LEZ

INTEGRALI DEFINITI CON METODI DI MONTE CARLO

Esistono sul mercato diversi schemi che permettono di calcolare numericamente integrali definiti

$$I = \int_a^b f(x)dx \qquad (1)$$

In generale per funzioni reali di una variabile reale $f: \mathbb{R} \to \mathbb{R}$, i metodi di Monte Carlo non sono quasi mai competitivi.

Ma se la funzione da integrare non è regolare (non ha per esempio derivate continue ai vari ordini) oppure si vuole calcolare l'integrale di funzioni in molte dimensioni, i metodi di Monte Carlo diventano competitivi, e in alcuni casi sono l'unico metodo possibile.

Analizziamo di seguito un metodo stocastico chiamato HIT or MISS.

Supponiamo di dover calcolare l'integrale di eq. (1) la tecnica del HIT or MISS è basata sull'interpretazione geometrica dell'integrale.

Supponiamo che la funzione da integrare, $f(x)$ sia limitata all'interno dell'intervallo di integrazione:

$$f(x) \leq C \qquad \forall \; x \in [a,b]$$

Definiamo un rettangolo

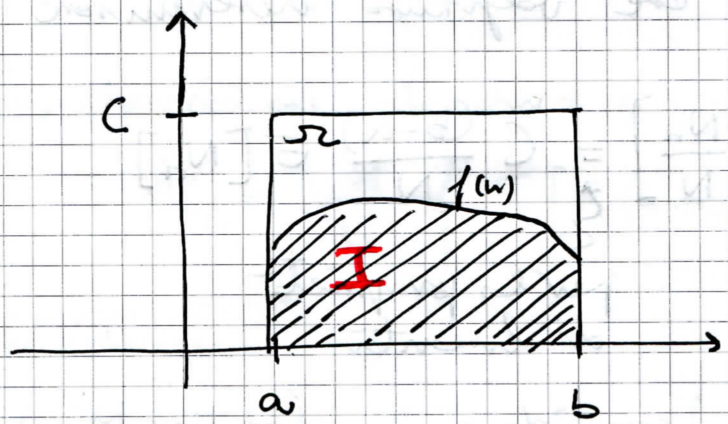
$$\Omega = \{ (x,y) : a \leq x \leq b \, , \; 0 \leq y \leq C \}$$

Sia ora (x, y) un vettore a due dimensioni uniformemente distribuito all'interno del rettangolo Ω, con pdf

$$f(x,y) = \begin{cases} \frac{1}{C} \cdot \frac{1}{(b-a)} & \text{se } (x,y) \in \Omega \\ 0 & \text{altrimenti} \end{cases}$$

N.B. La pdf è normalizzata, i.e.

$$\iint f(x,y)\, dx\, dy = 1$$



Ci chiediamo quale sia la probabilità che il vettore random (x, y) cada sotto la curva.

Denotiamo con I l'integrale, cioè l'area sottesa dalla curva

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

La probabilità è data dal rapporto delle aree

$$p = \frac{I}{\text{area } \Omega} = \frac{\int_a^b f(x) dx}{C \cdot (b-a)} = \frac{I}{C \cdot (b-a)} \Rightarrow \boxed{I = C(b-a) \cdot p}$$

Supponiamo di aver generato N vettori uniformemente distribuiti nel rettangolo Ω

$$(x_1, y_1) \ldots (x_2, y_2) \ldots (x_N, y_N)$$

Una stima della probabilità è

$$\hat{p} = \frac{N_H}{N}$$

dove N_H è il numero di volte che $(x_i, y_i) \in I$

Uno stimatore dell'integrale sarà quindi

$$\theta_1 = C \cdot (b-a) \cdot \frac{N_H}{N}$$

Verifichiamo ora che il valore atteso dello stimatore sia proprio l'integrale che vogliamo determinare

$$E[\theta_1] = E\left[C(b-a)\frac{N_H}{N}\right] \underset{\substack{\text{per la proprietà} \\ \text{di linearità}}}{=} C\,\frac{(b-a)}{N}\,E[N_H]$$

Il fenomeno che stiamo considerando (Hit or Miss) è di Bernoulli e ne segue la sua probabilità

$$\underbrace{P(N_H, N)}_{\substack{\text{la probabilità di} \\ \text{colpire l'area } N_H \\ \text{volte con } N \text{ tentativi}}} = \binom{N_H}{N} p^{N_H} (1-p)^{N-N_H}$$

Sappiamo che

$$E[N_H] = N \cdot p$$

$$var[N_H] = N \cdot p \cdot (1-p)$$

Quindi

$$E[\theta_1] = C\,\frac{(b-a)}{N}\,E[N_H] = C\,\frac{(b-a)}{\cancel{N}} \cdot \cancel{N} p \underset{\substack{\text{è proprio la} \\ \text{definizione di integrale} \\ \text{data precedentemente}}}{=} I$$

Calcoliamo la varianza dello stimatore

$$\mathrm{var}[\theta_1] = C^2 (b-a)^2 \,\mathrm{var}\left[\frac{N_H}{N}\right]$$

$$= C^2 \frac{(b-a)^2}{N^2} \mathrm{var}[N_H] = C^2 \frac{(b-a)^2}{N^{\cancel{2}}} \cdot \cancel{N}\, p(1-p)$$

$$= \frac{1}{N} \left\{ \underbrace{C\,(b-a)\,p}_{I} \left[C\cdot(b-a) - \underbrace{C\cdot(b-a)\cdot p}_{I} \right] \right.$$

$$= \frac{1}{N} \left\{ I\left[C\cdot(b-a) - I \right] \right\}$$

La deviazione standard è quindi

$$\sigma_{\theta_1} = \frac{1}{\sqrt{N}} \left\{ I\left[C(b-a) - I\right] \right\}^{1/2}$$

Considerazioni:

(1) L'errore dipende dal numero di tentativi effettuati e va come $N^{-1/2}$

(2) L'errore diventa sempre più piccolo (e si annulla) quando $C\cdot(b-a)$ tende a I

ALGORITMO

1) generare due numeri casuali $u_1, u_2 \in \mathcal{U}(0,1)$

2) calcolare
$$x = a + u_1 (b-a)$$
e
$$y = g(x)$$

3) se $g(x) > C\cdot u_2$ incrementare il contatore N_H

ripetere la procedura 1-2-3

L'integrale sarà dato da $\theta_1 = C\cdot(b-a)\cdot \frac{N_H}{N}$

Un altro modo per calcolare l'integrale [detto SAMPLE MEAN]

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

consiste nel riscriverlo come

$$I = \int_a^b \frac{f(x)}{g(x)}\, g(x)\,dx$$

dove $g(x)$ è una funzione densità di probabilità

con $g(x) > 0 \quad \forall x \,/\, f(x) \neq 0$

In questo caso, l'integrale può essere interpretato come il valore atteso di una variabile casuale

$$I = E\left[\frac{f(x)}{g(x)}\right]$$ dove x è distribuita come $g(x)$

Supponiamo, per semplicità, che $g(x)$ sia la distribuzione uniforme nell'intervallo $[a, b]$

$$g(x) = \begin{cases} \frac{1}{b-a} & x \in [a,b] \\ 0 & \text{altrimenti} \end{cases}$$

$$\text{e} \quad \int_a^b g(x)\,dx = 1$$

L'integrale è il valore atteso di $\dfrac{f(x)}{\frac{1}{b-a}}$

$$I = E\left[\frac{f(x)}{\frac{1}{b-a}}\right] = (b-a)\, E[f(x)]$$

$$I = \int_a^b f(x)\,dx = \int_a^b \frac{f(x)}{\frac{1}{b-a}} \cdot \frac{1}{b-a}\,dx = (b-a)\,E[f(x)] =$$
$$= (b-a)\,\langle f(x) \rangle$$

Uno stimatore dell'integrale è

$$\theta_2 \doteq (b-a)\,\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} f(x_i)$$

dove x_i sono campionati da $\mathcal{U}(a,b)$

Verifichiamo che lo stimatore sia '~~sti~~ unbiased'
(cioè che il suo valore atteso coincida con l'integrale che vogliamo calcolare)

$$E[\theta_2] = E\left[(b-a)\,\frac{1}{N}\sum f(x_i)\right]$$

$$= (b-a)\,\frac{1}{N}\sum E\left(f(x_i)\right)$$

ma $E[f(x_i)] = \langle f(x)\rangle \quad \forall i = 1,2,\dots,N$

quindi

$$E[\theta_2] = (b-a)\,\frac{1}{N}\sum \langle f(x)\rangle = (b-a)\,\frac{1}{\cancel{N}}\cancel{N}\langle f(x)\rangle$$

$$= (b-a)\langle f(x)\rangle = I$$

Calcoliamo ora la varianza dello stimatore

$$\mathrm{var}[\theta_2] = E[\theta_2^2] - E[\theta_2]^2$$

$$\mathrm{var}(\theta_2) = \mathrm{var}\left\{\frac{1}{N}(b-a)\sum_{i=1}^{N} f(x_i)\right\} = \frac{1}{N}\left[(b-a)^2\int f^2(x)\,\frac{dx}{b-a} - I^2\right]$$

$$= \frac{1}{N}\left[(b-a)\int_a^b f^2(x)\,dx - I^2\right]$$

ALGORITMO

1) generare una sequenza N di numeri da una distribuzione uniforme in $[a,b]$, $\mathcal{U}(a,b)$

$\hookrightarrow \quad u_i \in \mathcal{U}(0,1)$

$\hookrightarrow \quad x_i = (b-a)\cdot u_i + a$

2) calcolare l'integrale come

$$\boxed{I = (b-a)\,\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} f(x_i)}$$

Valutiamo ora l'efficienza dei Metodi di Monte Carlo.

Supponiamo di conoscere due metodi per stimare l'integrale di una funzione, I, e supponiamo che per entrambi

$$E[\theta_1] = E[\theta_2] = I$$

Chiamiamo con t_1 e t_2 il costo computazionale (tempo di CPU) necessario per effettuare i calcoli.

Si dice che il metodo 1 sia più efficiente del secondo se

$$t_1 \cdot var(\theta_1) < t_2 \cdot var(\theta_2)$$

Confrontiamo le efficienze dei metodi

HIT-OR-MISS

e

SAMPLE-MEAN

Supponiamo che per entrambi i metodi il costo computazionale sia confrontabile, $t_1 \sim t_2$

Confrontiamo quindi le varianze

HIT-OR-MISS
$$\theta_1 = C \cdot (b-a)\frac{N_H}{N} \qquad var(\theta_1) = \frac{I}{N}\left[C(b-a)-I\right]$$

SAMPLE-MEAN
$$\theta_2 = (b-a)\frac{1}{N}\Sigma f(x_i) \qquad var(\theta_2) = \frac{1}{N}\left[(b-a)\int f^2 dx - I^2\right]$$

Calcoliamo
$$var(\theta_1) - var(\theta_2) =$$
$$= \frac{1}{N}\left\{ C \cdot (b-a) \cdot I - \cancel{I^2} - (b-a)\int f^2 dx + \cancel{I^2} \right\}$$

dato che la funzione che integriamo è limitata,
$$\forall x \in [a,b] \qquad f(x) \leq C$$

$$var(\theta_1) - var(\theta_2) = \frac{(b-a)}{N}\underbrace{\left\{ C \cdot I - \int f^2(x)dx \right\}}_{\geq 0}$$

Quindi
$$\boxed{var(\theta_1) > var(\theta_2)}$$

perché $f(x) \leq C$
anche $f^2(x) \leq f(x) \cdot C$

Il metodo SAMPLE-MEAN è più efficiente di quello HIT-OR-MISS.

Introduciamo infine un terzo metodo come generalizzazione di SAMPLE-MEAN

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

[IMPORTANCE SAMPLING]

$$I = \int_a^b f(x)\,dx = \int_a^b \frac{f(x)}{g(x)}\, g(x)\, dx$$

con $\int_a^b g(x)\,dx = 1$ $\qquad I = E\left[\frac{f(x)}{g(x)}\right]$

$g(x)$ è in questo caso una qualsiasi distribuzione di probabilità.

Uno stimatore dell'integrale è
$$\Theta_3 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \frac{f(x_i)}{g(x_i)}$$

dove x_i sono campionati da $g(x)$

La funzione $g(x)$ si chiama IMPORTANCE SAMPLING DISTRIBUTION.

ESERCIZIO

Calcolare $I = \int_0^1 e^{-x^2}\,dx$ con metodi di Monte Carlo e confrontarlo con il risultato dei metodi numerici (Trapezio e Simpson 1/3).

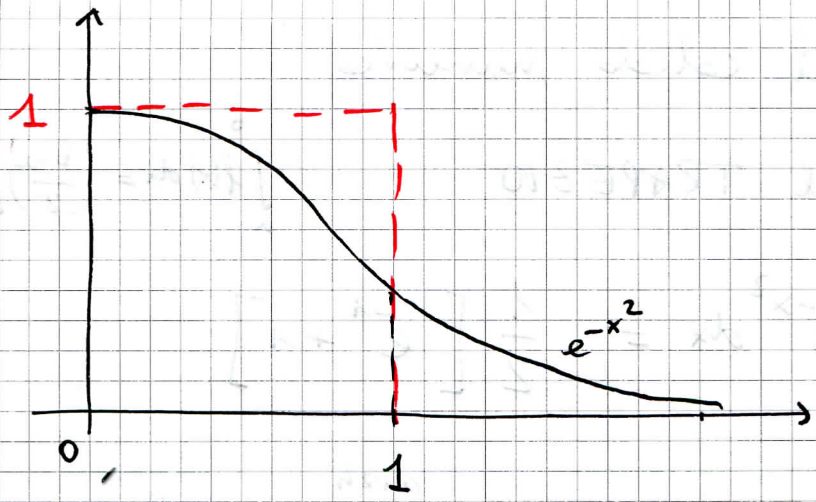
[A] HIT-or-MISS

$C = 1.0$

$$\boxed{\Theta_1 = \frac{N_H}{N}}$$

A.1) genero 2N campioni $u_i, u_i' \in \mathcal{U}(0,1)$

A.2) conto il numero di volte in cui
$$e^{-u_i^2} > u_i'$$
e incremento N_H



$$\theta_1 = \frac{N_H}{N}$$

$$var(\theta_1) = \frac{I}{N}(1-I)$$

$\boxed{B}$ SAMPLE-MEAN

B.1) genera N campioni $u_i \in \mathcal{U}(0,1)$

$$\theta_2 = \frac{1}{N}\sum e^{-u_i^2}$$

B.2) calcola

$$\theta_2 = \frac{1}{N}\sum e^{-u_i^2}$$

$$var(\theta_2) = \frac{1}{N}\left[\int e^{-2u^2}dx - I^2\right]$$

$\boxed{C}$ IMPORTANCE-SAMPLING

Scelgo come funzione densità di probabilità nell'intervallo $[0,1]$

$$g(u) = A e^{-u}$$

$$\int_0^1 g(x)\,dx = 1 \Rightarrow A\, e^{-x}\Big|_1^0 = A(1-e^{-1}) = 1$$

$$A = \frac{1}{1-1/e}$$

$$I = \int_0^1 \frac{e^{-u^2}}{(Ae^{-u})}(Ae^{-x})dx$$

C.1) genero N campioni da $g(x) = Ae^{-x}$

$$\theta_3 = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\frac{e^{-x_i^2}}{Ae^{-x_i}}$$

C.2) calcola

$$\theta_3 = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\frac{e^{-x_i^2}}{Ae^{-x_i}}$$

Confronto con il calcolo numerico

$\boxed{D}$ Regola del TRAPEZIO

$$\int_a^b f(x)\,dx = \left(\frac{b-a}{2}\right)\left[f(b)+f(a)\right]$$

$$\int_0^1 e^{-x^2}\,dx = \frac{1}{2}\left[e^{-1}+1\right]$$

$\boxed{E}$ Simpson 1/3

$$\int_a^{a+2h} f(x)\,dx = \frac{h}{3}\left[f(a)+4f(a+h) + f(a+2h)\right]$$

$$\int_0^1 e^{-x^2}\,dx = \frac{1}{6}\left[1+4e^{-1/4}+e^{-1}\right]$$

Esercizio

Simulazione del trasporto di un fascio di neutroni attraverso un dato materiale.

Dato un neutrone di una certa energia incidente su un materiale di spessore t, il neutrone può essere catturato con probabilità P_c oppure diffuso con probabilità P_s. [Per normalizzazione $P_s + P_c = 1$]

I neutroni sono diffusi con la stessa probabilità in tutte le direzioni.

$$p(\theta,\varphi)\,d\theta\,d\varphi = \frac{d\Omega}{4\pi} = \frac{1}{4\pi}\sin\theta\,d\theta\,d\varphi$$

probabilità che un neutrone venga diffuso con angoli compresi tra θ e $\theta+d\theta$ e φ e $\varphi+d\varphi$

ma $d\Omega = \sin\theta\,d\theta\,d\varphi$

Quindi

$$p(\theta,\varphi) = \frac{1}{4\pi}\sin\theta$$

φ è uniforme in $[0, 2\pi]$

Poiché θ e φ sono indipendenti calcoliamo le probabilità marginali

$$p(\theta) = \int_0^{2\pi} d\varphi\,\frac{1}{4\pi}\sin\theta = \frac{1}{2}\sin\theta$$

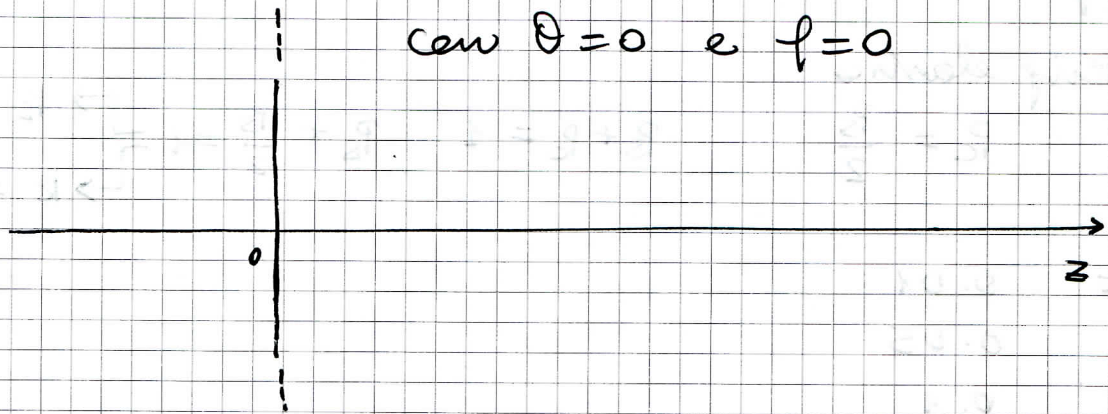
$$p(\varphi) = \int_0^{\pi} d\theta\,\frac{1}{4\pi}\sin\theta = -\frac{\cos\theta}{4\pi}\Big|_0^{\pi} = \frac{1}{2\pi}$$

La probabilità che un neutrone percorra un cammino r nel materiale prima di essere o catturato, oppure diffuso, è data da una distribuzione esponenziale

$$P(r) = \begin{cases} \frac{1}{\lambda} e^{-r/\lambda} & 0 < r < \infty \\ 0 & \text{altrimenti} \end{cases}$$

Algoritmo :

1) il neutrone arriva nel materiale a $z=0$ con $\theta = 0$ e $\varphi = 0$



2) il neutrone ~~4~~ percorre un cammino r estratto dalla distribuzione esponenziale:

$$z = -\lambda \ln u_1 \qquad \text{con } u_1 \in \mathcal{U}(0,1)$$

3) verifichiamo se il neutrone viene diffuso o catturato.

- generiamo $u_2 \in \mathcal{U}(0,1)$

$u_2 \leq P_c \Rightarrow$ il neutrone viene catturato, ripartiamo dal punto 1

$\Downarrow$

~~altro~~ se $u_2 > P_c$ il neutrone viene diffuso, calcoliamo gli angoli di diffusione:

$u_3 \in \mathcal{U}(0,1)$ $\quad \varphi = 2\pi u_3$

$u_4 \in \mathcal{U}(0,1)$ $\quad \theta = \operatorname{acos}(1 - 2u_4)$

4) ripartiamo con il punto 2.

Input del programma:

- spessore del piano τ
- capture probability P_c
- scattering probability P_s

Esempio:

scattering elastico

$\tau = 1$ $\quad P_c = \frac{P_s}{2}$ $\qquad P_s + P_c = 1$ $\qquad P_s + \frac{P_s}{2} = 1 \rightarrow P_s = \frac{2}{3}, \quad P_c = \frac{1}{3}$

$\lambda =$ 0.01

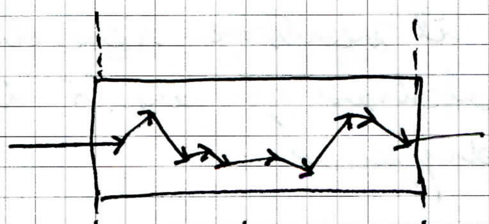
0.05

0.1

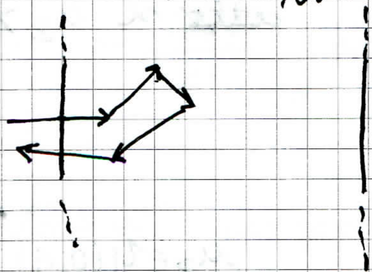
1

Calcolare le probabilità di

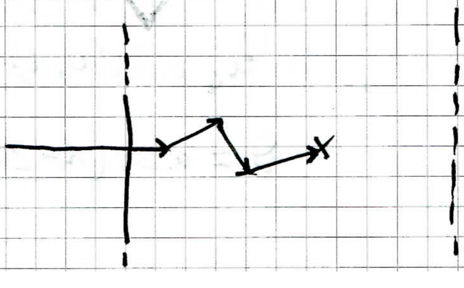
- trasmissione (frazione di neutroni incidenti che riescono ad attraversare completamente il materiale)
- riflessione (frazione di neutroni che inverte la direzione e esce da dove era entrato)
- assorbimento (frazione di neutroni assorbiti nel materiale)



neutrone trasmesso



neutrone riflesso



neutrone assorbito

ALGORITMO BOX-MÜLLER PER CAMPIONARE DA UNA DISTRIBUZIONE GAUSSIANA

La pdf di una Gaussiana è

$$f(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x-\mu}{\sigma}\right)^2}$$

Passiamo ad una distribuzione normale $(\mu=0, \sigma=1)$ con la trasformazione

$$X = \mu + \sigma \cdot Z$$

con $Z \in N(0,1)$ e $X \in Gauss(\mu,\sigma)$

$$f(z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{z^2}{2}}$$

Considero la probabilità congiunta di due variabili normali z_1, z_2 e indipendenti

$$p(z_1, z_2) = \frac{1}{2\pi} e^{-\frac{z_1^2+z_2^2}{2}}$$

Applichiamo una trasformazione di variabili passando alle coordinate polari

$$\begin{cases} z_1 = r\cos\theta \\ z_2 = r\sin\theta \end{cases}$$

$$J = \det\begin{pmatrix} \frac{\partial z_1}{\partial r} & \frac{\partial z_1}{\partial \theta} \\ \frac{\partial z_2}{\partial r} & \frac{\partial z_2}{\partial \theta} \end{pmatrix} = \begin{vmatrix} \cos\theta & -r\sin\theta \\ \sin\theta & r\cos\theta \end{vmatrix} = r$$

$$f(r,\theta) = \frac{1}{2\pi} r e^{-\frac{r^2}{2}}$$

r e θ sono indipendenti

$$f(r,\theta) = f(r)\cdot f(\theta)$$

$$f(\theta) = \frac{1}{2\pi} \qquad f(r) = r\,e^{-\frac{r^2}{2}}$$

$$\downarrow$$

introduco $\rho = \frac{r^2}{2}$

$$d\rho = r\,dr$$

$$f(r)\,dr = r\,dr\,e^{-\frac{r^2}{2}} = d\rho\,e^{-\rho}$$

$$F(\rho) = \int_0^{\rho} e^{-\rho'}d\rho' = 1 - e^{-\rho}$$

genero θ da $f(\theta) = \frac{1}{2\pi}$:

$u_1 \in \mathcal{U}(0,1)$ $\qquad \theta = 2\pi u_1$

genero ρ da $F(\rho) = e^{-\rho}$

$u_2 \in \mathcal{U}(0,1)$ $\qquad u_2 = 1 - e^{-\rho}$

$$\downarrow$$

$$\rho = -\ln(u_2)$$

Quindi

$$r = \sqrt{2\rho}$$

$$\boxed{\begin{aligned} z_1 &= r\cos\theta = \sqrt{2\rho}\cos\theta = \sqrt{-2\ln(u_2)}\,\cos(2\pi u_1) \\ z_2 &= r\sin\theta = \sqrt{2\rho}\sin\theta = \sqrt{-2\ln(u_2)}\,\sin(2\pi u_1) \end{aligned}}$$

z_1 e z_2 si distribuiscono come due variabili normali.