Úloha II.S ... derivace a Monte Carlo integrace

10 bodů; (chybí statistiky)

a) *Vykreslete závislost chyby na velikosti kroku pro metodu*

$$f'(x) \approx \frac{-f(x+2h)+f(x-2h)+8f(x+h)-8f(x-h)}{12h}$$

odvozenou pomocí Richardsonovy extrapolace v textu seriálu. Jaký je optimální krok a minimální chyba? Porovnejte s centrovanou a dopřednou diferencí. Jako derivovanou funkci použijte $\exp(\sin(x))$ *v bodě* $x = 1$.

Bonus *Vypočtěte pro tuto metodu teoretickou velikost optimálního kroku pomocí odhadu chyb.*

b) *Na webu se nachází soubor s experimentálně zjištěnými* t, x *a* y *souřadnicemi poloh hmotného bodu. Pomocí numerické derivace nalezněte časovou závislost složek rychlosti a zrychlení a vyneste obě závislosti do grafu. Jaký fyzikální děj bod nejspíše konal? Numerickou metodu si zvolte sami, svoji volbu ale odůvodněte.*

Bonus *Existuje v tomto případě přesnější varianta získání rychlosti a zrychlení, než přímočará aplikace numerické derivace?*

c) *Máme zadán integrál* $\int_0^\pi \sin^2 x \mathrm{d}x$.

1. *Nalezněte hodnotu integrálu z geometrické úvahy za pomoci Pythagorovy věty.*
2. *Nalezněte hodnotu integrálu pomocí Monte Carlo simulace. Určete směrodatnou odchylku výsledku.*

Bonus *Vyřešte Buffonovu úlohu ze seriálu (odhad hodnoty čísla π) pomocí MC simulace.*

d) *Nalezněte vztah pro výpočet objemu šestidimenzionální koule pomocí metody Monte Carlo.*

Nápověda *Pythagorovu větu lze využít k měření vzdáleností i ve vyšších dimenzích.*

Mirek a Lukáš čtou dokumentaci k Pythonu.

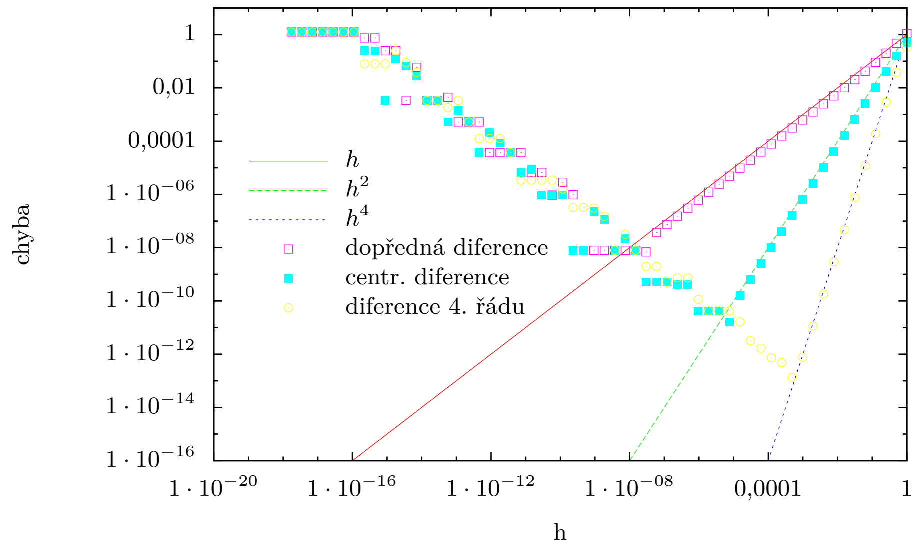
a) Abychom měli chybu podle čeho určovat, potřebujeme znát analyticky vyjádřenou derivaci testovací funkce.[1] Z pravidla o derivaci složené funkce snadno zjistíme, že platí

$$(\exp(\sin(x)))' = \cos(x)\exp(\sin(x)) \,.$$

Program, který vypíše různé kroky h a příslušné chyby tedy vypadá např. takto.

```
import math
def diff4(f,x,h):
  return(-f(x+2*h)+f(x-2*h)+8*f(x+h)-8*f(x-h))/(12*h)
h=1.
x=1.
points=100
f=lambda x: math.exp(math.sin(x))
df=lambda x: math.cos(x)*math.exp(math.sin(x))
for i in range(points):
  print("{} {}".format(h, math.fabs(df(x)-diff4(f,x,h))))
  h/=2
```

[1] Pokud bychom ji neznali, lze jako odhad použít numerickou metodu vyššího řádu.



Obr. 1: Závislost chyby derivace na kroku h pro různé metody. Jako testovací funkce byla zvolena $f(x) = \exp(\sin(x))$ v bodě $x = 1$.

Závislost chyby na velikosti kroku je pak vynesena v grafu 1. Z grafu vidíme, že optimální krok je $h_{\mathrm{opt}} \doteq 5 \cdot 10^{-4}$ a odpovídající chyba numerické derivace $1 \cdot 10^{-13}$, což je méně než pro centrovanou a dopřednou diferenci. Optimální krok je naopak v souladu s tvrzením v seriálu větší než u dopředné a centrované diference. Také si všimněme, že chyba metody klesá jako $O(h^4)$, což jsme očekávali.

Nyní zmiňme řešení bonusu. Zaokrouhlovací chybu spočítáme obdobně jako v textu seriálu. Platí pro ni

$$\Delta f'(x) = \frac{-f(x+2h)\varepsilon_1 + f(x-2h)\varepsilon_2 + 8f(x+h)\varepsilon_3 - 8f(x-h)\varepsilon_4}{12h}\,,$$

$$\Delta f'(x) \approx \frac{18\varepsilon|f(x)|}{12h} = \frac{3\varepsilon|f(x)|}{2h}\,,$$

kde ε_1, ε_2, ε_3 a ε_4 jsou skutečné relativní chyby vyčíslení funkce a $\varepsilon \approx \varepsilon_{1..4}$ je strojová přesnost. Všiměme si, že pro zaokrouhlovací chybu opět platí $\Delta f'(x) \propto h^{-1}$.

Chyba metody pak z Taylorova rozvoje je

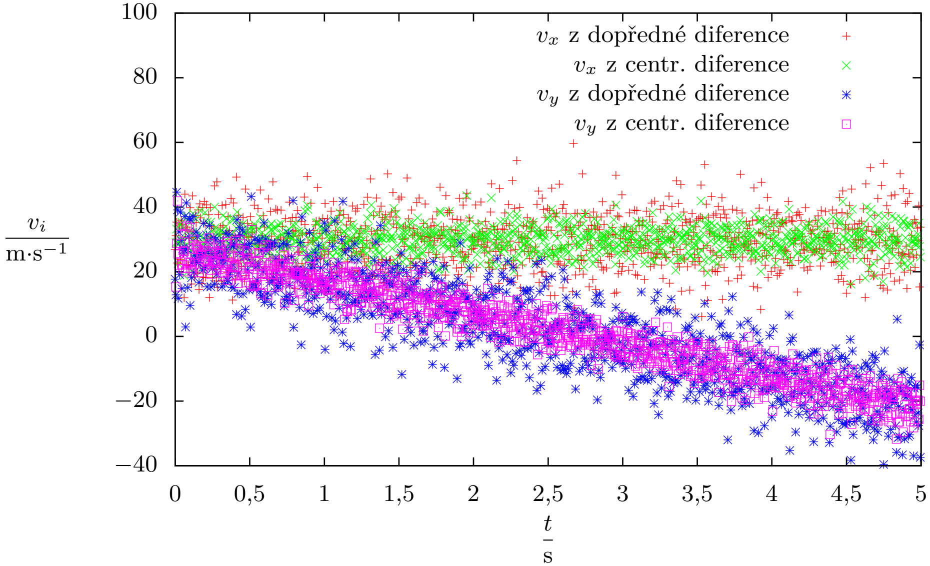
$$\delta = \frac{48|f^{(5)}(\xi)|}{5! \cdot 12}h^4 \approx \frac{|f^{(5)}(x)|}{30}h^4\,,$$

kde ξ je nějaké (správné) číslo mezi x a $x+h$. Z podmínky pro minimální chybu $\delta \approx \Delta f'(x)$ máme

$$h_{\mathrm{opt}} \approx \sqrt[5]{45\varepsilon\frac{|f(x)|}{|f^{(5)}(x)|}} \sim \varepsilon^{1/5} \sim 10^{-3}\,,$$

což řádově odpovídá našemu „experimentálně“ získanému výsledku. Konkrétně pro $x = 1$ (v radiánech) ještě můžeme dopočítat $f(x) \doteq 2{,}3$, $f^{(5)}(x) \doteq 23{,}8$ a $h_{opt} \doteq 8{,}5 \cdot 10^{-4}$.

b) Přistupme k řešení problému obráceně, nejprve vypočtěme rychlost a zrychlení pomocí dopředné a centrované diference a poté se výsledky pokusme interpretovat.

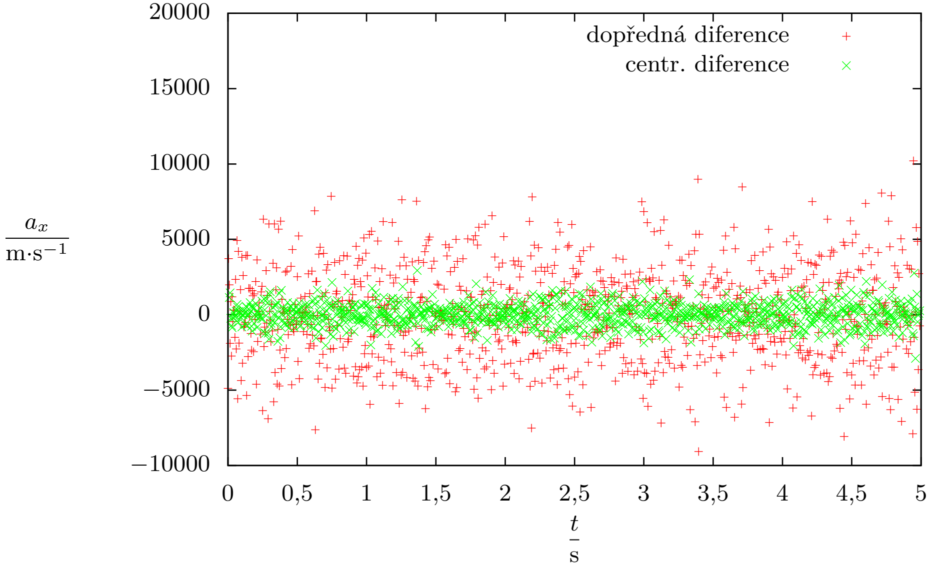


Obr. 2: Závislost složek rychlosti na čase získaná dopřednou a centrovanou diferencí.

Jak vidíme z grafů rychlosti 2 a zrychlení 3, 4, v $x$ovém směru bod vykonává rovnoměrný pohyb rychlostí asi $30\,\mathrm{m\cdot s^{-1}}$ a v $y$ovém směru rovnoměrně zrychlený přímočarý pohyb s počáteční rychlostí asi $27\,\mathrm{m\cdot s^{-1}}$ a zrychlením asi $-10\,\mathrm{m\cdot s^{-2}}$, přičemž zrychlení nedokážeme díky šumu vyčíst rovnou z grafu zrychlení, ale dokážeme jej určit výpočtem z grafu rychlosti. Vidíme tedy, že se jedná o případ vrhu v homogenním tíhovém poli.

Také vidíme, že centrovaná diference má menší rozptyl než dopředná diference. Protože druhá a vyšší derivace funkce $x(t) = 30 \cdot t$ podle času je rovna nule, dělíme ve vztahu pro optimální krok dopředné i centrované diference nulou a optimální krok tedy neexistuje, vždy jsme v režimu převládající zaokrouhlovací chyby. Obdobně pro $y(t)$ je nulová až třetí derivace, dopředná diference tedy má (pro $t = 1\,\mathrm{s}$) $h_{\mathrm{opt}} \approx 10^{-8}\,\mathrm{s}$, ale centrovaná diference opět optimální krok nemá. To si můžete lehce ověřit vyřešením předchozí podúlohy pro testovací funkce $x(t) = v_x t$ a $y(t) = v_y t - 1/2 g t^2$, kde v_x, v_y a g jsou konstanty.

Protože pro $x(t)$ jsou obě metody v režimu s převládající zaokrouhlovací chybou, měly by mít srovnatelnou přesnost, což ale očividně neplatí. To napovídá, že zde existuje nějaký efekt, který je daleko větší než vliv zaokrouhlovací chyby a chyby metody. Pokud se pozorně podíváme na předchozí data či si pořádně přečteme zadání, zjistíme, že neleží přesně na teoretické závislosti, ale, jako správná experimentální data, se kolem ní vyskytují s nějakou nepřesností měření. Centrovaná diference je pak přesnější, jak je vidět z následujícího příkladu. Představme si, že by naše závislost polohy byla konstantní (ale stále s „experi-



Obr. 3: Závislost $x$ové složky zrychlení na čase získaná dopřednou a centrovanou diferencí.

mentálním“ rozptylem σ). Pevně nyní zvolme nějakou vysokou pravděpodobnost P, třeba 99 %. Pak existuje číslo $n > 0$ takové, že dva po sobě následující body leží s pravděpodobností P na bočních stranách obdélníku o podstavě h a výšce $n\sigma$. Pokud je spojíme úsečkou, bude mít tato úsečka směrnici, a tedy i chybu derivace, menší než $n\sigma/h$. Pokud ale použijeme centrovanou diferenci,[2] používáme body „ob jedna“, které s pravděpodobností P leží na bočních stránách obdélníku o podstavě $2h$ a výšce $n\sigma$. Směrnice jejich spojnice bude nanejvýš $n\sigma/(2h)$, chyba tedy bude poloviční.

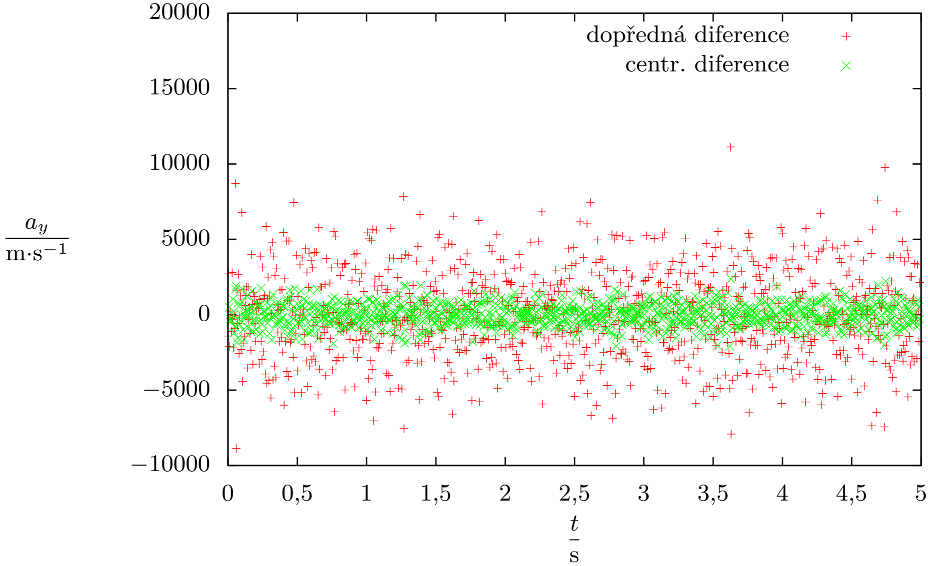
Obecně dle výše uvedeného by mělo platit, že čím je metoda vyššího řádu, tím lépe bude fungovat. Tomu navíc pomůže to, že metody vyššího řádu pracují s funkčními hodnotami ve více než dvou bodech, efektivně tedy v sobě obsahují obdobu váženého průměru, který by měl napomoci vyrušení rozptylu hodnot.

Všimněme si také, že rozptyl původních hodnot polohy je velmi malý, odpovídá měření s relativní odchylkou 0,02 %, což je velmi přesné měření. Přesto se tato odchylka aplikací derivace nesmírně zvětší. To je způsobeno tím, že numerická derivace není dobře podmíněná úloha, použité metody tedy nemohou být numericky stabilní.

Pokud bychom chtěli náš výsledek zpřesnit, mohli bychom toho docílit různými způsoby. Dle výše uvedeného by mělo pomoci zvětšení kroku přeskakováním některých hodnot, či použití metody vyššího řádu, přičemž druhá možnost by měla fungovat lépe. Další možností je na data před derivací nejprve aplikovat tzv. klouzavý průměr[3], čímž bychom zredukovali rozptyl hodnot. Jak již ale bylo zmíněno, metody vyšších řádů už v sobě jistý způsob průměrování efektivně obsahují, jednoduchým neváženým klouzavým průměrem bychom tedy

[2] Stejný efekt by měla i dopředná diference s dvojnásobným krokem.

[3] `https://en.wikipedia.org/wiki/Moving_average`



Obr. 4: Závislost $y$ové složky zrychlení na čase získaná dopřednou a centrovanou diferencí.

nejspíš lepších výsledků nedosáhli. Ve chvíli, kdy známe teoretickou závislost, podle které se data mají chovat, je asi nejlepším řešením data touto závislostí nafitovat a poté analyticky derivovat teoretickou závislost s koeficienty určenými z fitu.

c) Zadaný integrál lze snadno spočíst například za pomoci goniometrického vztahu $\sin^2 x = (1 - \cos(2x))/2$ a substituce $y = 2x$. Dostaneme

$$I = \int_0^{\pi} \sin^2 x \mathrm{d}x = \int_0^{\pi} \frac{1}{2} \mathrm{d}x - \int_0^{2\pi} \frac{1}{4} \cos y \mathrm{d}y = \frac{\pi}{2} \,.$$

Zadání nám však ukládá postupovat bez znalosti integrálního počtu, pojďme se o to tedy pokusit.

1. Pro kartézské souřadnice a, b bodu na jednotkové kružnici, představující délky odvěsen pravoúhlého trojúhelníku, platí Pythagorova věta ve tvaru $a^2 + b^2 = 1$. Neboli, vyjádřeno pomocí úhlu při středu kružnice medzi přeponou a jednou odvěsnou x, $\sin^2 x + \cos^2 x = 1$. Dále víme, že určitý integrál I vyjadřuje obsah útvaru vymezeného funkcí $\sin^2 x$ a osou x na intervalu $\langle 0, \pi \rangle$, tj. obsah jednoho „kopečku“ funkce $\sin^2 x$.
   Když k funkci $\sin^2 x$ všude připočteme funkci $\cos^2 x$, dostaneme díky Pythagorově větě místo kopečku obdélník o stranách π a 1, tedy o obsahu π. Nyní si už jen zbývá uvědomit, že funkce sinus a kosinus jsou identické až na posun o $\pi/2$ v ose x (a tedy i jejich kvadráty). Jeden kopeček kosinu na druhou má tedy stejný obsah jako kopeček sinu na druhou. Na obrázku **??** je názorně ukázáno, že celý obdélník sestává z jednoho sinového kopečku a jednoho převráceného kosinového kopečku rozděleného napůl. Jeden kopeček má tedy obsah přesně dvakrát menší než obdélník, a tedy $I = \pi/2 \doteq 1{,}5708$, což je v souladu s výsledkem výše.

2. K numerickému výpočtu použijeme kód na Monte Carlo integraci ze seriálu.[4] Generujeme dvojice pseudonáhodných čísel $\langle x, y\rangle$ na intervalech $\langle 0, \pi\rangle$ a $\langle 0, 1\rangle$, kritériem pro zásah je $y < \sin^2 x$. Ve výpočtu směrodatné odchylky je nyní $V = \pi$ a $O = \pi/2$, relativní směrodatnou odchylku pak vyjádříme jako

$$\frac{\sigma}{O} = \frac{1}{\sqrt{N}}\sqrt{(V/O - 1)} = 0{,}001\,.$$

   Pro jeden konkrétní běh programu s $N = 10^6$ jsme dostali výsledek 1,569 s relativní odchylkou od průměru 0,0012.

   Při řešení bonusové úlohy, odhad π pomoci házení jehly, si také vystačíme s mírnou úpravou kódu ze seriálu. Budeme volit $a = b = 1$, tzn. stejnou šířku pásu jako délku jehly. [5] Čím menší jehlu bychom volili, tím méně častěji by proťala hranici pásů a tím déle by musela simulace běžet, abychom dosáhli dané přesnosti. Dále víme, že stačí generovat dvojice pseudonáhodných čísel $\langle\vartheta, x\rangle$ z intervalů $\langle -\pi/2, \pi/2\rangle$ a $\langle 0, 1/2\rangle$, neboť tak pokryjeme všechny možné horizontální polohy středu jehly a veškerá možná její natočení. Není potřeba uvažovat další pásy, protože se periodicky opakují. Stejně tak nepotřebujeme rozlišovat, zda jehla leží napravo nebo nalevo o hranice, kterou proťala. Kritérium protnutí vyjádříme tak, že horizontální souřadnice levého konce jehly $x - (\cos\vartheta)/2$ je menší než nula.
   Ze seriálu víme, že pro $a = b = 1$ je pravděpodobnost protnutí $2/\pi \doteq 0{,}6366$. Pro jeden běh programu s $N = 10^6$ jsme dostali výsledek 0,6368 s relativní směrodatnou odchylkou (teoretickou) 0,0008 a relativní odchylkou od průměru 0,0004.

d) Objem koule v libovolné dimenzi musí záviset pouze na jejím poloměru R, neboť žádnou jinou informaci o kouli nemáme. Z jednotkových důvodů musí být poloměr umocněn na číslo udávající dimenzionalitu, v našem případě máme R^6. Tento mocninný výraz bude vynásoben konstantním faktorem, který obecně může být různý pro každou dimenzi. Volbou $R = 1$ se naše úloha omezuje na hledání tohoto faktoru.
Objem $n$dimenzionální koule o poloměru R lze vyjádřit vzorcem

$$V_n = \frac{\pi^{n/2}}{\Gamma\left(\frac{n}{2}+1\right)}R^n\,,$$

kde Γ je gama funkce. Nebudeme se zde zabývat její definicí, pouze si řekněme, že pro přirozené číslo n lze psát $\Gamma(n+1) = n!$. Nás zajímá dimenze 6, argumentem gama funkce tedy bude přirozené číslo a můžeme psát

$$V_6 = \frac{\pi^3}{3!}R^6\,.$$

Hledaný faktor je tedy roven $\pi^3/3! \doteq 5{,}1677$.
S uvedeným faktorem nyní srovnáme výsledek získaný metodou Monte Carlo. Použili jsme kód ze seriálu pro výpočet obsahu čtvrtkruhu s mírnými úpravami. Počet bodů jsme zvýšili na 10^7 a pomocí funkce random nyní nevytváříme dvojice, ale šestice náhodných čísel. V boxu

[4] Veškeré kódy použité v řešení této seriálové úlohy naleznete na našem webu.
[5] V seriálu jsme psali podmínku $a < b$, ale vzhledem k omezené přesnosti reprezentace čísel v počítači toto nemá smysl rozlišovat.

o hraně 1 (šestidimenzionální krychle) nyní není uzavřena čtvrtina kruhu, ale $1/2^6$ z objemu koule. Kritériem zásahu dovnitř objemu koule je výraz

$$\sum_{i=1}^{6} x_i^2 < 1\,,$$

kde x_i, $i \in \{1, 2, 3, 4, 5, 6\}$ jsou kartézské souřadnice náhodných bodů. Na základě znalosti přesného výsledku můžeme vypočíst směrodatnou odchylku

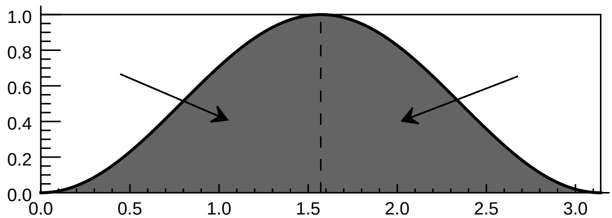
$$\sigma = \frac{1}{\sqrt{N}}\sqrt{O(V-O)}\,,$$

kde $V = 1^6 = 1$ a $O = \pi^3 \cdot 2^{-6} \cdot 3!$, číselně tedy získáme relativní odchylku $\sigma/O \doteq 0.0011$. Zde vidíme, že poměr O/V je již celkem nevýhodný a museli jsme proto volit o řád větší počet bodů (v porovnání s 2D případem), abychom dosáhli směrodatné odchylky $\sim 10^{-3}$. Výsledkem jednoho běhu programu byla průměrná hodnota hledaného faktoru 5,172 (relativní odchylka od průměru je 0,0008).

Lukáš Timko
`lukast@fykos.cz`

Miroslav Hanzelka
`mirek@fykos.cz`

Fyzikální korespondenční seminář je organizován studenty MFF UK. Je zastřešen Oddělením pro vnější vztahy a propagaci MFF UK a podporován Ústavem teoretické fyziky MFF UK, jeho zaměstnanci a Jednotou českých matematiků a fyziků.



Obr. 5: Ze dvou polovin převráceného „kopečku“ kosinu na druhou složíme jeden kopeček sinu na druhou.