

Metodo Montecarlo

Mario Ambrosino

06 Luglio 2018

Indice

1	Teoria	2
1.1	Integrazione Montecarlo	2
1.1.1	Algoritmo di Metropolis	3

Capitolo 1

Teoria

1.1 Integrazione Montecarlo

Vogliamo valutare il valore numerico dell'integrale

$$S = \int_0^1 f(x) dx$$

Dividiamo in modo equispaziato la regione $[0, 1]$ in M intervalli con $x_0 = 0$ e $x_M = 1$. L'integrale può essere approssimato come

$$S = \int_0^1 f(x) dx \approx \frac{1}{M} \sum_{n=1}^M f(x_n) + \mathcal{O}(h^2)$$

che equivale ad effettuare un campionamento in modo uniforme con peso pari a 1 per ogni punti. L'errore sulla valutazione può essere valutato utilizzando la deviazione standard

$$(\Delta S)^2 = \frac{1}{M} (\langle f_n^2 \rangle - \langle f_n \rangle^2)$$

dove con $\langle A_n \rangle$ si intende il valore atteso

$$\langle A_n \rangle = \frac{1}{M} \sum_{n=1}^M A_n$$

Osservazione 1. L'errore ottenuto tramite questo metodo montecarlo è pari a

$$\Delta S \approx \frac{1}{M^{1/2}}$$

che non lo rende efficiente per problemi 1-dim. Tuttavia ciò non è più vero se si utilizzano metodi Monte Carlo per domini multidimensionali con $N \gtrsim 10$ (difatti si nota un vantaggio con il metodo dei trapezi già per $N \geq 4$)

1.1.1 Algoritmo di Metropolis

Consideriamo un caso generale in cui vi sono $3N$ variabili: $\mathbf{R} = (\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n)$ con $i = 1, 2, \dots, N$. L'integrale 3-dimensionale possiamo scriverlo come

$$S = \int_D F(\mathbf{R}) d\mathbf{R}$$

dove D è il dominio dell'integrale.

L'idea di base dell'algoritmo di Metropolis è di sostituire il campionamento uniforme con un campionamento per importanza, tramite una distribuzione non più uniforme.

Consideriamo una funzione di distribuzione $\mathcal{W}(\mathbf{R})$ che mimica le variazioni di $F(\mathbf{R})$. In tal caso si ha

$$S \approx \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M \frac{F(\mathbf{R}_i)}{\mathcal{W}(\mathbf{R}_i)}$$

Riscriviamo infatti l'integrale S tramite la funzione di distribuzione $\mathcal{W}(\mathbf{R})$:

$$S = \int \mathcal{W}(\mathbf{R}) G(\mathbf{R}) d\mathbf{R}$$

dove $\mathcal{W}(\mathbf{R})$ è una funzione positiva e normalizzata (una distribuzione di probabilità). Allora si ha che $G(\mathbf{R}) = F(\mathbf{R}) / \mathcal{W}(\mathbf{R})$.

Una procedura introdotta da Metropolis nel 1953 è estremamente potente nella valutazione dell'integrale multidimensionale definito nell'espressione. La scelta dei punti di campionamento è visto come un processo di Markov. All'equilibrio, i valori della funzione di distribuzione in punti diversi dello spazio delle fasi sono regolati dal principio del bilancio dettagliato.

$$\mathcal{W}(\mathbf{R}) T(\mathbf{R} \mapsto \mathbf{R}') = \mathcal{W}(\mathbf{R}') T(\mathbf{R}' \mapsto \mathbf{R})$$

I punti non sono più campionati casualmente ma seguendo la catena di Markov: la transizione da un punto \mathbf{R} ad un altro punto \mathbf{R}' è accettato se il rapporto tra le probabilità di transizione soddisfa la relazione

$$\frac{T(\mathbf{R} \mapsto \mathbf{R}')}{T(\mathbf{R}' \mapsto \mathbf{R})} = \frac{\mathcal{W}(\mathbf{R}')}{\mathcal{W}(\mathbf{R})} \geq \omega_i$$

Assumiamo di avere scelto in modo casuale una configurazione \mathbf{R}_0 all'interno del dominio D . Viene valutato $\mathcal{W}(\mathbf{R}_0)$. Si ricerca una nuova configurazione \mathbf{R}_1 data da

$$\mathbf{R}_1 = \mathbf{R}_0 + \Delta \mathbf{R}$$

dove $\Delta \mathbf{R}$ è un vettore $3N$ -dimensionale di cui ogni componente ha valore pseudo-casuale generato uniformemente in $[-h, +h]$. Il valore del passo h è determinato dal tasso dei risultati accettati. Il nuovo passo R_1 sarà accettato verificando la condizione sulla probabilità.

Dopo un numero n_1 di passi necessari per inizializzare la catena di Markov prima di entrare nella regione ergodica. Dopo di questa si campiona M volte e si fornisce il risultato numerico nella forma

$$\langle A \rangle \approx \frac{1}{M} \sum_{i=0}^{M-1} A(R_{n_1+n_0i})$$

I dati sono presi con n_0 passi intermedi per evitare correlazioni tra numeri pseudocasuali consecutivamente generati.

Scelta la funzione $f(x) = x^2$, abbiamo che

$$\int_0^1 f(x) dx = \int_0^1 \mathcal{W}(x) g(x) dx$$

Possiamo scegliere $\mathcal{W}(x) = \frac{1}{\mathcal{Z}} (e^{x^2} - 1)$.

La costante di normalizzazione \mathcal{Z} è data da

$$\mathcal{Z} = \int_0^1 (e^{x^2} - 1) dx = 0.46265167$$