Monte Carlo 201711

Tópicos a serem abordados (± em ordem)

PARTE 1

(1) amostragem simples

. análise dos resultados

(2) amostragem por importância

. análise dos resultados

(3) P.E: Cadeias de Markov.

. análise dos resultados

PARTE 2

(1) ALGORITMO DE METROPOLIS

. Ising / LJ

(2) TRANSIÇÕES DE FASE

PARTE 3 : PROJETO OU MC AVANÇADO.

Introdução:

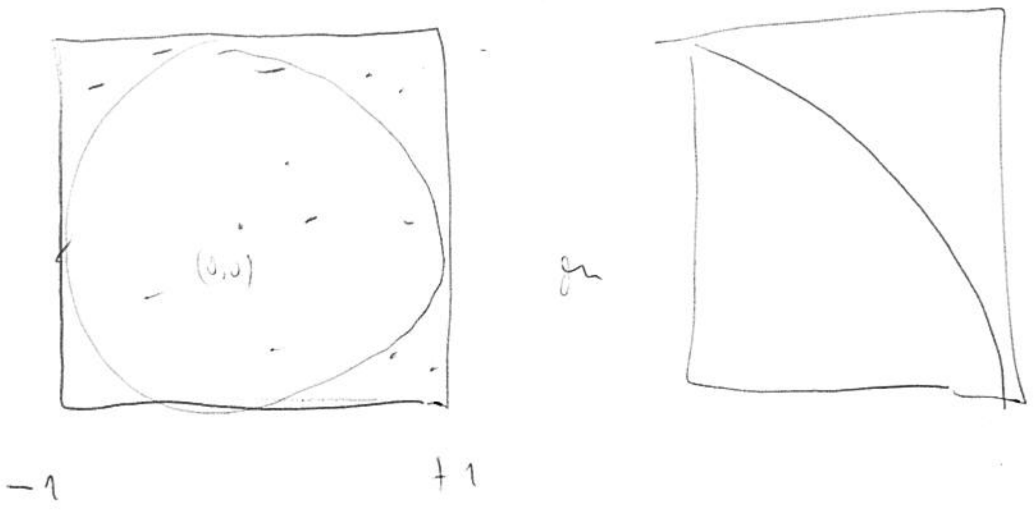
· crianças calculando π ~~[illegible]~~ jogando pedras na areia.

· figura do Knuth. ~~[illegible]~~

~~· figura do Jeferson 12~~

· fazemos ~~como~~ ~~[illegible]~~ uma amostragem direta.
↓
mais simples possível.

todo círculo



1/4 de círculo.

→ Conto o número de vezes que o ponto (x,y) sorteado está "dentro" da curva.

→ tabela #Run N_{hits} π_{est} p/ $N_{trial} = 4000$.

→ histograma N_{hits} p/ $N_{run} = 1000$ aumentar se for pouco ou muito rápido.

MC - 201711

Entendendo os resultados

- posso pensar que cada evento tem como resultado 1 se dentro do círculo e 0 se fora.

- prob. θ de obter 1
- prob. $(1-\theta)$ de obter 0

ξ_i variável de Bernoulli
↳ rand()
↳ gauss()

- o número de acertos N_{hits} tb é uma variável aleatória

$$\xi = \xi_1 + \xi_2 + \dots + \xi_N$$

- ξ_1 tem valor k_1
- ξ_2 tem valor k_2 ... ξ_N tem valor k_N

- prob de obter o conjunto $\{k_1, k_2, \dots, k_N\}$

$$\pi(\{k_1, k_2, \dots, k_N\})$$

MC - 201711

· para variáveis <u>independentes</u>

Π é uma notação infeliz para este exemplo!

$$\Pi(\{k_1, k_2, \ldots, k_N\}) = \Pi(k_1)\,\Pi(k_2)\ldots\Pi(k_N)$$

← prob. indep. fatoram

· os valores possíveis para ξ são $\{0, \ldots, N\}$

com probabilidades $\{\Pi_0, \ldots, \Pi_N\}$

· estou interessado nos conjuntos $\{k_1, \ldots k_N\}$ que resulta em K acertos

$$\underbrace{\Pi_K}_{\substack{N \text{ tentativas} \\ K \text{ acertos}}} = \sum_{\substack{k_1 = 0,1;\ k_2 = 0,1; \\ \ldots,\ k_N = 0,1 \\ k_1 + k_2 + \ldots + k_N = K}} \underbrace{\Pi(k_1, k_2, \ldots, k_N)}_{\Pi(k_1)\,\Pi(k_2)\ldots\Pi(k_N)}$$

· K acertos com prob. θ

· N-K erros com prob. $(1-\theta)$

· preciso contar quantas formas tenho de obter K acertos em N tentativas

$$\Rightarrow \binom{N}{K} = \frac{N!}{K!\,(N-K)!}$$

MC - 201711

$$\pi_K = \binom{N}{K} \theta^K (1-\theta)^{N-K} \qquad (0 \leq K \leq N)$$

(dist. binomial)

→ podemos olhar o algoritmo de cálculo de π com uma amostragem desta dist. binomial com $\theta = \frac{\pi}{4}$

. a dist. binomial não é prática devido ao fator combinatorial (números grandes) (coef.)

~~usamos os eventos~~

. escrever a prob. π' para N+1 tentativas em função da prob. p/ N tentativas:

a tentativa N+1 é independente do que ocorreu antes

$$\underset{\substack{N+1 \text{ tentativas} \\ K \text{ acertos}}}{\pi'_K} = \underset{\substack{N \text{ tent.} \\ K \text{ acerto}}}{\pi_K} \cdot \underset{\text{não acerto}}{(1-\theta)} + \underset{\substack{N \text{ tent} \\ K-1 \text{ acertos}}}{\pi_{K-1}} \cdot \underset{\text{acerto}}{\theta}$$

MC - 2017/1

$\theta = \frac{\pi}{4} \sim 0{,}7854$

$1-\theta \sim 0{,}2146$

1º tentativa $N=1$

$\pi_0 = 1-\theta \sim 0{,}215 \qquad \pi_1 = \theta \sim 0{,}785$

2º tentativa $N=2$

$\pi_0 = (1-\theta)(1-\theta) = (1-\theta)^2 \sim 0{,}0462$

$\pi_1 = (1-\theta)\theta + \theta(1-\theta) = 2\theta(1-\theta) \sim 0{,}3375$

$\pi_2 = \theta^2 \sim 0{,}6162$

$\hookrightarrow \pi_0 + \pi_1 + \pi_2 = (1-\theta)^2 + 2\theta(1-\theta) + \theta^2$

$(\theta + 1 - \theta)^2 \to \underline{\underline{1}}$

3º tentativa $N=3$

$\pi_0 = (1-\theta)^3 \sim 0{,}0099$

$\pi_1 = (1-\theta)\theta(1-\theta) + \theta(1-\theta)(1-\theta) + (1-\theta)(1-\theta)\theta = 3\theta(1-\theta)^2 \sim 0{,}1085$

$\pi_2 = (1-\theta)\theta.\theta + \theta(1-\theta)\theta + \theta.\theta(1-\theta) = 3\theta^2(1-\theta) \sim 0{,}3974$

$\pi_3 = \theta^3 \sim 0{,}4837$

$\pi_0 + \pi_1 + \pi_2 + \pi_3 = (1-\theta)^3 + 3\theta(1-\theta)^2 + 3\theta^2(1-\theta) + \theta^3$

$\underline{\underline{1}} \swarrow \left[(1-\theta)+\theta\right]^3 = \left[(1-\theta)^2 + 2\theta(1-\theta) + \theta^2\right]\left[(1-\theta)+\theta\right]$

$= (1-\theta)^3 + 2\theta(1-\theta)^2 + \theta^2(1-\theta) +$

$\theta(1-\theta)^2 + 2\theta^2(1-\theta) + \theta^3$

$= (1-\theta)^3 + 3\theta(1-\theta)^2 + 3\theta^2(1-\theta) + \theta^3$

Binomial

$$P_N(n_1) = \frac{N!}{n_0!\, n_1!} q^{n_0} p^{n_1}$$

$N = n_0 + n_1$

$p + q = 1$

$$\sum_{n_1=0}^{N} P_N(n_1) = \sum_{n_1=0}^{N} \frac{N!}{n_1!(N-n_1)!} p^{n_1} q^{N-n_1} = (p+q)^N = 1$$

(teorema binomial)

$$\langle n_1 \rangle = \sum_{n_1=0}^{N} n_1 P_N(n_1) = \sum_{n_1=0}^{N} \frac{n_1 N!}{n_1!(N-n_1)!} p^{n_1} q^{N-n_1}$$

$$= p \frac{\partial}{\partial p} (p+q)^N = pN$$

$$\frac{\partial}{\partial p}\left[\sum_{n_1} \frac{N!}{n_1!(N-n_1)!} p^{n_1} q^{N-n_1}\right] = \sum_{n_1} \frac{N!}{n_1!(N-n_1)!} n_1 p^{n_1-1} q^{N-n_1}$$

$$\frac{\partial}{\partial p}(p+q)^N = \frac{1}{p} \sum_{n_1} \frac{n_1 N!}{n_1!(N-n_1)!} p^{n_1} q^{N-n_1} = \frac{1}{p}\langle n_1 \rangle$$

$$= N(p+q)^{N-1} = N \qquad \frac{1}{p}\langle n_1 \rangle = N$$

$$\boxed{\langle n_1 \rangle = pN}$$

Binomial

$$\langle m_1\rangle^2 = \sum_{m_1} m_1^2 P_N(m_1) = (Np)^2 - Npq$$

$$\frac{\partial^2}{\partial p^2}\left[\sum_{m_1} \frac{N!}{m_1!(N-m_1)!} p^{m_1} q^{N-m_1}\right] = \frac{\partial}{\partial p}\left[\frac{1}{p}\sum_{m_1} \frac{m_1 N!}{m_1!(N-m_1)!} p^{m_1} q^{N-m_1}\right]$$

$$= -\frac{1}{p^2}\langle m_1\rangle + \frac{1}{p}\sum_{m_1}\frac{N!}{m_1!(N-m_1)!} m_1^2 p^{m_1-1} q^{N-m_1}$$

$$\frac{\partial^2}{\partial p^2}(p+q)^N = -\frac{pN}{p^2} + \frac{1}{p^2}\langle m_1^2\rangle$$

$$\frac{\partial}{\partial p}\left[N(p+q)^{N-1}\right] = N.(N-1)(p+q)^{N-2} = N^2 - N$$

$$N^2 - N = -\frac{pN}{p^2} + \frac{1}{p^2}\langle m_1^2\rangle$$

$$p^2(N^2-N) = -pN + \langle m_1^2\rangle$$

$$\langle m_1^2\rangle = p^2N^2 - p^2N + pN$$

$$= p^2N^2 - Np(p-1)$$

$$\boxed{\langle m_1^2\rangle = p^2N^2 - Npq}$$

Binomial

$$\langle m_1^2\rangle - \langle m_1\rangle^2 = Npq$$

$$\sigma_N = \sqrt{Npq}$$

$$\frac{\sigma_N}{\langle m_1\rangle} = \sqrt{\frac{q}{p}}\,\frac{1}{\sqrt{N}}$$ desvio fracional (fractional deviation)

- mede o desvio da fração, m_1/N, de tentativa com ~~resultado~~ resultado +1, em relação ao valor esperado, p, em qualquer sequência de N tentativas.

- um valor pequeno de $\dfrac{\sigma_N}{\langle m_1\rangle}$ significa que $\dfrac{m_1}{N}$ estará nas proximidades de p.

- $q \neq 0$ $N \to \infty$, $\dfrac{\sigma_N}{\langle m_1\rangle} \to 0$ de tal forma que $\dfrac{m_1}{N} \to p$.

MC - 2017(1)

~~Propr dist binomial~~

média $\langle \xi \rangle = \sum_k k \, \pi_k$

$$\langle \xi \rangle = \int dx \; x \, \pi(x)$$

Bernoulli $\langle \xi \rangle = \theta$

uniforme $\langle \xi \rangle = 1/2$

→ O valor médio da soma de N variáveis aleatórias é igual a soma das médias destas variáveis.

$$\langle \xi_1 + \xi_2 \rangle = \langle \xi_1 \rangle + \langle \xi_2 \rangle$$

↳ as variáveis não precisam ser independentes

variância $\mathrm{Var}(\xi) = \langle (\xi - \langle \xi \rangle)^2 \rangle$

Bernoulli $\mathrm{Var}(\xi) = \sum_k (k - \langle \xi \rangle)^2 \pi_k$

$$= (0 - \langle \xi \rangle)^2 \cdot \pi(0) + (1 - \langle \xi \rangle)^2 \cdot \pi(1)$$

fe 20/11 (8)

$$\mathrm{Var}(\xi) = \langle\xi\rangle^2\,\pi(0) + (1-\langle\xi\rangle)^2\,\pi(1)$$

$$= \theta^2\cdot(1-\theta) + (1-\theta)^2\cdot\theta$$

$$= \theta^2-\theta^3 + (1-2\theta+\theta^2)\theta$$

$$= \theta^2 - \cancel{\theta^3} + \theta - 2\theta^2 \cancel{+\theta^3}$$

$$= \theta - \theta^2 = \theta(1-\theta)$$

$$\mathrm{Var}(\xi) = \langle(\xi-\langle\xi\rangle)^2\rangle = \langle\xi^2\rangle - 2\langle \underbrace{\xi\cdot\langle\xi\rangle}_{\#\ \langle\xi\rangle\langle\xi\rangle}\rangle + \langle\xi\rangle^2$$

$$= \langle\xi^2\rangle - \langle\xi\rangle^2$$

$\Rightarrow$ posso guardar em tempo real na simulação.

Bernoulli

$$\mathrm{Var}(\xi) = \underbrace{\langle\xi^2\rangle}_{0^2\cdot(1-\theta)+1^2\cdot\theta} - \underbrace{\langle\xi\rangle^2}_{\theta^2} = \theta-\theta^2 = \theta(1-\theta)$$

uniforme

$$\mathrm{Var}(\xi) = \int_0^1 dx\, x^2 \underbrace{\pi(x)}_{1} - \left[\int_0^1 dx\ x\underbrace{\pi(x)}_{1}\right]^2$$

$$= \left.\frac{x^3}{3}\right|_0^1 - \left[\left.\frac{x^2}{2}\right|_0^1\right]^2 = \frac{1}{3} - \left(\frac{1}{2}\right)^2 = \frac{1}{3}-\frac{1}{4}$$

$$= \frac{4-3}{12} = \frac{1}{12}$$

gaussiana Var $\to \sigma^2$

σ : root mean square deviation $= \sqrt{Var(\xi_1)} = \sigma$

desvio padrão

↳ a variância é importante pois pode ser generalizada para uma série de variáveis. grandezas como $|\xi - \langle \xi \rangle|$ não podem.

→ consideramos duas variáveis independentes ξ_i e ξ_j que tomam os valores x_i e x_j

$$\int dx_i \int dx_j \, \pi(x_i) \pi(x_j) \, x_i x_j$$

$$= \left[\int dx_i \, x_i \, \pi(x_i) \right] \left[\int dx_j \, x_j \, \pi(x_j) \right]$$

$$\langle \xi_i \xi_j \rangle = \begin{cases} \langle \xi_i \rangle \langle \xi_j \rangle & i \neq j \\ \langle \xi_i^2 \rangle & i = j \end{cases} \quad \Big\} \text{ independentes}$$

$$Var(\xi_1 + \xi_2 + \dots \xi_N) = \langle (\xi_1 + \xi_2 + \dots \xi_N)^2 \rangle = \langle (\sum_i \xi_i)(\sum_j \xi_j) \rangle$$

média zero
p/ ficar fácil

$$= (\xi_1^i + \xi_2^i + \xi_3^i + \dots)(\xi_1^j + \xi_2^j + \xi_3^j + \dots)$$

$$= \xi_1^i \xi_1^j + \xi_1^i \xi_2^j + \xi_1^i \xi_3^j + \xi_2^i \xi_1^j + \xi_2^i \xi_2^j + \xi_2^i \xi_3^j$$

$$= \sum_i \langle \xi_i^2 \rangle + \sum_{i \neq j} \langle \xi_i \xi_j \rangle = \sum_i \langle \xi_i^2 \rangle$$

$$\sum_{i \neq j} \langle \xi_i \rangle \langle \xi_j \rangle$$

↳ média 0.

$$\Rightarrow Var(\xi_1 + \xi_2 + \dots \xi_N) = Var(\xi_1) + Var(\xi_2) + \dots + Var(\xi_N)$$

aditividade de variáveis aleatórias independentes

• ñ há relação pra $|\xi - \langle \xi \rangle|$

$$\begin{cases} Var(\xi_1 + \xi_2 + \dots \xi_N) = N \, Var(\xi_i) \\ Var\left(\dfrac{\xi_1 + \dots + \xi_N}{N}\right) = \dfrac{1}{N} Var(\xi_i) \end{cases}$$

prop. $\langle a\xi + b \rangle = a \langle \xi \rangle + b$

$$Var(a\xi + b) = a^2 \, Var(\xi)$$

MC - 2017/1

cálculo do π $\quad N_{hits} = \xi_1 + \xi_2 + \dots \xi_N$

$$\mathrm{Var}(N_{hits}) = \left\langle \left(N_{hits} - \frac{\pi}{4}N\right)^2 \right\rangle = N\,\mathrm{Var}(\xi_i) = N \underbrace{\theta(1-\theta)}_{0{,}169}$$

$$\mathrm{Var}\left(\frac{N_{hits}}{N}\right) = \left\langle \left(\frac{N_{hits}}{N} - \frac{\pi}{4}\right)^2 \right\rangle = \frac{1}{N}\,\mathrm{Var}(\xi_i) = \frac{\theta(1-\theta)}{N}$$

$\mathrm{Var}(N_{hits}) = 4000 \cdot 0{,}169 = 676 \qquad \sqrt{676} \sim 26$

=

Chebyshev inequality (desigualdade?)

- distribuição com média zero.

$$\mathrm{Var}(\xi) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, x^2\, \pi(x) \geqslant \int_{|x|\geqslant\epsilon} dx\, x^2\, \pi(x)$$

$$\geqslant \epsilon^2 \underbrace{\int_{|x|>\epsilon} dx\, \pi(x)}_{\text{prob de } |x - \langle x \rangle| > \epsilon}$$

MC - 2017(1

(92)

Chebyshev inequality $\rightarrow$ prob. de $|x - \langle x \rangle| > \epsilon$ $< \dfrac{Var(\xi)}{\epsilon^2}$

no cálculo de π sabemos que $Var(\xi) = \theta(1-\theta) < 1/4$ se $0 < \theta < 1$

$$Var\left(\frac{N_{hits}}{N}\right) < \frac{1}{4N}$$

$\hookrightarrow$ prob. de $\left|\dfrac{N_{hits}}{N} - \dfrac{\pi}{4}\right| < \epsilon$ $> 1 - \dfrac{1}{4\epsilon^2 N}$

$\hookrightarrow$ qdo $N \rightarrow \infty$ prob para qq ϵ fixo $\rightarrow 1$

(weak law of large numbers Bernoulli)

$\rightarrow$ É interessante saber como limitar um intervalo contendo uma dada qtdade de prob (99% de prob) como função de N

$$4\epsilon^2 N = \frac{1}{1-p}$$

$$p = 1 - \frac{1}{4\epsilon^2 N}$$

$$\epsilon^2 = \frac{1}{4(1-p)N}$$

$$p - 1 = -\frac{1}{4\epsilon^2 N}$$

$$\epsilon < \frac{1}{\sqrt{N}} \frac{1}{2\sqrt{1-p}} \xrightarrow{p=.99} \epsilon < \frac{5}{\sqrt{N}}$$

- a des. de Chebyshev mostra que uma variância finita faz o papel de ~~dist~~ escala delimitadora do intervalo dos valores possíveis de x:
  - independente da dist. é improvável que uma amostra esteja mais do que alguns σ da dist da média.
  - (esta prop. da dist. com var finita deve ser mantida em mente para cálculos práticos)

- A des. de Chebyshev é a base de entender pq amostras de tamanho N devem convergir (em probabilidade) para o valor médio da dist.
  - pq a largura do intervalo contendo uma quantidade fixa de probabilidade vai para zero com $\propto \frac{1}{\sqrt{N}}$

Teorema central do limite

Central limit

→ dist. com variância finita

→ reescalo as variáveis

$$\Pi_{resc}(x) = \sigma\, \Pi(\sigma x + \langle \xi \rangle)$$

$$y = \sigma x + \langle \xi \rangle$$

$$x = \frac{y - \langle \xi \rangle}{\sigma}$$

x tem média zero e variância um

Fig 1.35 ξ = soma de 50 números rand(0, 1)

↳ $\sigma = \sqrt{50} \cdot \sqrt{\frac{1}{12}} = 2{,}04$

$\langle \xi \rangle = 25$

$\Pi(y = 25) = 0{,}193 \rightarrow x = 0$

$\Pi_{resc}(0) = 2{,}04 \cdot 0{,}1903 = 0{,}39$

↳ ver a fig.

O teorema central do limite estabelece que a variável reescalada é gaussiana no limite $N \to \infty$. Se ξ for a soma de variáveis aleatórias independentes $\xi = \xi_1 + \xi_2 + \dots + \xi_N$ de variância finita.

→ Suponho todos os momentos finitos (não é necessário, só o 2º é necessário)

$$\underbrace{\langle \xi_i \rangle}_{=0} \quad \underbrace{\langle \xi_i^2 \rangle}_{=1} \quad \underbrace{\langle \xi_i^3 \rangle \dots \langle \xi_i^k \rangle}_{\text{finitos (podem ser zero)}}$$

$$\xi = \frac{1}{\sqrt{N}} (\xi_1 + \xi_2 + \dots + \xi_N)$$

→ 3.º momento

$$\left\langle \left(\frac{\xi_1 + \xi_2 + \dots \xi_N}{\sqrt{N}} \right)^3 \right\rangle = \frac{1}{N^{3/2}} \sum_{i,j,k=1}^{N} \langle \xi_i \xi_j \xi_k \rangle$$

$$= \frac{1}{N^{3/2}} \Big(\underbrace{\langle \xi_1 \xi_1 \xi_1 \rangle}_{\langle \xi_1^3 \rangle} + \underbrace{\langle \xi_1 \xi_1 \xi_2 \rangle}_{\langle \xi_1^2 \rangle \langle \xi_2 \rangle = 0} + \dots + \underbrace{\langle \xi_2 \xi_2 \xi_2 \rangle}_{\langle \xi_2^3 \rangle} + \dots$$