Integração multi-dimensional e Monte Carlo

Integração multi-dimensional

$$I = \int_{a_n}^{b_n} dx_n \cdots \int_{a_2}^{b_2} dx_2 \int_{a_n}^{b_n} dx_1 f(x_1, x_2, \ldots, x_n),$$

Pode ser realizada usando métodos 1D

Exemplo: 2D com bordas não regulares

$$I = \int_{a_y}^{b_y} dy \int_{a_x(y)}^{b_x(y)} dx f(x, y)$$

Pode ser tratado como uma integral 1D de F(y), que por sua vez é uma integral

Para D>3, não é muito efetivo.

$$I = \int_{a_y}^{b_y} dy F(y), \qquad F(y) = \int_{a_x(y)}^{b_x(y)} dx f(x, y)$$

Integração de Monte Carlo

- Apesar de menos glamourosos que os dados, geradores de números aleatórios são muito eficientes (10^8 números/s)
- Compiladores têm rotinas intrínsicas:
  - random_number(r) em Fortran 90 por exemplo.
  - Geradores externos normalmente são melhores

Integração de Monte Carlo

- Um integral pode ser escrita como uma média

$$A = \int_a^b dx\, f(x) = (b-a)\langle f \rangle$$

- A média pode ser estimada usando números aleatórios

$$\overline{f} = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} f(x_i) \rightarrow \langle f \rangle \text{ quando } N \rightarrow \infty$$

Integração de Monte Carlo

- Exemplo

```
a = 0;
  b = 1.0;
  for(i=0;i<N;i++){
    s += f(a+ranks()*(b-a));
  }
  s /= N;
  printf("valor da integral %lf\n",s);
```

- Flutuações (barra de erro) $\sigma \sim 1/\sqrt{N}$

Número de operações para integrações

- Integração numérica em limites regulares

$$t \sim M_1^D$$

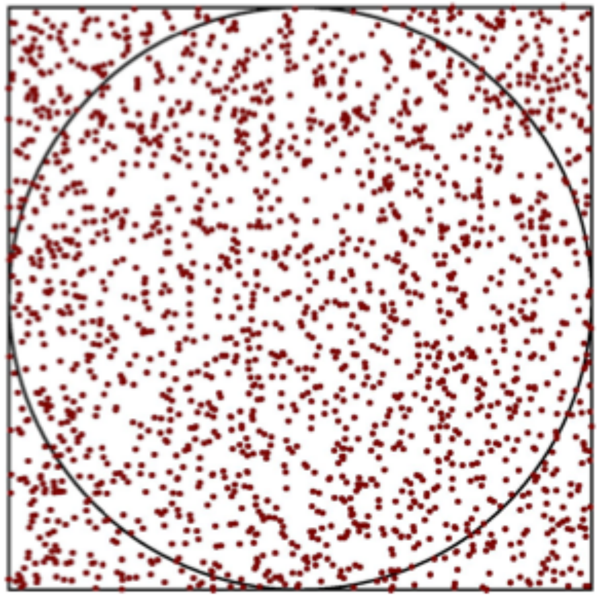
- Integração de Monte Carlo na precisão desejada (independe de D)

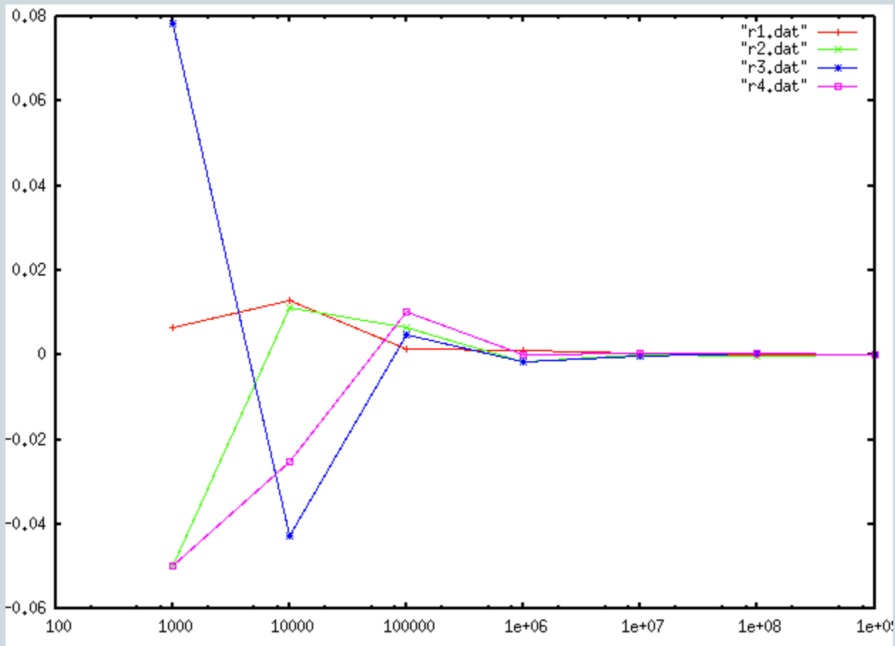
$$t \sim N \sim \frac{1}{\sigma^2}$$

- Monte Carlo é mais eficiente para dimensões mais altas
- Integração MC é problemática se o integrando tem picos

Exemplo: Área do Círculo

$$A = \int_{-1}^{1} dy \int_{-1}^{1} dx f(x,y), \quad f(x,y) = 1 \; x^2+y^2 \leq 1, \quad f(x,y) = 0, \; x^2+y^2 > 1.$$





Exemplo: Área do Círculo

```
double v;
 for(i=0;i<N;i++) {
  x = 2.0*ranks() - 1;
  y = 2.0*ranks() - 1;
  if( (x*x+y*y) < 1.0) a++;
 }
 v = 4.0*(double)a / (double) N;
 return v;
```

Erros Estatísticos

- Cálculos baseados em N pontos, qual o erro?
- Considere M cálculos independentes (cada um com N pontos)
- Médias estatisticamente independentes

$$\bar{A}_i,\ i = 1, \ldots, M$$

- Médias

Desvio padrão

$$\bar{A} = \frac{1}{M}\sum_{i=1}^{M}\bar{A}_i \qquad \sigma' = \sqrt{\frac{1}{M}\sum_{i=1}^{M}(\bar{A}_i^2 - \bar{A}^2)}$$

Erros Estatísicos

- O que queremos é o desvio padrão da média

$$\sigma = \sqrt{\frac{1}{M(M-1)}\sum_{i=1}^{M}(\bar{A}_i^2 - \bar{A}^2)}$$

- Que só faz sentido se as médias seguem uma distribuição gaussiana
- Podemos mostrar que

$$\int f\,dV \approx V\langle f\rangle \pm V\sqrt{\frac{\langle f^2\rangle - \langle f\rangle^2}{N}}$$

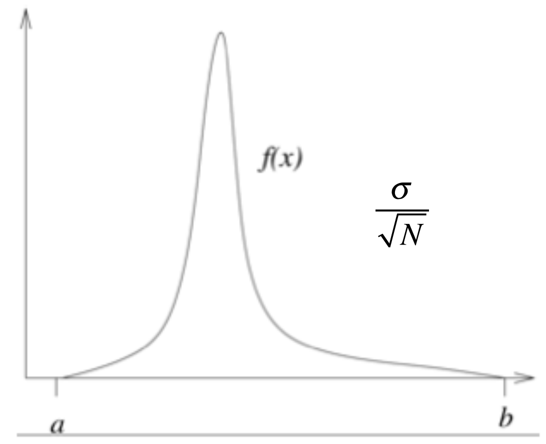
Erros estatísticos - cuidado

- Não há garantias que os pontos da função têm uma distribuição gaussiana
  - Equação anterior dá somente uma estimativa do erro esperado
- Mesmo que tenhamos uma distribuição gaussiana, N deve ser grande para termos um resultado confiável

Importância da amostragem

- Um dos métodos para aumentar a precisão da integração MC é reduzir a variância.
- Como a integração MC é proporcional a $\frac{\sigma}{\sqrt{N}}$ fica claro que se reduzirmos a variância podemo aumentar a precisão com o mesmo N.
- Isso é intuititvamente fácil de entender

Importância da amostragem



$$\frac{\sigma}{\sqrt{N}}$$

Se gerarmos pontos uniformemente distribuídos no intervalo [a,b] teremos pouca contribuição da área onde temos o pico

A idéia por trás da importância da amostragem é transformamos f(x) em uma função mais suave

Considere uma função g(x) normalizada no intervalo [a,b] com a propriedade que

$$\frac{f(x)}{g(x)}$$

é suave.

g(x) > 0 para todo o intervalo.

importância da amostragem

- Desejamos calcular

$$I = \int_a^b f(x)dx = \int_a^b \frac{f(x)}{g(x)} g(x)dx = \int_a^b \frac{f(x)}{g(x)} dG(x)$$

- Onde $G(x) = \int_a^x g(x)dx$

- Fazendo a mudança de variável, r=G(x), obtemos

$$I = \int_{G(a)}^{G(b)} \frac{f(G^{-1}(r))}{g(G^{-1}(r))} dr$$

importância da amostragem

- O cálculo da integral é feito da mesma maneira

$$I = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\frac{f(G^{-1}(r_i))}{g(G^{-1}(r_i))}$$

- onde r_i são números aleatórios uniformemente distribuídos.
- Temos ainda que determinar $G^{-1}(r_i)$
- Alternativa: gerar números aleatórios com a distribuição g(x), por qualquer meio. Não necessariamente analítico.

Amostragem por importância – um exemplo

- Cálculo da integral $$I = \int_0^1 e^{-x^2} dx$$
- Nessa região a função decresce 1/e. A função e^{-x} faz o mesmo.
- Normalização $$\int_0^1 e^{-x} dx = -\frac{1}{e} + 1 = 1 - \frac{1}{e} = \frac{e-1}{e}$$
- Função normalizada $$g(x) = \frac{e^{-x} e}{(e-1)}$$
- Então $$G(x) = \int_0^x \frac{e^{-x} e}{e-1} dx = \frac{(1-e^{-x})e}{e-1}$$

Amostragem por importância– um exemplo

- A inversa é dada por

$$G^{-1}(u) = -\log\left(1 - u\frac{e-1}{e}\right)$$

```
srand(); e=exp(1);
sum=0.0;
for(i=0;i<N;i++) {
r=-log(1-rand()*(e-1)/e);
foverg=exp(-r*r)/( exp(-r)*e/(e-1) );
sum+=foverg;
}
printf("%lf\n", sum/N);
```

amostragem por importância– um exemplo

- Resultado exato $\mathrm{erf}(1) * \sqrt{(\pi)}/2 = 0.746824$
- Amostragem por importância é mais lento, mas dá melhores resultados

	Amostragem direta		Amostragem por importancia	
N	tempo	Resultado	tempo	Resultado
1000	0.05386	0.7466441554	0.13347	0.7467940007
10000	0.53858	0.7468034381	1.33553	0.7468173704
100000	5.38048	0.7468234461	13.35917	0.7468217736
1000000	53.80201	0.7468274528	133.67710	0.7468245820
10000000	538.79680	0.7468264636	1335.09514	0.7468244071