單元 3: 以隨機數近似積分值
(課本 §3.2)

設函數 $g(x)$ 滿足

$$\theta = \int_0^1 g(x)dx$$

問 1. 如何以機率的方法近似 θ?

答 1. 可採用下述的蒙地卡羅法 (Monte Carlo Approach), 其理論基礎爲

強大數法則 (SLLN, Strong Law of Large Numbers). 若隨機變數 $X_1, X_2, \ldots$ 爲獨立同分布且共同的期望值 (mean) 爲 μ (有限或無限), 則

$$P\left(\lim_{n\to\infty} \frac{X_1 + X_2 + \cdots + X_n}{n} = \mu\right) = 1$$

亦即, 幾乎確定, 在長期觀察 (執行) 下, 獨立同分布隨機變數的 (算數) 平均值會收斂到其共同的期望值.

註. 上述中的

“幾乎確定” 相當於 “機率等於 1”

以及

$$“在長期觀察下” 相當於 “當 \ n \ 夠大時”$$

應用. 令隨機變數

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

亦即, X 的 pdf (機率密度函數)

$$f(x) = \begin{cases} 1, & 0 < x < 1 \\ 0, & \text{其它} \end{cases}$$

則

$$\begin{aligned} E[g(X)] &= \int_{-\infty}^{\infty} g(x) f(x) dx \\ &= \int_0^1 g(x) dx = \theta \end{aligned}$$

註. 上述的重點或關鍵乃在於

$$\theta = E[g(X)]$$

其中

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

亦即, 欲求的函數積分值 θ 可表示成在 $(0,1)$ 上均勻分布的隨機變數 X 的函數的期望值.

因此, 若隨機變數

$$X_1, X_2, \ldots \overset{\text{iid}}{\sim} \text{unif}(0,1)$$

則

$$g(X_1), g(X_2), \ldots \overset{\text{iid}}{\sim} g(X)$$

則由 SLLN, 幾乎確定地, 當 $n \to \infty$ 時,

$$\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} g(X_i) \to E[g(X)] = \theta$$

此乃所謂的蒙地卡羅法. 故, 得如下可執行的

演算法:

(1) 生成夠多的仿隨機數

$$x_1, x_2, \ldots, x_n$$

亦即, n 個獨立且 unif$(0,1)$ 分布的隨機變數的近似值.

(2) 以

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

例 1. 若 $g(x) = e^x$, 則

$$\int_0^1 e^x dx = e - 1$$

可由程式估計.

練習題. 試以不同的 n (如, $n = 1000$, 3000, 10000, ...) 求近似值, 且與

$$e - 1 \approx 1.71828$$

比較.

問 2. 如何求

$$\theta = \int_a^b g(x)dx$$

的估計值?

答 2. 根據上述的蒙地卡羅法的重點或關鍵, 設法將 θ 表示成一個在 $(0,1)$ 上均勻分布的隨機變數的函數的期望值, 亦即, 將 θ 表成

$$\theta = E[h(X)]$$

其中

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

且 $h(x)$ 爲某一適當的函數. 經由變數變換

$$y = \frac{x-a}{b-a}$$

得

$$x = a + (b-a)y$$

且

$$dx = (b-a)dy$$

以及

$$\begin{aligned} x = a &\Rightarrow y = 0 \\ x = b &\Rightarrow y = 1 \end{aligned}$$

故,

$$\begin{aligned} \theta &= \int_a^b g(x)dx \\ &= \int_0^1 g(a+(b-a)y)(b-a)dy \\ &= E[h(Y)] \end{aligned}$$

其中

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

且

$$h(y) = (b-a)g(a+(b-a)y)$$

因此, 對應的

演算法:

(1) 生成仿隨機數

$$y_1, y_2, \cdots, y_n$$

(2) 以

$$\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(b-a)g(a+(b-a)y_i) \approx \int_a^b g(x)dx$$

問 3. 如何求

$$\theta = \int_0^\infty g(x)dx$$

的估計值?

答 3. 經由變數變換

$$y = \frac{1}{x+1}$$

得

$$x = \frac{1}{y} - 1$$

且

$$dx = -\frac{1}{y^2} dy$$

以及

$$\begin{aligned} x = 0 &\ \Rightarrow\ y = 1 \\ x = \infty &\ \Rightarrow\ y = 0 \end{aligned}$$

故,

$$\begin{aligned} \theta &= \int_0^\infty g(x)dx \\ &= \int_1^0 g\left(\frac{1}{y} - 1\right)(-1)\frac{1}{y^2}dy \\ &= \int_0^1 \frac{g\left(\frac{1}{y} - 1\right)}{y^2}dy \\ &= E[h(Y)] \end{aligned}$$

其中

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

且

$$h(y) = \frac{g\left(\frac{1}{y} - 1\right)}{y^2}$$

因此, 對應的演算法如下.

演算法:

(1) 生成 n 個仿隨機數

$$y_1, y_2, \dots, y_n$$

(2) 以

$$\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\frac{g\left(\frac{1}{y_i}-1\right)}{y_i^2} \approx \int_0^\infty g(x)dx$$

問 4. 如何求 n 重積分

$$\theta = \int_0^1 \cdots \int_0^1 g(x_1, \dots, x_n)dx_1 \cdots dx_n$$

的近似值?

答 4. 令隨機變數

$$X_1, \dots, X_n \overset{\text{iid}}{\sim} \text{unif}(0,1)$$

則它們的 joint pdf (聯合機率密度函數)

$$f(x_1,\ldots,x_n)=\begin{cases}1, & \text{若 } 0\le x_i\le 1, i=1,\ldots,n\\ 0, & \text{其它}\end{cases}$$

且

$$\begin{aligned}
&E[g(X_1,\ldots,X_n)]\\
&= \int_{-\infty}^{\infty}\cdots\int_{-\infty}^{\infty} g(x_1,\ldots,x_n)\cdot\\
&\qquad\qquad f(x_1,\ldots,x_n)dx_1\cdots dx_n\\
&= \int_0^1\cdots\int_0^1 g(x_1,\ldots,x_n)dx_1\cdots dx_n\\
&= \theta
\end{aligned}$$

註. 上述近似多重積分值的關鍵或重點乃在於

$$\theta=E[g(X_1,\ldots,X_n)]$$

其中

$$X_1,\ldots,X_n \overset{\text{iid}}{\sim} \text{unif}(0,1)$$

亦即, 欲求的 n 變量函數積分值可表成在 $(0,1)^n$ 上均勻分布的隨機向量 $(X_1,\ldots,X_n)$ 的函數的期望值.

因此, 若隨機向量

$$X_1^1,\ldots,X_n^1 \overset{\text{iid}}{\sim} \text{unif}(0,1)$$

$$X_1^2, \ldots, X_n^2 \overset{\text{iid}}{\sim} \text{unif}(0,1)$$

$$\vdots$$

$$X_1^k, \ldots, X_n^k \overset{\text{iid}}{\sim} \text{unif}(0,1)$$

爲 k 組相互獨立的隨機向量, 則對於 $1 \le i \le k$,

$$g(X_1^i, \ldots, X_n^i) \overset{\text{iid}}{\sim} g(X_1, \ldots, X_n)$$

且由 SLLN, 幾乎確定地, 當 $k \to \infty$ 時,

$$\frac{1}{k}\sum_{i=1}^{k} g(X_1^i, \ldots, X_n^i) \to E[g(X_1, \ldots, X_n)] = \theta$$

故得如下對應的演算法.

演算法:

(1) 生成 k 組 (每組 n 個) 仿隨機數

$$x_1^i, \ldots, x_n^i, 1 \le i \le k$$

(2) 以

$$\frac{1}{k}\sum_{i=1}^{k} g(x_1^i, \ldots, x_n^i)$$
$$\approx \quad \theta = \int_0^1 \cdots \int_0^1 g(x_1, \ldots, x_n) dx_1 \cdots dx_n$$

例 2. 試估計 π.

<解> 令隨機變數

$$X, Y \overset{\text{iid}}{\sim} \text{unif}[-1, 1]$$

亦即, X 的 pdf

$$f(x) = \begin{cases} \frac{1}{2}, & -1 \le x \le 1 \\ 0, & \text{其它} \end{cases}$$

且 Y 的 pdf

$$f(y) = \begin{cases} \frac{1}{2}, & -1 \le y \le 1 \\ 0, & \text{其它} \end{cases}$$

則隨機向量 (X, Y) 的 joint pdf

$$\begin{aligned} f(x, y) &= f(x)f(y) \\ &= \begin{cases} \frac{1}{4}, & -1 \le x \le 1, -1 \le y \le 1 \\ 0, & \text{其它} \end{cases} \end{aligned}$$

亦即, 隨機向量 (X, Y) 在

$$\{(x, y) : -1 \le x \le 1, -1 \le y \le 1\}$$

上均勻分布, 如圖示. 因此,

$$P(X^2 + Y^2 \le 1) = P((X, Y) \in C) \qquad (1)$$

其中 C 爲單位圓碟, 如圖示.

接著根據一個在機率與統計課程中常用到的結果

$$P((X,Y)\in A)=\iint_A f(x,y)dA$$

亦即, 隨機向量 (X,Y) 落在區域 A 中的機率等於其 joint pdf 在 A 上的二重積分, 由 (1) 式得

$$\begin{aligned} P(X^2+Y^2\le 1) &= \iint_C f(x,y)dA \\ &= \iint_C \frac{1}{4}dA \\ &= \frac{1}{4}\cdot(C \text{ 的面積}) \\ &= \frac{\pi}{4} \end{aligned}$$

由此得

$$\pi=4P(X^2+Y^2\le 1)$$

令

$$I(x,y)=\begin{cases} 1, & x^2+y^2\le 1 \\ 0, & \text{其它} \end{cases}$$

則根據隨機變數的函數的期望值公式,

$$\begin{aligned} E[I(X,Y)] &= 1\cdot P[I(X,Y)=1] \\ &= P(X^2+Y^2\le 1) \\ &= \frac{\pi}{4} \end{aligned} \tag{2}$$

又根據上述註解中近似多重積分值的重點，需要設法將 $\frac{\pi}{4}$ 表成 $E[h(U_1, U_2)]$，其中

$$U_1, U_2 \overset{\text{iid}}{\sim} \text{unif}(0,1)$$

且 $h(u_1, u_2)$ 爲某一適當的函數，如下述．首先，令

$$U_1 = \frac{1}{2}(X+1)$$

且

$$U_2 = \frac{1}{2}(Y+1)$$

則

$$U_1, U_2 \overset{\text{iid}}{\sim} \text{unif}(0,1)$$

此乃因爲根據變數變換

$$u_1 = \frac{1}{2}(x+1)$$
$$u_2 = \frac{1}{2}(y+1)$$

得

$$x = 2u_1 - 1$$
$$y = 2u_2 - 1$$

且 U_1 的 pdf

$$g(u_1) = f(x)\frac{dx}{du_1} = \frac{1}{2}\cdot 2 = 1,\ 0 \le u_1 \le 1$$

亦即,

$$U_1 \sim \text{unif}(0,1)$$

同理, U_2 的 pdf

$$g(u_2) = f(y)\frac{dy}{du_2} = \frac{1}{2}\cdot 2 = 1,\ 0 \le u_2 \le 1$$

亦即,

$$U_2 \sim \text{unif}(0,1)$$

此外, 因爲 X 與 Y 相互獨立, 故 U_1 與 U_2 亦相互獨立. 接著, 根據上述 U_1 與 U_2 的定義以及 (2) 式, 得

$$\begin{aligned}\frac{\pi}{4} &= E[I(X,Y)] \\ &= E[I(2U_1-1, 2U_2-1)] \\ &= E[h(U_1,U_2)]\end{aligned}$$

其中

$$U_1, U_2 \overset{\text{iid}}{\sim} \text{unif}(0,1)$$

且

$$\begin{aligned}&h(u_1,u_2) \\ &= I(2u_1-1, 2u_2-1) \\ &= \begin{cases} 1, & (2u_1-1)^2 + (2u_2-1)^2 \le 1 \\ 0, & \text{其它} \end{cases}\end{aligned}$$

最後, 得對應的演算法如下.

演算法:

(1) 生成 k 組仿隨機數

$$(u_1^i, u_2^i),\ i = 1, \ldots, k$$

(2) 以

$$\begin{aligned}
&\frac{1}{k}\sum_{i=1}^{k} h(u_1^i, u_2^i) \\
&= \frac{1}{k} \cdot [\text{滿足 } (2u_1^i - 1)^2 + (2u_2^i - 1)^2 \leq 1 \\
&\qquad\qquad \text{的 } i \text{ 的個數}] \\
&\approx \frac{\pi}{4}
\end{aligned}$$

練習題: 試以不同的 k 求 π 的近似值.