

Tratamento Estatístico de Dados em Física

Vitor Oguri & Alberto Santoro

Departamento de Física Nuclear e Altas Energias (DFNAE)

Instituto de Física - Universidade do Estado do Rio de Janeiro

(24 de agosto de 2009)

Índice

I	Métodos Probabilísticos de Simulação	2
A	O Experimento de Buffon	2
B	Geração de Eventos	4
1	Monte Carlo	4
2	Método de Inversão	5
3	Método de Rejeição Simples	6
C	Cálculo de Integrais e Médias	7
1	Método de Rejeição Simples	7
2	Método Direto	7
D	Redução de Incertezas	8
1	Transformação e Inversão	8
2	Métodos de Rejeição	9
E	Método de Metropolis	10
	Apêndices	13
I	Simulação Direta	13
	O Experimento de Rutherford-Geiger	13

I. MÉTODOS PROBABILÍSTICOS DE SIMULAÇÃO

A. O Experimento de Buffon

Em 1777, o francês Georges Buffon [1] determinou o valor de π , a partir de lançamentos de uma agulha de comprimento ℓ sobre uma folha de papel, onde foram traçadas linhas paralelas separadas por uma distância $d \geq \ell$ (Fig. 1).

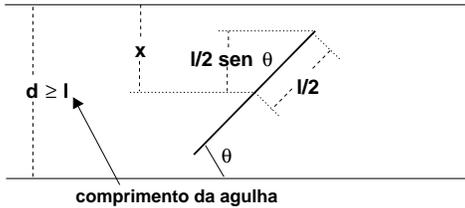


Fig. 1. O experimento da agulha de Buffon.

De acordo com o esquema da Fig. (1), o ângulo θ e a distância x , do ponto médio da agulha à linha mais próxima, são as coordenadas que caracterizam a configuração espacial da agulha.

Desse modo, pode-se analisar o experimento no chamado espaço de configurações do sistema (Fig. 2), onde o lugar geométrico para os possíveis pares de coordenadas (θ, x) é um retângulo de lados π e $d/2$, de área $A = \pi d/2$.

Nesse contexto, as interseções da agulha em uma linha qualquer, só ocorrerão se a condição $x \leq (\ell/2) \text{sen}\theta$ for satisfeita, ou seja, se θ e x forem as coordenadas de um ponto sob a curva definida pela função $x = (\ell/2) \text{sen}\theta$, no espaço de configurações,

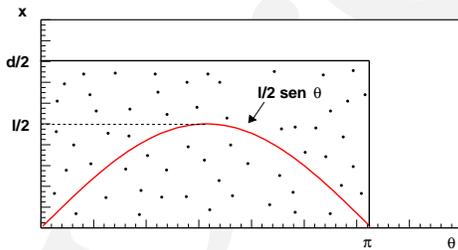


Fig. 2. Espaço de configurações do experimento de Buffon.

Considerando que os lançamentos da agulha são

uniformemente aleatórios, esses lançamentos correspondem a pontos que se distribuem uniformemente na região (retangular) acessível do espaço de configurações.

O experimento de Buffon é análogo também às tentativas de acertar uma região alvo, a partir de disparos aleatórios, distribuídos uniformemente, sobre uma região retangular ao redor do alvo.

Assim, de maneira alternativa, cada interseção pode ser considerada também como um disparo de sucesso (evento) e, a probabilidade p (*a posteriori*) de interseção da agulha, após N lançamentos (tentativas), é dada por

$$p = m/N$$

onde m é o número de sucessos.

Do ponto de vista geométrico, a probabilidade p (*a priori*) pode ser expressa pela razão entre a área I sob a curva senoidal e a área A do retângulo de lados π e $d/2$, de modo que

$$p = I/A = m/N$$

ou seja,

$$p = \frac{2 \ell}{\pi d} = \frac{m}{N}$$

uma vez que a área (I) sob a curva senoidal é dada pela integral $I = \int_0^\pi \frac{\ell}{2} \text{sen}\theta \, d\theta = \ell$.

Desse modo, a partir de N lançamentos de uma agulha, pode-se estimar experimentalmente, o valor de π por

$$\pi = \left(\frac{2N}{m}\right) \left(\frac{\ell}{d}\right)$$

Por outro lado, em vez do valor de π , se não soubermos calcular a integral I pode-se estimar o seu valor por

$$I = A \frac{m}{N} = \frac{\pi d}{2} \left(\frac{m}{N}\right)$$

Para N_{exp} repetições de um experimento de Buffon com N lançamentos (tentativas), as frequências (f_m^{esp}) esperadas para os números (m) de interseções obedecerão à seguinte distribuição binomial (Fig. 3)

$$f_m^{\text{esp}} = N_{\text{exp}} \times \frac{N!}{(N-m)!m!} p^m (1-p)^{(N-m)}$$

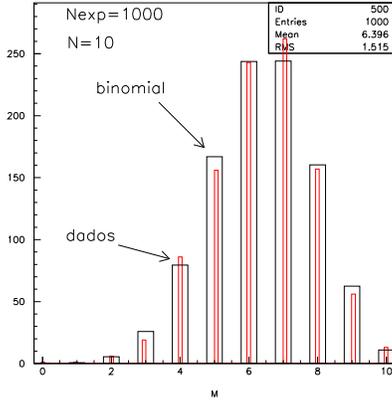


Fig. 3. Histograma dos resultados (dados) da simulação de 1000 (N_{exp}) experimentos de Buffon, cada qual com 10 (N) lançamentos, e da distribuição binomial esperada para os números (m) de intercepções, para $d = \ell = 1$.

com média $\mu = \langle m \rangle = Np = N2/\pi = 6.3662$ e desvio padrão $\sigma_m = \sqrt{Np(1-p)}$.

A partir da geração de (N_{amos}) amostras da simulação de (N_{exp}) experimentos de Buffon, cada qual com N lançamentos, pode-se verificar a boa aderência entre as distribuições dos resultados da simulação e da binomial esperada.

De fato, calculando-se para cada amostra j o valor da quantidade

$$\chi_j^2 = \sum_{m=0}^N \frac{(f_m^j - f_m^{\text{esp}})^2}{f_m^{\text{esp}}} \quad (j = 1, \dots, N_{\text{amos}})$$

onde f_m é a frequência associada ao número (m) de sucessos em N_{exp} experimentos de Buffon e f_m^{esp} é a correspondente frequência esperada, pode-se verificar que a quantidade χ_j^2 obedece a uma distribuição de χ^2 (Fig. 4) cujo número (ν) de graus de liberdade é determinado pela relação de vínculo $\sum_{m=0}^N f_m^j = \sum_{m=0}^N f_m^{\text{esp}} = N_{\text{exp}}$, entre as frequências, e ao fato de que os parâmetros da distribuição binomial, que determina as frequências esperadas, são determinados a partir do número de sucessos m . Ou seja, o número de graus de liberdade ν é igual a $N - 2$.

Desse modo, a incerteza no valor de π , para um grande número ($N \gg 1$) de lançamentos (ou

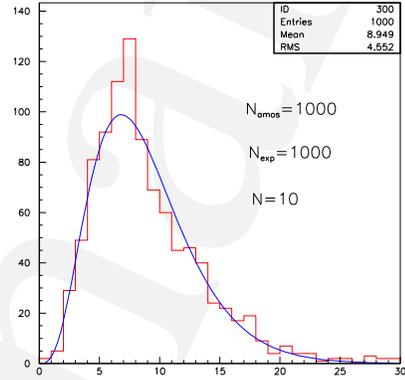


Fig. 4. Distribuição dos valores de χ^2 para 1000 (N_{amos}) amostras da simulação de 1000 (N_{exp}) experimentos de Buffon, cada qual com 10 (N) lançamentos, com relação à distribuição binomial esperada para os números (m) de intercepções em cada amostra. A função de ajuste é uma distribuição de χ^2 com $\nu = 9$ graus de liberdade.

tentativas), é dada por

$$\sigma_\pi = \pi \frac{\sigma_m}{m} = \frac{\pi}{Np} \sqrt{Np(1-p)}$$

ou seja,

$$\sigma_\pi = \frac{\pi}{\sqrt{N}} \sqrt{\frac{1}{p} - 1} = \pi \sqrt{\frac{1}{m} - \frac{1}{N}}$$

A Fig. (5) mostra a concordância entre a estimativa da incerteza teórica, dada por $\sigma_\pi = 2.3735/\sqrt{N}$, para a simulação de um experimento de Buffon, no qual $d = \ell = 1$, e $p = 2/\pi = 0.63662$, no cálculo do valor de π .

Assim, a incerteza no valor da integral é dada por

$$\sigma_I = \frac{A}{N} \sigma_m = \frac{A}{N} \sqrt{Np(1-p)}$$

ou seja,

$$\sigma_I = \frac{A}{\sqrt{N}} \sqrt{\epsilon(1-\epsilon)} = \frac{A}{\sqrt{N}} \sqrt{\frac{m}{N} \left(1 - \frac{m}{N}\right)}$$

onde a probabilidade de sucesso $p = m/N = \epsilon$ é chamada também de eficiência do experimento.

Um outro resultado, derivado do experimento de Buffon, é que a seqüência de números $\{\theta_i\}$, correspondentes aos pares (θ, x) que satisfazem

B. Geração de Eventos

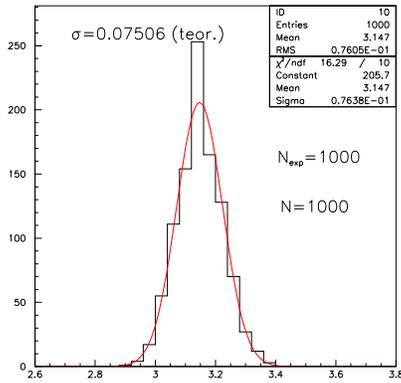


Fig. 5. Distribuição de valores de π , a partir da simulação de 1000 (N_{exp}) experimentos de Buffon, cada qual com 1000 (N) lançamentos, cuja incerteza esperada é dada por $2.3735/\sqrt{1000} = 0.07506$, para $d = \ell = 1$, e $p = 2/\pi = 0.63662$.

a condição de interceptação, estarão distribuídos segundo a função $f(\theta) = \sin \theta$ (Fig. 6).

Essa é a característica do experimento na qual se baseia o chamado método da rejeição para a geração de eventos distribuídos segundo uma dada pdf¹.

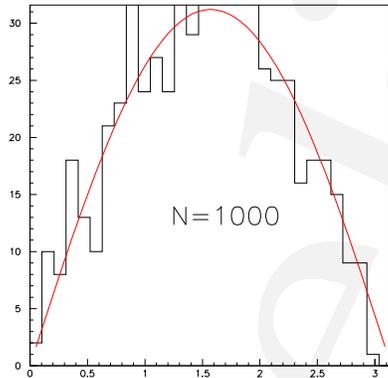


Fig. 6. Histogramas das coordenadas dos eventos de sucesso gerados a partir da simulação de um experimento de Buffon, com 1000 (N) tentativas, para o qual $d = \ell = 1$.

A geração de eventos aleatórios, que obedecem a distribuições de probabilidades conhecidas a priori, pode ser realizada a partir de simulações diretas (Apêndice I) de um fenômeno aleatório, como o decaimento radiativo, ou a partir de algoritmos baseados em métodos de Monte Carlo.

Em Física de Altas Energias, a geração de eventos a partir de simulações diretas é muito restritiva, ou mesmo impraticável pois, devido a enorme multiplicidade de partículas produzidas em colisões em altas energias, os processos (criação, aniquilação, bremsstrahlung) envolvidos são tão complexos que a simulação de eventos, em geral, não pode ser realizada diretamente. Daí a importância e a necessidade dos chamados métodos de Monte Carlo.

1. Monte Carlo

O experimento de Buffon, além de permitir o cálculo de integrais e médias, a partir de distribuições uniformes de números aleatórios, contém também os procedimentos sobre os quais se baseia um dos métodos numéricos probabilísticos (método da rejeição) de simulação de eventos, conhecidos genericamente como **métodos de Monte Carlo**.

A designação é uma alusão às roletas do famoso cassino Monte Carlo, de Mônaco, como geradores de números aleatórios distribuídos uniformemente num dado intervalo.

Apesar de ter sido utilizado por Fermi, em 1934, no estudo da difusão de nêutrons em materiais físséis, os primeiros algoritmos de Monte Carlo, aproveitando-se da capacidade dos computadores em realizar uma grande quantidade de operações, foram desenvolvidos por von Neuman, Ulam e Metropolis², durante a construção da bomba

¹Probability Density Function.

²N. Metropolis & S. Ulam, *The Monte Carlo Method*, Journal of the American Statistical Association, 44 (247), 335-341 (1949).

atômica, para a simulação tanto de problemas probabilísticos como determinísticos.

No sentido lato, um método de Monte Carlo possibilita, a partir de distribuições uniformes de números aleatórios, a geração de eventos (simulações) que obedecem a distribuições de probabilidades conhecidas *a priori*, ou a determinação de quantidades (integrais e médias) que, ou estão diretamente associadas à processos aleatórios, ou são associadas indiretamente a algum processo aleatório.

Praticamente, a construção de um algoritmo simples para um método de Monte Carlo, inicia-se a partir da geração de uma seqüência $\{r_1, r_2, \dots\}$ de números aleatórios distribuídos uniformemente no intervalo unitário $(0, 1)$, segundo $u(r)$ (Fig. 7).

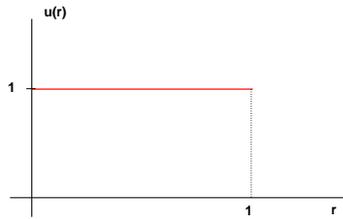


Fig. 7. Distribuição de probabilidades uniforme no intervalo $(0, 1)$.

Em seguida, adota-se alguns procedimentos (integração, inversão, rejeição, transformação, termalização de Metropolis) para se determinar e gerar uma outra seqüência $\{x_1, x_2, \dots\}$ de números aleatórios distribuídos de acordo com uma dada distribuição $f(x)$, num intervalo (a, b) (Fig. 8).

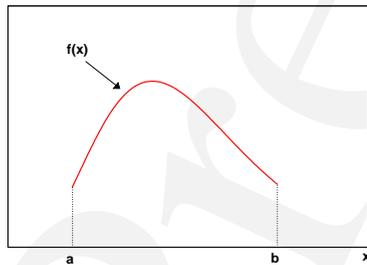


Fig. 8. Distribuição genérica $f(x)$ de probabilidades num intervalo (a, b) .

2. Método de Inversão

Se encararmos as seqüências $\{r_i\}$ e $\{x_i\}$ como conjuntos de eventos equivalentes, a probabilidade de ocorrência de um valor r_i num intervalo $(r, r+dr)$ é igual à probabilidade de ocorrência de um valor x_i no intervalo correspondente $[x(r), x(r) + dx]$, ou seja,

$$u(r) dr = f(x) dx$$

Assim, a probabilidade de que r_i seja menor que um valor genérico r é igual à probabilidade de que x_i seja menor que um correspondente $x(r)$,

$$r = \int_a^{x(r)} f(x') dx' \in (0, 1)$$

Desse modo, os valores de $x(r)$ gerados no intervalo (a, b) , a partir da inversão da integral de $f(x)$, estarão distribuídos segundo $f(x)$ ³.

Por exemplo, uma seqüência $\{x_i\}$ de números aleatórios distribuídos de acordo com uma **pdf** exponencial,

$$f(x) = \frac{1}{\lambda} e^{-x/\lambda} \quad (0, \infty)$$

pode ser gerada (Fig. 9) a partir da relação

$$x(r) = -\lambda \log(1 - r)$$

onde r são números distribuídos uniformemente entre 0 e 1.

Como $(1 - r)$ também são números distribuídos uniformemente entre 0 e 1, a seqüência $\{x_i\}$ pode ser calculada também por

$$x(r) = -\lambda \log r$$

³Se $f(x)$ não for uma **pdf**, ou uma função normalizada, deve-se normalizá-la e, gerar os eventos a partir de

$$r = \frac{1}{Z} \int_a^{x(r)} f(x') dx' \in (0, 1)$$

onde $Z = \int_a^b f(x) dx$

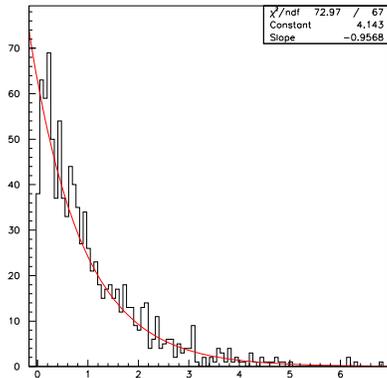


Fig. 9. Histograma da geração de 1000 eventos aleatórios distribuídos exponencialmente, segundo $f(x) = e^{-x}$.

3. Método de Rejeição Simples

Um outro procedimento geral de Monte Carlo para a simulação e geração de eventos, a partir de uma seqüência $\{r_1, r_2, \dots\}$ de números aleatórios distribuídos uniformemente num intervalo $(0,1)$, desenvolvido por Von Neumann, se apoia no experimento de Buffon.

De acordo com o experimento, tanto o problema da geração de eventos, segundo uma **pdf** $f(x)$, como o cálculo da integral de uma função genérica positiva $f(x)$, num intervalo (a,b) , podem ser encarados como uma seqüência de tentativas de acertar um alvo (uma certa região do espaço), a partir de disparos aleatórios distribuídos uniformemente numa região retangular de área $A = f_{\max}(b - a)$ que engloba o alvo (Fig. 10).

Assim, baseando-se no experimento de Buffon, a partir de duas seqüências $\{r_1^i\}$ e $\{r_2^j\}$ de números aleatórios distribuídos uniformemente no intervalo $(0,1)$, geram-se outras duas seqüências $\{x_1, x_2, \dots, x_N\}$ e $\{y_1, y_2, \dots, y_N\}$, uniformes nos intervalos (a,b) e $(0, f_{\max})$, respectivamente, a partir de $x = r_1(b - a) + a$ e $y = f_{\max}r_2$.

Nesse caso, a condição para que um disparo acerte o alvo, ou seja, que um ponto genérico (x,y) esteja na região limitada pela curva $f(x)$, pelas retas $x = a$ e $x = b$ e pelo eixo das abscissas, é dada por

$$y \leq f(x)$$

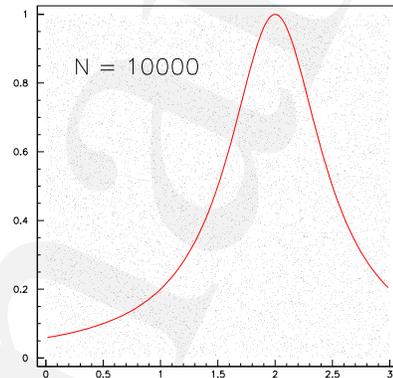


Fig. 10. Espaço de configuração para a geração de eventos distribuídos segundo uma **pdf** do tipo Breit-Wigner $\frac{\Gamma^2}{(x - \mu)^2 + \Gamma^2}$, de parâmetros $\mu = 2$ e $\Gamma = 1/2$ (FWHM), via método da rejeição, a partir de duas seqüências aleatórias de 10000 (N) valores distribuídos de maneira uniforme, respectivamente, entre os intervalos $(0, f_{\max} = 1)$ e $(a = 0, b = 3)$.

Desse modo, as coordenadas x dos eventos de sucesso (acerto ao alvo) que satisfazem a condição $y \leq f(x)$, constituem uma seqüência $\{x_i\}$ de valores distribuídos segundo $f(x)$ (Fig. 11).

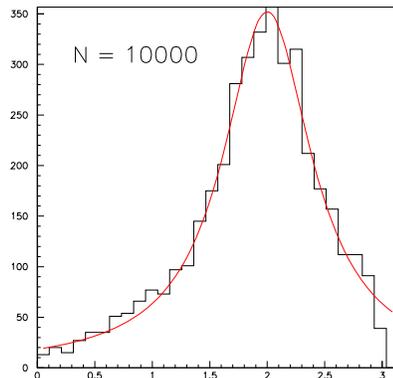


Fig. 11. Histograma de eventos aleatórios, gerados via método de rejeição, distribuídos segundo a **pdf** da Fig. 10.

C. Cálculo de Integrais e Médias

Associados aos problemas de geração de eventos, estão também os cálculos de integrais ou médias.

1. Método de Rejeição Simples

Se, na simulação por um método de rejeição simples, m é o número de eventos de sucesso, para um grande número (N) de tentativas, uma estimativa para a integral de $f(x)$ no intervalo (a, b) é dada por

$$I \pm \sigma_I = A \frac{m}{N} \pm \frac{A}{\sqrt{N}} \sqrt{\frac{m}{N} \left(1 - \frac{m}{N}\right)}$$

Para a **pdf** da Fig. (10), uma estimativa para a integral da Breit-Wigner,

$$I = \int_0^3 \frac{\Gamma^2}{(x - \mu)^2 + \Gamma^2} dx$$

é dada por $I = 1.2042 \pm 0.0147$.

Esse valor, para $N = 10000$, foi calculado a partir do fragmento de algoritmo mostrado abaixo.

```
double fun(double x)
{return (.5^2)/((x-2)^2 + .5^2);}

main()
{
  fmax=1.;
  m=0;
  A=3.;
  for (int i=1; i<=N; i++)
  {
    // rejeicao s/peso
    y = fmax*random(1);
    x = A*random(1);

    if (y < fun(x)) m++;
  }

  efic=float(m)/N;
  I=A*efic;
  sig=(A/sqrt(N))*sqrt(efic*(1-efic));
}
```

Uma vez que essa integral é conhecida também a priori ($I = 1.21255$), a eficiência teórica ϵ , nesse caso, é igual a $\epsilon = I/A = 0.4041833$, o que implica uma incerteza teórica da ordem de

$$\sigma_I = \frac{A}{\sqrt{N}} \sqrt{\epsilon (1 - \epsilon)} = 0.014722$$

para $A = 3$ e $N = 10000$.

2. Método Direto

Integrais definidas, num intervalo (a, b) , como

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

também podem ser estimadas diretamente, a partir de distribuições uniformes de números aleatórios num intervalo $(0, 1)$.

Fazendo-se a transformação $x' = (x - a)/(b - a)$, a integral pode ser escrita como uma integral no intervalo unitário $(0, 1)$.

$$I = (b - a) \underbrace{\int_0^1 f[x'(b - a) + a] dx'}_{I'}$$

Assim, se $\{x_1, x_2, \dots\}$ representa uma seqüência de números aleatórios que se distribuem uniformemente no intervalo $(0, 1)$, segundo $u(x)$, a integral I' pode ser escrita como o valor médio de uma função $h(x) = f[x(b - a) + a]$,

$$I' = \int_0^1 u(x) h(x) dx = \langle h \rangle$$

tal que seu valor seja dado pela média aritmética da seqüência $\{h(x_1), h(x_2), \dots\}$ gerada a partir de uma grande amostra de $\{x_i\}$,

$$\langle h \rangle = \frac{1}{N} \sum_i^N h(x_i)$$

com variância

$$\sigma_h^2 = \sqrt{\langle h^2 \rangle - \langle h \rangle^2}$$

Desse modo, a integral I de $f(x)$ pode ser estimada por

$$I = \frac{(b-a)}{N} \sum_{i=1}^N f[x_i(b-a) + a]$$

com incerteza

$$\sigma_I = (b-a)\sigma_h/\sqrt{N}$$

onde $\{x_i\}$ é uma seqüência de números aleatórios distribuídos uniformemente no intervalo $(0, 1)$.

O fragmento de algoritmo, a seguir, com $N = 3000$, foi utilizado para estimar o valor da integral,

$$\int_0^1 \frac{1}{1+x^2} dx = 0.785398$$

```
double fun(double x) {return 1/(1+x^2);}
```

```
main()
{
  a=0.;
  b=1.

  for (int i=1; i<=N; i++)
  {
    // direto s/peso
    x = random(1);
    hx=fun(x*(b-a)+a);
    sum = sum + hx;
    sumq= sumq + hx*hx;
  }
  h = sum/N;
  hq = sumq/N;
  sigh = sqrt(hq - h*h);

  I = (b-a)*h;
  sigI = (b-a)*sigh/sqrt(N);
}
```

que resultou em $I = 0.785319 \pm 0.000293$.

D. Redução de Incertezas

Tanto no método direto, quanto no método de rejeição simples, a incerteza na estimativa de uma integral depende do tamanho (N) da amostra da seqüência de números gerados aleatoriamente, segundo

$$\frac{1}{\sqrt{N}}$$

Devido a esse tipo de dependência, ao aumentarmos o tamanho da amostra, a incerteza é lentamente reduzida.

Para problemas unidimensionais, essa dependência implica que as incertezas estimadas a partir dos métodos de Monte Carlo são maiores do que as estimadas por quaisquer métodos numéricos não-probabilísticos. Entretanto, quando se simula distribuições ou se calcula integrais multidimensionais, enquanto a dependência da incerteza nos métodos de Monte Carlo permanece a mesma, as incertezas dos métodos tradicionais tornam-se maiores.

Por outro lado, para problemas que envolvem da ordem de 6 ou mais variáveis, os métodos não-probabilísticos tornam-se impraticáveis, ou nem mesmo existem.

1. Transformação e Inversão

Uma forma alternativa, e mais eficaz, para a redução da incerteza na estimativa de uma integral $I = \int_0^1 f(x) dx$, consiste em multiplicar e dividir o integrando por um fator de peso $w(x)$,

$$I = \int_0^1 w(x) \frac{f(x)}{w(x)} dx = Z \int_0^1 \frac{w(x)}{Z} h(x) dx$$

onde $Z = \int_0^1 w(x) dx$, de modo que o novo integrando $h(x) = f(x)/w(x)$ seja praticamente constante no intervalo de integração, o que pode ser conseguido se $w(x)$ segue as variações de $f(x)$.

Em seguida, geram-se amostras de x distribuídos

segundo o fator de peso, a partir da inversão de

$$r = \frac{1}{Z} \int_0^{x(r)} w(x') dx' \in (0, 1)$$

de modo que a integral possa ser estimada por

$$I = Z \times \langle h \rangle = \frac{Z}{N} \sum_{i=1}^N h(x_i)$$

com incerteza

$$\sigma_I = Z \sigma_h / \sqrt{N}$$

menor do que a da correspondente estimativa direta sem o fator de peso.

Por exemplo, a integral anterior, $I = 0.785398$, com $N = 3000$, calculada pelo algoritmo de transformação e inversão a seguir,

```
double fun(double x)
    {return 1/(1 + x^2);}
double w(double x)
    {return (4-2*x)/3.;}
double x(double y)
    {return 2.-sqrt(4-3*y);}

main()
{
    Z=1.;
    for (int i=1; i<=N; i++)
    {
        // direto c/peso
        r = random(1);
        y = x(r);
        hx = fun(y)/w(y);
        sum = sum + hx;
        sumq= sumq + hx*hx;
    }
    h = sum/N;
    hq = sumq/N;
    sigh = sqrt(hq - h*h);

    I = Z*h;
    sigI = Z*sigh/sqrt(N);
}
```

resultou em $I = 0.785369 \pm 0.000037$.

2. Métodos de Rejeição

Para os métodos de rejeição, a incerteza na estimativa de uma integral $I = \int_0^1 f(x) dx$, pode ser obtida aumentando-se a eficiência do método, ou seja, a fração de eventos de sucesso, englobando a **pdf** original $f(x)$ por uma outra curva $w(x)$, tal que $w(x) \geq f(x)$, para a qual pode-se gerar uma seqüência $\{x_i\}$ de N números aleatórios distribuídos segundo a mesma, a partir de uma seqüência uniforme $\{r_1^i\}$,

$$r_1 = \frac{1}{Z} \int_0^{x(r_1)} w(x') dx' \in (0, 1)$$

onde $Z = \int_0^1 w(x) dx$.

Em seguida, a partir de uma outra seqüência uniforme $\{r_2^i\}$, gera-se uma correspondente seqüência $\{y_i\}$ de N números aleatórios distribuídos uniformemente entre 0 e $w(x_1)$,

$$y_i = w(x_i) \times r_2^i$$

A partir, então, da contagem dos pares (x_i, y_i) de valores que satisfazem a condição $y \leq f(x)$, a integral pode ser estimada por

$$I = A \frac{m}{N}$$

onde m é o número total de pares (x_i, y_i) não rejeitados pela condição $y \leq f(x)$, N é o número total de pares gerados e $A = Z$.

A mesma integral anterior, $I = 0.785398$, com $N = 3000$, pode ser calculada pelo algoritmo de rejeição com peso a seguir,

```
double fun(double x)
{return 1/(1 + x^2);}
double w(double x)
{return (4-2*x)/3.;}
double x(double y)
{return 2.-sqrt(4-3*y);}

main()
{
  m=0;
  Z=1.;
  A=Z;
  for (int i=1; i<=N; i++)
  {
    // rejeicao c/peso
    r1 = random(1);
    x1 = x(r1);

    r2 = random(1);
    y = w(x1)*r2;

    if (y < fun(x)) m++;
  }

  efic=float(m)/N;
  I=A*efic;
  sig=(A/sqrt(N))*sqrt(efic*(1-efic));
}
```

resultou em $I = 0.786323 \pm 0.0007482$.

A Fig. 12 mostra algumas distribuições $f(x)$ e, correspondentes, possíveis fatores de peso $w(x)$ ou envoltórias.

A geração de eventos, a partir do método rejeição simples, e a determinação de integrais, partir dos métodos direto e de rejeição simples, não dependem de integrações de funções adicionais. Por outro lado, a utilização de métodos para a redução de incertezas, quando se fazem transformações do integrando, ou se aumenta a eficiência nos métodos de rejeição, pressupõem a determinação e a inversão de integrais de funções adicionais.

Assim, a escolha de um método para simulação, além da redução de incertezas, depende do compromisso entre o tempo de processamento, a

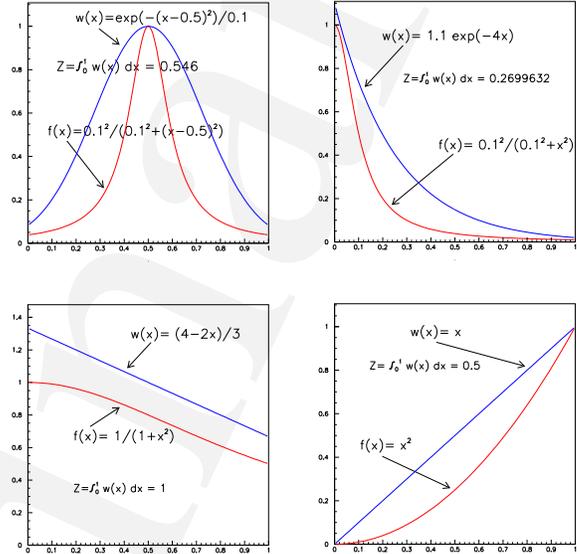


Fig. 12. Comportamentos típicos de algumas distribuições $f(x)$ e possíveis fatores de peso $w(x)$.

eficiência e a simplicidade do método. Em geral, num mesmo problema são utilizados vários métodos.

E. Método de Metropolis

Um outro procedimento de simulação, talvez o mais eficaz, que tanto pode ser utilizado na geração de eventos como na integração de funções é o chamado **Método de Metropolis**.

O método apoia-se na compararação da transformação que pode ser realizada em uma integral para a redução da incerteza,

$$I = \int f(x) dx = \int \frac{w(x)}{Z} \underbrace{\frac{f(x)}{w(x)/Z}}_{h(x)} dx$$

onde $Z = \int w(x) dx$, com o cálculo da média de uma grandeza (h), associada a um sistema em equilíbrio térmico, à temperatura T .

$$\langle h \rangle = \int \frac{\overbrace{e^{-\varepsilon(x)/kT}}^{w(x)}}{Z} h(x) dx$$

onde x representa um conjunto $\{x_i\}$ de variáveis que caracterizam o sistema, $\varepsilon(x)$ é a energia de cada

configuração e $Z = \int \underbrace{e^{-\varepsilon(x)/kT}}_{w(x)} dx$ é a função de partição.

Baseando-se nessa analogia, Metropolis [7] introduz um algoritmo, a partir do qual a integral pode ser calculada por um método probabilístico.

Em equilíbrio térmico, as transições (Q) do sistema entre suas várias configurações podem ser relacionadas por ⁴

$$w(x) Q(x \rightarrow x') = w(x') Q(x' \rightarrow x)$$

onde $Q(x \rightarrow x')$ é a taxa de transição de um estado de configuração x para um estado x' .

Do ponto de vista probabilístico, diz-se que o processo (estocástico) de transição entre os estados constitui uma cadeia de Markov.

Denotando-se $\beta = 1/kT \implies w(x) = e^{-\beta\varepsilon(x)}$, a condição de equilíbrio entre as transições do sistema pode ser expressa por

$$\frac{T(x \rightarrow x')}{T(x' \rightarrow x)} = e^{-\beta \overbrace{(\varepsilon - \varepsilon')}^{\Delta\varepsilon}}$$

Se x e x' são configurações do sistema tais que

$$- \varepsilon > \varepsilon' \quad (\Delta\varepsilon < 0)$$

$$- \varepsilon > \varepsilon' \quad (\Delta\varepsilon > 0) \quad \text{e} \quad e^{-\beta\Delta\varepsilon} > r \in (0, 1)$$

a transição é aceita.

Como primeiro passo para a construção de um algoritmo para implementar o cálculo de uma integral segundo o método de Metropolis, seleciona-se uma configuração inicial x_o e calcula-se $w(x_o)$.

A seguir, através de uma variação aleatória (Δx) entre $-\Delta$ e Δ ,

$$\Delta x_i = \Delta(2r_i - 1)$$

determina-se uma nova possível configuração,

$$x_i = x_o + \Delta x_i$$

O tamanho da variação é determinado pela taxa de aceitação desejada. Um valor grande para Δ resulta pequena taxa de aceitação.

A nova configuração é aceita com probabilidade

$$p = \frac{w(x_i)}{w(x_o)}$$

isto é, se $p \geq r_i \in (0, 1)$ a nova configuração é aceita, senão a configuração anterior passa a ser considerada como a nova.

Em geral, a geração de novas possíveis configurações é realizada após N_{term} vezes (termalização) para evitar a influência da configuração inicial.

Além disso, o número (N_{siz}) de configurações possíveis, $\{x_k\}$, é escolhido após a realização de um certo número (N_{step}) passos para evitar correlações entre configurações sucessivas.

Assim, o resultado da integração de uma função $h(x)$ é dada por

$$I = \frac{Z}{N_{\text{siz}}} \sum_{k=1}^{N_{\text{siz}}} h(x_k)$$

com incerteza

$$\sigma_I = Z\sigma_h/\sqrt{N}$$

Para minimizar correlações entre configurações sucessivas e determinar o número de passos adequados, deve-se realizar um estudo sobre a variação da função de autocorrelação,

$$C_l = \frac{\langle h_{n+l} h_n \rangle - \langle h_n \rangle^2}{\langle h_n^2 \rangle - \langle h_n \rangle^2}$$

⁴Esse é o chamado Princípio do Balanceamento Detalhado.

Segue-se um algoritmo para a implementação do método de Metropolis, para a integral anterior, $I = 0.785398$, com a possibilidade de se determinar a função de autocorrelação.

```
double xm,rw,wm,delta=.4,Z=.7469;
int n_acept;

double fun(double x)
    {return 1/(1 + x^2);}
double wx(double x)
    {return (exp(-x*x));}

void metropolis(double &xm,double &wm,
                int &n_acept)
{
    double xsav,wtry,rxm;
    xsav = xm;
    rxm = random(1);

    xm=xm+2*delta*(rxm-.5);
    if ((xm < 0.)||(xm >1.)) xm=xsav;

    wtry = wx(xm);

    rw = random(1);

    if (wtry > (wm*rw))
        {
            wm = wtry;
            n_acept++;
        }
    else xm = xsav;
}

main()
{
    int N_siz=3000,N_amos=100,
        N_step=15,lj,N_term=1000;

    for (int j=1; j<=N_amos; i++)
        {
            xm = random(1);
            wm = wx(xm);
            n_acept=0;

            //termalizacao
            for (int l=1; l<=N_term; l++)
                metropolis(xm,wm,n_acept);

            sum = 0.;
```

```
sumq = 0.;
n_acept=0;

fsb=0.;
fs1=0.;
fs2=0.;
lj=N_step+1;

for (int i=1;i<=N_siz*N_step;i++)
    {
        if (i==1) fxb = fun(xm)/wx(xm);
        if (i%lj == 0)
            fxb = fun(xm)/wx(xm);

        metropolis(xm,wm,n_acept);

        if (j%N_step == 0)
            {
                sum = sum + fun(xm)/wx(xm);
                sumq = sumq + (fun(xm)/wx(xm))
                    * (fun(xm)/wx(xm));
                fxa=fun(xm)/wx(xm);
                fsb=fsb+fxb;
                fs1=fs1+fxb*fxb;
                fs2=fs2+fxa*fxb;
            }
    }

corr = (fs2-fsb*fsb/N_siz)/
        (fs1-fsb*fsb/N_siz);
I = Z*sum/N_siz;
sigsq = sqrt(sumq - sum^2);
sig = Z*sigsq/sqrt(N_siz);
accept = float(n_acept)/
        (N_siz*N_step);
}
```

o resultado, para $N_{siz} = 3000$ e $N_{step} = 15$, foi de $I = 0.785321 \pm 0.000749$.

Apêndices

I Simulação Direta

O fenômeno da radioatividade é o exemplo mais simples de um processo físico aleatório que pode ser utilizado para ilustração de um método de simulação direta.

Se a probabilidade (p) de que um núcleo de um isótopo radioativo decaia em outro núcleo, emitindo uma partícula α , num pequeno intervalo de tempo dt é dada por

$$p = \lambda dt$$

e, inicialmente, existem N_0 núcleos, o número médio de núcleos restantes $\langle N \rangle_t$, após um intervalo de tempo t , é dado pela lei de decaimento exponencial,

$$\langle N \rangle_t = N_0 e^{-\lambda t}$$

onde λ , a chamada constante de decaimento está relacionada com a meia-vida ⁵ ($T_{1/2}$) do isótopo por $\lambda = (\log 2)/T_{1/2}$.

O fragmento de algoritmo abaixo pode ser utilizado para simular esse comportamento.

```
N = NO (numero inicial de nucleos)
LOOP de t=0 a T, step dt
  Nr = N
  LOOP sobre nucleos restantes (Nr)
    IF [random(1) < p] N = N - 1
  END LOOP sobre nucleos
  WRITE t,N
END LOOP temporal
```

Esse algoritmo pressupõe o conhecimento da quantidade inicial de núcleos, informação que não é experimentalmente factível.

II O Experimento de Rutherford-Geiger

Experimentalmente, para isótopos com meias-vidas da ordem de horas, ou seja, constantes de decaimentos da ordem de 10^{-4}s^{-1} , as partículas α emitidas durante certos intervalos de tempo ($T \approx 10\text{s}$) podem ser detectadas e contadas. Esse foi o procedimento realizado por E. Rutherford e Geiger, que observaram o decaimento de uma amostra de polônio (Po), num certo número (2608) de intervalos de tempo (7.5s) pré-determinados.

Uma vez que a quantidade de núcleos é da ordem de 10^{23} , pode-se considerar que, em cada intervalo de tempo pré-determinado (T), muito menor que a meia-vida do isótopo, a probabilidade (p) de detecção de uma partícula α , além de ser extremamente pequena, é constante e igual a $p = \lambda T$, pois o número de núcleos praticamente não se altera.

Desse modo, o número (m) de partículas α detectadas obedece a uma distribuição binomial que tende a uma distribuição de Poisson.

-
- [1] <http://mathworld.wolfram.com/BuffonsNeedleProblem.html>
 - [2] F. James, *Monte Carlo theory and practice*, reprinted in *Experimental Techniques in High Energy Physics*, T. Ferbel (ed.), Addison-Wesley Pub., 1987, from *Report on Progress Physics*, vol. 43, 1145-1189, 1980.
 - [3] I. Manno, *Introduction to the Monte Carlo Method*, Akadémiai Kiadó, Budapest, 1999.
 - [4] G. Cowan, *Statistical Data Analysis*, Oxford Press, 1998.
 - [5] P. R. Bevington & D. K. Robinson, *Data Reduction and Error Analysis for the Physical Sciences*, 2nd. edition, MacGraw-Hill, Inc., 1992.
 - [6] A. Santoro, S. Novaes e V. Oguri, *Noções de Estatística, Simulações e Erros*, CBPF-NT-001/01.
 - [7] N. Metropolis, A. W. & M. N. Rosenbluth & A. H. & E. Teller, *Equation of State Calculations by Fast Computing Machines*, *J. Chim. Phys.*, 21, 1087-1092, 1953.
 - [8] <http://pdg.lbl.gov/>

⁵Intervalo de tempo em que o número médio de núcleos que decaem é reduzido à metade. $T_{1/2}$ varia de $3 \times 10^{-7}\text{s}$ (${}_{84}\text{Po}^{212}$) até 5×10^{15} anos (${}_{60}\text{Nd}^{144}$).