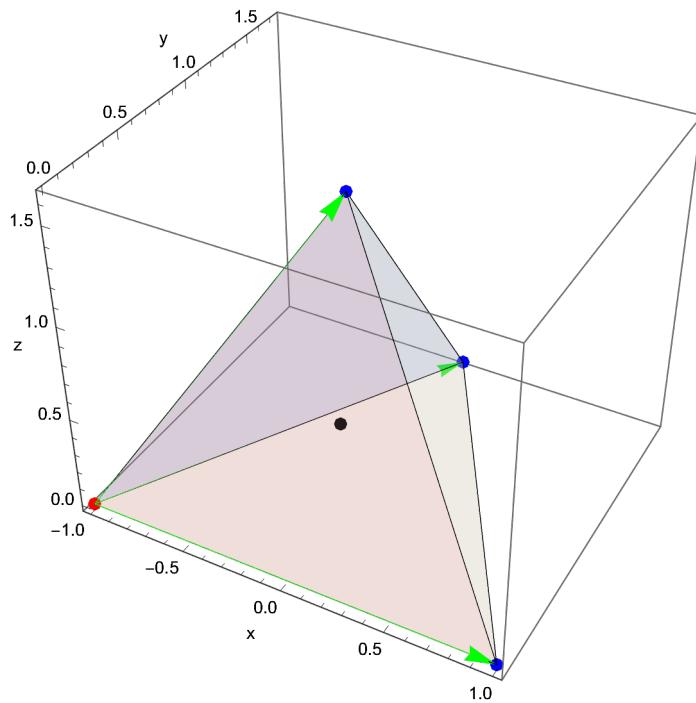
Als Beispiel wollen wir ein dreidimensionales Integral über das Volumen einen regelmäßigen Tetraeders berechnen. Dazu verwenden wir das MC Integrationspaket **Vegas** von Lepage. Es ist in vielen Standardsprachen implementiert, so auch in C oder Python. **Vegas** stellt in vieler Hinsicht den state-of-the-art der MC Integration dar. Wir verwenden hier nur die Basisfunktionalität.

Ein Hauptproblem besteht (wie in allen MC Integrationsprogrammen) darin, die gewürfelten Punkte zu bestimmen, welche in das Integrationsgebiet fallen. Dazu

gehört ein wenig Geometrie. Konkret sei der Tetraeder durch die vier Punkte P_i

$$\begin{aligned} h_d &= \frac{3}{4}a \\ h_p &= \frac{2}{3}a \\ P_1 &= \left(-\frac{1}{2}a, 0, 0\right) \\ P_2 &= \left(\frac{1}{2}a, 0, 0\right) \\ P_3 &= \left(0, h_d, 0\right) \\ P_4 &= \left(0, \frac{1}{3}h_d, h_p\right) \end{aligned}$$

gegeben. Wir wählen $a = 2$. Der Tetraeder hat dann die Form



Der rote Punkt ist P_1 , die grünen Pfeile sind die Vektoren von P_1 zu den anderen drei Eckpunkten

$$\vec{v_{12}} = P_2 - P_1, \quad \vec{v_{13}} = P_3 - P_1, \quad \vec{v_{14}} = P_4 - P_1$$

Der schwarze Punkt in der Mitte soll einen Punkt im Inneren des Tetraeders darstellen. Der MC Algorithmus erzeugt (oft) gleichverteilte Zufallszahlen - hier also 3D Punkte

- aus einem vorgegebenen Gebiet G , welches das zu integrierende Volumen V , über welches integriert werden soll, natürlich einschließen muss. Die Kunst besteht nun darin, das Gebiet G so zu wählen, dass $V \subseteq G$ und $V \sim G$ gelten. (vgl. Importance sampling). Im vorliegenden Fall wird diesem wichtigen Aspekt keine so große Rolle gegeben.

Wie wird nun abgesichert, dass von den ausgewählten Punkten nur die beitragen, welche im Tetraeder liegen? Dazu verwenden wir den Fakt, dass die Vektoren $\vec{v_{12}}, \vec{v_{13}}, \vec{v_{14}}$ eine Basis im 3D Raum bilden. Ein beliebiger Punkt P hat also die Darstellung

$$P = P_1 + r \vec{v_{12}} + s \vec{v_{13}} + t \vec{v_{14}}, \quad r, s, t \in \mathcal{R}$$

Geometrische Überlegungen zeigen, dass die Bedingungen dafür, dass P im Tetraeder liegt, wie folgt lauten

$$r > 0, s > 0, t > 0, r + s + t < 1$$

Damit ist die Prozedur klar

- Wähle zufällig einen Punkt $P_{rand} \in G$ aus.
- Löse das Gleichungssystem $P_{rand} = P_1 + r \vec{v_{12}} + s \vec{v_{13}} + t \vec{v_{14}}$ nach r, s, t auf.
- Wenn die Lösung (r, s, t) die obigen Bedingungen erfüllt, dann verwende den Punkt, anderenfalls nicht.

Das folgende jupyter notebook zeigt die Berechnung des Volumens. (Die Berechnung des Integrals über eine Funktion ist auskommentiert.) Da die Formel für das Volumen bekannt ist

$$V_{tetraeder} = \frac{\sqrt{2}}{12} a^3$$

kann man vergleichen.