Implementando Algoritmo de Monte Carlo com Paralelismo em C++

Danilo Sanchez Tuzita
(danilo_st@hotmail.com)

I. Resumo

Esse é um trabalho que tem como objetivo implementar os algoritmo de Monte Carlo em *C++* para integração numérica.

II. Introdução

O cálculo numérico de integrais pode ser mais fácil e rápido de se obter um resultado do que calcular de forma analítica. Porém deve-se levar em conta que esse cálculo não será completamente preciso.

III. Teoria

Para o entendimento desse trabalho é necessário conhecimentos básico de cálculo.

IV. Proposta e Implementação

O Método de Monte Carlo utiliza de números aleatórios e chance para calcular uma integral. É tirado várias amostras em pontos aleatórios da função dentro do intervalo que se quer integrar a função e calculado a média das amostras, como demonstra a fórmula 1, onde n é a quantidade de "chutes" e x_i um valor aleatório no intervalo $[a, b]$.

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

Uma das desvantagens desse algorítimo é que é muito dependente da função que se quer integrar, se essa não for "bem comportada" é possível que a média se desvie drasticamente pois por chance foi escolhido um x_i num pico ou vale da função, fazendo com que o resultado não seja tão próximo ao valor real. Porém isso pode ser combatido aumentando o valor de n.

O Método de Monte Carlo, também pode calcular integrais multidimensionais, porém, diferentemente das integrações unidimensionais, é preciso de uma função auxiliar g que retornará se as coordenadas passadas estão dentro ou não da função.

Por exemplo, considerando que se quer calcular o valor de π, teremos a função g demonstrada pela fórmula 2, calculamos a aproximação de π utilizando a fórmula 3.

$$g(x,y) = \begin{cases} 1, & \text{se } x^2+y^2 \leq 1 \\ 0, & \text{caso contrario} \end{cases} \tag{2}$$

$$\int_a^b \int_c^d f(x,y)\,dx\,dy \approx (b-a) \times (d-c) \times \frac{1}{n} \times \sum_{i=1}^{n} g(x_i, y_i) \tag{3}$$

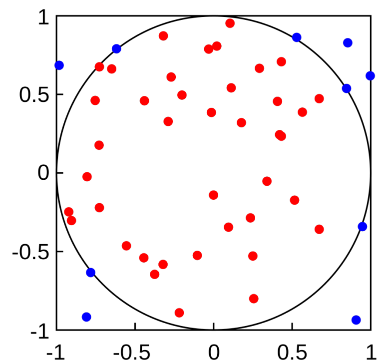

Fig. 1. Representação do Método Monte Carlo para cálculo de pi. Fonte: Wikipédia

Esse cálculo pode ser representado pela figura 1, onde os pontos vermelhos indicam que as coordenadas aleatórias geradas estão dentro da área de interesse. Com essas amostras é calculado a proporção de quantas das coordenadas caíram dentro da área do circulo vezes a área total do domínio de teste.

V. Resultados

Para testar o Método proposto, foi calculado a integral de duas funções e o volume de uma intersecção entre um toroide e um cubo. Cada experimento consiste do cálculo de cada integral para iterações $n = \{10^2 - 10^8\}$.

A. Experimento 1

As funções calculadas com o método de Monte Carlo foram as seguintes integrais 4 e 5:

$$\int_0^1 \frac{4}{1+x^2}\,dx \tag{4}$$

$$\int_0^1 \sqrt{x+\sqrt{x}}\,dx \tag{5}$$

1) a: A tabela I demonstra os resultados obtidos para o calculo da integral 4. Nota-se que quanto mais iterações o resultado mais se aproxima de π, o resultado analítico dessa integral.

TABLE I
RESULTADOS EXPERIMENTO 1A

Experimento 1a.	
Iterações	**Resultado**
100	3.062506
1000	3.129705
10000	3.143852
100000	3.143789
1000000	3.141701
10000000	3.141583
100000000	3.141569

TABLE II
RESULTADOS EXPERIMENTO 1B

Experimento 1b.	
Iterações	**Resultado**
100	1.035658
1000	1.034073
10000	1.045930
100000	1.044759
1000000	1.045265
10000000	1.045237
100000000	1.045275

2) b: A tabela II demonstra os resultados obtidos para o calculo da integral 5. Diferentemente do Experimento 1a. o cálculo dessa integral de modo geral, com apenas 100 iterações, já se aproxima consideravelmente do resultado final. Isso de deve ao fato dessa função ser mais "comportada" do que a função do experimento anterior.

B. Experimento 2

Para o cálculo do volume da intersecção de um toroide com um cubo, foi dado a fórmula 6 e a figura 2. Com isso podemos descobrir que o cálculo do volume da intersecção pedida pode ser descrita pela fórmula 7.

$$g(x,y,z) = \begin{cases} 1, & \text{se } z^2 \times \left(\sqrt{x^2+y^2}-3\right) \leq 1 \\ 0, & \text{caso contrario} \end{cases} \tag{6}$$

$$\int_{-1}^{1}\int_{-3}^{4}\int_{1}^{4} f(x,y,y)\,dx\,dy\,dz \approx (4-1)\times(4-(-3))\times(1-(-1))\times\frac{1}{n}\times\sum_{i=1}^{n} g(x_i,y_i,z_i) \tag{7}$$

TABLE III
RESULTADOS EXPERIMENTO 2

Experimento 2.	
Iterações	**Resultado**
100	22.680000
1000	21.672000
10000	22.822800
100000	22.044120
1000000	22.084272
10000000	22.118292
100000000	22.094325

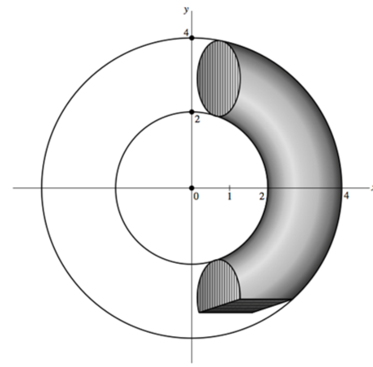

Fig. 2. Representação da intersecção do toroide e cubo a ser calculado

Os resultados desse experimento são demonstrados na Tabela III, para esse experimento nota-se que é necessário uma quantidade razoavelmente maior de iterações para se ter uma boa acurácia, se comparado aos experimentos anteriores. Isso se deve ao fato de ser uma integral de uma função multidimensional e seu domínio de onde pode ser amostrado valores é também significativamente maior do que o nos experimentos anteriores.

VI. CONCLUSÃO

A utilização de métodos de integração numérica pode ser muito útil quando é difícil calcular a integral analiticamente especialmente o calculo de integrais em múltiplas dimensões.

O Método de Monte Carlo resolve esse problema atingindo uma precisão razoável a um baixo custo computacional.