

Báo cáo giữa kỳ Khóa Luận Tốt Nghiệp

Tên đề tài: Giải số Tích phân Monte Carlo nhiều lớp bằng gieo điểm quan trọng

Sinh viên thực hiện: Huỳnh Thị Hạ Vy, MSSV: 1513229

Email: huynhthihavy12@gmail.com, ĐTDĐ: 037.784.5682

Cán bộ hướng dẫn: TS. Nguyễn Chí Linh.

| CBHD (ký và ghi rõ họ tên) | Sinh viên (ký và ghi rõ họ tên) |
|----------------------------|---------------------------------|
| | |

1. MỞ ĐẦU

Một trong những vấn đề lớn mà các nhà Vật lý phải đối mặt đó là tính toán các tích phân nhiều chiều hoặc các tích phân phức tạp. Trong lý thuyết hạt cơ bản, tích phân lớn hơn bốn chiều được sử dụng thường xuyên để tính toán biên độ tán xạ theo lý thuyết nhiễu loạn của Feynman. Để giải quyết vấn đề này đó là sử dụng phương pháp Monte Carlo thích nghi áp dụng thuật toán Vegas.

2. TỔNG QUAN

Phương pháp Monte Carlo là một phương pháp số để giải quyết các bài toán bằng cách lấy mẫu ngẫu nhiên (hoặc bằng cách mô phỏng các biến ngẫu nhiên). Kết quả của phương pháp này càng chính xác khi số lượng mẫu càng tăng. Theo quy luật số lớn khi kích thước mẫu càng lớn thì các ước tính sẽ hội tụ đến kết quả chính xác. Thực tế thì không phải sử dụng càng nhiều mẫu thì sẽ cho ra kết quả chính xác. Bởi vì các mẫu được chọn ngẫu nhiên nên để cho ra kết quả không thật sự chính xác. Điểm mạnh của phương pháp Monte-Carlo cũng là điểm yếu. Bởi vì cần kích thước mẫu thật sự lớn để có được kết quả chính xác. Điều này phụ thuộc vào phần cứng máy tính. Nhìn chung, tốc độ hội tụ của phương pháp Monte Carlo là khá thấp.

Để giải quyết vấn đề trên đề tài sử dụng phương pháp tích phân Monte-Carlo thích nghi với thuật toán Vegas.

Đặc điểm thuật toán:

- Phương sai chính xác cho tích phân thì được tính toán dễ dàng.
- Hàm tính tích phân không cần liên tục khi sử dụng thuật toán mới này. Đặc biệt, các hàm bước nhảy cũng không có vấn đề gì. Vì thế để tính tích phân nhiều chiều là việc đơn giản.
- Tốc độ hội tụ không phụ thuộc vào số chiều của tích phân.
- Đây là thuật toán thích nghi, nó tự động tập trung đánh giá tích phân tại những vùng có tích phân quan trọng nhất.

Đặc điểm (a) và (c) là phổ biến trong tất cả phương pháp Monte Carlo. Với (d) là một tính năng quan trọng nhất trong thuật toán này. Vấn đề chính trong tính toán các tích phân nhiều chiều là việc tăng số lượng mẫu theo cấp số nhân khi tăng số chiều. Do đó, mục đích chung của thuật toán để tính toán tích phân nhiều chiều là thích nghi (adaptive).

3. NỘI DUNG

3.1. Cơ sở lý thuyết của phương pháp tính tích phân nhiều chiều với thuật toán Vegas

Tích phân Monte-carlo

Xét tích phân của một hàm n biến \mathbf{x} (x_1, \dots, x_n) trên không gian mẫu " Ω ".

$$I = \int_{\Omega} d\mathbf{x} f(\mathbf{x})$$

Nếu các điểm $M(\mathbf{x})$ được chọn ngẫu nhiên từ một phân bố các điểm trong không gian mẫu Ω với xác suất $p(\mathbf{x})$. Dễ dàng thấy được tích phân xấp xỉ bằng

$$S^{(1)} = \frac{1}{M} \sum_{\mathbf{x}} \frac{f(\mathbf{x})}{p(\mathbf{x})} \quad (1)$$

$$\rightarrow I \text{ as } M \rightarrow \infty$$

Trong đó hàm mật độ xác suất được chuẩn hóa thành:

$$\int_{\Omega} d\mathbf{x} p(\mathbf{x}) = 1$$

Đại lượng $S^{(1)}$ được kì vọng sẽ dao động về giá trị đúng của tích phân. Tương ứng với mỗi tập hợp các điểm M ngẫu nhiên là 1 đại lượng $S^{(1)}$ khác nhau. Phương sai của dao động này là:

$$\sigma^2 = \left\{ \int_{\Omega} d\mathbf{x} \frac{f^2(\mathbf{x})}{p(\mathbf{x})} - \left[\int_{\Omega} d\mathbf{x} f(\mathbf{x}) \right]^2 \right\} M^{-1}$$

Đối với tập hợp điểm M lớn thì phương sai sẽ là

$$\sigma^2 \cong \frac{S^{(2)} - S^{(1)}}{M - 1} \quad (2)$$

Tại:

$$S^{(2)} = \frac{1}{M} \sum_{\mathbf{x}} \left(\frac{f(\mathbf{x})}{p(\mathbf{x})} \right)^2$$

Độ lệch chuẩn σ chỉ ra kết quả chính xác của $S^{(1)}$ như là một kết quả gần đúng của I . Lưu ý rằng ước tính của phương sai chính xác khi tích phân

$$\int_{\Omega} d\mathbf{x} \frac{f^2(\mathbf{x})}{p(\mathbf{x})}$$

hữu hạn nhưng nếu tích phân không hữu hạn thì $S^{(1)}$ xấp xỉ giá trị trung bình của I .

Có một số kỹ thuật để giảm phương sai $\sigma^{(2)}$ với tập hợp M không đổi. Hai phương pháp phổ biến nhất được sử dụng trong tích phân nhiều chiều là:

- (a) *Lấy mẫu quan trọng*. Ở đây mật độ $p(\mathbf{x})$ được thay đổi để giảm $\sigma^{(2)}$. Như đã biết, phương sai được tối ưu khi

$$p(\mathbf{x}) = |f(\mathbf{x})| / \int_{\Omega} d\mathbf{x} |f(\mathbf{x})| \quad (3)$$

Do đó, khi sử dụng gieo điểm trọng tích phân sẽ được tính tập trung tại nơi tích phân có độ lớn lớn nhất (dù nó có flat ở đó hay không).

- (b) *Lấy mẫu phân tầng*. Để giảm phương sai, thể tích tích phân có thể được chia thành N khối thể tích nhỏ với các kích thước khác nhau. Sau đó tích phân Monte-carlo được thực hiện trong mỗi khối thể tích nhỏ. Với mỗi khối thể tích nhỏ này sử dụng M/N điểm ngẫu nhiên. Khi kích thước của khối thể tích nhỏ bị thay đổi thì phương sai sẽ được tính toán lại và được tối ưu khi phương sai của mỗi khối thể tích nhỏ này là như nhau ($= \sigma^2/N$). Do đó, khi sử dụng gieo điểm phân tầng, tích phân sẽ được tập trung tại nơi có sai số lớn nhất, tức là nơi tích phân vừa lớn và vừa dao động mạnh.

Các phương pháp giảm phương sai không phù hợp trong trường hợp tổng quát vì nó đòi hỏi phải có thông tin chi tiết về cách hành xử của hàm dưới dấu tích phân trước khi xử lý. Tuy nhiên, Sheppey tạo ra thuật toán lặp, sử dụng thông tin được tạo ra từ lần tính tích toán trước để tính toán cho lần sau nhằm giảm

phương sai trong các lần tính tích phân tiếp theo. Thuật toán sử dụng phương pháp lấy mẫu phân tầng. Ban đầu thuật toán chia khối thể tích của tích phân n chiều thành N^n khối nhỏ như nhau. Bằng cách sử dụng một lưới hình chữ nhật đồng nhất. Mỗi khối nhỏ sử dụng hai điểm để đóng góp vào việc tính tích phân Monte Carlo và phương sai. Các phương sai từ các khối nhỏ sau đó được sử dụng để định nghĩa lại không gian lưới mới dọc theo mỗi trục. Và không gian lưới mới này sẽ được sử dụng cho lần lặp tiếp theo. Và phải giữ cho tổng số khối nhỏ không đổi. Như vậy qua mỗi vòng lặp thì các khối nhỏ có thể tập trung dần dần về nơi có phương sai lớn nhất trước đó. Như vậy phương sai được giảm.

Thuật toán này được sử dụng rộng rãi trong ngành Vật lý Lý thuyết và rất thành công cho nhiều ứng dụng tính toán hai chiều trở lên. Sức mạnh lớn nhất của phương pháp là khả năng thích nghi của tích phân đang được xem xét. Tuy nhiên khả năng thích nghi của nó được quyết định bởi số lượng đoạn được chia dọc theo mỗi trục (N). Và N bị giới hạn bởi tổng số tích phân (M) được cho phép ở mỗi vòng lặp.

$$M = 2N^n$$

Hạn chế này cho thấy một khuyết điểm lớn khi có số chiều lớn ($M < 10^6$ khi $n = 9$ và $N \leq 4$).

3.2. Thuật toán Vegas

Hạn chế từ phương pháp của Sheppey có thể tránh được bằng cách sử dụng phương pháp lấy mẫu quan trọng thay vì phương pháp lấy mẫu phân tầng để giảm phương sai. Phương pháp lấy mẫu quan trọng dường như cho thấy kém hiệu quả hơn phương pháp lấy mẫu phân tầng. Tuy nhiên trong thực tế khả năng thích nghi vượt trội hơn khi được thể hiện ở bài toàn có số chiều lớn.

Giống như Sheppey, thuật toán Vegas ở đây được mô tả là sự lặp đi lặp lại. Để minh họa hãy xem tích phân một chiều

$$I = \int_0^1 dx f(x)$$

Khởi tạo M điểm với mật độ xác suất như nhau ($p(x) = 1$). Sau đó tính toán ước tính của tích phân và phương sai. Phương trình (1) và (2), các điểm M dùng để tính tích phân cũng có thể được sử dụng để định nghĩa lại mật độ xác suất tốt hơn cho vòng lặp tiếp theo. Trong phương pháp này phương sai sẽ được giảm dần qua các vòng lặp.

Có một số kỹ thuật để tạo ra dãy số giả ngẫu nhiên với phân bố đều. Sẽ khó khăn hơn khi muốn tạo ra dãy số ngẫu nhiên với một phân bố bất kỳ có mật độ $p(x)$. Vậy $p(x)$ là một hàm bước nhảy với N bước. Xác suất của một số ngẫu nhiên được chọn từ một bước nhảy bất kỳ thì được xác định là một hằng số $1/N$ cho tất cả các bước ($0 = x_0 < \dots x_N = 1, \Delta x_i = x_i - x_{i-1}$)

$$p(x) = \frac{1}{N\Delta x_i}, \quad x_i - \Delta x_i \leq x < x_i, \quad i = 1, \dots, N,$$

$$\sum_{i=1}^N \Delta x_i = 1$$

Phân phối xác suất được điều chỉnh theo các tích phân từng phần cụ thể bằng cách thay đổi kích thước của các đoạn Δx_i . Trên thực tế thì N bị giới hạn bởi bộ nhớ máy tính và thường thì N là một hằng số ($N = 50$ đến 100).

Cho các M điểm tính tích phân, phân bố xác suất. Kích thước các đoạn Δx_i được điều chỉnh lại bằng cách chia nhỏ mỗi đoạn thành $m_i + 1$ đoạn nhỏ hơn, tại

$$m_i = K \left(\frac{\bar{f}_i \Delta x_i}{\sum_j \bar{f}_j \Delta x_j} \right) \quad (4)$$

Và

$$\bar{f}_i \equiv \sum_{x \in x_i - \Delta x_i}^{x_i} |f(x)|$$

Mỗi đoạn sẽ bị chia nhỏ thành $k+1$ đoạn con (thường thì $k = 1000$). Sự đóng góp của mỗi đoạn cho hàm trọng sẽ tăng tỉ lệ với sự đóng góp của nó cho tích phân $|f(x)|$, như yêu cầu trong phương trình (3). Do cần tổng số đoạn vẫn giữ nguyên là N , các đoạn con sẽ được dom lại thành các đoạn mới sao cho số đoạn con là như nhau và không đổi (để giữ mật độ tỉ đối giữa các đoạn không đổi giữa các đoạn). Hệ quả là ta phải thay đổi kích thước của các đoạn nhưng giữ tổng số đoạn không đổi sao cho đoạn có kích thước nhỏ nhất ở nơi $|f(x)|$ lớn nhất. Lưới mới này sẽ được dùng và sẽ được tinh chỉnh trong mỗi lần lặp cho tới khi ta có được lưới tối ưu (tức $m_i = m_j, i, j = 1, \dots, N$).