Exercício 4 – Monte Carlo - Integração

Cláudio Santos nº 42208 MIEF

claudiostb7@hotmail.com

Sumário: Cálculo do valor de π. Cálculo da média sobre todas as configurações possíveis da distância média entre pontos aleatórios numa caixa.

Exercício 4.1

O objectivo é determinar o valor de π. Gera-se aleatoriamente **N** pontos (x_i,y_i) uniformemente distribibuídos num quadrado unitário. Calcula-se a distância à origem $r_i=\sqrt{x_i^2+y_i^2}$ e sempre que $r_i<1$, ou seja, se os pontos estivererem dentro de um quarto de círculo, de raio unitário centrado na origem, contabiliza-se esse número de pontos $\mathbf{N_d}$. O valor de **π(N)** é estimado calculando a fração $\mathbf{N_d/N}$ e multiplicando por quatro, para obter um círculo de raio unitário.

$$\pi(N)=4\times\frac{N_d}{N}$$

No código definiu-se as variaveís **N** (número de pontos gerados), **x** (coordenada cartesiana x), **y** (coordenada cartesiana y), **r** (distância à origem do ponto gerado) e **conta** (corresponde ao $\mathbf{N_d}$). Para gerador aleatório de **x** e **y** foi usando a função drand48(), e para gerar os **N** pontos e verificar a condição do quarto de círculo, implementou-se um ciclo. Analisou-se o valor de π(N) desde **N=10** até $\mathbf{N=10^5}$.

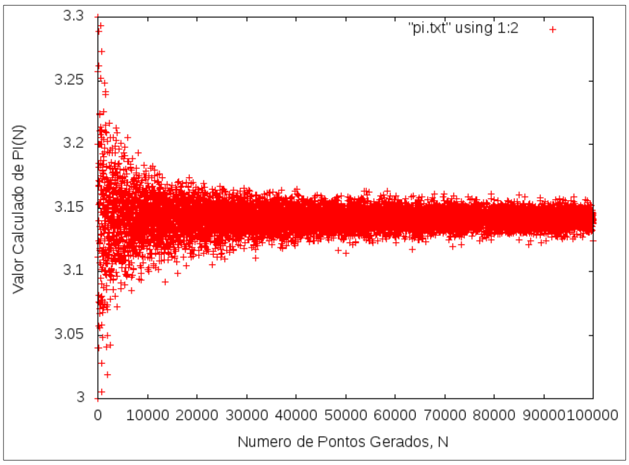

Figura 1: Simulação de Monte Carlo: Gráfico do valor de π(N) em função do número de pontos gerados, N. Os valores flutuam em torno do valor teórico.

Por exemplo, para $N=10^4$, o valor calculado é $\pi(N)=3{,}1404$

Também se estudou desvio Δ(N) face ao valor teórico:

$$\Delta(N)=\pi-\pi(N)$$

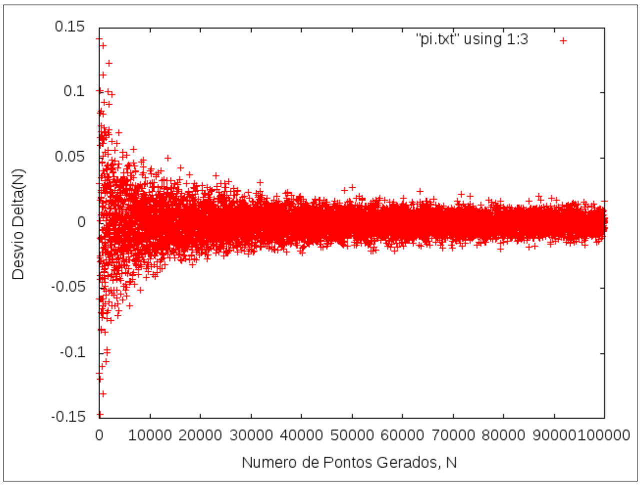

Figura 2: Simulação de Monte Carlo: Gráfico do desvio Δ(N) face ao valor teórico em função do número de pontos gerados, N.

No mesmo exemplo de $N=10^4$, o desvio é $\Delta(N)=0{,}001$. Para $N=10^4$, o valor calculado de π é então $\pi_{calculado}=3{,}1404\pm0{,}0012$.

Exercício 4.2

O objectivo é determinar a média $\langle \mathbf{d_{media}} \rangle$ sobre todas as configurações possíveis da distância média $\mathbf{d_{media}}$ entre **N** pontos distribuidos uniformemente numa caixa de tamanho **L**. Essa distância média corresponde ao seguinte integral:

$$\langle d_{media}\rangle=\frac{1}{Z}\int d^3r_1 d^3r_2 \ldots d^3r_N \quad (1)$$

$$\text{onde}\quad Z=\int d_{media}\, d^3r_1 d^3r_2 \ldots d^3r_N$$

A distância média em cada configuração é obtida pela soma:

$$d_{media} = \frac{2}{N(N-1)} \sum_i \sum_{j>i} d_{ij} \quad (2)$$

onde $d_{ij} = \sqrt{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2 + (z_i - z_j)^2}$ (3)

Vai-se se resolver o integral usando o método de Monte Carlo. Gerou-se uma configuração k e aleatoriamente a posição de N pontos. Calculou-se a distância média d^k_{media} entre os pontos gerados. Usando as equações (2) e (3). Repetiu-se o processo para M configurações diferentes e determina-se a média **<d_{media}>**:

$$\langle d_{media} \rangle \approx \frac{1}{M} \sum_{k=1}^{M} d^k_{media} \quad (4)$$

No código definiu-se uma função **caixa**() que tem como argumentos o número de partículas **N** e o número de configurações **K**. Dentro desta função são definidos os arrays **X[N]**, **Y[N]**, **Z[N]** que correspondem às posições das **N** partículas. Considerou-se o tamanho **L=1**. Fez-se um duplo ciclo e, dentro do segundo ciclo, é gerado aleatoriamente a posição **(x,y,z)** de cada partícula com a função drand48(). Depois implementou-se a fórmula (3) verificando a condição entre índices dos ciclos. Após todos os **d_{ij}** serem somados, aplica-se a equação (2) e obtem-se a distância média **dm[k]** sobre uma dada configuração **k**. O algoritmo repete-se até **K** configurações (variando a *seed* do gerador aleatório para cada configuração). No final, usa-se a expressão (4) para calcular <**dmedia**> sobre as **K=1,2,…,100** configurações. O número de partículas é fixo, **N=100**.

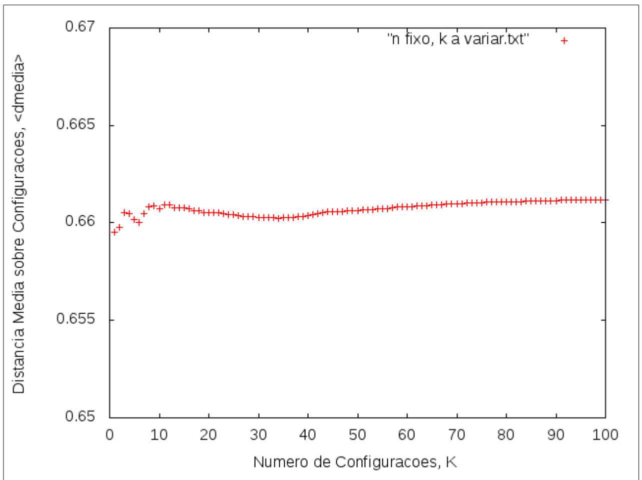

*Figura 3: Gráfico da <d_{media}> em função do número de configurações **K**.*

Conclui-se que <**d_{media}**> praticamente não depende do número de configurações e tem o valor aproximado de 0,66 para qualquer configuração.

Numa segunda análise, desta vez fixou-se o número de configurações K=50 e variou-se o número de partículas **N=2,3,…,500**.

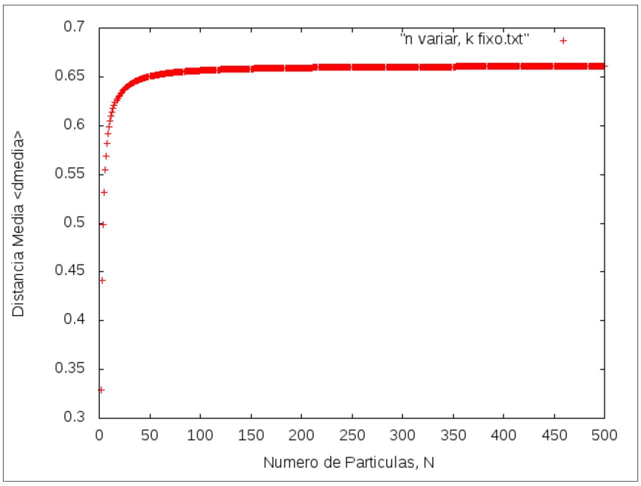

*Figura 4: Gráfico da <d_{media}> em função do número de partículas **N** (dimensão do integral).*

Neste caso, <**d_{media}**> converge para o valor aproximado de 0,65 ao fim de ~100 partículas.