Integration i hög och låg dimension

Anders Szepessy

- Integrera i en dimension: metod och noggrannhet
- Alternativ integration: metod och noggrannhet
- Integrera i hög dimension
- Jämförelse komplexitet
- Exempel: kemi och fysik

Integration i hög och låg dimension

Anders Szepessy

- Integrera i en dimension: metod och noggrannhet
- Alternativ integration: metod och noggrannhet
- Integrera i hög dimension
- Jämförelse komplexitet
- Exempel: kemi och fysik

- konvergens på olika sätt
- sannolikhet väntevärde, varians, Monte Carlo
- molekyldynamik vad kan räknas ut?

Integration i en dimension

$$\int_0^1 f(x)\,dx \simeq \sum_{n=0}^{N-1} f(x_n)\Delta x, \quad \Delta x = \frac{1}{N}$$

Felet:

$$\int_{x_n}^{x_{n+1}} \underbrace{|f(x) - f(x_n)|}_{\leq C(x-x_n)} dx \leq C|x_{n+1} - x_n|^2/2 \quad \text{om } |f'(x)| \leq C$$

så

$$|\int_0^1 f(x)dx - \sum_{n=0}^{N-1} f(x_n)\Delta x| \leq CN|\Delta x|^2/2 = C\Delta x/2$$

Alternativ Monte Carlo metod

X likformigt fördelad på $[0,1]$ ger *förväntad höjd*

$$E := \int_0^1 f(x)dx$$

och

$$\int_0^1 f(x)dx \simeq \sum_{n=1}^{N} f(X_n)\frac{1}{N}$$

X_n oberoende och likformigt fördelade på $[0,1]$

$$\text{Förväntat värde av } \tfrac{X_1+X_2+X_3}{3} = \int_0^1\int_0^1\int_0^1 \frac{f(X_1)+f(X_2)+f(X_3)}{3} dX_1 dX_2 dX_3$$

$$= \frac{E+E+E}{3} = E$$

Monte Carlo felet: $\sum_{n=1}^{N} f(X_n)\frac{1}{N} - \int_0^1 f(x)dx =?$

Varianses $=$ felet i kvadrat i integralmening $=$

$$\int_0^1 \dots \int_0^1 \Big(\underbrace{\sum_{n=1}^{N} f(X_n)\frac{1}{N} - E}_{N^{-1}\sum_n (f(X_n)-E)}\Big)^2 dX_1 \dots dX_N$$

$$= \sum_{n=1}^{N}\sum_{m=1}^{N} \int_0^1 \dots \int_0^1 N^{-2}\big(f(X_n) - E\big)\big(f(X_m) - E\big) dX_1 \dots dX_N$$

$$= \sum_{n=1}^{N}\sum_{m=1}^{N} \begin{cases} 0, & n \neq m \\ \int_0^1 \big(f(x) - E\big)^2 dx N^{-2}, & n = m \end{cases}$$

$$= \frac{1}{N}\int_0^1 \big(f(x) - E\big)^2 dx$$

Integration i högre dimension

$$\int_0^1 \int_0^1 f(x_1, x_2) dx_1 dx_2 \simeq \sum_{n=0}^{N-1} \sum_{m=0}^{N-1} f(n\Delta x, m\Delta x)(\Delta x)^2$$

Eulerfelet:

$$|\int_0^1 \int_0^1 f(x_1, x_2) dx_1 dx_2 - \sum_{n=0}^{N-1} \sum_{m=0}^{N-1} f(n\Delta x, m\Delta x)(\Delta x)^2| \leq C\Delta x$$

Monte Carlo i högre dimension

$X_n = \big(x_1(n), x_2(n)\big)$ oberoende likformigt fördelade på $[0,1]^2$

$$E = \int_0^1 \int_0^1 f(x_1, x_2) dx_1 dx_2 \simeq \sum_{n=1}^{N} \frac{f(X_n)}{N}$$

$$\text{Variansen} := \int_{[0,1]^2} \dots \int_{[0,1]^2} \Big(\sum_{n=1}^{N} f(X_n) \frac{1}{N} - E \Big)^2 dX_1 \dots dX_N$$
$$= \frac{1}{N} \int_{[0,1]^2} \big(f(x_1, x_2) - E \big)^2 dx_1 dx_2$$

Komplexitet jämförelse $\int_0^1 \ldots \int_0^1 f(x_1, \ldots, x_d) dx_1 \ldots dx_d$

Dimension 1:

$$\text{Eulerfel} = \epsilon \sim \Delta x = N^{-1}$$

$$\text{antat operationer} = N = (\Delta x)^{-1} \sim \epsilon^{-1}$$

Dimension 2:

$$\text{Eulerfel} = \epsilon \sim \Delta x = N^{-1/2}$$

$$\text{antat operationer} = N = (\Delta x)^{-2} \sim \epsilon^{-2}$$

Dimension d:

$$\text{Eulerfel} = \epsilon \sim \Delta x = N^{-1/d}$$

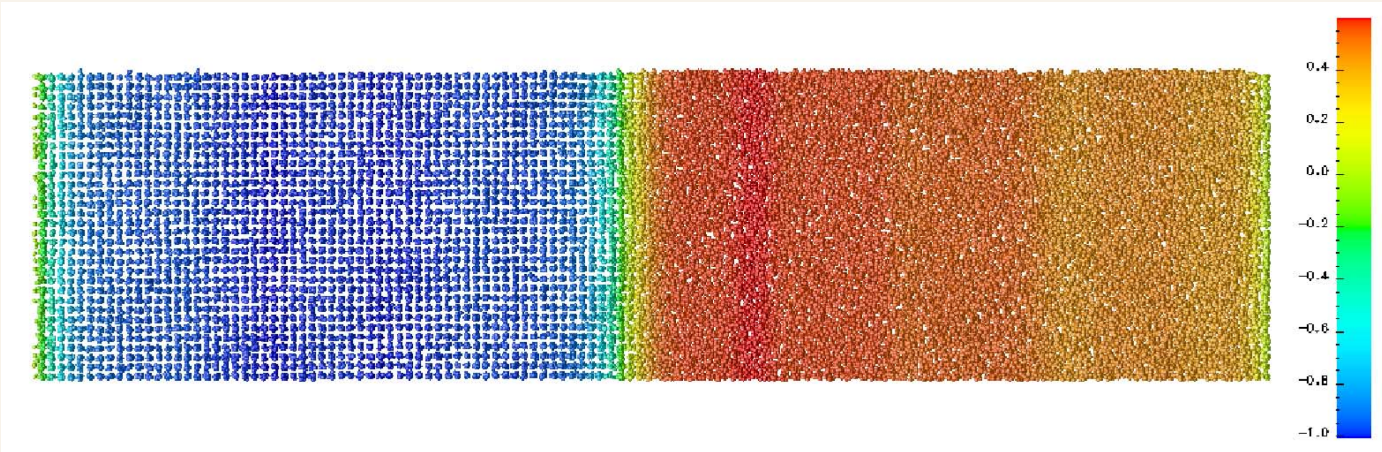
$$\text{antat operationer} = N = (\Delta x)^{-d} \sim \epsilon^{-d}$$

Komplexitet med N operationer i dimension d:

Eulerfel: $N^{-1/d,}$ $\epsilon = 10^{-2}$ ger $N = 10^{20}$

Monte Carlo fel: $N^{-1/2}$ i integralmening

Molekyldynamikexempel



Kärnors position $X(t) \in \mathbb{R}^{3N}$ och hastighet $P(t) \in \mathbb{R}^{3N}$

Dynamik med potential $\lambda : \mathbb{R}^{3N} \to \mathbb{R}$:

$$\frac{d}{dt}X(t) = P(t)$$

$$\frac{d}{dt}P(t) = -\lambda'(X(t))$$

energi $H(X,P) := |P|^2/2 + \lambda(X)$

Vad kan räknas ut?

Observabel g t.ex. $g = \lambda = \sum_{n,m\neq n} f(|X_n - X_m|), \quad f(x) = z_1(\sigma/x)^{12} - z_2(\sigma/x)^6$

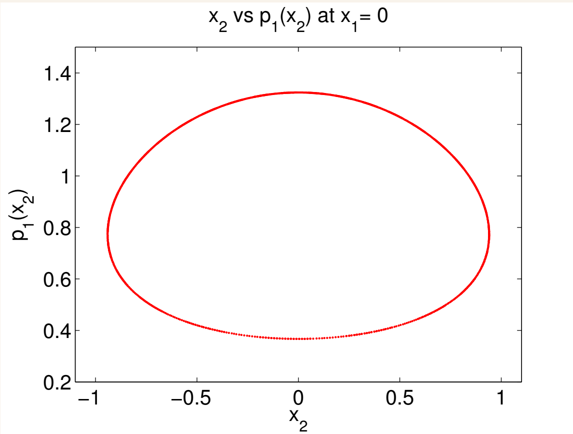
$$\lim_{T\to\infty} \int_0^T g\big(X(t)\big)\frac{dt}{T}$$

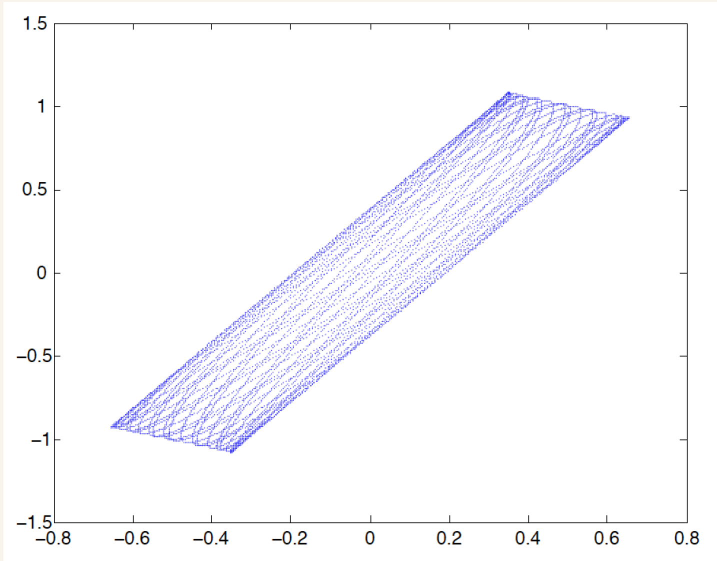
$$= \lim_{\delta\to 0+} \frac{\int_{E<H(X,P)<E+\delta} g(X)\,dX\,dP}{\int_{E<H(X,P)<E+\delta} dX\,dP} \quad \text{om ergodiskt}$$

$$= \lim_{N\to\infty} \sum_{n=1}^{N} \frac{1}{N} \int_{\tau n}^{\tau(n+1)} g\big(X(t)\big)\frac{dt}{\tau} \quad \text{om oberoende efter tiden } \tau$$

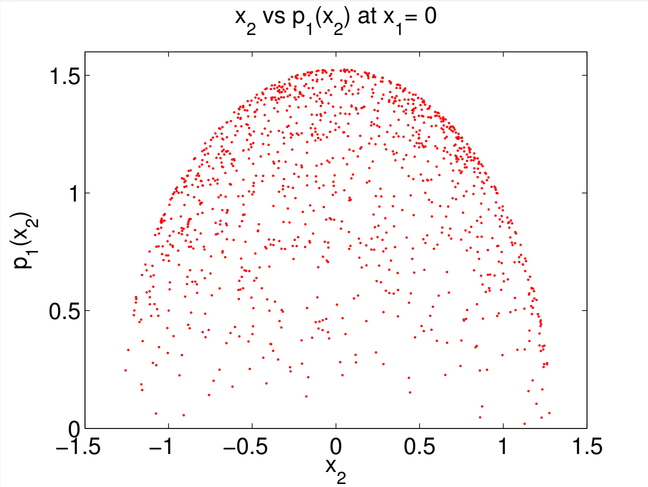
Felet $\sim N^{-1/2} \sim T^{-1/2}$

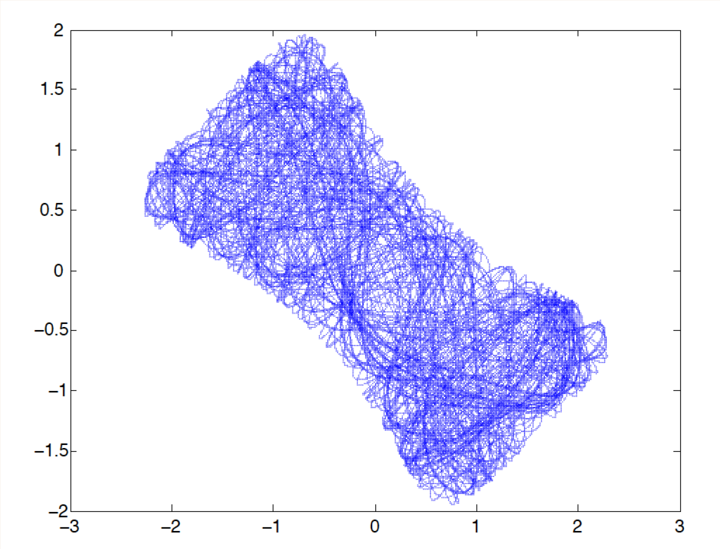
Multi D: $\lambda(X) = \frac{X_1^2}{2} + \frac{X_2^2}{\sqrt{2}} + \beta \sin(X_1 X_2)$



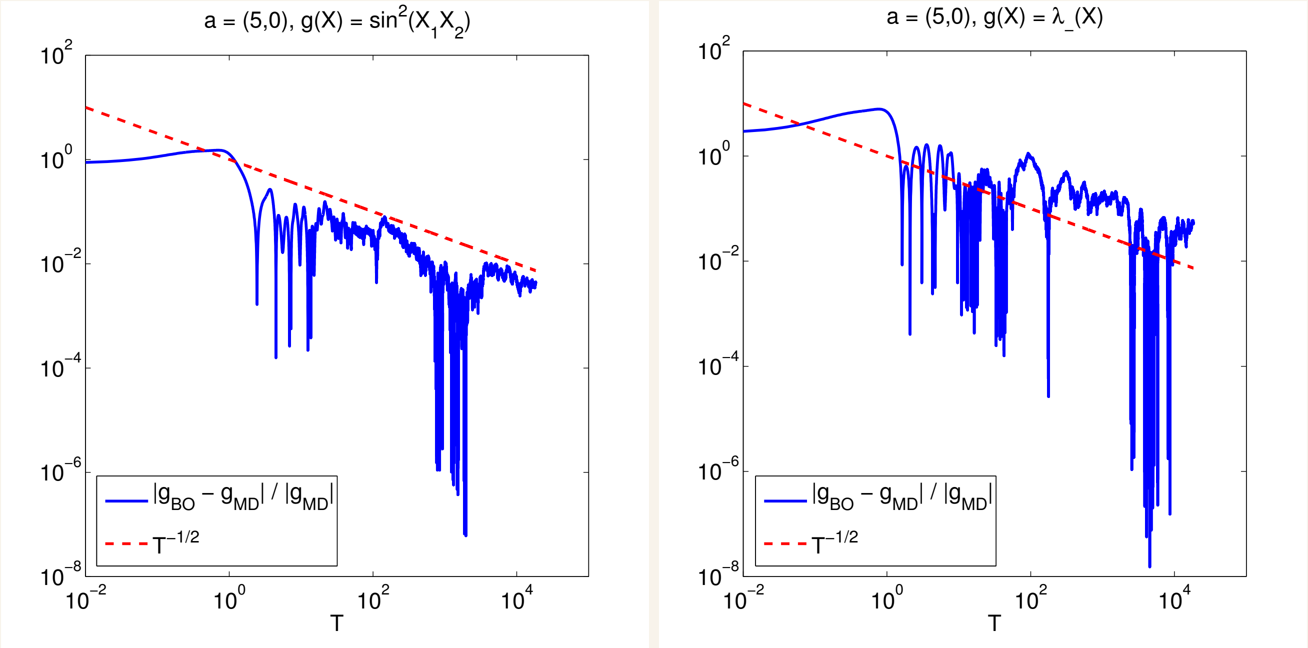


Left: hitting points in plane $X_1 = 0$ for $\beta = 0.3$ and $E = 1.0001$. Right: the path $(X_1(t), X_2(t))$ for $\beta = 0.3$





Left: hitting points in plane $X_1 = 0$ for $\beta = 2$ and $E = 1.0001$. Right: the path $(X_1(t), X_2(t))$ for $\beta = 2$.



Ergodicity test with $g_{BO}(T) = \int_0^T g(X_t)dt/T$ and g_{MD} computed as the phase-space integral

Slutsats

- Monte Carlo har långsam konvergens i låg dimension men snabb i hög
- Kvadratur har snabb konvergens i låg dimension men långsam i hög
- Molekyldynamik fungerar pga ergodicitet
- konvergens behöver mätas på olika sätt