

Numerická integrace metodou „crude“ Monte Carlo

Úkol

Použijte generátor pseudonáhodných čísel k numerickému výpočtu jednoduchého, dvojného a trojného integrálu. Analyzujte konvergenci výsledků a porovnejte s analytickým výpočtem.

Použitý software

Mathematica CalcCenter, Origin, předkompilované programy (i1.exe, i2.exe, i3.exe)

Zadané určité integrály

1. Jednoduchý integrál

$$I_1 = \int_0^{\pi} \sin x dx . \quad (1)$$

2. Dvojný integrál

$$I_2 = \iint_{\Omega} ye^x dx dy . \quad (2)$$

kde $\Omega = \langle 0,1 \rangle \times \langle 1,2 \rangle$.

3. Trojný integrál

$$I_3 = \iiint_{\Omega} 1 dx dy dz . \quad (3)$$

kde $\Omega = \{(x, y, z); x^2 + y^2 + z^2 \leq 1, z \geq 0\}$.

Použité soubory se zdrojovými kódy

V této úloze budete používat předkompilované programy a se zdrojovými kódy pracovat nebudete.

Teorie

Při výpočtu jednorozměrného integrálu (pro jednoduchost z kladné funkce $f(x)$)

$$I = \int_a^b f(x) dx ,$$

nejprve určíme maximum integrované funkce $\max(f(x))$. Dále generujeme dvojice pseudonáhodných čísel z kartézského součinu $\langle a,b \rangle \times \langle 0, \max(f(x)) \rangle$ a počítáme poměr mezi počtem bodů, které leží uvnitř integrované plochy N_u a počtem všech vygenerovaných bodů N . Hodnota integrálu se pak určí podle vztahu

$$I = \frac{N_u}{N} S ,$$

kde S je obsah obdélníka odpovídajícímu výše uvedenému kartézskému součinu.

Integraci metodou Monte Carlo lze také použít k výpočtu obsahu či objemu složitých geometrických útvarů, speciálně pak k výpočtu vícerozměrných integrálů. Zatímco analytickými metodami může být provedení výpočtu velice zdoluhavé, ne-li nemožné, metoda Monte Carlo poskytuje v tomto případě velice silný prostředek. Metodu Monte Carlo můžeme použít i u funkcí, které jsou dány tabulkou hodnot, získanou například experimentálními měřeními a jejich integrace jinými metodami bez předchozí interpolace dat je nemožná.

Postup výpočtu dvojrozměrného integrálu (2) funkce $f(x, y)$ na oblasti Ω je zobecněním postupu pro jednoduchý integrál. Uvažujeme jen jeden rozměr navíc, tj. generujeme trojice pseudonáhodných čísel a rozhodujeme, kolik vygenerovaných bodů N_u leží uvnitř integrovaného objemu z celkového počtu N bodů v oblasti $\Omega \times \langle 0, \max(f(x, y)) \rangle$. Hledaná hodnota dvojného integrálu je potom dána předpisem

$$I = \frac{N_u}{N} V,$$

kde V je objem geometrického útvaru odpovídajícímu výše uvedenému kartézskému součinu.

Postup při výpočtu integrálu (3) – trojného je založen podobných úvahách. Ale vzhledem k tomu, že se jedná o integrál z konstantní funkce rovné jedné, tj. o objem oblasti Ω , která nemá naopak jednoduchý tvar kartézského součinu jednorozměrných intervalů, redukuje se nám v podstatě úloha na dvojný integrál – určení objemu pod grafem funkce, dané tentokrát implicitně rovnicí $x^2 + y^2 + z^2 = 1$ pro kladné hodnoty z . Budeme tedy sledovat, kolik vygenerovaných bodů N_u leží pod grafem této funkce z celkového počtu N bodů, které generujeme v oblasti $\langle -1, 1 \rangle \times \langle -1, 1 \rangle \times \langle 0, 1 \rangle$.

Postup práce

I. Jednoduchý určitý integrál

1. V domácí přípravě si spočítejte první zadaný integrál (1).
2. Vykreslete si integrovanou funkci pomocí software Mathematica CalcCenter, graf si uložte a ověřte výpočet integrálu – spusťte Mathematica CalcCenter a postupně zadejte (do dalšího řádku přejdete vždy stiskem klávesy Enter):

```
f1[x_]:=Sin[x]
Export["D:\u09a.bmp", Plot[f1[x], {x, 0, Pi}], "BMP"]
Integrate[f1[x], {x, 0, Pi}]
```

Cestu pro uložení souboru si samozřejmě upravte podle potřeby a proveďte výpočet stiskem Shift+Enter. Celý soubor si uložte.
3. Proveďte výpočet integrálu Monte Carlo metodou – pravým tlačítkem myši poklepejte na ikonu připraveného programu `i1.exe` a zadejte požadovaný počet generovaných bodů a počet výpisů integrálů, prozatím obě hodnoty stejné, např. 10 000. Výsledek se zapisuje do souboru `i1.txt`.
4. Spusťte program Origin, načtěte textový soubor `i1.txt` s hodnotami integrálu v průběhu generování pseudonáhodných čísel (zvolte File/Import/Single ASCII a vyberte požadovaný soubor) a odpovídající závislost hodnoty integrálu na počtu generovaných bodů vykreslete (označte sloupce a zvolte Plot/Line). Do grafu přidejte i přesný výsledek (zvolte Graph/Add Function Graph) jako konstantní funkci.
5. Studujte konvergenci hodnoty integrálu s počtem generovaných bodů – proveďte výpočet pro větší počty generovaných bodů 10^6 , 10^7 a 10^8 (můžete zadávat ve tvaru $1e7$, $1e8$, $1e9$; stačí zvolit jeden výpis). Pokud nechcete ztratit obsah staršího souboru `i1.txt`, vždy starší soubor přejmenujte. Za účelem odhadu chyby výsledku proveďte všechny tyto výpočty pětkrát.

6. Spočítejte průměrnou hodnotu integrálu a odhady chyb pro jednotlivé počty 10^6 , 10^7 a 10^8 generovaných bodů a vše zaznamenejte do tabulky. Do tabulky přidejte i přesné řešení. Vyslovte závěry o konvergenci výsledku.

II. Dvojný integrál (2)

7. V domácí přípravě si integrál (2) spočítejte.
8. Vykreslete si integrovanou funkci pomocí software Mathematica CalcCenter, graf si uložte a ověřte výpočet integrálu – do již otevřeného souboru s příponou `nb` postupně zadejte (do dalšího řádku přejdete stiskem klávesy `Enter`):

```
f2[x_,y_]:=y*Exp[x]  
Export["D:\\u09b.bmp",Plot3D[f2[x,y],{x,0,1},{y,1,2}], "BMP"]  
Integrate[Exp[x],{x,0,1}]*Integrate[y,{y,1,2}]
```

Využili jsme toho, že dvojný integrál lze převést na dvojnásobný. Cestu pro uložení souboru si opět upravte podle potřeby a výpočet proveďte stiskem `Shift+Enter`. Soubor uložte.
9. Proveďte výpočty metodou Monte Carlo (`i2.exe`) a zpracujte výsledky (`i2.txt`) analogicky s body 3 - 6 postupu; jen v bodě 5 proveďte výpočty pro menší počty generovaných bodů.

III. Trojný integrál (3)

10. V domácí přípravě spočítejte integrál (3), řešení se zjednoduší substitucí do sférických souřadnic.
11. Pomocí software Mathematica CalcCenter vykreslete integrační oblast (přímo funkci vyreslit nemůžeme – graf by měl být čtyřrozměrný) a graf uložte – do již otevřeného souboru s příponou `nb` zadejte parametrické zadání plochy:

```
Export["D:\\u09c.bmp",ParametricPlot3D[{Sin[u]Cos[v],Sin[u]Sin[v],Cos[u]}, {u,-Pi/2,Pi/2},{v,0,Pi}], "BMP"]
```

Cestu pro uložení souboru si upravte podle potřeby a stiskněte `Shift+Enter`.
12. Proveďte výpočty metodou Monte Carlo (`i3.exe`) a zpracujte výsledky (`i3.txt`) analogicky s body 3 - 6 postupu; jen v bodě 5 proveďte výpočty pro menší počty generovaných bodů.

Doporučená literatura

literatura k lekci 11 kurzu KFY/PMFCH (viz <http://artemis.osu.cz/pmfch/lekce10.pps> nebo <http://artemis.osu.cz/pmfch/lekce10.pdf>)

NEZBEDA, I., KOLAFA, J., KOTRLA, M. *Úvod do počítačových simulací. Metody Monte Carlo a molekulární dynamiky*. Praha: Karolinum, 2003.

manuály k software Mathematica CalcCenter, Origin