Τυχαίοι Αριθμοί

και Monte Carlo ολοκλήρωση

Αριθμητική Ολοκλήρωση

Επίλυση ολοκληρωμάτων με τυχαίους αριθμούς

Χρησιμοποίηση τυχαίων αριθμών για επίλυση ολοκληρωμάτων

Η μέθοδος Monte Carlo δίνει μια διαφορετική προσέγγιση για την επίλυση ενός ολοκληρώματος

Τυχαίοι αριθμοί

Η συνάρτηση rand προσφέρει μια ακολουθία τυχαίων αριθμών ομοιόμορφα κατανεμημένων στο διάστημα [0,1)

Δύο βασικές μέθοδοι χρησιμοποιούνται για την επίλυση ολοκληρωμάτων

- Μέθοδος επιλογής ή δειγματοληψίας
- Μέθοδος μέσης τιμής

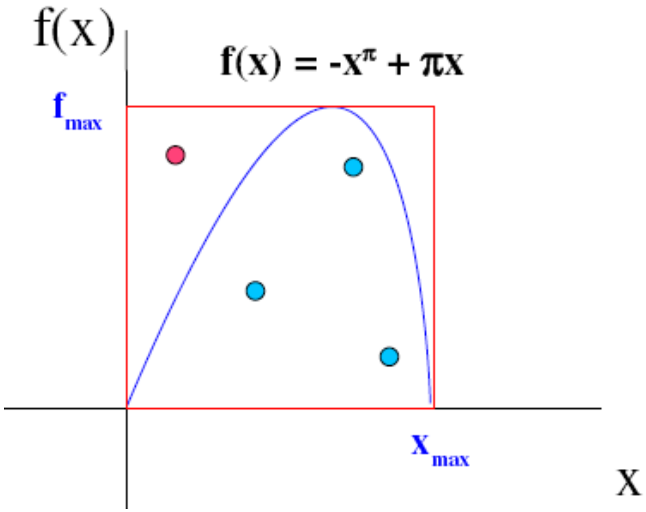
Monte Carlo – Μέθοδος δειγματοληψίας

- Περικλείουμε την συνάρτηση που θέλουμε να ολοκληρώσουμε μέσα σε ένα ορθογώνιο στο διάστημα της ολοκλήρωσης
  - Υπολογίζουμε το εμβαδό του ορθογωνίου
- Εισάγουμε τυχαία σημεία στο ορθογώνιο
  - Μετρούμε τα σημεία που βρίσκονται μέσα στο ορθογώνιο και αυτά που περικλείονται από την συνάρτηση
  - Το εμβαδό της συνάρτησης (ολοκλήρωμα) στο διάστημα ολοκλήρωσης δίνεται από

$$E_{f(x)} = E_{o\rho\theta o\gamma.} \times \frac{N_{f(x)}}{N_{o\rho\theta o\gamma.}}$$

Όπου $N_{f(\chi)}$= αριθμός 

$N_{o\rho\theta o\gamma.}$ = αριθμός 



Monte Carlo – Μέθοδος δειγματοληψίας

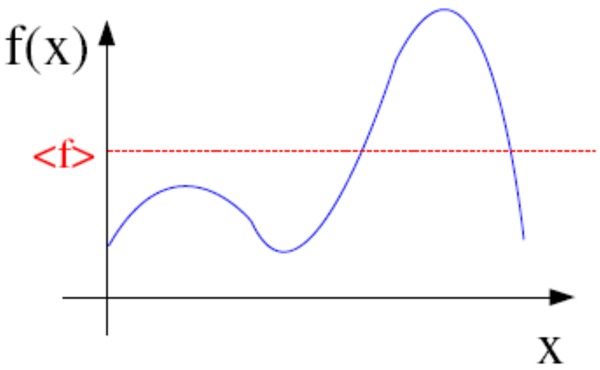
```
#!/usr/bin/python3

'''
!--------------------------------------------------------
! Paradeigma oloklirwsis tis methodou aporripsis
! xrisimopoiontas tyxaioys arithmoys
! Efarmogi sti synartisi F(x) = x**2*exp(-x).
! Apotelesma einai -(x^2+2x+2)exp(-x)~1.99446
!--------------------------------------------------------
'''
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from random import random, seed

Ntries = int(input("How many tries to estimate the integral ? "))
iseed = 123456
seed(iseed)

def myfunc(x):
    return x**x * np.exp(-x)

ymax   =  0.55       # mexisti timi tis oloklirwteas sunartisis (paragwgos 0)
ymin   =  0.         # elaxisti timi tis oloklirwteas sunartisis
xlolim =  0.         # katw orio oloklirwsis
xuplim = 10.         # panw orio oloklirwsis

Npass  = 0.          # Metritis epityxeiwn
for itries in range(Ntries):
    x = random()                     # tyxaio simeio sto diastima [0,1)
    x = xlolim + (xuplim - xlolim)*x  # metatropi sto diastima [0,10)

    ftest=ymin + ymax * random()      # tuxaia metavliti ftest sto [0,ymax)
    if myfunc(x) > ftest :
        Npass = Npass+1.             # H f(x) perase to ftest

A = (ymax-ymin)*(xuplim-xlolim) # Embado tou orthog. pou perikleiei ti sunartisi
integral= A * Npass/Ntries
print("Meta apo %6d prospatheies to oloklirwma einai %6.4f:"%(Ntries,integral))
```

Monte Carlo - Μέθοδος Μέσης Τιμής

Η ολοκλήρωση με Monte Carlo γίνεται με το να πάρουμε τη μέση τιμή της συνάρτησης υπολογιζόμενη σε τυχαία επιλεγμένα σημεία μέσα στο διάστημα ολοκλήρωσης

$$I = \int_{x_a}^{x_b} f(x)dx = (b-a) < f(x) >$$

$$< f(x) > \simeq \frac{1}{N}\sum_{i=0}^{N} f(x_i)$$



Το στατιστικό σφάλμα: $\delta I = \sigma_{\bar{f}}$ όπου $\sigma_{\bar{f}} = \frac{\sigma_f}{\sqrt{N}}$

Monte Carlo - Μέθοδος Μέσης Τιμής

```
#!/usr/bin/python3
'''
!-----------------------------------------------------
! Paradeigma oloklirwsis tis methodou mesis timis
! xrisimopoiontas tyxaioys arithmoys
! Efarmogi sti synartisi F(x) = x**2*exp(-x).
! Apotelesma einai -(x^2+2x+2)exp(-x)~1.99446
!-----------------------------------------------------
'''
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from random import random, seed

def integrand(x):
    y = x * x * np.exp(-x)
    return y

def monte_carlo_integration(ntr,LowLim,UpLim):
    value=0.
    for i in range(ntr):
        rnd = LowLim + (UpLim-LowLim)* random()
        rvs = integrand(rnd)
        value = value + rvs
    expected_value = (UpLim-LowLim)*(value/ntr)
    return expected_value


ntries = int(input("How many tries to evaluate the integral ? "))
lowlimit = float(input("The low limit of integration "))
hilimit = float(input("The upper limit of integration "))
iseed = 123456
seed(iseed)

result = monte_carlo_integration(ntries,lowlimit, hilimit)
print("After %6d tries, the integral is %10.5f"%(ntries,result))
```

Monte Carlo - Ολοκλήρωση σε πολλές διαστάσεις

Εύκολο να γενικεύσουμε τη μέθοδο της μέσης τιμής σε πολλές διαστάσεις

Το σφάλμα στη μέθοδο ολοκλήρωσης με Monte Carlo είναι στατιστικό

Ελαττώνεται ως $1/\sqrt{N}$

Για 2 διαστάσεις:

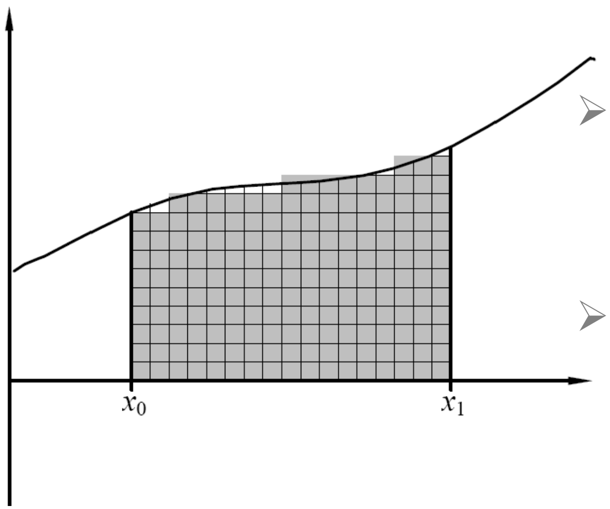
$$I = \int_a^b dx_1 \int_c^d dx_2 f(x,y) \simeq (b-a)(d-c) \times \frac{1}{N} \sum_i^N f(x_i, y_i)$$

Αριθμητική ολοκλήρωση

- Υπάρχουν πολλοί λόγοι που κάποιος θέλει να κάνει αριθμητική ολοκλήρωση:
  - Το ολοκλήρωμα είναι δύσκολο να υπολογισθεί αναλυτικά
  - Ολοκλήρωση πίνακα δεδομένων

- Διάφοροι τρόποι ολοκλήρωσης ανάλογα με το πρόβλημα

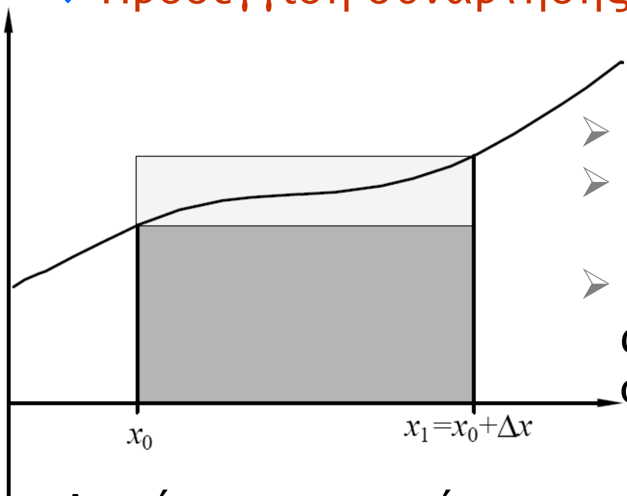
- Ολοκλήρωση με το "χέρι"



- Ένας τρόπος είναι να χρησιμοποιήσουμε ένα πλέγμα πάνω στο γράφημα της συνάρτησης προς ολοκλήρωση και να μετρήσουμε τα τετράγωνα (μόνο αυτά που περιέχονται κατά 50% από τη συνάρτηση).
- Αν οι υποδιαιρέσεις του πλέγματος (τετράγωνα) είναι πολύ μικρές τότε μπορούμε να προσεγγίσουμε αρκετά καλά το ολοκλήρωμα της συνάρτησης.

Αριθμητική ολοκλήρωση

❖ Προσέγγιση συνάρτησης με σταθερά



- Ο πιο απλός τρόπος ολοκλήρωσης.
- Υποθέτουμε ότι η συνάρτηση f(x) είναι σταθερή στο διάστημα (x_0,x_1)
- Η μέθοδος δεν είναι ακριβής και οδηγεί σε αμφίβολα αποτελέσματα ανάλογα με το αν η σταθερά επιλέγεται στην αρχή ή το τέλος του διαστήματος ολοκλήρωσης.

Αν πάρουμε το ανάπτυγμα Taylor της συνάρτησης f(x) ως προς το κατώτερο όριο:

$$\int_{x_0}^{x+\Delta x} f(x)dx = \int_{x_0}^{x+\Delta x}\left[f(x_0)+f'(x_0)(x-x_0)+\frac{1}{2}f''(x_0)(x-x_0)^2+\cdots\right]dx$$

σταθερά

$$= f(x_0)\Delta x+\frac{1}{2}f'(x_0)(x-x_0)^2+\frac{1}{6}f''(x_0)(x-x_0)^3+\cdots \quad = f(x_0)\Delta x+O(\Delta x^2)$$

Αν η σταθερά λαμβάνεται από το πάνω όριο ολοκλήρωσης θα είχαμε:

$$\int_{x_0}^{x_0+\Delta x} f(x)dx = f(x_0+\Delta x)\Delta x+O(\Delta x^2)$$

- Το σφάλμα και στις 2 περιπτώσεις είναι τάξης $O(\Delta x^2)$ με το συντελεστή να καθορίζεται από τη τιμή της 1ης παραγώγου

Αριθμητική ολοκλήρωση – Κανόνας του τραπεζίου

Θεωρήστε το ανάπτυγμα της σειράς Taylor που ολοκληρώνεται μεταξύ x_0 και $x_0+\Delta x$

$$\int_{x_0}^{x+\Delta x} f(x)dx = \int_{x_0}^{x+\Delta x} \left[f(x_0) + f'(x_0)(x-x_0) + \tfrac{1}{2} f''(x_0)(x-x_0)^2 + \cdots \right] dx$$

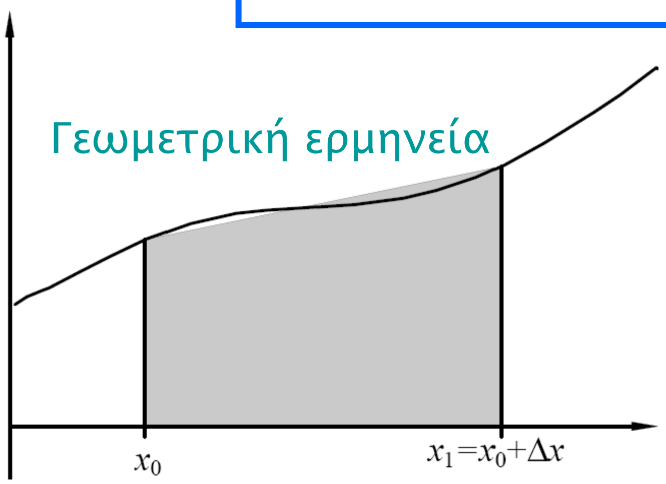
$$= f(x_0)\Delta x + \tfrac{1}{2} f'(x_0)\Delta x^2 + \tfrac{1}{6} f''(x_0)\Delta x^3 + \cdots$$

$$= \left\{ \tfrac{1}{2} f(x_0) + \tfrac{1}{2}\left[f(x_0) + f'(x_0)\Delta x + \tfrac{1}{2} f''(x_0)\Delta x^2 + \cdots \right] - \tfrac{1}{12} f''(x_0)\Delta x^2 + \cdots \right\} \Delta x$$

$$= \boxed{\tfrac{1}{2}\left[f(x_0) + f(x_0+\Delta x) \right]\Delta x} + O(\Delta x^3)$$

Κανόνας του τραπεζίου

Σφάλμα προσέγγισης

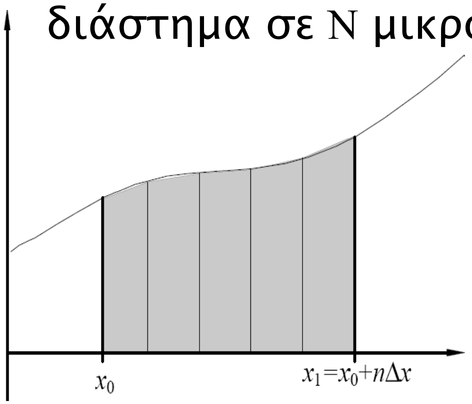


Αφού το σφάλμα ελαττώνεται κατά Δx^3 κάνοντας το διάστημα μισό το σφάλμα θα μικραίνει κατά 8

Αλλά η περιοχή θα ελαττωθεί στο μισό και θα πρέπει να χρησιμοποιήσουμε το κανόνα 2 φορές και να αθροίσουμε.
Το σφάλμα τελικά ελαττώνεται κατά 4

Αριθμητική ολοκλήρωση – Κανόνας του τραπεζίου

Συνήθως όταν θέλουμε να ολοκληρώσουμε σε ένα διάστημα x_0, x_1 χωρίζουμε το διάστημα σε N μικρότερα διαστήματα $\Delta x=(x_1-x_0)/N$



Εφαρμόζοντας το κανόνα του τραπεζίου

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x)dx = \sum_{i=0}^{n-1} \int_{x_0+i\Delta x}^{x_0+(i+1)\Delta x} f(x)dx$$

$$\approx \frac{\Delta x}{2}\sum_{i=0}^{n-1}\Big[f\big(x_0+i\Delta x\big)+f\big(x_0+(i+1)\Delta x\big)\Big] \Rightarrow$$

$$\boxed{\int_{x_0}^{x_1} f(x)dx \approx \frac{\Delta x}{2}\Big[f\big(x_0\big)+2f\big(x_0+\Delta x\big)+2f\big(x_0+2\Delta x\big)+\cdots+2f\big(x_0+(n-1)\Delta x\big)+f\big(x_1\big)\Big]}$$

Ενώ το σφάλμα για κάθε βήμα είναι Δx^3 το συνολικό σφάλμα είναι αθροιστικό ως προς όλα τα βήματα (N) και επομένως θα είναι N φορές $O(\Delta x^2) \sim O(N^{-2})$

Στα παραπάνω υποθέσαμε ότι το βήμα, Δx, είναι σταθερό σε όλο το διάστημα.
Θα μπορούσε ωστόσο να μεταβάλλεται σε μια περιοχή (να 'ναι πιο μικρό) ώστε να έχουμε μικρότερο σφάλμα. π.χ. περιοχές με μεγάλη καμπύλωση της συνάρτησης
Προσοχή το σφάλμα παραμένει και πάλι της τάξης $O(\Delta x^2)$ αλλά οι υπολογισμοί θα είναι πιο ακριβείς
Αυτό το κάνουμε γιατί σε περιοχές μεγάλης καμπύλωσης η 2η παράγωγος της συνάρτησης θα γίνει πολύ μεγάλη οπότε μικρότερο Δx θα κρατήσει τον όρο μικρό

Αριθμητική ολοκλήρωση – Κανόνας μέσου σημείου

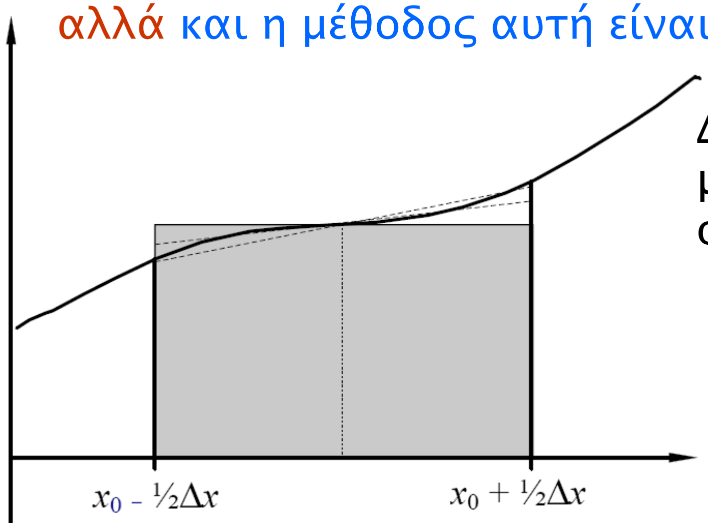
Μια παραλλαγή του κανόνα του τραπεζίου είναι ο κανόνας του μέσου σημείου

Η ολοκλήρωση του αναπτύγματος Taylor γίνεται από x_0-$\Delta x/2$ σε x_0+$\Delta x/2$ οπότε:

$$\int_{x_0-\frac{1}{2}\Delta x}^{x_0+\frac{1}{2}\Delta x} f(x)dx = \int_{x_0-\frac{1}{2}\Delta x}^{x_0+\frac{1}{2}\Delta x}\left[f(x_0)+f'(x_0)(x-x_0)+\tfrac{1}{2}f''(x_0)(x-x_0)^2+\cdots\right]dx \Rightarrow$$

$$\boxed{\int_{x_0-\frac{1}{2}\Delta x}^{x_0+\frac{1}{2}\Delta x} f(x)dx \approx f(x_0)\Delta x + \frac{1}{24}f''(x_0)\Delta x^3+\cdots}$$

Υπολογίζοντας τη συνάρτηση στο μέσο κάθε διαστήματος το σφάλμα μπορεί να ελαττωθεί κάπως μια και ο παράγοντας μπροστά από τον όρο της 2ης παραγώγου είναι 1/24 αντί του 1/12 που έχουμε στη μέθοδο του τραπεζίου
αλλά και η μέθοδος αυτή είναι τάξης $O(\Delta x^2)$



Διαχωρίζοντας το διάστημα σε υποδιαστήματα μπορούμε να ελαττώσουμε το σφάλμα όπως και στην περίπτωση του κανόνα του τραπεζίου:

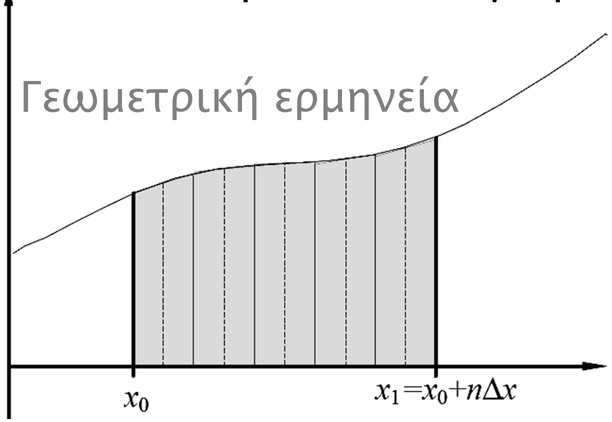
$$\int_{x_0}^{x_1} f(x)dx \approx \Delta x\sum_{i=0}^{n-1} f\left(x_0+\left(i+\tfrac{1}{2}\right)\Delta x\right)$$

Αριθμητική ολοκλήρωση – Κανόνας μέσου σημείου

Κανόνας μέσου σημείου: $\int_{x_0}^{x_1} f(x)dx \approx \Delta x \sum_{i=0}^{n-1} f\left(x_0 + \left(i + \frac{1}{2}\right)\Delta x\right)$

Κανόνας τραπεζίου: $\int_{x_0}^{x_1} f(x)dx \approx \frac{\Delta x}{2}\left[f(x_0) + 2f(x_0+\Delta x) + 2f(x_0+2\Delta x) + \cdots + 2f(x_0+(n-1)\Delta x) + f(x_1)\right]$

Η διαφορά τους είναι μόνο στη “φάση” των σημείων και της περιοχής υπολογισμού, και στον τρόπο υπολογισμού του πρώτου και τελευταίου διαστήματος



Ωστόσο υπάρχουν δύο πλεονεκτήματα της μεθόδου του ενδιάμεσου σημείου σε σχέση με την μέθοδο του τραπεζίου:

A) Χρειάζεται ένα υπολογισμό της $f(x)$ λιγότερο

B) Μπορεί να χρησιμοποιηθεί πιο αποτελεσματικά για τον υπολογισμό του ολοκληρώματος κοντά σε μια περιοχή που υπάρχει ολοκληρώσιμο ιδιάζων σημείο