

## Exercício 4: Monte Carlo - Integração

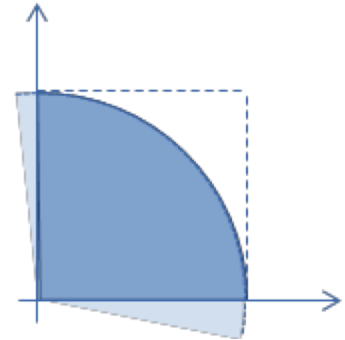
Data da aula: 20 de outubro (LF) e 25 de outubro (MIEF/MIEBB)

Data limite para entrega do relatório: 3 de novembro (LF) e 8 de novembro (MIEF/MIEBB)

### 4.1. Cálculo do valor de $\pi$

Implemente o seguinte algoritmo para a determinação do valor de  $\pi$ :

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  $\pi$ , usando a relação  $\pi(N) = 4 N_d/N$ .



Desenhe o gráfico do valor estimado de  $\pi$  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  $\langle d_{\text{média}} \rangle$  sobre todas as configurações possíveis da distância média  $d_{\text{média}}$  entre  $N_p$  pontos distribuídos uniformemente numa caixa de lado  $L$ . Essa distância média corresponde ao seguinte integral:

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

A distância média em cada configuração é obtida da soma:

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

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

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

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.