

METODO MONTECARLO & ENTROPIA STATISTICA

dr.ing. Alberto Sacchi
Sviluppo Progetti Avanzati srl- R&D Dept.
ing.sacchi@alice.it

NOTE PRELIMINARI

Il presente documento è scritto in linguaggio naturale, con precisa rinuncia al linguaggio formale simbolico della logica-matematica, allo scopo di renderlo facilmente accessibile al lettore medio. Si è fatto ricorso a molteplici esempi pratici per illustrare i concetti generali base che correlano entropia e metodo Montecarlo, rinunciando a formulazioni generali a vantaggio della immediata comprensione.

SINTESI (Abstract)

Analisi delle correlazioni esistenti tra Entropia Statistica e metodi numerici non parametrici (in particolare Metodo Montecarlo)

Correlations analysis between entropy and nonparametric statistic numerical methods (Monte Carlo method).

INTRODUZIONE

La storia della nascita del MMC (Metodo Monte Carlo) è narrata da Nicholas Constantine Metropolis, matematico e fisico statunitense che collaborò con Oppenheimer, Fermi, Teller e Von Neumann al progetto Manhattan.

Secondo Metropolis Fermi ideò il MMC al fine di risolvere numericamente i complessi problemi derivanti dalla moderazione dei neutroni, durante i suoi primi esperimenti romani, negli anni 20, cioè prima degli studi condotti a Los Alamos negli anni 40 da Von Neumann cui si deve la formulazione ufficiale del MMC.

Ludwig Eduard Boltzmann_ 1844 – 1906) fisico e matematico austriaco e' stato uno dei più grandi fisici teorici di tutti i tempi ed i suoi contributi in termodinamica ed in meccanica statistica sono assolutamente fondamentali.

Negli anni 60 del XVII secolo, con J.C.Maxwell, stabilisce l'equazione che governa la distribuzione delle velocità della molecole di un gas a temperatura e pressione note, successivamente, intorno al 1870, pubblica i lavori con cui definisce su basi statistiche il concetto di entropia.

L'entropia, come misura del disordine verso cui evolve l'Universo, è una conseguenza delle sue intuizioni.

Penso perciò che sia necessario aggiungere alle leggi fisiche l'ipotesi che nel passato l'universo fosse più ordinato, nel senso tecnico [cioè nel senso del macrostato iniziale di bassa entropia], di oggi: credo cioè che questa sia l'affermazione supplementare necessaria a dare un senso a tutto, e a rendere comprensibile l'irreversibilità. A conclusioni simili sembra fosse anche arrivato Boltzmann nel 1897. Feynman

MMC

Il MMC è volto alla risoluzione di problemi difficilmente affrontabili per via analitica sia a causa della molteplicità di variabili che della non linearità delle equazioni differenziali che governano i fenomeni.

La simulazione casuale di un fenomeno complesso si effettua sostituendo la valutazione analitica con l'osservazione empirica di un fenomeno equivalente, cioè retto dalle medesime leggi.

Tipico esempio applicativo del MMC è la misura dell'area di una superficie di contorno altamente irregolare.

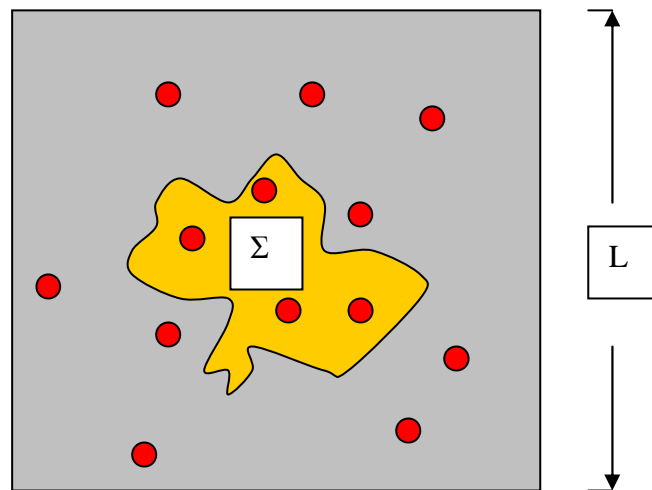


FIG 1

Sia data una superficie irregolare il cui perimetro non risulti esprimibile analiticamente (Figura gialla in FIG 1); venga inscritta in un quadrato di lato L , di superficie sufficientemente ampia da contenere Σ .

Si lascino cadere N (ad esempio 13) corpi indistinguibili (pallini identici di forma e peso) da una altezza sufficiente affinché la distribuzione sulla superficie $L \times L$ sia del tutto casuale.

Sia n Il numero di pallini caduti in Σ (ed esempio $n=4$) e sia $N - n$ ($13-4= 9$) i pallini caduti entro Σ .

Si ha che:

$$\frac{\Sigma}{L \times L} = \frac{n}{N} \text{ ne deriva: } \Sigma = \frac{n}{N} \cdot L^2 \quad (0.1)$$

Il rapporto tra due aree (cioè Σ/L^2) viene simulato dal rapporto tra due numeri (n/N).

Nell'esempio viene assunta quale postulato la casualità nella distribuzione spaziale dei pallini.

Un ulteriore esempio di impiego del MMC si ha nella determinazione del valore di π . Si immagini infatti di sostituire la superficie Σ con quella di una cerchio di raggio r (FIG.2).

In tali condizioni si ottiene.

Area cerchio = $C = \pi r^2$

Area quadrato = $L \times L$

Si ha quindi:

$$\pi = \frac{n}{N} \frac{LxL}{r^2} \quad (0.2)$$

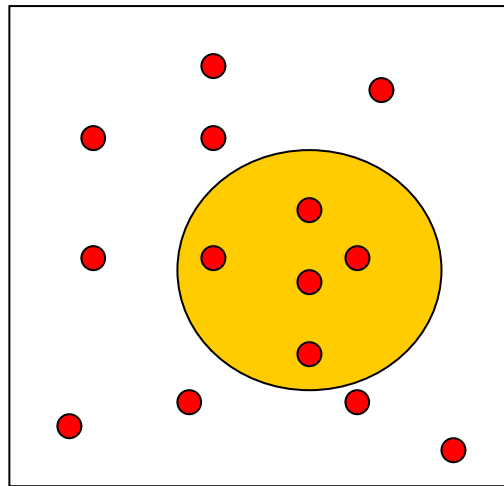


FIG.2

Per l'esempio illustrato in FIG 2 si ha:

$$L = 6$$

$$R = 2$$

$$n = 4$$

$$N = 15$$

da cui $\pi = 3,2$ in prima approssimazione

I problemi che si presentano nell'impiego del MMC sono essenzialmente:

- effettiva casualità nella distribuzione dei punti rilevati (nell'esempio distribuzione spaziale)
- numero dei punti rilevati; la stima migliora con l'aumento dei rilevamenti.

La dipendenza della precisione del MMC dal numero N di rilevamenti deriva dalla constatazione che mentre il rapporto tra due aree (Σ/L^2) può essere un numero irrazionale, il rapporto tra due conteggi di numeri naturali (interi) i , cioè tra n ed N è forzatamente un numero razionale.

In generale la precisione del dato rilevato diminuisce con:

$$\frac{1}{\sqrt{N}} \quad (0.3)$$

Un semplice esempio può meglio illustrare la situazione.

Si consideri la situazione di FIG 3 dove un cerchio risulta inscritto in un quadrato di lato unitario ($L=1$); il raggio r sarà allora $r=1/2$ e l'area del cerchio $\Sigma=\pi/4$ mentre quella del quadrato $L \times L = L^2 = 1$.

Ne deriva:

$$\pi/4 = n/N \quad \text{ossia}$$

$$\pi = 4 \frac{n}{N}$$

Si inizi il conteggio con
ma con
e con

$n = 8 ; N = 10$ ottenendo $\pi = 3,2$
 $n = 27 ; N = 34$ ottenendo $\pi = 3,17$
 $n = 59 ; N = 75$ si ha $\pi = 3,14$

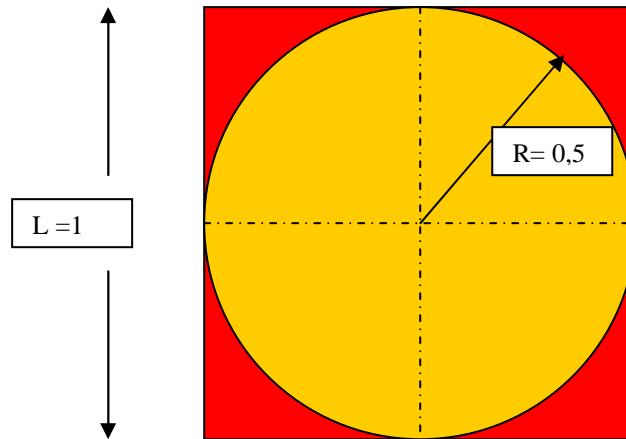


FIG.3

La casualità può venire parzialmente garantita dall'impiego di numeri pseudo casuali (numeri generati da un algoritmo che presentino la stessa probabilità di ripetizione di un evento casuale di tipo fisico).

Negli esempi di Figg 1 e 2 disponendo di una coppia di numeri casuali a cui attribuire le coordinate cartesiane dei punti rilevati, si ottiene la casualità distributiva senza ricorrere ad un evento fisico quale la caduta di palline indistinguibili.

Quello illustrato negli esempi precedenti è MMC Grezzo dove la distribuzione delle biglie è puramente casuale.

Si consideri invece il caso di un contenitore quadrato di lato L in cui siano immesse N biglie. Il contenitore viene agitato in modo da ottenere una distribuzione spaziale delle biglie di tipo casuale puro (esattamente come nel caso di FIG 1 e FIG 2). Ora, a partire da tale distribuzione (statica) si torni ad agitare il contenitore ottenendo una seconda distribuzione che, contrariamente a quanto avveniva nel caso di casualità pura, dipende dalla posizione iniziale delle biglie.

Questo è il MMC markoviano che procede esattamente come per il MMC grezzo per quanto attiene il rapporto tra il numero n di biglie interne all'area Σ e biglie interne all'area $L \times L$.

ENTROPIA STATISTICA

Si consideri un insieme di $N = 4$ biglie assolutamente identiche e, quindi, indistinguibili. Si distribuiscano le 4 biglie in due contenitori separati denominati α e β , in tutti i modi possibili, tenendo presente la indistinguibilità delle biglie ed ottenendo 5 possibili distribuzioni delle biglie nei due contenitori.

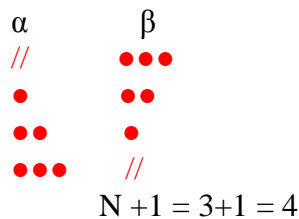
I due contenitori α e β sono equivalenti alle due superfici Σ e $L \times L$ degli esempi di Fig 1 e Fig.2 di cui a Parag. Precedente.

E' definito Macro stato ognuna delle possibili distribuzioni (5 nel caso illustrato)

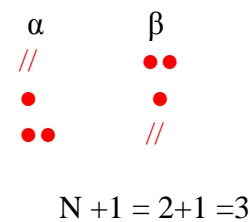


Il numero di stati (Macro stati) ottenibili con 4 biglie è:
 $N + 1 = 4 + 1 = 5$

Tale relazione è valida per N qualsiasi (esempi)
 Per 3 biglie si ottiene:



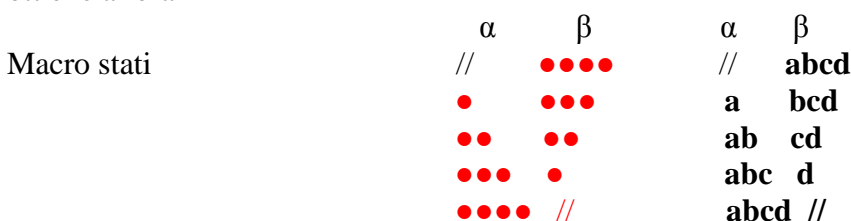
Per 2 biglie:



Quindi il numero di Macro di N elementi è $= N + 1$

Si consideri ora il macro stato ●/●●● relativo ad uno dei Macro generati da 4 biglie e si sostituisca l'unica biglia posta in α con la prima biglia posta in β ottenendo ancora ●/●●● ma con una composizione diversa.

Per meglio evidenziare tale situazione è opportuno individuare le biglie con lettere minuscole; si ottiene allora



Si consideri ora il Macrostatto $\mathbf{a/bcd} = \bullet/\bullet\bullet\bullet$ e, in ordine alla assoluta identità delle biglie, si sostituisca la biglia a con la b e viceversa ottenendo $\mathbf{a/bcd} = \bullet/\bullet\bullet\bullet = \mathbf{b/acd}$.

Analogamente si proceda con tutte le sostituzioni che non variano la composizione di tutti i Macro, ottenendo:

Macro	Micro	
// abcd	// abcd	1 microstato
a bcd	a bcd b acd c abd d abc	4 microstati
ab cd	ab cd ac bd ad bc cb ab bd ac bc ad	6 microstati
abc d	bcd a acd b abd c abc d	4 microstati
abcd //	abcd //	1 microstato

Totale micro per tutti i macro ottenibili da 4 biglie in 2 contenitore = $16 = 2^4$

Naturalmente l'operazione è valida per qualsiasi numero N di biglie in 2 contenitori.

$$\text{Numero Microstati di N elementi in classe 2} = 2^N \quad (1.1)$$

Dal calcolo combinatorio:

Combinazione di N elementi in classe k = Microstati di N elementi suddivisi in 2 zone di cui una avente K elementi e l'altra N-K

$$C_{N;K} = \frac{N!}{K!(N-K)!} \quad (1.2)$$

La (1.2) è facilmente verificabile:

Per $N = 4$ e $K = 2$ ci si ritrova nella situazione precedentemente illustrata cioè: Totale micro per il macro 2/2 (cioè 2 biglie in α e due in β) cioè uno dei 6 macro ottenibile da 4 biglie.

ab cd	ab cd	6 microstati
--------------	--------------	--------------

ac	bd
ad	bc
cb	ab
bd	ac
bc	ad

Infatti

$$C_{4,2} = \frac{4!}{2!(4-2)!} = \frac{1.2.3.4}{(1.2).(1.2)} = 6$$

Per N =6 e K = 2 si ha:

ab cdef	ab	cdef	db	acef	15 microstati
	ac	bdef	de	abcf	
	ad	bcef	df	abce	
	ae	bcdf	ef	abcd	
	af	bcde	be	acdf	
	cb	adef	bf	acde	
	cd	abef			
	ce	abdf			
	cf	abde			

$$C_{6,2} = \frac{6!}{2!(6-2)!} = \frac{720}{2.24} = 15$$

Ora è interessante valutare la probabilità che il Macro 2/2 (che ricordiamo si compone di 6 Micro) ha di realizzarsi a seguito di spostamenti casuali delle 4 biglie tra i due compartimenti α e β .

I casi favorevoli sono evidentemente $6 = C_{4,2}$ mentre i casi possibili sono 2^N (come da (1.1)), quindi:

$$\text{Probabilità} = \Gamma = 6/2^4 = 6/16 = 0,375$$

Ben diversa è la probabilità che si realizzi casualmente la situazione Macro 1/3 già illustrata e di seguito riportata:

a bcd	a bcd	4 microstati = $C_{4,1} = \frac{4!}{1!(4-1)!} = \frac{1.2.3.4}{1.3!} = \frac{24}{1.2.3} = 4$
	b acd	
	c abd	
	d abc	

$$\text{Probabilità} = \Gamma = 4/2^4 = 0,25$$

Ne segue che il Macro $C_{4,2}$ può realizzarsi più facilmente di $C_{4,1}$ (a seguito di una distribuzione casuale delle biglie tra i due contenitori per esempio avendosi α e β in un solo contenitore diviso da una riga sul fondo ed agitandolo)

Generalizzando le probabilità che si verifichi uno specifico Macrostatato (tra gli $N + 1$ presenti) in un insieme di N elementi ripartiti in 2 zone in cui una con K elementi e l'altra con $n-k$ elementi è:

$$\Gamma = \frac{N!}{K!(N-K)!2^N} \quad (1.3)$$

Definendo ENTROPIA una funzione della probabilità che un Macrostatato possa verificarsi si ottiene:

$$S = f(\Gamma) \text{ dove } f \text{ rappresenta una funzione analitica da stabilire}$$

Secondo Boltzmann $S = K \log \Gamma$

ENTROPIA E MMC

L'analogia tra MMC markoviano e Meccanica Statistica è rilevante; in entrambe le discipline si fa riferimento alla distribuzione spaziale di particelle (molecole per la Termodinamica statistica e biglie per MMC) identiche ed indistinguibili e a moti casuali elastici.

Per la Termodinamica i moti sono quelli di diffusione molecolare mentre per MCC sono urti elastici casuali generati dalla vibrazione di un contenitore.

Si consideri nuovamente la situazione di cui a FIG 1 e si proceda immettendo nel contenitore rettangolare di lato L N biglie indistinguibili.

Si agiti il contenitore e, all'arresto dei moti casuali delle biglie, si verifichi la distribuzione spaziale delle stesse.

Siano:

n le biglie interne all'area Σ

$N-n$ le biglie interne al quadrato $L \times L$

Il rapporto. $n / (N-n) = \Sigma / (L \times L)$

Ma N biglie possono ammettono $C_{N;k}$ Microstati ossia $C_{n;k}$ combinazioni diverse:

$$C_{N;k} = \frac{N!}{K!(N-K)!} \text{ secondo la } (1.2)$$

con la probabilità che la situazione distributiva constatata sperimentalmente si verifichi è pari a:

$$\Gamma = \frac{N!}{K!(N-K)!2^N} \text{ secondo la } (1.3)$$

cui è associata una entropia:

$$S = K_B \log \Gamma$$

dove $K_B =$ costante di Boltzmann $= 1,38065 \cdot 10^{-23} \text{JK}^{-1}$

In termodinamica statistica l'entropia è una funzione di stato rappresentante il livello di caos nella distribuzione di molecole, mentre in MMC essa rappresenta la probabilità che la distribuzione casuale sperimentalmente constatata si verifichi spontaneamente; in altri termini è un parametro atto a quantizzare il livello di casualità pura della situazione constatata sperimentalmente.

Ne segue che, mentre la forma analitica della relazione tra entropia e casualità rimane di tipo logaritmico, la costante di proporzionalità non potrà essere k_B (k_B è riferito a situazioni termodinamiche) ma H_{MMC} .

$$S_{MMC} = H_{MMC} \log \Gamma \quad (2.1)$$

All'aumento di S_{MMC} derivante dall'aumento di N e, conseguentemente del numero di Microstati Γ , corrisponde un aumento delle precisione del dato rilevato (secondo la 0.3) e un aumento della casualità nella distribuzione dei punti rilevati.

BIBLIOGRAFIA (References)

- W.K Hastings, *Monte Carlo sampling methods using Markov chains and their applications*, *Biometrikam*
- Bernd A. Berg, *Markov Chain Monte Carlo Simulations and Their Statistical Analysis (With Web-Based Fortran Code)*, World Scientific 2004
- P. Kevin MacKeown, *Stochastic Simulation in Physics*, 1997
- C.P. Robert and G. Casella. "Monte Carlo Statistical Methods" (second edition). New York: Springer-Verlag, 2004,
- Mosegaard, Klaus., and Tarantola, Albert, 1995. Monte Carlo sampling of solutions to inverse problems. *J. Geophys. Res.*
- Tarantola, Albert, *Inverse Problem Theory*, Society for Industrial and Applied Mathematics, 2005.
- (IT) Ben-Naim Arieh, *L'entropia svelata. La seconda legge della termodinamica ridotta a puro buon senso*, 1^a ed., Edizioni libreriauniversitaria.it, 2009.
- (EN) J. M. Smith, H.C.Van Ness; M. M. Abbot, *Introduction to Chemical Engineering Thermodynamics*, 6^a ed., McGraw-Hill, 2000.
- Arieh Ben-Naim, *Entropy Demystified*, World Scientific, 2007.
- J. S. Dugdale, *Entropy and its Physical Meaning*, 2nd Ed., Taylor and Francis (UK); CRC (US), 1996.
- Enrico Fermi, *Termodinamica*, ed. italiana Bollati Boringhieri, (1972)
- Enrico Fermi, *Thermodynamics*, Prentice Hall, 1937.
- F. Reif, *Fundamentals of statistical and thermal physics*, McGraw-Hill, 1965.