Metodo de Monte Carlo e espaço de fase

8 de Agosto de 2020

Daniel Kenzo dos Santos 145773

1 Resumo

Método de Monte Carlo (ou MMC) se baseia em amostragens aleatórias para por exemplo extrair informações ou fazer simulações numéricas sobre um dado sistema. Sua utilidade é bem ampla em campos como mecânica estatística, finanças e biologia. Nas próximas páginas vamos ver algumas de suas utilidades dentro do estudo de ensemble canônico, em especial em espaços de fase de osciladores harmonicos.
Tambem vamos acompanhar cada seçao com um programa escrito no Wolfram Mathematica ilustrando o algoritmo usado para os calculos.

2 Introduçao

O método de Monte Carlo usa de números aleatórios dentro de um algoritmo estocástico para resolver problemas. O exemplo clássico deste método calcula o número Pi ao usar um círculo inscrito em um quadrado tal que o círculo toca as laterais do quadrado. Sorteamos entao pontos dentro deste quadrado e contamos quantos destes pontos estão também dentro do círculo.

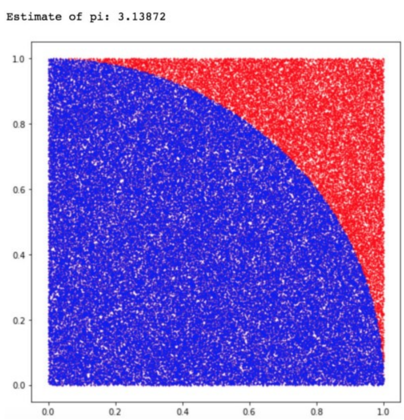

Figura 1: Visualização dos pontos dentro dos alvos no primeiro quadrante.Retirado da ref 1

Se o sorteio de pontos for realmente aleatório, o número de pontos em uma região deve ser proporcional a área desta mesma região. Apenas como exemplo vamos tomar o quadrado de lado 2 e o círculo de raio 1. A razão entre suas áreas é:

$Aq = l^2$
$Ac = \pi r^2$
Ac/Aq $=\pi r^2/l^2 = \pi/4$

Ou seja, se compararmos com a razão dos pontos:

4*Pontos dentro do círculo/Pontos dentro do quadrado $= \pi$

É possível fazer este mesmo algoritmo no Wolfram Mathematica como ilustrado na figura 2:

```
In[93]:= (*calcular π*)
Clear[M]
apaga
NN = 10000; (*numero de pontos*)
M = 0;
X = RandomReal[1, NN];
    real aleatório
Y = RandomReal[1, NN];
    real aleatório
Do[
repete
 If[(X^2 + Y^2)[[i]] ≤ 1, M = M + 1] (*verificamos se esta dentro do circulo*)
 se
 , {i, 1, NN}]
(4 M / NN) // N(*valor estimado de π*)
              valor numérico
Out[98]= 3.1424
```

Figura 2: Codigo em Wolfram Mathematica para o calculo de pi com 10000 pontos

Que imprime o valor estimado de pi de 3.1424. Valores arbitrariamente mais próximos do valor real podem ser alcançados se simplesmente usarmos um número maior de pontos. O algoritmo é apenas uma traduçao para o Wolfram Mathematica do experimento das agulhas de Buffon (do naturalista frances Georges de Buffon), onde agulhas eram aleatoriamente lançadas sobre uma superficie marcada com linhas paralelas, tambem projetado para calcular uma estimativa de π.

Neste projeto vamos resolver um problema em mecânica estatística usando este método. Podemos calcular o volume do espaço de fase de um oscilador harmônico em 1 e 3 dimensões, o qual é essencial na fisica estatistica.

3 Espaço de fase e Oscilador Harmonico

Primeiro vamos introduzir a noção de espaço de fase. Para um sistema clássico, o microestado do sistema pode ser representado como um ponto em um espaço 6N dimensional (3 coordenadas de posição e 3 de momento) ,onde N é o número de partículas, digamos (pi,qi).

Nem todas as combinaçoes de (pi,qi) sao permitidas e por isso visualizar o espaço de fase por ser crucial para entender o problema .A noçao de espaço de fase é bastante importante por exemplo no ensemble canonico pois ela é chave para calcular a funçao de partiçao Z. Dessa funçao de partiçao Z é possivel deduzir muitas propriedades importantes em um dado sistema, como a entropia, a temperatura e a energia livre. Porem a utilidade de Z nao vai ser explorada neste trabalho. Vamos ao inves disso apenas nos concentrar em achar o tamanho do espaço de fase.

Para um oscilador harmônico em uma dimensão, temos

H(p,q)$=p^2/2m + Kq^2/2$

Onde m é a massa da partícula e K é a constante do oscilador O espaço de fase do oscilador harmônico é o espaço englobado por 2 elipses como na figura a seguir

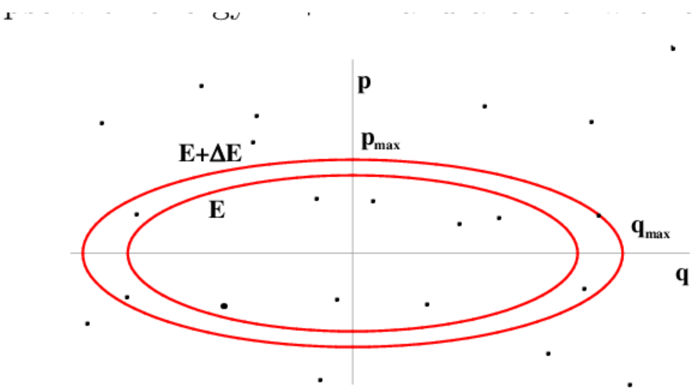

Figura 3: Visualização do espaço de fase de um oscilador harmonico

Lembrando que esta área não é medida em ”$distncia$”^{2}mas em “distância”x”momento” Temos que para uma energia E fixa, definimos uma hipersuperfície:

H(p,q)=$p^2/2m + Kq^2/2 = cte$

Os semi-eixos da elipse determinada por esta equação são: a=2mE e b=2K/E com frequência do oscilador =K/M

Para aplicar o método de monte carlo a um problema desses a estratégia é bem similar ao do cálculo de Pi. Vamos definir uma região com a área que queremos calcular é uma área que a engloba na qual sabemos seu valor devido a calculos analiticos. Em seguida sorteamos diversos pontos dentro desta área maior e contamos quantos pontos caíram dentro da área menor.

Observamos que se A é a área do espaço total , Δé o espaço de fase desejado e R a razão de pontos obtidos do método de Monte Carlo(pontos em A dividido pelos pontos em Δ):

$$\Delta\omega = \int_{E \leq H(q,p) \leq E+\Delta E} dq\, dp = \int_{E \leq H(q,p) \leq E+\Delta E} d\omega$$

Figura 4: Tamanho analitico do espaço de fase;retirado da bibliografia 3(eq5.6)

A/Δ =R ; implica Δ=A/R

Digamos que para este exemplo nossa “área maior” seja um retângulo com lados paralelos aos eixos e de lados 10 ”Kg.m/s” e “10 metros”, que nos dá 100 ı$Kg.m^2/s$ȷ de área. Vamos sugerir também que a massa e a frequência de oscilação do oscilador ambas valem 1 em suas devidas unidades. A área entre as elipses é analiticamente calculada da seguinte forma: Aqui “a” e “b” são os semi-eixos da elipse maior e “a’” e “b’” são os semi eixos da elipse menor.
Δ=$\pi * (a * b) - \pi * (a' * b') = 2\pi E$

Também podemos construir esse algoritmo no Wolfram Mathematica usando a mesma estrategia do calculo de pi. Aqui fizemos com que E=1 (energia entre 9 e 10), pela formula anterior, esperamos um valor de:6,28319...

O valor resultante desse algoritmo em uma das tentativas foi de 6.32 (para 10^5) e 6.2844(se substituirmos N por 10^6), que sao valores bem proximos ao resultado analitico e quanto mais pontos sao usados mais perto do

```
In[99]:= (*Oscilador Harmonico 1d*)
Clear[M, NN, Ω, p, q, m, w, R]
apaga
m = 1; (*massa*)
En = 10; (*E+ΔE*)
E0 = 9; (*E*)
w = 1; (*frequencia do oscilador*)
NN = 100000; (*numero de pontos*)
M = 0; (*variavel contadora*)
Lp = 5;
Lq = 5;
p = RandomReal[{-Lp, Lp}, NN]; (*sorteia valores para o momento*)
    real aleatório
q = RandomReal[{-Lq, Lq}, NN]; (*sorteia valores para posiçao*)
    real aleatório
Do[If[(p[[i]])^2/2m + m w^2*q[[i]]^2/2 ≤ En && (p[[i]])^2/2m + m w^2*q[[i]]^2/2 >= E0, (*verifica a energia por(p,q)*)
r··· se
  M = M + 1;]
 , {i, 1, NN}];
R = (NN / M) // N
                 valor numérico

Ω = (4 Lp*Lq / R) // N(*tamanho estimado do espaço de fase acessivel*)
                      valor numérico

Out[107]= 15.8228

Out[108]= 6.32
```

Figura 5: Codigo em Wolfram Mathematica para o calculo do espaço de fase para um oscilador harmonico 1d

resultado analitico chegamos.

Para um oscilador em 3 dimensões um algoritmo similar pode ser feito. Aqui temos apenas que levar em conta que a posição e o momento são representados com 3 coordenadas cada.
Definimos a largura de cada coordenada e cada momento como a mesma do exemplo anterior (entre -5 e +5 cada) e usamos

Desta vez obtemos o valor: 2,4

Neste tipo de problema, o que define o formato do espaço de fase é a hamiltoniana do sistema, que neste caso nos deu uma elipse, porem outras hamiltonianas podem nos dar formas diferentes. Por exemplo, em um gas ultrarelativistico o hamiltoniano depende apenas da soma dos modulos do momento de cada particula. Pressupomos ate aqui que a funçao "RandomReal"é um gerador de numeros aleatorios uniforme (o que aqui apenas significa que o gerador de numeros aleatorios é confiavel)

4 Conclusao

O método de monte carlo tem muitas aplicações e não seria possível explorar a todas elas aqui. Nossa aplicação foi uma pequena extensão a técnica original de se calcular pi e pode ser bem valiosa se nenhum metodo analitico conseguir obter o tamanho do espaço de fase. Apesar destas vantagens o metodo é bem custoso em termos de tempo de processamento devido ao numero gigantesco de pontos que podem ser necessarios para obter a precisão desejada.

```
(*Oscilador Harmonico 3d*)
Clear[M, NN, Ω, p, q, m, w, Z, R, Lpx, Lpy, Lpz, Lqx, Lqy, Lqz]
apaga
m = 1; (*massa*)
En = 10; (*E+ΔE*)
E0 = 8; (*E*)
w = 1; (*frequencia do oscilador*)
NN = 1000; (*numero de pontos*)
M = 0;
Lpx = 5;
Lpy = 5;
Lpz = 5;
Lqx = 5;
Lqy = 5;
Lqz = 5;
p = {RandomReal[{-Lpx, Lpx}, NN], RandomReal[{-Lpy, Lpy}, NN], RandomReal[{-Lpz, Lpz}, NN]}; (*sorteia os momentos em cada eixo*)
     real aleatório                real aleatório                real aleatório
q = {RandomReal[{-Lqx, Lqx}, NN], RandomReal[{-Lqy, Lqy}, NN], RandomReal[{-Lqz, Lqz}, NN]}; (*sorteia as posiçoes em cada eixo*)
     real aleatório                real aleatório                real aleatório

Do[
repete

  Dp = (p[[1, i]]^2 + p[[2, i]]^2 + p[[3, i]]^2)^0.5; (*"p^2"*)
  Dq = (q[[1, i]]^2 + q[[2, i]]^2 + q[[3, i]]^2)^0.5; (*"q^2"*)

  If[(Dp^2 / 2m + m w^2 * Dq^2 / 2 ≤ En) && (Dp^2 / 2m + m w^2 * Dq^2 / 2 >= E0),
  se
   M = M + 1;]

  , {i, 1, NN}];
R = M / NN

Ω = 4 Lp * Lq * R // N(*valor estimado para o tamanho do espaço de fase acessivel*)
                     valor numérico

3
---
125

2.4
```

Figura 6: Codigo em Wolfram Mathematica para o calculo do espaço de fase para um oscilador harmonico 3d

5 Bibliografia

1-https://towardsdatascience.com/an-overview-of-monte-carlo-methods-675384eb1694
2-https://www.researchgate.net/figure/The-accessible-area-of-phase-space-of-a-one-dimensional-Harmonic-oscillator-is-the-area$_{f}ig3_{2}$42495758
$3 - ThermodynamicsandStatisticalMechanics(Greiner, Neise, Stocker)$
$4 - FundamentalsofStatisticalandThermalPhysics(F.Reif)$