Monte Carlo 2

Jeferson J. Arenzon

Instituto de Física – UFRGS
Porto Alegre – RS
http://www.if.ufrgs.br/∼arenzon

2014/1

Até agora...

- Processo de Markov: mecanismo que gera o estado ν a partir do estado μ com uma probabilidade $P(\mu \to \nu)$ que
  - é independente do tempo
  - depende somente de ν e μ
  - $\sum_{\nu} P(\mu \to \nu) = 1$

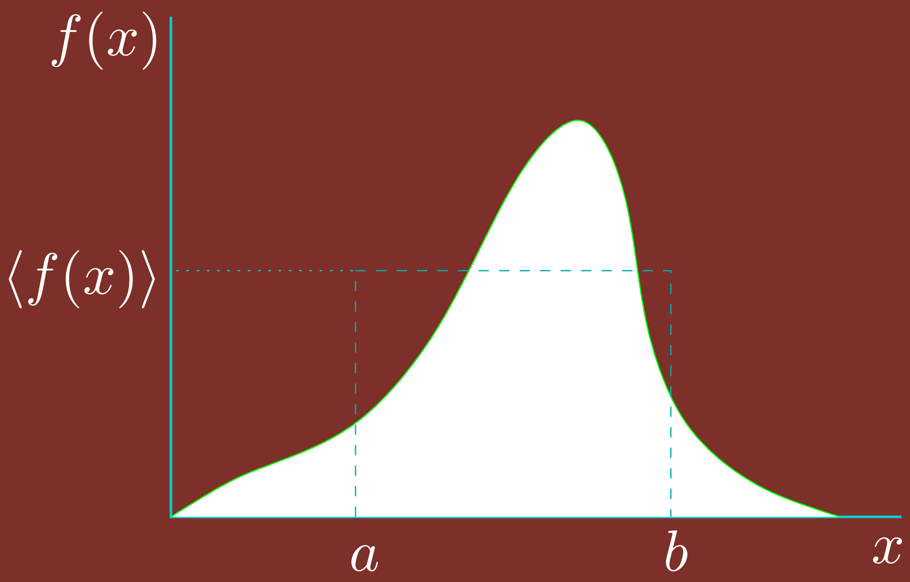
Até agora...

- Processo de Markov: mecanismo que gera o estado ν a partir do estado μ com uma probabilidade $P(\mu \to \nu)$ que
  - é independente do tempo
  - depende somente de ν e μ
  - $\sum_{\nu} P(\mu \to \nu) = 1$

- Balanço Detalhado: $\dfrac{d\rho_\mu}{dt} = \sum_{\nu} \left[\rho_\nu P_{\nu\to\mu} - \rho_\mu P_{\mu\to\nu}\right] = 0$

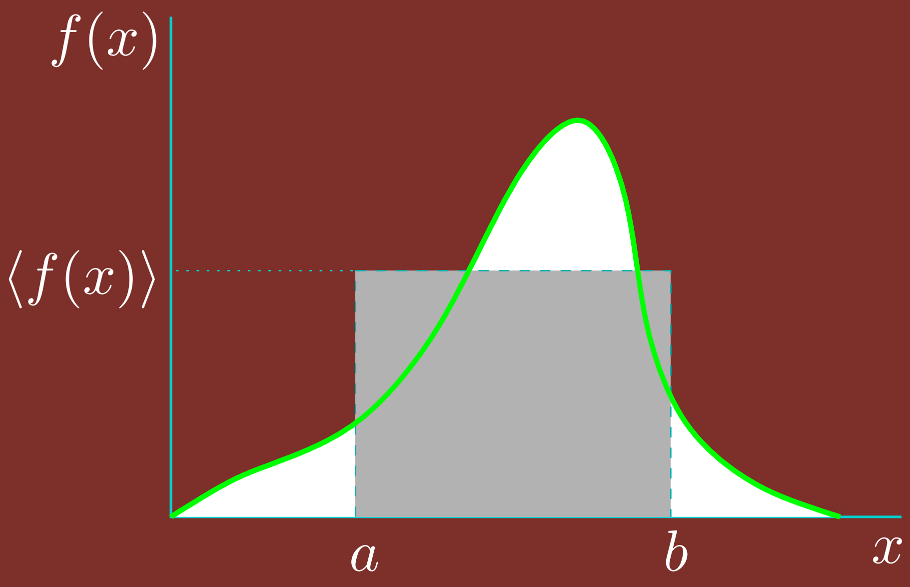
$$\boxed{\rho_\nu P_{\nu\to\mu} = \rho_\mu P_{\mu\to\nu}}$$

Amostragem Direta



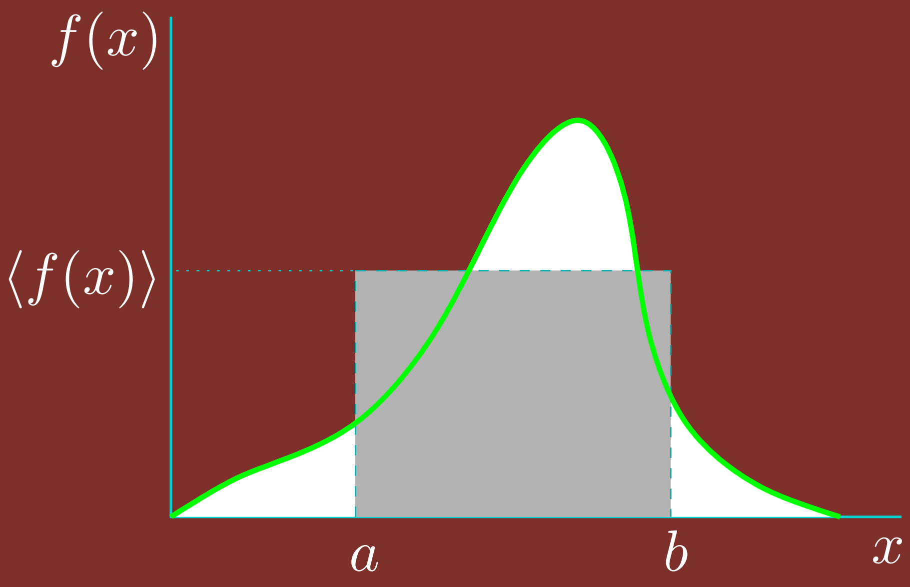
$$I = \int_a^b f(x)dx$$

Amostragem Direta



$$
\begin{aligned}
I &= \int_a^b f(x)dx \\
&= (b-a)\langle f(x) \rangle
\end{aligned}
$$

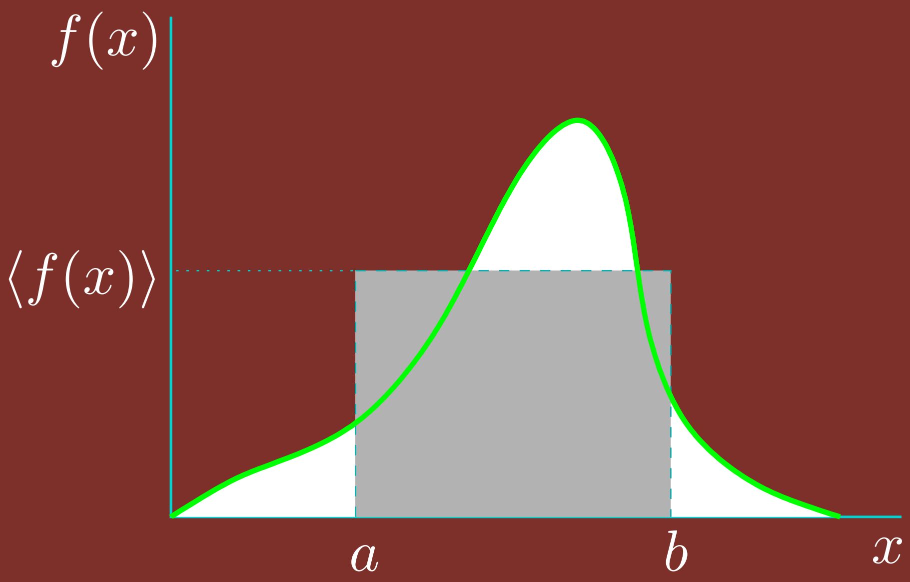
Amostragem Direta



$$
\begin{aligned}
I &= \int_a^b f(x)dx \\
&= (b-a)\langle f(x) \rangle \\
&= \frac{b-a}{N} \sum_{i=1}^{N} f(x_i)
\end{aligned}
$$

Método simples (embora ineficiente) para calcular integrais.

Amostragem Direta



$$
\begin{aligned}
I &= \int_a^b f(x)dx \\
&= (b-a)\langle f(x) \rangle \\
&= \frac{b-a}{N}\sum_{i=1}^{N} f(x_i)
\end{aligned}
$$

Método simples (embora ineficiente) para calcular integrais.

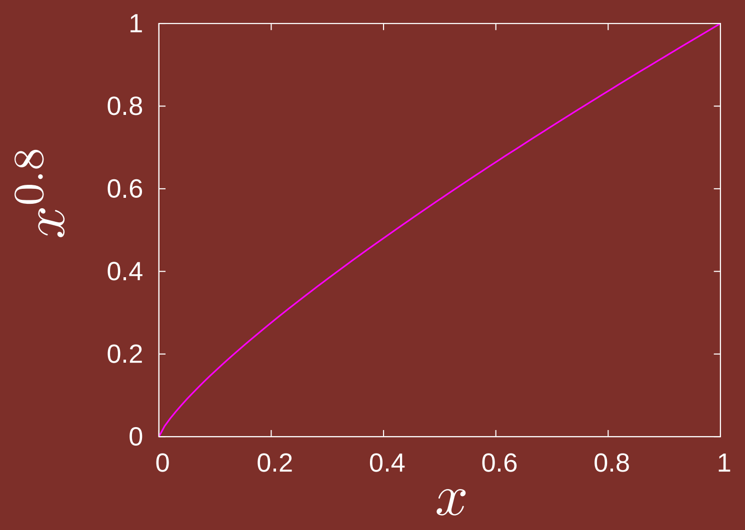
Mas e se o integrando variar rapidamente?

Exemplo: $I(\gamma)$

$$\begin{aligned} I(\gamma) &= \int_0^1 dx\, x^\gamma \\ &= \frac{1}{1+\gamma}, \quad \gamma > -1 \end{aligned}$$

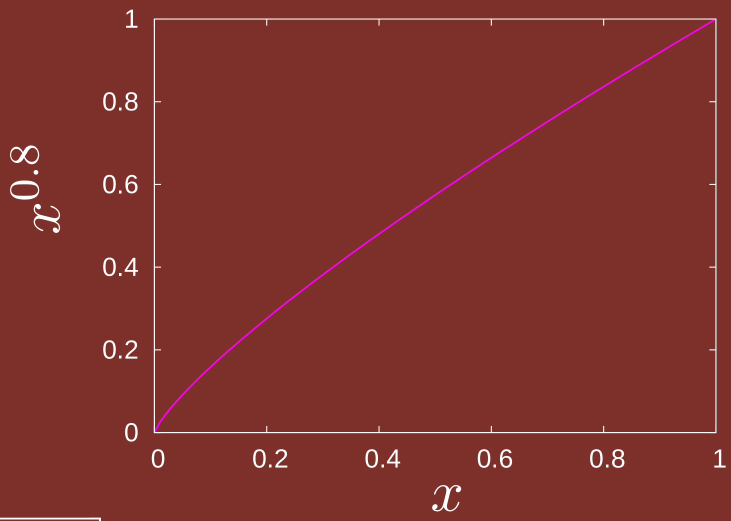
Exemplo: $I(\gamma)$

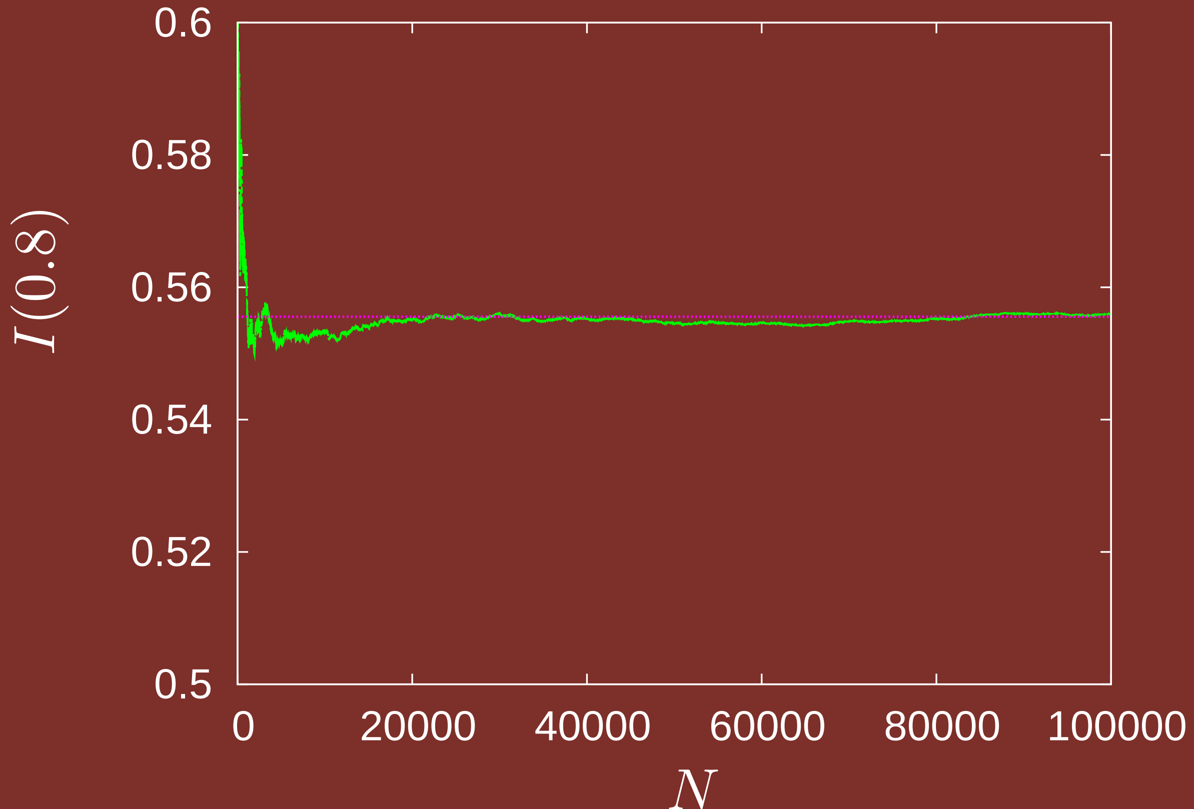
$$
\begin{aligned}
I(\gamma) &= \int_0^1 dx\, x^\gamma \\
&= \frac{1}{1+\gamma}, \quad \gamma > -1
\end{aligned}
$$



Exemplo: $I(\gamma)$

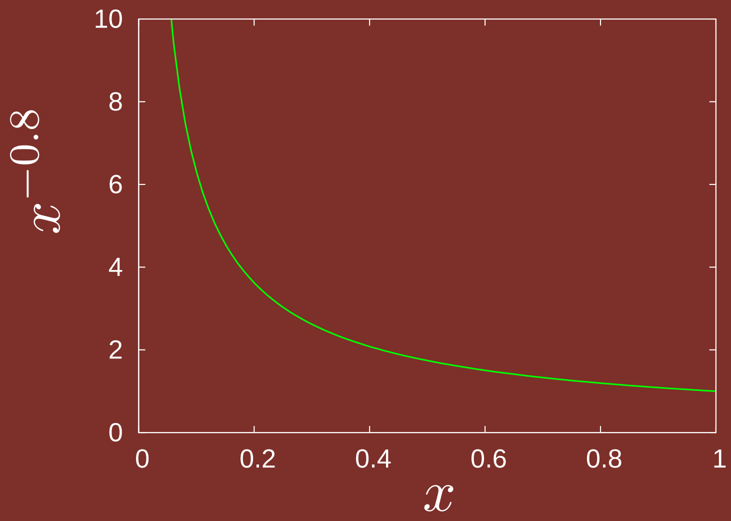
$$
\begin{aligned}
I(\gamma) &= \int_0^1 dx\, x^\gamma \\
&= \frac{1}{1+\gamma}, \quad \gamma > -1
\end{aligned}
$$





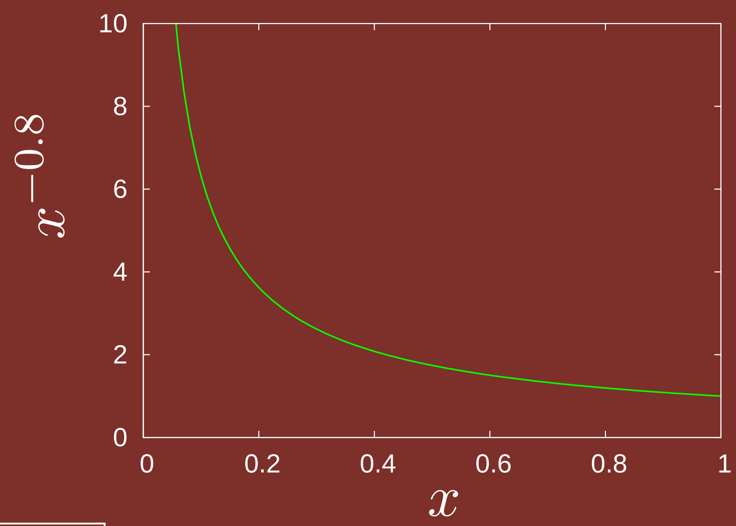
Exemplo: $I(\gamma)$

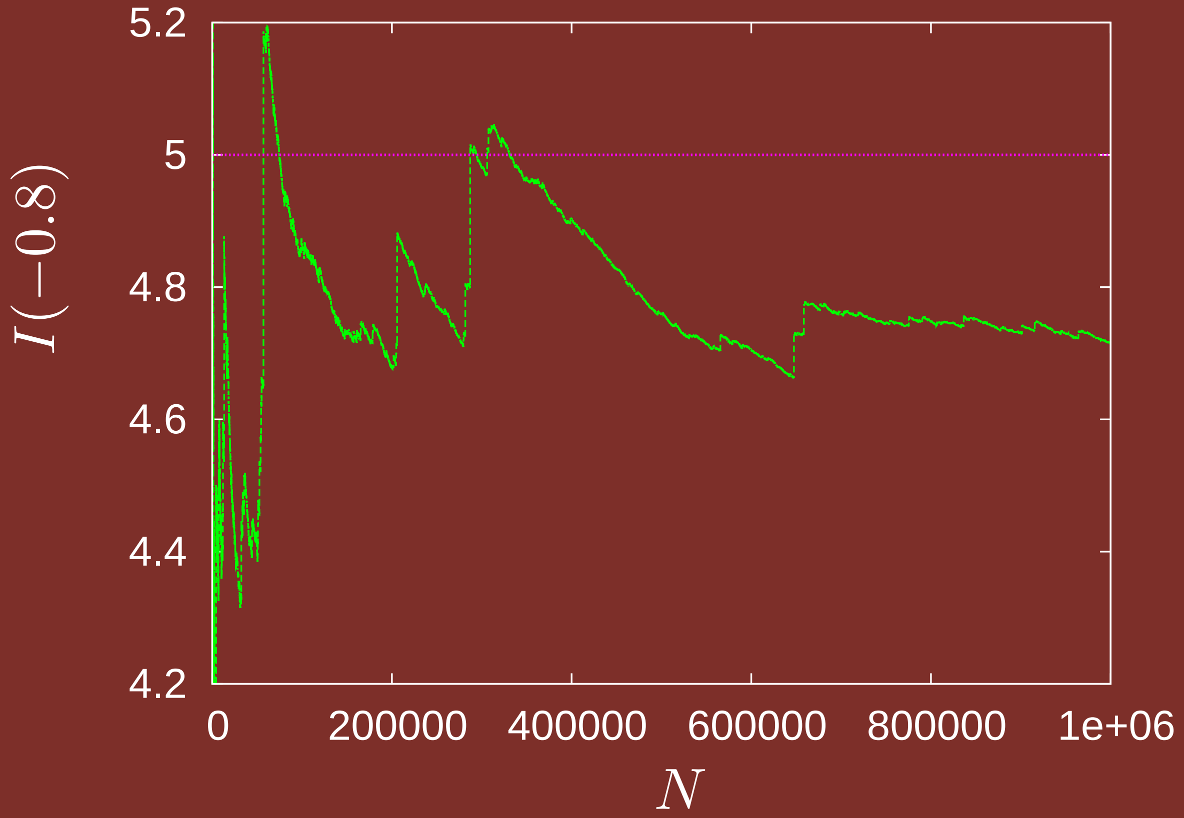
$$I(\gamma) = \int_0^1 dx\, x^\gamma = \frac{1}{1+\gamma}, \quad \gamma > -1$$



Exemplo: $I(\gamma)$

$$
\begin{aligned}
I(\gamma) &= \int_0^1 dx\, x^\gamma \\
&= \frac{1}{1+\gamma}, \quad \gamma > -1
\end{aligned}
$$





Exercício 5

Calcule, por amostragem direta, $I(0.8)$ e $I(-0.8)$ com

$$I(\gamma) = \int_0^1 dx\, x^\gamma.$$

Faça um gráfico da estimativa em função do número de pontos utilizados.

Exemplo: Função Partição

Em Mecânica Estatística, as propriedades de um sistema em equilíbrio com um banho térmico à temperatura T podem ser obtidas a partir da sua Função Partição Z. Por exemplo:

$$\langle E \rangle = \frac{\sum_{\mu} E_{\mu} \mathrm{e}^{-\beta E_{\mu}}}{\sum_{\mu} \mathrm{e}^{-\beta E_{\mu}}} = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta}$$

Exemplo: Função Partição

Em Mecânica Estatística, as propriedades de um sistema em equilíbrio com um banho térmico à temperatura T podem ser obtidas a partir da sua Função Partição Z. Por exemplo:

$$\langle E \rangle = \frac{\sum_\mu E_\mu \mathrm{e}^{-\beta E_\mu}}{\sum_\mu \mathrm{e}^{-\beta E_\mu}} = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta}$$

Para N variáveis de dois estados,
a soma tem 2^N termos:

$$N = 100$$

$$2^{100}$$

Exemplo: Função Partição

Em Mecânica Estatística, as propriedades de um sistema em equilíbrio com um banho térmico à temperatura T podem ser obtidas a partir da sua Função Partição Z. Por exemplo:

$$\langle E \rangle = \frac{\displaystyle\sum_{\mu} E_{\mu} \mathrm{e}^{-\beta E_{\mu}}}{\displaystyle\sum_{\mu} \mathrm{e}^{-\beta E_{\mu}}} = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta}$$

Para N variáveis de dois estados,
a soma tem 2^N termos:

$$N = 100$$

$$\begin{aligned} 2^{100} &= (2^{10})^{10} \\ &\simeq (10^3)^{10} = 10^{30} \end{aligned}$$

Exemplo: Função Partição

Em Mecânica Estatística, as propriedades de um sistema em equilíbrio com um banho térmico à temperatura T podem ser obtidas a partir da sua Função Partição Z. Por exemplo:

$$\langle E \rangle = \frac{\sum_\mu E_\mu \mathrm{e}^{-\beta E_\mu}}{\sum_\mu \mathrm{e}^{-\beta E_\mu}} = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta}$$

http://www.kokogiak.com/megapenny

Para N variáveis de dois estados, a soma tem 2^N termos:

$$\begin{aligned} N &= 100 \\ 2^{100} &= (2^{10})^{10} \\ &\simeq (10^3)^{10} = 10^{30} \end{aligned}$$

Exemplo: Função Partição

Em Mecânica Estatística, as propriedades de um sistema em equilíbrio com um banho térmico à temperatura T podem ser obtidas a partir da sua Função Partição Z. Por exemplo:

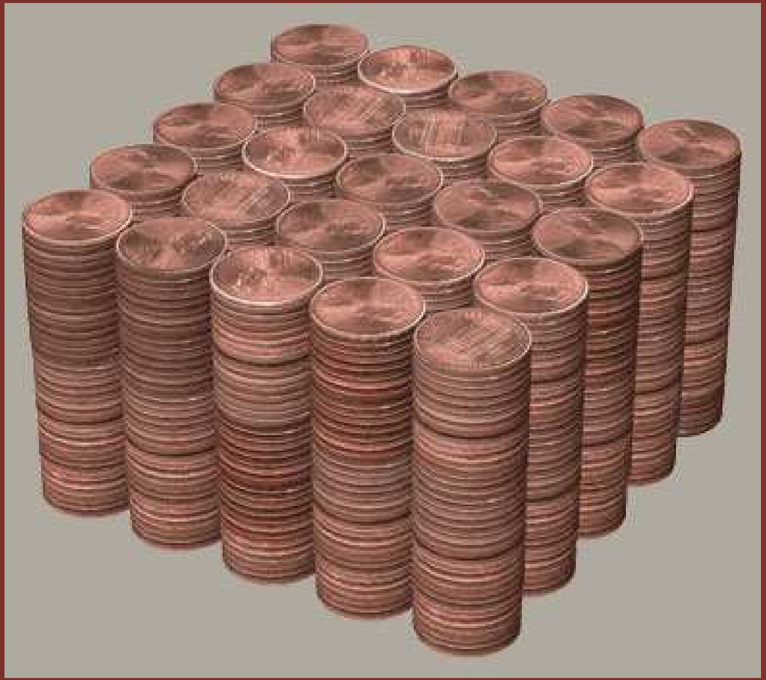
$$\langle E \rangle = \frac{\sum_{\mu} E_{\mu} e^{-\beta E_{\mu}}}{\sum_{\mu} e^{-\beta E_{\mu}}} = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta}$$

Para N variáveis de dois estados, a soma tem 2^N termos:

$$N = 100$$

$$2^{100} = (2^{10})^{10} \simeq (10^3)^{10} = 10^{30}$$

http://www.kokogiak.com/megapenny



$N = 10^3$

Exemplo: Função Partição

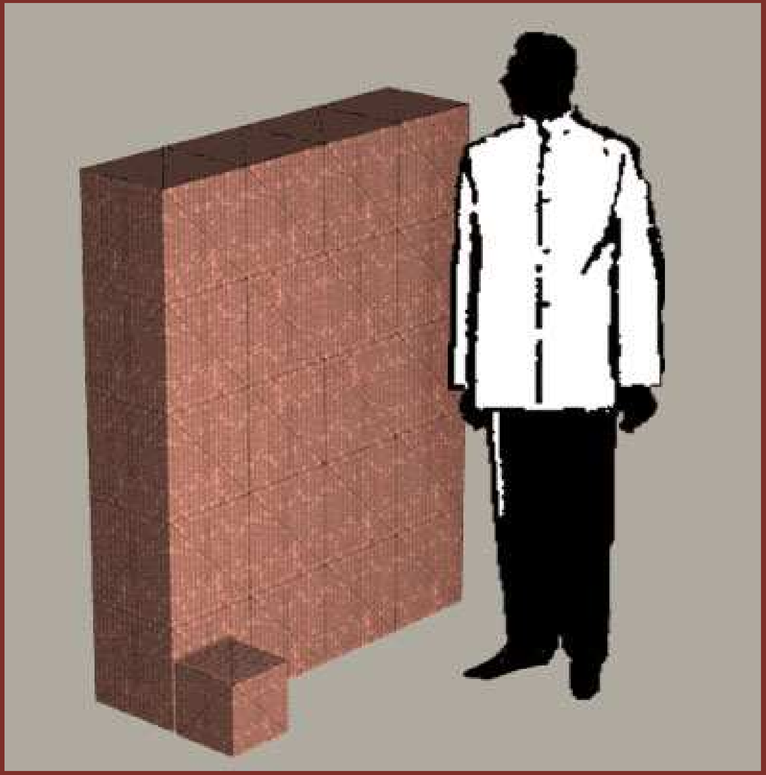
Em Mecânica Estatística, as propriedades de um sistema em equilíbrio com um banho térmico à temperatura T podem ser obtidas a partir da sua Função Partição Z. Por exemplo:

$$\langle E \rangle = \frac{\sum_\mu E_\mu \mathrm{e}^{-\beta E_\mu}}{\sum_\mu \mathrm{e}^{-\beta E_\mu}} = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta}$$

http://www.kokogiak.com/megapenny

Para N variáveis de dois estados, a soma tem 2^N termos:

$$\begin{aligned} N &= 100 \\ 2^{100} &= (2^{10})^{10} \\ &\simeq (10^3)^{10} = 10^{30} \end{aligned}$$



$N = 10^6$

Exemplo: Função Partição

Em Mecânica Estatística, as propriedades de um sistema em equilíbrio com um banho térmico à temperatura T podem ser obtidas a partir da sua Função Partição Z. Por exemplo:

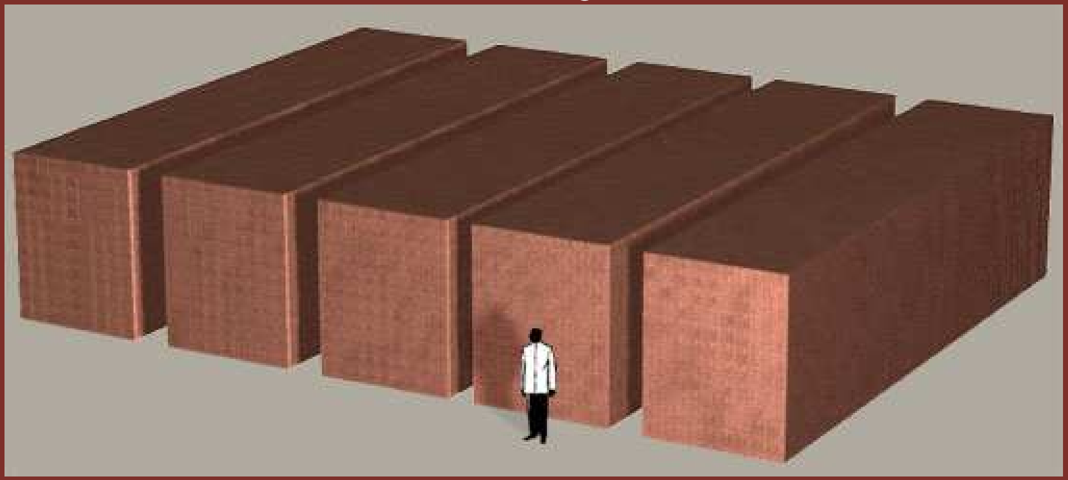
$$\langle E \rangle = \frac{\sum_\mu E_\mu \mathrm{e}^{-\beta E_\mu}}{\sum_\mu \mathrm{e}^{-\beta E_\mu}} = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta}$$

Para N variáveis de dois estados, a soma tem 2^N termos:

$$\begin{aligned} N &= 100 \\ 2^{100} &= (2^{10})^{10} \\ &\simeq (10^3)^{10} = 10^{30} \end{aligned}$$

http://www.kokogiak.com/megapenny

$N = 10^9$



Exemplo: Função Partição

Em Mecânica Estatística, as propriedades de um sistema em equilíbrio com um banho térmico à temperatura T podem ser obtidas a partir da sua Função Partição Z. Por exemplo:

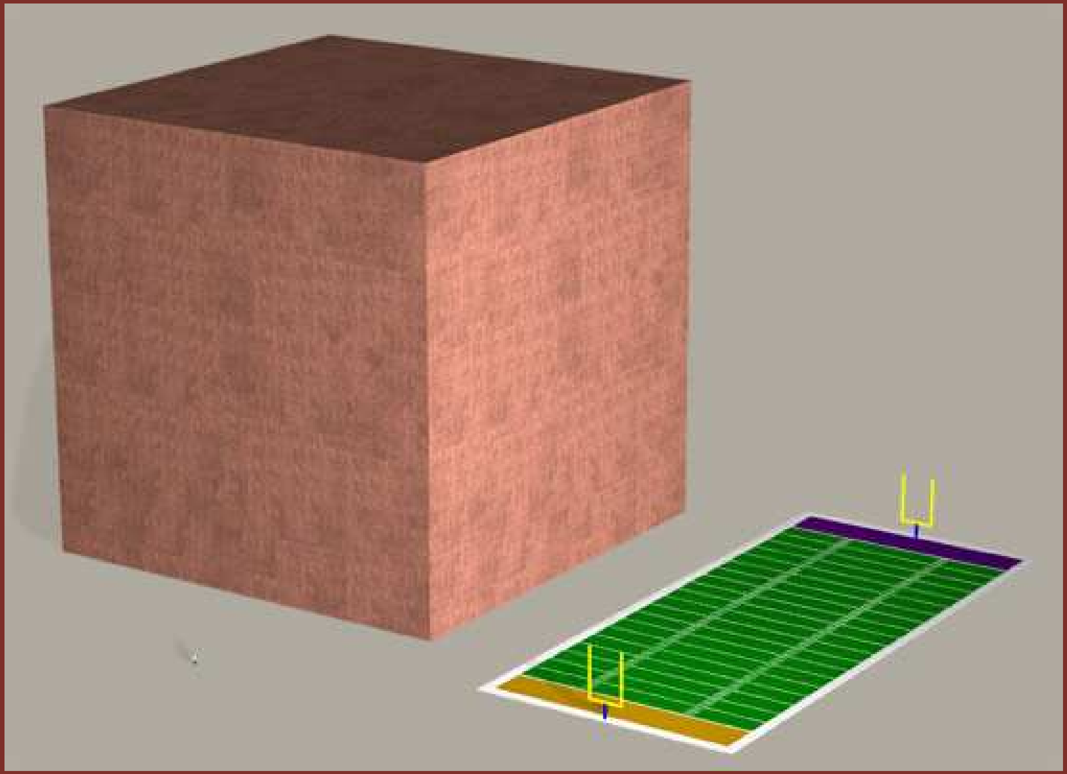
$$\langle E \rangle = \frac{\sum_\mu E_\mu \mathrm{e}^{-\beta E_\mu}}{\sum_\mu \mathrm{e}^{-\beta E_\mu}} = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta}$$

Para N variáveis de dois estados, a soma tem 2^N termos:

$$\begin{aligned} N &= 100 \\ 2^{100} &= (2^{10})^{10} \\ &\simeq (10^3)^{10} = 10^{30} \end{aligned}$$

http://www.kokogiak.com/megapenny

$N = 10^{12}$



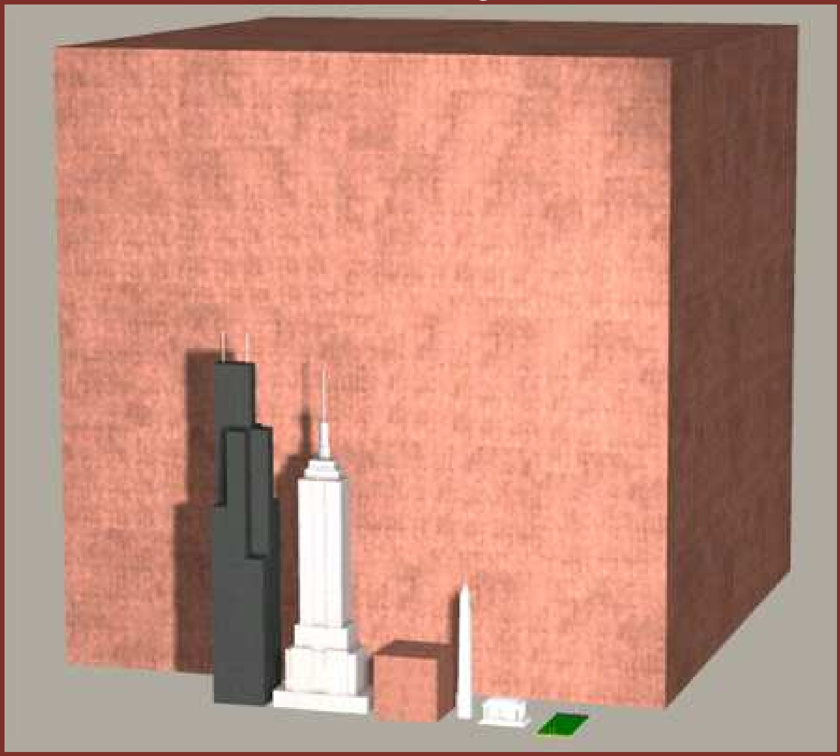
Exemplo: Função Partição

Em Mecânica Estatística, as propriedades de um sistema em equilíbrio com um banho térmico à temperatura T podem ser obtidas a partir da sua Função Partição Z. Por exemplo:

$$\langle E \rangle = \frac{\sum_{\mu} E_{\mu} \mathrm{e}^{-\beta E_{\mu}}}{\sum_{\mu} \mathrm{e}^{-\beta E_{\mu}}} = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta}$$

http://www.kokogiak.com/megapenny

$N = 10^{15}$



Para N variáveis de dois estados, a soma tem 2^N termos:

$$\begin{aligned} N &= 100 \\ 2^{100} &= (2^{10})^{10} \\ &\simeq (10^3)^{10} = 10^{30} \end{aligned}$$

Exemplo: Função Partição

Em Mecânica Estatística, as propriedades de um sistema em equilíbrio com um banho térmico à temperatura T podem ser obtidas a partir da sua **Função Partição** Z. Por exemplo:

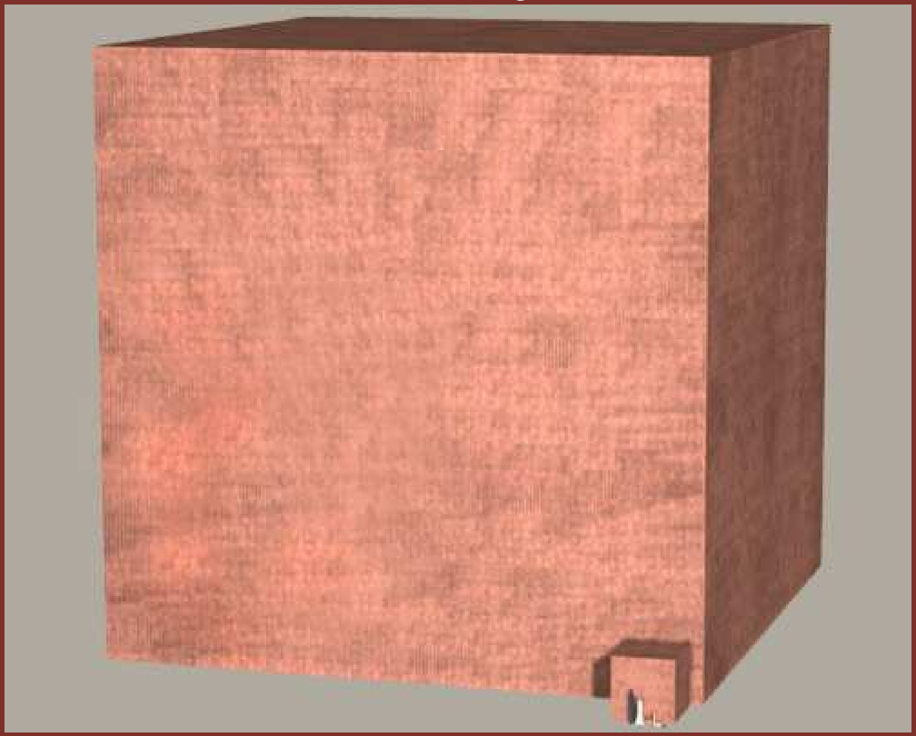
$$\langle E \rangle = \frac{\sum_\mu E_\mu e^{-\beta E_\mu}}{\sum_\mu e^{-\beta E_\mu}} = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta}$$

Para N variáveis de dois estados, a soma tem 2^N termos:

$$\begin{aligned} N &= 100 \\ 2^{100} &= (2^{10})^{10} \\ &\simeq (10^3)^{10} = 10^{30} \end{aligned}$$

http://www.kokogiak.com/megapenny

$N = 10^{18}$



De volta ao exemplo: $I(\gamma)$

Dividimos o integrando:

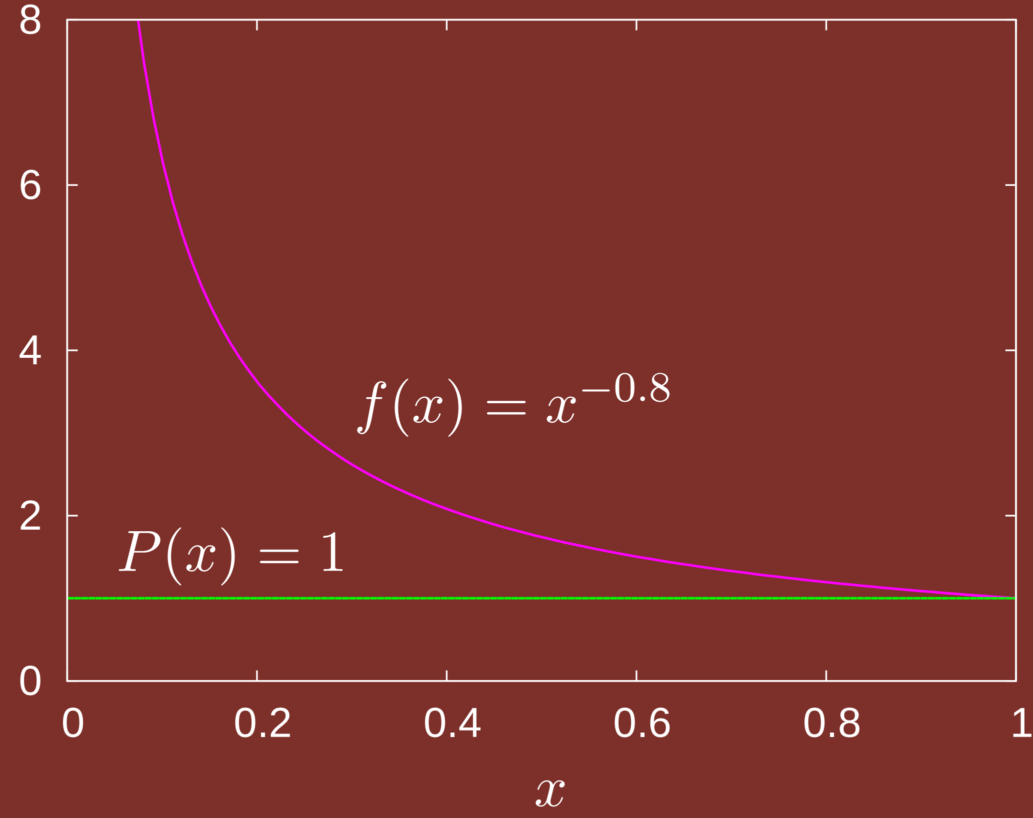
$$\begin{aligned}
I(\gamma) &= \int_0^1 dx\ x^\gamma \\
&= \int_0^1 dx\ x^\zeta \frac{x^\gamma}{x^\zeta} \\
&= \int_0^1 dx\ P(x) f(x)
\end{aligned}$$

De volta ao exemplo: $I(\gamma)$

Dividimos o integrando:

$$\begin{aligned} I(\gamma) &= \int_0^1 dx\, x^\gamma \\ &= \int_0^1 dx\, x^\zeta \frac{x^\gamma}{x^\zeta} \\ &= \int_0^1 dx\, P(x) f(x) \end{aligned}$$

$P(x) = 1$ e $f(x) = x^{-0.8}$:

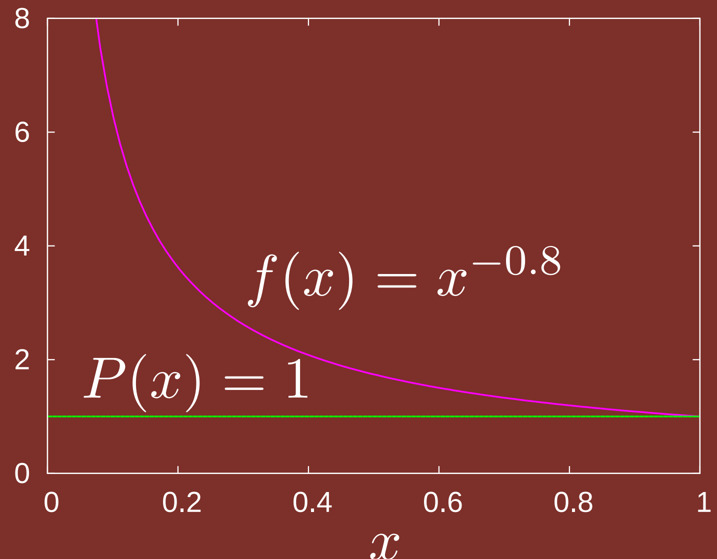


De volta ao exemplo: $I(\gamma)$

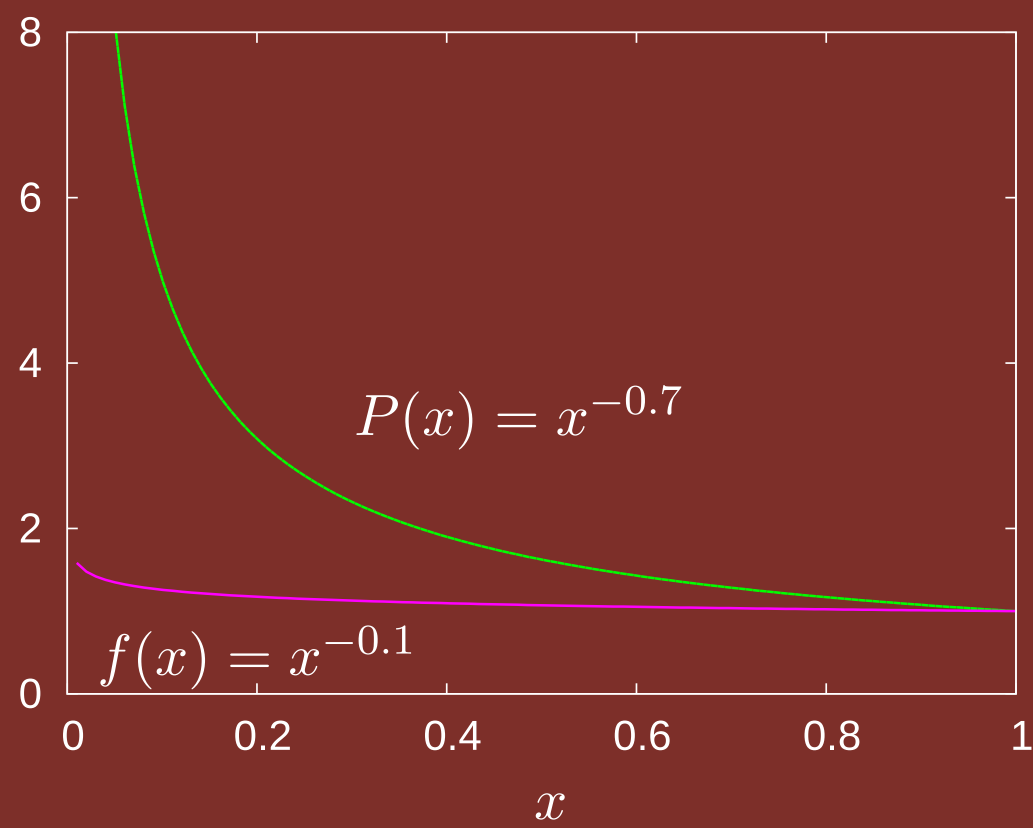
Dividimos o integrando:

$$\begin{aligned} I(\gamma) &= \int_0^1 dx\, x^\gamma \\ &= \int_0^1 dx\, x^\zeta \frac{x^\gamma}{x^\zeta} \\ &= \int_0^1 dx\, P(x) f(x) \end{aligned}$$

$P(x) = 1$ e $f(x) = x^{-0.8}$:

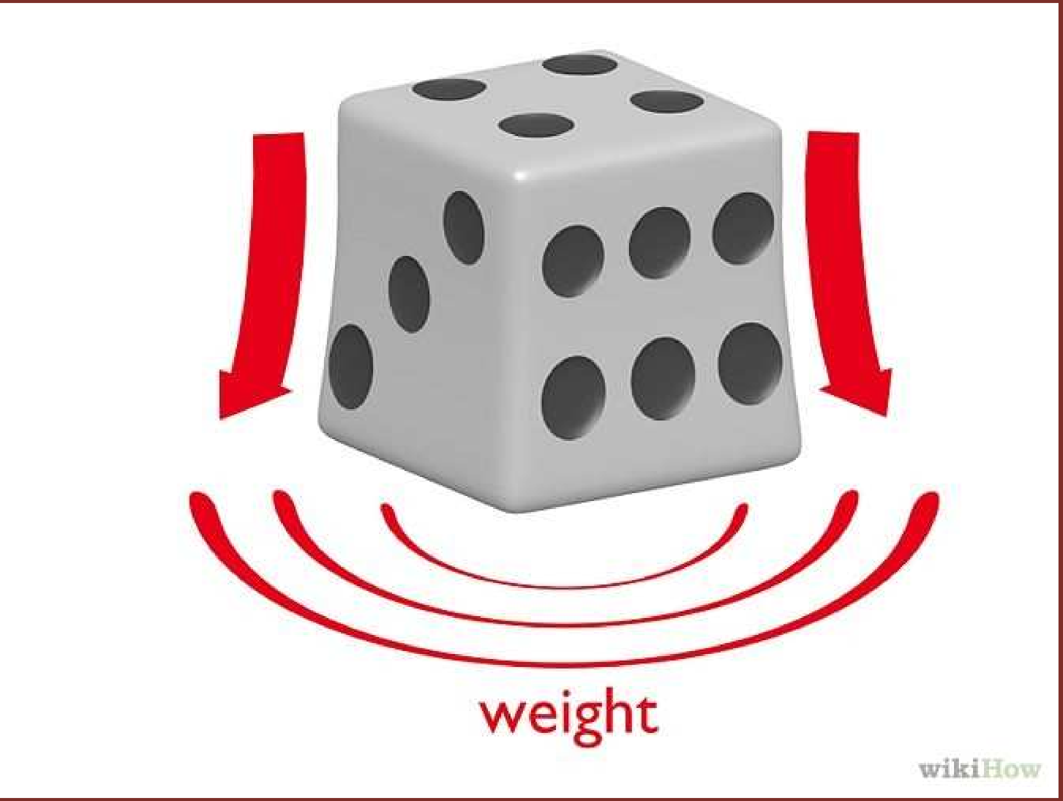


$P(x) = x^{-0.7}$ e $f(x) = x^{-0.1}$:



Devemos escolher os pontos com uma distribuição não uniforme:
Amostragem por importância!

Dado Viciado



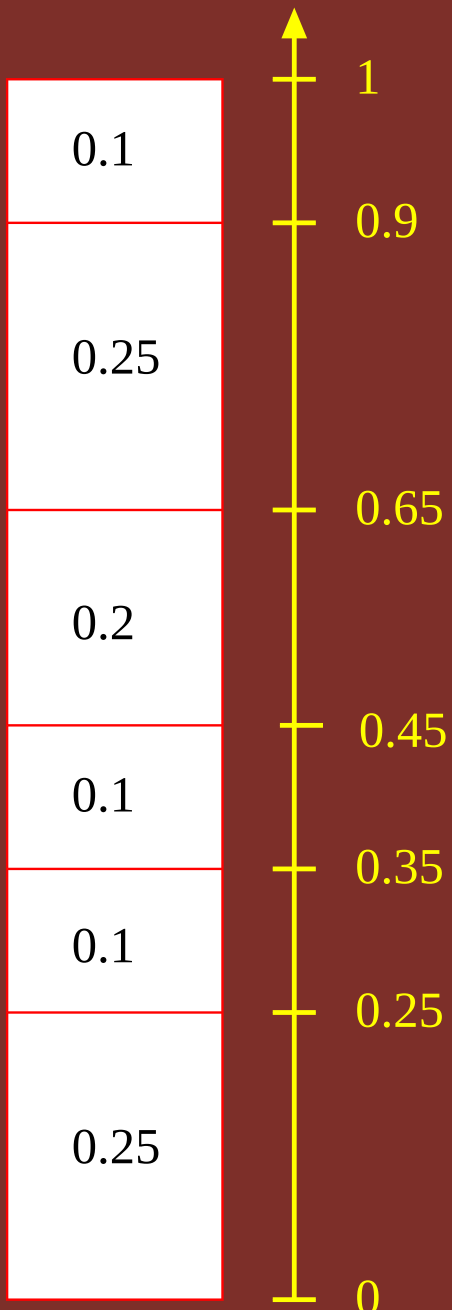
Como simular a amostragem do resultado?

Método da Transformação Inversa

Um exemplo:

$$
\begin{aligned}
p_1 &= 0.25 \\
p_2 &= 0.1 \\
p_3 &= 0.1 \\
p_4 &= 0.2 \\
p_5 &= 0.25 \\
p_6 &= 0.1
\end{aligned}
$$

Método da Transformação Inversa



Um exemplo:

$$p_1 = 0.25$$
$$p_2 = 0.1$$
$$p_3 = 0.1$$
$$p_4 = 0.2$$
$$p_5 = 0.25$$
$$p_6 = 0.1$$

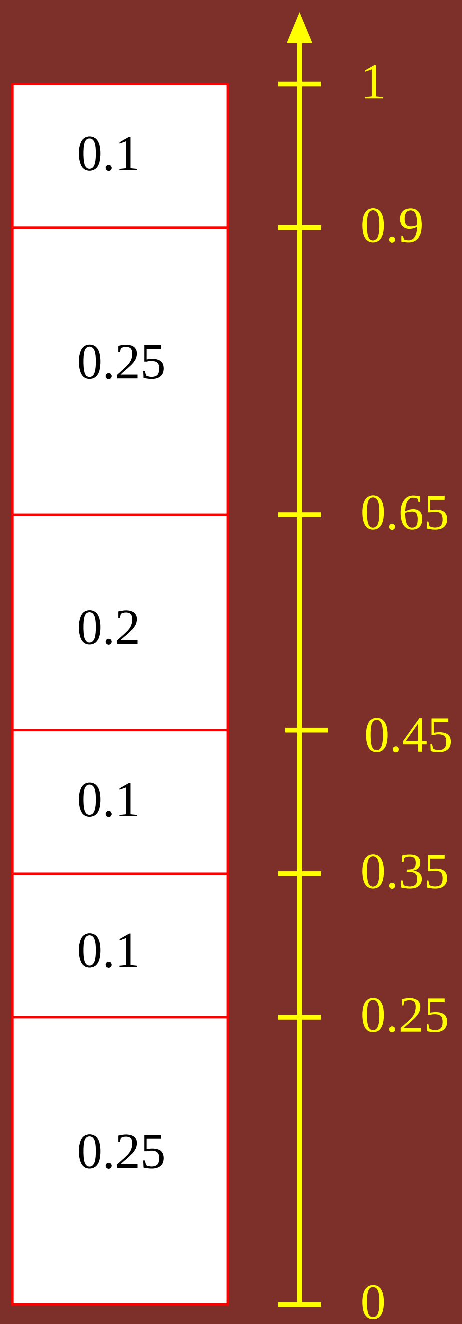
Para escolher um, basta sortear $r \in (0,1)$ (uniforme!):

$$P_{i-1} < r < P_i$$

onde

$$P_i = P_{i-1} + p_i \text{ e } p_0 = P_0 = 0.$$

Método da Transformação Inversa



Um exemplo:

$$p_1 = 0.25$$
$$p_2 = 0.1$$
$$p_3 = 0.1$$
$$p_4 = 0.2$$
$$p_5 = 0.25$$
$$p_6 = 0.1$$

Para escolher um, basta sortear $r \in (0, 1)$ (uniforme!):

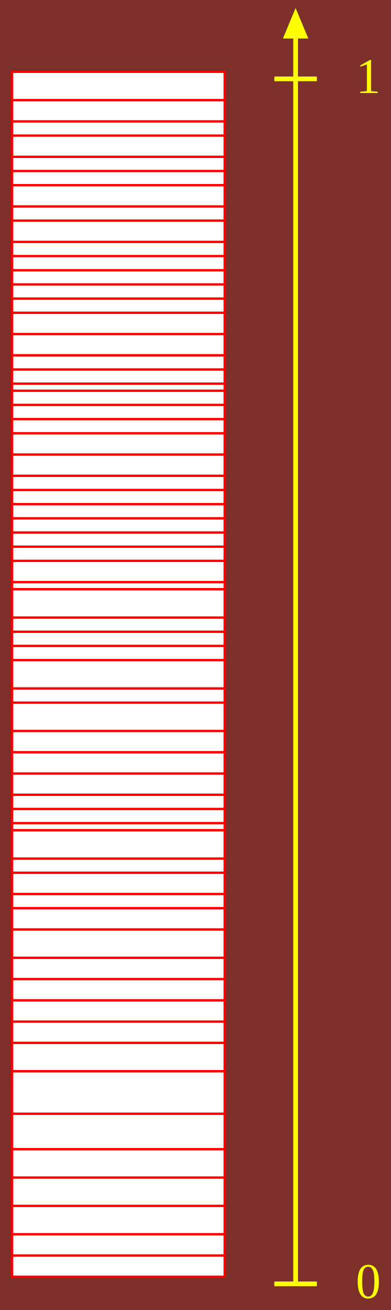
$$P_{i-1} < r < P_i$$

onde

$$P_i = P_{i-1} + p_i \text{ e } p_0 = P_0 = 0.$$

Vamos agora tomar o limite contínuo deste problema...

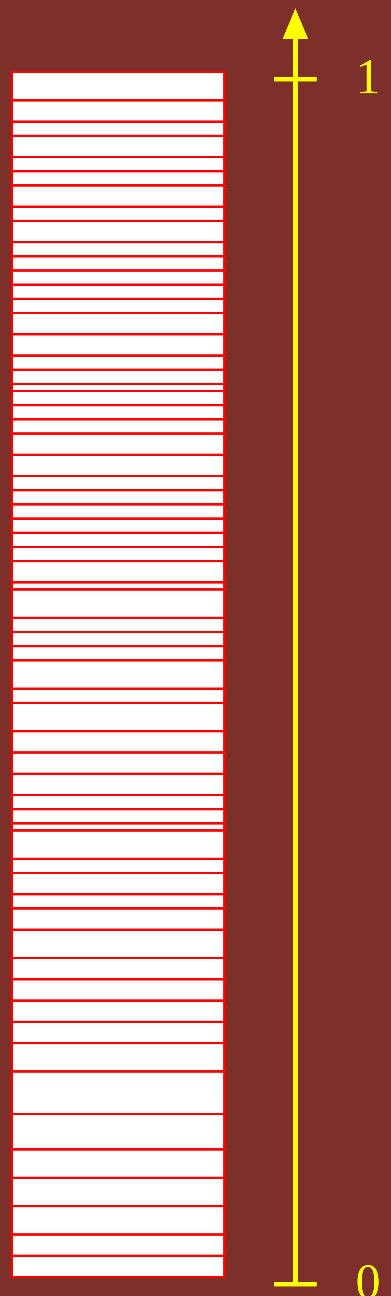
Método da Transformação Inversa



A probabilidade acumulada é

$$P(x) = \int_{-\infty}^{x} p(x')dx'$$

Método da Transformação Inversa



A probabilidade acumulada é

$$P(x) = \int_{-\infty}^{x} p(x')dx'$$

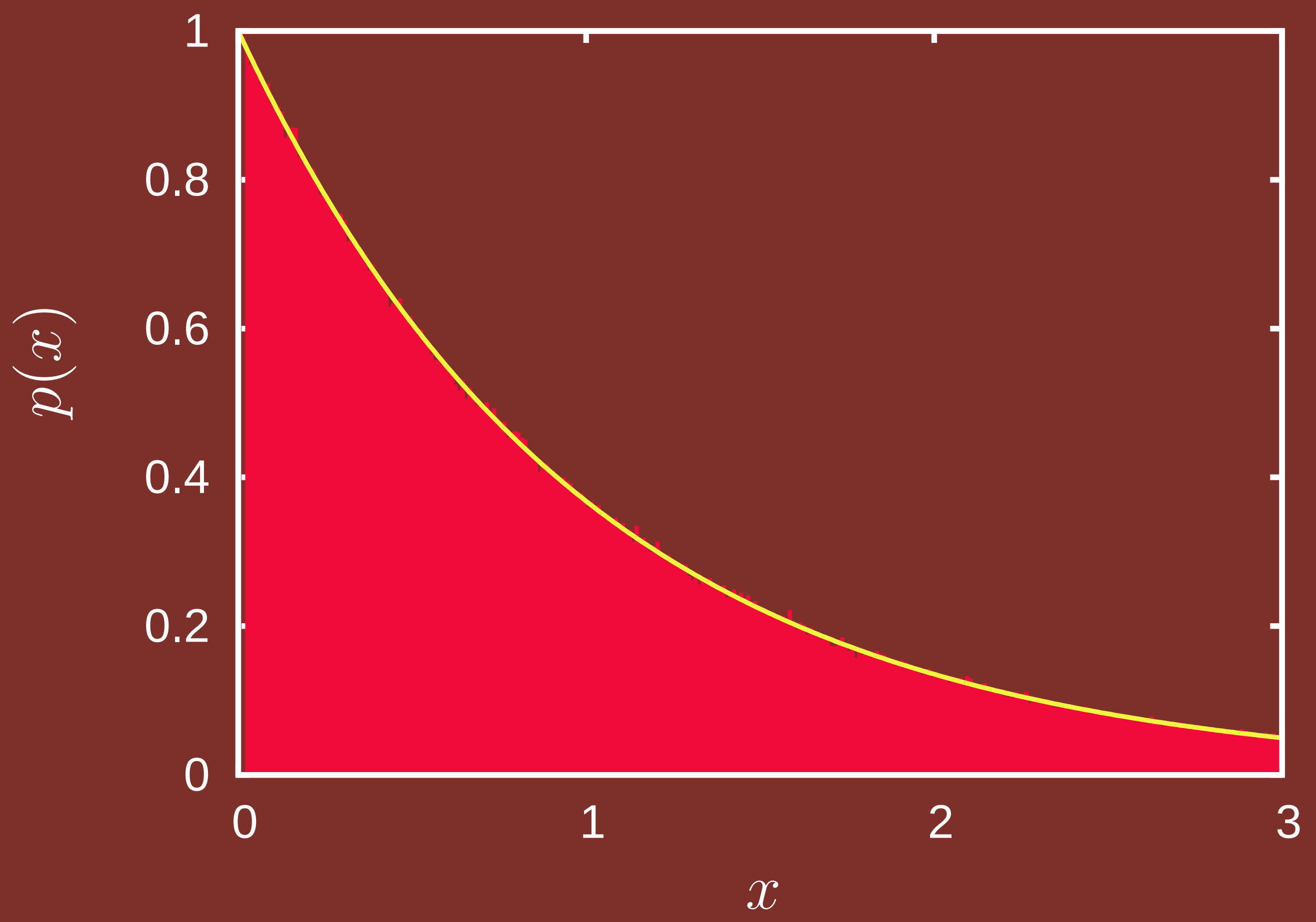
Novamente, para escolher um, basta sortear $r \in (0,1)$ e verificar

$$r = P(x) \to x = P^{-1}(r)$$

Exemplo

$$p(x) = \mathrm{e}^{-x}$$

$$r = \int_0^x \mathrm{e}^{-x'} dx' = 1 - \mathrm{e}^{-x} \implies x = -\ln(1-r) \implies x = -\ln r$$



Exercício 6

$$p(x) = (1+\gamma)x^{\gamma}, \;\; 0 < x < 1$$

Mostre que

$$x = r^{1/(1+\gamma)}$$

e faça uma amostragem com 10^6 pontos, comparando com a curva exata.

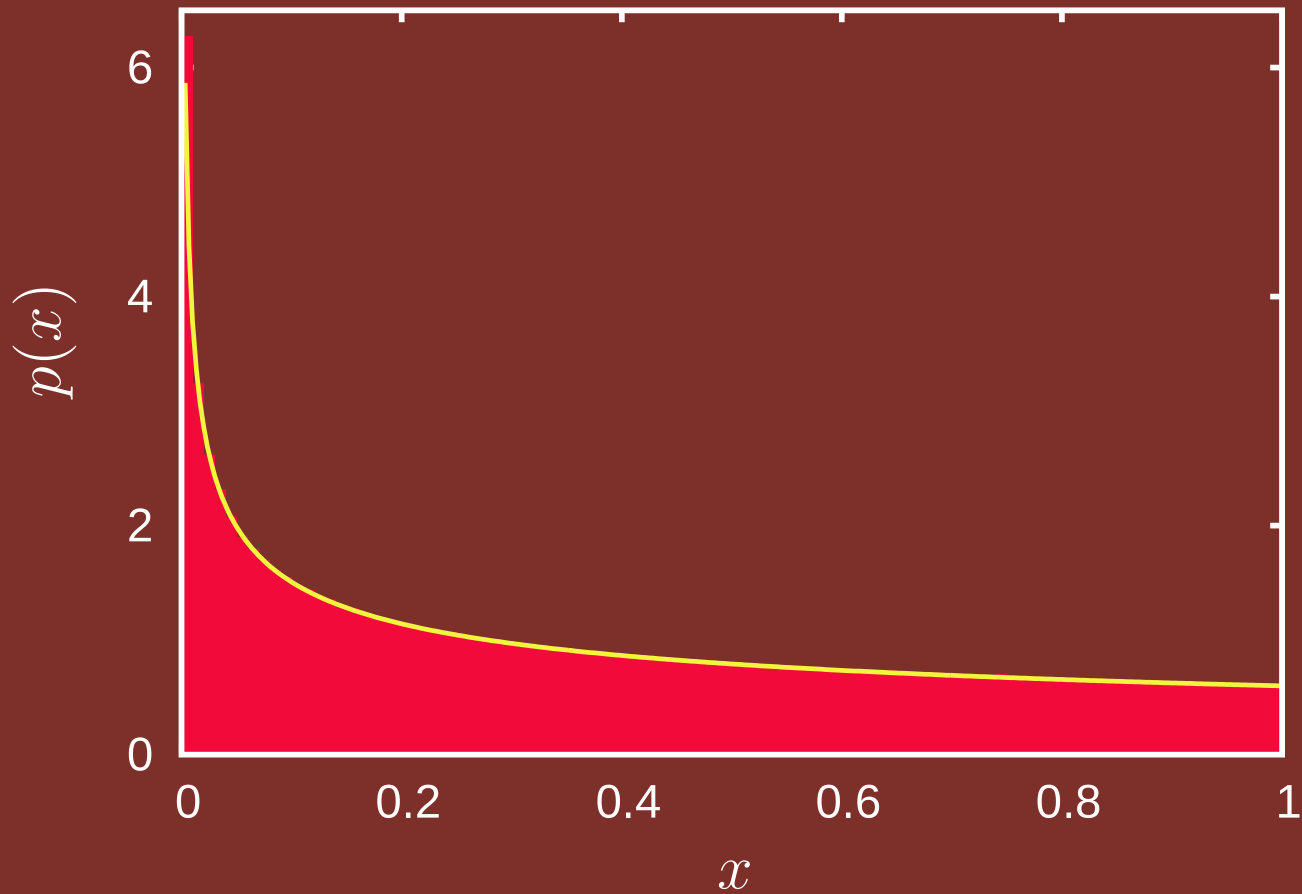
Exercício 6

$$p(x) = (1+\gamma)x^{\gamma}, \quad 0 < x < 1$$

Mostre que

$$x = r^{1/(1+\gamma)}$$

e faça uma amostragem com 10^6 pontos, comparando com a curva exata.



Exercício 7

$$p(x) = \frac{1}{\pi}\frac{a}{a^2 + x^2}, \quad -\infty < x < \infty$$

Mostre que

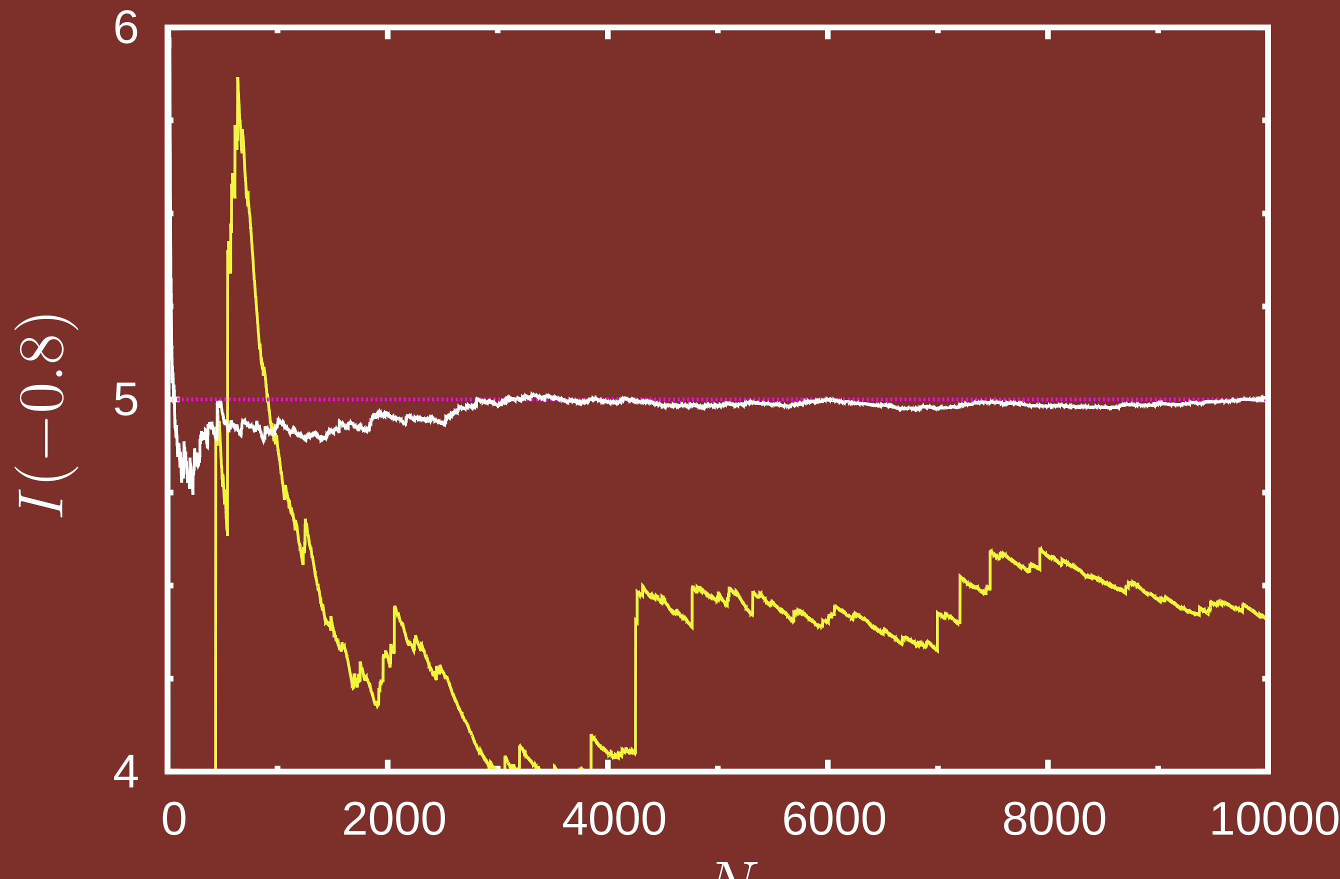
$$x = a \tan\left[\pi\left(r - \frac{1}{2}\right)\right]$$

e faça uma amostragem com 10^6 pontos, comparando com a curva exata.

De volta ao exemplo: $I(\gamma)$

$$I(\gamma) = \int_0^1 dx\, x^\gamma = \int_0^1 dx\, \underbrace{(1+\zeta)x^\zeta}_{P(x)} \frac{x^\gamma}{(1+\zeta)x^\zeta} = \frac{1}{1+\zeta}\int_0^1 dx\, P(x) x^{\gamma-\zeta}$$

- Com o coeficiente $1+\zeta$ temos uma distribuição normalizada.



Exercício 8

Calcule, usando amostragem por importância,

$$I(\gamma) = \int_0^1 dx\; x^\gamma,$$

para $\gamma = -0.8$. Teste diferentes valores de ζ (inclusive $\zeta = \gamma$). Faça um gráfico da estimativa em função do número de pontos utilizados e compare com o valor exato.