

Métodos Computacionais em Física I (FIW234)

Turmas IFA e IFB

Aplicações do Método de Monte Carlo

Edivaldo M. Santos e João R. T. de Mello Neto

Aula 10

Aplicações de Monte Carlo

- Exemplo de geradores de números aleatórios
- Integração pelo Método de Monte Carlo
- Método da "Importance Sampling"
- Difusão e Caminhada Aleatória
- Introdução ao Latex

Geradores de números aleatórios

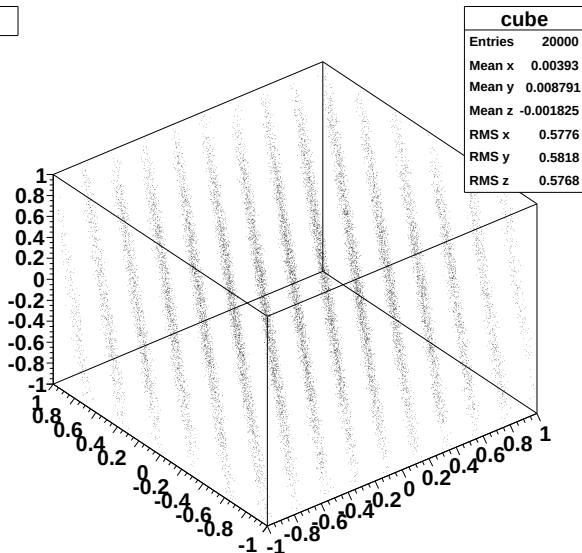
- Na aula passada já mencionamos que computadores não podem gerar números aleatórios. O computador é uma máquina determinista cujas operações têm resultados não aleatórios.
- Mas temos algoritmos que geram números pseudo-aleatórios. Uma sequência destes números, em muitas circunstâncias, produzem os mesmos efeitos que uma sequência de números que satisfazem as condições matemáticas de aleatoriedade.
- A questão aqui é como assegurar que os números produzidos pelo gerador de números aleatórios que utilizamos (por exemplo, o `rand()`) possuem as qualidades mínimas de um bom gerador.
- Existe uma grande quantidade de testes estatísticos para se determinar se um gerador é aceitável. Basicamente queremos que os números gerados não possuam correlações significativas entre eles.
- Um grupo importante de geradores de números aleatórios é o que emprega uma equação da forma

$$x_{n+1} = (ax_n + b) \bmod m$$

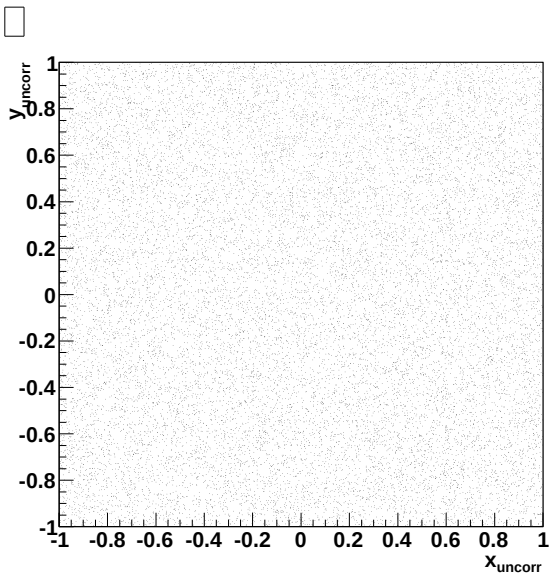
conhecido como geradores congruenciais lineares. Muito já se escreveu sobre eles e quais são os melhores valores para a e b (m é relacionado ao hardware do computador e tipicamente tem o valor 2^{32} , de modo que apenas os 32 bits mais baixos são levados em conta no cálculo de x_{n+1}).

- Para ilustrarmos o tipo de problema que pode haver num gerador de numeros aleatórios, vamos estudar um caso famoso, que foi o gerador RANDU: $x_{n+1} = 65539x_n \bmod 2^{31}$, com x_0 impar. Ele é considerado um dos piores geradores já concebidos.
- O problema é que um dos defeitos dessa classe de geradores é que se ele é utilizado para se obter pontos num plano de n —dimensões, os pontos se acumularão no máximo em $m^{1/n}$ hiperplanos (teorema de Marsaglia). Isto é devido a correlações seriais entre valores sucessivos da sequência x_n . O teste espectral, que é um teste simples da qualidade de um gerador, se baseia neste fato.
- Pode-se mostrar que no caso do RANDU, em três dimensões os pontos se distribuem em apenas 15 planos.
- No entanto, ao se fazer um gráfico bi-dimensional dos pontos, não se nota nenhuma estrutura.

RANDU: correlações em três dimensões



RANDU: histograma bi-dimensional ($r = -0.0045$)



RANDU

```
#include <stdio.h>
#include <math.h>
#include <stdlib.h>

#define NPONT 20000      /* numero de pontos */
/* numero aleatorio entre 0 e 1 */
#define frand() (double)rand()/(RAND_MAX+1.) /* excluindo valor 1 */

double randu(int *semente) {
    int prod=65539*(*semente);
    int m = pow(2,31);
    *semente = prod%m;
    return (double) *semente/pow(2.0,31);
}

int main(){
    double randu(int *semente);
    FILE *sRandu, *sFrاند; /* arquivos de saida */
    int semente = 300;      /* semente para o randu */
    int i;
    double x, y, z;
```

```
/* abre os arquivos de saida */
sRandu = fopen("sRandu.dat","w");
sFrاند = fopen("sFrاند.dat","w");
/* gere x, y, z para os dois geradores */
for (i=0; i<NPONT; i++){
    /* randu */
    x = randu(&semente);
    y = randu(&semente);
    z = randu(&semente);
    /* escreva arquivo pra randu */
    fprintf(sRandu,"%f %f %f\n",x,y,z);
    /* frاند */
    x = frاند();
    y = frاند();
    z = frاند();
    /* escreva arquivo pra frاند */
    fprintf(sFrاند,"%f %f %f\n",x,y,z);
}
/* fecha os arquivos de saidas */
fclose(sRandu);
fclose(sFrاند);
return 0;
}
```

Integração pelo Método de Monte Carlo

- Considere uma função em uma dimensão a ser integrada no intervalo $[a, b]$. A integral é a área sob a curva. Se soubéssemos a área, poderíamos dividi-la pela largura do intervalo, $b - a$, e definir o valor médio da função $\langle f \rangle$. Assim, a largura vezes o valor médio da função é o valor da integral:

$$\int_a^b f(x) dx = (b - a) \langle f \rangle$$

- Assim, precisamos de um modo de calcular o valor médio da função. E é exatamente aí que os números aleatórios x_i entram.

$$\langle f \rangle_N = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i)$$

- À medida que o número de pontos utilizados no cálculo da média aumenta, $\langle f \rangle_N$ tende ao valor médio "real" $\langle f \rangle$, e podemos escrever a estimativa da integral da seguinte forma:

$$\int_a^b f(x) dx \approx (b - a) \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i)$$

Integração por Monte Carlo

```
/* calculo da integral de exp(x) entre 0 e 1 pelo met de monte carlo
   valor exato: e-1 o numero total de pontos eh NAVAL * DPONT */
#include <stdio.h>
#include <math.h>
#include <stdlib.h>

#define NAVAL 200      /* numero de valores da integral */
#define DPONT 100      /* apresentar resultado a cada DPONT pontos */
#define frand() (double)rand()/(RAND_MAX+1.) /* numero aleatorio entre 0 e 1
                                              excluindo valor 1 */

int main(){
    int i;
    double x, soma = 0.0;
    int np =1;
    int semente = 1400;      /* semente para o rand */
    srand(semente);
    while (np <= NAVAL) {
        i=0;
        while (i<DPONT) {
            x = frand();      /* gere um numero no intervalo 0 - 1 */
            soma = soma + exp(x);
            i++;
        }
        printf("%d      %f\n",np, fabs( (soma/(np*DPONT) - (M_E-1.0))/(M_E-1.0) ) );
        np++;
    }
    return 0;
}
```

Cálculo do Desvio Padrão

- A teoria das probabilidades nos possibilita estimar o desvio padrão da média, uma medida da largura da distribuição das várias estimativas da integral. Já que 68.3% de todas as estimativas caem dentro de um desvio padrão da média, podemos também dizer que há 68.3% de probabilidade que a nossa estimativa particular $\langle f \rangle_N$ esteja a dentro de um desvio padrão do valor verdadeiro $\langle f \rangle$.
- O desvio padrão pode ser estimado da seguinte pela seguinte expressão:

$$\sigma_N = \sqrt{\frac{\frac{1}{N} \sum f(x_i)^2 - (\frac{1}{N} \sum f(x_i))^2}{N - 1}}$$

- O erro num cálculo de Monte Carlo é fundamentalmente diferente do erro nos outros métodos de integração já discutidos aqui. No Monte Carlo, o erro tem uma natureza probabilística - 68.3% das vezes, a estimativa em um desvio padrão do valor verdadeiro. O método de Monte Carlo converge lentamente - vai com a raiz quadrada de N - mas essa convergência **não depende da dimensionalidade da integral**. Ou seja, para reduzir o erro por um fator de dois, N deve ser aumentado quatro vezes, independentemente da dimensionalidade da integral. Para dimensões altas, o método de Monte Carlo converge mais rapidamente do que qualquer dos outros métodos já discutidos aqui.
- Integrais multidimensionais são onde o método de Monte Carlo mostra toda sua força.

Importance Sampling

- A acurácia do método de Monte Carlo pode ser melhorada quando se utiliza informação sobre a função. Por exemplo, se $g(x) \approx f(x)$, e podemos integrar g , então podemos escrever:

$$\int_a^b f(x) dx = \int_a^b \frac{f(x)}{g(x)} g(x) dx = \int_{y^{-1}(a)}^{y^{-1}(b)} \frac{f(x)}{g(x)} dy$$

onde

$$y(x) = \int_a^x g(t) dt$$

- Assim, ao invés de gerar x uniformemente para integrar $f(x)$, geramos uniformemente y e integramos $f(x)/g(x)$. Se $g(x)$ for uma boa aproximação para $f(x)$, o integrando será aproximadamente constante, e fácil de se calcular.
- Esta técnica, conhecida como **importance sampling**, tem o efeito de colocar um grande número de pontos amostrados aonde a função é grande, permitindo portanto uma melhor estimativa da integral.

Importance Sampling

- Voltando ao exemplo anterior, onde calculamos

$$I = \int_0^1 e^x dx$$

já que $e^x \approx 1 + x$, a integral pode ser reescrita na forma:

$$I = \int_0^1 \frac{e^x}{1+x} (1+x) dx = \int_0^{3/2} \frac{e^{\sqrt{1+2y}-1}}{\sqrt{1+2y}} dy$$

onde

$$y = \int^x (1+t) dt = x + \frac{x^2}{2}$$

e

$$x = -1 + \sqrt{1+2y}$$

- Assim, para se calcular a integral na forma acima, deve-se gerar y uniformemente no intervalo $0 \leq y \leq 3/2$.

Caminhadas aleatórias

- O movimento de uma molécula num gás ou de um grão de pólen na superfície de uma solução é análogo a uma "caminhada aleatória". Essas caminhadas aparecem frequentemente nas simulações de processos aleatórios.
- A situação mais simples envolve um bêbado que dá passos de comprimento unitário ao longo de uma linha. Ele inicia a caminhada na origem e vai ou para a esquerda ou para a direita. Aí ele escolhe aleatoriamente se prossegue na mesma direção ou se volta, isso se repete a cada passo.
- Num processo físico como o movimento de uma molécula gasosa, podemos adotar um tempo característico para o passo, de modo que o número do passos é grosseiramente proporcional ao tempo. Podemos então nos referir à posição do bêbado como função do tempo.
- O programa a seguir calcula e faz o gráfico de várias caminhadas, todas se iniciando na origem.

Programa para simular caminhadas aleatórias

```
#include <stdio.h>
#include <math.h>
#include <stdlib.h>
#define NCAM 10          /* numero de caminhadas */
#define NPAS 1000        /* numero de passos em cada */
#define frand() (double)rand()/(RAND_MAX+1.) /* excluindo valor 1 */
int main(){
    FILE *camin;          /* arquivos de saida, dados */
    FILE *fpout = NULL;    /* arquivos de saida, gnuplot */
    int semente = 300;     /* semente para o frand */
    int i,j;
    int pos[NCAM];
    /* abre os arquivos de saida */
    camin = fopen("caminhada.dat","w");
    srand(semente);

    for (i=0; i<NCAM; i++) pos[i]=0.0;          /* todos comecam da origem */
    for (j=0; j<NPAS; j++){                      /* loop nos passos */
        fprintf(camin,"%d",j);
        for (i=0;i<NCAM; i++) fprintf(camin,"\t%d",pos[i]); /* imprime posicao */
        fprintf(camin,"\n");
        for (i=0;i<NCAM; i++){                    /* passo */
            if(frand(<0.5){
                pos[i]=pos[i]+1;
            }else{
                pos[i]=pos[i]-1;
            }
        }
    }
}
```

Programa para simular caminhadas aleatórias

```
/* gnuplot */
fpout=fopen("mplot.plt", "w+");
fprintf(fpout, "set term post eps enhanced color\n");
fprintf(fpout, "set out 'Grafico.eps'\n");
fprintf(fpout, "set title 'Caminhada aleatoria '\n");
fprintf(fpout, "set xlabel 'Tempo'\n");
fprintf(fpout, "set ylabel 'X(t) '\n");
// fprintf(fpout, "set xtics 0.25\n");
fprintf(fpout, "set key left top\n");
fprintf(fpout, "set xrange[0:1010]\n");
fprintf(fpout, "set yrange[-70:70]\n");
fprintf(fpout, "plot 'caminhada.dat' using 1:2 notit \n");
fprintf(fpout, "replot 'caminhada.dat' using 1:3 notit \n");
fprintf(fpout, "replot 'caminhada.dat' using 1:4 notit\n");
fprintf(fpout, "replot 'caminhada.dat' using 1:5 notit\n");
fprintf(fpout, "replot 'caminhada.dat' using 1:6 notit\n");
fprintf(fpout, "replot 'caminhada.dat' using 1:7 notit\n");
fprintf(fpout, "replot 'caminhada.dat' using 1:8 notit\n");
fprintf(fpout, "replot 'caminhada.dat' using 1:9 notit\n");
fprintf(fpout, "replot 'caminhada.dat' using 1:10 notit\n");
fprintf(fpout, "replot 'caminhada.dat' using 1:11 notit\n");
fclose(fpout);
system("gnuplot 'mplot.plt'");
system("evince Grafico.eps");
system("rm mplot.plt");
//system("rm caminhada.dat");
return 0;
}
```

O movimento browniano e a equação de difusão

- Em 1827 o botânico escocês Robert Brown usou um microscópio para observar grãos de pólen numa solução, e os viu se moverem numa trajetória errática. Ele pensou originalmente que eles estavam vivos, mas hoje sabemos que o movimento é devido aos impactos das moléculas do solvente nos grãos de pólen. Esta observação foi muito significativa para o estabelecimento da hipótese atômica. Em 1905 Einstein obteve uma descrição quantitativa do chamado movimento browniano deduzindo a distribuição de probabilidades para a posição da partícula após um certo intervalo de tempo.
- Langevin analisou o movimento browniano em termos de uma **equação diferencial estocástica**. Uma partícula movendo-se num fluido viscoso sente uma força de arrasto, e se sua velocidade não for muito alta, a força que atua nela é dada pela fórmula de Stokes:

$$\vec{F} = -6\pi\mu a\vec{v}$$

onde μ é a viscosidade do fluido, a é o diâmetro da partícula, e $\vec{v}$ é a velocidade da partícula. Além disso, modela-se o movimento browniano incluindo-se uma força estocástica η devido ao impacto molecular na partícula. Assim, a equação de movimento para uma partícula seria a seguinte:

$$m \frac{d^2x}{dt^2} = -6\pi\mu a \frac{dx}{dt} + \eta$$

O movimento browniano e a equação de difusão

- Este é um exemplo do que agora se denomina equação de Langevin. Como η é uma variável aleatória, x torna-se também. Assim, não podemos resolver a equação para x diretamente. Podemos utilizar a equação diferencial para obter quantidades observadas que dependam de x . Sabemos que

$$\frac{d(x^2)}{dt} = 2x \frac{dx}{dt}$$

e

$$\frac{d^2(x^2)}{dt^2} = 2 \left(\frac{dx}{dt} \right)^2 + 2x \frac{d^2x}{dt^2} = 2v^2 + 2x \frac{d^2x}{dt^2}$$

- Utilizando a expressão acima, se multiplicarmos a equação de movimento por x podemos reescrevê-la na forma:

$$\frac{m}{2} \frac{d^2(x^2)}{dt^2} - mv^2 = -3\pi\mu a \frac{d(x^2)}{dt} + \eta x$$

e agora vamos tomar o valor temporal esperado:

$$\frac{m}{2} \frac{d^2 \langle x^2 \rangle}{dt^2} + 3\pi\mu a \frac{d \langle x^2 \rangle}{dt} = m \langle v^2 \rangle + \langle \eta x \rangle$$

que, no lado direito, o primeiro termo é igual a kT pelo teorema da equipartição (aqui um grau de liberdade) e o segundo é zero porque o termo de ruído que flutua rapidamente é decorrelacionado com a partícula que se move lentamente. Portanto

$$\frac{d^2 \langle x^2 \rangle}{dt^2} + \frac{6\pi\mu a}{m} \frac{d \langle x^2 \rangle}{dt} = \frac{2kT}{m}$$

O movimento browniano e a equação de difusão

- A equação anterior é uma equação diferencial ordinária para a variância de x e pode ser facilmente resolvida:

$$\langle x^2 \rangle = Ae^{-\frac{6\pi\mu a}{m}t} + \frac{kT}{3\pi\mu a}t$$

- O primeiro termo é uma exponencial que decresce rapidamente e portanto resta

$$\langle x^2 \rangle = \frac{kT}{3\pi\mu a}t$$

- Este resultado é o mesmo do obtido por Einstein, embora aqui obtido de forma bem distinta.

Para fazer em sala

- Modifique o programa `rwalk.c` e faça o gráfico de $\langle x^2 \rangle$ como função do passo (ou do tempo). Tome a média de 10 trajetórias. O que representa a inclinação do gráfico?