MATEMATIČNO-FIZIKALNI PRAKTIKUM

2. naloga: Monte Carlo integracija

Pri integraciji zahtevnejsih funkcij, predvsem pa pri integraciji v več dimenzijah postanejo običajne integracijske metode zapletene ter pogosto računsko zelo počasne. Tu priskoči na pomoč statistika. Izhajamo lahko iz izreka o povprečni vrednosti (zapisan v eni dimenziji, velja v poljubno dimenzijah):

$$\int_a^b f(x)\, w(x)\, dx = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} f(x_i) = \bar{f} \tag{1}$$

kjer je w(x) verjetnostna porazdelitev norminirana na intervalu (a, b) in so x_i naključno izbrane vrednosti iz te porazdelitve v intervalu (a, b). Izrek velja točno vi limiti ko gre število meritev $N \to \infty$. Varianca (kvadrat 'napake') tako določenega povprečja je podan s formulo:

$$\sigma^2 f = \frac{\frac{1}{N}\sum\limits_{i=1}^{N} f^2(x_i) - (\frac{1}{N}\sum\limits_{i=1}^{N} f(x_i))^2}{N-1} = \frac{\overline{f^2} - \bar{f}^2}{N-1} \tag{2}$$

in pada približno s številom meritev N.

Najlažji primer je izračun ploscin in volumnov s pomočjo MC integracije. Vzemimo ploskovni primer: Na kvadratni podlagi s stranico a je lik s površino S. Verjetnostna porazdelitev točk naj bo enakomerna po površini kvadrata. Verjetnost, da točka pade v lik je kar enaka razmerju ploščin $p = S/a^2$. Funkcija f opisuje ploskev z pogojem $f = 1$, če je točka v liku in $f = 0$ drugače. Integral v izreku nam res da:

$$\int_{a^2} f(x)\, w(x)\, dx = \frac{1}{a^2}\int_S 1\, dx = \frac{S}{a^2} = p \tag{3}$$

in varianca postane

$$\sigma^2 f = \frac{p(1-p)}{N-1}, \tag{4}$$

kar ustreza binomski napaki pri velikih N kot pričakovano.

Pomembno je opažanje, da v primeru, ko območje integracije (verjetnostno porazdelitev) stisnemo na površino lika S, postane varianca enaka nič (p=1)! To ugotovitev lahko tudi posplošimo v primeru integracije poljubnih funkcij. Če bi radi izračunali integral funkcije g(x) v intervalu (a, b), uporabimo izrek o povprečni vrednosti takole:

$$\int_a^b g(x)\, dx = \int_a^b f(x)\, w(x)\, dx = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} f(x_i) = \bar{f}, \tag{5}$$

pri čemer je $f(x) = g(x)/w(x)$. V idealnem primeru bi si torej lahko izbrali w(x)=g(x), kar bi dalo f(x)=1 po celem intervalu in potemtakem varianco rezultata enako nič. V realnih primerih pa si lahko izberemo vsaj funkcijo, ki približno opisuje g(x). Pristop se imenuje 'importance sampling' (prednostno vzorčenje).

Točke x_i je v tem primeru potrebno generirati po verjetnostni porazdelitvi w(x). Za izračun algoritma je osnova naslednja formula:

$$\int_a^x w(t)\,dt = \rho \cdot \int_a^b w(t)\,dt, \tag{6}$$

ki jo je potrebno rešiti in iz nje izraziti spremenljivko x. Za nekatere porazdelitve je izračun preprost, npr $w(x) = \frac{1}{\tau}e^{-\frac{x}{\tau}}$ nam da kar:

$$x = -\tau \ln(1-\rho). \tag{7}$$

Podobno dobimo za vzorčenje Gaussove porazdelitve recept:

- pridobi dve psevdo-naključni števili ρ_1, ρ_2,
- spremenljivka x je porazdeljena po Gaussovi porazdelitvi ko:

$$x = sin(2\pi\,\rho_1)\sqrt{-2\ln\rho_2}$$

Naloge:

- S pomočjo MC integracije izračunaj ploščino krožnega izseka in volumen stožca ter opazuj padanje napake s številom izbranih točk. Primerjaj natančnost in hitrost metode z računanjem ploščine s pomočjo točk na enakomerni mreži!
- Izračunaj integral Gaussove porazdelitve s pomočjo trapezne formule in navadne MC integracije ter (dodatno) prednostnega vzorčenja, pri čemer parameter srednje vrednosti (μ) za prednostno vzorčenje spreminjaj od prave vrednosti postopoma daleč stran. Primerjaj čase integracij in računske napake!