

Métodos de Monte Carlo

Métodos de Monte Carlo — Integração numérica

A denominação "Métodos de Monte Carlo" aplica-se a todos os algoritmos que usam sequências de números aleatórios para obter soluções numéricas aproximadas de diversos tipos de problemas.

Os métodos de Monte Carlo são utilizados em várias áreas da física, química, matemática, finanças, etc. Uma das principais classes de aplicações é a simulação molecular em física estatística, sendo uma das duas abordagens mais comuns a esses problemas (a outra é a dinâmica molecular).

Aqui vamos usar métodos de Monte Carlo para calcular o valor de integrais definidos e para estimar a magnetização de um sistema usando o modelo de *Ising*.

Métodos tradicionais de integração numérica

Os métodos usados habitualmente para calcular numericamente integrais a uma dimensão baseiam-se na divisão do domínio de integração (entre $x = a$ e $x = b$) em N intervalos iguais. A função $f(x)$ a integrar é depois calculada em todos os pontos

$$x_k = a + kh$$

com

$$h = \frac{b - a}{N}, \quad k = 0, 1, 2, \dots, N$$

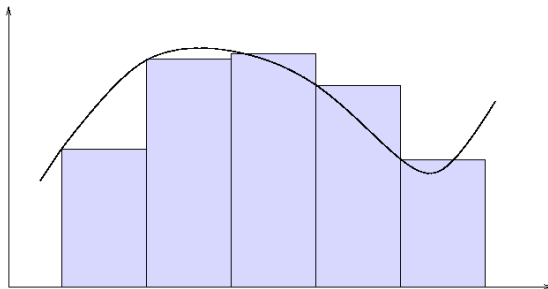
Diferentes métodos usam diferentes maneiras de calcular, a partir dos valores $f(x_k)$, uma estimativa do integral

$$I = \int_a^b f(x) dx$$

Métodos tradicionais de integração numérica

Regra dos retângulos

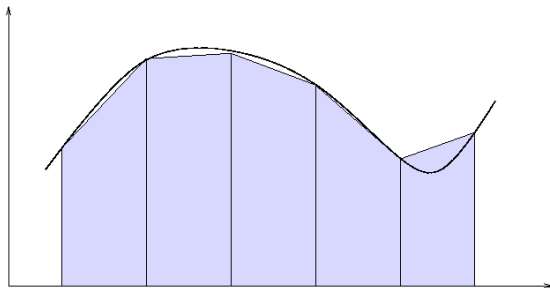
$$I = \sum_{k=0}^{N-1} f(x_k)h$$



Métodos tradicionais de integração numérica

Regra dos trapézios

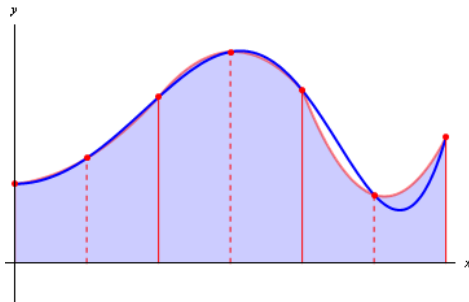
$$I = \left[\frac{1}{2}f(x_0) + \sum_{k=1}^{N-1} f(x_k) + \frac{1}{2}f(x_N) \right] h$$



Métodos tradicionais de integração numérica

Regra de Simpson

$$I = \frac{1}{3} \left[f(x_0) + 4f(x_1) + 2f(x_2) + 4f(x_3) + \dots + 2f(x_{N-2}) + 4f(x_{N-1}) + f(x_N) \right] h$$



Métodos tradicionais de integração numérica

Expandindo a função em série de Taylor, verifica-se que, para integrais a uma dimensão, os erros totais dos 3 métodos apresentados acima são, respetivamente, de ordens $O(h)$, $O(h^2)$ e $O(h^4)$, ou seja, $O(N^{-1})$, $O(N^{-2})$ e $O(N^{-4})$.

A ordem do erro das estimativas de integrais d -dimensionais tem a mesma dependência com h . No entanto, o número de pontos cresce com o decréscimo de h da forma $N = h^{-d}$. Assim, os métodos de ordem $O(h)$, $O(h^2)$ e $O(h^4)$ são de ordem $O(N^{-1/d})$, $O(N^{-2/d})$ e $O(N^{-4/d})$.

Para garantir a precisão das estimativas de integrais multidimensionais, é necessário um aumento significativo do número de pontos onde se calcula a função.

Métodos de Monte Carlo — Integração numérica

Iremos ver mais tarde que os métodos de Monte Carlo para cálculo de integrais definidos se tornam melhores que os métodos convencionais para integrais multi-dimensionais.

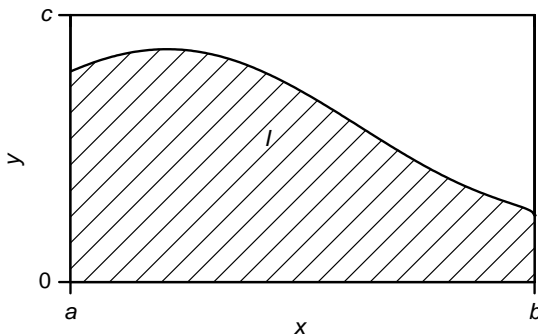
Vamos mostrar duas maneiras de usar números aleatórios para determinar o integral

$$I = \int_a^b y(x) dx$$

Métodos de Monte Carlo — Integração numérica I

Vamos assumir que, no domínio de integração $[a, b]$, $y(x)$ é sempre positivo e inferior a um dado valor c .

- A área do retângulo da figura é $A_0 = c \cdot (b - a)$.
- O integral I é uma fração da área do retângulo, i.e., $I = f A_0$.



Métodos de Monte Carlo — Integração numérica I

O algoritmo deste segundo método é:

- 1 Gera-se um conjunto $\{x_i\}$ de N números (pseudo-)aleatórios com uma distribuição de probabilidades uniforme entre a e b e um conjunto $\{y_i\}$ de N números (pseudo-)aleatórios com uma distribuição de probabilidades uniforme entre 0 e c . Obtemos um conjunto de N pontos com coordenadas (x_i, y_i) .
- 2 Conta-se o número de pontos N_I desse conjunto que se encontram na zona tracejada.
- 3 Uma estimativa para f é N_I/N , então a estimativa numérica do integral é:

$$I = \frac{N_I}{N} \cdot c \cdot (b - a)$$

Métodos de Monte Carlo — Integração numérica II

Se soubermos o valor médio $\langle y \rangle$ de $y(x)$ no domínio de integração $[a, b]$, é imediato obter o valor do integral:

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

O algoritmo é:

- 1 Gera-se um conjunto $\{x_i\}$ de N números (pseudo-)aleatórios com uma distribuição de probabilidades uniforme entre a e b .
- 2 Calcula-se os valores $\{y(x_i)\}$.
- 3 Calcula-se a estimativa numérica do integral:

$$I = (b - a) \cdot \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N y(x_i)$$

Teorema do valor médio para integrais

Existe um c entre a e b tal que

$$\int_a^b f(x)dx = f(c)(b-a), \quad a \leq c \leq b$$

Prova:

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x)dx &= \lim_{m \rightarrow \infty} \sum_{i=1}^m f(x_i)(x_{i+1} - x_i) = \lim_{m \rightarrow \infty} \sum_{i=1}^m f(x_i) \frac{b-a}{m} = \\ &= \lim_{m \rightarrow \infty} \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m f(x_i)(b-a) = \lim_{m \rightarrow \infty} \langle f_i \rangle (b-a) \end{aligned}$$

Erro do método de Monte Carlo

Para um dado valor de N , o erro do método de integração numérica de Monte Carlo é diferente para duas repetições do cálculo, com números aleatórios diferentes.

Contudo, se fizermos várias simulações independentes para cada N , verificamos que, **em média**, o valor absoluto do erro é proporcional a $N^{-1/2}$.

Podemos levantar duas questões:

- Porquê essa dependência?
- Podemos saber a constante de proporcionalidade?

Dado que a estimativa do integral resulta de uma média, vamos analisar alguns conceitos estatísticos, em particular, o erro média quando esta é estimada usando uma amostra da população.

Variância — Conceito estatístico

Variância da amostra

$$\tilde{\sigma}^2 = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N \left[y_i - \langle y \rangle \right]^2$$

onde

$$\langle y \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N y_i$$

Para $N \gg 1$, a variância da amostra é aproximadamente igual à variância da população.

Variância da população

$$\sigma^2 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left[y_i - \langle y \rangle \right]^2 = \langle y^2 \rangle - \langle y \rangle^2$$

Desvio padrão e erro da média

O desvio padrão da amostra ou da população é dado pela raiz quadrada da variância

$$\sigma = \sqrt{\sigma^2}$$

A média da população é estimada pela média da amostra. A esta estimativa está associado um desvio padrão, usualmente designado de erro da média, dado por:

Erro da média

$$\sigma_m = \frac{\sigma}{\sqrt{N-1}} \approx \frac{\sigma}{\sqrt{N}}$$

Erro do Método de Monte Carlo

No método de Monte Carlo, I é calculado como uma média, o erro que lhe está associado é o erro da média. O erro do integral I do slide 9 é:

$$\text{erro}(I) = |b - a| \frac{\sigma_y}{\sqrt{N}}$$

onde σ_y é o desvio padrão das amostras de $y(x)$ e N é o tamanho das amostras.

Para integrais multidimensionais temos

$$\text{erro}(I) = V_D \frac{\sigma_y}{\sqrt{N}},$$

onde V_D é o volume multidimensional do domínio de integração.

Erro do método de Monte Carlo - explicação qualitativa

Para tentar perceber melhor porque o erro é proporcional a σ_y , vamos considerar dois casos limite.

- Vamos supor que a função a integrar é uma constante C em todo o intervalo $x \in [a, b]$. Como queremos determinar o valor médio da função dentro do intervalo, qualquer cálculo da função, para qualquer ponto, vai dar o valor exato: o erro é nulo para qualquer valor de N .
- Suponhamos agora uma segunda função com o mesmo valor médio que a primeira, mas que tem um valor muito pequeno na maior parte do intervalo e um pico muito alto e estreito centrado num valor x_0 . É fácil de perceber que o erro do método de Monte Carlo vai ser muito elevado.
- A diferença significativa entre os dois casos é que dado um conjunto de N números aleatórios $\{x_k\}$, uniformemente distribuídos entre a e b , a amostra de valores $\{y_k\}$ vai ter um desvio padrão nulo no primeiro caso e um desvio padrão muito grande no segundo.

Comparação dos erros dos métodos tradicionais e de Monte Carlo

A discussão dos últimos slides não depende de todo do número d de dimensões do integral. Quer dizer que, ao contrário dos métodos tradicionais, o aumento do d não altera a forma da dependência com N . Assim, os métodos de Monte Carlo para cálculo de integrais definidos tornam-se melhores que os métodos convencionais para integrais multi-dimensionais (o que acontece, na prática, logo a partir de valores de d de 5 ou 6).

Se quisermos diminuir o erro de uma estimativa, temos que aumentar o número de pontos ou diminuir a variância. Para atingir o segundo objetivo, usa-se uma distribuição não uniforme de números aleatórios — amostragem por importância.

Modelo de Ising

Consideremos um sistema bidimensional de N spins que se encontram nos locais de uma rede quadrada. Cada spin é descrito por um número quântico S que pode tomar apenas os valores -1 e $+1$. A interação entre os spins é descrita pelo modelo de Ising: a energia de uma dada configuração α do sistema é dada por uma soma sobre todos os pares de vizinhos próximos:

$$E(\alpha) = - \sum_{\langle i,j \rangle} J S_i S_j,$$

onde $J > 0$. No trabalho prático vamos usar unidades reduzidas de energia, de tal maneira que $J = 1$:

$$E^*(\alpha) = - \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j,$$

Modelo de Ising

Se o sistema está em contato térmico com um reservatório de calor a uma temperatura T , a probabilidade de uma dada configuração α é dada por:

$$P(\alpha) = \frac{e^{-\beta E(\alpha)}}{Z},$$

onde $\beta = 1/(k_B T)$ e Z é a função de partição (soma dos fatores de Boltzmann de todas as 2^N possíveis configurações).

Usando unidades reduzidas de temperatura, vem

$$P(\alpha) = \frac{e^{-E^*(\alpha)/T^*}}{Z}.$$

Magnetização

Uma medida macroscópica como a magnetização M corresponde à média das magnetizações de todas as configurações possíveis que podem ocorrer durante o intervalo de medida.

Teoricamente todas as configurações são possíveis mas com diferentes probabilidades. Poderíamos então determinar a magnetização como

$$M = \sum_{\alpha} M_{\alpha} P_{\alpha}$$

onde P_{α} é a probabilidade da configuração α e M_{α} a respetiva magnetização dada por

$$M_{\alpha} = \sum_j S_j$$

As várias configurações que poderão ocorrer durante uma medição devem-se a alterações de orientação de alguns spins devido a trocas de energia com o reservatório de calor.

Método de Monte Carlo aplicado ao modelo de Ising

Algoritmo de Metropolis

O método de Monte Carlo aplicado ao modelo de Ising simula as alterações de orientação dos spins mencionadas acima.

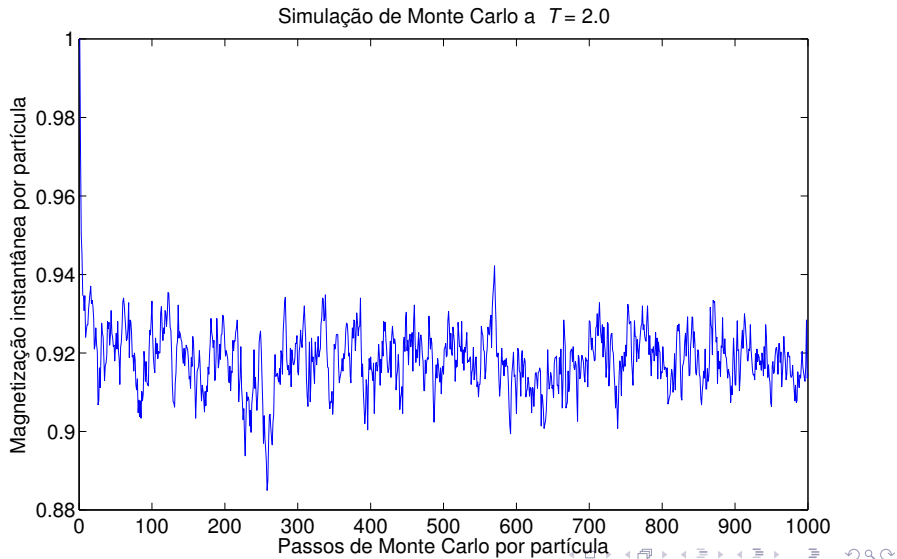
- O sistema inicial está numa configuração qualquer.
- É escolhido um spin e avalia-se variação da energia do sistema se a sua orientação for alterada.
 - ▶ Se a a variação de energia ΔE^* é negativa - a orientação é alterada.
 - ▶ Se a variação de energia é positiva - a orientação é alterada se $\exp(-\Delta E^*/T^*)$ for maior que um número entre 0 e 1 gerado aleatoriamente (supondo distribuição uniforme), e não é alterada no caso contrário.

Algoritmo de metropolis (continuação)

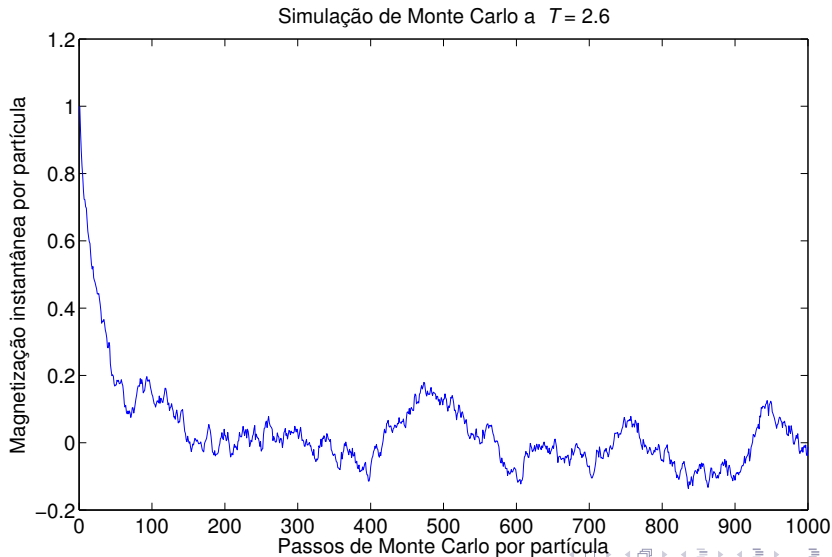
- O último procedimento é repetido um número grande de vezes.
- A magnetização é calculada como a média das magnetizações de um número grande de configurações após ter sido atingido o 'equilíbrio térmico'.

Pode-se provar que este procedimento simula a evolução de um sistema em equilíbrio térmico.

Modelo de Ising — Ferromagnetismo



Modelo de Ising — Paramagnetismo



Modelo de Ising — Transição de fase

