Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего профессионального образования
Московский государственный технический университет им. Н.Э. Баумана
Факультет «Фундаментальные науки»

Лабораторная работа №7
по курсу «Вычислительная физика»
Тема: «Метод Монте Карло»
Вариант 6

Выполнили: студенты группы ФН4-72Б
Хижик А.И., Мистрюкова Л.А.
Проверил: доцент, к.физ.-мат.н.
Хасаншин Р.Х.

Москва, 2019

Оглавление

1. Теоретическая часть

1.1. Введение

В математической физике часто встречаются задачи, сводящиеся к следующему интегралу:

$$\frac{1}{\pi^2}\int_S\int_S f(\rho)dPdQ \tag{1}$$

где S – единичный шар, P, $Q \in S$, $\rho = |P-Q|$ – Предположим, что P и Q равномерно распределены в единичном шаре S. Тогда их плотности распределения равны:

$$p(P) = p(Q) = \frac{3}{4\pi}.$$

Рассмотрим сферическую систему координат (r,φ,μ), $\mu = \cos(\theta)$, $dP = -r^2 dr d\varphi d\mu$. Возьмём точку P на оси $0z$.

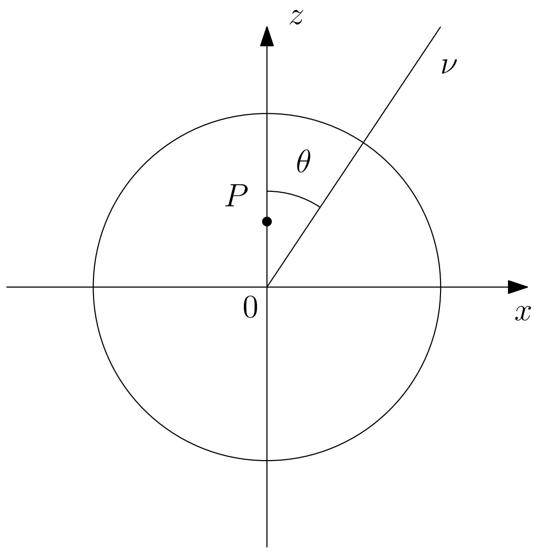

Рис. 1

$$3\int_0^{r_P} r^2 dr = \gamma_{i+1}.$$

Не теряя общности возьмём точку Q на плоскости $0xz$, т.е. при $\varphi = 0$. Для этого разыграем точку Q на произвольном направлении ν. Таким образом точка Q выбирается по следующим законам:

$$\int_{-1}^{\mu_Q}\frac{d\mu}{2} = \gamma_{i+2},$$

$$3\int_0^{r_Q} r^2 dr = \gamma_{i+3}.$$

Следовательно, $r_P = \sqrt[3]{\gamma_{i+1}}$, $\mu_Q = 2\gamma_{i+2}-1$, $r_Q = \sqrt[3]{\gamma_{i+3}}$ и $\rho = \sqrt{r_P^2 + r_Q^2 - 2r_P r_Q \mu_Q}$, $i = \overline{0, N-1}$. Для вычисления интеграла (1) определим среднее значение подынтегральной функции.

$$M\left[\frac{f(\rho)}{p(P)p(Q)}\right] = \int_S\int_S \frac{f(\rho)}{p(P)p(Q)}p(P)p(Q)dPdQ = \pi^2 I \Rightarrow I = \frac{1}{\pi^2}M\left[\frac{f(\rho)}{p(P)p(Q)}\right] = \frac{16}{9}M[f(\rho)].$$

При достаточно больших N: $M[f(\rho)] = \frac{1}{N}\sum_{i=0}^{N-1} f(\rho_i)$,

$$I \approx \overline{I} = \frac{16}{9N}\sum_{i=0}^{N-1} f(\rho_i) \tag{2}$$

Вычисление интегралов с особенностями

Особенности могут быть двух видов: особенность подынтегральной функции на ограниченной области и бесконечная область интегрирования.

В первом случае используют существенную выборку, а именно, подбирают плотность вероятности содержащую ту же особенность что и подынтегральная функция.

Во втором случае:

1. Если возможно, то с помощью преобразования координат перейти к первому случаю;
2. Отбросить часть интеграла от достаточно удалённой области;
3. Использовать существенную выборку, когда плотность вероятности достаточно быстро убывает с ростом границы области интегрирования.

Предположим, что подынтегральная функция интеграла (1) содержит особенность $\sim \rho^{-2}$. Подберем плотность вероятности пропорциональную ρ^{-2}.

Пусть независимые случайные точки P и Q распределены следующим образом: точка P равномерно распределена в шаре $p(P) = \frac{3}{4\pi}$, точку Q ищем на плоскости $0xz$, $p(Q) \sim \rho^{-2}$. Для этого рассмотрим сферическую систему координат (r, φ, μ),

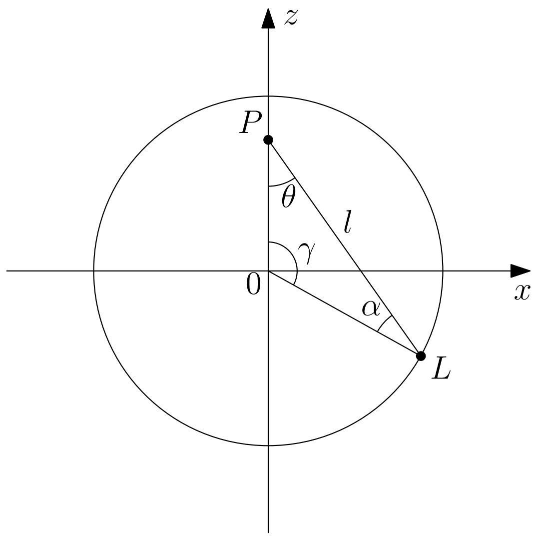

Рис. 2

$$\mu = \cos(\theta),$$

$$\int_{-1}^{\mu_Q} \frac{d\mu}{2} = \gamma_{i+2},$$

$$p(Q) = \frac{1}{4\pi l \rho^2}.$$

Используя теорему синусов, получаем

$$l = r_P \mu_Q + \sqrt{1 - r_P^2(1 - \mu_Q^2)}.$$

Предыдущие манипуляции позволяют получит следующие расчётные формулы:

$$r_P = \sqrt[3]{\gamma_{i+1}},\ \ \mu_Q = 2\gamma_i - 1,\ \ l = r_P \mu_Q + \sqrt{1 - r_P^2(1 - \mu_Q^2)},$$

$$M\left[\frac{f(\rho)}{p(P)p(Q)}\right] = \frac{16}{3} M[f(\rho)\rho^2 l],$$

$$I \approx \tilde{I} = \frac{16}{3N} \sum_{i=0}^{N-1} f(\rho_i)\rho_i^2 l_i. \tag{3}$$

1.2. Методы понижения дисперсии

Все методы и приемы рассмотренные для вычисления одномерных интегралов без затруднений переносятся на многомерный случай.

Интегрирование по части переменных

Пусть $\int_{V_P}\int_{V_Q} f(P,Q)p(P,Q)dPdQ$, где точки $P \in V_P$, $Q \in V_Q$, $p(P,Q)$ – плотность распределения.

Пусть $\tilde{p}(P) = \int_{V_Q} p(P,Q)dQ \to \tilde{f}(P)\tilde{p}(P) = \int_{V_Q} f(P,Q)p(P,Q)dQ$. Очевидно, что $I = \int_{V_P} \tilde{f}(P)\tilde{p}(P)dP$.

Утверждение: $D[\tilde{f}] \le D[f]$.

Доказательство: пусть $u(x)$, $v(x) \in \mathbb{L}_2(G)$, используем неравенство Коши-Буняковского: $|\langle u, v\rangle| \le \|u\|\|v\|$.

$$\left(\int_G u(x)v(x)dx\right)^2 \le \int_G u^2(x)dx \int_G v^2(x)dx$$

Пусть $p(P) \ge 0$ в G и $u(P), v(P) \in \mathbb{L}_2(G;p)$. Тогда

$$\left(\int_G u(P)v(P)p(P)dP\right)^2 \le \int_G u^2(P)p(P)dP \int_G v^2(P)p(P)dP,$$

,

$$\forall z \in \mathbb{R}:\ \ 0 \le \int_G [zu(P) + v(P)]^2 p(P)dP \Longleftrightarrow 0 \le az^2 + 2bz + c \Rightarrow b^2 - ac \le 0,$$

$$\tilde{f}^2(P)\tilde{p}^2(P) = \left[\int_{V_Q} f(P,Q)p(P,Q)dQ\right]^2 \le \int_{V_Q} f^2(P,Q)p(P,Q)dQ \int_{V_Q} p(P,Q)dQ,$$

$$\tilde{f}^2(P)\tilde{p}^2(P) \le \tilde{p}(P)\int_{V_Q} f^2(P,Q)p(P,Q)dQ.$$

Проинтегрируем полученное неравенство по V_P:

$$D[\tilde{f}] \le D[f].$$

Выборка по группам

$I = \int_G f(P)p(P)dP$. Пусть $G = \sum_{i=1}^m G_i \to I_i = \int_{G_i} f(P)p(P)dP,\ p_i = \int_{G_i} p(P)dP$. Введем в области G_i случайную величину $\xi^{(i)}$ с плотностью вероятности $\frac{p(P)}{p_i}$. Возьмём N_i значений случайно величины $\xi^{(i)} : \left\{\xi_k^{(i)}\right\}$. Тогда $I_i \approx \frac{p_i}{N_i} \sum_{k=1}^{N_i} f\left(\xi_k^{(i)}\right)$,

$$I \approx \sum_{i=1}^{m} \frac{p_i}{N_i} \sum_{k=1}^{N_i} f\left(\xi_k^{(i)}\right).$$

Этот метод по своей идее близок к методу существенной выборки: здесь также предлагается выбирать больше точек в более «существенных» областях, однако выбор регулируется не специально подобранной плотностью распределения, а указанием количества точек в различных областях интегрирования.

2. Постановка задачи

- Вычислить ММК интеграл $I_m = \dfrac{1}{\pi^2} \displaystyle\int_S \int_S \dfrac{dPdQ}{\rho^m}$ при $m = 1$ и $m = 2$, где S – единичный трёхмерный шар, P, $Q \in S$, $\rho = |P - Q|$, используя оценки $\overline{I} = \dfrac{16}{9N} \displaystyle\sum_{i=1}^{N} f(\rho_i)$ и $\tilde{I} = \dfrac{16}{3N} \displaystyle\sum_{i=1}^{N} f(\rho_i)\rho_i^2 l_i$. Сравнить полученные значения с точными.

3. Программа

```
#include <iostream>
using namespace std;
#include <random>
#include <cmath>

double N = 1e6;
double fun1(double dis, double m);

int main()
{
    mt19937 gen{random_device()()};
    uniform_real_distribution <double> dist(0.0, 1.0);
    double r1, mu2, r2, dis1, dis2, l;
    double sum11 = 0, sum12 = 0, sum21 = 0, sum22 = 0;
    double Integral1(2.133), Integral2(4.000);

    for (int i = 0; i < N-1; i++) {
        r1 = pow(dist(gen), 1. / 3);
        mu2 = 2 * dist(gen) - 1;
        r2 = pow(dist(gen), 1. / 3);
        dis1 = sqrt(r1*r1 + r2*r2 - 2*r1*r2*mu2);
        l = r1*mu2 + sqrt(1 - r1*r1*(1 - mu2*mu2));
        dis2 = l*dist(gen);
        sum11 += fun1(dis1, 1.);
        sum12 += fun1(dis2, 1.) * dis2*dis2 * l;
        sum21 += fun1(dis1, 2.);
        sum22 += fun1(dis2, 2.) * dis2*dis2 * l;
    }

    cout << "Number of steps: " << N << endl;

    double Integral11 = 16 * sum11 / (9*N);
    double AbsError11 = abs(Integral11 - Integral1);
    double Disp11 = N / 9 * pow(AbsError11, 2);

    cout << "m = 1\n" << "I1 = " << Integral11 << endl;
    cout << "AbsError = " << AbsError11 << endl;
    cout << "Dispersion = " << Disp11 << "\n\n";

    double Integral12 = 16 * sum12 / (3*N);
    double AbsError12 = abs(Integral12 - Integral1);
    double Disp12 = N / 9 * pow(AbsError12, 2);

    cout << "I2 = " << Integral12 << endl;
    cout << "AbsError = " << AbsError12 << endl;
    cout << "Dispersion = " << Disp12 << "\n\n";

    double Integral21 = 16 * sum21 / (9*N);
    double AbsError21 = abs(Integral21 - Integral2);
```

```
    double Disp21 = N / 9 * pow(AbsError21, 2);

    cout << "m = 2\n" << "I1: " << Integral21 << endl;
    cout << "AbsError = " << AbsError21 << endl;
    cout << "Dispersion = " << Disp21 << "\n\n";

    double Integral22 = 16 * sum22 / (3*N);
    double AbsError22 = abs(Integral22 - Integral2);
    double Disp22 = N / 9 * pow(AbsError22, 2);

    cout << "I2: " << Integral22 << endl;
    cout << "AbsError = " << AbsError22 << endl;
    cout << "Dispersion = " << Disp22 << "\n\n";
    return 0;
}
double fun1(double dis, double m)
{
    return 1 / pow(dis, m);
}
```

4. Результаты вычислений

Вычисленные значения интеграла $I_m = \dfrac{1}{\pi^2}\displaystyle\int_S\int_S \dfrac{dPdQ}{\rho^m}$ для a) $m=1$ и b) $m=2$ при использовании оценок $\overline{I} = I1 = \dfrac{16}{9N}\displaystyle\sum_{i=1}^{N} f(\rho_i)$, $\tilde{I} = I2 = \dfrac{16}{3N}\displaystyle\sum_{i=1}^{N} f(\rho_i)\rho_i^2 l_i$ для различных статистик N

```
m = 1
I1 = 2.06612
AbsError = 0.0668847
Dispersion = 0.497063

I2 = 1.98044
AbsError = 0.152556
Dispersion = 2.58593
```

a)

```
m = 2
I1 = 3.87903
AbsError = 0.120968
Dispersion = 1.62593

I2 = 3.88037
AbsError = 0.119632
Dispersion = 1.59021
```

b)

Рис. 3. $N = 10^3$

```
m = 1
I1 = 2.11984
AbsError = 0.0131622
Dispersion = 0.192493

I2 = 2.11843
AbsError = 0.0145675
Dispersion = 0.23579
```

a)

```
m = 2
I1 = 3.92708
AbsError = 0.0729218
Dispersion = 5.90843

I2 = 3.9917
AbsError = 0.00830318
Dispersion = 0.076603
```

b)

Рис. 4. $N = 10^4$

```
m = 1                          m = 2
I1 = 2.13112                   I1 = 3.98252
AbsError = 0.00188309          AbsError = 0.0174777
Dispersion = 0.039400          Dispersion = 3.39413

I2 = 2.12539                   I2 = 3.98964
AbsError = 0.00761331          AbsError = 0.0103607
Dispersion = 0.644027          Dispersion = 1.19271
```

a) b)

Рис. 5. $N = 10^5$

```
m = 1                          m = 2
I1 = 2.13404                   I1 = 4.00366
AbsError = 0.00103611          AbsError = 0.00366037
Dispersion = 0.11928           Dispersion = 1.4887

I2 = 2.13058                   I2 = 3.99725
AbsError = 0.00241528          AbsError = 0.00274573
Dispersion = 0.648174          Dispersion = 0.837669
```

a) b)

Рис. 6. $N = 10^6$

5. Вывод

Методом Монте-Карло был вычислен многомерный интеграл $I_m = \dfrac{1}{\pi^2}\displaystyle\int_S\int_S \dfrac{dPdQ}{\rho^m}$ при $m = 1$ и $m = 2$, используя оценки $\overline{I} = \dfrac{16}{9N}\displaystyle\sum_{i=1}^{N} f(\rho_i)$, $\tilde{I} = \dfrac{16}{3N}\displaystyle\sum_{i=1}^{N} f(\rho_i)\rho_i^2 l_i$ для статистики $N = 10^6$.

При вычислении интеграла I_1 наибольшую точность при одной и той же статистике позволяет достичь приближение $\overline{I}$, в свою очередь, оценка $\tilde{I}$ значительно точнее оценки $\overline{I}$ при вычислении интеграла I_2.