Sandsynlighedsbaserede metoder

– Monte Carlo-metoden

Daniel Kjær

I sidste udgave af FAMØS kunne læseren finde første halvdel af en todelt artikelserie om sandsynlighedsbaserede metoder under afsnittet med titlen *»Sandsynlighedsbaserede metoder«* med undertitlen *»Pseudotilfældige tal«*. I denne artikel præsenterede forfatteren flere fundamentale begreber for pseudotilfældige tal-generatorer fra et ergodeteoretisk synspunkt.

Den foreliggende artikel er den anden halvdel i serien og denne artikel omhandler den egentlige Monte Carlo-metode. De problemer vi i det følgende vil betragte er kendetegnet ved, at de er meget enkle og fremstillingen af emnet kræver kun et indledende kendskab til målteori.

Monte Carlo-metodens generelle idé og oprindelse

Inspiration til numeriske metoder kan springe fra alle mulige uforventede kilder. *Simuleret udglødning* har taget sit navn fra metallurgien (læren om metallers fremstilling, egenskaber og bearbejdning) og *splines* blev først taget i anvendelse af tekniske skitsetegnere. På en tilsvarende façon er Monte Carlo-metoden rodfæstet i hazardspillet. Og hvem føler ikke en slags fjernt ekko af noget glamourøst ved navnet Monte Carlo-metoden?

Selve navnet er afledt af byen Monte Carlo i fyrstendømmet Monaco. Byen er berømt verden over for sit grand casino, *»Casino de Monte-Carlo«*, et ikon for industrien for hazardspil. Det korte af det lange er, at Monte Carlo-metoden ikke kan hjælpe én med at vinde i roulette; metoden er end ikke et forsøg på det.

Monte Carlo-metoden er en numerisk metode til løsningen af matematiske problemer ved hjælp af simulation.

Monte Carlo-metodens teoretiske fundament, i særdeleshed de store tals lov, har længe været kendt. Men siden simulation af stokastiske variable per håndkraft er en svært møjsommelig proces, har Monte Carlo-metoder været praktisk umulige at udføre uden hjælp fra en computer. Det er derfor ikke overraskende, at Monte Carlo-metoden som universelt anvendt numerisk teknik er snævert forbundet med udbredelsen af computeren.

Monte Carlo-metodens alment accepterede oprindelsesdag er 1949, hvor en artikel under overskriften »*The Monte Carlo Method*« dukkede op. De amerikanske matematikere Jersey Neyman og Stanislaw Ulam betragtes som værende ophavsmændene til denne artikel. I Sovjetunionen publiceredes de første artikler om Monte Carlo-metoden i 1955 og 1956 af V. V. Chavchanidze, Yu. A. Schreider og V. S. Vladimirov.

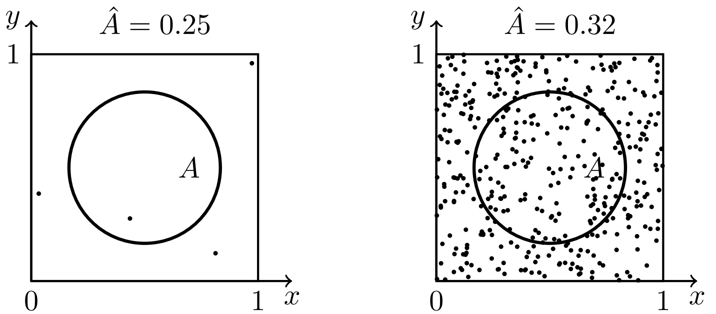
For hver ny generation af computere finder Monte Carlo-metoden nye anvendelsesområder.

Differentia specifica og et simpelt eksempel

Vores udgave af Monte Carlo-metoden er kendetegnet ved, for det første, den beregningsmæssige enkle struktur af algoritmen. Algoritmen består i almindelighed af en proces til produktionen af en tilfældig hændelse. Processen gentages $n \in \mathbb{N}$ gange, med hvert forsøg uafhængigt af de forrige og resultaterne bruges til dannelsen af et gennemsnit.

Et andet særkende ved metoden er, som hovedregel, at fejlen fra udregningen er proportional med $\sqrt{1/n}$, hvor n er antallet af forsøg. For at opnå høj præcision må man altså have et stort antal gentagelser (for at at formindske fejlen med en faktor 10 er det nødvendigt at øge n med en faktor 100). Lad os illustrere metoden med et simpelt eksempel.

Eksempel 1 (Hit-or-Miss Integration) Forestil dig, at vi har brug for at udregne arealet, A, af en figur i planen begrænset af enhedskvadratet. Det skal principielt være en kompliceret figur, før det kommer til sin ret at sætte Monte Carlo-metoden i anvendelse, men af hensyn til bekvemmelighed lader vi figuren være en cirkel som vist i figur 1.



Figur 1 Approksimation af arealet $A = 0.35$.

Vælg tilfældigt n punkter i kvadratet og betegn ved n' antallet af punkterne, der falder indenfor cirklen. Det er fra figuren klart, at cirklens areal approksimativt er lig med n'/n. Jo større n, desto bedre approksimation.

I skemaet til venstre ser vi, at 1 af 4 punkter er faldet indenfor cirklen, så vores estimat for cirklens areal er $n'/n = 1/4 = 0.25$. I skemaet til højre er 128 af 400 punkter faldet indenfor cirklen, så vores estimat for cirklens areal er $n'/n = 128/400 = 0.32$. Cirklens faktiske areal er lig med $A = 0.35$.

Observér, at metoden til estimation af arealet A kun er gyldig, når de tilfældige punkter ikke blot er 'tilfældige punkter' i enhedskvadratet, men faktisk er 'ligeligt fordelt' på hele enhedskvadratet.

For at kunne replikere eksemplet kræves altså en metode til produktionen af ligefordelte stokastiske variable i enhedskvadratet. Dette skridt består i virkeligheden i at kalde en subrutine i et computerprogram, en s.k. *pseudotilfældig tal-generator*, som udfører den bestemte opgave at producere visse følger af tal, der til ethvert praktisk formål er uskelnelige fra udfald af ligefordelte stokastiske variable. Denne frembringelsesproces blev beskrevet i detaljer i sidste udgave af FAMØS i artiklen *»Pseudotilfældige tal«*.

Simple sandsynlighedsbaserede modeller

Fraktiltransformation metoden

Vi beskriver i dette afsnit en simpel model til frembringelsen af værdier af en stokastisk variabel med en given sandsynlighedsfordeling.

Definition 2 Lad $(\Omega, \mathfrak{F}, P)$ være et sandsynlighedsfelt. Lad X være en reel stokastisk variabel på Ω og lad P_X være fordelingen af X på $(\mathbb{R}, \mathfrak{B}_{\mathbb{R}})$. Ved p-fraktilerne hørende til P_X for et $p \in (0,1)$ forstås mængden

$$\left\{x \in \mathbb{R} \colon \lim_{y \uparrow x} P_X((-\infty, y]) \leqslant p \leqslant P_X((-\infty, x])\right\}.$$

Et element i mængden kaldes en p-fraktil for P_X. Ved en fraktilfunktion hørende til P_X mener vi en funktion q på $(0,1)$ ind i $\mathbb{R}$ således at for alle $p \in (0,1)$, så er $q(p)$ en p-fraktil for P_X.

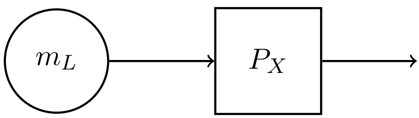
Vigtigheden af følgende sætning er ikke til at tage fejl af. Sætningen understreger den centrale rolle, som ligefordelingen spiller i simulationsmodellering.

Sætning 3 *Lad* $(\Omega, \mathfrak{F}, P)$ *være et sandsynlighedsfelt. Lad* X *være en reel stokastisk variabel på* Ω*, lad* P_X *være fordelingen af* X *på* $(\mathbb{R}, \mathfrak{B}_{\mathbb{R}})$ *og lad* q *være en fraktilfunktion hørende til* P_X*. Betragt sandsynlighedsfeltet* $((0,1), \mathfrak{B}_{(0,1)}, m_L)$*, hvor* m_L *er Lebesgue målet på Borel* σ*-algebraen* $\mathfrak{B}_{(0,1)}$ *af delmængder af* $(0,1)$*, og lad* U *være en stokastisk variabel på* Ω *ind i* $(0,1)$ *med fordeling* m_L*. Da gælder, at*

$$P_X = (q \circ U)(P).$$

Bevis. Se [3]. □

Lad X være en reel stokastisk variabel på et bagvedliggende sandsynlighedsfelt $(\Omega, \mathfrak{F}, P)$ og lad q være en fraktilfunktion hørende til fordelingen P_X. Frembringelsesprocessen af stokastiske variable med denne fordeling er sammensat som en serieforbindelse af to delprocesser, som i figur 2.



Figur 2 Frembringelse af stokastiske variable.

Den første delproces i udarbejdelsen af input til en simulation består i, at frembringe en ligefordelt stokastisk variabel U på det ovennævnte sandsynlighedsfelt. Dernæst fokuseres på at lade den ligefordelte stokastiske variabel undergå metamorfosen til $q \circ U$.

Sætningen klargør, at denne produktionsproces faktisk giver et udfald af en stokastisk variabel med den ønskede fordeling P_X. Lad os illustrere metoden med et simpelt eksempel.

Eksempel 4 Lad $(\Omega, \mathfrak{F}, P)$ være et sandsynlighedsfelt. Lad X være positiv reel stokastisk variabel og lad for et $\lambda > 0$, $\exp(\lambda)$ være fordelingen af X på $(\mathbb{R}_+, \mathfrak{B}_{\mathbb{R}_+})$. Fraktilfunktionen q hørende til P_X er givet ved

$$q(p) = -\frac{\log(1-p)}{\lambda}, \qquad p \in (0,1).$$

1. Lad U være en ligefordelt stokastisk variabel defineret på $(\Omega, \mathfrak{F}, P)$.
2. Den stokastiske variabel $-\log(1-U)/\lambda$ på $(\Omega, \mathfrak{F}, P)$ er fordelt $\exp(\lambda)$ på $(\mathbb{R}_+, \mathfrak{B}_{\mathbb{R}_+})$.

Der findes situationer, hvor man gerne vil simulere stokastiske variable med en fordeling, hvor fordelingen er så kompliceret, at det ikke er helt enkelt at gå direkte til fraktilfunktionen.

Eksempel 5 Lad $(\Omega, \mathfrak{F}, P)$ være et sandsynlighedsfelt. Lad X være en reel stokastisk variabel og lad $N(0,1)$ være fordelingen af X på $(\mathbb{R}, \mathfrak{B}_{\mathbb{R}})$. Genkald, at fordelingsfunktionen hørende til P_X, betegnet ved Φ, er givet ved

$$\Phi(y) = \int_{(-\infty,y]} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left\{-\frac{x^2}{2}\right\} m_L(dx), \qquad y \in \mathbb{R}.$$

Da det er klart, at $\Phi \in \mathbf{C}^1(\mathbb{R})$ med positiv differentialkvotient, så er funktionen strengt voksende på $\mathbb{R}$ og en fraktilfunktion q hørende til P_X eksisterer entydigt, som den inverse af Φ.

For så vidt som fordelingsfunktionen Φ ikke kan gives et analytisk udtryk (uden brug af specielle funktioner), så kan fraktiltransformationsmetoden ikke direkte anvendes.

Eksemplet klargør, at alternative metoder til frembringelse af normalfordelte variable må tages i brug. Vi nævner i flæng: *Numerisk approksimation* af q, *Box-Muller*, *Acceptance-Rejection*, etc.

Sætning 6 (Den centrale grænseværdisætning) *Lad* $\{X_n : n \in \mathbb{N}\}$ *være en familie af reelle stokastiske variable på et sandsynlighedsfelt* $(\Omega, \mathfrak{F}, P)$*. Antag, at følgende tre betingelser er opfyldt.*

1. *Familien* $\{X_n : n \in \mathbb{N}\}$ *er et uafhængigt system af stokastiske variable på* $(\Omega, \mathfrak{F}, P)$*.*
2. *Der findes et sandsynlighedsmål* Q *på* $(\mathbb{R}, \mathfrak{B}_{\mathbb{R}})$ *således at* Q *er fordelingen af* X_n *på* $(\mathbb{R}, \mathfrak{B}_{\mathbb{R}})$ *for ethvert* $n \in \mathbb{N}$*.*
3. *Følgende integraler eksisterer og er endelige:* $\mu \equiv \mathbf{E}(X_n)$, $\sigma^2 \equiv \mathbf{E}[(X_n - \mu)^2] > 0$, $n \in \mathbb{N}$*.*

Lad $\{Z_n : n \in \mathbb{N}\}$ *være systemet af stokastiske variable på* $(\Omega, \mathfrak{F}, P)$ *defineret ved*

$$Z_n = \frac{\sum_{k=1}^{n} X_k - n\mu}{\sigma\sqrt{n}}.$$

Da gælder, for alle $a, b \in \mathbb{R}$ *hvor* $a < b$*, at*

$$\lim_{n\to\infty} P_{Z_n}((a,b]) = \Phi(b) - \Phi(a),$$

hvor Φ *er fordelingsfunktionen hørende til fordelingen* $N(0,1)$*.*

Bevis. Se [1]. □

Eksempel 7 Lad $(\Omega, \mathfrak{F}, P)$ være et sandsynlighedsfelt. Lad X være en reel stokastisk variabel og lad $N(0,1)$ være fordelingen af X på $(\mathbb{R}, \mathfrak{B}_{\mathbb{R}})$. Fraktilfunktionen q hørende til P_X eksisterer ikke på eksplicit form.

1. Lad $\{U_n : n = 1, \dots, 12\}$ være et uafhængigt system af ligefordelte stokastiske variable defineret på $(\Omega, \mathfrak{F}, P)$. Observér, at $\mu \equiv \mathbf{E}(U_n) = 1/2$, $\sigma = \mathbf{E}[(U_n - \mu)^2]^{1/2} = 1/\sqrt{12}$.
2. Den stokastiske variabel $\sum_{k=1}^{12} U_k - 6$ på $(\Omega, \mathfrak{F}, P)$ er fordelt approksimativt $N(0,1)$.

Monte Carlo-integration

Monte Carlo-integration er en numerisk metode til approksimation af integraler ved hjælp af sandsynlighedsbaserede metoder og næsten enhver Monte Carlo udregning kan betragtes som et forsøg på at approksimere integralet

$$\int_D f \, \mathrm{d}m_L,$$

for et $f \in L_1(\mathbb{R}, \mathfrak{B}_\mathbb{R}, m_L)$ og $D \in \mathfrak{B}_\mathbb{R}$, hvor m_L er Lebesgue målet på Borel σ-algebraen $\mathfrak{B}_\mathbb{R}$ af delmængder af $\mathbb{R}$. Vi ser, at integralet kan repræsenteres som en middelværdi af en stokastisk variabel.

Sætning 8 (Monte Carlo-integration) *Lad $f \in \mathcal{M}(\mathbb{R}, \mathfrak{B}_\mathbb{R})$ og lad $D \in \mathfrak{B}_\mathbb{R}$. Lad $(\Omega, \mathfrak{F}, P)$ være et sandsynlighedsfelt og lad X være en stokastisk variabel på Ω ind i D og lad P_X være fordelingen af X på $(D, \mathfrak{B}_D)$. Antag, at P_X er absolut kontinuert med hensyn til m_L og lad $p \equiv \frac{dP_X}{dm_L}$ være den Radon-Nikodym afledede af P_X med hensyn til m_L.*

1. *Der gælder, at*

$$\mathbf{E}\left[\frac{f(X)}{p(X)}\right] = \int_D f \, \mathrm{d}m_L,$$

i den forstand, at eksistensen af den ene side medfører eksistensen af den anden og lighedstegnet.

2. Dersom integralerne i 1. eksisterer og dersom $\{X_n \colon n \in \mathbb{N}\}$ *er et uafhængigt system af stokastiske variable på* Ω *ind i* D *med fælles fordeling* P_X *af* X_n *for ethvert* $n \in \mathbb{N}$*, så findes en nulmængde* Λ *i* $(\Omega, \mathfrak{F}, P)$ *således, at*

$$\lim_{n\to\infty} \frac{1}{n} \sum_{k=1}^{n} \frac{f(X_k)(\omega)}{p(X_k)(\omega)} = \int_D f \, \mathrm{d}m_L, \qquad \omega \in \Lambda^c.$$

Bevis. 1. er oplagt og 2. følger af STORE TALS STÆRKE LOV. □

Eksempel 9 (Simpel Monte Carlo-integration) Lad $\{U_n \colon n \in \mathbb{N}\}$ være et uafhængigt system af stokastiske variable på et sandsynlighedsfelt $(\Omega, \mathfrak{F}, P)$ ind i (a, b) for $a, b \in \mathbb{R}$ med $a < b$. Lad ligefordelingen på (a, b) være fordelingen af U_n for ethvert $n \in \mathbb{N}$. Lad $f \in L_1(\mathbb{R}, \mathfrak{B}_{\mathbb{R}}, m_L)$.

1. Der gælder, at

$$(b-a)\mathbf{E}\left[f(U_1)\right] = \int_{(a,b)} f \, \mathrm{d}m_L, \qquad n \in \mathbb{N}.$$

2. Der findes en nulmængde Λ i $(\Omega, \mathfrak{F}, P)$ således, at

$$(b-a) \lim_{n\to\infty} \frac{1}{n} \sum_{k=1}^{n} f(U_k)(\omega) = \int_{(a,b)} f \, \mathrm{d}m_L, \qquad \omega \in \Lambda^c.$$

Det er klart, at den ovenstående procedure for Monte Carlo-integration let lader sig generalisere til flere dimensioner. Dette generalisationsproblem overlades til læseren.

Monte Carlo-optimering

Simulation af stokastiske variable i numerisk optimering er en anden stærk og meget populær anvendelse af Monte Carlo-metoden.

Problemet er at minimere (eller maksimere) funktioner, som ofte har et stort antal dimensioner.

Lad $\mathbf{W}(\mathbb{R}^d)$, for et $d \in \mathbb{N}$, betegne samlingen af alle kontinuerte funktioner w på $\mathbb{R}^d$ ind i $\mathbb{R}$. Vores ambition i dette afsnit er at beskrive metoder til løsning af (evt. multiekstremale) optimeringsproblemer:

$$\begin{cases} \min\limits_{x \in D} w(x), & w \in \mathbf{W}(\mathbb{R}^d), \\ D \text{ kompakt}, & D \subset \mathbb{R}^d. \end{cases}$$

Mange teoretiske og praktiske problemstillinger kan modelleres indenfor denne generelle ramme.

Lemma 10 (Borel-Cantelli) *Lad $(\Omega, \mathfrak{F}, P)$ være et sandsynlighedsfelt og lad $F_n \in \mathfrak{F}$ for $n \in \mathbb{N}$. Hvis*

$$\sum_{n \in \mathbb{N}} P(F_n) < \infty,$$

så er

$$P(\cap_{n \in \mathbb{N}} \cup_{k=n}^{\infty} F_k) = 0.$$

Bevis. Se [4] □

Sætning 11 (Simpel Monte Carlo-optimering) *Lad $w \in \mathbf{W}(\mathbb{R}^d)$, for et $d \in \mathbb{N}$, være en kontinuert funktion på $\mathbb{R}^d$ ind i $\mathbb{R}$ og lad D være en kompakt delmængde af $\mathbb{R}^d$. Antag, at der findes et entydigt punkt x^* i $\mathbb{R}^d$ således, at*

$$x^* = \arg\min_{x \in D} w(x).$$

Lad $(\Omega, \mathfrak{F}, P)$ være et sandsynlighedsfelt og lad $\{X_n : n \in \mathbb{Z}_+\}$ være et uafhængigt system af d-dimensionale stokastiske variable på Ω

ind i D med fælles fordeling P_X af X_n på $(D, \mathfrak{B}_D)$ for ethvert $n \in \mathbb{Z}_+$ og antag at $\{x^*\}$ er en nulmængde i $(D, \mathfrak{B}_D, P_X)$. Lad $\{Y_n \colon n \in \mathbb{Z}_+\}$ være et system af reelle stokastiske variable på $(\Omega, \mathfrak{F}, P)$ givet ved

$$Y_n = w(X_n), \qquad n \in \mathbb{Z}_+.$$

Hvis der for ethvert $\delta > 0$ gælder, at

$$P_{Y_n}((w(x^*), w(x^*) + \delta]) > 0,$$

så findes en nulmængde Λ i $(\Omega, \mathfrak{F}, P)$ således, at

$$\lim_{n\to\infty} \min\{Y_1, \dots, Y_n\}(\omega) = w(x^*), \qquad \omega \in \Lambda^c.$$

Bevis. Siden $\{x^*\}$ er en nulmængde i $(D, \mathfrak{B}_D, P_X)$, så er $(X_n)^{-1}(\{x^*\})$ en nulmængde i $(\Omega, \mathfrak{F}, P)$ for ethvert $n \in \mathbb{Z}_+$. Men $(X_n)^{-1}(\{x^*\}) = (Y_n)^{-1}((-\infty, w(x^*)])$. Således har vi etableret, at

$$P_{Y_n}((-\infty, w(x^*)]) = 0. \tag{1}$$

Lad $\delta > 0$ være givet. Jævnfør vor antagelse har vi, at

$$P_{Y_n}((-\infty, w(x^*) + \delta]) = P_{Y_n}((w(x^*), w(x^*) + \delta]) > 0,$$

hvor lighedstegnet følger af (1). Fra dette og fra uafhængigheden af systemet $\{Y_n \colon n \in \mathbb{Z}_+\}$ har vi, at

$$P_{\min\{Y_1,\dots,Y_n\}}((w(x^*) + \delta, \infty)) = \{1 - P_{Y_n}((w(x^*), w(x^*) + \delta])\}^n$$

hvilket giver anledning til følgende geometriske række:

$$\sum_{n\in\mathbb{N}} P_{\min\{Y_1,\dots,Y_n\}}((w(x^*) + \delta, \infty)) = \frac{1 - P_{Y_n}((w(x^*), w(x^*) + \delta])}{P_{Y_n}((w(x^*), w(x^*) + \delta])}.$$

Den højre side af lighedstegnet er oplagt endelig. Fra Lemma 10 (Borel-Cantelli) har vi for ethvert $\delta > 0$, at

$$P(\cap_{n\in\mathbb{N}} \cup_{k=n}^{\infty} \{\min\{Y_1, \dots, Y_k\} \geq w(x^*) + \delta\}) = 0,$$

eller ækvivalent hermed: for ethvert $\delta > 0$, så er

$$P(\cup_{n\in\mathbb{N}} \cap_{k=n}^{\infty} \{\min\{Y_1, \dots, Y_k\} < w(x^*) + \delta\}) = 1.$$

Heraf sluttes det ønskede resultat. $\square$

Litteratur

[1] Billingsley, P., *Convergence of Probability Measures*, John Wiley & Sons, Inc., 1968.

[2] Hammersley, J. M., & Handscomb, D. C., *Monte Carlo Methods*, Methuen's Monographs on Applied Probability and Statistics, London, 1964.

[3] Hansen, E., *Measure Theory*, Institut for Matematiske Fag, Københavns Universitet, 4. udgave, 2009.

[4] Jacobsen, M., *Videregående Sandsynlighedsregning*, Institut for Matematiske Fag, Københavns Universitet, 3. udgave, 2003.

[5] Metropolis, N. & Ulam, S., *The Monte Carlo method*, J. Am. Stat. Assoc., **44**, N 247, 335–341, 1949

[6] Sobol', I. M., *A Primer for the Monte Carlo Method*, Boca Raton: CRC Press, Inc., 1994