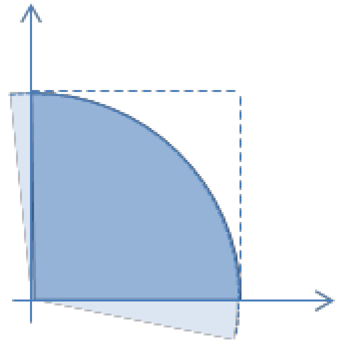
Exercício 4: Monte Carlo - Integração

Data da aula: 2 de novembro (LF) e 25 de outubro (MIEF/MIEBB)
Data limite para entrega do relatório: 16 de novembro (LF) e 8 de novembro (MIEF/MIEBB)

4.1. Cálculo do valor de π



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

1. Gere aleatoriamente N pontos (x_i, y_i) uniformemente distribuidos 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 $\langle d_{média} \rangle$ sobre todas as configurações possíveis da distância média $d_{média}$ entre N_p pontos distribuídos uniformemente numa caixa de lado L. Essa distância média corresponde ao seguinte integral:

$$\langle d_{média} \rangle = \frac{1}{Z} \int d_{média} d^3 r_1 \dots d^3 r_{N_p} \qquad \text{onde} \qquad Z = \int d^3 r_1 \dots d^3 r_{N_p} \; .$$

A distância média em cada configuração é obtida da soma:

$$d_{média} = \frac{2}{N_p(N_p-1)} \sum_i \sum_{j>i} d_{ij} \qquad \text{onde} \qquad d_{ij} = \sqrt{\left(x_i - x_j\right)^2 + \left(y_i - y_j\right)^2 + \left(z_i - z_j\right)^2} \; .$$

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 $d^k_{média}$ entre os pontos gerados;
3. Repita para M configurações diferentes;
4. Calcule a média $\langle d_{média} \rangle$:

$$\langle d_{média} \rangle \approx \frac{1}{M} \sum_{k=1}^{M} d^k_{média}$$

Desenhe o gráfico do valor médio estimado em função do número de configurações consideradas. Verifique a convergência do integral.
Faça o mesmo para diferentes números de pontos (diferentes dimensões do integral) e discuta como depende a convergência da dimensão.