

Exercício 4: Monte Carlo - Integração

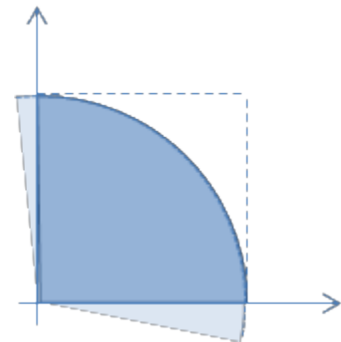
Data da aula: 18 de outubro (LF) e 17 de outubro (MIEF/MIEBB)

Data limite para entrega do relatório: 1 de novembro (LF) e 31 de outubro (MIEF/MIEBB)

4.1. Cálculo do valor de π

Implemente o seguinte algoritmo para a determinação do valor de π :

1. Gere aleatoriamente N pontos (x_i, y_i) uniformemente distribuídos no interior de um quadrado unitário;
2. Para cada um dos pontos calcule a distância à origem;
3. Calcule o número N_d de pontos que estão dentro do semicírculo de raio unitário centrado na origem (ver imagem ao lado);
4. Estime o valor de π , usando a relação $\pi(N) = 4 N_d/N$.



Desenhe o gráfico do valor estimado de π em função do número de pontos gerados.

Desenhe o gráfico do desvio $\Delta = \pi - \pi(N)$ em função de N e determine a dependência funcional.

4.2. Pontos numa caixa

Pretende-se determinar a média $\langle d_{m\u00e9dia} \rangle$ sobre todas as configurações possíveis da distância média $d_{m\u00e9dia}$ entre N_p pontos distribuídos uniformemente numa caixa de lado L . Essa distância média corresponde ao seguinte integral:

$$\langle d_{m\u00e9dia} \rangle = \frac{1}{Z} \int d_{m\u00e9dia} d^3 r_1 \dots d^3 r_{N_p} \quad \text{onde} \quad Z = \int d^3 r_1 \dots d^3 r_{N_p}.$$

A distância média em cada configuração é obtida da soma:

$$d_{m\u00e9dia} = \frac{2}{N_p(N_p-1)} \sum_i \sum_{j>i} d_{ij} \quad \text{onde} \quad d_{ij} = \sqrt{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2 + (z_i - z_j)^2}.$$

Resolva este integral usando o método de Monte Carlo:

1. Gere uma configuração k , gerando aleatoriamente a posição dos N_p pontos;
2. Calcule a distância média $d_{m\u00e9dia}^k$ entre os pontos gerados;
3. Repita para M configurações diferentes;
4. Calcule a média $\langle d_{m\u00e9dia} \rangle$:

$$\langle d_{m\u00e9dia} \rangle \approx \frac{1}{M} \sum_{k=1}^M d_{m\u00e9dia}^k$$

Desenhe o gráfico do valor médio estimado em função do número de configurações consideradas. Verifique a converg\u00eancia do integral.

Fa\u00e7a o mesmo para diferentes n\u00fameros de pontos (diferentes dimens\u00f5es do integral) e discuta como depende a converg\u00eancia da dimens\u00e3o.