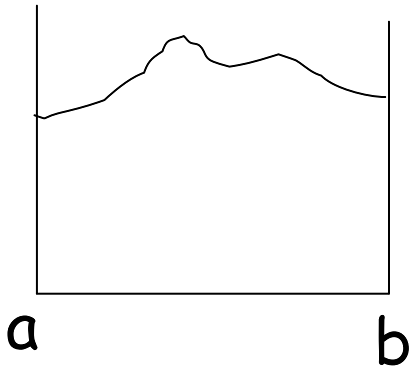
Metodo Monte Carlo per l'integrazione

Richiamo dei metodi di integrazione numerica

$$F = \int_a^b f(x)dx$$



Approx. rettangolare

$$\Delta x = \frac{b-a}{n} \qquad F_n = \sum_{k=0}^{n-1} f(x_k)\Delta x$$

Regole del trapezio e di Simpson

Regola del trapezio

$$F_n = \left[\frac{1}{2} f(x_0) + \sum_{k=1}^{n-1} f(x_i) + \frac{1}{2} f(x_n) \right] \Delta x$$

Regola di Simpson

$$F_n = \frac{1}{3} \left[f(a) + 4f(x_1) + 2f(x_2) + \ldots + 4f(x_{n-1}) + f(b) \right] \Delta x$$

Calcolo dell'errore $\left|F_n - F\right|$

$$f(x) = f(x_i) + f'(x_i)(x - x_i) + \frac{1}{2} f''(x_i)(x - x_i)^2 + \ldots$$

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx = f(x_i)\Delta x + \frac{1}{2} f'(x_i)\Delta x^2 + \frac{1}{6} f''(x_i)\Delta x^3 + \ldots$$

errore su ogni step $\Delta_i \approx \frac{1}{2} f'(x_i)\Delta x^2$

errore totale $n\Delta_i = n(\Delta x)^2 = n\left(\frac{b-a}{n}\right)^2 \propto \frac{1}{n}$

Andamento dell'errore

Regola del trapezio $$\Delta \propto \frac{1}{n^2}$$

Regola di Simpson $$\Delta \propto \frac{1}{n^4}$$

La regola di Simpson va meglio delle altre

Verificare i risultati per Simpson

Errore in dimensione d

Se per un integrale unidimensionale vale $\Delta \propto \frac{1}{n^{a}}$

Per un integrale in d dimensioni vale $\Delta \propto \frac{1}{n^{a/d}}$

Regola di Simpson:

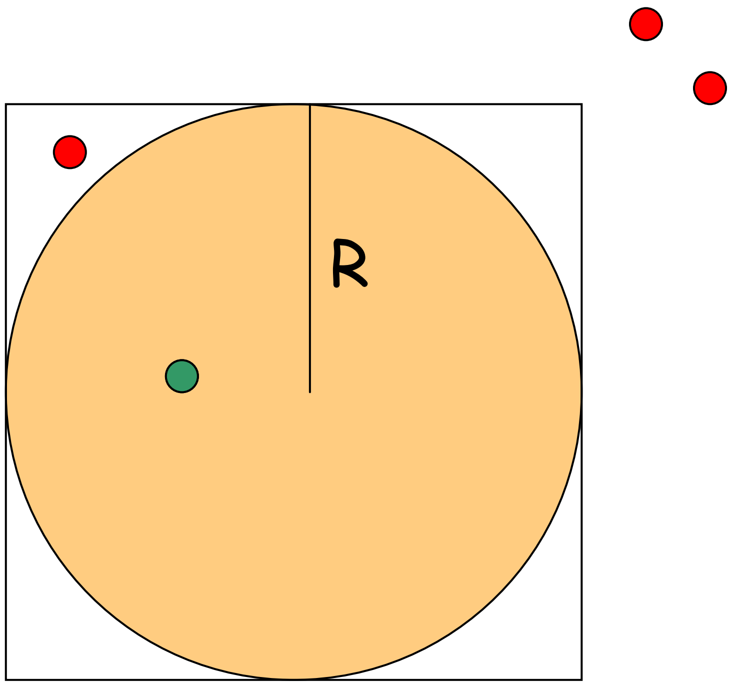
$$\mathrm{d}=1 \quad \Delta \propto \frac{1}{n^{4}} \qquad \mathrm{d}=2 \quad \Delta \propto \frac{1}{n^{2}} \qquad \mathrm{d}=3 \quad \Delta \propto \frac{1}{n^{4/3}}$$

Integrazione Monte Carlo

$$\Delta \propto \frac{1}{\sqrt{n}} \quad \text{per qualsiasi d}$$

Calcolo di π

M. Lazzarini 1901 (Buffon '800)



Numero tentativi: $\mathbf{N_t}$

Numero successi: $\mathbf{N_s}$

$$\frac{\text{Area cerchio}}{\text{Area quadrato}} = \frac{N_s}{N_t}$$

$$\frac{\text{Area cerchio}}{\text{Area quadrato}} = \frac{\pi R^2}{(2R)^2} = \frac{\pi}{4}$$

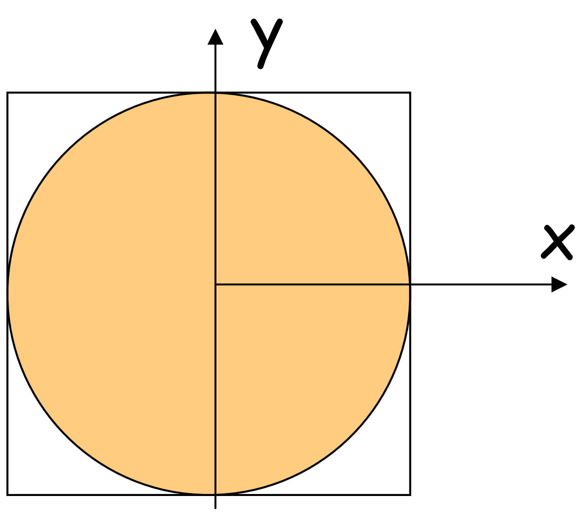
$$\boxed{\pi = 4\frac{N_s}{N_t}}$$

Calcolo di π

Lazzarini: con 3407 lanci $\rightarrow$ 3.1415929 (?)

Versione moderna: si usa il computer

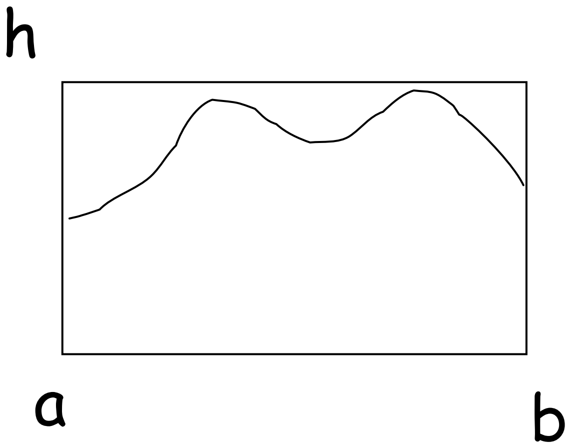
- si estraggono due numeri random in modo da avere un punto a caso $-R < x < R$ $-R < y < R$



Con 10^7 tentativi

$\pi = 3.14173$

Integrazione Monte Carlo hit and miss



$$A = (b-a)h$$

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

Scelta random di $a \le x_i \le b$ e $0 \le y_i \le \mathrm{h}$

if $y_i \le f(x_i)$ then hit else miss

$$F_n = A\frac{n_S}{n}$$

Integrare e^{-x} fra 0 e 1

Integrazione Monte Carlo basato sul metodo di sampling

Si sceglie un numero random x tale che $a \le x \le b$

$$F_n = (b-a) < f > = (b-a)\frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} f(x_k)$$

Come si stima l'errore ? $\left|F_n - F\right|$

Usare il programma per l'integrazione M.C. di $f(x) = 4\sqrt{1-x^2}$

Fra [0,1] il risultato è pi greco

Calcolo dell'errore nell'integrazione M.C.

Si può pensare di stimare l'errore usando la varianza

$$\sigma^2 = < f^2 > - < f >^2$$

$$< f > = \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} f(x_k)$$

$$< f^2 > = \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} f^2(x_k)$$

Ma l'errore stimato risulta troppo grande: vedere l'esempio precedente confrontando σ con

$$\left| F_n - \pi \right|$$

Stima dell'errore con run diversi

- Si effettuano vari run indipendenti della stessa lunghezza
- per ogni run si calcolano le medie e le varianze

$$< f >_\alpha = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^{n} f(x_k) \qquad \text{media ottenuta nel run } \alpha$$

Si calcola:

$$< f > = \frac{1}{m} \sum_{\alpha=1}^{m} < f >_\alpha \qquad < f^2 > = \frac{1}{m} \sum_{\alpha=1}^{m} < f^2 >_\alpha$$

e quindi:

$$\sigma_m^2 = < f^2 > - < f >^2$$

Stima dell'errore col metodo dei blocchi

- Si effettua un unico run di n step
- si divide il run in n_b blocchi di $m=n/n_b$ step

Valgono le formule di prima ma ora le somme vanno fatte sulle medie ottenute in ogni "blocco"

$$< f >_b = \frac{1}{n_b} \sum_{\alpha=1}^{n_b} < f >_\alpha$$

L'errore risulta essere da $\sigma_b^2 =< f^2 >_b - < f >_b^{\,2}$

$$\Delta \approx \frac{\sigma_b}{\sqrt{m}}$$

Importance sampling (1)

Per migliorare la convergenza del metodo M.C. si può cercare di *migliorare* il *campionamento* sui punti estratti random. Se dobbiamo calcolare:

$$F = \int_a^b f(x)dx$$

Possiamo introdurre una funzione generica p(x) che soddisfi

$$\int_a^b p(x)dx = 1$$

Trasformiamo l'integrale

$$F = \int_a^b \frac{f(x)}{p(x)}[p(x)dx]$$

Importance sampling (2)

L'integrale può essere calcolato come

$$F = \int_a^b \frac{f(x)}{p(x)}\left[p(x)dx\right] \approx F_n = \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n}\frac{f(x_k)}{p(x_k)}$$

dove ora le x_k sono distribuite secondo la funzione p(x) che deve essere scelta in modo opportuno.

La distribuzione che abbiamo usato finora è di tipo uniforme

$$p(x) = \frac{1}{b-a}$$

Distribuzioni non uniformi (1)

Abbiamo usato finora una distribuzione uniforme e vogliamo passare ad una distribuzione generica.

Distribuzione uniforme di numeri r con 0<r<1

$$p_u(r)dr = \begin{cases} dr & 0 < r < 1 \\ 0 & \text{altrimenti} \end{cases}$$

$$\int_0^1 p_u(r)dr = 1$$

Generica p(x) tale che p(x)dx è la probabilità che ci sia un evento nell'intervallo x-x+dx, vogliamo che

$$p_u(r)dr = p(x)dx$$

per ottenerla definiamo

$$W(x) = \int_{-\infty}^{x} p(x')dx' \qquad W(+\infty) = 1$$

Distribuzioni non uniformi (2)

$$W(x) = \int_{-\infty}^{x} p(x')dx'$$

$$\frac{dW}{dx} = p(x) \longrightarrow dW = p(x)dx = p_u(r)dr$$

$$W(r) = \int_{-\infty}^{r} p_u(x')dx' = \int_{0}^{r} p_u(x')dx' = r \qquad 0 < r < 1$$

dato che $p_u(x)dx = \begin{cases} dx & 0 < x < 1 \\ 0 & \text{altrimenti} \end{cases}$

Distribuzioni non uniformi (3)

$$W(x) = \int_{-\infty}^{x} p(x')dx' = r$$

Si ottiene x distribuito secondo p(x) invertendo questa relazione e ricavando

$$x = W^{(-1)}(r)$$

dove

$W^{(-1)}$ è l'inversa di W

Distribuzioni non uniformi (riassunto)

A partire dai numeri random r distribuiti in modo uniforme ***0<r<1***

si possono ottenere numeri x distribuiti secondo una p(x) invertendo la relazione

$$W(x) = \int_{-\infty}^{x} p(x')dx' = r$$

per avere

$$x = W^{(-1)}(r)$$

questa operazione non è sempre facile o possibile.

Esempio 1 (facile!)

Vogliamo *x* random distribuito uniformemente fra *a* e *b*

$$p(x) = \frac{1}{b-a}$$

$$W(x) = \int_a^x \frac{dx}{b-a} = \frac{x-a}{b-a} \longrightarrow \frac{x-a}{b-a} = r$$

quindi

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

Esempio 2 (meno facile)

Vogliamo x random distribuito in modo esponenziale

$$p(x) = \frac{1}{\lambda} e^{-x/\lambda} \qquad 0 \le x \le \infty$$

$$W(x) = \frac{1}{\lambda} \int_0^x e^{-x/\lambda} dx = 1 - e^{-x/\lambda} \qquad \longrightarrow \qquad 1 - e^{-x/\lambda} = r$$

quindi posso ottenere x con

$$x = -\lambda \log r$$

Scegliere una p(x) per importance sampling

La p(x) va scelta in modo da minimizzare la varianza dell'integrando

$$F_n = \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n}\frac{f(x_k)}{p(x_k)}$$

dovrebbe avere una varianza inferiore a

$$F_n = \frac{b-a}{n}\sum_{k=1}^{n} f(x_k)$$

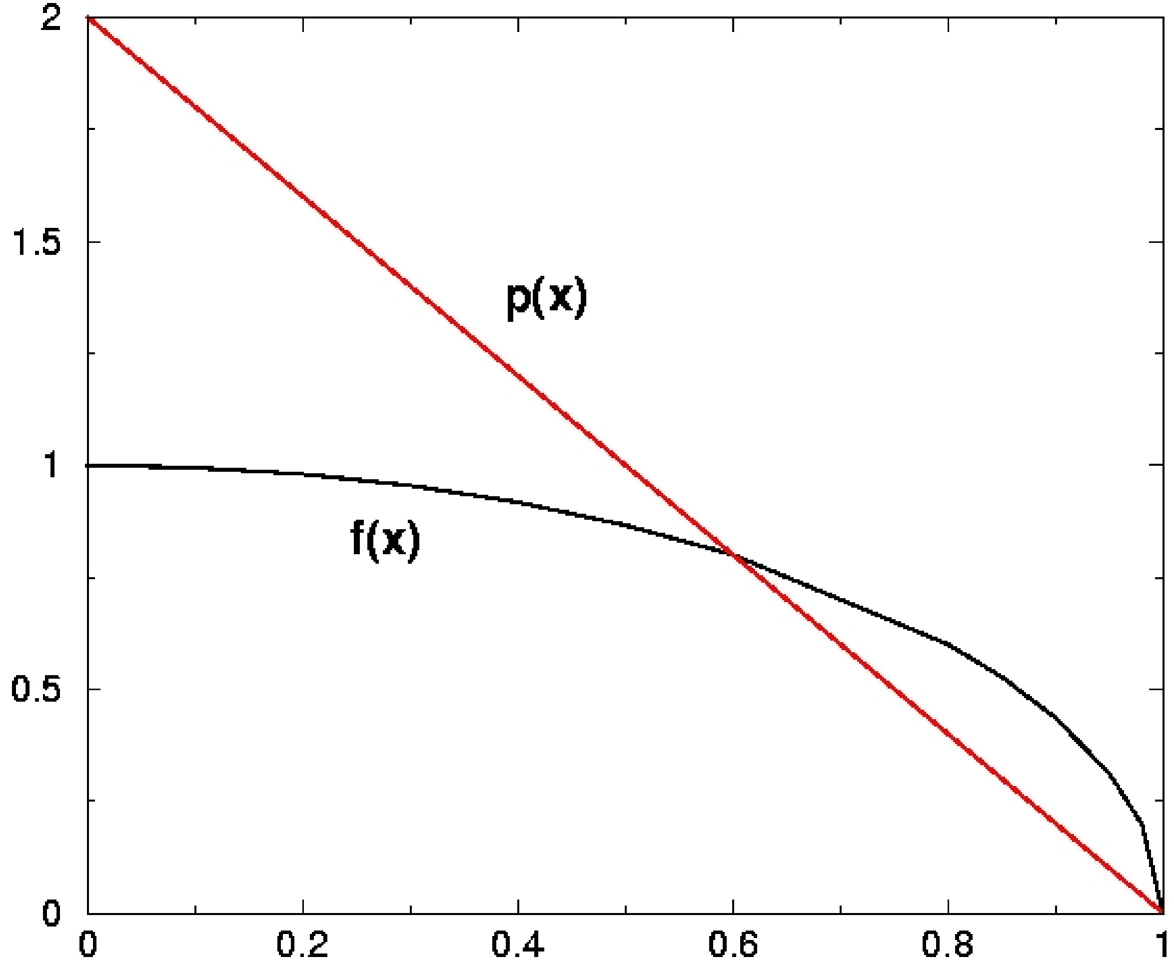
Esempio

$$f(x) = \sqrt{1 - x^2}$$

Provare ad integrarla con

$$p(x) = A(1 - x)$$

Naturalmente *A* deve essere tale da normalizzare la *p(x)* a 1


p(x)
f(x)
2
1.5
1
0.5
0
0
0.2
0.4
0.6
0.8
1

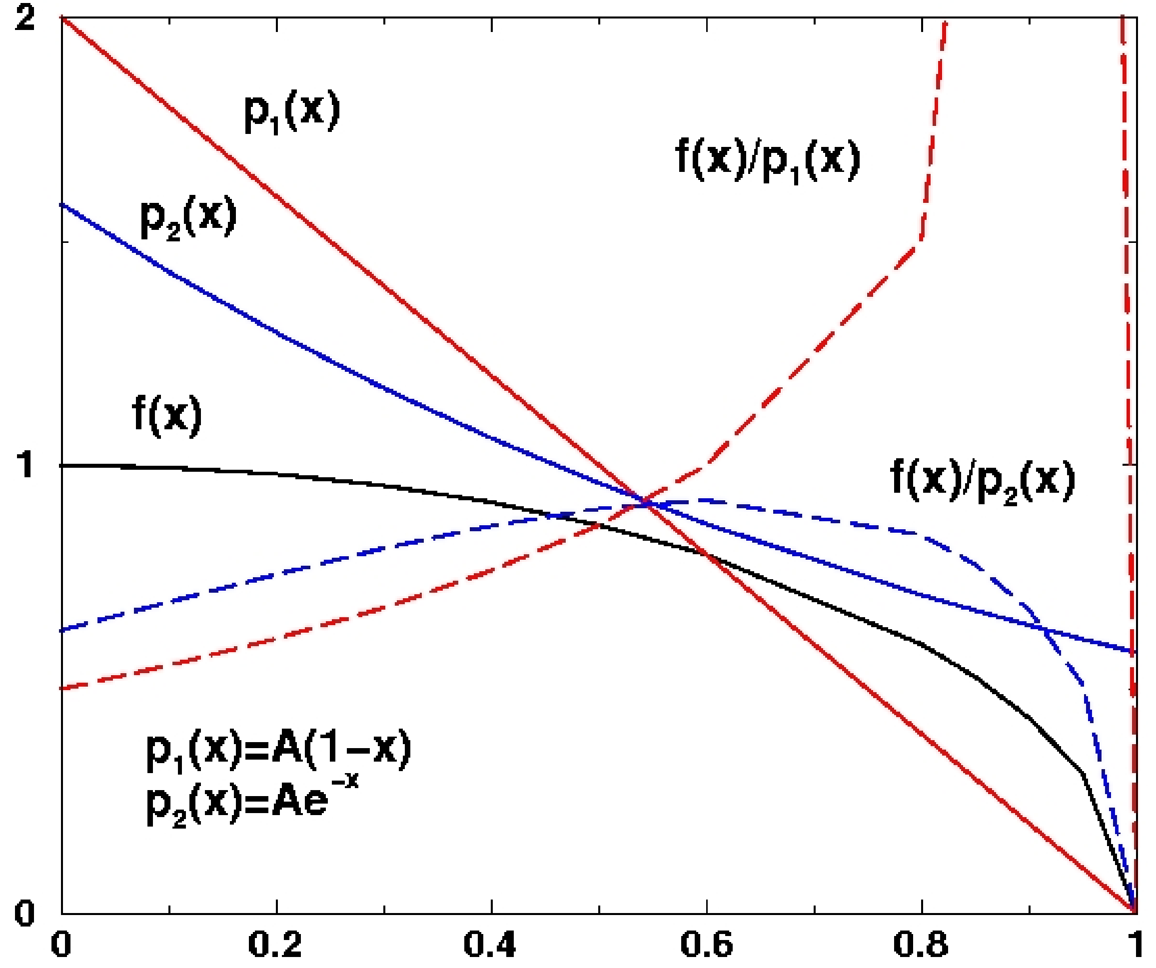
Prova con altra funzione p(x)

$$f(x) = \sqrt{1 - x^2}$$

usare ora

$$p(x) = Ae^{-x}$$

si vedrà un notevole miglioramento



2
1
0
0
0.2
0.4
0.6
0.8
1
p1(x)
p2(x)
f(x)
f(x)/p1(x)
f(x)/p2(x)
p1(x)=A(1−x)
p2(x)=Ae−x

Ancora un esempio

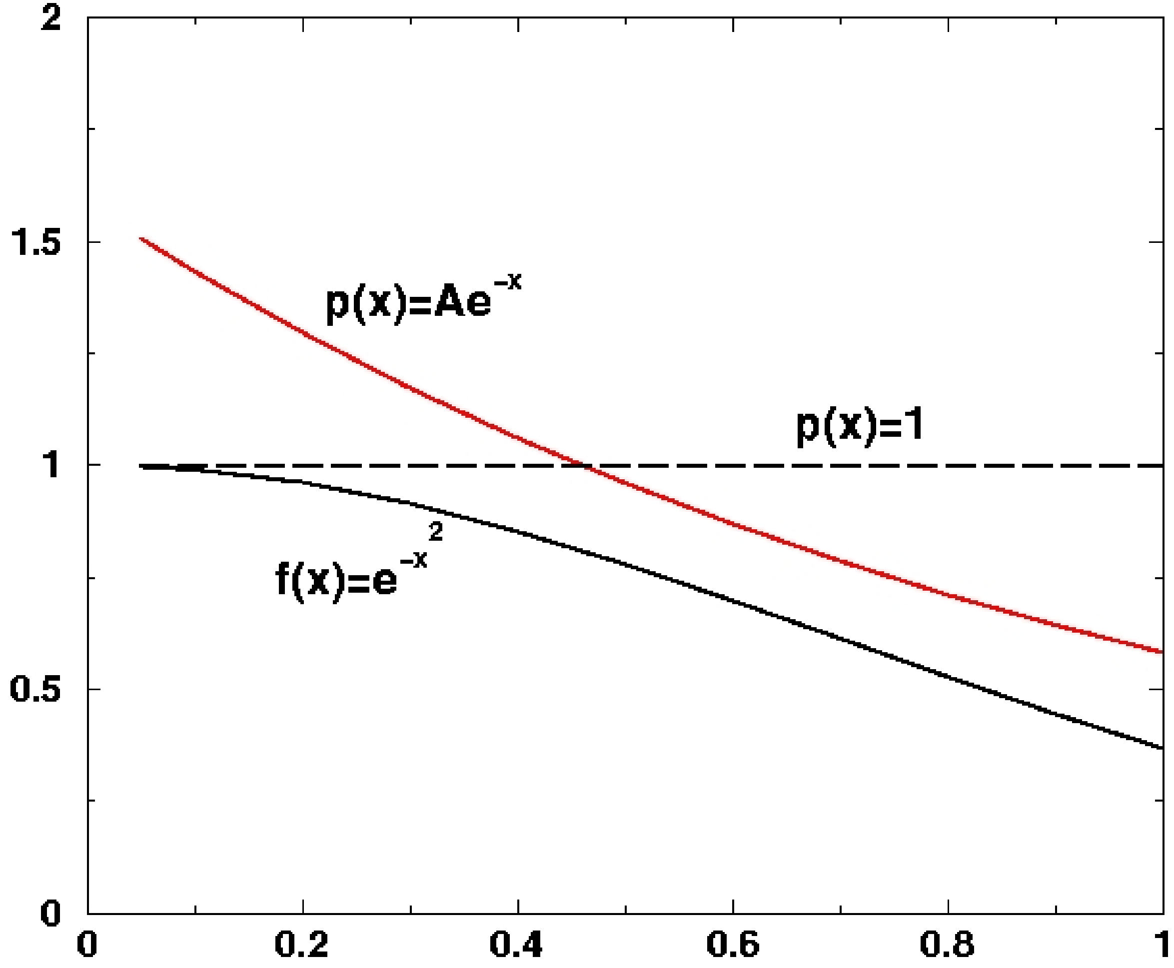
$$f(x) = e^{-x^2}$$

calcolare

$$\int_0^1 e^{-x^2} dx = \frac{1}{2}\sqrt{\pi} erf(1) = \frac{1}{2}\sqrt{\pi} 0.842700793$$

Con normale integrazione MC e poi con importance sampling usando:

$$p(x) = Ae^{-x}$$


2
1.5
1
0.5
0
0
0.2
0.4
0.6
0.8
1
p(x)=Ae^{-x}
p(x)=1
f(x)=e^{-x^2}

Integrazione Monte Carlo col rejection method

Metodo proposto da Von Neumann

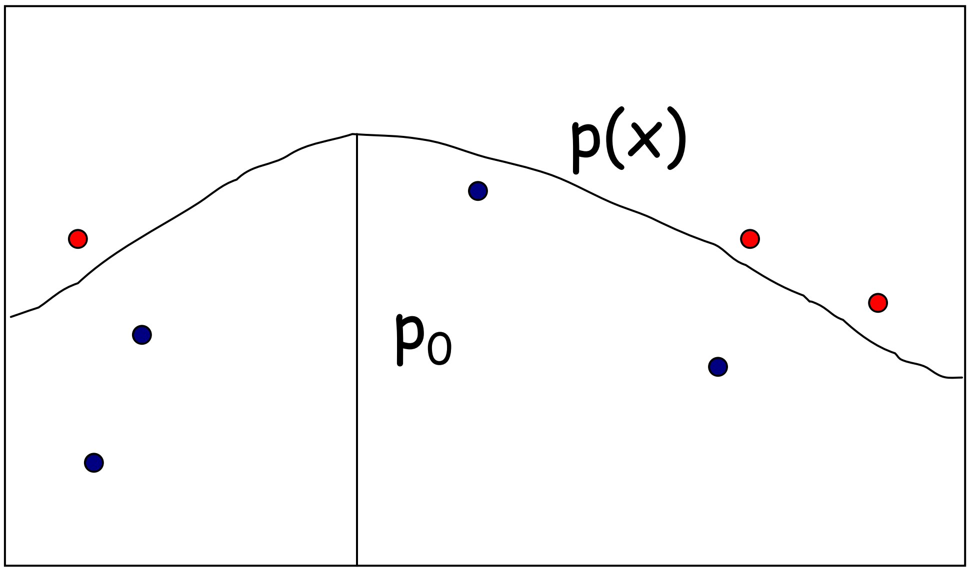
1. si calcola il massimo della p(x) : p0
2. si estrae un numero random r1
3. si ottiene x = a+r1*(b-a) e quindi p(x)
4. si estrae un secondo numero random r2
5. si calcola p1=p0*r2

Se **p1 < p(x)** si accetta $\Longrightarrow$ si calcola f(x)/p(x) e si torna al 2

altrimenti

si rifiuta e si torna al 2

Rejection method



Si riesce a mappare la funzione peso con una procedura di hit and miss

Esempio

Integrare la solita funzione

$$f(x) = \sqrt{1 - x^2}$$

con

$$p(x) = Ae^{-x}$$

ma usando il rejection method