

Matematično fizikalni seminar

Monte Carlo integracija

Teodor Jovanovski, 28241125
Profesor: doc. dr. Miha Muškinja
Marec, 2025

1 Uvod

Pri integraciji zahtevnejših 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 pričakovani (ali povprečni) vrednosti (zapisan v eni dimenziji, velja v poljubno dimenzijah):

$$\int_a^b g(x) w(x) dx = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N g(x_i) = \bar{g} \quad (1)$$

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 v limiti ko gre število meritev $N \rightarrow \infty$. Varianca (kvadrat 'napake') tako določenega povprečja je podan s formulo:

$$\sigma_{\bar{g}}^2 = \frac{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N g^2(x_i) - (\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N g(x_i))^2}{N-1} = \frac{\overline{g^2} - \bar{g}^2}{N-1} \quad (2)$$

in pada približno s številom meritev N .

Najlažji primer je izračun ploščin 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 g opisuje ploskev s pogojem $g = 1$, če je točka v liku in $g = 0$ drugače. Integral v izreku nam res da:

$$\int_{a^2} g(S) w(S) dS = \frac{1}{a^2} \int_S 1 dS = \frac{S}{a^2} = p \quad (3)$$

in varianca postane

$$\sigma_{\bar{f}}^2 = \sigma_p^2 = \frac{p(1-p)}{N-1}, \quad (4)$$

kar ustreza binomski napaki pri velikih N kot pričakovano. Ploščino lahko torej določimo s poskušanjem in določitvijo verjetnosti $\hat{p} = N_{\text{uspehov}}/N_{\text{poskusov}}$. Ploščino potem določimo kot $S = a^2 \cdot \hat{p}$ in napako kot $\sigma_S = a^2 \cdot \sigma_{\hat{p}}$. Ta recept lahko uporabimo brez sprememb za izračun prostornine v treh dimenzijah (in v principu tudi prostornino v poljubno dimenzijah...!)

Pomembno je opazanje, 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 $f(x)$ v intervalu (a, b) , uporabimo izrek o pričakovani vrednosti takole:

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

pri čemer je $g(x) = f(x)/w(x)$. V najpreprostejšem primeru je x enakomerno porazdeljen v intervalu $[a, b]$, kar da verjetnostno porazdelitev $w(x) = 1/(b-a)$ in $g(x) = f(x) \cdot (b-a)$. V tem primeru lahko torej tudi napišemo:

$$\int_a^b f(x) dx = \int_a^b g(x) \frac{1}{b-a} dx = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N g(x_i) = \frac{(b-a)}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i), \quad (6)$$

kar nam da najpreprostejšo formulo za MC integracijo. Ustrezno lahko zdaj preprosto uporabimo tudi formulo za varianco (enačba 2).

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

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

$$\int_a^x w(t) dt = \rho \cdot \int_a^b w(t) dt, \quad (7)$$

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:

$$x = -\tau \ln(1 - \rho). \quad (8)$$

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 elipse in volumen elipsoida ter opazuj padanje napake s številom izbranih točk. Primerjaj s pravo vrednostjo (πab in $\frac{4}{3}\pi abc$) ter (dodatno) za elipso primerjaj natančnost in hitrost metode z računanjem ploščine s pomočjo točk na enakomerni mreži!
- Izračunaj integral normalne Gaussove porazdelitve ($\mu = 0$ in $\sigma = 1$) na določenem območju (npr. $[-1, 1]$, $[-2, 2]$, $[-3, 3]$) 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!

2 Ploščina elipse in volumen elipsoida

Za prvo nalogo sem izbral naslednje parametre za elipso in elipsoid:

$$a = 2$$

$$b = 1$$

$$c = 3$$

Pravi vrednosti ploščine in volumna sem izračunal z uporabo enačb, navedenih v uvodu. Izračunal sem tako napako metode Monte Carlo (MC) za 20 točk med 10^2 in 10^6 , kot tudi čas, potreben za izračun. Enako sem storil tudi za enakomerno mrežo in metodo MC v primeru, ko uporablja isto število točk kot enakomerna mreža.

Tabela 1: Vrednosti ploščine, približkov in časov računanja.

	πab	MC	Mreža	MC mreža
Vrednost	6.2831	6.2805	6.2701	6.2820
Povprečen čas	/	$1.9354 \cdot 10^{-4}\text{s}$	$2.8471 \cdot 10^{-4}\text{s}$	$4.0157 \cdot 10^{-4}$

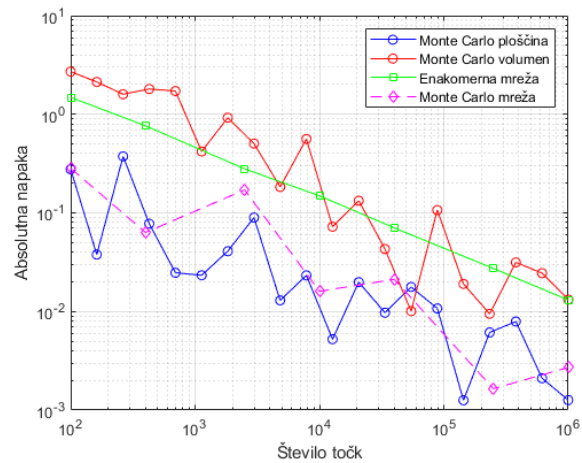
Kot vidimo, vse metode dajejo dokaj natančne rezultate, pri čemer je metoda MC v povprečju najhitrejša.

Za volumen elipsoida pa imamo:

Tabela 2: Vrednosti volumna, približka in časa računanja.

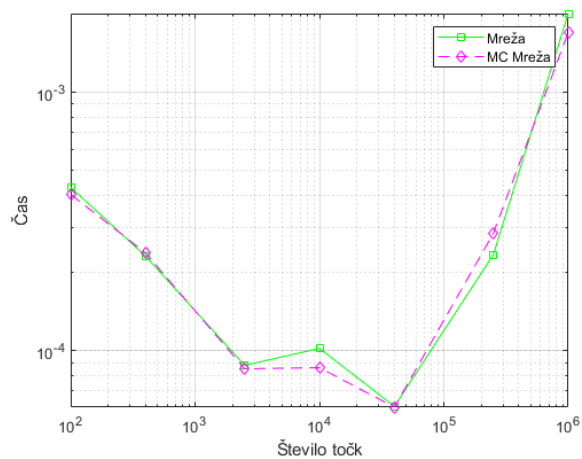
	$\frac{4}{3}\pi abc$	MC
Vrednost	25.1327	25.1460
Povprečen čas	/	$3.4226 \cdot 10^{-4}\text{s}$

Na spodnjem grafu lahko vidimo, kako je napaka padala z naraščajočim številom točk.



Slika 1: Odvisnost absolutne napake od števila točk za vse metode.

Primerjal sem tudi hitrost metode MC v primerjavi z metodo enakomerne mreže. Glede na rezultate, prikazane na sliki 2, sta obe metodi približno enako časovno zahtevni, pri čemer se zdi, da je metoda MC bolj natančna, ne glede na njeno nestabilnost.



Slika 2: Odvisnost časa računanja od števila točk za MC in enakomerno mrežo.

3 Integral normalne Gaussove porazdelitve

Pri drugi nalogi sem najprej definiral parametre. Parameter srednje vrednosti μ za prednostno vzorčenje (PV) je imel naslednje vrednosti:

$$\mu = \{0, 1, 2, 5, 7\}.$$

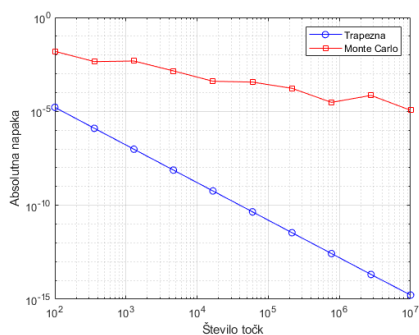
Število točk za trapezno in metodo MC je bilo med 10^2 in 10^7 .

Rezultati so bili takšni:

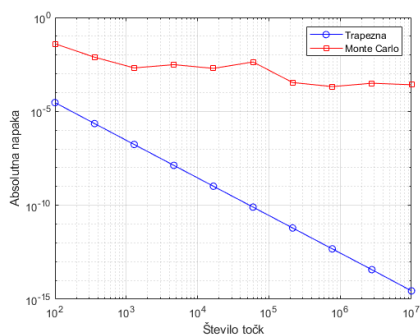
Tabela 3: Rezultati za različne intervale pri $N = 10000000$.

Metoda	[-1,1]	[-2,2]	[-3,3]
Prava vrednost	0.68268949	0.95449974	0.99730020
Trapezna	0.68268949	0.95449974	0.99730020
MC	0.68269635	0.95418682	0.99697229
$\mu = 0$	0.68287100	0.95445350	0.99733970
$\mu = 1$	0.68248478	0.95427772	0.99736640
$\mu = 2$	0.68356113	0.95470170	1.00057442
$\mu = 5$	0.86600796	6.53289410	0.52235562
$\mu = 7$	0.00000000	0.05305412	0.10345986

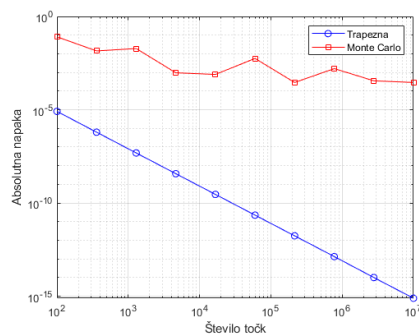
Trapezna metoda je po pričakovanjih za eno dimenzijo konvergirala hitreje za vse intervale, imela je manjšo napako in njen čas računanja je bil manjši.



Slika 3: $[-1,1]$

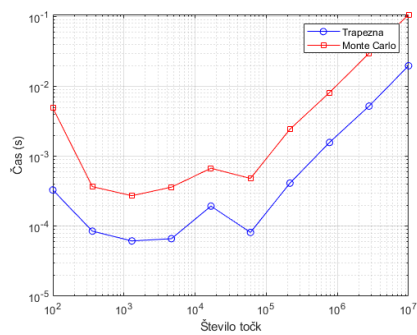


Slika 4: $[-2,2]$

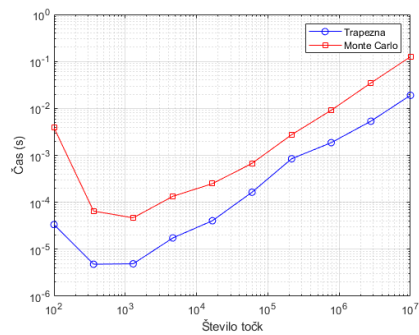


Slika 5: $[-3,3]$

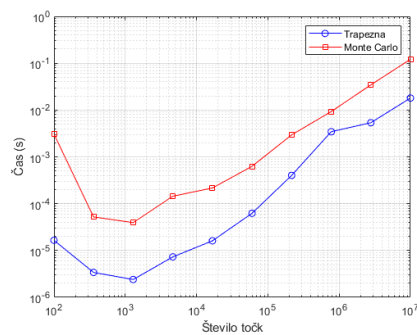
Slika 6: Absolutne napake v odvisnosti od števila točk za vse intervale.



Slika 7: $[-1,1]$



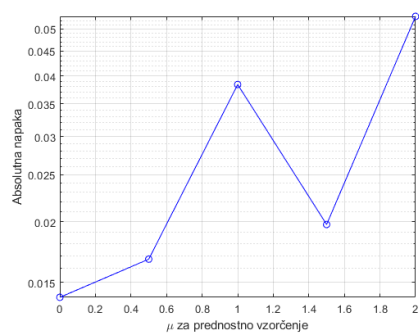
Slika 8: $[-2,2]$



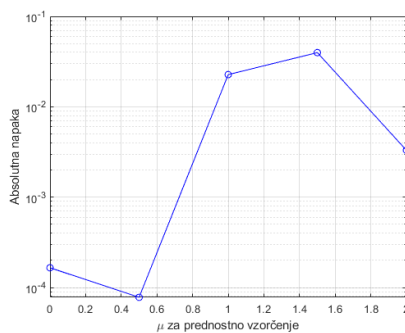
Slika 9: $[-3,3]$

Slika 10: Čas računanja v odvisnosti od števila točk za vse intervale.

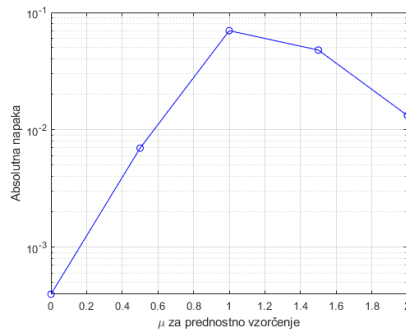
Še posebej zanimiva je bila nestabilnost prednostnega vzorčenja. Vsakič, ko sem testiral kodo, sem dobil različne vrednosti. Tudi to je pričakovano, saj se z naraščajočim μ oddaljujemo od centralne vrednosti, kar močno vpliva na izbiro točk, ki jih metoda uporablja.



Slika 11: $[-1,1]$



Slika 12: $[-2,2]$



Slika 13: $[-3,3]$

Slika 14: Absolutne napake v odvisnosti od μ za vse intervale.

4 Zaključek

V tej domači nalogi sem raziskal uporabo Monte Carlo integracije za reševanje različnih numeričnih problemov. Ugotovil sem, da metoda ponuja fleksibilen pristop k integraciji. Rezultati, pridobljeni z različnimi metodami, so se v splošnem dobro ujemali s pričakovanimi vrednostmi, kar potrjuje uporabnost metode. Opazil sem tudi vpliv parametrov, kot je število vzorcev, na natančnost in čas računanja. Prednostno vzorčenje se je izkazalo za zanimivo tehniko, čeprav je pokazalo določeno mero nestabilnosti, kar je skladno s teorijo. Na splošno lahko zaključim, da je metoda Monte Carlo močno orodje za numerično reševanje integralov.