

Proste całkowanie z szacowaniem wariancji

Metody Monte Carlo w fizyce
Nanoinżynieria materiałów

Łukasz Ruba



Akademia Górniczo-Hutnicza
im. Stanisława Staszica w Krakowie

24 marca 2024

Spis treści

	Cel ćwiczenia	3
1	Wstęp teoretyczny	3
2	Metodyka	4
3	Wyniki	4
4	Wnioski	6
	Literatura	7

Cel ćwiczenia

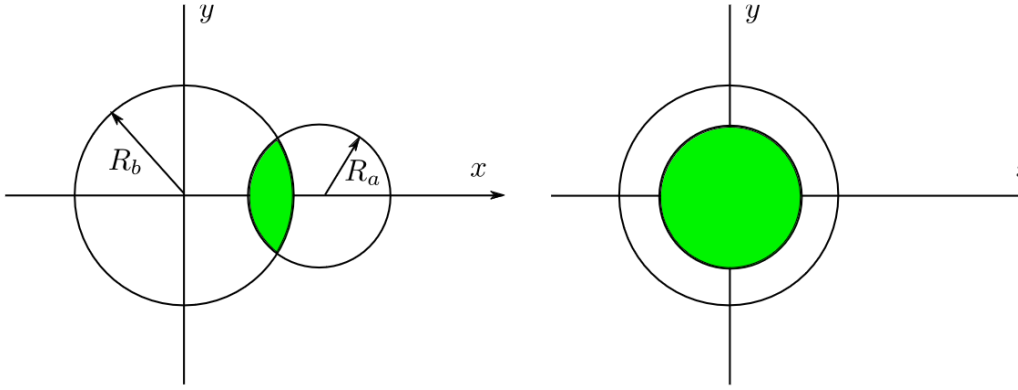
Celem ćwiczenia było wykorzystanie metod Monte Carlo do całkowania powierzchni wspólnej wyznaczonej przez dwa okręgi.

1 Wstęp teoretyczny

Na płaszczyźnie zdefiniowano dwa koła:

$$\begin{aligned} K_A &= (x, y) : (x - x_A)^2 + (y - y_A)^2 \leq R_A^2, \\ K_B &= (x, y) : (x - x_B)^2 + (y - y_B)^2 \leq R_B^2, \end{aligned} \quad (1)$$

których środki i promienie dobrano tak, żeby częściowo się przykrywały (Rys. 1).



Rysunek 1: Ideowy rysunek powierzchni wspólnej generowanych kół [1].

Chcąc oszacować wartość pola powierzchni wspólnej tych kół można skorzystać z metody Monte Carlo polegającej na generowaniu punktów w kole K , a następnie sprawdzaniu jaki jest stosunek punktów wspólnych do całkowitej liczby losowań.

W tym celu należy wylosować punkty w okręgu K z rozkładem jednorodnym. Wpierw losowano punkty metodą Boxa-Mullera:

$$X = \sqrt{-2 \ln(1 - U_1)} \cdot \cos(2\pi U_2), \quad (2)$$

$$Y = \sqrt{-2 \ln(1 - U_1)} \cdot \sin(2\pi U_2), \quad (3)$$

gdzie U_1 i U_2 to dwie liczby pseudolosowe z przedziału $[0,1]$.

Z uzyskanych punktów o rozkładzie normalnym można utworzyć rozkład jednorodny o współrzędnych z przedziału koła o zadanym promieniu R . Współrzędne punktów należy znormalizować, a następnie przesunąć je do środka okręgu zgodnie ze wzorem [4]:

$$X'|Y' = \frac{X|Y}{\sqrt{X^2 + Y^2}} \cdot \sqrt{U} \cdot R, \quad (4)$$

gdzie U to zmienna losowa z przedziału $[0,1]$ i wyraz $\sqrt{U} \cdot R$ odpowiada za przenoszenie punktów do wnętrza okręgu $K^2(0, R)$.

W celu policzenia powierzchni części wspólnej należy obliczyć całkę:

$$S_{\alpha,\beta} = \pi R_\alpha^2 \int_{(x,y) \in K_\alpha} \Theta_{\alpha,\beta}(x, y) dx dy, \quad (5)$$

gdzie funkcja $\Theta_{\alpha,\beta}$ pełni rolę funkcji wskaźnikowej o wartości binarnej (metoda eliminacji) i jest zdefiniowana jako:

$$\Theta_{\alpha,\beta} = \begin{cases} 1 & \text{gdzie } (x, y) \in K_\alpha \wedge (x, y) \in K_\beta \\ 0 & \text{w przeciwnym wypadku.} \end{cases} \quad (6)$$

Chcąc przełożyć tę metodę na obliczenia Monte Carlo pole powierzchni obliczymy jako pierwszy moment rozkładu:

$$\mu^{(1)} = \bar{S}_{\alpha,\beta} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \pi R_{\alpha}^2 \Theta_{\alpha,\beta}(x_i, y_i), \quad (7)$$

gdzie punkty (x_i, y_i) losujemy z rozkładu jednorodnego w kole K_{α} .

Skoro funkcja Θ przyjmuje wartość tylko 0 lub 1, to prawdziwym jest, że $\Theta_{\alpha,\beta}^2 = \Theta_{\alpha,\beta}$, a za tem drugi moment możemy obliczyć jako:

$$\mu^{(2)} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\pi R_{\alpha}^2 \Theta_{\alpha,\beta}(x_i, y_i))^2 = \pi R_{\alpha}^2 \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \pi R_{\alpha}^2 \Theta_{\alpha,\beta}(x_i, y_i) = \pi R_{\alpha}^2 \mu^{(1)}. \quad (8)$$

Znając pierwszy i drugi moment można obliczyć wariancję ze wzoru:

$$\sigma^2 = \frac{\mu^{(2)} - (\mu^{(1)})^2}{N}, \quad (9)$$

oraz odchylenie standardowe:

$$\sigma = \sqrt{\frac{\mu^{(2)} - (\mu^{(1)})^2}{N}}. \quad (10)$$

2 Metodyka

Obliczenia wykonano w języku *C++*. Zaimplementowano algorytm losowania punktów w kole zgodnie ze wzorem [4] oraz algorytm sprawdzający przynależność punktu do dwóch kół [6]. Wartość średnią pola, jej odchylenie standardowe i wariancję obliczono na podstawie wzorów [7, 9, 10].

Wygenerowano ciągi liczb pseudolosowych o mocy 10^k , gdzie $k = [2, 3, 4, 5, 6]$ w kołach o parametrach:

1. $\alpha = A, x_A = R_B + 0.5 \cdot R_A$,
2. $\alpha = A, x_A = 0$,
3. $\alpha = B, x_A = R_B + 0.5 \cdot R_A$,
4. $\alpha = B, x_A = 0$,

przy czym wartości x_B, y_A i y_B wynosiły 0 oraz promienie R_A i R_B wynosiły kolejno 1^1 i $\sqrt{2}R_A$. Dla każdego przypadku obliczono wartość pola części wspólnej, wariancję i odchylenie standardowe.

Wszystkie wykresy utworzono przy pomocy biblioteki *matplotlib* w *Python*.

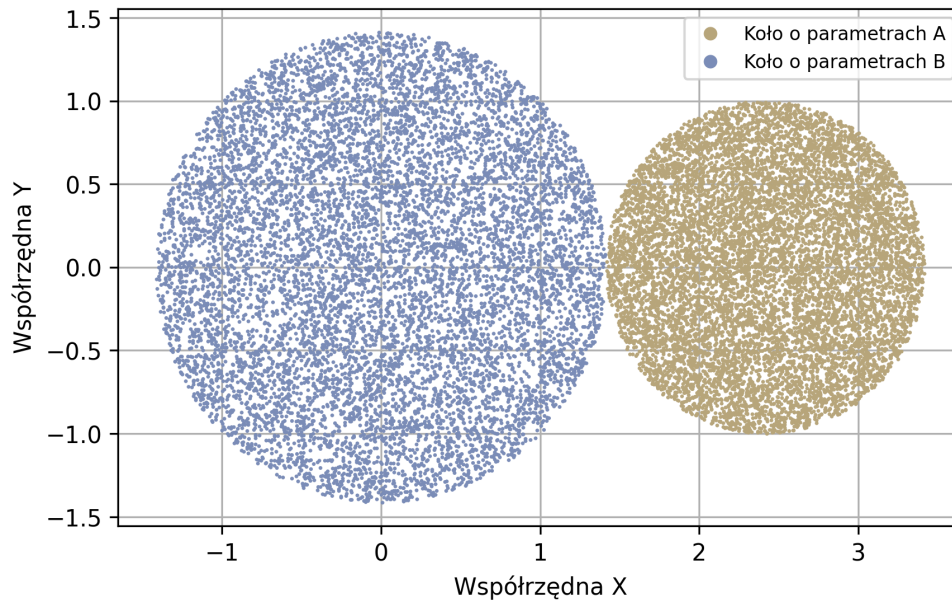
3 Wyniki

Na Rysunku 2 zaprezentowano przykładowe rozmieszczenie 10^6 punktów w kole A i B, umieszczonych tak aby się dotykały, ale nie nachodziły na siebie.

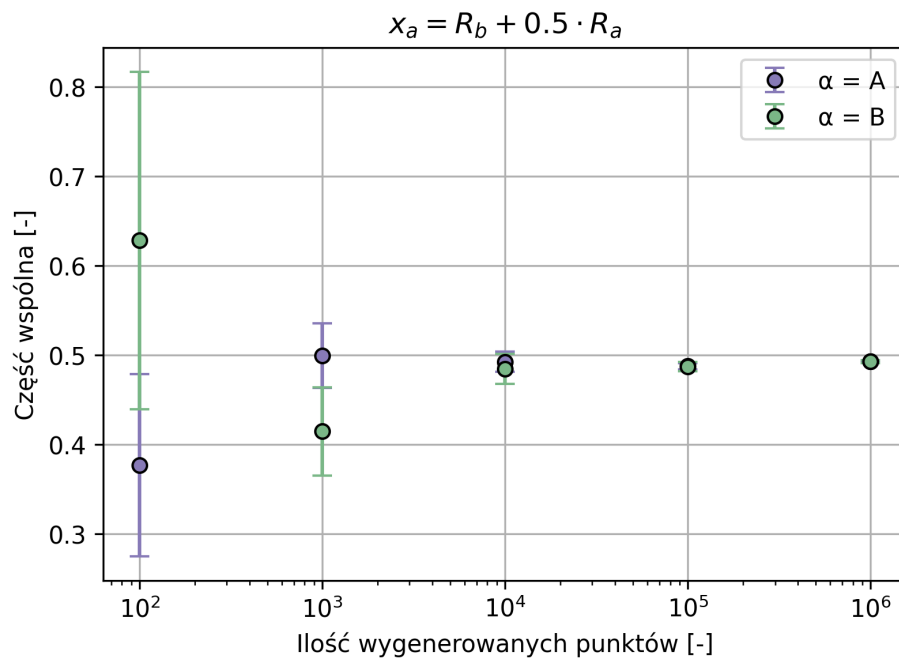
Dla przypadku 1 i 3 (patrz sekcja 2) utworzono wykres (Rys. 3) wartości pola części wspólnej wraz ze słupkami błędów. Jak można zaobserwować zwiększenie liczby losowań spowodowało zdążanie wartości pola w obu przypadkach do wspólnej wartości, która wynosiła około 0.5. W każdym wariancie słupki błędów dla $\alpha = A$ i B pokrywały się, a wraz ze wzrostem losowań odchylenie standardowe silnie malało. Oba trendy są zgodne z przypuszczeniami teoretycznymi.

¹W tym miejscu popełniono błąd względem opisu zadania, ponieważ przyjęto wartość R_A jako 1, a nie 2. Wyniki są inne niż powinny być, ale nie wpływa to na samą ideę obliczeń zaprezentowanych w sprawozdaniu, dlatego postanowiono zostawić tę pomyłkę, a co za tym idzie wszystkie obliczenia oraz wykresy.

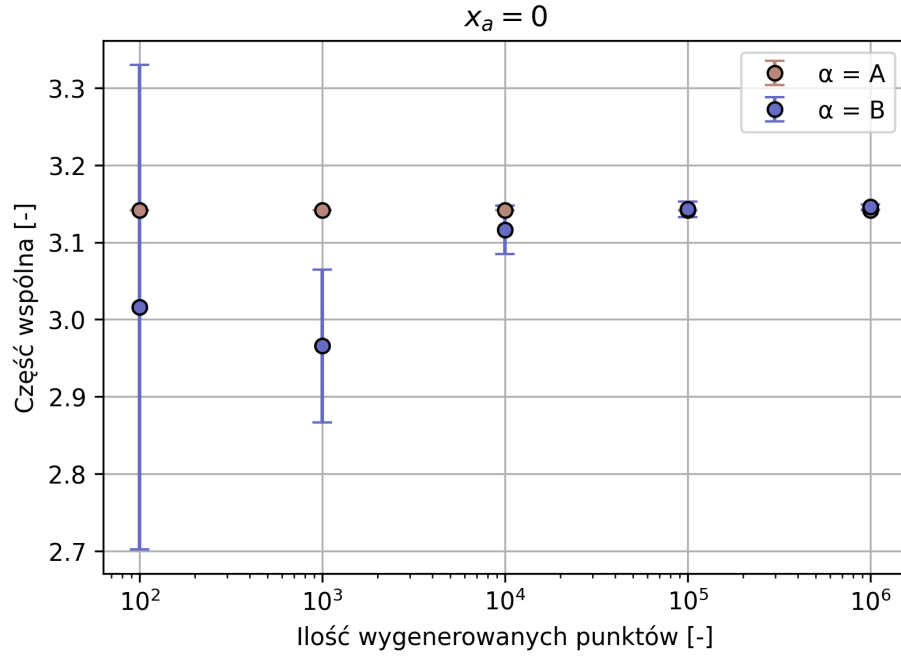
Podobną sytuację odnotowano dla przypadku 2 i 4 z tym, że dla $\alpha = A$ wartość pola się nie zmieniała w zależności od ilości losowań i jej odchylenie standardowe wynosiło zero. Jest to zachowanie zgodne z przypuszczeniami, ponieważ koło A znajdowało się wewnątrz koła B, tak więc każdy wylosowany punkt należał do części wspólnej, której pole przy $R_A = 1$ musiało wynieść π . Dla przypadku $\alpha = B$ wartość pola części wspólnej dążyła do π wraz ze wzrostem ilości losowań. Najlepszą zgodność uzyskano nie dla maksymalnej ilości losowań lecz dla $k = 5$, co oznacza, że dalsze losowania już nie poprawiały znacząco precyzji obliczeń.



Rysunek 2: Przykładowe punkty wygenerowane dla parametrów dwóch różnych kół.



Rysunek 3: Wartość średnia pola wraz z odchyleniem standardowym dla przypadku losowania punktów z koła A i B przy przesunięciu środka koła A o wartość $R_B + 0.5 \cdot R_A$ w osi x.



Rysunek 4: Wartość średnia pola wraz z odchyleniem standardowym dla przypadku losowania punktów z koła A i B w przypadku kiedy środki obu kół znajdowały się w tym samym miejscu na osiach.

4 Wnioski

W obu przypadkach można zauważyć, że zwiększenie liczby losowań pozytywnie wpływało na redukcję odchylenia standardowego każdego przypadku oraz uzyskanie wartości pola w przybliżeniu zgodnej z rozwiązaniem analitycznym. Jest to wynik zgodny z przypuszczeniami teoretycznymi, ponieważ precyzja/rozrzut wyniku jawnie zależy od liczby losowań:

$$\sigma_{\bar{z}} = \frac{\sigma_z}{\sqrt{N}}. \quad (11)$$

Przypadek z Rysunku 4 pokazał, że mimo redukcji odchylenia standardowego, ciągłe zwiększanie liczby losowań nie wpływało już znacząco na poprawę wyniku od $k = 5$. Pogorszenie się wyniku wartości średniej względem jej faktycznej wartości unaocznia problem z losową naturą metod Monte Carlo. Nie mniej prostota zaprezentowanych obliczeń i dokładność wyników pokazują, że narzędzia te mogą stanowić świetną alternatywę w miejscach, gdzie obliczenia analityczne stają się zbyt obszerne.

Literatura

- [1] Tomasz Chwiej, dr hab. inż., skrypt do zadania “*Monte Carlo: proste całkowanie z szacowaniem wariancji*”, AGH, Kraków, 21 stycznia 2022.