

AGA 511

Métodos Computacionais em Astronomia

Segundo semestre de 2023

Método de Monte Carlo

- * Referência básica: caps. 2 e 3 da minha tese de doutorado (no Moodle)
- * Origem na II Guerra Mundial
 - propagação de nêutrons em meios materiais
 - John von Neumann e Stanislas Ulam
- * **Princípio básico do MMC:** simular um grande número de vezes a propagação de nêutrons individuais, levando em conta todos os eventos possíveis
- * Pode ser aplicado sempre que cada processo físico envolvido possa ser descrito em termos de uma distribuição de probabilidades

Princípio Fundamental do MMC

- * Seja um processo físico associado a uma variável x , definida no domínio $[a, b]$
- * Exemplo: espalhamento da luz, definido entre 0 e 180 graus
- * Função distribuição de probabilidades:

→ $p(x) dx$ é a probabilidade de x estar entre x e $x + dx$

→ normalizada:

$$\int_a^b p(x') dx' = 1$$

→ Função cumulativa de probabilidades:

$$P(x) = \int_a^x p(x') dx', \quad 0 \leq P \leq 1$$

Princípio Fundamental do MMC

- * A probabilidade de que P esteja no intervalo $[P, P+dP]$ é a mesma que a variável x esteja em $[x, x+dx]$:

$$\wp(P)dP = p(x)dx$$

Como $p(x) = dP / dx$, temos que

$$\wp(P)dP = dP, \therefore \wp(P) = 1$$

Valores da função cumulativa de probabilidades estão distribuídos uniformemente entre 0 e 1.

Princípio Fundamental do MMC

- * Segue-se que, para amostrar um valor de P , pode-se usar a seguinte relação:

$$P(x) = \xi$$

onde ξ é um número aleatório entre 0 e 1. Portanto, para amostrar um valor x_s da variável x devemos resolver a seguinte equação:

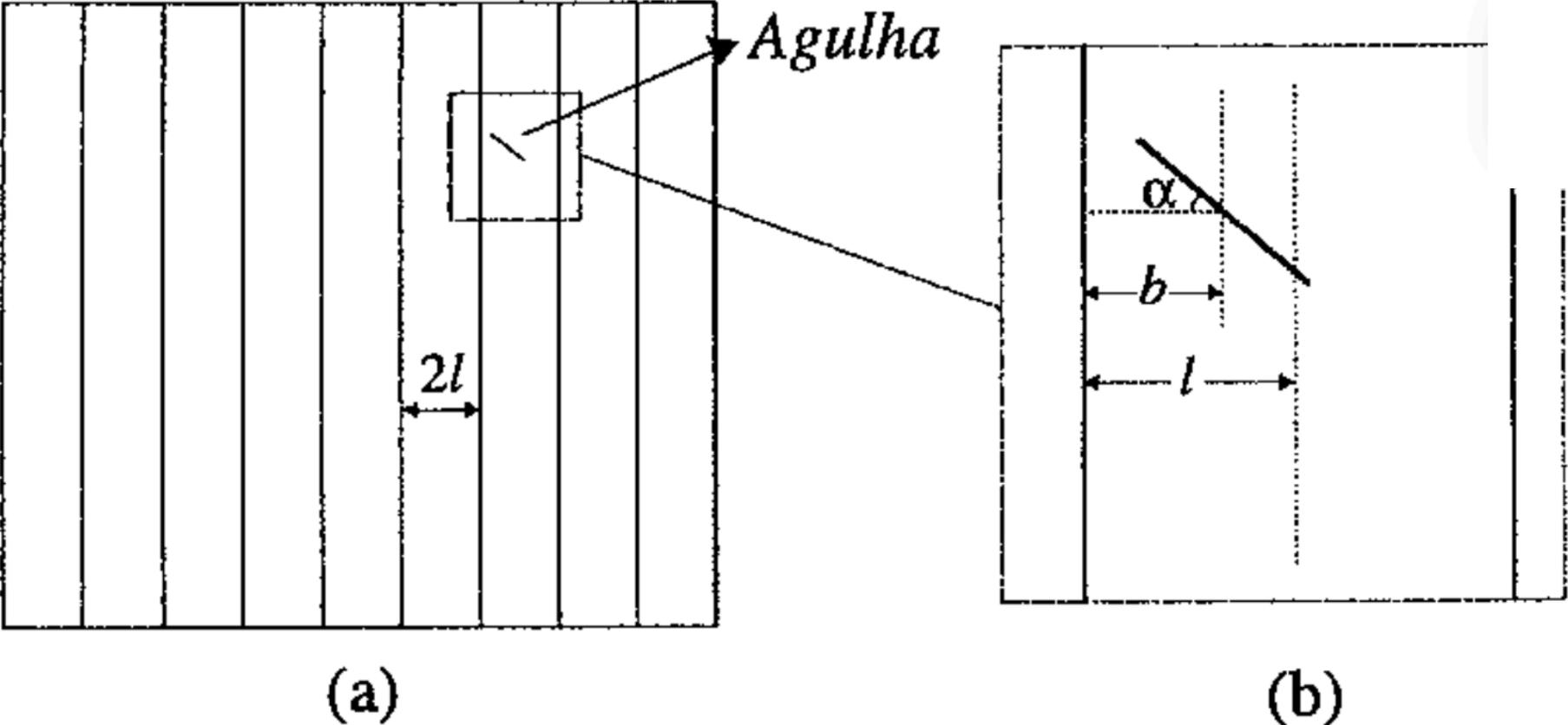
$$\xi = \int_a^{x_s} p(x) dx$$

Exemplo 1 - A agulha de Buffon

- * Buffon's needle: https://en.wikipedia.org/wiki/Buffon%27s_needle
- * Agulha de comprimento l lançada N vezes sobre uma cartolina grande, com linhas paralelas separadas de $2l$
- * É possível mostrar que a probabilidade de um lançamento cair sobre uma linha é $1/\pi$
- * Seja N_1 o número de vezes que a agulha cai sobre uma linha. É possível mostrar que

$$r = \frac{N_1}{N} = \frac{1}{\pi}$$

Exemplo 1 - A agulha de Buffon



Exemplo 1 - A agulha de Buffon

- * Implementação MC
- * Modelo do sistema:
 - 2 entidades: agulha e cartolina
 - 1 processo: lançamento
 - 2 eventos: distribuição discreta
- * Amostragem de um evento:
 - $b \in [0, l[\rightarrow b = \xi l$
 - $\alpha \in [0, \pi/2[\rightarrow \alpha = \xi \pi/2$
- * Condição para verificar se a agulha está sobre uma linha:

$$\frac{l}{2} \cos(\alpha) \geq b$$

Exemplo 1 - A agulha de Buffon

- * **Erro de Monte Carlo**

- * Seja r_e a razão experimental obtida a partir de uma simulação com N lançamentos.

- * O erro cometido será da ordem de: $\sigma_{r_e} = \frac{r_e}{\sqrt{N}}$

Tabela 2.1 – Resultados para simulações da experiência da agulha.

<i>Nº de lançamentos</i>	<i>N/N_1</i>	<i>Erro da Simulação</i>	<i>Erro real</i>
10	2,5	0,8	0,6
1.000	3,27	0,10	0,13
10.000	3,09	0,03	0,05
1.000.000	3,134	0,003	0,007
100.000.000	3,1419	0,0003	0,0003
500.000.000	3,1415	0,0001	0,0001

Exemplo 1 - A agulha de Buffon

- * **Curiosidade: Lazzarini (1901)** - 34080 lançamentos
- * Obteve: 3.1415929. Bom demais para estar correto!

Tabela 2.1 – Resultados para simulações da experiência da agulha.

<i>Nº de lançamentos</i>	<i>N/N_1</i>	<i>Erro da Simulação</i>	<i>Erro real</i>
10	2,5	0,8	0,6
1.000	3,27	0,10	0,13
10.000	3,09	0,03	0,05
1.000.000	3,134	0,003	0,007
100.000.000	3,1419	0,0003	0,0003
500.000.000	3,1415	0,0001	0,0001

Método de Monte Carlo

Esse exemplo, apesar de muito simples, é útil para identificarmos os principais “ingredientes” de um código de Monte Carlo. Começa-se com a formulação de um modelo para o sistema estudado. Em seguida, identificam-se as *entidades* do modelo e os *processos* aos quais essas entidades estarão sujeitas. Finalmente, definem-se as *configurações* das entidades que são relevantes ao problema.

EP 1 - A agulha de Buffon

- * Fazer um programa em C ou Fortran ou Python que resolva o problema da agulha de Buffon usando o método de MC
- * **Entrada:** número de lançamentos a serem simulados
- * **Saída:** estimativa de pi e seu erro respectivo
- * Entregar:
 1. Código fonte do programa pelo Collab
 2. Gráfico mostrando como o erro experimental se compara com o erro real como função de N . O erro real se comporta como o esperado? Discuta.

EP 1 - A agulha de Buffon

3. Estimativa de quantos lançamentos são necessários para se calcular π com 14 casas decimais, e quanto tempo isso leva em um CPU convencional

Data da entrega: 30/08

Será aceito o EP com atraso, mas será descontado 0,5 ponto por dia de atraso

Projeto - Imagem de uma Estrela

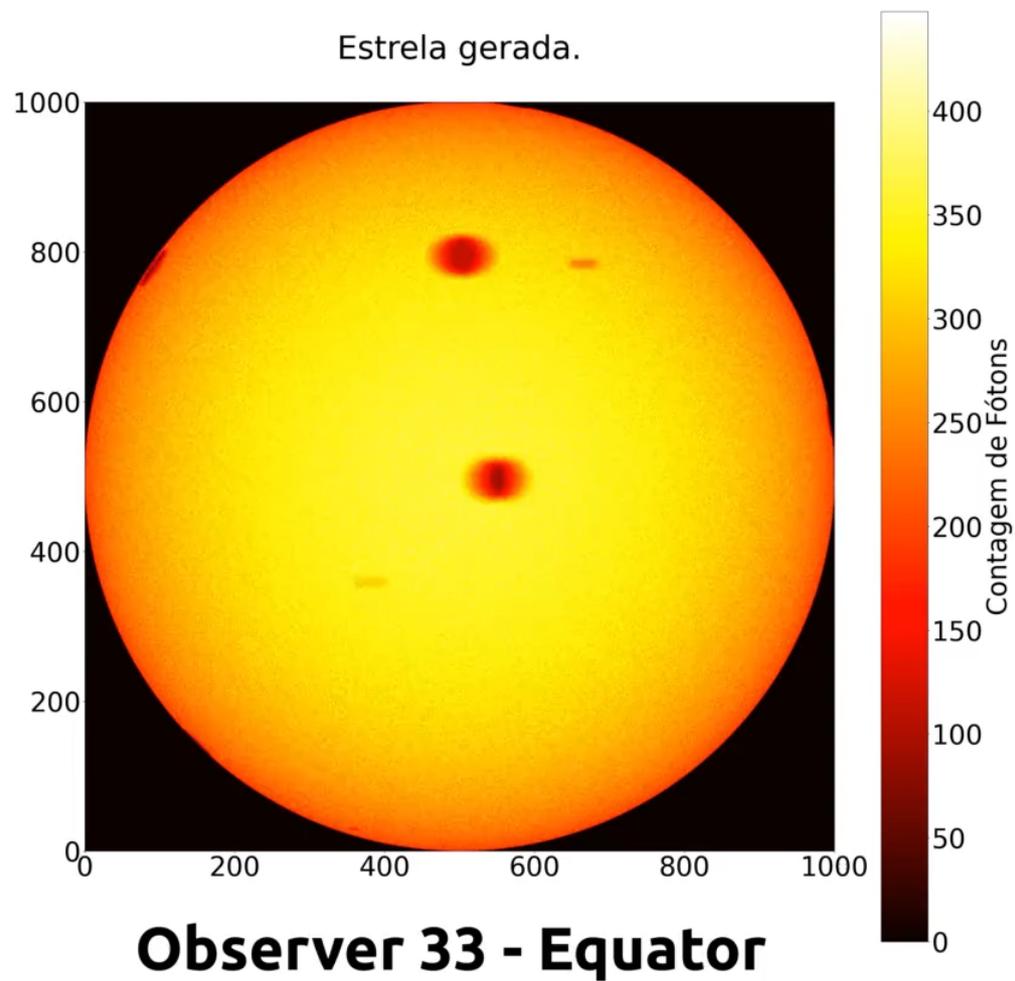
Fazer um programa que calcule a imagem de uma estrela com manchas estelares em sua superfície usando o método de Monte Carlo. O programa deve simular o lançamento de fótons da superfície estelar e o registro destes fótons por observadores.

Fazer um video mostrando a rotação da estrela

Elementos do problema:

- * Estrela, fótons, observadores
- * Processo físicos: emissão dos fótons, escurecimento de bordo
- * **Configurações:** número de manchas, tamanho relativo em relação à estrela, intensidade relativa, posições dos observadores

Ex: video feito pelo aluno Matheus Castro (vosso monitor), da turma de 2020



Projeto - Imagem de uma Estrela

Procedimento básico:

1. Amostrar um ponto aleatório na superfície da estrela
2. Amostrar uma direção aleatória de propagação do fóton emitido
3. Registrar o fóton como visto por um observador
4. Repetir este procedimento um número suficiente de vezes para produzir uma imagem com razão sinal ruído suficiente

Projeto - Imagem de uma Estrela

Sistema de coordenadas.

Qual usar? Esférico? Cartesiano?

É indiferente...

Projeto - Imagem de uma Estrela

Sistema de coordenadas:

* *Posição do fóton na estrela:*

(X_e, Y_e, Z_e)

* *Direção de propagação:*

A direção \hat{s} é caracterizada pelas coordenadas direcionais

(u, v, w)

$$\begin{cases} u = \hat{i} \cdot \hat{s} \\ v = \hat{j} \cdot \hat{s} \\ w = \hat{k} \cdot \hat{s} \end{cases}$$

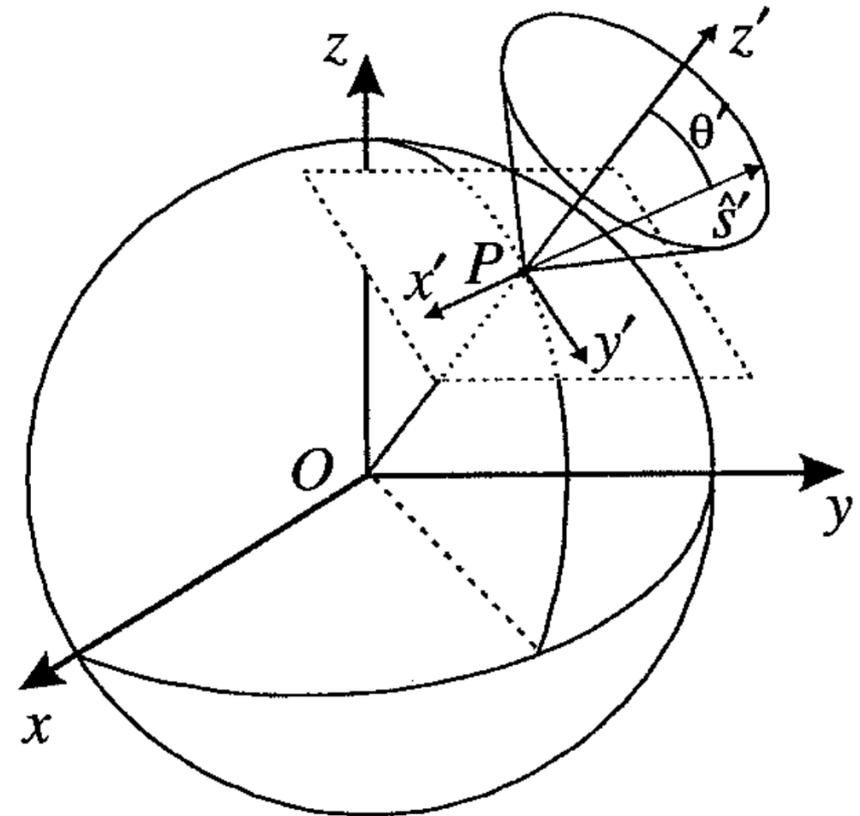


Figura 3.1 - Emissão da radiação por uma fonte esférica.

Projeto - Imagem de uma Estrela

1. Amostragem de um ponto aleatório na superfície da estrela

São necessários dois números aleatórios. O primeiro amostra z entre $-R$ e R e o segundo amostra o ângulo azimutal:

$$\phi = 2\pi\xi_2$$

DICA: neste problema, o tamanho da estrela é irrelevante. Então $R = 1$, sem perda de generalidade

$$\begin{cases} z_e = R(2\xi_1 - 1) \\ x_e = R\sqrt{1 - z_e^2} \cos(\phi) \\ y_e = R\sqrt{1 - z_e^2} \sin(\phi) \end{cases}$$

Projeto - Imagem de uma Estrela

2. Amostragem de uma direção aleatória de propagação do fóton emitido

Dada uma posição na superfície, sorteia-se uma direção de propagação dada por

$$\hat{s}' = (\mu', \phi')$$

Inicialmente sorteia-se μ' a partir do escurecimento de bordo

Depois, fazemos

$$\phi' = 2\pi\xi$$

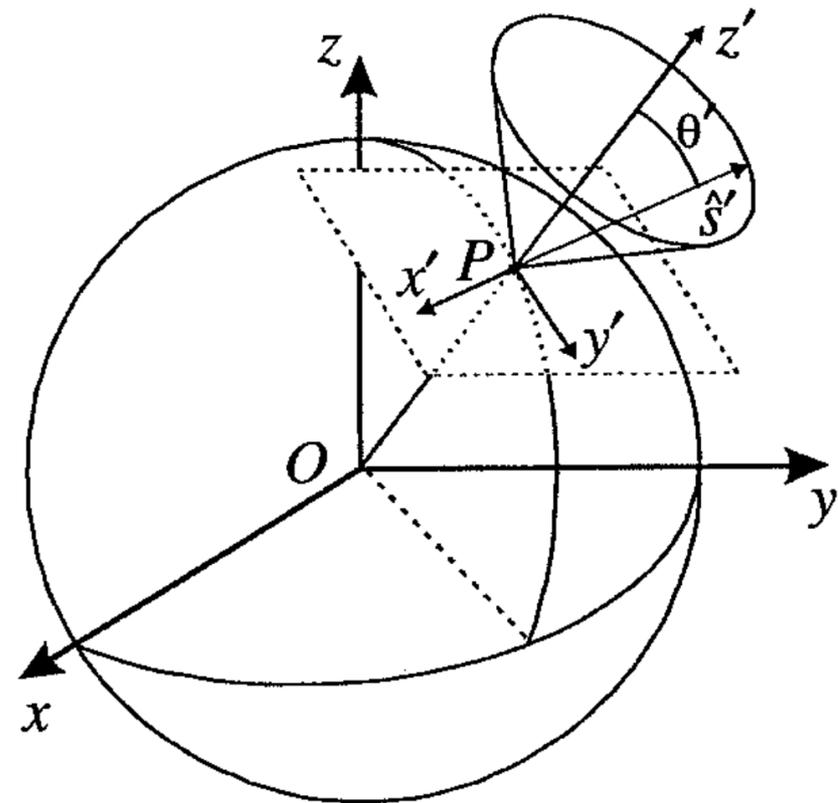


Figura 3.1 - Emissão da radiação por uma fonte esférica.

Projeto - Imagem de uma Estrela

Escurecimento de Bordo

Normalmente há uma dependência entre a intensidade emitida, I , e a direção radial (normal à superfície da estrela).

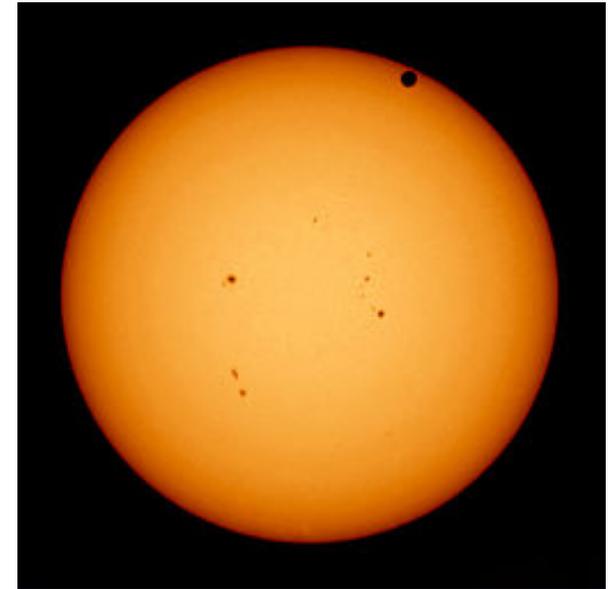
$$I = I(\cos \theta) = I(\mu)$$

Uma aproximação frequentemente usada para I é

$$\frac{I(\mu)}{I_0} = 1 + a\mu$$

Pode-se amostrar μ facilmente usando o princípio fundamental.

Dica: pode-se usar também o método da rejeição (ver minha tese).



Projeto - Imagem de uma Estrela

2. Amostragem de uma direção aleatória de propagação do fóton emitido

Finalmente, basta escrever os cosenos diretores no sistema (x, y, z)

$$\hat{s} = \begin{cases} u_0 = -\sqrt{1-\mu'^2} \operatorname{sen} \phi \operatorname{sen} \phi' + \cos \phi \left[\sqrt{1-\mu'^2} z_e / R \cos \phi' + \mu' \sqrt{1-(z_e / R)^2} \right] \\ v_0 = \sqrt{1-\mu'^2} \cos \phi \operatorname{sen} \phi' + \operatorname{sen} \phi \left[\sqrt{1-\mu'^2} z_e / R \cos \phi' + \mu' \sqrt{1-(z_e / R)^2} \right] \\ w_0 = \mu' z_e / R - \sqrt{1-(z_e / R)^2} \sqrt{1-\mu'^2} \cos \phi' \end{cases}$$

Projeto - Imagem de uma Estrela

Definição dos observadores

Os observadores são definidos dividindo-se uma esfera imaginária em torno da estrela em “caixinhas” com o seguinte tamanho

$$\Omega_{\text{caixa}} = \frac{4\pi}{N_{\mu}N_{\phi}}$$

N_{μ} é o número de divisões em latitude

N_{ϕ} é o número de divisões em azimute

Portanto, o número total de "observadores" é $N_{\phi}N_{\mu}$

Um dado observador é caracterizado por dois índices: imu , $iphi$

Projeto - Imagem de uma Estrela

3. Registrar o fóton como visto por um observador

Para registrar o fóton emitido, inicialmente determina-se os índices *imu* e *icphi*:

$$imu = 0.5 * (w+1) * nm_u + 1.$$

$$tmp = ATAN2(v, u)$$

$$IF (tmp < 0.) tmp = tmp + 2.*pi$$

$$iphi = tmp * nphi / 2. / pi + 1.$$

NOTA: a variável *pi* precisa ser definida pelo usuário

Projeto - Imagem de uma Estrela

3. Registrar o fóton como visto por um observador

Depois determina-se o parâmetro de impacto da posição do fóton sobre o disco da estrela como visto pelo observador. Inicialmente define-se o sistema x', y', z' girando o sistema x, y, z em torno do eixo z por um ângulo ϕ . Neste sistema, a direção do observador fica no plano $x'-z'$.

Em seguida obtém-se o sistema x'', y'', z'' girando y' por $90 - \arccos(w)$, de forma que x'' se alinhe com a direção do observador.

As coordenadas y'', z'' correspondem ao parâmetro de impacto procurado.

Projeto - Imagem de uma Estrela

Código em FORTRAN para calcular o parâmetro de impacto (xpp e ypp). x: array de 3 números contendo a posição do fóton

```
raiz = SQRT(1.-w*w)
IF (raiz == 0.) THEN
    zpp = -x(1)
    ypp =  x(2)
ELSE
    st = raiz
    raiz = 1.0/raiz
    cf = u*raiz
    sf = v*raiz
    ct = w

    ypp = -sf*x(1) + cf*x(2)
    dum =  cf*x(1) + sf*x(2)
    zpp = -dum*ct + x(3)*st
    xpp =  dum*st + x(3)*ct
END IF
```

IMPORTANTE: no plano do céu, x -> ypp e y -> zpp

Projeto - Imagem de uma Estrela

3. Registrar o fóton como visto por um observador

Finalmente, dado o parâmetro de impacto, deve-se determinar os índices do “pixel” da imagem a que este parâmetro de impacto corresponde: i_x e i_y .

Isto é deixado como exercício. 🙌

Como cada fóton corresponde a uma unidade (arbitrária, neste caso) de energia, o “registro” de um fóton corresponde a somar 1 a um array definido como:

```
REAL, ALLOCATABLE :: image(:, :, :, :)
```

...

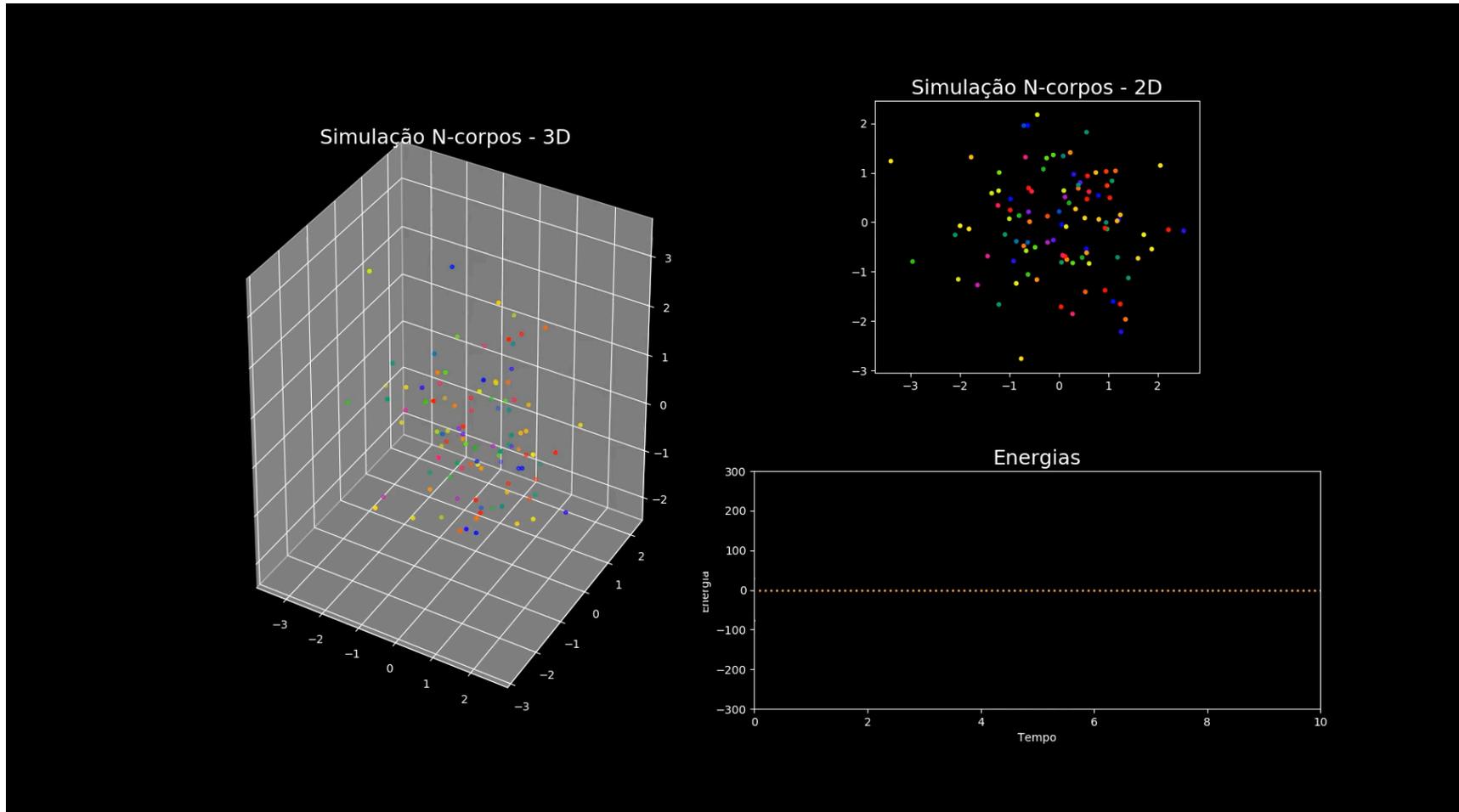
```
ALLOCATE ( image(nx, ny, nmu, nphi) )
```

Projeto - Imagem de uma Estrela

Discussão em aula: como implementar uma mancha estelar?

Outras ideias para projetos

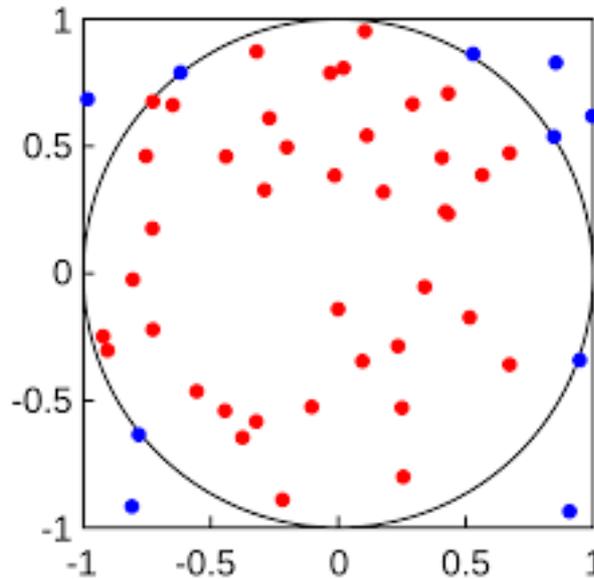
* Implementação (simples) do problema de N Corpos



Crédito: Ariane C. F. Silva (aluna da turma de 2021)

Outras ideias para projetos

* Integração Multi-Dimensional usando MC



Bibliografia:

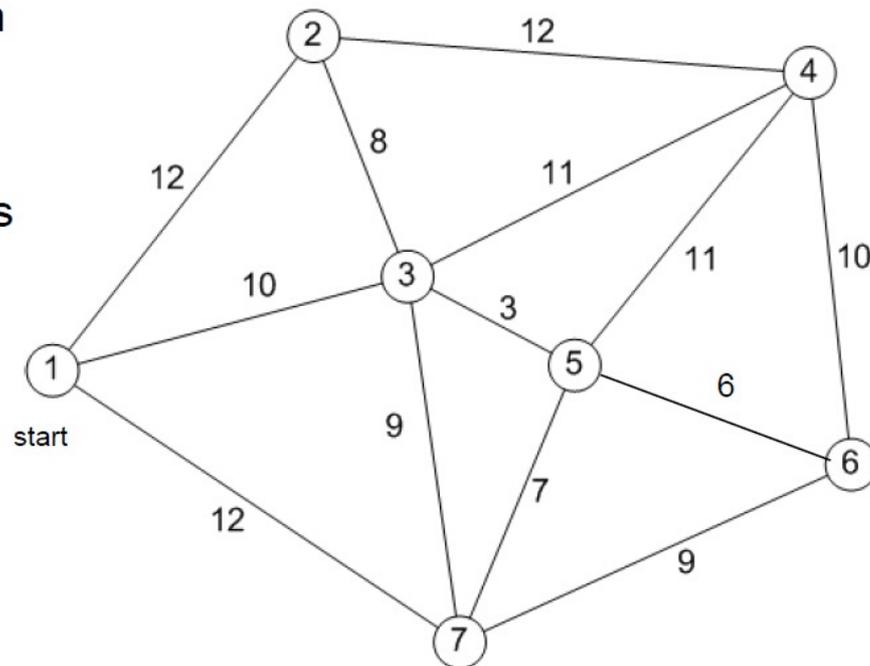
<https://www.ime.usp.br/~jstern/miscellanea/LabSimulacao/EricVeach2.pdf>

Outras ideias para projetos

* O problema do Caixeiro Viajante

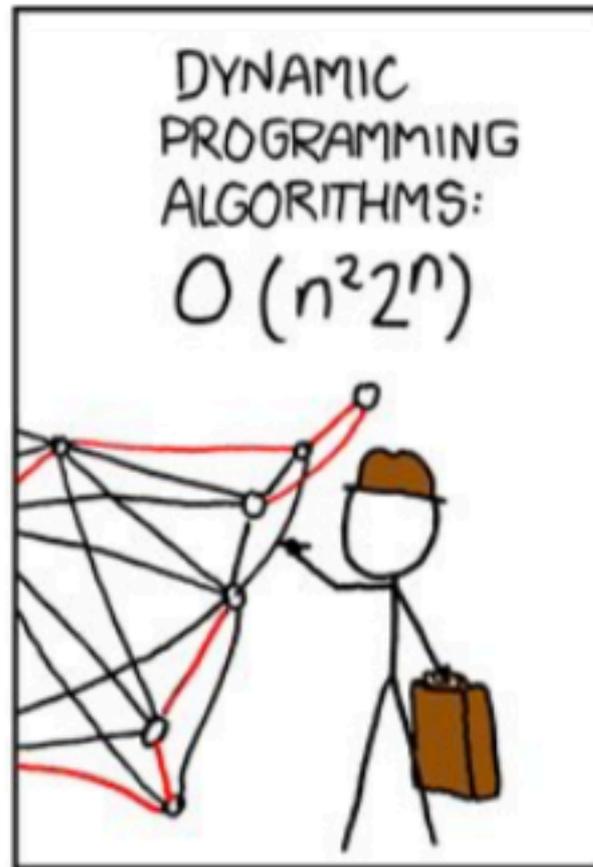
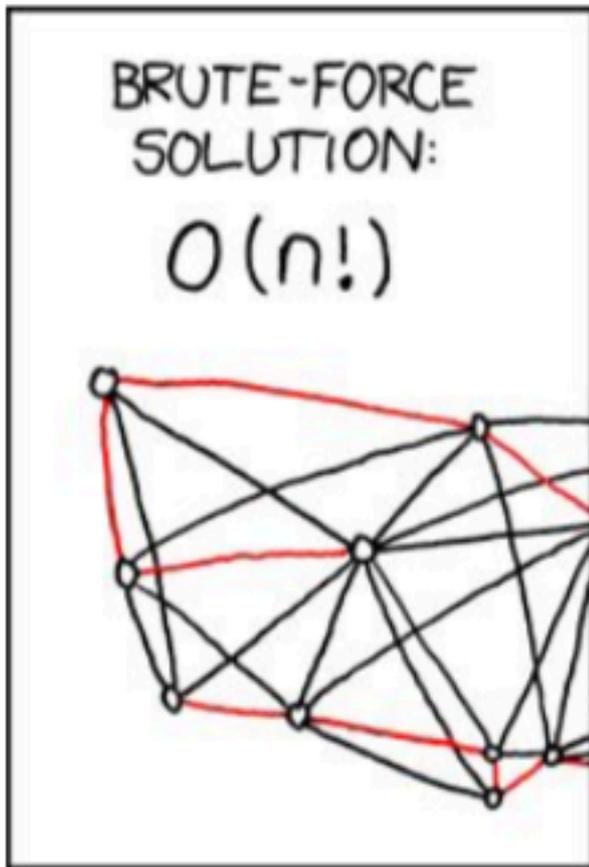
The Traveling Salesman Problem

- Starting from city 1, the salesman must travel to all cities once before returning home
- The distance between each city is given, and is assumed to be the same in both directions
- Only the links shown are to be used
- Objective - Minimize the total distance to be travelled



Outras ideias para projetos

* O problema do Caixeiro Viajante



Calendário

- 09/08 - Aula de Apresentação - Agulha de Buffon
- 16/08 - Apresentação de ideias para os trabalhos individuais
- 23/08 - Definição das equipes e dos projetos individuais
- 30/08 - **Aula 1** - Entrega do EP1
- 13/09 - **Aula 2**
- 20/09 - **Aula 3**
- 27/09 - **Aula 4 - Entrega do EP2**
- 04/10 - Reunião com a equipe de OpenMP
- 11/10 - Reunião com a equipe de MPI
- 18/10 - Reunião com a equipe de CUDA
- 25/10 - Reunião com a equipe de OpenACC - **Entrega do EP3**
- 01/11 - **Apresentação da Equipe OpenMP + trabalhos individuais**
- 08/11 - **Apresentação da Equipe MPI + trabalhos individuais**
- 22/11 - **Apresentação da Equipe CUDA + trabalhos individuais**
- 29/11 - **Apresentação da Equipe OpenACC + trabalhos individuais**
- 08/12 - **Entrega do TCD**

Outras ideias para projetos

- * Algum problema interessante da sua IC?
 - * Automação de tarefas
 - * Repetição de procedimentos
- * Hidrodinâmica
- * Transporte Radiativo
 - * Espalhamento eletrônico da luz polarizada :-)
- * Markov Chain Monte Carlo usando o algoritmo de metrópolis

EP 2 (Projeto Individual)

Data de entrega: 27/09

De preferência em C ou Fortran

Fazer estudo de desempenho (ver próximas aulas)

Lição de Casa para Aula que vem!

- 1) **Estudar os problemas propostos em aula e definir qual será o tema do seu EP2**
- 2) **Estudar as quatro ferramentas propostas para o curso, e escolher com qual delas vai trabalhar:**
 - a) **MPI - C++ ou FORTRAN**
 - b) **OpenMP - C++ ou FORTRAN**
 - c) **CUDA - C++**
 - d) **OpenACC**

Aula que vem: definição dos projetos e formação das equipes de trabalho