

Całkowanie w czterech wymiarach metodą Monte Carlo

Tomasz Chwiej

20 stycznia 2014

1 Opis problemu

Naszym zadaniem jest numeryczne wyznaczenie wartości poniższej całki:

$$V = \iiint_{-\infty}^{\infty} d^2\vec{r}_1 d^2\vec{r}_2 \frac{\rho_1(\vec{r}_1)\rho_2(\vec{r}_2)}{r_{12}} \quad (1)$$

gdzie:

$$\rho_1(\vec{r}_1) = \frac{1}{2\pi\sigma^2} \exp\left(-\frac{(\vec{r}_1 - \vec{R}_{10})^2}{2\sigma^2}\right) = \frac{1}{2\pi\sigma^2} \exp\left(-\frac{(x_1 - X_{10})^2 + (y_1 - Y_{10})^2}{2\sigma^2}\right) \quad (2)$$

$$\rho_2(\vec{r}_2) = \frac{1}{2\pi\sigma^2} \exp\left(-\frac{(\vec{r}_2 - \vec{R}_{20})^2}{2\sigma^2}\right) = \frac{1}{2\pi\sigma^2} \exp\left(-\frac{(x_2 - X_{20})^2 + (y_2 - Y_{20})^2}{2\sigma^2}\right) \quad (3)$$

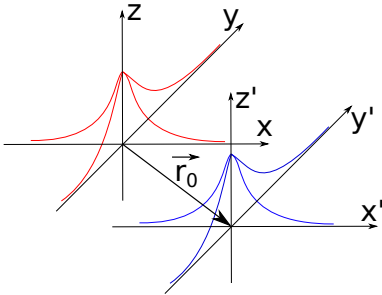
oraz

$$r_{12} = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2| = \sqrt{(x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2} \quad (4)$$

Zauważmy że funkcje ρ_1 i ρ_2 odpowiadają iloczynom Gaussowskich rozkładów prawdopodobieństwa

$$\rho_i(x, y) \rightarrow N(X_{i0}, \sigma) \cdot N(Y_{i0}, \sigma)$$

wobec czego, funkcją podcałkową jest tylko wyraz $1/r_{12}$. Całkę V można więc łatwo obliczyć metodą Monte Carlo jeśli założymy, że współrzędne położeniowe (x_1, y_1, x_2, y_2) mają rozkład normalny $N(\mu, \sigma)$.



Rysunek 1: Funkcja $\rho_2(\vec{r})$ jest przesunięta względem $\rho_1(\vec{r})$ o wektor $\vec{r}_0$.

Dokładną wartość całki V można wyznaczyć analitycznie:

$$V_{dok} = \frac{\sqrt{\pi}}{2\sigma} \exp\left(-\frac{r_0^2}{8\sigma^2}\right) I_0\left(\frac{r_0^2}{8\sigma^2}\right) \quad (5)$$

gdzie: $I_0(x)$ jest modyfikowaną funkcją Bessel'a pierwszego rodzaju (**jej wartość można wyznaczyć stosując funkcję `bessio(float x)` z `Numerical Recipes`**), a r_0 jest odległością pomiędzy środkami gaussianów $r_0 = |\vec{R}_{10} - \vec{R}_{20}|$.

2 Zadania do wykonania

1. Przyjmujemy $\sigma = 1$, wtedy do generowania liczb losowych o rozkładzie $N(0, 1)$ możemy wykorzystać schemat Boxa-Millera:

$$U_1, U_2 \in (0, 1] \quad (6)$$

$$Z_1 = \sqrt{-2\ln U_1} \cos(2\pi U_2) \quad (7)$$

$$Z_2 = \sqrt{-2\ln U_1} \sin(2\pi U_2) \quad (8)$$

$$Z_1, Z_2 \in N(0, 1) \quad (9)$$

Uwaga: dla $\sigma \neq 1$ zmienne losowe Z_1 i Z_2 trzeba przeskalować - przemnożyć przez σ .

2. Należy wyznaczyć wartość numeryczną całki V metodą MC dla liczby losowań $n = 10^i$, $i = 2, 3, 4, 5$ zakładając, że: $\vec{R}_{10} = (0, 0)$, $\vec{R}_{20} = (x_{20}, 0)$. Dla każdego n wartość x_{20} będziemy zmieniać w zakresie od 0.0 do 6.0 z krokiem $\Delta x = 0.1$. Numeryczną wartość całki liczymy tak:

$$V_n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n c_i \quad (10)$$

gdzie: c_i jest wartością funkcji podcałkowej dla współrzędnych losowych $\vec{r}_1 = (x_1, y_1)$ i $\vec{r}_2 = (x_2, y_2)$ w i -tym losowaniu. Współrzędne losujemy zgodnie z rozkładem $N(0, 1)$. **Należy pamiętać, aby po wylosowaniu liczb pseudolosowych do x_{20} dodać przesunięcie X_{20} , wtedy otrzymamy rozkład przesunięty $N(0, 1) \rightarrow N(X_{20}, \sigma)$ - skalować nie trzeba bo $\sigma = 1$**

Błąd wartości całki $\sigma_{\bar{V}}$:

$$\sigma_{\bar{V}} = \sqrt{\frac{\sigma^2}{n}} \quad (11)$$

$$\sigma^2 = \frac{1}{n} \left(\sum_{i=1}^n c_i^2 - \frac{1}{n} \left(\sum_{i=1}^n c_i \right)^2 \right) \quad (12)$$

3. Osobno dla każdej wartości n , na jednym rysunku umieścić wykresy $V_{dok} = f(r_0)$ oraz $V_n = f(r_0)$ wraz z zaznaczonym błędem całkowania.

W gnuplocie wykres z błędem rysujemy przy użyciu polecenia:

```
plot '100000.dat' u 1:2:3 w yerrorbars
```

gdzie: 1- kolumna to współrzędna x_{20} , 2- kolumna to wartość całki, 3 -kolumna to obliczony błąd.

4. W sprawozdaniu proszę dokonać analizy wyników oraz skomentować problem osobliwości funkcji podcałkowej.