Project 3 - Computational physics - FYS3150

Department of Physics, University of Oslo, Norway.
Philip Niane og Rohullah Akbari
Link til githubmappen:
https://github.com/philipkarim/Philip-and-Rohullah-ComFys

Abstrakt

I denne rapporten er det vist hvordan energien mellom to elektroner i et helium atom i grunntilstanden kan utregnes ved forskjellige integrasjonsmetoder. Integrasjonsmetodene som er brukt er: Gauss Legendre kvadratur som gir en relativ stor feil, med mindre integrasjonsstegene N er mange nok. Gauss Laguerre kvadratur som gir bedre resultater for små N enn Legendre, men fra erfaring da kodene ble kjørt er begge metodene relativt tidskrevende ved store N. "Brute force" Monte Carlo er også brukt men her ble presisjonen relativt dårlig sammenliknet med en forbedret Monte Carlo. Den forbedrede Monte Carlo metoden, også kalt importance sampling gir gode approksimasjoner men kan være rimelig tidskrevende. Denne metoden ble modifisert ved bruk av parallellisering noe som førte til en veldig tidseffektiv metode.

Innholdsfortegnelse

1 Introduksjon

Målet med dette prosjektet er å løse integralet som gir grunntilstandsenergien mellom to elektroner ved bruk av forskjellige numeriske metoder. Integralet som skal løses ser slik ut:

$$\langle \frac{1}{|r_1 - r_2|} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dr_1 dr_2 e^{-2\alpha(r_1, r_2)} \frac{1}{|r_1 - r_2|} \tag{1}$$

Hvor

$$\mathbf{r}_i = x_i \mathbf{e}_x + y_i \mathbf{e}_y + z_i \mathbf{e}_z \tag{2}$$

Som gir

$$r_i = \sqrt{x_i^2 + y_i^2 + z_i^2}. \tag{3}$$

Konstanten α blir satt til å være lik 2, da dette tilsvarer ladningen til et helium atom, Z=2.
Metodene som skal ses på i dette prosjektet er Gauss Legendre, Gauss Laguerre og flere versjoner av Monte Carlo integrasjon. Det blir brukt både kartesiske koordinater og kulekoordinater. Prosjektet gir også trening i bruk av parallellisering av kode som gir enda hurtigere programmer.[3]

2 Teori

2.1 Gauss Kvadratur

En av integrasjonsmetodene som skal brukes er Gauss kvadratur. Denne metoden skiller seg ut fra en del andre metoder innenfor numeriske metoder ved at steglengden mellom x_i og x_{i+1} ikke er fast. Gauss kvadratur går ut på å skrive om integranden til følgende form:

$$A = \int_a^b f(x)dx = \int_a^b W(x)g(x)dx \approx \sum_{i=0}^{N-1} \omega_i g(x_i) \tag{4}$$

Hvor W(x) er vektfunksjonen, samtidig som aproksimasjonen blir nøyaktig om graden til polynomfunksjonen g(x) er mindre enn 2N-1. Vektene w_i fås gjennom de ortogonale polynoms-algoritmene som for eksempel Legendre, Laguerre, Hermite og Chebyshev. I dette prosjektet fokuseres det kun på Legendre og Laguerre. [1]

2.1.1 Gauss Legendre Kvadratur

Gauss Legendre metode bruker finite integrasjonsgrenser. Vektfunksjonen til Legendres metode W(x)=1, derfor er det mulig ut ifra likning (4) å se at metoden kan kjøres på integralet uten å måtte skrives om. Da x_i, y_i og z_i defineres fra $-\infty$ til ∞ vil passende finite grenser settes senere i rapporten.

2.1.2 Gauss Laguerre Kvadratur

Gauss Laguerre metode er fin å bruke når det opereres med grenser som går mot uendelig. Dette passer bra med tanke på at en endring til sfæriske koordinater vil gi r $\in$ [0,∞). Samtidig blir vinkelgrensene $\theta \in$[0,π] og $\phi \in$[0,2π].
Laguerre har en vektet funksjon på følgende form: $W(x) = x^{\alpha}e^{-x}$. Dette betyr at integralet som skal utregnes må skrives om på følgende form:

$$A = \int_0^{\infty} x^{\alpha}e^{-x}g(x)\,dx = \sum_{i=1}^{N} \omega_i g(x_i).$$

Etter uttrykket er skrevet om til sfæriske koordinater og skrevet om til formen over, kan uttrykket skrives på følgende måte: (Utledning kan ses i appendix)

$$A = \frac{1}{(2\alpha)^5} \int_0^{\infty}\int_0^{\infty}\int_0^{\pi}\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi}\int_0^{2\pi} W(u_1)W(u_2)g(u,\theta,\phi)\,du_1du_2d\theta_1d\theta_2d\phi_1d\phi_2$$

Hvor

$$W(u_i) = (u_i)^2e^{-u_i} \tag{5}$$

og

$$g(u_1,u_2,\theta_1,\theta_2,\phi_1,\phi_2) = \frac{\sin\theta_1\sin\theta_2}{r_{12}} \tag{6}$$

r_{12} og $cos(\beta)$ er oppgitt i oppgaven som:

$$\frac{1}{r_{12}} = \frac{1}{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1r_2\cos(\beta)}}, \tag{7}$$

og

$$\cos(\beta) = \cos(\theta_1)\cos(\theta_2) + \sin(\theta_1)\sin(\theta_2)\cos(\phi_1 - \phi_2)). \tag{8}$$

Dermed er uttrykket klart, og radiusdelen kan kjøres gjennom en Laguerre funksjon da radiusen går mot ∞, mens det holder å kjøre vinkeldelene gjennom en Legendre funksjon. Da disse grensene er begrenset.

2.2 Monte Carlo

Monte Carlo er den andre hovedintegrasjonsmetoden som skal brukes. Denne metoden er basert på middelverdisetningen fra kalkulus, hvor middelpunktet til en funksjon skal finnes mellom punktene a og b. Ved å utføre denne metoden uendelig mange ganger vil resultatet konvergere mot middelverdien til funksjonen.

Men siden det ikke lar seg gjøre å utføre denne metoden uendelig mange ganger fører dette til en numerisk feil. Variansen forteller om avviket fra gjennomsnittet, denne er definert med hensyn på antall ganger metoden kjører N: (Utledning kan ses i appendiks)

$$\sigma_N^2 = \frac{1}{N}(\langle f^2 \rangle - \langle f^2 \rangle) \tag{9}$$

Standardavviket er proposjonalt med den inverse kvadratroten av N:

$$\sigma_N = \frac{1}{\sqrt{N}} \tag{10}$$

2.2.1 "Brute force" og uniform distribusjon

I denne delen blir funksjonen integrert ved bruk av brute force. Det blir dermed ikke tatt noen spesielle hensyn til integralet, og integralet håndteres som en uniform distribusjons funksjon. Når integralet løses blir det produsert tilfeldige tall mellom grensene på veien mot en korrekt approksimasjon. Integralet fremstilles på følgende vis:

$$A = \int_{-\infty}^{\infty} ... \int_{-\infty}^{\infty} f(x1, y1, z1, x2, y2, z2) dx_1 dy_1 dz_1 dx_2 dy_2 dz_2$$

Grensene til dette integralet går fra -∞ til ∞. Dette gjør det som i Legendre umulig å løse. Dermed er det også her nødt til å settes bestemte grenser, altså $[-\infty, \infty] \rightarrow [a, b]$. A kan da tilnærmes til: (Se appendiks for utledning)

$$A \approx (b-a)^6 \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} f(x_{1i}, y_{1i}, z_{1i}, x_{2i}, y_{2i}, z_{2i})$$

Der $(b-a)^6$ er Jacobi-determinanten og alle $x_{1i}...z_{2i}$ er uniforme distribuerte tilfeldige tall. Disse tallene er produsert ved følgende likning:

$$s_i = a + (b-a)x_i \tag{11}$$

Der $s_i \in [x_{1i}, ..., z_{2i}]$ og x_i er et helt tilfeldig tall mellom 0 og 1.

2.2.2 Forbedret Monte Carlo og Importance sampling

For å forbedre metoden ovenfor er det mulig å velge en annen distribusjonsfunksjon. I dette tilfeldig velges det en funksjon som følger integralet nøye. Da integralet inneholder en eksponentiell del er det lurt å velge en eksponentiell distribusjonsfunksjon.
De kartesiske koordinatene skiftes ut med sfæriske koordinater. Og velger følgende eksponentiellfunskjon $p(r) = le^{-rl}$ der l er en konstant. Her er $\cos(\theta)_i$ brukt som variabel istedenfor θ_i. Og gir følgende variabler:

$$r_i = -\frac{1}{l} \ln(1 - x_i),$$

$$\cos(\theta)_i = 2x_i - 1$$

$$\phi_i = 2\pi x_i$$

der $r_i \in [0, \infty)$, $\cos(\theta)_i \in [-1, 1]$, $\phi_i \in 2\pi[0, -1]$ og x_i er et tilfeldig tall mellom 0 og 1. Funksjonen blir da:(Se appendiks for utledning)

$$f(x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2) = f(r_1, r_2, \cos(\theta)_1, \cos(\theta)_2, \phi_1, \phi_2) = \frac{r_{11} r_{22}}{r_{12}}$$

Dette lar seg kun gjøre hvis l = 4. Og integralet kan da tilnærmes til:

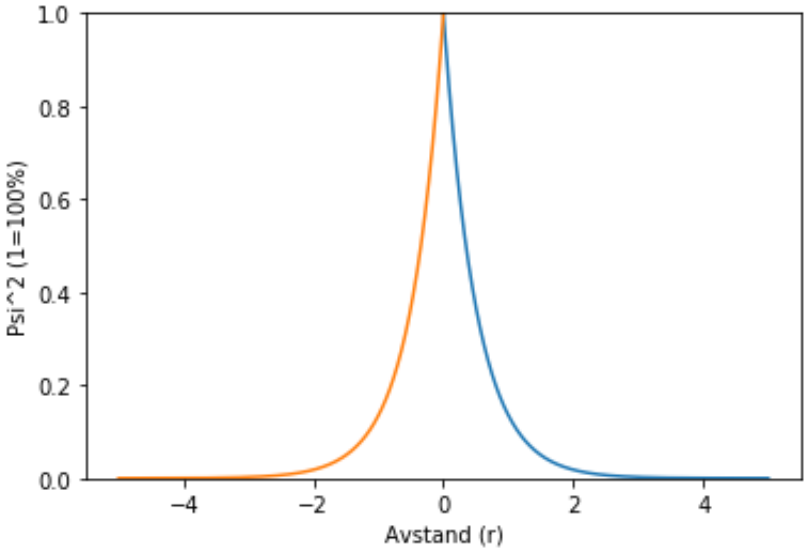
$$A \approx (2\pi)^2 2^2 \frac{1}{A^2} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \frac{r_{11} r_{22}}{r_{12}} \tag{12}$$

[1][3]

3 Metode

3.1 Gauss Kvadratur

Som sagt er det litt vanskelig å beregne integraler for uendelige grenser ved bruk av Legendres metode. Dermed må det bestemmes definerte grenser som kan brukes. Grensene bestemmes ved å plotte bølgefunksjonen $\Psi(r_1 r_2) = e^{-\alpha(r_1 + r_2)}$. Plottet av bølgefunksjonen er fremstilt i figur 1.



Figur 1: Sannsynlighetsdistribusjon for bølgefunksjonen $\Psi(r_1 r_2) = e^{-\alpha(r_1 + r_2)}$. Grensene går mot 0, ved større avstand mellom elektronen.

Utifra figur 1 konvergerer grafen mot 0, grafen når ≈ 0 når r ligger utenfor intervallet [-3,3]. Dette blir integrasjonsgrensene i Legendres metode.

3.1.1 Gauss Kvadratur- Kartesiske Koordinater

Koden som brukes til Legendre integrasjon er inspirert av eksempelkodene fra github[2].
Ved bruk av kartesiske koordinater holder det å bruke Legendres metode, med integrasjonsgrenser fra -3 til 3. Når det gjelder psudokoden kjøres Legendre funksjonen med de oppgitte grensene for å lage Legendrepolynomet. Videre er integranden lik det som ble oppgitt i oppgaveteksten. Denne integranden blir satt opp ved hjelp av en funksjon. Om avstanden mellom elektronene nærmer seg 0, vil funksjonen som lager uttrykket returnere 0 ved hjelp av en if/else setning.
Videre vil dette uttrykket brukes i en seksdimensional for-loop for å regne ut vektene. Vektene blir videre brukt i samme loop ved å multiplisere disse med integranden som ble laget i starten.

3.1.2 Gauss Laguerre- Sfæriske Koordinater

Koden som brukes til Laguerre integrasjon er stort sett inspirert av eksempelkodene fra github[2].
Ved bruk av sfæriske koordinater er det som sagt tidligere i rapporten kun nødvendig å bruke laguerre på radialdelen, mens Legendre brukes på vinkelene på samme måte som med de kartesiske koordinatene, men med annerledes grenser naturligvis.
Psudokoden har store likheter som over, på samme måte blir integranden produsert ved bruk av en funksjon. Også her returnerer funksjonen 0 om avstanden mellom elektronene blir for liten, ved hjelp av en if/else setning. Laguerrepolynomet produseres ved å kjøre radialdelen gjennom Laguerre funksjonen. Videre brukes en seksdimensional loop i dette tilfellet også. Den seksdimensionale loopen fungerer på samme måte som for Legendre over, bortsett fra at denne brukes på sfæriske koordinater. Koden kjøres og bruker legendre på vinklene og Laguerre på radialdelen som til slutt returnerer en approksimasjon til integralet.

3.2 Monte Carlo

Koden som brukes til Monte Carlo integrasjon er stort sett inspirert av eksempelkodene fra github[2].
Programmet starter med å definere de forskjellige variablene. Deretter blir det definert en vektor y som brukes til å lagre de tilfeldige tallene. Den viktigeste koden i programmet er løkken. Denne løkken starter med å finne tilfeldige tall mellom 0 og 1, ved bruk av funksjonen *randu*. Disse blir lagret i x vektoren. Deretter blir x-vektoren brukt til å finne de andre variablene som inngår i integranden. Deretter blit variablene brukt til å rope integraden og dermed lagret i fx. fx blir

summert opp i $crude_{mc}$ og kvadrat av fx blir summert i $sum - sigma$. Deretter berenges integralet og variansen ved bruk av definisjonene ovenfor i teoridel.
Et punkt som er verdt å merke seg er at om programmet kjøres flere ganger vil det produseres ulike svar så og si hver gang da metoden baserer seg på tilfeldige tall. Dette ble løst ved å velge en tilfeldig kjøring.

3.2.1 "Brute Force" og uniform distribusjon

Vektoren y blir fylt opp med verdier fra x vektoren ved bruk av ligning (9). Når alle verdiene er lagret blir de sendt videre til funksjonen *integrate*. Denne funksjonen bruker de innsendte variabelene til å regne ut $ledd1$ som er den eksponentielle delen av integranden og $ledd2$ som er nevneren. Dette gjentas i løkken N ganger.

3.2.2 Forbedret MC og Importance Sampling

I denne metoden er det flere variabler å ta hensyn til. r_i, $\cos(\theta)_i$ og ϕ_i blir regnet ved hjelp av x_i. Deretter gjøres det samme som ovenfor. Disse sendes til funksjonen $ingerate - impor$. Her blir de forskjellige delene i integranden utregnet. Dette gjøres N ganger.

4 Resultater

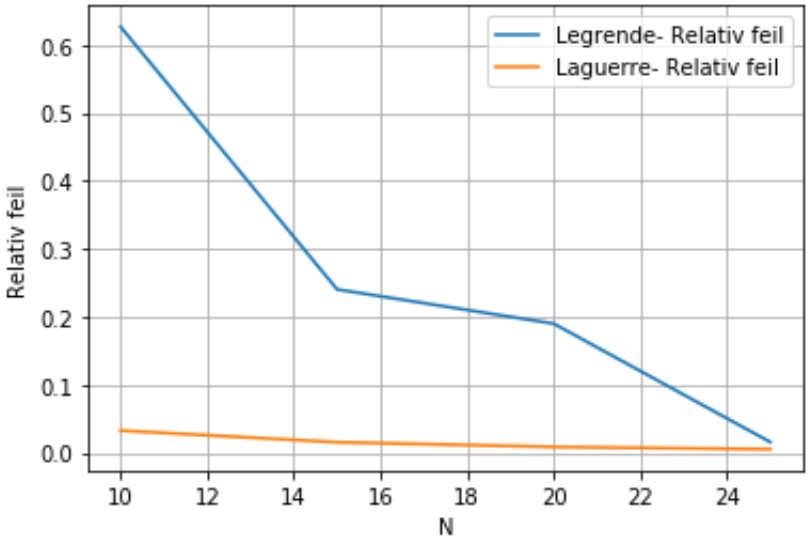
4.1 Gauss Kvadratur

Resultatene fra Gauss kvadraturet kan ses i tabell 1.

N	Svar-Legendre	Svar-Laguerre	Relativ Feil-Legendre	Relativ Feil-Laguerre
10	0.0720	0.1865	0.6266	0.0327
15	0.2391	0.1898	0.2403	0.0156
20	0.1561	0.1911	0.1900	0.0087
25	0.1958	0.1917	0.0158	0.0053

Tabell 1: Resultatene fra Gauss kvadraturet. N= antall integrasjonssteg. Andre og tredje kolonne gir de approksimerte svarene til integralet. De to siste kolonnene gir relativ feil sammenliknet med det korrekte svaret: 0,1928.

Plottet over de relative feilene mot N kan ses i figur 2.



Figur 2: Relativ feil plottet for Legendre og Laguerre mot integrasjonssteglengde N. Feilene er de samme verdiene som i tabell 1, men presentert på en annen måte da noen kan foretrekke plots fremfor grafer.

4.2 Monte Carlo

N	Svar-Brute Force	Svar-Importance	Error-Brute force	Error-Importance
10e3	0.2306	0.1835	0.1964	0.0483
10e4	0.173337	0.1946	0.1008	0.0093
10e5	0.2003	0.1939	0.0395	0.0058
10e6	0.1811	0.1926	0.0604	0.0009

Tabell 2: Resultatene fra Monte Carlo. N= antall itterasjoner. Andre og tredje kolonne gir de approksimerte svarene til integralet. De to siste kolonnene gir relativ feil sammenliknet med det korrekte svaret: 0,1928.

N	Varianse-Brute force	Varianse-Importance	Tid-Brute force	Tid-Importance
10e3	0.0921	0.0065	0.0452 s	0.0566 s
10e4	0.0758	0.0032	0.5098 s	0.5776 s
10e5	0.0250	0.0008	3.117 s	5.637 s
10e6	0.0082	0.0003	34.75 s	47.29 s

Tabell 3: Resultatene fra Monte Carlo. N= antall itterasjoner. Andre og tredje kolonne gir de approksimerte verdiene til variansene. De to siste kolonnene gir CPU tiden for algoritmen.

N	Tid-Parallellisert	Tid-Ikke parallellisert
10e3	0.0143 s	0.0566 s
10e4	0.1004 s	0.5776 s
10e5	0.6165 s	5.637 s
10e6	3.550 s	47.29 s

Tabell 4: Resultatene fra Monte Carlo med Importance Sampling. N= antall itterasjoner. Andre kolonne gir tiden etter parallellisert program, tredje kolonne gir tiden uten parallisering.

5 Diskusjon

Ved bruk av Gauss-Legendres metode gir denne ut ifra tabell 1 for høy error ved bruk av lave N. Det er ikke før N nærmer seg 25 at metoden gir tilnærminger som er brukbare. Det positive er at ut ifra figur 2, synker den relative erroren ganske raskt med økende N.

Når det gjelder Gauss-Laguerres metode synker feilen med økende N. Denne metoden gir også mye bedre approksimasjoner enn Legendre. Ved N=15 gir Laguerres metode tilsvarende relativ feil som Legendre hadde ved N=25.

Monte Carlo metoden fungerer best ved store N-verdier. Utifra tabell 2 og 3 er det lett å se at ved økende N-verdier genererer algoritmen mer og mer presis resualtater. Samtidig kan det observeres at variansen minker mer og mer for økende N-verdier. Dette stemmer bra med teorien, da variansen er omvendt proporsjonal med kvadratroten av antall itterasjoner. $\sigma_N = \frac{1}{\sqrt{N}}$. Jo større N-verdier desto lavere varianser og lavere relativ feil.

Et annet interessant faktum er at variansen minker ved å modifisere metoden fra Brute Force til Importance Sampling, noe som gir et bedre svar ved modifisering utifra både teorien og resultatene. Siden det kreves store N-verdier for å kjøre denne metoden, øker også CPU-tiden det tar å kjøre programmet. Dette kan observeres i tabell 3. Det tar mer tid å kjøre metoden for Importance Sampling enn Brute Force. Dette skyldes at ved Importance Sampling tas det hensyn til flere variabler noe som gjør at maskinen bruker mer minne og mer tid. Ved bruk av en parallellisert versjon av Importance Sampling er det lett å se fra tabell 4 at en kode som bruker flere kjerner helt klart er raskest.

6 Konklusjon

Det ble altså vist hvordan det er mulig å finne energien mellom to elektroner i et heliumatomet i grunntilstanden ved bruk av forskjellige integrasjonsmetoder. Det ble vist at den parallelliserte Monte Carlo metoden er den best tilpassede metoden å velge til et slikt problem da denne både gir gode approksimasjoner

samtidig som den tilbyr god tidseffektivitet. Det ble testet forskjellige former for Gauss Kvadratur som viste at sfæriske koordinater og Laguerres metode slår kartesiske koordinater og Legendres metode for problemstillingen det er fokusert på i dette prosjektet da Laguerre gir gode approksimasjoner samtidig som den er enkel å bruke ved integrasjonsgrenser som går mot ∞. Det ble testet to former for Monte Carlo metoden. I den ene delen ble det antatt uniform distribusjon og i den andre delen ble det antatt eksponentiell distribusjon. Det viste seg at de mest presise resultatene ble gitt av Monte Carlo metoden hvor det ble antatt eksponentiell distribusjon. Hurtigheten i denne metoden kan økes ved å inkludere flere kjerner ved parallellisering.

7 Appendiks

7.1 Omskrivning til sfæriske koordinater og "Laguerres form"

For å skrive om til sfæriske koordinater tas det utgangspunkt i integralet som ble oppgitt, der α=2.

$$A = \int_{-\infty}^{\infty} dr_1 dr_2 e^{-4(r_1+r_2)} \frac{1}{|r_1 - r_2|} \tag{13}$$

Hvor $dr_1 dr_2 = r_1^2 r_2^2 dr_1 dr_2 dcos(\theta_1) dcos(\theta_2) d\phi_1 d\phi_2$
som igjen gir $dr_1 dr_2 = r_1^2 r_2^2 \sin\theta_1 \sin\theta_2 dr_1 dr_2 d\theta_1 d\theta_2 d\phi_1 d\phi_2$.

Dette føres i likning 13 og gir:

$$A = \int_0^{\infty}\int_0^{\infty}\int_0^{\pi}\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi}\int_0^{2\pi} r_1^2 r_2^2 e^{-4r_1} e^{-4r_2} \frac{\sin\theta_1 \sin\theta_2}{r_{12}} dr_1 dr_2 d\theta_1 d\theta_2 d\phi_1 d\phi_2 \tag{14}$$

Så gjøres uttrykket om ved å forandre variabler: $u_1 = 4r_1$ og $u_2 = 4r_2$, dette gir:

$$A = \int_0^{\infty}\int_0^{\infty}\int_0^{\pi}\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi}\int_0^{2\pi} \frac{1}{(2\alpha)^5} u_1^2 u_2^2 e^{-u_1} e^{-u_2} \frac{\sin\theta_1 \sin\theta_2}{\sqrt{u_1^2 + u_2^2 - 2u_1 r_2 \cos\beta}} du_1 du_2 d\theta_1 d\theta_2 d\phi_1 d\phi_2 \tag{15}$$

Som gir integralet vårt på "Laguerres form"

$$A = \frac{1}{(2\alpha)^5} \int_0^{\infty}\int_0^{\infty}\int_0^{\pi}\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi}\int_0^{2\pi} W(u_1) W(u_2) g(u,\theta,\phi)\, du_1 du_2 d\theta_1 d\theta_2 d\phi_1 d\phi_2. \tag{16}$$

7.2 Monte Carlo

7.2.1 Utledning av variansen

Variansen er definert ved:

$$\sigma^2 = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}(f(x_i) - \langle f \rangle)^2 p(x_i)$$

Der $\langle f \rangle = \sum_{i=1}^{N}(f(x_i)p(x_i)$ og $p(x_i)$ er distribusjonsfunksjonen. Dette kan skrives som:

$$\sigma^2 = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}(f(x_i)p(x_i))^2 - (\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}(f(x_i)p(x_i)))^2$$

Som kan igjen skrives som:

$$\sigma_N^2 = \frac{1}{N}(\langle f^2 \rangle - \langle f^2 \rangle)$$

7.2.2 Utledning av A ved Brute Force

Ser på integralet på følgende vis:

$$A = \int_{-\infty}^{\infty} ... \int_{-\infty}^{\infty} f(x1, y1, z1, x2, y2, z2) dx_1 dy_1 dz_1 dx_2 dy_2 dz_2$$

Kan approksimeres til:

$$A = \int_{-\infty}^{\infty} ... \int_{-\infty}^{\infty} f(x1, y1, z1, x2, y2, z2) dx_1 dy_1 dz_1 dx_2 dy_2 dz_2 \approx J\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}(f(x_i)p(x_i)$$

Der J er Jacobi-determinanten og kan beregnes:

$$J = \Pi_{i=1}^{6}(b_i - a_i) = (b_i - a_i)^6$$

Som gir:

$$A \approx (b_i - a_i)^6 \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}(f(x_i)p(x_i)$$

7.2.3 Utledning av uniforme distribuerte tilfeldige tall

Antar generell uniform distribusjon:

$$p(y)dy = \begin{cases} \frac{dy}{b-a}, y \in [a,b] \\ \\ 0, ellers \end{cases}$$

Ønsker å relatere dette til x-verdiene, $x \in [0, 1]$:

$$p(y)dy = \frac{dy}{b-a} = dxp(x) = dx$$

Ved integrasjon:

$$\int_0^x dx' = \int_a^y \frac{dy'}{b-a}$$

Altså:

$$x = \frac{y}{b-a} - \frac{a}{b-a}$$

Dersom y står alene:

$$y = a + (b-a)x$$

For å ikke gjøre dette forvirrende med variabler kalles denne s_i:

$$s_i = a + (b-a)x_i$$

Det er s-verdiene som inngår i funksjonen for å beregne integralet ved Brute Force.

7.2.4 Utledning av sfæriske koordinater

For Importance Sampling ble det valgt en eksponentiell distribusjonsfunksjon og deretter byttet om til sfæriske koordinater. Starter med:

$$p(r)dr = dr4e^{-r4} = dxp(x) = dx$$

Integrer på begge sidene:

$$x(r) = P(r) = \int_0^r 4e^{-4r}dr' = 1 - e^{-4r}$$

Skriver det som funksjon av r_i:

$$r_i = \frac{1}{4}\ln(1-x_i),$$

For å gjøre det enklere brukes $\cos(\theta)_i$ som variabel istedenfor θ_i. Siden $\theta_i \in [0, \pi]$ blir $\cos(\theta_i) \in [-1, 1]$. Derfor kan $\cos(\theta_i)$ fås ved:

$$\cos(\theta)_i = 2x_i - 1$$

Når det gjelder $\phi \in [0, 2\pi]$ kan dette skrives på følgende måte:

$$\phi_i = 2\pi x_i$$

Der $x_i \in [0, 1]$.

7.2.5 Utledning av A med Importance Sampling

Ser på integralet på følgende vis:

$$A = \int_{-\infty}^{\infty} ... \int_{-\infty}^{\infty} f(x1, y1, z1, x2, y2, z2) dx_1 dy_1 dz_1 dx_2 dy_2 dz_2$$

Der

$$f(x1, y1, z1, x2, y2, z2) = e^{-4(r_1+r_2)} \frac{1}{|r_1 - r_2|}$$

Ved å transformere fra kartesiske til sfæriske koordinater fås det følgende:

$$A = \int_{-\infty}^{\infty} ... \int_{-\infty}^{\infty} f(x1, y1, z1, x2, y2, z2) dx_1 dy_1 dz_1 dx_2 dy_2 dz_2$$

$$= \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} \int_0^{\pi} \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{-4r_1} e^{-4r_2} \frac{1}{r_{12}} r_1^2 r_2^2 dr_1 dr_2 dcos(\theta_1) dcos(\theta_2) d\phi_1 d\phi_2$$

Dette gir den nye funksjonen:

$$f(r_1, r_2, \cos(\theta)_1, \cos(\theta)_2, \phi_1, \phi_2) = r_1^2 r_2^2 e^{-4r_1} e^{-4r_2} \frac{1}{r_{12}}$$

Dette kan kan skrives som:

$$A = \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} \int_0^{\pi} \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{f(r_1, r_2, \cos(\theta)_1, \cos(\theta)_2, \phi_1, \phi_2)}{p(r)} p(r) ...$$

$$...dr_1 dr_2 dcos(\theta_1) dcos(\theta_2) d\phi_1 d\phi_2$$

$$A = \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} \int_0^{\pi} \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{f(r_1(x_i), r_2(x_i), \cos(\theta)_1(x_i), \cos(\theta)_2(x_i), \phi_1(x_i), \phi_2(x_i))}{p(r(x_i))} ...$$

$$...dr_1 dr_2 dcos(\theta_1) dcos(\theta_2) d\phi_1 d\phi_2$$

Integralet kan dermed approksimeres til:

$$A \approx J \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \frac{f(r_1(x_i), r_2(x_i), \cos(\theta)_1(x_i), \cos(\theta)_2(x_i), \phi_1(x_i), \phi_2(x_i))}{p(r(x_i))}$$

$$= J \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \frac{r_1^2 r_2^2}{r_{12}}$$

Der $J = (2\pi)^2 2^2 \frac{1}{4^2}$ er Jacobi determinanten.

8 Bibliografi

[1] Morten Hjorth-Jensen, august 2015, Computational Physics Lecture Notes, 5 Numerical Integration and 11 Outline of the Monte Carlo Strategy, (https://github.com/CompPhysics/ComputationalPhysics/ blob/master/doc/Lectures/lectures2015.pdf)

[2] Morten Hjorth-Jensen, 2019, Codeexamples, (https://github.com/CompPhysics/ComputationalPhysics/tree/master/doc/Projects/ 2019/Project3/CodeExamples)

[3] Morten Hjorth-Jensen, september 2019 Project 3, (https://github.com/CompPhysics/ComputationalPhysics/blob/master/doc/Projects /2019/Project3/pdf/Project3.pdf).

Link til githubmappen: https://github.com/philipkarim/Philip-and-Rohullah-ComFys