Übungen zur Einführung in die Computerphysik

Klessen / Spurzem

Sommersemester 2008

Blatt 12 (Zusatzaufgabe zum Semesterende, Bearbeitung freiwillig)

Monte Carlo Integration – Importance Sampling

Wir haben in der Vorlesung die einfache Monte Carlo Integration kennengelernt, um für eine Funktion f deren Erwartungswert $\langle f \rangle_p$ über einer Wahrscheinlichkeitsverteilung (PDF) $p(x)$ zu berechnen:

$$\langle f \rangle_p = \int f(x)p(x)dx \approx \frac{1}{N}\sum_i^N f(x_i) \tag{0.1}$$

wobei die Zahlenfolge x_i ($x_i = 1 \ldots N$) gemäß $p(x)$ verteilt ist. Wir wollen hier den Spezialfall $p(x) \equiv 1$ voraussetzen, das heißt, das Ziel ist, das Integral über $f(x)$ mit Hilfe eines Monte Carlo Verfahrens näherungsweise zu berechnen.
Unter Importance Sampling versteht man die Einführung einer neuen PDF $g(x)$. Wir betrachten dann

$$\langle f \rangle = \int f(x)dx \equiv \int [f(x)/g(x)]g(x)dx \tag{0.2}$$

Wenn die Funktion $g(x)$ überall dort klein ist, wo auch der (modifizierte) Integrand $f(x)/g(x)$ klein ist, erhalten wir ein bevorzugtes Sampling dort, wo der Integrand wesentliche Beiträge liefert (Importance Sampling). Die Effizienz des Verfahrens hängt von der geschickten Wahl von $g(x)$ ab.
1: Berechnen Sie das Integral

$$I = \frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-y_1^2 - y_2^2)dy_1dy_2 \tag{0.3}$$

numerisch mit Hilfe von Monte Carlo Verfahren.
Verwenden Sie dabei:

- gleichverteilte Zufallszahlen im Bereich $[-a, +a]$. Variieren Sie a und die Zahl der Zufallszahlen, die Sie verwenden. Welches sind die optimalen Parameter um ein zuverlässiges Ergebnis (einfache, doppelte Genauigkeit) zu bekommen?

- Importance Sampling nach den in der Vorlesung gegebenen Funktionen (siehe unten*).

2: Importance Sampling und *Random Walk*

Teil 1: Konstruieren Sie einen stochastischen Prozeß, der die Funktion $g(x)$ aus der obigen Teilaufgabe als Gleichgewichtsverteilung hat (Metropolis-Verfahren mit Importance Sampling). Nach einem Einschwingvorgang von i Schritten speichern Sie eine Folge k von k Paaren von Zahlen ab; die Folge k ist eine stochastische Repräsentation der darunterliegenden Gleichgewichtsverteilung. Mit k läßt sich ein "Meßwert" des Integrals bestimmen. Erzeugen Sie 10, 100, 1000 solcher Folgen k und bestimmen Sie das Integral als Mittelwert der Meßwerte. Wählen Sie die Länge des Einschwingvorgangs und die Länge eines Testsamples als freie Parameter und plotten Sie den Wert des erhaltenen Integrals als Funktion der beiden Parameter.

*Zur Erinnerung:

$$y_1 = \sqrt{-2\ln x_1}\cos(2\pi x_2) \tag{0.4}$$

$$y_2 = \sqrt{-2\ln x_1}\sin(2\pi x_2) \tag{0.5}$$

mit $x_1, x_2 \in [0, 1]$.