

Κεφάλαιο 4

Συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας των πειραματικών μετρήσεων

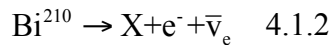
4.1 Εισαγωγή

Στα προηγούμενα Κεφάλαια ασχοληθήκαμε με μεθόδους περιγραφής των στατιστικών διακυμάνσεων των μετρήσεων εισάγοντας την έννοια της τυχαίας μεταβλητής και της συνάρτησης πυκνότητας πιθανότητας. Στην συντριπτική πλειοψηφία των περιπτώσεων που μας απασχόλησαν, θεωρήσαμε ότι οι στατιστικές διακυμάνσεις υπεισέρχονται κατά την διάρκεια της διαδικασίας μέτρησης και οφείλονται κατ' αποκλειστικότητα στη διαδικασία της μέτρησης. Στην ουσία δεχθήκαμε ότι, για ιδανικά μετρητικά όργανα (όργανα με μηδενικό σφάλμα), η συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας θα είναι:

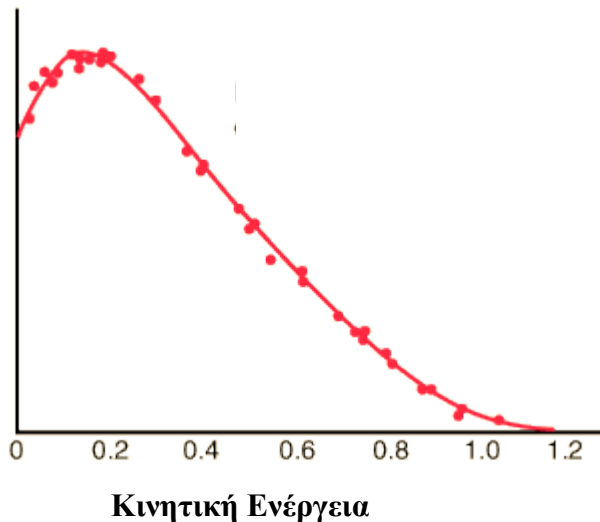
$$f(x)=\delta(x-x_R) \quad 4.1.1$$

όπου $\delta(x)$ είναι η συνάρτηση δ του Dirac και το σύμβολο x_R παριστά την πραγματική τιμή της μεταβλητής X .

Η σχέση 4.1.1 υπονοεί ότι όσες φορές και εάν επαναλάβουμε την διαδικασία της μέτρησης του φυσικού μεγέθους X , το αποτέλεσμα της μέτρησης θα ισούται με την τιμή x_R . Εύκολα όμως μπορεί να δείξει κανείς ότι δεν υπάρχει πάντα μία και μοναδική τιμή του φυσικού μεγέθους X . Επί παραδείγματι, η κινητική ενέργεια του ηλεκτρονίου κατά την β – διάσπαση του πυρήνα Bi^{210} σε ένα πυρήνα ??? , ένα ηλεκτρόνιο (e^-) και ένα ηλεκτρονικό αντινεutrino ($\bar{\nu}_e$) :



συμπεριφέρεται ως τυχαίος αριθμός. Πράγματι, τα θυγατρικά ηλεκτρόνια των διασπάσεων πανομοιότυπων πυρήνων Bi^{210} , έχουν διαφορετικές ενέργειες. Η συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας της ηλεκτρονικής κινητικής ενέργειας φαίνεται στο Σχήμα 4.1.1.



Σχήμα 4.1.1: Η καμπύλη παριστά γραφικά την συνάρτηση πυκνότητας της κινητικής ενέργειας των ηλεκτρονίων κατά την β -διάσπαση πυρήνων Bi^{210} , όπως υπολογίζεται θεωρητικά. Τα σημεία αντιστοιχούν σε πειραματικές μετρήσεις

Θα μπορούσαμε να αναφέρουμε πληθώρα παραδειγμάτων όπου η «πραγματική» τιμή κάποιας φυσικής ποσότητας που χαρακτηρίζει ένα φαινόμενο έχει τα χαρακτηριστικά της τυχαίας μεταβλητής.

Εν γένει, η σχέση 4.1.1 αναφέρεται σε μετρήσεις μεγεθών της Κλασικής Φυσικής. Στα περισσότερα φαινόμενα του μικρόκοσμου, ακόμα και όταν εμπλέκονται «ιδανικές» μετρητικές συσκευές, η επανάληψη του ιδίου πειράματος καταλήγει σε διαφορετικές τιμές των μετρούμενων φυσικών μεγεθών. Στην καλύτερη των περιπτώσεων, στην περίπτωση ιδανικών μετρητικών συσκευών, η συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας της μέτρησης, x , του φυσικού μεγέθους, X , ταυτίζεται με την συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας της “πραγματικής” τιμής του μεγέθους, x_R .

$$f(x)=f(x_R) \quad 4.1.3$$

Στην πραγματικότητα, οι συσκευές που χρησιμοποιούνται στα πειράματα πάσχουν από «μετρητικές ατέλειες». Επιπλέον, σε κάθε πραγματικό πείραμα υπάρχουν πολλοί εξωτερικοί παράγοντες που επηρεάζουν τα αποτελέσματα των μετρήσεων με αποτέλεσμα η συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας που περιγράφει την στατιστική συμπεριφορά των μετρήσεων να είναι περισσότερο πολύπλοκη από αυτήν που περιγράφει η σχέση 4.1.3.

4.2 Διακριτική ικανότητα των μετρητικών διατάξεων.

Ας επανέλθουμε στο παράδειγμα της ραδιενεργού διάσπασης 4.1.2. Επειδή η μέτρηση της ενέργειας του ηλεκτρονίου γίνεται από πειραματική διάταξη (αποτελούμενη συνήθως από κρυσταλλικό σπινθηριστή, φωτοπολλαπλασιαστή και ηλεκτρονικούς καταμετρητές) “πάσχουσα” από μετρητικά σφάλματα, το αποτέλεσμα της μέτρησης, E_m , θα διαφέρει της πραγματικής τιμής της ενέργειας, E_R .

Η συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας της μεταβλητής E_R , έστω $f(E_R)$, μπορεί να υπολογισθεί αναλυτικά στο πλαίσιο του θεωρητικού μοντέλου που περιγράφει τις ασθενείς αλληλεπιδράσεις. Για δεδομένη τιμή της πραγματικής τιμής της κινητικής ενέργειας, E_R , το αποτέλεσμα της μέτρησης συμπεριφέρεται ως τυχαία μεταβλητή.

Έστω ότι η υπό συνθήκη συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας της μεταβλητής E_m είναι η $g(E_m; E_R)$. Συνεπώς, η πιθανότητα του αποτελέσματος μίας μέτρησης να βρίσκεται στο διάστημα τιμών $[E_m, E_m+d E_m]$, δεδομένου ότι η πραγματική ενέργεια του ηλεκτρονίου είναι E_R , θα είναι:

$$P(E_m|E_R)=g(E_m; E_R)dE_m \quad 4.2.1$$

Συνήθως καλούμε την συνάρτηση $g(E_m; E_R)$, συνάρτηση διακριτικής ικανότητας της μετρητικής διάταξης. Η συνάρτηση αυτή εξαρτάται αποκλειστικά από την μετρητική διάταξη και είναι ανεξάρτητη του μηχανισμού παραγωγής των ηλεκτρονίων. Όσον αφορά στην κανονικοποίηση της συνάρτησης διακριτικής ικανότητας ισχύει ότι:

$$\int_{-\infty}^{\infty} g(E_m; E_R) dE_m = 1 \quad \forall E_R \quad 4.2.2$$

Παράδειγμα 4.2.1

Για λόγους γενικότητας θεωρήσαμε ότι η συνάρτηση διακριτικής ικανότητας εξαρτάται από την πραγματική τιμή της μετρούμενης ποσότητας. Η εξάρτηση αυτή μπορεί να είναι σχετικά απλή. Επί παραδείγματι, η διακριτική ικανότητα μπορεί να είναι συνάρτηση της διαφοράς ΔE μεταξύ της πραγματικής τιμής και του αποτελέσματος της μέτρησης, όπως εκφράζει η ακόλουθη σχέση:

$$g(E_m; E_R) = g(\Delta E) = \frac{1}{\sigma \cdot \sqrt{2 \cdot \pi}} \cdot e^{-\frac{(E_m - E_R)^2}{2 \cdot \sigma^2}} = \frac{1}{\sigma \cdot \sqrt{2 \cdot \pi}} \cdot e^{-\frac{(\Delta E)^2}{2 \cdot \sigma^2}} \quad 4.2.3$$

όπου η ποσότητα « σ » εκφράζει μία χαρακτηριστική σταθερά της μετρητικής συσκευής.

Στις περισσότερες των περιπτώσεων, για λόγους που επιβάλλονται από της φυσικές διεργασίες της μέτρησης, η παράμετρος « σ » εξαρτάται από την ενέργεια του ηλεκτρονίου με σχέσεις της μορφής:

$$\sigma = \sigma(E_R) = \frac{\alpha}{\sqrt{E_R}} + \beta \quad 4.2.4$$

Είναι προφανές ότι σ' αυτή την περίπτωση η συνάρτηση διακριτικής ικανότητας εξαρτάται άμεσα από την πραγματική τιμή της ενέργειας του προσπίπτοντος ηλεκτρονίου.

Επεκτείνοντας της σχέση 4.2.1, γράφουμε την πιθανότητα του αποτελέσματος της μέτρησης να ευρίσκεται στο διάστημα τιμών $[E_m, E_m + dE_m]$, ενώ η πραγματική τιμή της ενέργειας έχει τιμή στο διάστημα $[E_R, E_R + dE_R]$, ως:

$$P(E_m | E_R) \cdot P(E_R) = g(E_m; E_R) \cdot f(E_R) \cdot dE_R \cdot dE_m \quad 4.2.5$$

Επιπλέον, η πιθανότητα ώστε το αποτέλεσμα της μέτρησης να βρεθεί ίσο με E_m ανεξάρτητα της πραγματικής τιμής της ενέργειας του ηλεκτρονίου θα δίνεται από το ολοκλήρωμα της σχέσης 4.2.5, ως ακολούθως:

$$P(E_m) = \left[\int_{-\infty}^{\infty} g(E_m; E_R) \cdot f(E_R) \cdot dE_R \right] \cdot dE_m \quad 4.2.6$$

Κατ' αναλογία η συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας του αποτελέσματος της μέτρησης, $q(E_m)$, εκφράζεται ως η συνέλιξη της συνάρτησης πυκνότητας πιθανότητας της πραγματικής τιμής της ενέργειας και της συνάρτησης διακριτικής ικανότητας ως:

$$q(E_m) = \int_{-\infty}^{\infty} g(E_m; E_R) \cdot f(E_R) \cdot dE_R \quad 4.2.7$$

Ερώτηση 4.2.1: Δείξτε ότι $\int_{-\infty}^{\infty} q(E_m) \cdot dE_m = 1$

Ερώτηση 4.2.2: Δείξτε ότι στη περίπτωση όπου $g(E_R; E_m) = g(E_R - E_m)$ η χαρακτηριστική συνάρτηση του αποτελέσματος της μέτρησης, $\Phi_q(t)$, γράφεται ως το γινόμενο των χαρακτηριστικών συναρτήσεων της πραγματικής τιμής της ενέργειας και της διακριτικής ικανότητας.

$$\Phi_q(t) = \Phi_f(t) \cdot \Phi_g(t)$$

Υπόδειξη:

$$q(E_m) = \int_{-\infty}^{\infty} g(E_m - E_R) \cdot f(E_R) \cdot dE_R$$

$$\Phi_q(t) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{itE_m} \left[\int_{-\infty}^{\infty} g(E_m - E_R) \cdot f(E_R) \cdot dE_R \right] \cdot dE_m = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \left(e^{it(E_m - E_R)} \cdot g(E_m - E_R) \right) \cdot \left(e^{itE_R} \cdot f(E_R) \right) \cdot d(E_m - E_R) \cdot dE_R$$

Παράδειγμα 4.2.2

Τα όρια ολοκλήρωσης των σχέσεων 4.2.6 και 4.2.7 εκτείνονται από το μείον άπειρο έως το συν άπειρο. Βεβαίως, η ενέργεια του ηλεκτρονίου δεν μπορεί να πάρει αρνητικές τιμές ούτε μπορεί να υπερβεί μία μέγιστη τιμή ίση με την συνολική διαθέσιμη ενέργεια, όπως επιβάλλεται από την αρχή διατήρησης της ενέργειας. Σε τέτοιες περιπτώσεις θα πρέπει να περιοριστούμε σε φυσικά αποδεκτές περιοχές τιμών τροποποιώντας την κανονικοποίηση των συναρτήσεων πιθανότητας.

Ας υποθέσουμε ότι η φυσική ποσότητα X έχει αποδεκτές τιμές στο διάστημα $[a,b]$. Συνήθως, για να εκφράσουμε την πυκνότητα πιθανότητας των τιμών της ποσότητας X χρησιμοποιούμε κάποια από τις εύχρηστες συναρτησιακές μορφές, π.χ. την κανονική συνάρτηση. Στην πλειοψηφία τους αυτές οι εύχρηστες συναρτήσεις εΐθισται να κανονικοποιούνται ως:

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) dx = 1 \quad 4.2.8$$

Προκειμένου να χρησιμοποιήσουμε την $f(x)$ για να εκφράσουμε την συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας της φυσικής ποσότητας X , $g(x)$, θα πρέπει να προβούμε στην ακόλουθη «τροποποίηση»:

$$g(x) = \frac{f(x)}{\int_a^b f(x) dx} \quad 4.2.9$$

Η συνάρτηση $g(x)$ είναι πράγματι κανονικοποιημένη στο διάστημα $[a,b]$ ($\int_a^b g(x) dx = 1$) αλλά στις περισσότερες των περιπτώσεων έχει περισσότερο πολύπλοκο συναρτησιακό τύπο από ότι η αρχική συνάρτηση $f(x)$.

Ερώτηση: Χρησιμοποιήσετε την κανονική συνάρτηση, $f(y) = \frac{1}{\sigma \cdot \sqrt{2 \cdot \pi}} \cdot e^{-\frac{(\mu - y)^2}{2 \cdot \sigma^2}}$, για να

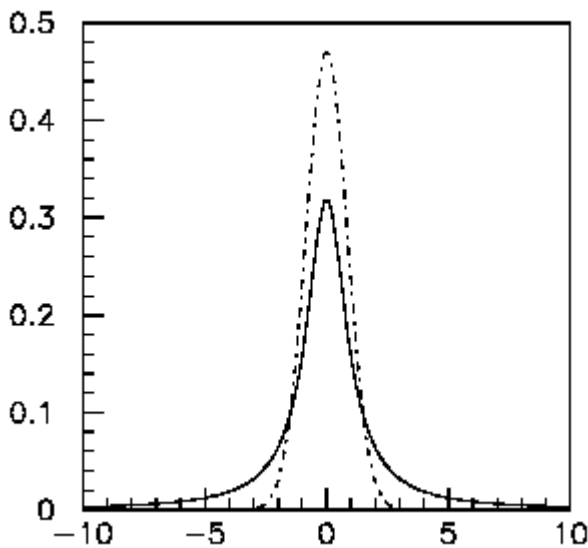
κατασκευάσετε την συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας του φυσικού μεγέθους Y οι τιμές του οποίου έχουν φυσική σημασία στο διάστημα $[a,b]$. Δείξτε ότι εάν $(\mu - a) = (\mu - b) = \lambda$ η αναμενόμενη τιμή $\langle y \rangle$ των τιμών του φυσικού μεγέθους ισούται με μ .

Υπόδειξη: $f(y) = \frac{1}{\sigma \cdot \sqrt{2 \cdot \pi}} \cdot e^{-\frac{(\mu-y)^2}{2 \cdot \sigma^2}}$, $g(y) = \frac{f(y)}{\int_a^b f(y) dy} = \frac{e^{-\frac{(\mu-y)^2}{2 \cdot \sigma^2}}}{\int_a^b e^{-\frac{(\mu-y)^2}{2 \cdot \sigma^2}} dy}$

Παρατηρήσετε ότι: $\int_a^b y \cdot f(y) \cdot dy = \int_{a-\mu}^{b-\mu} (y - \mu) \cdot f(y - \mu) \cdot d(y - \mu) = \int_{-\lambda}^{\lambda} t \cdot \frac{1}{\sigma \cdot \sqrt{2 \cdot \pi}} \cdot e^{-\frac{(t)^2}{2 \cdot \sigma^2}} dt = 0$

Υπάρχουν όμως περιπτώσεις όπου ο περιορισμός του πεδίου ορισμού της τυχαίας μεταβλητής έχει ευεργετικές επιπτώσεις. Κλασικό παράδειγμα αποτελεί η συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας Cauchy (ή Breit-Wigner):

$$f(x) = \frac{1}{\pi} \cdot \frac{1}{x^2 + 1} \quad 4.2.10$$



Σχήμα 4.2.1 : Η συνεχής γραμμή παριστά γραφικά τη συνάρτηση Cauchy, της σχέσης 4.2.10 . Η διακεκομμένη γραμμή είναι η γραφική παράσταση κανονικής συνάρτησης. Οι παράμετροι της κανονικής συνάρτησης επιλέχθηκαν ώστε να εμφανίζει μέγιστο στο μηδέν και το πλήρες εύρος¹ στο ήμισυ του μεγίστου να ισούται με δύο. Παρ' όλο που η συνάρτηση 4.2.10 βρίσκει πολλές εφαρμογές² στην περιγραφή καταστάσεων συντονισμού πάσχει από το γεγονός ότι δεν είναι δυνατόν να ορίσουμε τις ορμές (αναμενόμενη τιμή, διασπορά κ.τ.λ.) της τυχαίας μεταβλητής x.

¹ Το εύρος της περιοχής τιμών της μεταβλητής για τις οποίες η συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας έχει τιμές μεγαλύτερες από το ήμισυ της μέγιστης τιμής της.

² Η συνάρτηση Cauchy, συνήθως γραφόμενη υπό την μορφή:

$$f(x) = \frac{1}{\pi} \cdot \left[\frac{\Gamma}{\Gamma^2 + (x - x_0)^2} \right] \quad 4.2.11$$

Ερώτηση: Δείξτε ότι το πλήρες εύρος στο ήμισυ του μεγίστου των συνάρτησεων Cauchy και Gauss είναι 2 και $2 \cdot \sqrt{\ln 4} \cdot \sigma$; $2.3548 \cdot \sigma$ αντίστοιχα.

Όπως φαίνεται στο Σχήμα 4.2.1, η συνάρτηση Cauchy σε σύγκριση με την συνάρτηση Gauss, τείνει στο μηδέν πολύ αργά με αποτέλεσμα οι ορμές της τυχαίας μεταβλητής να απειρίζονται. Όταν όμως το πεδίο ορισμού της τυχαίας μεταβλητής περιορίζεται, επι παραδείγματι στην περιοχή $[-A, A]$, η προκύπτουσα συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας:

$$g(x) = \frac{f(x)}{\int_{-A}^A f(x) \cdot dx} = \frac{1}{2 \cdot \arctan(A)} \quad 4.2.12$$

έχει πεπερασμένη αναμενόμενη τιμή:

$$E(x) = \int_{-A}^A x \cdot g(x) \cdot dx = 0 \quad 4.2.13$$

και πεπερασμένη διασπορά:

$$V(x) = \int_{-A}^A x^2 \cdot g(x) \cdot dx = \frac{A}{\arctan A} - 1 \quad 4.2.14$$

4.3 Αποδοχή και αποδοτικότητα της μετρητικής διάταξης

Κάθε μετρητική διάταξη, για προφανείς λόγους, έχει πεπερασμένες διαστάσεις και μπορεί να ανιχνεύσει φαινόμενα (και να εκτελέσει μετρήσεις φυσικών ποσοτήτων) που εξελίσσονται εντός του ενεργού της χώρου. Επιπλέον, άλλα φαινόμενα που συμβαίνουν κατά την διάρκεια της μέτρησης επηρεάζουν την λειτουργία των οργάνων και συνεισφέρουν στο νεκρό χρόνο της διάταξης. Το τελικό αποτέλεσμα της επίδρασης όλων αυτών των εξωγενών παραμέτρων συνίσταται στην μείωση της αποδοτικότητας της διάταξης και στην παραμόρφωση της πραγματικής συνάρτησης πυκνότητας πιθανότητας του υπό μέτρηση φυσικού μεγέθους.

Παράδειγμα 4.3.1:

Ας υποθέσουμε ότι εκτελούμε μία σειρά μετρήσεων για τον προσδιορισμό της φασματικής κατανομής ακτινοβολίας κάποιας φωτεινής πηγής, η οποία εκπέμπει στην περιοχή μήκων κύματος $\lambda \in [a, b]$. Εκφράζουμε με την συνάρτηση $f(\lambda)$ την πυκνότητα πιθανότητα ώστε ένα εκπεμπόμενο φωτόνιο από την πηγή να έχει μήκος κύματος στην περιοχή τιμών $[\lambda, \lambda + d\lambda]$. Η συνάρτηση $f(\lambda)$ περιγράφει την φασματική κατανομή ακτινοβολίας εκφράζοντας το αποτέλεσμα μίας αλληλουχίας αλληλεπιδράσεων των δομικών συστατικών της πηγής. Παράλληλα η συνάρτηση $f(\lambda)$ εκφράζει την πυκνότητα πιθανότητας της τυχαίας μεταβλητής λ .

Χρησιμοποιώντας τις συλλεγόμενες μετρήσεις προσδιορίζουμε της φασματική κατανομή ως:

περιγράφει την συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας της μάζας βραχύβιων σωματιδίων, όπου η παράμετρος x_0 εκφράζει την μάζα μεγίστης πιθανότητας ενώ η παράμετρος 2Γ εκφράζει το εύρος της συνάρτησης πυκνότητας πιθανότητας στο ήμισυ του μεγίστου, όπως φαίνεται στο Σχήμα 4.2.1.

$$f(\lambda_i) = \lim_{\substack{\Delta\lambda \rightarrow 0 \\ N' \rightarrow \infty}} \frac{n_i'}{N'} \quad 4.3.1$$

όπου n_i' είναι ο αριθμός των φωτονίων με μήκη κύματος στην περιοχή τιμών $[\lambda_i, \lambda_i + \Delta\lambda]$ που καταμετρήθηκαν από την μετρητική συσκευή και N' είναι ο συνολικός αριθμός των καταμετρούμενων φωτονίων ανεξαρτήτου μήκους κύματος.

Το πλήθος n_i' είναι πολύ μικρότερο από το πλήθος των φωτονίων που εξέπεμψε η πηγή στην περιοχή μήκους κύματος $[\lambda_i, \lambda_i + \Delta\lambda]$. Πράγματι το εκπεμπόμενο φωτόνιο μπορεί να απορροφηθεί από τα υλικά (π.χ. αέρας, φακοί, τοιχώματα κατευθυντήρων, κτλ) που παρεμβάλλονται μεταξύ της πηγής και της ανιχνευτικής διάταξης. Επιπλέον, μικρό ποσοστό των φωτονίων που φτάνουν στην ανιχνευτική διάταξη παράγουν³ ανιχνεύσιμα ηλεκτρόνια. Συνεπώς η συνάρτηση $f(\lambda)$, προσδιοριζόμενη από τις πειραματικές μετρήσεις σύμφωνα με την σχέση 4.3.1 περιγράφει την πυκνότητα πιθανότητας των μετρήσεων αλλά δεν εκφράζει την φασματική κατανομή της πηγής.

Προκειμένου να συνδέσουμε την συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας των μετρήσεων με την συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας εκπομπής των φωτονίων θα χρησιμοποιήσουμε την πιθανότητα ανίχνευσης κάθε φωτονίου (συνάρτηση αποδοτικότητας της μετρητικής συσκευής) η οποία στη γενική περίπτωση εξαρτάται από τα φυσικά χαρακτηριστικά των φωτονίων. Πράγματι, η πιθανότητα απορρόφησης των φωτονίων από τα παρεμβαλλόμενα υλικά αλλά και η πιθανότητα παραγωγής ηλεκτρικού παλμού στην μετρική συσκευή εξαρτώνται εν γένει από το μήκος κύματος και την διεύθυνση του φωτονίου (σε σχέση με τα οπτικά και ανιχνευτικά στοιχεία της μετρητικής συσκευής).

Για απλότητα, θα θεωρήσουμε σ' αυτό το παράδειγμα ότι η πιθανότητα ανίχνευσης, $\varepsilon(\lambda, \theta)$, είναι συνάρτηση του μήκους κύματος και της γωνίας που σχηματίζει η διεύθυνση του φωτονίου με κάποιο⁴ άξονα συμμετρίας της πειραματικής διάταξης. Θα εκφράσουμε την πυκνότητα πιθανότητας εκπομπής των φωτονίων από την πηγή με την συνάρτηση $g(\lambda, \theta)$

($\int_a^b \int_0^{2\pi} g(\lambda, \theta) \cdot d\theta \cdot d\lambda = 1$), υποθέτοντας ότι, λόγω των φυσικών μηχανισμών εκπομπής, το μήκος κύματος συσχετίζεται με την διεύθυνση εκπομπής των φωτονίων. Ακολουθώντας, θα εκφράσουμε την πυκνότητα πιθανότητας των μετρήσεων, $f(\lambda)$, με την συνέλιξη της κοινής συνάρτησης πυκνότητας πιθανότητας των μεταβλητών λ και θ , $g(\lambda, \theta)$, και της πιθανότητας ανίχνευσης των φωτονίων, $\varepsilon(\lambda, \theta)$, ως:

$$f(\lambda) = \frac{\int_0^{2\pi} g(\lambda, \theta) \cdot \varepsilon(\lambda, \theta) \cdot d\theta}{\int_a^b \int_0^{2\pi} g(\lambda, \theta) \cdot \varepsilon(\lambda, \theta) \cdot d\theta \cdot d\lambda} \quad 4.3.2$$

³ Προκειμένου το φωτόνιο να καταμετρηθεί θα πρέπει να αλληλεπιδράσει με την ανιχνευτική διάταξη παράγοντας ανιχνεύσιμο ηλεκτρόνιο (φωτοηλεκτρικό φαινόμενο) το οποίο με τη σειρά του θα παράγει μετρήσιμο ηλεκτρικό παλμό. Η παραγωγή ηλεκτρονίων και στη συνέχεια ηλεκτρικών παλμών στις ανιχνευτικές διατάξεις φωτονίων (π.χ. φωτοπολλαπλασιαστές) είναι χαρακτηριστικά παραδείγματα διαδικασιών μέτρησης όπου το τελικό αποτέλεσμα μπορεί να περιγραφεί μόνο πιθανοκρατικά.

⁴ Ας υποθέσουμε ότι η πειραματική διάταξη έχει κυλινδρική συμμετρία ώστε η γωνία θ να είναι η γωνία μεταξύ των διευθύνσεων του φωτονίου και του άξονα συμμετρίας της συσκευής. Στην πράξη η εξάρτηση της πιθανότητας ανίχνευσης από την διεύθυνση του φωτονίου είναι περισσότερο πολύπλοκη.

Ερώτηση: Δείξτε ότι: $\int_a^b f(\lambda) \cdot d\lambda = 1$

Θα πρέπει να επισημάνουμε ότι προκειμένου να εκφράσουμε την συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας των μετρήσεων του μήκους κύματος των φωτονίων, χωρίς να μας ενδιαφέρει η διεύθυνση εκπομπής τους, είμαστε υποχρεωμένοι να χρησιμοποιήσουμε πληροφορία που αφορά την διεύθυνση των φωτονίων. Την απαίτηση αυτή επιβάλλει η εξάρτηση της συνάρτησης αποδοτικότητας της μετρητικής συσκευής, $\varepsilon(\lambda, \theta)$, από την γωνία θ .

Στην απλούστερη περίπτωση όπου η αποδοτικότητα της συσκευής μέτρησης είναι συνάρτηση μόνο του μήκους κύματος ($\varepsilon(\lambda, \theta) \rightarrow \varepsilon(\lambda)$) η έκφραση 4.3.2 απλοποιείται ως:

$$f(\lambda) = \frac{\int_0^{2\pi} g(\lambda, \theta) \cdot \varepsilon(\lambda) \cdot d\theta}{\int_a^b \int_0^{2\pi} g(\lambda, \theta) \cdot \varepsilon(\lambda) \cdot d\theta \cdot d\lambda} = \frac{\varepsilon(\lambda) \cdot \left[\int_0^{2\pi} g(\lambda, \theta) \cdot d\theta \right]}{\int_a^b \varepsilon(\lambda) \cdot \left[\int_0^{2\pi} g(\lambda, \theta) \cdot d\theta \right] \cdot d\lambda} = \frac{\varepsilon(\lambda) \cdot G(\lambda)}{\int_a^b \varepsilon(\lambda) \cdot G(\lambda) \cdot d\lambda} \quad 4.3.3$$

όπου $G(\lambda) = \int_0^{2\pi} g(\lambda, \theta) d\theta$. Στην περίπτωση αυτή δεν απαιτείται πλέον καμία πληροφορία για την διεύθυνση, έστω και εάν η φυσική διαδικασία εκπομπής φωτονίων συσχετίζει τις δύο φυσικές παραμέτρους, θ και λ , μέσω της κοινής συνάρτησης πυκνότητας πιθανότητας, $g(\lambda, \theta)$.

Γενικεύοντας τα συμπεράσματα του Παραδείγματος 4.3.1, έστω ότι οι φυσικές μεταβλητές $\{t, x_1, x_2, \dots, x_k\}$ χαρακτηρίζουν το αποτέλεσμα κάποιας φυσικής διεργασίας, την οποία μελετούμε πειραματικά. Έστω η κοινή συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας των φυσικών μεταβλητών, $g(t, x_1, x_2, \dots, x_k)$, η οποία εκφράζει την πυκνότητα πιθανότητας των τιμών των φυσικών παραμέτρων κατά την εκτέλεση ενός πειράματος. Έστω επίσης η συνάρτηση $\varepsilon(t, x_1, x_2, \dots, x_k)$, που εκφράζει την αποδοτικότητα της μετρητικής διάταξης (πιθανότητα) να ανιχνεύσει την φυσική διεργασία και να μετρήσει την τιμή της μεταβλητής t .

Η συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας των μετρήσεων της μεταβλητής t , εκφράζεται με την ακόλουθη σχέση:

$$f(t) = \frac{\int_{\Omega_1} \int_{\Omega_2} \int_{\Omega_k} g(t, x_1, x_2, K, x_k) \cdot \varepsilon(t, x_1, x_2, K, x_k) \cdot dx_1 dx_2 \dots dx_k}{\int_{\Omega_1} \left[\int_{\Omega_2} \int_{\Omega_k} g(t, x_1, x_2, K, x_k) \cdot \varepsilon(t, x_1, x_2, K, x_k) \cdot dx_1 dx_2 \dots dx_k \right] dt} \quad 4.3.4$$

όπου $\Omega_t, \Omega_1, \Omega_2, \dots, \Omega_k$ είναι οι επιτρεπτές περιοχές τιμών των μεταβλητών $t, x_1, x_2, \dots, x_k$.

Η σχέση 4.3.4 περιγράφει μετρητική διάταξη ιδανικής διακριτικής ικανότητας. Πράγματι, στην συζήτηση που προηγήθηκε δεν έγινε διάκριση μεταξύ της πραγματικής τιμής και της μετρούμενης τιμής των φυσικών μεταβλητών. Έστω ότι t^m και $t^R, x_1^R, x_2^R, K, x_k^R$ την μετρούμενη και τις πραγματικές τιμές των φυσικών μεταβλητών. Η πιθανότητα εύρεσης (αποτέλεσμα της μέτρησης) της τιμής της φυσικής

ποσότητας t , ίσης με t_m δίνεται από την συνάρτηση διακριτικής ικανότητας της μετρητικής διάταξης, $R(t^m; t^R, x_1^R, x_2^R, K, x_k^R)^5$, όπου:

$$\int_{\Omega_{t^m}} R(t^m; t^R, x_1^R, x_2^R, K, x_k^R) \cdot dt^m = 1 \quad , \quad \forall \{t^R, x_1^R, x_2^R, K, x_k^R\}^6$$

Η συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας των αποτελεσμάτων της μέτρησης της μεταβλητής t , θα δίνεται από την ακόλουθη επέκταση της σχέσης 4.3.4:

$$\begin{aligned} f(t^m) &= \frac{\int_{\Omega_{t^R}} R(t^m; t^R, x_1^R, x_2^R, K, x_k^R) \left[\int_{\Omega_1} \int_{\Omega_2} K \int_{\Omega_k} g(t^R, x_1^R, x_2^R, K, x_k^R) \cdot \varepsilon(t^R, x_1^R, x_2^R, K, x_k^R) \cdot dx_1^R \cdot dx_2^R, K \, dx_k^R \right] dt^R}{\int_{\Omega_{t^m}} \int_{\Omega_{t^R}} R(t^m; t^R, x_1^R, x_2^R, K, x_k^R) \left[\int_{\Omega_1} \int_{\Omega_2} K \int_{\Omega_k} g(t^R, x_1^R, x_2^R, K, x_k^R) \cdot \varepsilon(t^R, x_1^R, x_2^R, K, x_k^R) \cdot dx_1^R \cdot dx_2^R, K \, dx_k^R \right] dt^R \cdot dt^m} \\ &= \frac{\int_{\Omega_{t^R}} R(t^m; t^R, x_1^R, x_2^R, K, x_k^R) \left[\int_{\Omega_1} \int_{\Omega_2} K \int_{\Omega_k} g(t^R, x_1^R, x_2^R, K, x_k^R) \cdot \varepsilon(t^R, x_1^R, x_2^R, K, x_k^R) \cdot dx_1^R \cdot dx_2^R, K \, dx_k^R \right] dt^R}{\int_{\Omega_{t^R}} \left[\int_{\Omega_1} \int_{\Omega_2} K \int_{\Omega_k} g(t, x_1, x_2, K, x_k) \cdot \varepsilon(t^R, x_1^R, x_2^R, K, x_k^R) \cdot dx_1^R \cdot dx_2^R, K \, dx_k^R \right] dt^R} \end{aligned} \quad 4.3.$$

⁵ Η διακριτική μίας μετρητικής διάταξης της φυσικής ποσότητας t , στην γενική περίπτωση, εξαρτάται από όλες τις φυσικές παραμέτρους που χαρακτηρίζουν την υπό μελέτη διαδικασία. Επί παραδείγματι, η διακριτική ικανότητα των πειραματικών διατάξεων μέτρησης του μήκους κύματος εξαρτάται από τη γωνία πρόσπτωσης των φωτονίων στα οπτικά στοιχεία της διάταξης.

⁶ Απλό παράδειγμα συνάρτησης της διακριτικής ικανότητας είναι η κανονική συνάρτηση της μορφής:

$$R(t^m; t^R, x_1^R, x_2^R, K, x_k^R) = \frac{1}{\sqrt{2\pi} \cdot \sigma(t^R, x_1^R, x_2^R, K, x_k^R)} \cdot e^{-\frac{(t^m - t^R)^2}{2\sigma^2(t^R, x_1^R, x_2^R, K, x_k^R)}}$$

όπου ισχύει ότι:
$$\int_{\Omega_{t^m}} \frac{1}{\sqrt{2\pi} \cdot \sigma(t^R, x_1^R, x_2^R, K, x_k^R)} \cdot e^{-\frac{(t^m - t^R)^2}{2\sigma^2(t^R, x_1^R, x_2^R, K, x_k^R)}} dt^m = 1 \quad , \quad \forall \{t^R, x_1^R, x_2^R, K, x_k^R\}$$

4.4 Ολοκλήρωση Monte Carlo

Η εκτίμηση της συνάρτησης πυκνότητας πιθανότητας των μετρήσεων ως ολοκλήρωμα της μορφής 4.3.4 είναι ιδιαίτερα δύσκολη, έστω και εάν είναι γνωστή η «πραγματική» συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας του υπό μέτρηση φυσικού μεγέθους. Η δυσκολία έγκειται στην συνήθως πολύπλοκη μορφή της υπό ολοκλήρωσης συνάρτησης και στο γεγονός ότι στις περισσότερες των περιπτώσεων η αποδοτικότητα και διακριτική ικανότητα των πειραματικών διατάξεων δεν είναι δυνατόν να περιγραφούν από απλές συνεχείς συναρτήσεις. Ιδιαίτερα όταν η αποδοτικότητα ή-και η διακριτική ικανότητα περιγράφονται από μη συνεχείς συναρτήσεις, οι γνωστές μέθοδοι αριθμητικής ολοκλήρωσης δεν είναι εύκολα εφαρμόσιμες.

Στην υποενότητα ????? εφαρμόσαμε τον νόμο των μεγάλων αριθμών για να εκτιμήσουμε την τιμή ολοκληρωμάτων. Σας υπενθυμίζω ότι η μέθοδος που αναπτύξαμε συνίσταται στην εκτίμηση του ολοκληρώματος:

$$I = \int_a^b y(x) \cdot dx \quad 4.4.1$$

ως άθροισμα τιμών της υπό ολοκλήρωση συνάρτησης της μορφής:

$$\hat{I} = \frac{b-a}{N} \cdot \sum_{i=1}^N y(x_i) \quad 4.4.2$$

όπου x_i ($i=1,2,\dots,N$) είναι N τιμές της μεταβλητής x ισοπίθανα επιλεγμένες στο διάστημα $[a,b]$. Την μέθοδο αυτή θα την καλούμε στα επόμενα «απλή Monte Carlo ολοκλήρωση».

Δείξαμε ότι, για $N \rightarrow \infty$, η εκτίμηση 4.4.2 συμπίπτει με το ακριβές αποτέλεσμα της ολοκλήρωσης, I . Για πεπερασμένο, αλλά μεγάλο, αριθμό όρων, N , η εκτίμηση, $\hat{I}$, συμπεριφέρεται ως τυχαία μεταβλητή με κανονική συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας, $g(\hat{I})$:

$$g(\hat{I}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi} \cdot \sigma_{\hat{I}}} \cdot e^{-\frac{(I-\hat{I})^2}{2\sigma_{\hat{I}}^2}} \quad 4.4.3_a$$

$$\sigma_{\hat{I}} = (b-a) \cdot \sqrt{\frac{\sigma_y^2}{N}} \quad 4.4.3_b$$

όπου:

$$\sigma_y^2 = \frac{1}{b-a} \int_a^b (y(x) - \frac{I}{b-a})^2 \cdot dx = \frac{1}{b-a} \int_a^b (y(x))^2 \cdot dx - \frac{I^2}{(b-a)^2}$$

Σύμφωνα με όσα αναπτύξαμε περί σφαλμάτων στη υποενότητα ????? η ακρίβεια της εκτίμησης της τιμής του ολοκληρώματος εκφράζεται από την ποσότητα $\sigma_{\hat{I}}$. Προκειμένου να εκτιμήσουμε την τιμή της ποσότητας $\sigma_{\hat{I}}$ χρησιμοποιούμε την προσέγγιση :

$$\sigma_{\hat{I}}^2 = (b-a)^2 \frac{1}{N} \cdot \left[\overline{y^2(x)} - (\overline{y(x)})^2 \right] \quad 4.4.4$$

$$= (b-a)^2 \frac{1}{N} \cdot \left[\frac{1}{N} \cdot \sum_{i=1}^N y^2(x_i) - \left(\frac{1}{N} \cdot \sum_{i=1}^N y(x_i) \right)^2 \right]$$

Στην γενική περίπτωση πολλαπλών ολοκληρώσεων της μορφής:

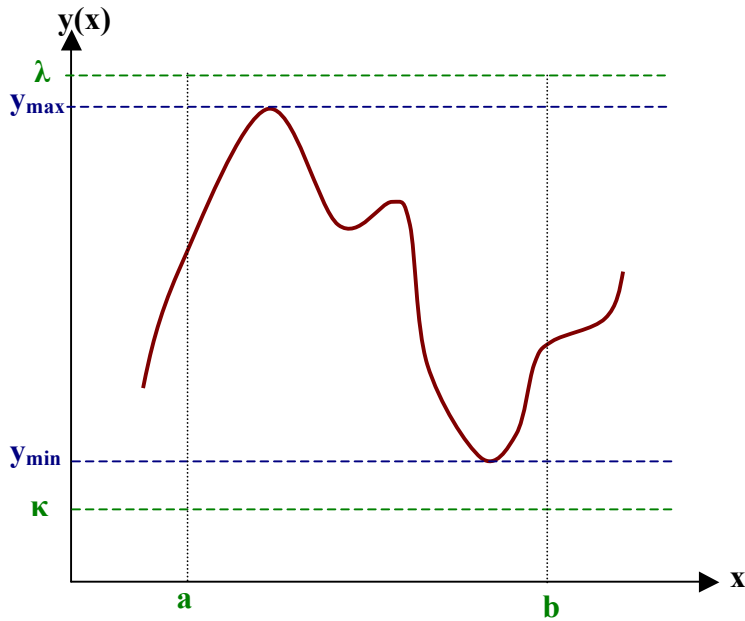
$$I = \int_{a_1}^{b_1} \int_{a_2}^{b_2} \dots \int_{a_k}^{b_k} y(x_1, x_2, \dots, x_k) \cdot dx_1 \cdot dx_2 \cdot \dots \cdot dx_k \quad 4.4.5$$

χρησιμοποιούμε την ίδια μεθοδολογία επιλέγοντας ισοπίθανα σημεία εντός του χώρου ολοκλήρωσης και ο παράγων $(b-a)$ αντικαθίσταται από τον όγκο ολοκλήρωσης

$$V = \int_{a_1}^{b_1} \int_{a_2}^{b_2} \dots \int_{a_k}^{b_k} dx_1 \cdot dx_2 \cdot \dots \cdot dx_k .$$

4.5 Ολοκλήρωση Monte Carlo με την μέθοδο «επιτυχίας-απώλειας»

Επιδιώκουμε να εκτιμήσουμε την τιμή του ολοκληρώματος 4.4.1. Έστω $y_{\min}$ και $y_{\max}$ το μέγιστο και ελάχιστο της συνάρτησης $y(x)$ στο διάστημα $x \in [a, b]$, αντίστοιχα. Έστω επίσης οι πραγματικοί αριθμοί κ και λ ώστε $\kappa \leq y_{\min}$ και $\lambda \geq y_{\max}$.



Σχήμα 4.5.1.: Γραφική παράσταση της υπό ολοκλήρωση συνάρτησης.

Έστω $\{x_i, z_i\}$, $i=1,2,3,\dots,N$ ζεύγη ανεξάρτητων τυχαίων αριθμών διαλεγμένα ομοιόμορφα στα διαστήματα $[a,b]$ και $[\kappa,\lambda]$ αντίστοιχα. Στα επόμενα θα χρησιμοποιούμε τα σύμβολα:

$$\begin{aligned} x_i &= R[a, b] \\ z_i &= R[\kappa, \lambda] \end{aligned} \quad 4.5.2$$

για να δηλώνουμε ότι οι τυχαίοι αριθμοί επιλέγονται σύμφωνα με ομοιόμορφη συνάρτηση πιθανότητας στα αντίστοιχα διαστήματα τιμών.

Ορίζουμε ως επιτυχία την περίπτωση κατά την οποία:

$$\text{επιτυχία} \equiv z_i \leq y(x_i) \quad 4.5.3$$

και ορίζουμε ως απώλεια την περίπτωση κατά την οποία:

$$\text{απώλεια:} \equiv z_i \geq y(x_i) \quad 4.5.4$$

Ας υποθέσουμε ότι μετά από N δοκιμές (N επιλογές ζευγών $\{x_i, z_i\}$) είχαμε n επιτυχίες και $(N - n)$ απώλειες. Η εκτίμηση του ολοκληρώματος 4.4.1 εκφράζεται από την ακόλουθη σχέση:

$$\hat{I} = \frac{n}{N} \cdot (b - a) \cdot (\lambda - \kappa) + \kappa \cdot (b - a) \quad 4.5.5$$

Η ποσότητα n είναι τυχαία μεταβλητή με δυνωμική συνάρτηση πιθανότητας και αναμενόμενη τιμή: $E(n) = N \cdot p$, όπου p είναι η πιθανότητα επιτυχίας σε κάθε μία από τις δοκιμές (επιλογές ζεύγους σύμφωνα με την 4.5.2). Από το Σχήμα 4.5.1 εύκολα μπορείτε να αποδείξετε⁷ γεωμετρικά ότι:

$$p = \frac{I - (b - a) \cdot \kappa}{(b - a) \cdot (\lambda - \kappa)} \quad 4.5.6$$

Από τις σχέσεις 4.5.5 και 4.5.6 εύκολα καταλήγουμε ότι:

$$E(\hat{I}) = \frac{\sum_{n=0}^{N \cdot p} E(n)}{N} \cdot (b - a) \cdot (\lambda - \kappa) + \kappa \cdot (b - a) = I \quad 4.5.7$$

Η δυνωμική διασπορά της μεταβλητής n , είναι ίση με: $V(n) = N \cdot p \cdot (1 - p)$ και συνεπώς η διασπορά της τυχαίας μεταβλητής $\hat{I}$ θα είναι:

$$\begin{aligned} V(\hat{I}) &= \frac{1}{N} \cdot p \cdot (1 - p) \cdot (b - a)^2 \cdot (\lambda - \kappa)^2 \\ &= \frac{1}{N} \cdot (I - (b - a) \cdot \kappa) \cdot ((b - a) \cdot \lambda - I) \end{aligned} \quad 4.5.8$$

Για δεδομένο αριθμό δοκιμών, N , η διασπορά της εκτίμησης του ολοκληρώματος ελαχιστοποιείται, μεγιστοποιείται η ακρίβεια εκτίμησης, όταν ο παράγων κ λάβει την μέγιστη δυνατή τιμή και ο παράγων λ την ελάχιστη δυνατή τιμή. Όπως φαίνεται από το Σχήμα 4.5.1 και σύμφωνα με τον τρόπο επιλογής των κ και λ η διασπορά ελαχιστοποιείται για $\kappa = y_{\min}$ και $\lambda = y_{\max}$. Εύκολα αντιλαμβάνεται κανείς ότι στις περιπτώσεις όπου $\kappa < y_{\min}$ ή/και $\lambda > y_{\max}$ γίνεται «σπατάλη» τυχαίων αριθμών: επιλέγονται ζεύγη τυχαίων αριθμών που θα απορριφθούν χωρίς καμία συνεισφορά στην ακρίβεια της εκτίμησης. Στις περισσότερες πρακτικές εφαρμογές είναι πολύ δύσκολο να γνωρίζουμε με ακρίβεια το ελάχιστο και μέγιστο της υπό ολοκλήρωση συνάρτησης όποτε είναι προτιμότερη μία ασφαλής επιλογή των τιμών των κ και λ .

Σε κάθε πρακτική εφαρμογή της μεθόδου ο χρήστης θέλει να ξέρει την ακρίβεια των εκτιμήσεων του. Είναι προφανές ότι η σχέση 4.5.8 δεν έχει πρακτική αξία διότι απαιτεί την εκ των προτέρων γνώση της τιμής του ολοκληρώματος, I . Σε κάθε πρακτική εφαρμογή **εκτιμούμε** την ακρίβεια των υπολογισμών αντικαθιστώντας στην σχέση 4.5.8 : $\hat{I} \rightarrow I$

⁷ Αντιστοιχείστε το πλήθος των επιτυχιών και δοκιμών σε εμβαδά που ορίζονται από τις γραμμές του Σχήματος 4.5.1.

$$\begin{aligned}\hat{V}(\hat{I}) &= \frac{1}{N} \cdot \left(\hat{I} - (b-a) \cdot \kappa \right) \cdot \left((b-a) \cdot \lambda - \hat{I} \right) \\ &= \frac{n}{N^2} \cdot \left(1 - \frac{n}{N} \right) \cdot (b-a)^2 \cdot (\lambda - \kappa)^2\end{aligned}\quad 4.5.9$$

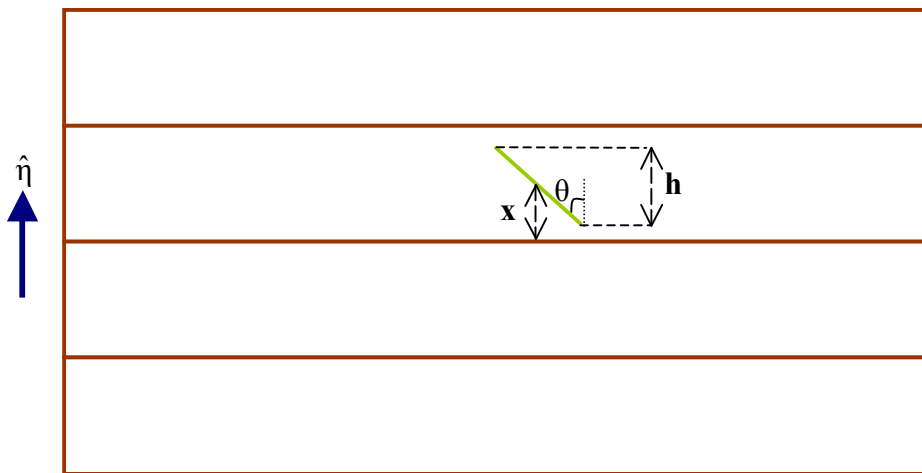
και γράφουμε ότι:

$$I: \hat{I} \pm \sqrt{\hat{V}(\hat{I})} = \left[\frac{n}{N} \cdot (b-a) \cdot (\lambda - \kappa) + \kappa \cdot (b-a) \right] \pm \left[\frac{1}{N} \cdot \sqrt{n \cdot \left(1 - \frac{n}{N} \right)} \cdot (b-a) \cdot (\lambda - \kappa) \right] \quad 4.5.10$$

Η γενίκευση αυτής της μεθόδου Monte Carlo ολοκλήρωσης σε εκτιμήσεις πολλαπλών ολοκληρωμάτων γίνεται εύκολα επιλέγοντας τυχαία σημεία στον χώρο ολοκλήρωσης ($x_i \rightarrow \hat{x}_i$), ένα τυχαίο αριθμό μεταξύ της ελαχίστης και μεγίστης τιμής της υπό ολοκλήρωση συνάρτησης στο χώρο ολοκλήρωσης ($z_i \rightarrow \hat{z}_i$) και εφαρμόζοντας τα κριτήρια χαρακτηρισμού του αποτελέσματος της δοκιμής ως επιτυχία ή απώλεια. Η εκτίμηση του ολοκληρώματος εκφράζεται με την σχέση 4.5.10, αντικαθιστώντας τον όρο (b-a) με τον όγκο του χώρου ολοκλήρωσης.

Παράδειγμα 4.5.1:

Παραλλαγή της μεθόδου ολοκλήρωσης «επιτυχίας απώλειας» χρησιμοποιήθηκε (1777) για τον υπολογισμό του «π». Η μέθοδος έμεινε γνωστή ως «μέθοδος βελόνας του Buffon» και έχει ως ακολούθως.



Σχήμα 4.5.2: Το μέσον της βελόνας απέχει κατά x από την πλησιέστερη παράλληλο και η διεύθυνσή της σχηματίζει γωνία θ με την κάθετο προς τις παράλληλες ευθείες γραμμές

Χαράχθηκαν στο πάτωμα ισαπέχουσες παράλληλες γραμμές σε απόσταση d μεταξύ τους. Μία βελόνα, μήκους d , αφήνεται από κάποιο ύψος να πέσει στο πάτωμα με τρόπο ώστε η

απόσταση του μέσου της βελόνας από την πλησιέστερη γραμμή, x , και η γωνία που σχηματίζει η βελόνα με την κάθετο προς τις παράλληλες γραμμές, θ , να κατανέμονται με ίσες πιθανότητες στα διαστήματα $[0, d/2]$ και $[0, \pi/2]$ αντίστοιχα. Οι συναρτήσεις πυκνότητας πιθανότητας των τυχαίων μεταβλητών x και θ είναι:

$$g(x) = \frac{2}{d}, \quad w(\theta) = \frac{2}{\pi} \quad 4.5.11$$

Επιτυχία θεωρείται το γεγονός κατά το οποίο η βελόνα τέμνει μία από τις παράλληλες ευθείες γραμμές. Σ' αντίθετη περίπτωση το γεγονός θεωρείται απώλεια.

Για κάποια συγκεκριμένη τιμή της γωνίας θ , $\theta = \theta_0$, η πιθανότητα επιτυχίας θα δίνεται από την υπό συνθήκη πιθανότητα:

$$f(\text{επιτυχία} | \theta = \theta_0) = \frac{h}{d} = \frac{d \cdot \cos \theta}{d} = \cos \theta \quad 4.5.12$$

όπου h είναι το μήκος της προβολής της βελόνας παράλληλα προς την κάθετο των παράλληλων ευθειών γραμμών (βλέπε Σχήμα 4.5.2).

Η πιθανότητα επιτυχίας για οποιαδήποτε τιμή της γωνίας θ δίνεται από την ακόλουθη σχέση:

$$P = \int_0^{\pi/2} f(\text{επιτυχία} | \theta) \cdot w(\theta) \cdot d\theta = \int_0^{\pi/2} \frac{2}{\pi} \cdot \cos \theta \cdot d\theta = \frac{2}{\pi} \quad 4.5.13$$

Εάν κατά την εκτέλεση N δοκιμών σημειώθηκαν n επιτυχίες τότε η πιθανότητα επιτυχίας εκτιμάται κατά τα γνωστά ως: $\hat{p} = \frac{n}{N}$. Κατά συνέπεια η τιμή του « π » εκτιμάται ως:

$$\hat{\pi} = \frac{2 \cdot N}{n} \quad 4.5.14$$

Όπως φαίνεται από τις σχέσεις 4.4.3 και 4.5.8 η ακρίβεια της εκτίμησης, εκπεφρασμένη ως η τετραγωνική ρίζα της διασποράς, είναι αντιστρόφως ανάλογη του αριθμού των δοκιμών, τόσο για την απλή Monte Carlo ολοκλήρωση όσο και για την μέθοδο επιτυχίας-απώλειας.

Γενικά η απλή Monte Carlo ολοκλήρωση καταλήγει σε ακριβέστερα αποτελέσματα, για τον ίδιο αριθμό δοκιμών, όπως επιδεικνύεται με το επόμενο παράδειγμα.

Παράδειγμα 4.5.2:

Ας υπολογίσουμε την ακρίβεια των εκτιμήσεων του ολοκληρώματος:

$$I = \int_0^{\pi/2} \cos \theta \cdot d\theta \quad 4.5.15$$

με την μέθοδο της απλής Monte Carlo ολοκλήρωσης και της μεθόδου επιτυχίας-απώλειας.

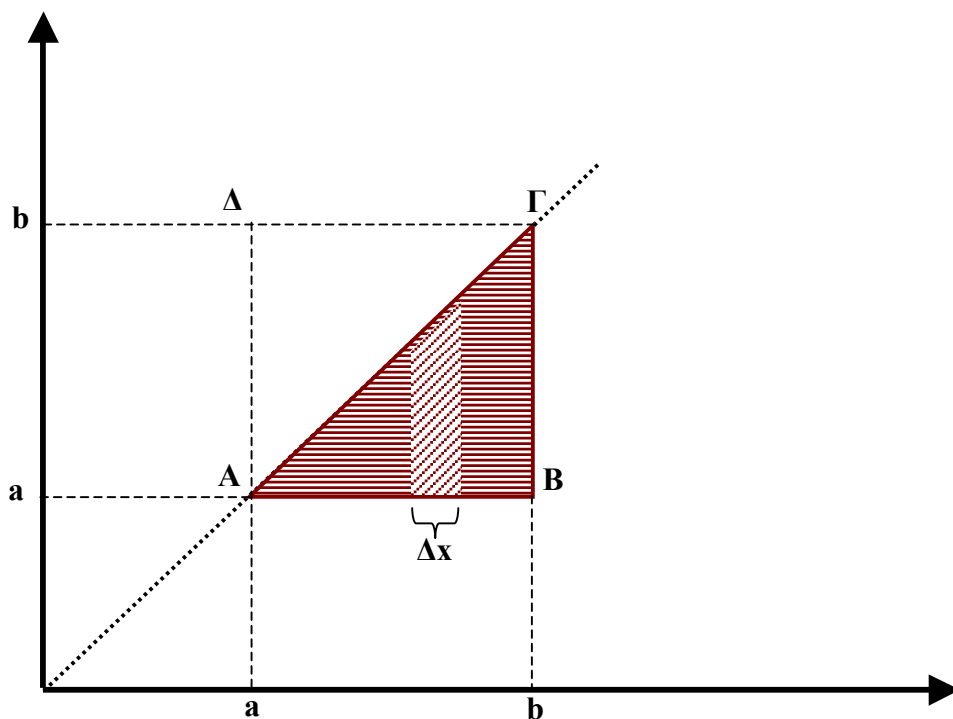
Προφανώς $I = \int_0^{\pi/2} \cos \theta \cdot d\theta = \frac{\pi}{2}$. Εφαρμόζοντας την σχέση 4.4.3 καταλήγουμε ότι η ακρίβεια

της απλής μεθόδου Monte Carlo ολοκλήρωσης είναι: $\sqrt{V(\hat{I})} = \frac{0.308}{\sqrt{N}}$.

Η ακρίβεια της μεθόδου επιτυχίας-απώλειας, για $\kappa=0$, $\lambda=1$, $a=0$, $b=\pi/2$ και $p=2/\pi$, βρίσκεται από την σχέση 4.5.8 να είναι ίση με: $\sqrt{V(\hat{I})} = \frac{0.756}{\sqrt{N}}$, δηλαδή υπερδιπλάσια της άλλης μεθόδου.

4.6 Τεχνικές επιλογής τυχαίων αριθμών

Στις εφαρμογές των μεθόδων Monte Carlo ολοκλήρωσης επιζητούμε αποδοτικές τεχνικές επιλογής τυχαίων αριθμών. Θα μελετήσουμε ένα παράδειγμα διπλής ολοκλήρωσης για να αναδείξουμε τις δυσκολίες που προκύπτουν.



Σχήμα 4.6.1: Επιφάνεια ολοκλήρωσης του ολοκληρώματος $I = \int_a^b \left[\int_a^x g(x, y) dy \right] dx$

Έστω ότι θέλουμε να εκτιμήσουμε την τιμή του ακόλουθου ολοκληρώματος:

$$I = \int_a^b \left[\int_a^x g(x, y) dy \right] dx \quad 4.6.1$$

όπου η επιφάνεια ολοκλήρωσης παρίσταται με το γραμμοσκιασμένο τμήμα του Σχήματος 4.6.1. Στην συνέχεια θα συζητήσουμε τέσσερις τρόπους επιλογής τυχαίων αριθμών σε συμφωνία με τα όρια ολοκλήρωσης.

4.6.1 Προφανής (αλλά λανθασμένος) τρόπος επιλογής

Επιλέγουμε τυχαίους αριθμούς στο διάστημα ολοκλήρωσης ως:

$$\begin{aligned} x_i &= R[a, b] \\ y_i &= R[a, x_i] \end{aligned} \quad 4.6.2$$

και εκτιμούμε το ολοκλήρωμα με το άθροισμα:

$$\hat{I} = \underbrace{\frac{(b-a)^2}{14 \cdot 2 \cdot 4}}_{\text{επιφάνεια ολοκλήρωσης}} \cdot \frac{1}{N} \cdot \sum_{i=1}^N g(x_i, y_i) \quad 4.6.3$$

Η μέθοδος αυτή είναι λανθασμένη!

Επιλέγοντας ισοπίθανα τα x_i στο διάστημα $[a, b]$, κάθε στοιχειώδης περιοχή ΔS_i , γύρω από το x_i και με εύρος $\Delta x \rightarrow 0$, (βλέπε Σχήμα 4.6.1) έχει την ίδια πιθανότητα να επιλεγεί. Μετά από την επιλογή του x_i θα επιλεγεί ένας αριθμός y_i στο διάστημα $[a, x_i]$ ώστε το σημείο $\{x_i, y_i\}$ να ανήκει στην στοιχειώδη περιοχή ΔS_i . Συνεπώς θα επιλέγεται ο ίδιος αριθμός σημείων σε κάθε στοιχειώδη περιοχή ανεξάρτητα του εμβαδού της με αποτέλεσμα τα επιλεγμένα σημεία $\{x_i, y_i\}$ να μην έχουν ομοιόμορφη πυκνότητα στην επιφάνεια ολοκλήρωσης.

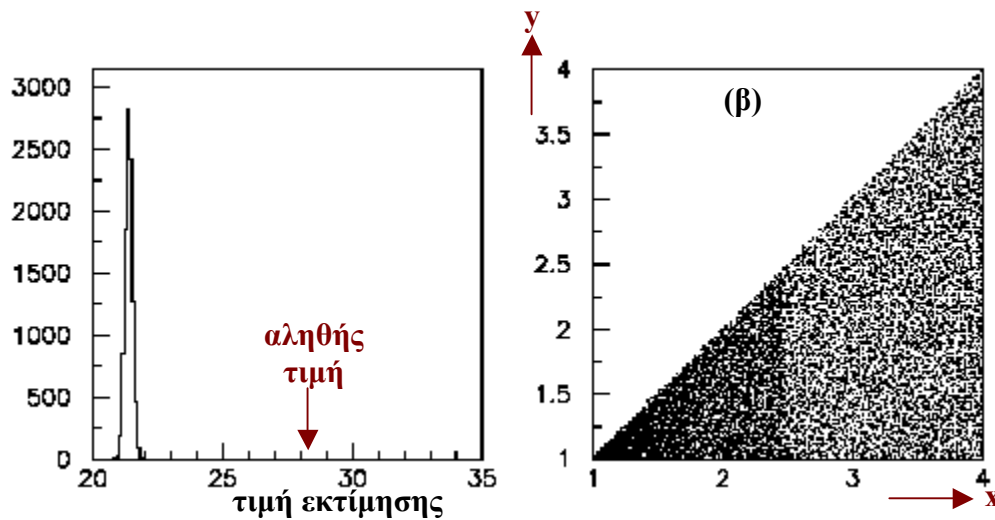
Παράδειγμα 4.6.1:

Στο Σχήμα 4.6.2α παρουσιάζονται, υπό μορφή ιστογράμματος, τα αποτελέσματα εκτιμήσεων του ολοκληρώματος :

$$J = \int_1^4 \int_1^x (x \cdot y) dx dy \quad 4.6.4$$

βάσει της σχέσης 4.6.3. Για κάθε εκτίμηση έχουν επιλεγεί $N=10000$ τυχαίοι αριθμοί, σύμφωνα με τη συνθήκη 4.6.2. Οι εκτιμήσεις κατανέμονται γύρω από μία μέση τιμή (περίπου) ίση με 21.36 η οποία διαφέρει σημαντικά από την πραγματική τιμή⁸ 28.15. Στο σχήμα 4.6.2.β παρουσιάζονται γραφικά τα σημεία $\{x_i, y_i\}$ που επιλέγηκαν κατά τις εκτιμήσεις του ολοκληρώματος. Είναι εμφανές ότι η πυκνότητα σημείων μεταβάλλεται στην επιφάνεια ολοκλήρωσης, καταστρατηγώντας τις βασικές προϋποθέσεις της ολοκλήρωσης Monte Carlo, καταλήγοντας σε λανθασμένη εκτίμηση του ολοκληρώματος

⁸ Εύκολα μπορεί να διαπιστωθεί ότι $J = \int_1^4 \int_1^x (x \cdot y) dx dy = 28.125$



Σχήμα 4.6.2: (α) Η κατανομή των εκτιμήσεων του ολοκληρώματος 4.6.4 και (β) η γραφική παράσταση των επιλεγμένων ζευγών τυχαίων αριθμών σύμφωνα με την συνθήκη 4.6.2.

4.6.2 Μέθοδος απόρριψης

Εύκολα καταλαβαίνει κανείς ότι επιλέγοντας τους τυχαίους αριθμούς $\{x_i, y_i\}$ σύμφωνα με την συνθήκη:

$$\begin{aligned} x_i &= R[a, b] \\ y_i &= R[a, b] \end{aligned} \quad 4.6.5$$

καλύπτουμε ισότροπα την επιφάνεια $AB\Gamma\Delta$ του Σχήματος 4.6.1. Επειδή η επιφάνεια ολοκλήρωσης είναι η επιφάνεια του τριγώνου $AB\Gamma$, ορίζουμε την συνάρτηση $z(x, y)$ ως:

$$x, y \in [a, b], z(x, y) = \begin{cases} 0 & \text{για } y > x \\ g(x, y) & \text{για } y \leq x \end{cases} \quad 4.6.6$$

Είναι εύκολο να δείξουμε ότι ολοκληρώνοντας την συνάρτηση $z(x, y)$ ως $\int_a^b \left[\int_a^x z(x, y) dy \right] dx$

καταλήγουμε στο ολοκλήρωμα της σχέσης 4.6.1

$$\int_a^b \left[\int_a^x z(x, y) dy \right] dx = \int_a^b \left[\int_a^x g(x, y) dy \right] dx = I \quad 4.6.7$$

Κατά τα γνωστά, το ολοκλήρωμα υπολογίζεται με την επιλογή N ζευγών $\{x_i, y_i\}$, σύμφωνα με την συνθήκη 4.6.5, ως:

$$\hat{I} = \frac{(b-a)^2}{N} \cdot \sum_{i=1}^N z(x_i, y_i) = \frac{(b-a)^2}{N} \cdot \sum_{i=1}^N z(x_i, y_i) \quad 4.6.8$$

όπου N' ($N'=N/2$) είναι ο αριθμός των σημείων $\{x_i, y_i\}$ στο εσωτερικό του τριγώνου $AB\Gamma$.

Η διασπορά της εκτίμησης του ολοκληρώματος με την σχέση 4.6.8 δίνεται από την έκφραση:

$$\hat{V}(\hat{I}) = \frac{(b-a)^4}{N} \cdot V(z(x, y)) = \frac{(b-a)^4}{N} \cdot \left[\frac{1}{N} \cdot \sum_{i=1}^{N'} g^2(x_i, y_i) - \frac{1}{N^2} \cdot \left(\sum_{i=1}^{N'} g(x_i, y_i) \right)^2 \right] \quad 4.6.9$$

Η ακρίβεια ολοκλήρωσης, όπως εκφράζεται με την σχέση 4.6.9, είναι μικρότερη από την ακρίβεια που θα επιτυγχάνετο διαλέγοντας N' ($=N/2$) ζεύγη τυχαίων αριθμών στην τριγωνική

επιφάνεια ολοκλήρωσης, $E_{AB\Gamma} = \frac{(b-a)^2}{2}$. Πράγματι, θέτοντας στην 4.6.9, $N'=N/2$

καταλήγουμε ότι:

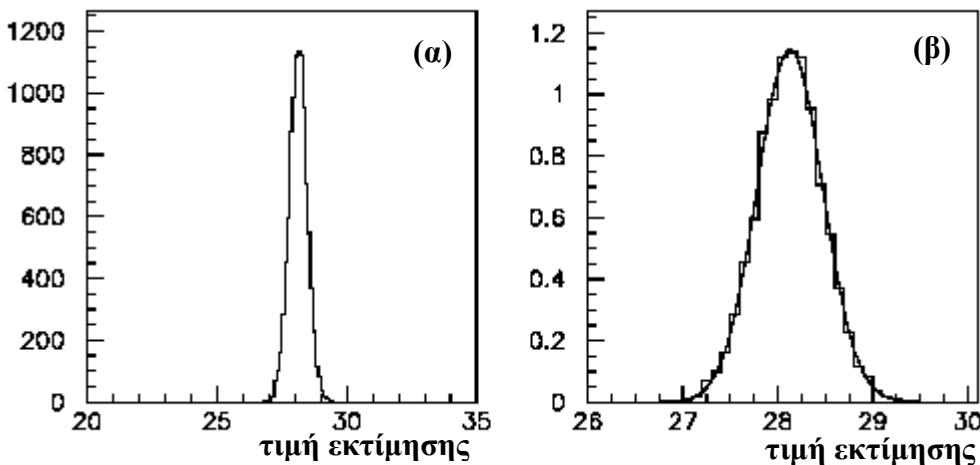
$$\hat{V}(\hat{I}) = \frac{\left(\frac{(b-a)^2}{2} \right)^2}{N'} \cdot \left[\frac{1}{N'} \cdot \sum_{i=1}^{N'} g^2(x_i, y_i) - \frac{1}{2 \cdot N'^2} \cdot \left(\sum_{i=1}^{N'} g(x_i, y_i) \right)^2 \right]$$

$$\hat{V}(\hat{I}) > \frac{\left(\frac{(b-a)^2}{2} \right)^2}{N'} \cdot \left[\frac{1}{N'} \cdot \sum_{i=1}^{N'} g^2(x_i, y_i) - \frac{1}{N'^2} \cdot \left(\sum_{i=1}^{N'} g(x_i, y_i) \right)^2 \right]$$

Είναι προφανές ότι τα μισά από τα ζεύγη τυχαίων αριθμών δεν προσφέρουν στην ακρίβεια ολοκλήρωσης καθιστώντας της μέθοδο απόρριψης μη αποδοτική.

Παράδειγμα 4.6.2:

Στο Σχήμα 4.6.3α παρουσιάζονται, υπό μορφή ιστογράμματος, τα αποτελέσματα εκτιμήσεων του ολοκληρώματος 4.6.4 βάσει της σχέσης 4.6.8. Για κάθε εκτίμηση έχουν επιλεγεί $N=10000$ τυχαίοι αριθμοί, σύμφωνα με τη συνθήκη 4.6.5.



Σχήμα 4.6.3: (α) Η κατανομή των εκτιμήσεων και (β) παράσταση σε ιστόγραμμα της συνάρτησης πυκνότητας πιθανότητας σε σύγκριση με την αναμενόμενη κανονική συνάρτηση

Οι εκτιμήσεις κατανέμονται γύρω την πραγματική τιμή του ολοκληρώματος, 28.15. Στο σχήμα 4.6.3.β παρουσιάζεται ως ιστόγραμμα η συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας⁹ των εκτιμήσεων του ολοκληρώματος σε σύγκριση με την γραφική παράσταση κανονικής συνάρτησης με μέση τιμή την πραγματική του ολοκληρώματος και $\sigma (=0.3454)$ ίσο με την τετραγωνική ρίζα της διασποράς που εκφράζει η σχέση 4.6.9, για $N=10000$

4.6.3 Μέθοδος μεταφοράς

Επιλέγουμε N ζεύγη τυχαίων αριθμών, $\{u_i, v_i\}$, στην εσωτερική επιφάνεια του ΑΒΓΔ του Σχήματος 4.6.1 ως:

$$\begin{aligned} u_i &= R[a, b] \\ v_i &= R[a, b] \end{aligned} \quad 4.6.10$$

Στη συνέχεια ορίζουμε τους τυχαίους αριθμούς x_i και y_i ως το μέγιστο και ελάχιστο των u_i και v_i αντίστοιχα:

$$\begin{aligned} x_i &= \max(u_i, v_i) \\ y_i &= \min(u_i, v_i) \end{aligned} \quad 4.6.11$$

Με τον μετασχηματισμό 4.6.11 διατηρούμε την ομοιομορφία επιλογής των σημείων $\{u_i, v_i\}$ εφόσον ανήκουν στην περιοχή ολοκλήρωσης (ΑΒΓ) . Στην περίπτωση όπου το ζεύγος $\{u_i, v_i\}$ ανήκει στην περιοχή ΑΓΔ μεταφέρεται στη περιοχή ολοκλήρωσης διατηρώντας την ομοιομορφία στη κατανομή των σημείων.

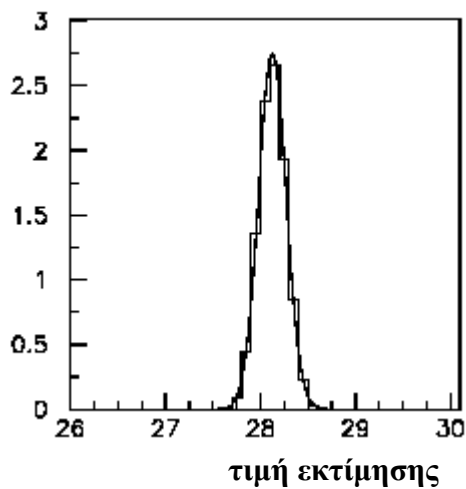
Με την χρήση των N επιλεγμένων ζευγών $\{x_i, y_i\}$, η τιμή του ολοκληρώματος 4.6.1 εκτιμάται με την ακόλουθη σχέση:

$$\hat{I} = \frac{(b-a)^2}{2} \cdot \frac{1}{N} \cdot \sum_{i=1}^N g(x_i, y_i) \quad 4.6.12$$

Είναι προφανές ότι με την μέθοδο αυτή, κάθε επιλεγμένο ζεύγος αριθμών συμμετέχει στον υπολογισμό και συνεισφέρει στην ακρίβεια της ολοκλήρωσης.

Ερώτηση: Στο Σχήμα 4.6.4 παρίσταται με την μορφή ιστογράμματος η συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας των εκτιμήσεων του ολοκληρώματος 6.4.4 με την μέθοδο μεταφοράς, για $N=1000$ ζεύγη τυχαίων αριθμών. Στο ίδιο Σχήμα φαίνεται η γραφική παράσταση κανονικής συνάρτησης με μέση τιμή ίση με την πραγματική τιμή του ολοκληρώματος και ≈ 0.145 , λιγότερο από το μισό της τιμής που βρέθηκε στο Παράδειγμα 4.6.2. Δικαιολογήσετε τα αποτελέσματα.

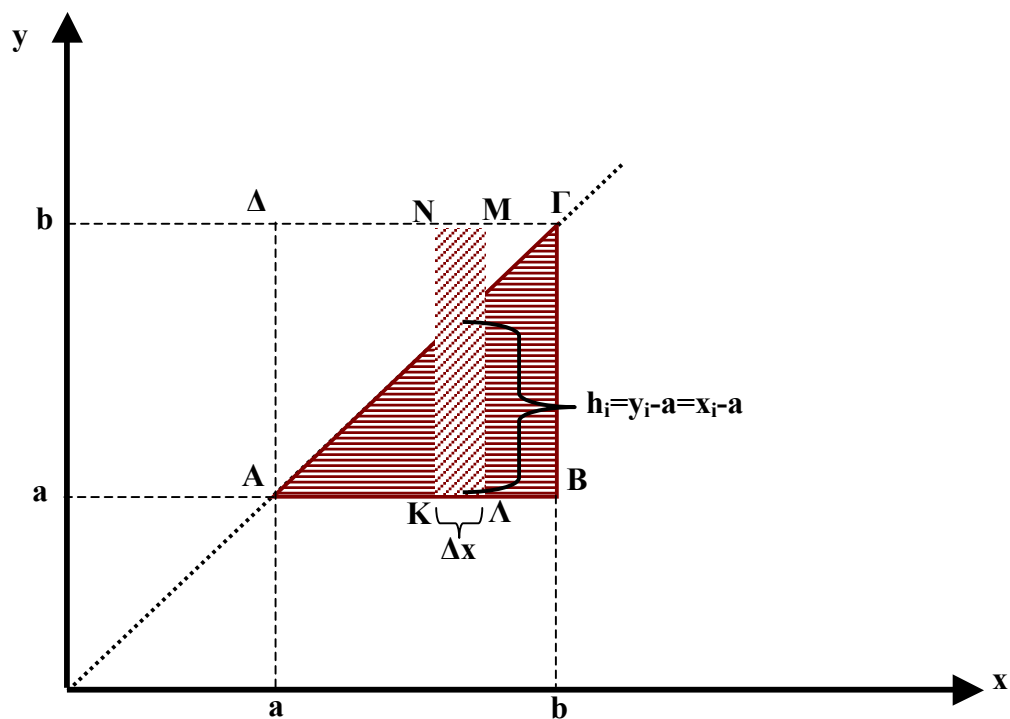
⁹ Το ιστόγραμμα του Σχήματος 4.6.3β, που παρίστα την συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας, πρέκυψε από το ιστόγραμμα του Σχήματος 4.6.3^α διαιρώντας το ύψος κάθε ιστού με τον συνολικό αριθμό των εκτιμήσεων (μετατρέποντας το πλήθος εκτιμήσεων σε κάθε ιστό σε πιθανότητα η εκτίμηση να έχει τιμή εντός των ορίων του ιστού) και με το εύρος των ορίων του ιστού (μετατρέποντας την πιθανότητα σε πυκνότητα πιθανότητας).



Σχήμα 4.6.4: Πυκνότητα πιθανότητας των εκτιμήσεων του ολοκληρώματος 6.4.4 με την μέθοδο μεταφοράς.

4.6.4 Μέθοδος βεβαρημένου αθροίσματος

Επανερχόμενος στην μέθοδο που συζητήσαμε στην παράγραφο 4.6.1, θα σας υπενθυμίζω ότι σε κάθε στοιχειώδη περιοχή με βάση $\Delta x \rightarrow 0$ και ύψος $h_i = x_i - a$, που βρίσκεται σε τεταγμένη x_i (βλέπε Σχήμα 4.6.5), συμπίεζονται όλα τα σημεία που επιλέγηκαν αρχικά στο ορθογώνιο ΚΛΜΝ



Σχήμα 4.6.5

Αρχικά τα σημεία επιλέγονται ομοιόμορφα στην περιοχή ABΓΔ με συνέπεια η πυκνότητα κατανομής των n επιλεγμένων σημείων στη περιοχή KΛMN να είναι: $\rho = \frac{n}{\Delta x \cdot (b-a)}$. Μετά

την «συμπίεση» των σημείων στην περιοχή της ολοκλήρωσης, επιφάνειας $\Delta x \cdot (x_i - a)$, η

πυκνότητα σημείων θα είναι: $\rho' = \frac{n}{\Delta x \cdot (x_i - a)}$

Προκειμένου να εξασφαλίσουμε την ίδια πυκνότητα σημείων για κάθε περιοχή ολοκλήρωσης, θα «βαρύνουμε» την συμμετοχή κάθε επιλεγέντος ζεύγους, $\{x_i, y_i\}$, στο άθροισμα 4.6.3 με τον λόγο των πυκνοτήτων, ως:

$$w_i = \frac{\frac{n}{\Delta x \cdot (b-a)}}{\frac{n}{\Delta x \cdot (x_i - a)}} = \frac{(x_i - a)}{(b-a)} \quad 4.6.13$$

Η τιμή του ολοκληρώματος εκτιμάται από την ακόλουθη σχέση:

$$I = \frac{(b-a)^2}{N} \cdot \sum_{i=1}^N g(x_i, y_i) \cdot \frac{x_i - a}{b-a} = \frac{(b-a)}{N} \cdot \sum_{i=1}^N g(x_i, y_i) \cdot (x_i - a) \quad 4.6.14$$

Στην παράγραφο 4.7.3 θα συζητήσουμε την αυστηρή απόδειξη ισχύος αυτής της μεθόδου, η οποία καταλήγει σε ακριβέστερες εκτιμήσεις από εκείνες της μεθόδου μεταφοράς όταν η διασπορά της ποσότητας $(x-a)g(x,y)$ είναι μικρότερη της διασποράς της ποσότητας $g(x,y)$, όταν x και y είναι τυχαίες μεταβλητές ισοπίθανα κατανεμημένες στη περιοχή ολοκλήρωσης.

4.7 Τεχνικές μεγιστοποίησης της ακρίβειας της ολοκλήρωσης Monte Carlo

Όπως επανειλημμένα αναφέρθηκε, η ακρίβεια της Monte Carlo ολοκλήρωσης εξαρτάται από το πλήθος των τυχαίων τιμών που θα επιλεγούν για τις ανεξάρτητες μεταβλητές και θα χρησιμοποιηθούν στο άθροισμα της σχέσης 4.4.2. Επειδή η εκτίμηση της τιμής του ολοκληρώματος συμπεριφέρεται ως τυχαία μεταβλητή, με διασπορά άμεσα εξαρτώμενη από την διασπορά της υπό ολοκλήρωση συνάρτησης (όπως εκφράζεται από την σχέση 4.4.3), αναζητούμε τεχνικές ελαχιστοποίησης της διασποράς για πεπερασμένο πλήθος όρων (N) του αθροίσματος 4.4.2.

Στην συνέχεια αυτής της υποενότητας θα συζητήσουμε τεχνικές που συνήθως χρησιμοποιούνται για την μείωση της διασποράς της εκτίμησης.

4.7.1 Μέθοδος διάστρωσης (stratification)

Σύμφωνα με την μέθοδο αυτή χωρίζουμε την περιοχή ολοκλήρωσης σε υπο-περιοχές, ως:

$$I = \int_a^b y(x) dx = \int_a^c y(x) dx + \int_c^b y(x) dx \quad 4.7.1$$

και η τιμή του ολοκληρώματος εκτιμάται ως:

$$\hat{I} = \hat{I}_1 + \hat{I}_2 \quad 4.7.2\alpha$$

όπου $\hat{I}_1$ και $\hat{I}_2$ είναι οι εκτιμήσεις των τιμών των ολοκληρωμάτων

$$\hat{I}_1 = \int_a^c y(x) dx \text{ και } \hat{I}_2 = \int_c^b y(x) dx \text{ αντίστοιχα.}$$

Η διασπορά της εκτίμησης 4.7.2α εξαρτάται από την διασπορά των εκτιμήσεων $\hat{I}_1$ και $\hat{I}_2$ ως:

$$V(\hat{I}) = V(\hat{I}_1) + V(\hat{I}_2) \quad 4.7.2\beta$$

Σωστή επιλογή των ορίων ολοκλήρωσης και του αριθμού των τυχαίων αριθμών σε κάθε περιοχή, μπορεί να οδηγήσει σε δραματική μείωση της διασποράς.

Ερώτηση: Δείξτε ότι εάν επιλεγεί $c = \frac{a+b}{2}$ και το πλήθος των τυχαίων αριθμών που

επιλέγονται στις περιοχές $[a, c]$ και $[c, b]$ είναι $N_1 = N_2 = \frac{N}{2}$ τότε η διασπορά της εκτίμησης

4.7.2 είναι μικρότερη από την διασπορά της εκτίμησης 4.4.2 που επιτυγχάνεται με την επιλογή N τυχαίων αριθμών στην περιοχή $[a, b]$.

Υπόδειξη: Όταν η τιμή του ολοκληρώματος $I = \int_a^b y(x) dx$ εκτιμάται με Monte Carlo

ολοκλήρωση στην περιοχή $[a, b]$, η διασπορά της εκτίμησης θα είναι:

$$V(\hat{I}) = \frac{(b-a)^2}{N} \cdot V(y(x)) = \frac{(b-a)^2}{N} \cdot \left[\frac{1}{b-a} \cdot \int_a^b y^2(x) \cdot dx - \left(\frac{1}{b-a} \cdot \int_a^b y(x) \cdot dx \right)^2 \right] \quad 4.7.3$$

Στην περίπτωση της εκτίμησης της τιμής του ολοκληρώματος σύμφωνα με την σχέση 4.7.2, η διασπορά θα είναι:

$$\begin{aligned} V(\hat{I}_1) + V(\hat{I}_2) &= \frac{\left(\frac{b-a}{2}\right)^2}{N/2} \cdot \left[\frac{2}{b-a} \cdot \int_a^c y^2(x) \cdot dx - \left(\frac{2}{b-a} \cdot \int_a^c y(x) \cdot dx \right)^2 + \frac{2}{b-a} \cdot \int_c^b y^2(x) \cdot dx - \left(\frac{2}{b-a} \cdot \int_c^b y(x) \cdot dx \right)^2 \right] \\ &= \frac{\left(\frac{b-a}{2}\right)^2}{N/2} \cdot \left[\frac{2}{b-a} \cdot \int_a^b y^2(x) \cdot dx - \frac{4}{(b-a)^2} \cdot \left[\left(\int_a^c y(x) \cdot dx \right)^2 + \left(\int_c^b y(x) \cdot dx \right)^2 \right] \right] \end{aligned} \quad 4.7.4$$

Η διαφορά των εκφράσεων 4.7.3 και 4.74 καταλήγει σε:

$$V(\hat{I}) - \left(V(\hat{I}_1) + V(\hat{I}_2) \right) = \frac{1}{N} \cdot \left[\int_a^c y(x) \cdot dx - \int_c^b y(x) \cdot dx \right]^2 \geq 0$$

4.7.3 Μέθοδος ιεραρχημένης δειγματοληψίας

Έστω ότι υπάρχει η θετική συνάρτηση $g(x)$ ($g(x) > 0 \forall x \in [a, b]$) και έστω επίσης ότι

$R = \int_a^b g(x) dx$. Το ολοκλήρωμα $I = \int_a^b y(x) dx$, μπορεί να γραφεί ως:

$$I = \int_a^b \frac{y(x)}{\left[\frac{1}{R} \cdot g(x) \right]} \cdot \left[\frac{1}{R} \cdot g(x) \right] \cdot dx \sqrt{b^2 - 4ac} \quad 4.7.5$$

Παρατηρήστε ότι η τιμή του ολοκληρώματος ισούται με την μέση τιμή της συνάρτησης

$Q(x) = \frac{y(x)}{\left[\frac{1}{R} \cdot g(x) \right]}$ όταν η συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας της μεταβλητής x είναι η

συνάρτηση $P(x)$ η οποία ορίζεται ως:

$$P(x) = \begin{cases} \frac{g(x)}{R}, & x \in [a, b] \\ 0, & x \notin [a, b] \end{cases} \quad 4.7.6$$

Σύμφωνα με τον νόμο των μεγάλων αριθμών, η τιμή του ολοκληρώματος 4.7.5 ισούται με :

$$I = \int_a^b \frac{y(x)}{\left[\frac{1}{R} \cdot g(x) \right]} \cdot P(x) \cdot dx = \frac{y(x)}{\left[\frac{1}{R} \cdot g(x) \right]} = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{R}{N} \sum_{i=1}^N \frac{y(x_i)}{g(x_i)} \quad 4.7.7$$

όπου οι τιμές x_i ($i=1,2,3,\dots,N$) της μεταβλητής x έχουν επιλεγεί σύμφωνα με τη συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας $P(x)$.

Επιπλέον, η μεταβλητή:

$$\hat{I} = \frac{R}{N} \sum_{i=1}^N \frac{y(x_i)}{g(x_i)} \quad 4.7.8$$

η οποία ορίζεται με μεγάλο αλλά πεπερασμένο πλήθος τιμών της μεταβλητής x , αποτελεί εκτίμηση της τιμής του ολοκληρώματος. Η ακρίβεια της εκτίμησης $V(\hat{I})$, (η διασπορά της τυχαίας μεταβλητής που ορίσθηκε με την σχέση 4.7.8) εξαρτάται από την διασπορά της μεταβλητής $y(x)/g(x)$, $V\left(\frac{y(x)}{g(x)}\right)$, ως:

$$V(\hat{I}) = \frac{R^2}{N} V\left(\frac{y(x)}{g(x)}\right) \quad 4.7.9$$

Απλή σύγκριση με την σχέση 4.4.3 αρκεί για να δείξει ότι εάν στην περιοχή ολοκλήρωσης

ισχύει ότι $V\left(\frac{y(x)}{g(x)}\right) < V(y(x))$ τότε η μέθοδος ιεραρχημένης δειγματοληψίας καταλήγει σε

ακριβέστερη εκτίμηση από ότι η μέθοδος απλής Monte Carlo ολοκλήρωσης, για τον ίδιο αριθμό όρων, N .

Πρακτικά ζητούμε να βρούμε συναρτήσεις $g(x)$ οι οποίες «ομοιάζουν» με την προς ολοκλήρωση συνάρτηση, $y(x)$, ώστε ο λόγος $y(x)/g(x)$ να έχει μικρή διασπορά στο διάστημα $[a,b]$.

Παράδειγμα 4.7.1

Έστω το ολοκλήρωμα:

$$I = \int_0^{\pi} \sin x \cdot dx \quad 4.7.10$$

το οποίο προφανώς ισούται με $I = \int_0^{\pi} \sin x \cdot dx = 2$.

Η τιμή του ολοκληρώματος μπορεί να εκτιμηθεί με απλή ολοκλήρωση Monte Carlo, επιλέγοντας τυχαίους αριθμούς, r , στο διάστημα $[0,\pi]$ ως:

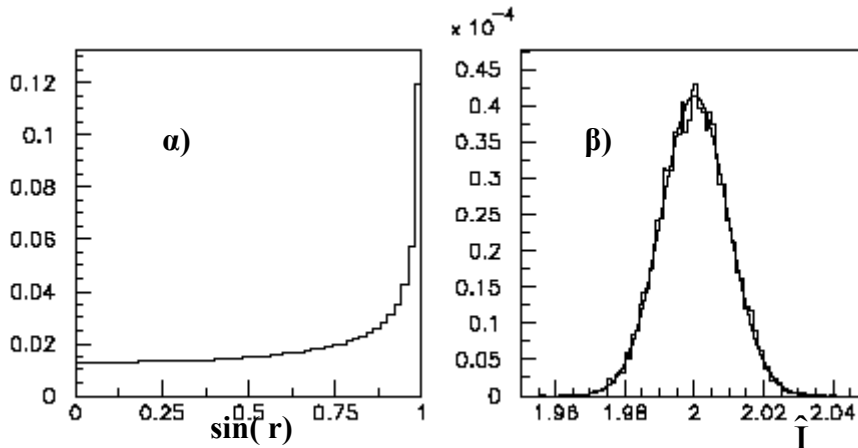
$$\hat{I} = \frac{\pi}{N} \cdot \sum_{i=1}^N \sin(r_i) \quad 4.7.11$$

όπου η ακρίβεια της εκτίμησης εκφράζεται από την διασπορά της τυχαίας μεταβλητής $\hat{I}$, ως:

$$V(\hat{I}) = \frac{\pi^2}{N} \cdot V(\sin(r)) \quad 4.7.12$$

Στο σχήμα 4.7.1α παρίσταται υπό μορφή ιστογράμματος η συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας της συνάρτησης $\sin(r)$ όταν το r είναι τυχαίος αριθμός στο διάστημα $[0,\pi]$. Εύκολα υπολογίζεται (π.χ. από το Σχήμα 4.7.1α) ότι $V(\sin(r)) \approx 0.097$ και συνεπώς αναμένεται η ακρίβεια εκτίμησης του ολοκληρώματος να είναι: $V(\hat{I}) \approx 9.58 \cdot 10^{-5}$, για $N=10000$.

Ερώτηση: Δείξτε ότι $V(\sin(r)) = \int_0^{\pi} \frac{1}{\pi} \cdot \sin^2(r) \cdot dr - \left[\int_0^{\pi} \frac{1}{\pi} \cdot \sin(r) \cdot dr \right]^2 \approx 0.097$



Σχήμα 4.7.1: α) Γραφική παράσταση της πυκνότητας πιθανότητας της συνάρτησης $\sin(r)$ όταν το r είναι τυχαίος αριθμός στο διάστημα $[0,\pi]$. β) Το ιστόγραμμα παριστά γραφικά την πυκνότητα πιθανότητας των εκτιμήσεων του ολοκληρώματος. Η συνεχής γραμμή παριστά την κανονική συνάρτηση με παραμέτρους που περιγράφονται στο κείμενο.

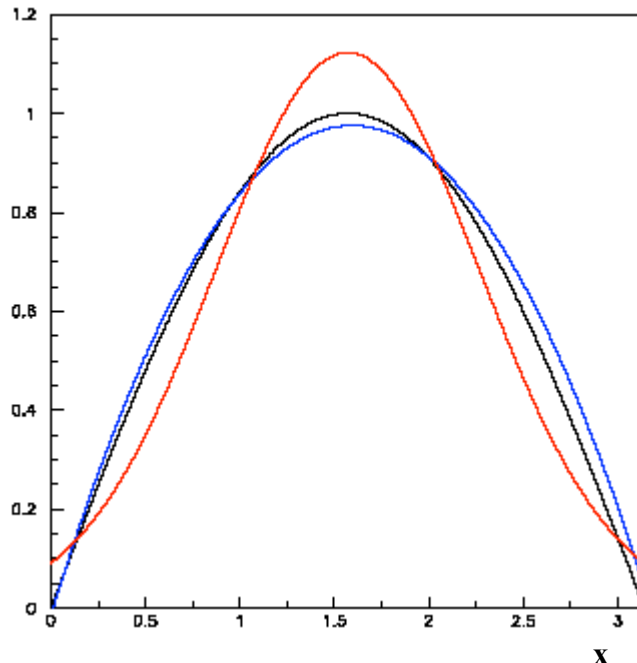
Στο Σχήμα 4.7.1β παρίστανται υπό μορφή ιστογράμματος η πυκνότητα πιθανότητα εκτιμήσεων της τιμής του ολοκληρώματος 4.7.10. Κάθε εκτίμηση προέκυψε σύμφωνα με την σχέση 4.7.11 για $N=10000$. Στο ίδιο Σχήμα φαίνεται προς σύγκριση η γραφική παράσταση κανονικής συνάρτησης με μέση τιμή ίση με την πραγματική τιμή του ολοκληρώματος και $\sigma=0.31(\approx \sqrt{V(\hat{I})})$.

Στη συνέχεια θα εκτιμήσουμε την τιμή του ολοκληρώματος χρησιμοποιώντας την μέθοδο της ιεραρχικής δειγματοληψίας, σχέση 4.7.8, για $N=10000$ τιμές της μεταβλητής x . Οι τιμές της μεταβλητής x θα επιλεγούν σύμφωνα με τις ακόλουθες συναρτήσεις πυκνότητας πιθανότητας:

$$P_1(x) = \frac{1}{R_1} \cdot g_1(x) = \frac{1}{1.9215} \cdot \left[1.123 \cdot e^{\frac{(x-1.57)^2}{0.98}} \right]_{g_1(x)} \quad 4.7.13$$

$$P_2(x) = \frac{1}{R_2} \cdot g_2(x) = \frac{1}{2.056} \cdot \left[-0.015 + 1.243 \cdot x - 0.39 \cdot x^2 \right]_{g_2(x)}$$

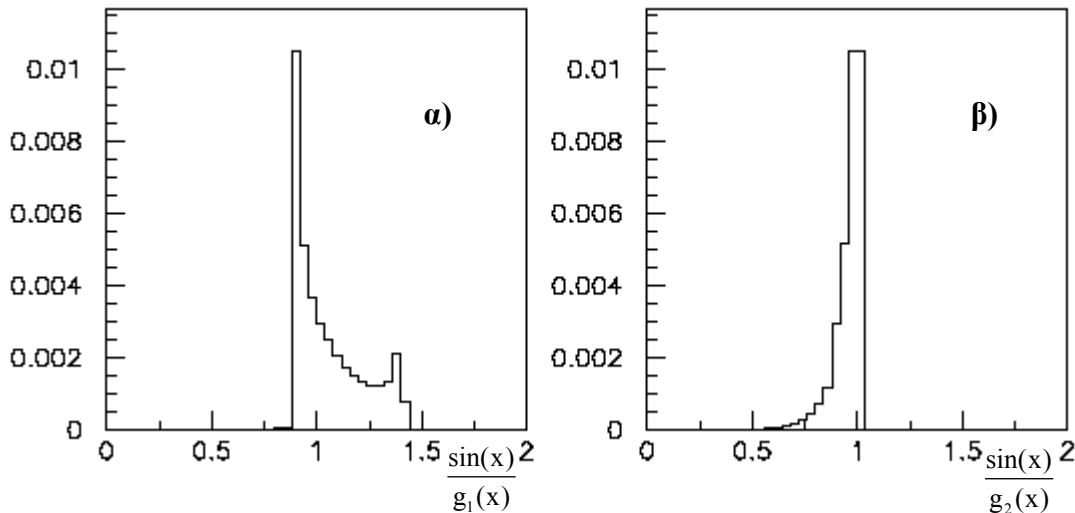
$$\text{όπου } \int_0^\pi P_1(x) \cdot dx = \int_0^\pi P_2(x) \cdot dx = 1$$



Σχήμα 4.7.2: Γραφικές παραστάσεις των συναρτήσεων: $\sin(x)$ (μαύρο χρώμα),

$g_1(x) = 1.123 \cdot e^{\frac{(x-1.57)^2}{0.98}}$ (κόκκινο χρώμα) και $g_2(x) = -0.015 + 1.243 \cdot x - 0.39 \cdot x^2$ (μπλε χρώμα)

Στο Σχήμα 4.7.2 παρίστανται γραφικά οι συναρτήσεις: $\sin(x)$, $g_1(x)$ και $g_2(x)$, ενώ στο Σχήμα 4.7.3 παρίστανται οι πυκνότητες πιθανότητας των συναρτήσεων: $\frac{\sin(x)}{g_1(x)}$ και $\frac{\sin(x)}{g_2(x)}$. Είναι προφανές ότι η συνάρτηση $g_1(x)$ προσομοιάζει την υπό ολοκλήρωση συνάρτηση $\sin(x)$ πολύ καλύτερα από ότι η συνάρτηση $g_2(x)$.



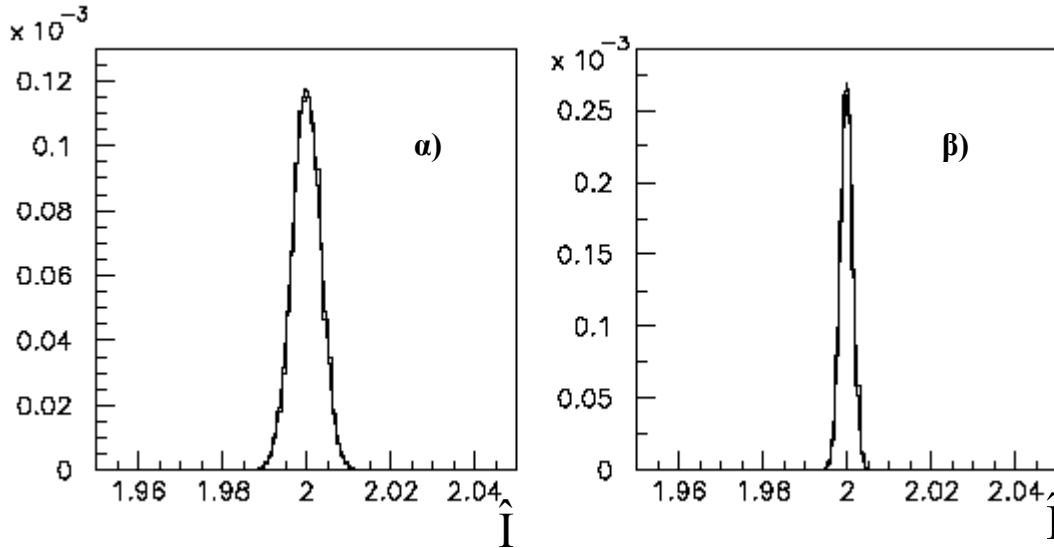
Σχήμα 4.7.3: Παράσταση σε ιστόγραμμα της πυκνότητας πιθανότητας των τυχαίων μεταβλητών: α) $\frac{\sin(x)}{g_1(x)}$ και β) $\frac{\sin(x)}{g_2(x)}$

Συνεπώς, όπως παραστατικά φαίνεται στο Σχήμα 4.7.3, η τυχαία μεταβλητή που ορίζεται από τον λόγο $\frac{\sin(x)}{g_2(x)}$ είναι λιγότερο «διασπαρμένη» από ότι ο λόγος $\frac{\sin(x)}{g_1(x)}$. Πράγματι, η διασπορά $V(\frac{\sin(x)}{g_2(x)}) \approx 0.53 \cdot 10^{-2}$ είναι σημαντικά μικρότερη από την διασπορά $V(\frac{\sin(x)}{g_1(x)}) \approx 0.29 \cdot 10^{-1}$.

Ερώτηση: Υπολογίσετε την ακρίβεια εκτίμησης του ολοκληρώματος 4.7.10 με την μέθοδο της ιεραρχημένης δειγματοληψίας, όταν χρησιμοποιείται η συνάρτηση $g_1(x)$ και όταν χρησιμοποιείται η συνάρτηση $g_2(x)$.

Στο Σχήμα 4.7.4 παρίστανται τα αποτελέσματα εκτιμήσεων του ολοκληρώματος 4.7.10, για $N=10000$ τυχαίους αριθμούς επιλεγμένους σύμφωνα με τις συναρτήσεις πυκνότητας πιθανότητας α) $P_1(x)$ ή β) $P_2(x)$, εφαρμόζοντας την σχέση 4.7.8.

Οι συνεχείς γραμμές παριστούν κανονικές συναρτήσεις με μέση τιμή την πραγματική τιμή του ολοκληρώματος και $\sigma_1=3.3 \cdot 10^{-3}$, $\sigma_2=1.5 \cdot 10^{-3}$, σε πλήρη συμφωνία με τις προβλέψεις της σχέσης 4.7.9.



Σχήμα 4.7.4: Γραφική παράσταση των αποτελεσμάτων των εκτιμήσεων του ολοκληρώματος 4.7.10 με την μέθοδο της ιεραρχημένης δειγματοληψίας. Τα ιστογράμματα παριστούν την πυκνότητα πιθανότητας των εκτιμήσεων ενώ οι συνεχείς γραμμές παριστούν, γραφικά, κανονικές συναρτήσεις με μέσες τιμές ίσες με την πραγματική τιμή του ολοκληρώματος και διασπορά σύμφωνα με τις προβλέψεις της σχέσης 4.7.9. Οι τιμές για την μεταβλητή x επελέγησαν σύμφωνα με τις συναρτήσεις πυκνότητας πιθανότητας: α) $P_1(x)$ και β) $P_2(x)$ που περιγράφονται με την σχέση 4.7.13

Στην προηγούμενη ανάλυση υποθέσαμε ότι μπορούμε εύκολα να παράγουμε τιμές για την μεταβλητή x σύμφωνα με την συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας $P(x)$. Στην πράξη αυτή η προϋπόθεση δεν είναι εύκολο να ικανοποιηθεί. Στο παράδειγμα η επιλογή τιμών της μεταβλητής x , σύμφωνα με τις συναρτήσεις πυκνότητας πιθανότητας $P_1(x)$ και $P_2(x)$, έγινε με την μέθοδο της απόρριψης (βλέπε στην παράγραφο 4.8.;;;;), η οποία αφ' εαυτής δαπανά δοκιμές προκειμένου να επιλέξει τις κατάλληλες τιμές.

Πρακτικά η μέθοδος είναι εύκολα εφαρμόσιμη όταν η συνάρτηση $g(x)$ είναι εύκολα

ολοκληρώσιμη και η συνάρτηση $G(x) = \int_a^x \frac{1}{R} \cdot g(y) \cdot dx = \int_a^x P(y) \cdot dx$ είναι εύκολα

αντιστρέψιμη. Στην περίπτωση αυτή, η σχέση 4.7.7 γράφεται ως:

$$I = \int_a^b \frac{y(x)}{\left[\frac{1}{R} \cdot g(x) \right]} \cdot P(x) \cdot dx = \int_{G(a)}^{G(b)} \frac{y(x)}{\left[\frac{1}{R} \cdot g(x) \right]} \cdot dG(x) \quad 4.7.14$$

όπου $G(a)=0$ και $G(b)=1$. Επιλέγοντας τυχαίες τιμές για την μεταβλητή $G(x)$ στο διάστημα $[0,1]$ και αντιστρέφοντας για να υπολογίσουμε την αντίστοιχη τιμή του x ($x = G^{-1}(x)$), υπολογίζουμε το ολοκλήρωμα με την σχέση 4.7.8.

Θα πρέπει επίσης να σημειωθεί ότι μερικές φορές, όταν η τιμή της $g(x)$ είναι πολύ μικρή και η τιμή του λόγου $y(x)/g(x)$ πολύ μεγάλη, η μέθοδος αυτή είναι υπολογιστικά ασταθής (π.χ. στη εφαρμογή της ως λογισμικό υπολογιστικού συστήματος).

Για τους προαναφερθέντες λόγους, η μέθοδος χρησιμοποιείται σε ειδικές περιπτώσεις και σχεδόν αποκλειστικά¹⁰ σε ολοκληρώσεις μίας μεταβλητής.

Εναλλακτικά, μπορούμε να προσθαφαιρέσουμε το ολοκλήρωμα κάποιας συνάρτησης $q(x)$ ώστε:

$$I = \int_a^b y(x) dx = \int_a^b [y(x) - q(x)] dx + \int_a^b q(x) dx \quad 4.7.15$$

εάν βεβαίως το ολοκλήρωμα $\int_a^b q(x) dx$ είναι εύκολα υπολογίσιμο και υπό την προϋπόθεση ότι

η διασπορά $V([y(x) - q(x)])$ είναι μικρότερη της διασποράς $V(y(x))$, όταν η μεταβλητή x κατανέμεται ισοπίθانا στο $[a,b]$.

Με τον τρόπο αυτό αποφεύγονται παθολογικές περιπτώσεις (π.χ. περιπτώσεις όπου για κάποιες τιμές της μεταβλητής x , η τιμή της συνάρτησης $g(x)$ είναι πολύ μικρή και η τιμή του λόγου $y(x)/g(x)$ πολύ μεγάλη) και επί πλέον δεν απαιτείται η χρήση γεννητόρων τυχαίων αριθμών σύμφωνα με (συνήθως) πολύπλοκες συναρτήσεις πυκνότητας πιθανότητας ($P(x)$).

4.7.4 Μέθοδος συνελιγμένων μεταβλητών

Υπενθυμίζεται ότι η διασπορά του αθροίσματος δύο συναρτήσεων της τυχαίας μεταβλητής x εκφράζεται από την σχέση:

$$V(y_1(x) + y_2(x)) = V(y_1(x)) + V(y_2(x)) + 2 \cdot \text{cov}(y_1(x), y_2(x)) \quad 4.7.16$$

Έστω οι συναρτήσεις $y_1(x)$ και $y_2(x)$ τέτοιες ώστε:

$$I = \int_a^b y(x) \cdot dx = \int_a^b [y_1(x) + y_2(x)] \cdot dx \quad 4.7.17$$

Εάν οι συναρτήσεις $y_1(x)$ και $y_2(x)$ έχουν επιλεγεί ώστε να είναι αρνητικά συνελιγμένες ($\text{cov}(y_1(x), y_2(x)) < 0$) είναι δυνατόν $V(y(x)) < V(y_1(x) + y_2(x))$. Ωστε η εκτίμηση της τιμής του δεξιού μέλους της ισότητας 4.7.17, με Monte Carlo ολοκλήρωση, θα καταλήγει ταχύτερα σε ακριβέστερες τιμές.

Επί παραδείγματι εάν $y(x)$ είναι μία μονοτονικά αύξουσα συνάρτηση στο διάστημα $[a,b]$ και $y_1(x) = 0.5 \cdot y(x)$, $y_2(x) = 0.5 \cdot y(b - (x - a))$ προφανώς ισχύει ότι η σχέση 4.7.17, αλλά οι συναρτήσεις $y_1(x)$ και $y_2(x)$ είναι εκ κατασκευής αρνητικά συνελιγμένες (όταν η τιμή της μίας αυξάνει της δεύτερης μειώνεται). Στην περίπτωση αυτή, θα εκτιμήσουμε την τιμή του ολοκληρώματος ως:

¹⁰ Εν τούτοις, η μέθοδος του βεβαρημένου αθροίσματος που περιγράφηκε στην υποενότητα 4.6.4 αποτελεί εφαρμογή αυτής της μεθόδου.

$$\hat{I} = \frac{b-a}{N} \cdot \sum_{i=1}^N [y_1(x_i) + y_2(x_i)] \quad 4.7.18$$

όπου οι τιμές x_i της μεταβλητής x , θα επιλέγονται τυχαία στο διάστημα $[a,b]$. Η ακρίβεια της εκτίμησης θα εξαρτάται από την διασπορά $V(y_1(x) + y_2(x))$ η οποία λόγω της αρνητικής συνέλιξης αναμένεται να είναι μικρότερη από την διασπορά της υπό ολοκλήρωση συνάρτησης, $V(y(x))$.

Παράδειγμα 4.7.2

Ας εφαρμόσουμε την μέθοδο των συνελιγμένων μεταβλητών στην εκτίμηση του ολοκληρώματος της σχέσης 4.7.19:

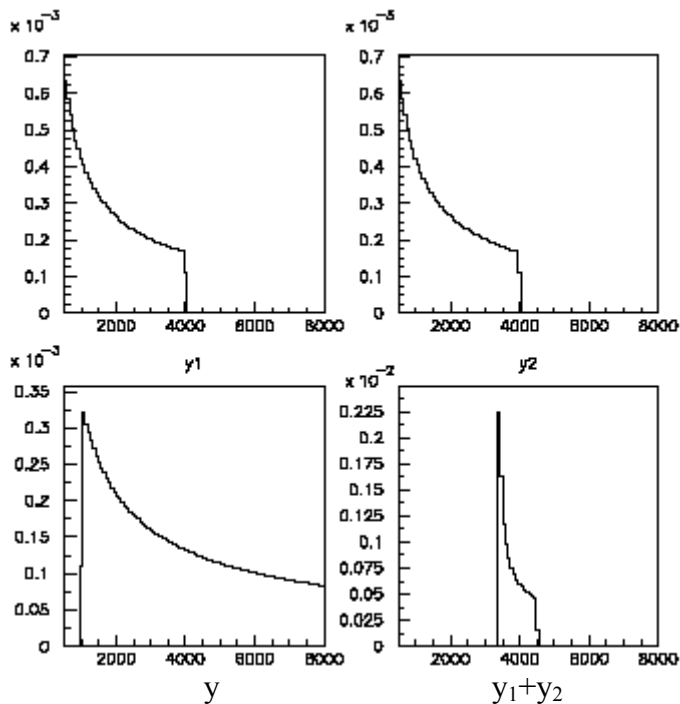
$$I = \int_{10}^{20} x^3 \cdot dx = \int_{10}^{20} \left[\frac{1}{4} \cdot x^3 + \frac{1}{2} \cdot (30-x)^3 \right] \cdot dx = 3750 \quad 4.7.19$$

$y_1(x)$ $y_2(x)$

Η εκτίμηση με την απλή μέθοδο Monte Carlo ολοκλήρωσης εκφράζεται από την σχέση:

$$\hat{I}_y = \frac{10}{N} \cdot \sum_{i=1}^N y(x_i) \quad \text{ενώ η εκτίμηση με την μέθοδο των συνελιγμένων μεταβλητών εκφράζεται}$$

$$\text{από την σχέση: } \hat{I}_{y_1+y_2} = \frac{10}{N} \cdot \sum_{i=1}^N [y_1(x_i) + y_2(x_i)].$$



Σχήμα 4.7.5: Οι πυκνότητες πιθανότητας των μεταβλητών $y_1(x)$, $y_2(x)$, $y(x)$ και $y_1(x) + y_2(x)$.

Η ακρίβεια των εκτιμήσεων εκφράζεται από την διασπορά των μεταβλητών $\hat{I}_y$ και $\hat{I}_{y_1+y_2}$, ως:

$$V(\hat{I}_y) = \frac{100}{N} \cdot \sum_{i=1}^N V(y(x_i)) \text{ και } V(\hat{I}_{y_1+y_2}) = \frac{100}{N} \cdot \sum_{i=1}^N V(y_1(x_i) + y_2(x_i)) \text{ αντίστοιχα.}$$

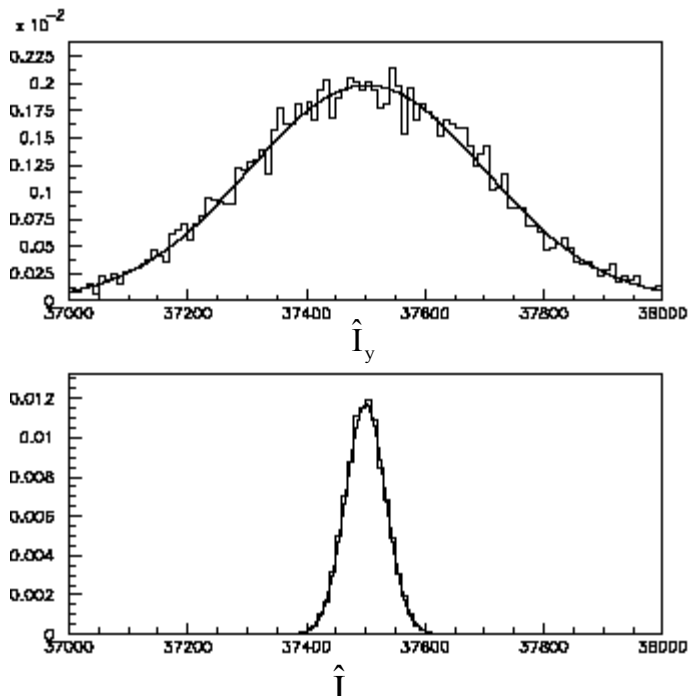
Ερώτηση: Δείξτε ότι, όταν η συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας της μεταβλητής x ($x \in [10, 20]$) είναι $P(x) = \frac{1}{10}$ τότε $V(y_1(x)) = V(y_1(x)); 1020099.2$, $V(y(x)); 4080396.8$, $\text{cov}(y_1(x), y_2(x)); -963839.3$ και ότι $V(y_1(x) + y_2(x)) = 112499.8$

Υπόδειξη:

$$\text{cov}(y_1(x), y_2(x)) = \langle y_1(x) \cdot y_2(x) \rangle - \langle y_1(x) \rangle \cdot \langle y_2(x) \rangle$$

$$= \int_{10}^{20} y_1(x) \cdot y_2(x) \cdot \frac{1}{10} \cdot dx - \left(\int_{10}^{20} y_1(x) \frac{1}{10} \cdot dx \right) \cdot \left(\int_{10}^{20} y_2(x) \frac{1}{10} \cdot dx \right)$$

Στο Σχήμα 4.7.5 παρίστανται υπό μορφή ιστογράμματος οι πυκνότητες πιθανότητας των μεταβλητών $y_1(x)$, $y_2(x)$, $y(x)$ και $y_1(x) + y_2(x)$, όταν το x παίρνει τυχαίες τιμές στο διάστημα $[10, 20]$. Είναι προφανής η μικρότερη διασπορά της συνάρτησης $y_1(x) + y_2(x)$ από την διασπορά της συνάρτησης $y(x)$.



Σχήμα 4.7.6: Οι πυκνότητες πιθανότητας των εκτιμήσεων $\hat{I}_y$ και $\hat{I}_{y_1+y_2}$, για $N=10000$, σε σύγκριση με την γραφική παράσταση κανονικών συναρτήσεων με $\sigma_y=202$ και $\sigma_{y_1+y_2}=33.5$ αντίστοιχα.

Στο Σχήμα 4.7.6 παρίστανται οι πυκνότητες πιθανότητας των εκτιμήσεων $\hat{I}_y$ και $\hat{I}_{y_1+y_2}$, για $N=10000$, σε σύγκριση με την γραφική παράσταση κανονικών συναρτήσεων με $\sigma_y=202$ και $\sigma_{y_1+y_2}=33.5$ αντίστοιχα. Είναι προφανής η επιτυχία της μεθόδου συνελιγμένων μεταβλητών να καταλήξει σε ακριβέστερες εκτιμήσεις για την περίπτωση αυτού του παραδείγματος.

Ερώτηση: Δείξτε ότι οι παράμετροι $\sigma_y=202$ και $\sigma_{y_1+y_2}=33.5$ των κανονικών συναρτήσεων του Σχήματος 4.7.6 είναι σε απόλυτη συμφωνία με τις τιμές της διασποράς που βρήκατε στην προηγούμενη Ερώτηση.

Άσκηση: Σ' ένα πείραμα μέτρησης του φυσικού μεγέθους X , χρησιμοποιείται συσκευή μέτρησης με συνάρτηση διακριτικής ικανότητας που δίνεται από την ακόλουθη σχέση:

$$g(x_m; x_R) = g(\Delta x) = \frac{1}{\Gamma \cdot \sqrt{2 \cdot \pi}} \cdot e^{-\frac{(x_m - x_R)^2}{2 \cdot \Gamma^2}}$$

όπου x_R και x_m είναι η πραγματική τιμή και το αποτέλεσμα της μέτρησης της φυσικής ποσότητας. Εάν η πραγματική τιμή της ποσότητας X συμπεριφέρεται ως τυχαία μεταβλητή με

συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας $f(x_R) = \frac{1}{\sqrt{2 \cdot \pi} \cdot \sigma} \cdot e^{-\frac{(x_R - \mu)^2}{2 \cdot \sigma^2}}$ με σ και μ σταθερές

παραμέτρους. Να δείξετε ότι η συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας, $q(x_m)$, των αποτελεσμάτων μέτρησης της ποσότητας X είναι Gaussian με αναμενόμενη τιμή και διασπορά ίσες με μ και $\sigma^2 + \Gamma^2$ αντίστοιχα.

4.8 Προσομοίωση φαινομένων με την μέθοδο Monte Carlo

Με την μέθοδο Monte Carlo, αντιμετωπίζουμε δύο κατηγορίες προβλημάτων: προβλήματα ολοκλήρωσης και προβλήματα προσομοίωσης, όπως περιγράφεται στο ακόλουθο παράδειγμα.

Ας υποθέσουμε ότι μελετούμε την εξέλιξη ενός φυσικού φαινομένου το οποίο αναπαράγουμε πειραματικά στο εργαστήριο. Κάθε φορά που συμβαίνει το φαινόμενο, π.χ. η σκέδαση πυρήνα He κατά την διέλευση του δια μέσου λεπτού φύλλου χρυσού (σκέδαση Rutherford), οι πειραματικές συσκευές καταγράφουν ένα πλήθος από n φυσικές ποσότητες¹, $\{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3, \mathbf{K}, \mathbf{x}_n\}$.

Στα επόμενα θα παριστούμε τις παρατηρήσεις που αναφέρονται σε ένα γεγονός (δηλαδή σε μία διεξαγωγή του φαινομένου) με το διάνυσμα $\mathbf{x} = \{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3, \mathbf{K}, \mathbf{x}_n\}$. Κάθε συνιστώσα του διανύσματος $\mathbf{x}$ ($\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3, \mathbf{K}, \mathbf{x}_n$) αντιστοιχεί στη μέτρηση μίας από τις n φυσικές ποσότητες.

Η εκτέλεση του ίδιου πειράματος N φορές καταλήγει στην συλλογή N διανυσμάτων, $\mathbf{x}_i = \{\mathbf{x}_{i,1}, \mathbf{x}_{i,2}, \mathbf{x}_{i,3}, \mathbf{K}, \mathbf{x}_{i,n}\}$ με $i=1,2,3,\dots,N$, όπου κάθε διάνυσμα περιέχει όλη την πειραματική πληροφορία που συλλέξαμε σε ένα γεγονός².

Έστω επίσης ότι υπάρχει κάποια φυσική θεωρία (ή απλώς ένα θεωρητικό μοντέλο ή μία θεωρητική υπόθεση) που προβλέπει την συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας, $g(\mathbf{y}) = g(\mathbf{y}_1, \mathbf{y}_2, \mathbf{y}_3, \mathbf{K}, \mathbf{y}_n)$ ³, των φυσικών ποσοτήτων που χαρακτηρίζουν το φαινόμενο.

Όπως συζητήσαμε αναλυτικά σε προηγούμενη υποενότητα (βλέπε σχέση 4.3.5) η συνάρτηση πυκνότητα πιθανότητας, $f(\mathbf{x})$, που περιγράφει τις πειραματικές μετρήσεις εκφράζεται ως:

$$f(\mathbf{x}) = \frac{\int_{\Omega} g(\mathbf{y}) \cdot \varepsilon(\mathbf{y}) \cdot R(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \cdot d\mathbf{y}}{\int_{\Omega} g(\mathbf{y}) \cdot \varepsilon(\mathbf{y}) \cdot d\mathbf{y}} \quad 4.8.1$$

Οι συναρτήσεις $\varepsilon(\mathbf{y})$ και $R(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ ⁴ παριστούν την αποδοχή-αποδοτικότητα και την συνάρτηση διακριτικής ικανότητας της ανιχνευτικής διάταξης, αντίστοιχα. Ο παράγων Ω , παριστά την περιοχή επιτρεπτών τιμών των φυσικών ποσοτήτων $\mathbf{y}_1, \mathbf{y}_2, \mathbf{y}_3, \mathbf{K}, \mathbf{y}_n$.

¹ Επι παραδείγματι οι ποσότητες αυτές μπορεί να είναι τα συνημίτονα κατεύθυνσης του σκεδαζόμενου πυρήνα He.

² Επι παραδείγματι παρατηρούμε τις σκεδάσεις N σωματίων α και συλλέγουμε N αντίστοιχα διανύσματα $\mathbf{x} = \{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2\}$, όπου $\mathbf{x}_1$ και $\mathbf{x}_2$ είναι τα συνημίτονα κατεύθυνσης του σκεδαζόμενου σωματίου.

³ Επι παραδείγματι το ατομικό μοντέλο του Rutherford προβλέπει την συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας των συνημίτονων κατεύθυνσης των σκεδαζόμενων σωματίων α , όταν είναι γνωστή η αρχική κινητική κατάσταση της προσπίπτουσας δέσμης των σωματίων α . Συμβολίζουμε ως, $(\mathbf{y}_1, \mathbf{y}_2, \mathbf{y}_3, \mathbf{K}, \mathbf{y}_n)$ τις «πραγματικές» τιμές των φυσικών ποσοτήτων ενώ συμβολίζουμε ως $(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3, \mathbf{K}, \mathbf{x}_n)$ τα αποτελέσματα των αντίστοιχων μετρήσεων.

⁴ Προφανώς, στην περίπτωση ιδανικής μετρητικής συσκευής: $R(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y})$ και τα διανύσματα $\mathbf{x}$ και $\mathbf{y}$ ταυτίζονται.

Έχοντας διαθέσιμες μεγάλο πλήθος πειραματικών μετρήσεων, μπορεί να προσδιορισθεί η συχνότητα εμφάνισης, P_i , των αποτελεσμάτων της μέτρησης, $\hat{x}_i$, των φυσικών ποσοτήτων. Στη συνέχεια η σύγκριση των πειραματικών δεδομένων (P_i , $\hat{x}_i$) με την πρόβλεψη της θεωρητικής υπόθεσης, όπως εκφράζεται με την σχέση 4.81., καταλήγει σε έλεγχο της ορθότητας των θεωρητικών μοντέλων ή στον προσδιορισμό παραμέτρων της συνάρτησης $g(\hat{y})$ που αφορούν σε βασικές φυσικές σταθερές.

Σε σύνθετες πειραματικές διατάξεις, όπως στα πειράματα Σωματιδιακής Φυσικής, οι συναρτήσεις $g(\hat{y})$, $\varepsilon(\hat{y})$ και $R(\hat{x}, \hat{y})$ προϋποθέτουν επιπλέον πολύπλοκες ολοκληρώσεις για τον προσδιορισμό τους, ώστε η μέθοδος της Monte Carlo ολοκλήρωσης αποτελεί σχεδόν μοναδικό εργαλείο υπολογισμού.

Επιπλέον, κατά την ανάλυση πειραματικών δεδομένων είναι ιδιαίτερα χρήσιμο να υπάρχει η δυνατότητα «παραγωγής» διανυσμάτων $\hat{x}$, σύμφωνα με την πειραματική συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας. Η προσομοίωση Monte Carlo έγκειται στην επιλογή διανυσμάτων σύμφωνα με την συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας 4.8.1. Τα διανύσματα $\hat{x}$ - τα γεγονότα προσομοίωσης - χρησιμοποιούνται στην συνέχεια για την μελέτη των χαρακτηριστικών της πειραματικής διάταξης, ανάπτυξης τεχνικών ανάλυσης κ.τ.λ..

Στην συντριπτική πλειοψηφία των περιπτώσεων, η γεωμετρική αποδοχή-αποδοτικότητα και η διακριτική ικανότητα του ανιχνευτή αποτελούν αποτελέσματα πολύπλοκων διαδικασιών που η μία διαδέχεται την άλλη. Κατά την προσομοίωση Monte Carlo, αυτές οι πολύπλοκες διαδικασίες αναλύονται σε διαδοχικά βήματα. Σε κάθε βήμα, κάθε δυνατή έκβαση (αποτελέσμα) επιλέγεται από ένα σύνολο πιθανών εκβάσεων σύμφωνα με κάποια συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας, $Q(\hat{x})$, που χαρακτηρίζει τις φυσικές διεργασίες σ' αυτό το βήμα.

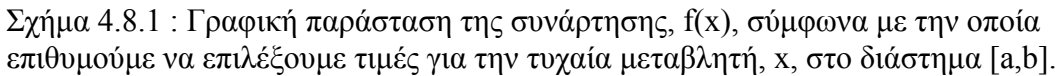
Ένα παράδειγμα προσομοίωσης Monte Carlo αποτελεί το Παράδειγμα 2.4.2 των διαδοχικών σκεδάσεων που υφίσταται μία σφαίρα κατά την κίνησή της πάνω σε οριζόντιο δάπεδο με ανώμαλη επιφάνεια. Η κίνηση αναλύεται σε βήματα, κατά τα οποία η σφαίρα κινείται ευθύγραμμα. Στην αρχή κάθε βήματος η σφαίρα υφίσταται σκέδαση, λόγω της σύγκρουσης της με κάποιο από τα εξογκώματα του δαπέδου. Η εγκάρσια μετατόπιση, δ_k , στο τέλος του βήματος k (πριν από την επόμενη σκέδαση) περιγράφεται από την συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας $\rho_k(\delta_k)$. Οι οκτώ πρώτες συναρτήσεις πυκνότητας πιθανότητας παρίστανται γραφικά στο Σχήμα 2.4.3. Κάθε σκέδαση αποτελεί ανεξάρτητο φαινόμενο, αλλά η συνολική απόκλιση μετά από N σκεδάσεις εξαρτάται από όλες τις σκεδάσεις που προηγήθηκαν. Στο Σχήμα 2.4.4 παρίστανται γραφικά τα αποτελέσματα της σκέδασης πλήθους σφαιρών. Τα αποτελέσματα αυτά προέρχονται από την Monte Carlo προσομοίωση της κίνησης.

Είναι προφανές ότι η προσομοίωση συνίσταται στην επιλογή τιμών για τις τυχαίες μεταβλητές δ_k , σύμφωνα με τις συναρτήσεις πυκνότητας πιθανότητας $\rho_k(\delta_k)$.

Στα επόμενα αυτής της υποενότητας θα μας απασχολήσουν μέθοδοι επιλογής τιμών για τυχαίες μεταβλητές σύμφωνα με συναρτήσεις πυκνότητας πιθανότητας που εκφράζουν την ιδιαίτερη δυναμική του υπό προσομοίωση φαινομένου.

4.8.1 Μέθοδος απόρριψης

Στο Σχήμα 4.8.1 παρίσταται γραφικά η συνάρτηση $f(x)$, σύμφωνα με την οποία επιθυμούμε να επιλέξουμε τιμές για την τυχαία μεταβλητή, x , στο διάστημα $[a,b]$. Η συνάρτηση $f(x)$ δεν είναι κατ' ανάγκη κανονικοποιημένη στο διάστημα επιλογής.


$$\begin{aligned} x_i &= R[a, b] \\ z_i &= R[0, \lambda] \end{aligned} \quad 4.8.2$$
$$z_i \leq f(x_i) \quad 4.8.3$$
$$\int_a^b f(x) \cdot dx ; \hat{I} = \frac{n}{N} \cdot (b-a) \cdot \lambda \quad 4.8.4$$
$$\int_c^d f(x) \cdot dx ; \hat{I}_{c \leq x \leq d} = \frac{n_{c \leq x \leq d}}{N} \cdot (b-a) \cdot \lambda \quad 4.8.5$$

Κατά τα γνωστά, η πιθανότητα επιλογής μίας τιμής της τυχαίας μεταβλητής x στο διάστημα $[c,d]$ ισούται με:

$$\frac{\int_a^d f(x) \cdot dx}{\int_a^b f(x) \cdot dx}; \frac{\frac{n_{c \leq x \leq d}}{N} \cdot (b-a) \cdot \lambda}{\frac{n}{N} \cdot (b-a) \cdot \lambda} = \frac{n_{c \leq x \leq d}}{n} \quad 4.8.6$$

Η σχέση 4.8.6 υποδεικνύει ότι πράγματι οι n επιλεγέντες αριθμοί x_i , με την απαίτηση 4.8.3, αποτελούν τιμές τυχαίας μεταβλητής με συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας:

$$P(x) = \frac{f(x)}{\int_a^b f(x) \cdot dx} \quad 4.8.7$$

Προκειμένου να εφαρμόσει κανείς την μέθοδο αποδοτικά (δηλαδή να επιτύχει την παραγωγή του μέγιστου πλήθους τιμών της τυχαίας μεταβλητής x με συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας που εκφράζεται με την 4.8.7, για ένα αριθμό N δοκιμών) θα πρέπει να χρησιμοποιήσει ως μέγιστο όριο, $\lambda = f_{\max}$. Επισημαίνεται ότι το κάτω όριο της περιοχής τιμών για τους τυχαίους αριθμούς z_i θα πρέπει να είναι το μηδέν. Ακόμα και στη περίπτωση όπου η συνάρτηση $f(x)$ παραμένει μεγαλύτερη από κάποια τιμή $f_{\min}$, σ' όλο το διάστημα $[a, b]$, η επιλογή των τυχαίων αριθμών z_i στο διάστημα $[f_{\min}, \lambda]$ θα οδηγήσει σε λάθος αποτελέσματα.

Ερώτηση: Δείξτε ότι στη περίπτωση όπου η συνάρτηση $f(x)$ παραμένει μεγαλύτερη από κάποια τιμή $f_{\min}$, σ' όλο το διάστημα $[a, b]$, η επιλογή των τυχαίων αριθμών z_i στο διάστημα $[f_{\min}, \lambda]$ οδηγεί σε λάθος αποτελέσματα.

Υπόδειξη: Χρησιμοποιήσετε την σχέση 4.5.5 για να ορίσετε την πιθανότητα κατ' αναλογία της 4.8.6. Δείξτε ότι η πιθανότητα σ' αυτή την περίπτωση δεν προσεγγίζεται από τον λόγο

$$\frac{n_{c \leq x \leq d}}{n}$$

Το βασικό πλεονέκτημα αυτής της μεθόδου έγκειται στην δυνατότητα άμεσης εφαρμογής της στην πλειοψηφία των προβλημάτων. Το βασικό της μειονέκτημα έγκειται στην επιλογή του ορίου, λ , όταν η συνάρτηση $f(x)$ δεν είναι γνωστή αναλυτικά. Στην περίπτωση αυτή, επιλέγεται η τιμή του λ αρκετά υψηλότερη από το μέγιστο της συνάρτησης, προκειμένου να διασφαλισθεί η ορθή επιλογή τιμών, με αποτέλεσμα η μέθοδος απόρριψης να μην είναι ιδιαίτερα αποδοτική.

4.8.2 Μέθοδος αντιστρόφου μετασχηματισμού.

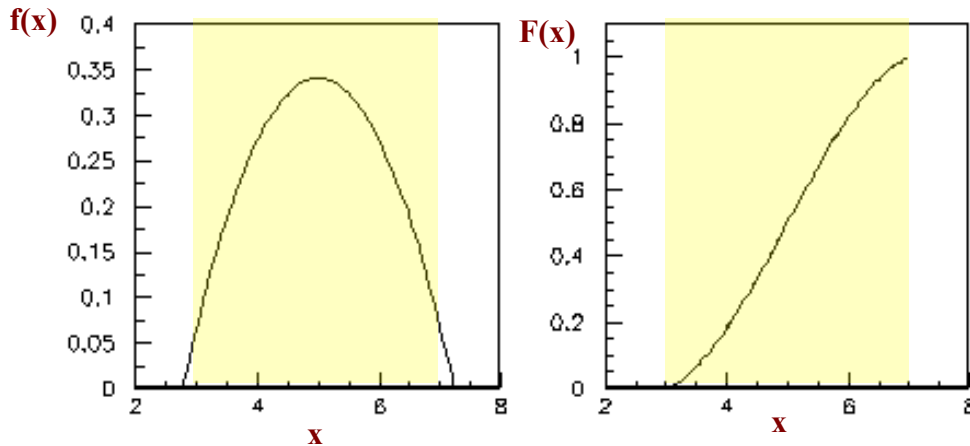
Στην μέθοδο αυτή χρησιμοποιούμε την αθροιστική συνάρτηση πιθανότητας (cumulative probability function), $F(x) = \int_a^x f(x) dx$, αντί της συνάρτησης πυκνότητας πιθανότητας $f(x)$.

Εάν το διάστημα τιμών της τυχαίας μεταβλητής x είναι το $[a, b]$ τότε $F(a)=0$ και $F(b)=1$.

Στο Σχήμα 4.8.2 παρουσιάζεται ως παράδειγμα η γραφική παράσταση της συνάρτησης πυκνότητας πιθανότητας $f(x) = \frac{1}{14.67} \cdot (-x^2 + 10 \cdot x - 20)$, κανονικοποιημένη στο διάστημα

[3,7] , και της αντίστοιχης αθροιστικής συνάρτησης πιθανότητας

$$F(x) = \frac{1}{14.67} \cdot \left[-\frac{1}{3} \cdot (x^3 - 27) + 5 \cdot (x^2 - 9) - 20 \cdot (x - 3) \right].$$



Σχήμα 4.8.2: Γραφική παράσταση της συνάρτησης πυκνότητας πιθανότητας και της αντίστοιχης αθροιστικής συνάρτησης πιθανότητας. Η γραμμοσκιασμένες περιοχές υποδεικνύουν την περιοχή τιμών της μεταβλητής x .

Σύμφωνα με την μέθοδο μετασχηματισμού, επιλέγονται ομοιόμορφα τιμές για την μεταβλητή $u=F(x)$, από το διάστημα τιμών $[0,1]$.

$$u_i = R[0,1] \quad 4.8.8$$

Ακολουθώντας, με τον αντίστροφο μετασχηματισμό:

$$x_i = F^{-1}(u_i) \quad 4.8.9$$

επιλέγονται τιμές για την τυχαία μεταβλητή x . Η συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας, $g(x)$, της μεταβλητής x , που παίρνει τιμές από τις 4.8.8 και 4.8.9, εκφράζεται με την βοήθεια της συνάρτησης πυκνότητας πιθανότητας, $Q(u)$, της τυχαίας μεταβλητής u και της Jacobian, $\left| \frac{\partial u}{\partial x} \right|$,

ως:

$$g(x) = Q(u) \cdot \left| \frac{\partial u}{\partial x} \right| = \left| \frac{\partial F(x)}{\partial x} \right| = f(x) \quad 4.8.10$$

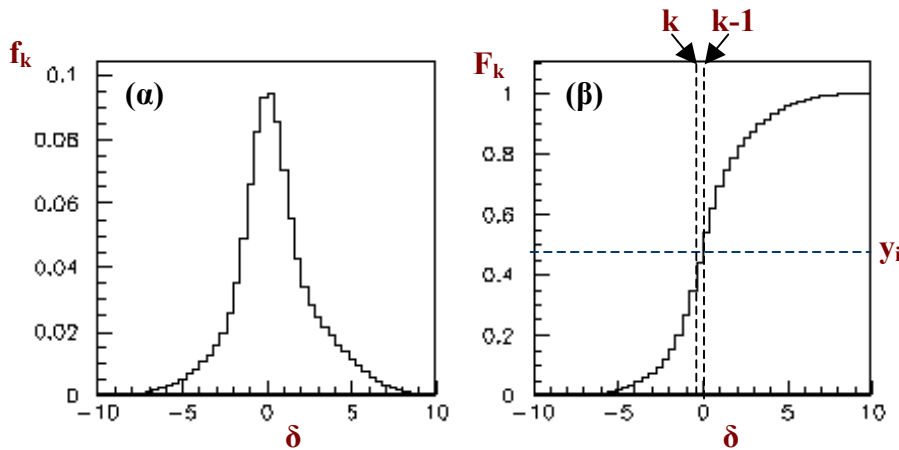
Συνεπώς, η μέθοδος μετασχηματισμού επιλέγει τιμές σύμφωνα με την συνάρτησης $f(x)$, όπως ακριβώς επιθυμούμε.

Το βασικό μειονέκτημα αυτής της μεθόδου έγκειται σε υπολογιστικές δυσκολίες που αφορούν στην ολοκλήρωση για τον προσδιορισμό της αθροιστικής συνάρτησης πιθανότητας και στον αντίστροφο μετασχηματισμό 4.8.9. Όταν αυτοί οι υπολογισμοί είναι εφικτοί, έστω και αριθμητικά, η μέθοδος αυτή είναι η πλέον αποδοτική στην παραγωγή τιμών για τυχαίες μεταβλητές.

Παράδειγμα 4.8.1 :

Συνήθως, στην ανάλυση πειραματικών δεδομένων, χρησιμοποιούμε τυχαίες μεταβλητές για τις οποίες δεν είναι γνωστή η αναλυτική μορφή της συνάρτησης πυκνότητας πιθανότητας. Επί παραδείγματι, η διακριτική ικανότητα μίας μετρητικής συσκευής προσδιορίζεται πειραματικά, υπό μορφή ιστογράμματος. Στο Σχήμα 4.8.3α, παρίστανται υπό μορφή ιστογράμματος η συχνότητα, f , της απόκλισης, δ , της μέτρησης ενός φυσικού μεγέθους από την πραγματική τιμή. Έχει προκύψει από α) την επανάληψη (N φορές) της μέτρησης, της ίδιας, γνωστής, φυσικής ποσότητας, β) τον προσδιορισμό, κάθε φορά, της απόκλισης (δ_i , $i=1,2,\dots,N$) του αποτελέσματος της μέτρησης από την πραγματική τιμή και γ) τον προσδιορισμό του λόγου:

$f_k = \frac{n_{l_k \leq \delta < u_k}}{N}$, όπου $n_{l_k \leq \delta < u_k}$ είναι το πλήθος των περιπτώσεων που η μέτρηση βρέθηκε να αποκλίνει εντός των ορίων του k ιστού του ιστογράμματος ($l_k \leq \delta < u_k$).



Σχήμα 4.8.3: Γραφική παράσταση, υπό μορφή ιστογράμματος, (α) της συχνότητας και (β) της αθροιστικής πιθανότητας η μέτρηση να αποκλίνει κατά δ από την πραγματική τιμή του φυσικού μεγέθους.

Στο Σχήμα 4.8.3β, παρίσταται η αθροιστική πιθανότητα, $F_k = P(\delta < u_k) = \sum_{i=1}^k f_i$, η απόκλιση της μέτρησης από την πραγματική τιμή να είναι μικρότερη από u_k (το πάνω όριο του ιστού k). Προφανώς, $0 \leq F_k \leq 1$.

Στην συνέχεια θεωρούμε την τυχαία (συνεχή) μεταβλητή, y , με σταθερή συχνότητα πυκνότητα πιθανότητας ($=1$) στο διάστημα $[0,1]$. Προφανώς:

$$P(F_{k-1} \leq y < F_k) = \int_{F_{k-1}}^{F_k} dy = F_k - F_{k-1} = f_k \quad 4.8.11$$

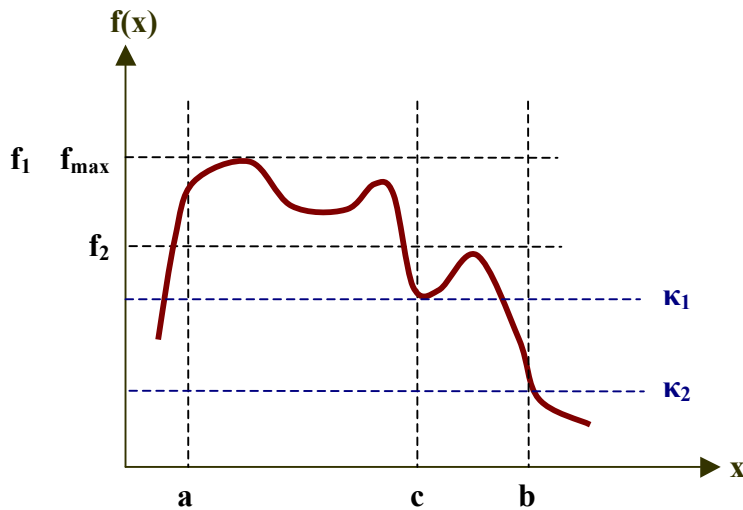
Συνεπώς, προκειμένου να επιλέξουμε τιμές για την τυχαία μεταβλητή δ σύμφωνα με τον πειραματικό προσδιορισμό της διακριτικής ικανότητας του οργάνου μέτρησης, που παριστά το Σχήμα 4.8.3β, εκτελούμε τα ακόλουθα βήματα.:

1. Επιλέγουμε την τυχαία μεταβλητή $y_i = R[0,1]$

2. Προσδιορίζουμε τον δείκτη k ώστε $F_{k-1} \leq y_i < F_k$, όπως παρίσταται γραφικά στο Σχήμα 4.8.3β.

3. Επιλέγουμε, εντός των ορίων του ιστού k , την τιμή της απόκλισης δ ώστε $l_k \leq \delta < u_k$. Η επιλογή μπορεί να γίνει ομοιόμορφα μέσα στο διάστημα $[l_k, u_k)$ ή (εάν το εύρος του ιστού $(u_k - l_k)$ είναι μικρό) αρκεί να επιλεγεί το μέσον του ιστού ή να επιλεγεί η μέση τιμή των αποκλίσεων των μετρήσεων που συλλέχθηκαν στον ιστό k .

Άσκηση: Δίνεται η συνάρτηση $f(x)$, που παρίσταται γραφικά στο Σχήμα. Προτείνετε μία αποδοτική παραλλαγή της μεθόδου απόρριψης για την παραγωγής τιμών της τυχαίας μεταβλητής x στο διάστημα $[a,b]$, με συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας: $P(x) = \frac{f(x)}{\int_a^b f(x) \cdot dx}$



Απάντηση: Χωρίζουμε την περιοχή $[a,b]$ στις περιοχές $[a,c]$ και $[c,b]$ όπου η κλίμακα τιμών της $f(x)$ είναι σαφώς διαφορετική. Έστω $f_1(=f_{\max})$, f_2 και κ_1 , κ_2 οι τιμές μεγίστου και ελαχίστου της συνάρτησης στις περιοχές $[a,c]$ και $[c,b]$, αντίστοιχα.

Υπολογίζουμε τα ακόλουθα ολοκληρώματα:

$$\int_a^c f(x) \cdot dx ; \hat{I}_1 = \frac{n_1}{N_1} \cdot (c-a) \cdot (f_1 - \kappa_1) + \kappa_1 \cdot (c-a) \text{ και}$$

$$\int_c^b f(x) \cdot dx ; \hat{I}_2 = \frac{n_2}{N_2} \cdot (b-c) \cdot (f_2 - \kappa_2) + \kappa_2 \cdot (b-c)$$

δημιουργώντας N_1 (N_2) τυχαία ζεύγη τιμών σύμφωνα με την σχέση 4.5.2 και επιλέγοντας n_1 (n_2) τιμές για την μεταβλητή x , σύμφωνα με την απαίτηση 4.5.4, στην περιοχή $[a,c]$ ($[c,b]$).

Στην συνέχεια υπολογίζουμε τον λόγο: $\rho = \frac{\hat{I}_1}{\hat{I}_1 + \hat{I}_2}$

Ο αλγόριθμος επιλογής τιμών για την τυχαία μεταβλητή x , με συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας $P(x) = \frac{f(x)}{\int_a^b f(x) \cdot dx}$, στο διάστημα $[a,b]$ έχει ως εξής.

1. Επιλέγουμε τον τυχαίο αριθμό $r_i = R[0,1]$
2. Εάν $r_i \leq \rho$ επιλέγουμε τιμή για την μεταβλητή x στην περιοχή $[a,c]$ με την μέθοδο απόρριψης, θέτοντας $\lambda=f_1$.
3. Εάν $r_i > \rho$ επιλέγουμε τιμή για την μεταβλητή x στην περιοχή $[c,b]$ με την μέθοδο απόρριψης, θέτοντας $\lambda=f_2$.

Άσκηση: Προτείνεται μέθοδο παραγωγής ακεραίων τιμών για την μεταβλητή n , η οποία ακολουθεί Poissonian συνάρτηση πιθανότητας με μέση τιμή $\mu=3$.

Υπόδειξη: Εφαρμόσετε την μεθοδολογία που αναλύεται στο Παράδειγμα 4.8.1

Άσκηση: Παράγετε τιμές για δύο ανεξάρτητες μεταβλητές x_1 και x_2 , ομοιόμορφα καταναεμημένες στο διάστημα $[0,1]$.