

Całkowanie Monte Carlo - rozkład normalny i Maxwella

Tomasz Chwiej

19 czerwca 2018

1 Wstęp

1.1 Rozkład normalny $N(0, 1) \rightarrow N(\mu, \sigma)$

Do generowania liczb losowych dla rozkładu normalnego z $\mu = 0$ i $\sigma = 1$ najczęściej używa się algorytmu Boxa-Müllera. Dwie liczby o rozkładzie $N(0,1)$ (z_1, z_2) otrzymamy stosując transformację dwóch liczb losowych o rozkładzie jednorodnym ($x_1, x_2 \in (0, 1]$):

$$z_1 = \sqrt{-2\ln(x_1)}\cos(2\pi x_2) \quad (1)$$

$$z_2 = \sqrt{-2\ln(x_1)}\sin(2\pi x_2) \quad (2)$$

Jeśli zależy nam na uzyskaniu liczb pseudolosowych z rozkładem $N(\mu, \sigma)$ to wówczas przekształcamy zmienną np. z_1 :

$$Z_1 = (z_1 \cdot \sigma) + \mu \quad (3)$$

1.2 Rozkład Maxwella

Jeśli wylosujemy trzy zmienne, np. prędkości V_x, V_y, V_z o rozkładzie $N(0, \sigma)$ to można z nich utworzyć zmienną losową $w = (V_x^2 + V_y^2 + V_z^2)/\sigma^2$. Zmienna losowa w ma rozkład χ^2 :

$$g(w) = \sqrt{\frac{w}{2\pi}} e^{-\frac{w}{2}} \quad (4)$$

o trzech stopniach swobody (bo V_i są niezależne). Jeśli przyjmiemy $V = \sqrt{V_x^2 + V_y^2 + V_z^2}$ to prawdopodobieństwo wylosowania cząstki mającej prędkość V jest równe:

$$f(V)dV = g(w)dw \quad (5)$$

a gęstość prawdopodobieństwa $f(V)$ wynosi:

$$f(V) = g(w) \frac{dw}{dV} = \sqrt{\frac{V^2}{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{V^2}{2\sigma^2}} \frac{2V}{\sigma^2} \quad (6)$$

Jeśli założymy, że $\sigma = \sqrt{kT/m}$, gdzie: k - stała Boltzmanna, T -temperatura, m - masa cząsteczki, to $f(V)$ jest Maxwellowskim rozkładem predkości cząsteczek gazu:

$$f(V) = \left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/2} \left(\frac{m}{kT}\right)^{3/2} V^2 e^{-\frac{mV^2}{2kT}} \quad (7)$$

2 Zadania do wykonania

1. Przyjmujemy parametry: $T = 100\text{ K}$, $m = 40u$ (Argon), $u = 1.66 \cdot 10^{-27}\text{ kg}$, $k = 1.38 \cdot 10^{-23}\text{ J/K}$, $\sigma = \sqrt{kT/m}$.
2. Wygenerować ciąg N_L liczb pseudolosowych o rozkładzie Maxwella. Przyjąć $N_L = 10^L$, $L = 3, 4, 5, 6$.

W celu określenia jednej zmiennej losowej prędkości: V_n , $n = 1, \dots, N_L$, o rozkładzie Maxwella należy:

- wylosować 4 liczby o rozkładzie jednorodnym $x_i \in (0, 1]$, $i = 1, 2, 3, 4$.
- zamienić je na liczby o rozkładzie $N(0, \sigma)$

$$V_1 = \sigma \cdot \sqrt{-2\ln(x_1)} \cos(2\pi x_2) \quad (8)$$

$$V_2 = \sigma \cdot \sqrt{-2\ln(x_1)} \sin(2\pi x_2) \quad (9)$$

$$V_3 = \sigma \cdot \sqrt{-2\ln(x_3)} \cos(2\pi x_4) \quad (10)$$

$$V_4 = \sigma \cdot \sqrt{-2\ln(x_3)} \sin(2\pi x_4) \quad (11)$$

- utworzyć docelową zmienną losową jako: $V_n = \sqrt{V_1^2 + V_2^2 + V_3^2}$ (V_4 nie jest nam potrzebna)
3. Dla każdego ciągu N_L proszę stworzyć histogram, dzieląc przedział $v \in [0, 5\sigma]$ na 30 podprzedziałów o równej długości i określić **empiryczną gęstość prawdopodobieństwa** $\phi_i = n_i/N_L/\Delta V$, gdzie: n_i to ilość liczb pseudolosowych w podprzedziale i-tym, $\Delta V = 5 \cdot \sigma/30$. Na każdym histogramie proszę nanieść wykres gęstości prawdopodobieństwa $f(V)$ w postaci krzywej ciągłej.
4. Dla każdego ciągu liczb pseudolosowych N_L o rozkładzie Maxwella proszę metodą Monte Carlo oszacować wartość prędkości średniej:

$$V_{sr} = \int_0^\infty V f(V) dV \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N V_i \quad (13)$$

oraz odchylenia standardowego średniej:

$$s(V_{sr}) = \sqrt{\frac{1}{N(N-1)} \left[\sum_{i=1}^N V_i^2 - \frac{1}{N} \left(\sum_{i=1}^N V_i \right)^2 \right]} \quad (14)$$

a także prędkości średniej kwadratowej:

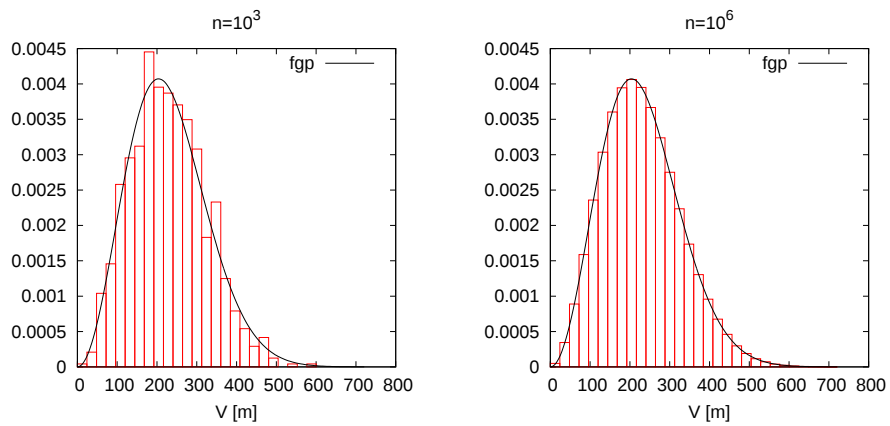
$$V_{sr,kw}^2 = \int_0^\infty V^2 f(V) dV \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N V_i^2 \quad (15)$$

oraz jej odchylenia standardowego:

$$s(V_{sr,kw}^2) = \sqrt{\frac{1}{N(N-1)} \left[\sum_{i=1}^N V_i^4 - \frac{1}{N} \left(\sum_{i=1}^N V_i^2 \right)^2 \right]} \quad (16)$$

Wyniki proszę zamieścić w tabeli i porównać wartościami dokładnymi tj. $V_{sr} = \sqrt{\frac{8kT}{\pi m}}$ i $V_{sr,kw}^2 = \frac{3kT}{m}$.

3 Przykładowe wyniki



$$\begin{aligned}
 N_L = 10^6 \quad V_{sr} &= 230.0 \text{ ***} \quad \sigma(V_{sr}) = 0.09 \text{ ***} \\
 N_L = 10^6 \quad V_{sr,kw}^2 &= 62375.1 \text{ ***} \quad \sigma(V_{sr,kw}) = 51.0 \text{ ***}
 \end{aligned}$$