

METODI MONTECARLO

I metodi MC forniscono soluzioni approssimate ad una gamma di problemi chimici, fisici e matematici mediante esperimenti di campionamento statistico su un calcolatore.

Definizione: “È un'ampia famiglia di tecniche basate sul campionamento casuale del dominio di una o più variabili al fine di determinare una stima numerica delle loro proprietà statistiche.”

Innanzitutto è necessario un generatore di numeri casuali. Poi con questo generatore si genera una campione di una variabile legata al problema considerato. La variabile in sé non è casuale ma la si rende casuale. Alcuni valori della variabile risolvono il problema, altri no. Selezionando quali valori risolvono il problema si trova la soluzione (numerica) del problema

Esempio: calcolo di aree

Supponiamo di generare con una variabile casuale N punti interni al quadrato che circoscrive una circonferenza. Se i punti sono molti la frazione dei punti interni alla circonferenza sarà circa uguale al rapporto tra l'area della circonferenza e quella del quadrato:

$$\frac{S_c}{S_q} = \frac{N_i}{N}$$

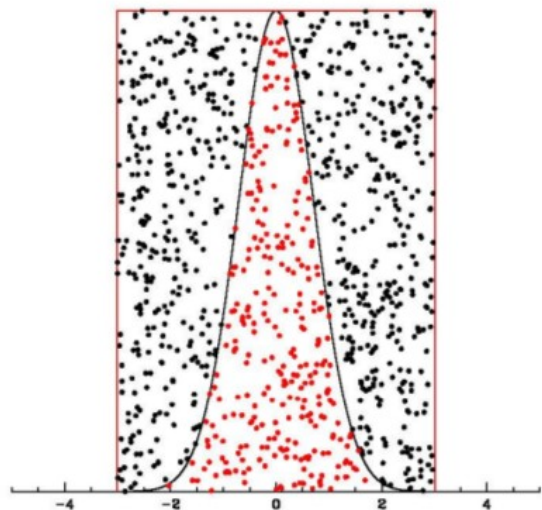
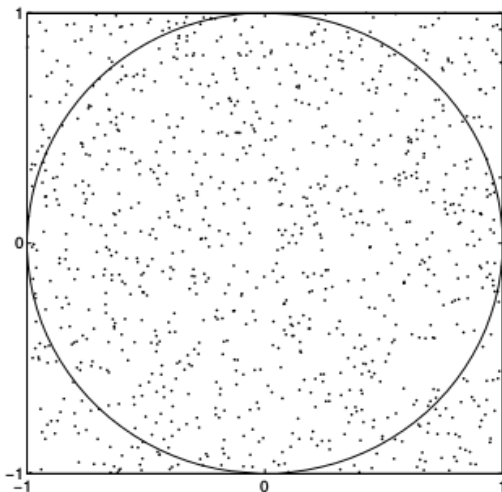
Si può ricavare allora che $S_c = \frac{N_i}{N_{tot}} \cdot S_q$.

In realtà nell'area del cerchio non c'è nulla di casuale. Ma si è ipotizzata l'esistenza di una variabile casuale N_i che ha la sola condizione di stare dentro il cerchio. Poi, simuliamo mediante un generatore di numeri casuali, la variabile casuale N , che ha la sola condizione di stare dentro il quadrato. Si sa che il cerchio è dentro il quadrato. Ma anche le N_i sono dentro le N . Se si riesce a conoscere le N_i note le N allora si riesce a conoscere l'area del cerchio nota quella del quadrato.

In modo analogo si può procedere per il calcolo di aree di altre figure piane o di integrali di funzioni non negative. Ad esempio abbiamo :

$$\int_a^b f(x) dx \approx y_{max} \cdot (b-a) \cdot \frac{N_i}{N}$$

dove $y_{max} = \max_{[a,b]} f(x)$ ed N_i rappresenta il numero di punti (x, y) estratti uniformemente sul rettangolo $[a, b] \times [0, y_{max}]$ aventi $y \leq f(x)$.



Chiaramente la tecnica dipende dal numero di punti N . Bisogna allora valutare l'errore sul calcolo effettuato. Poiché si cercano gli N_i successi sulle N prove la statistica del metodo è binomiale.

Da cui la deviazione standard della variabile casuale N_i :

$$\sigma = \sqrt{N p(1-p)} = \sqrt{N_i(1-p)}$$

con $p = \frac{N_i}{N}$

E la deviazione standard dell'area: $\sigma_{A_q} = \frac{A_q}{N} \cdot \sqrt{N p(1-p)}$

Si può notare che l'errore su N_i è proporzionale a \sqrt{N} (p è costante perché le aree non sono variabili casuali)

L'errore relativo è : $\frac{\Delta A_c}{A_c} \propto \frac{\sqrt{N}}{N} = \frac{1}{\sqrt{N}}$. Quindi la misura sarà tanto più precisa quanto più è numerosa la popolazione di variabili causali generata.