Introdução a Métodos Computacionais em Física
Módulo 6

Leonardo Cabral

26 de Setembro de 2019

Algumas aplicações do Método de Monte Carlo:

- Computo de integrais definidas.
- Simulações de sistemas estatísticos.
  - *Ensemble* microcanônico: algoritmo do demônio.
  - *Ensemble* canônico: algoritmo do Metropolis.

Mais informações sobre este assunto podem ser encontradas em:

- H. Gould, J. Tobochnik and W. Christian, "An Introduction to Computer Simulations Methods: Applications to Physical systems", 3rd Ed, Capítulos 11 e 15.
- W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling and B. P. Flannery, *Numerical Recipes in C: The Art of Scientific Computing*, 2nd Ed., Cap. 4 Cambridge University Press, 1992.

UFPE

DF-UFPE

Métodos numéricos de integração discretizam $x \in [a,\, b]$ em N intervalos Δx_j de modo que

$$I = \int_a^b f(x)dx \approx \sum_{j=0}^{N-1} f(x_j)\Delta x_j .$$

Métodos com intervalos uniformes Δx (trapezoidal, Simpson, Romberg) utilizam alguma aproximação para a função em $x_j \leq x \leq x_{j+1}$ de modo que

$$I \approx \Delta x \sum_{j=0}^{N-1} c_j f(x_j),$$

onde c_j depende do método escolhido.
Métodos mais sofisticados (quadraturas gaussianas) utilizam polinômios ortogonais para discretizar x não uniformemente, resultando em algo do tipo

$$I \approx \sum_{j=0}^{N-1} w_j f(x_j).$$

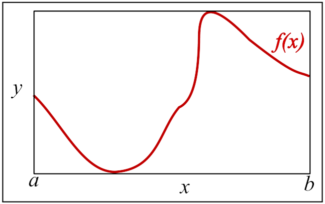
onde os 'pesos' w_j dependem da função a ser integrada e do polinômio utilizado.

Métodos padrões de integração (mencionados acima):

- São precisos e eficientes para integrais unidimensionais.
- Erro no método (para N pontos de integração): $N^{-a/D}$, onde N^{-a} é o erro associado à integração em uma dimensão $D = 1$.
- Proibitivos para integrais multidimensionais em que $D \gg 1$.

Métodos de Monte Carlo para integração:

- Requerem a obtenção de números aleatórios.
- Eficientes para integrais multidimensionais em que $D \gg 1$ em relação aos métodos convencionais.
- Erro para N pontos de integração: $N^{-1/2}$ independentemente do número de dimensões D.



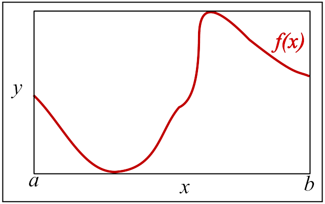
Exemplo simples em 1-D.

Método *hit or miss* (acerte ou erre)

- Inscreva a função $f(x)$ e o intervalo de integração $[a,\, b]$ em um retângulo $(b-a)\times h$, onde $h = |\max f - \min f|$.
- Calcule N pares de números aleatórios $(x_i,\, y_i)$ uniformemente distribuídos, onde $x_i \in [a,\, b]$ e $y_i \in [\min f,\, \max f]$.
- Resultado da integração é aproximado por

$$I_N = \frac{N_s}{N} A$$

onde N_s é o número de pontos aleatórios dentro da área sob a curva e $A = (b-a)h$.



Exemplo simples em 1-D.

Método da média amostral

- Teorema do valor médio em cálculo diz que

$$I = \int_a^b f(x)dx = (b-a)\langle f \rangle, \qquad \text{onde } \langle f \rangle \equiv \text{média de f(x) em } [a,\, b]$$

- Escolha N números aleatórios x_i em $[a,\, b]$ com distribuição uniforme, de modo que

$$I = (b-a)\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} f(x_i), \qquad \text{onde } \langle f \rangle = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} f(x_i)$$

Volume V_D envolvido por uma hipersuperfície fechada S_D em D dimensões. Neste caso, deve-se calcular

$$I = \int_{V*} f(\vec{r}) d^D r, \qquad \text{onde } f(\vec{r}) = \begin{cases} 1, & \text{se } \vec{r} \text{ dentro de } S_D \\ 0, & \text{caso contrário} \end{cases}$$

e V^* é um hipervolume que engloba toda a hipersuperfície S_D. Para isto:

- Considere um hipercubo de dimensão D e arestas $a_j \leq x_j \leq b_j$, onde $[a_j, b_j]$ são os intervalos que englobam a região V_D na direção $j = 1, 2, \ldots, D$.
- Obtenha N números aleatórios $\mathbf{r}_k = (x_{1,k}, x_{2,k}, \ldots, x_{D,k})$ com distribuição uniforme dentro do hipercubo.
- A estimativa do volume V_D é dada por

$$V_D = \frac{N_{\text{in}}}{N} V^*$$

onde V^* é o volume do hipercubo e N_{in} é o número de vezes em que $\vec{r}_k$, $(k = 1, \ldots, N)$, estiver dentro de S_D.

Elabore um relatório em `pdf` contendo seus resultados referentes ao itens abaixo. Faça gráficos para mostrar seus resultados quando necessário.

1. Elabore um programa para calcular o volume de uma hiperesfera em D dimensões de raio 1.
2. Considere $D = 2, 3, \ldots, 7$. Para cada valor de D:
   - 2.1 Estime o hipervolume V_D^{num} dentro de cada hiperesfera para diferentes N (quantidade de números aleatórios gerados). Considere $N = 10, 100, 1000, \ldots, 1000000, \ldots$, por exemplo.
   - 2.2 Calcule o erro na integração numérica em função de N, i.e., $\Delta V_D = \left| V_D^{\text{ex}} - V_D^{\text{num}} \right|$.
   - 2.3 Faça gráficos de V_D^{num} e de ΔV_D em função de N para cada D. Verifique se ΔV_D depende de V como esperado.
3. Agora, tome N não menor do que 10^6 e faça um gráfico de V_D^{num} em função de D, onde ΔV_D é a barra de erro em V_D. Também inclua V_D^{ex} versus D no gráfico. Verifique se seus resultados estão consistentes com os esperados.

Obs: O hipervolume exato de uma esfera D-dimensional de raio R é $V^{\text{ex}} = \dfrac{2\pi^{D/2}}{\Gamma(D/2)} \dfrac{R^D}{D}$.