

Física Estatística Computacional - Projeto 2

Jorge Augusto Salgado Salhani

September 2018

1 Introdução

Historicamente o método de Monte Carlos surgiu ao fim da segunda guerra mundial como forma de simulação computacional (neste momento, feito no primeiro computador de nome ENIAC - acrônimo para *Electronic Numerical Integrator and Computer* - para modelos de decaimento radioativo para a construção de armas termonucleares. Com participação de nomes influentes como John von Neumann, tal método matemático baseado em amostras aleatórias foi apelidado em despeito a cidade de Monte Carlo, onde há grande concentração de casinos ^[1], populares por jogos que abusam de múltiplos agentes e probabilidade.

Integrais de funções possuem importância em todos os ramos do conhecimento, onde pode ser interpretada de múltiplas formas dependendo dos eventos considerados. No contexto de duas variáveis (x, y) onde sabe-se como uma varia em decorrência a outra (a chamar $y(x)$), a interpretação da integral é automática e refere-se à área descrita entre a função $y(x)$ e o eixo x . Neste molde, métodos de diferença (e.g. método de Euler-Cromer ^[2]) são eficientemente utilizados e são muito mais intuitivos, a primeira vista. No entanto, conforme se observa a existência de variáveis não apenas bidimensionais mas D -dimensionais, como são em muitos casos de mecânica estatística e termodinâmica ^[3], mostra-se importante abordar o problema com metodologias para integração numérica mais otimizados.

Ainda que a visualização de preenchimento de espaço com dimensões maiores que 3 seja inviável, a ideia de integral como área ou volume ainda é válida, porém com conceitos estendidos para volumes multidimensionais.

Neste contexto faz-se importante a análise computacional de integrais de grande complexidade. Dispondo apenas de pontos discretos no espaço, o preenchimento de volumes D -dimensionais necessita de automação para que maior seja a precisão obtida. Além disso, métodos estocásticos também mostram-se dominantes nesta abordagem, pois ao utilizar valores aleatoriamente gerados como ocupação de espaço delimitado, tem-se uma amostragem suficientemente dispersa para que os pontos sejam representativos dos domínios de integração da função desejada.

2 Objetivos

Neste estudo objetiva-se analisar o método de Monte Carlo em algumas de suas facetas (acerto e erro, amostragem simples e por importância) na obtenção de resultados numéricos para integrais com resultados já conhecidos para que se possa comparar acurácia e precisão do mesmo.

3 Metodologia

3.1 Acerto e erro - Estimativa de π

Partindo da relação de proporcionalidade entre o número de pontos aleatoriamente colhidos internos à circunferência e a área que a mesma descreve, algebricamente

$$\frac{A_{circ}}{A} = \frac{N_i}{N} \quad (1)$$

onde A_{circ} representa a área da circunferência que está contida no quadrado de área A , N_i descreve o número de pontos escolhidos internos ao círculo e N o número total de pontos utilizados.

Gerando-se aleatoriamente N coordenadas (x, y) no intervalo $[0,1)$ e sabendo que a área da circunferência de raio $r = 1$ é proporcional ao valor numérico de π , dá-se a relação

$$\pi = 4 \frac{N_i}{N} \quad (2)$$

sendo o fator multiplicativo 4 devido ao resultado corresponder, a princípio, a apenas um dos quadrantes. De modo mais representativo, o resultado pode ser obtido através da equação

$$\pi = \frac{4}{N} \sum_{i=1}^N n_i \quad (3)$$

O resultado acima pode ser generalizado para d -dimensões, com a relação das áreas (equação (1)) agora dada pela relação de volumes d -dimensionais. Sendo L coordenada espacial qualquer e $\Gamma(t)$ função gama, tem-se

$$L^d = \frac{\pi^{d/2}}{\Gamma(d/2 + 1)} = \pi^{d/2} \left[\int_0^\infty x^{d/2} e^{-x} dx \right]^{-1} \quad (4)$$

que confere a estimativa numérica de π para múltiplas dimensões dada pela relação

$$\pi = \left[\frac{2^d}{N} \left(\int_0^\infty x^{d/2} e^{-x} dx \right) \sum_{i=1}^N n_i \right]^{2/d} \quad (5)$$

O termo 2^d refere-se ao número de quadrantes a serem contabilizados. Nos casos onde $d = 2$ e $d = 3$ a visualização torna-se mais fácil, dado que há 4 e 8 quadrantes, respetivamente.

3.2 Acertos e erros - Cálculo de integrais

Como obter a área de uma circunferência está diretamente ligado a obter a integral do espaço que está sob seu domínio, é possível estender este método numérico para o cálculo de integrais de funções quaisquer definidas em um intervalo finito $[a, b]$ tal que $b > a$.

Em primeira análise são estabelecidos limites máximo e mínimo que contém a região de interesse da função e, assim como supracitado, gera-se pontos aleatórios e coleta-se aqueles que estão contidos sob a função, deslocando a distribuição uniforme (através da multiplicação por ou soma de constantes) para que a mesma seja capaz de gerar valores além do intervalo padrão $[0, 1)$.

Portanto, dada uma função $f(x)$, definida em $[f_{min}, f_{max}]$ no intervalo de integração $[a, b]$, sua integral pode ser calculada numericamente através da equação

$$I = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i) \quad (6)$$

para x_i gerado aleatoriamente no intervalo $L_1 = b - a$ e $f(x_i)$ pertencente a $L_2 = |f_{max} - f_{min}|$.

No entanto, caso a relação entre as áreas do retângulo e da região sob a função $f(x)$ seja muito grande, o processamento torna-se ineficaz, já que a maior parte dos pontos são inutilizados. Assim, pode-se definir domínios mais restritos de incidência dos pontos gerados, com um custo: a distribuição gerada aleatoriamente não encontra-se disposta uniformemente.

Para que este custo seja revertido, deve-se expandir ou contrair a distribuição de acordo com a função integrada. Considerando um caso particular onde apenas uma variável aleatória u_1 é gerada uniformemente no intervalo $[0, 1)$, a posição efetiva x é dada por $x = x(u_1)$. Desta forma a função densidade de probabilidade definida nos limites $[a, b]$ é

$$P(a \leq u_1 \leq b) = \int_a^b f(u_1) du_1 \quad (7)$$

Mas como $x = x(u_1)$ implica em $u_1 = u_1(x)$ (supondo que para x exista uma função inversa x^{-1}) e portanto $du_1 = (du_1/dx)dx$, tem-se

$$P[x(a) \leq x \leq x(b)] = \int_{x(a)}^{x(b)} f(u_1(x)) \frac{du_1}{dx} dx \quad (8)$$

representando a probabilidade distribuída não mais uniforme mas variante proporcional ao fator du_1/dx . Em generalização para mais dimensões (i.e., dependência de x para mais de uma variável), este fator é representado através do determinante da matriz jacobiana associada às funções $u_n(x_n)$, com $n = 1, 2, 3, \dots$

Sendo o par de coordenadas aleatórias (u_1, u_2) gerados uniformemente no intervalo $[0, 1)$, para que esta seja modificada, a coordenada efetiva deve ser x tal que $x = x(u_1)$. Gerado este elemento, a distribuição ao longo do outro eixo deve ser uniforme no intervalo $[0, f(x)]$, fazendo com que o elemento efetivo desta coordenada y seja $y = f(u_1, u_2)$. Assim, a probabilidade distribuída efetivamente é dada por

$$P[(x(a) \leq x \leq x(b)] = \int_{x(a)}^{x(b)} f(u_1, u_2) J_f(u_1, u_2) dx \quad (9)$$

onde J_f é o determinante da matriz jacobiana dada por

$$J_f(u_1, u_2) = \begin{vmatrix} \frac{\partial u_1}{\partial x} & \frac{\partial u_1}{\partial y} \\ \frac{\partial u_2}{\partial x} & \frac{\partial u_2}{\partial y} \end{vmatrix} = \frac{\partial u_1}{\partial x} \frac{\partial u_2}{\partial y} - \frac{\partial u_1}{\partial y} \frac{\partial u_2}{\partial x}$$

3.3 Método de Monte Carlo - Cálculo generalizado de integrais

É possível calcular integrais sem necessariamente buscar preencher toda a região sob a função a ser integrada. Sendo a variável aleatória x definida no domínio de integração $[a, b]$ de modo que sua mudança de distribuição tenha forma

$$u(x)dx = \frac{dx}{b-a} \quad (10)$$

uma aproximação da integral é possível através da equação

$$\int_a^b \frac{f(x)}{b-a} dx \approx \frac{1}{N} \sum_{x_i}^N f(x_i) \quad (11)$$

Este é denominado "método de Monte Carlo com amostragem simples", que não dispõe de mecanismos para melhor selecionar regiões de maior contribuição para a integral.

Para melhorar a amostragem fornecida, tem-se o "método com amostragem por importância", que possui abordagem similar à anterior, porém considerando regiões de mais relevância (i.e. que mais incrementam o

valor da integral desejada) para escolher os números aleatórios. Neste caso, considera-se uma ponderação $w(x)$ normalizada no intervalo de integração, ou seja, $\int_a^b w(x)dx = 1$, tal que

$$\int_a^b \frac{f(x)}{b-a} dx = \int_a^b \frac{f(x)}{w(x)} \frac{w(x)}{b-a} dx \quad (12)$$

De modo distinto a amostragem simples, a distribuição de probabilidade é descrita pela equação

$$u(x)dx = \frac{w(x)}{b-a} dx \quad (13)$$

e não mais pela equação (10), estando assim distribuída não uniformemente ao longo do intervalo. A função integrada também varia com um termo multiplicativo $1/w(x)$.

Utilizando-se de mudança de variável -similar ao método descrito na sessão 2.2- dada por

$$y(x) = a + \int_a^x w(x') dx' \quad (14)$$

e supondo $y(x)$ inversível com $y(x)^{-1} = x(y)$, finda a formulação por

$$\int_a^b \frac{f(x)}{b-a} dx = \int_a^b \frac{f[x(y)]}{w[x(y)]} \frac{dy}{b-a} \quad (15)$$

que agora possui distribuição de y uniforme no intervalo $[a, b]$ e pode ter seu resultado avaliado numericamente por

$$\int_a^b \frac{f(x)}{b-a} dx \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{f[x(y_i)]}{w[x(y_i)]} \quad (16)$$

com escolha de valores aleatórios y_i .

4 Resultados

4.1 Acerto e erro - Estimativa de π

Com o uso da equação (5) para as dimensões $d = 2$, $d = 3$, $d = 4$ e $d = 10$ o valor de π obtido converge para o esperado como pode ser visto nas figuras de (2) a (5), com convergência proporcional a \sqrt{N} , como previsto pela teorema central do limite. Este resultado é possível ao validar a escolha de n_i números aleatórios que obedeçam a relação

$$\sum_{i=1}^d (n_i)^2 \leq r^2 = 1 \quad (17)$$

Para a dimensão $d = 2$ (omo para $d = 3$, aqui não presente) também faz-se possível a análise visual do preenchimento do espaço confinado pela circunferência e pelo quadrado que a contém, observado na figura (1).

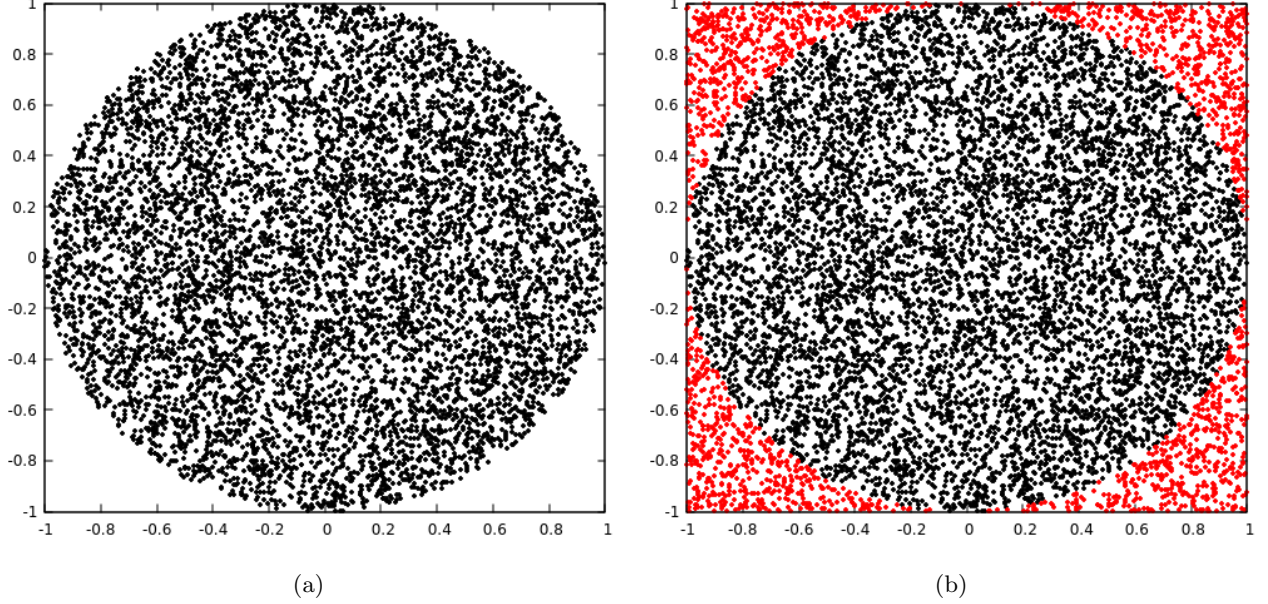


Figure 1: Pontos dados por coordenadas aleatórias (x_i, y_i) que obedecem a equação (17) (a), e pontos em todo o quadrado de lado $l = 1$ (b), utilizando $N = 7000$ pontos.

N	$\langle \pi \rangle$	σ
10^2	3.1	0.2
10^4	3.14	0.02
10^6	3.141	0.002

Table 1: Valores obtidos de π com respectivos desvios padrão σ ao utilizar N amostras. Nota-se o aumento da precisão em uma ordem de grandeza para cada acréscimo de 100 amostras.

Para alguns distintos números de amostras N , a dependência da precisão $\sigma(N)$ pode ser observada na tabela (1), a qual mostra sucintamente que, para uma casa decimal de precisão é necessário aumentar N em 100 vezes.

Melhor análise pode ser feita observando a função $\sigma(N)$ com eixos em escala logarítmica, dados pelas figuras (kb); com k de 2 a 5, para, respectivamente, $d = 2$, $d = 3$, $d = 4$ e $d = 10$ dimensões.

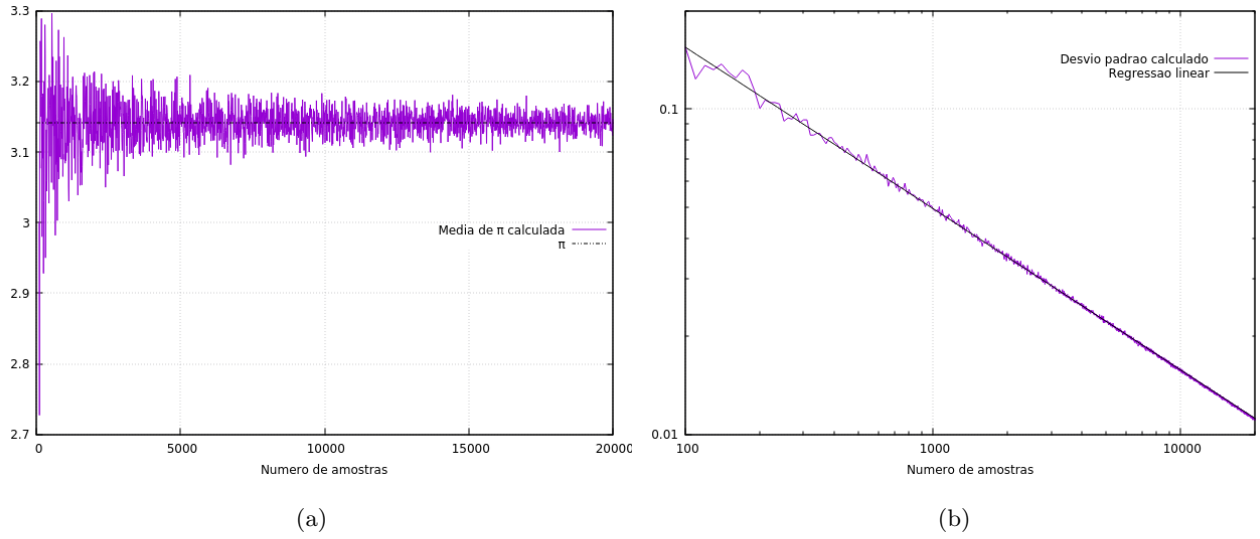


Figure 2: Estimativas de π obtidas pela equação (5) para $d = 2$ (a) e dependência do desvio padrão σ com o aumento do número de amostras em escala logarítmica (b). Com regressão linear, obtém-se o coeficiente angular $\alpha = -0.4955 \pm 0.0005$, com erro de 0.09%, conferindo com o esperado de -0.5 .

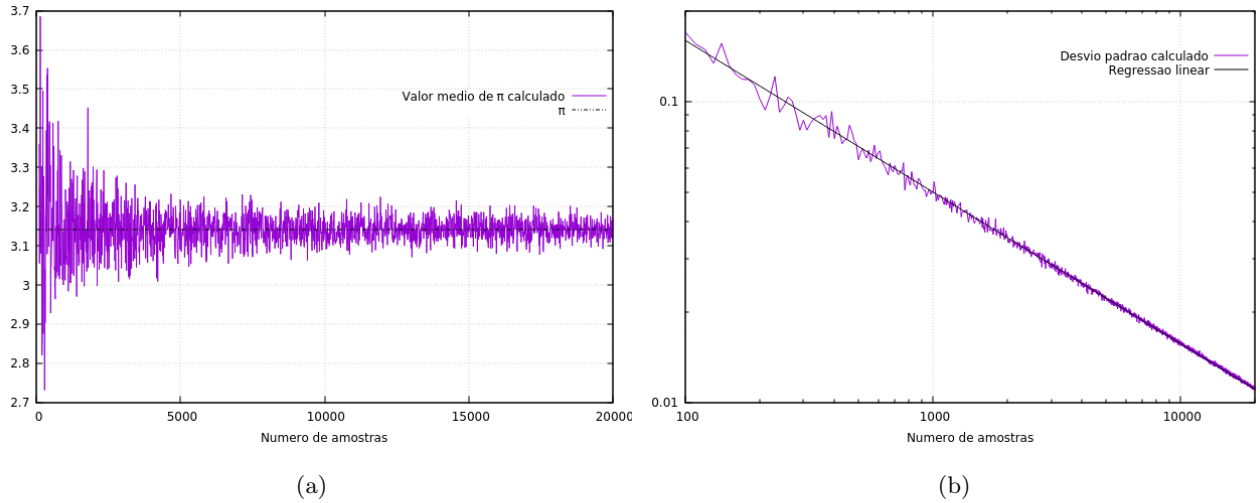


Figure 3: Estimativas de π obtidas pela equação (5) para $d = 3$ (a) e dependência do desvio padrão σ com o aumento do número de amostras em escala logarítmica (b). Com regressão linear, obtém-se o coeficiente angular $\alpha = -0.5039 \pm 0.0007$, com erro de 0.13%, conferindo com o esperado de -0.5 .

4.2 Acertos e erros - Cálculo de integrais

Através da equação (6), foram obtidos valores esperados para a integral da função $f(x) = e^x$ no intervalo $[0, 1]$. Em primeira abordagem, os números aleatórios x foram escolhidos uniformemente neste intervalo e deslocados através de um termo constante multiplicativo pela equação $g(x) = (e - 1)x + 1$, para que fossem distribuídos no intervalo $[0, e]$ no eixo y .

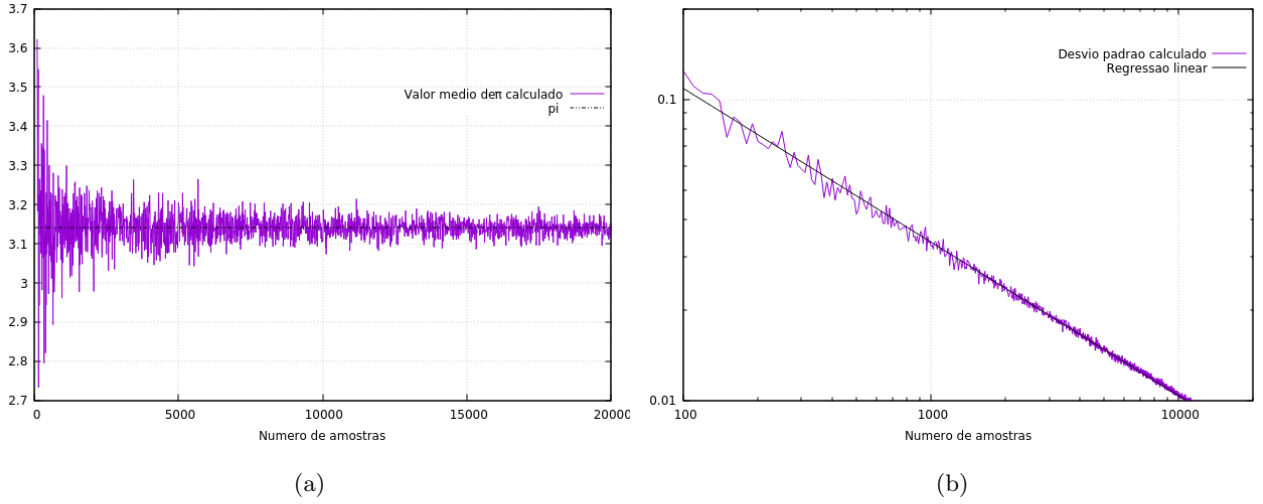


Figure 4: Estimativas de π obtidas pela equação (5) para $d = 4$ (a) e dependência do desvio padrão σ com o aumento do número de amostras em escala logarítmica (b). Com regressão linear, obtém-se o coeficiente angular $\alpha = -0.51047 \pm 0.0008$, com erro de 0.15%, conferindo com o esperado de -0.5 .

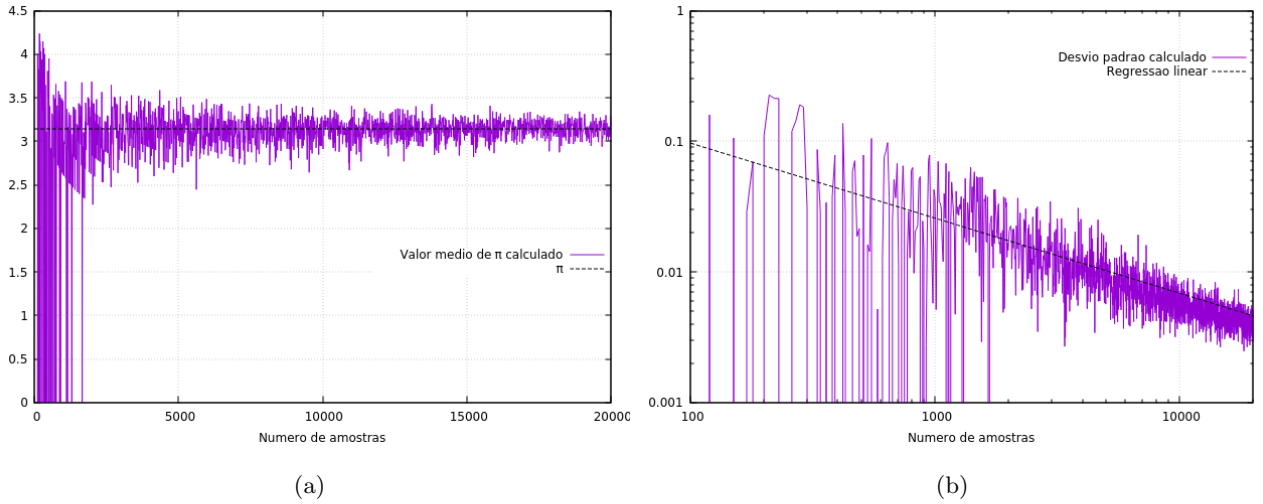


Figure 5: Estimativas de π obtidas pela equação (5) para $d = 10$ (a) e dependência do desvio padrão σ com o aumento do número de amostras em escala logarítmica (b). Com regressão linear, obtém-se o coeficiente angular $\alpha = -0.57 \pm 0.01$, com erro de 2.35%, conferindo com o esperado de -0.5 , no entanto nota-se uma flutuação muito grande para N menores que 1000. Isto deve-se à baixa probabilidade de ocorrer a validação da equação (17) para poucos pontos em dimensões superiores, resultando em valores nulos para poucas amostras.

Utilizando-se o critério de escolha de pontos menores que $f(x)$, podem ser obtidos os pontos válidos e inválidos mostrados na figura (6). A convergência ocorre para o valor da integral exata (figura (7a)), porém muito do processamento ocorre em escolhas incorretas de pontos não pertencentes à região de interesse. Desta forma pode-se reduzir o espaço disponível para a escolha de pontos x aleatórios.

Reduzindo o retângulo de lados $l_1 = 1$ e $l_2 = e$ para um trapézio delimitado pela equação $g(x) = (e - 1)x + 1$,

a maior parte dos pontos pertence à área de integração, otimizando seu cálculo. No entanto, ao comprimir o espaço da distribuição de pontos, esta deixa de ser uniforme, resultando em um acúmulo de pontos na região próxima a 0, observada na figura (8). Através de uma mudança de variável obtida como descrito pelas equações (7) a (9), retoma-se a sua uniformidade, com resultado mostrado através da figura (9).

Para que a uniformização da distribuição aconteça, considerou-se a escolha das coordenadas aleatórias (u_1, u_2) . Sendo $x = x(u_1)$ coordenada efetiva e $g(x) = (e - 1)x + 1$ equação da reta delimitante do trapézio, é possível reescrevê-la na forma $g[x(u_1)] = [e - 1]x(u_1) + 1$. Para a coordenada efetiva y vale a função $f(u_1, u_2) = y(u_1, u_2)$, onde supondo-se dependência na forma $y(u_1, u_2) = u_2 g[x(u_1)]$, o jacobiano $J_f(u_1, u_2)$ associado a (x, y) é dado por

$$J_f(u_1, u_2) = \frac{\partial u_1}{\partial x} \frac{1}{g[x(u_1)]} \quad (18)$$

Como o trapézio tem distribuição espacial crescente linearmente -já que é delimitado pela função linear $g(x)$ - uma estratégia de obtenção da função $x(u_1)$ é impondo que $J_f(u_1, u_2) = K$, com K constante.

Deste modo,

$$\frac{\partial u_1}{\partial x} \frac{1}{g[x(u_1)]} = K \quad (19)$$

que leva à solução da equação diferencial ordinária (EDO) simples, em termo de uma nova constante $C \equiv 1/K$

$$C du_1 = [[e - 1]x(u_1) + 1] dx \quad (20)$$

com solução dada por

$$Cu_1 = \frac{e - 1}{2} x(u_1)^2 + x \quad (21)$$

Para que seja possível obter a função $x(u_1)$, a mesma deve ser bijetora, o que permite apenas o domínio no intervalo para $x > 0$, pois as raízes são dadas pelos pontos

$$x_{\pm} = \frac{-1 \pm [1 + 2(e - 1)Cu_1]^{1/2}}{e - 1} \quad (22)$$

e $x(u_1)$ deve pertencer ao intervalo restrito a $[0, 1]$ em u_1 . tem-se que apenas o sinal positivo da equação (22) deve ser considerado e que

$$x(0) = \frac{-1+1}{e-1} = 0$$

$$x(1) = \frac{-1 + [1 + 2(e-1)C]^{1/2}}{e-1} = 1$$

Resultando na constante $C = (e^2 - 1)/2(e - 1)$. Substituindo este resultado na equação (22), tem-se por fim

$$x(u_1) = \frac{1}{e-1} \left[-1 + [1 + u_1(e^2 - 1)]^{1/2} \right] \quad (23)$$

que representa a transformação que se deve fazer sobre a variável aleatória u_1 para se manter a distribuição uniforme sob o trapézio.

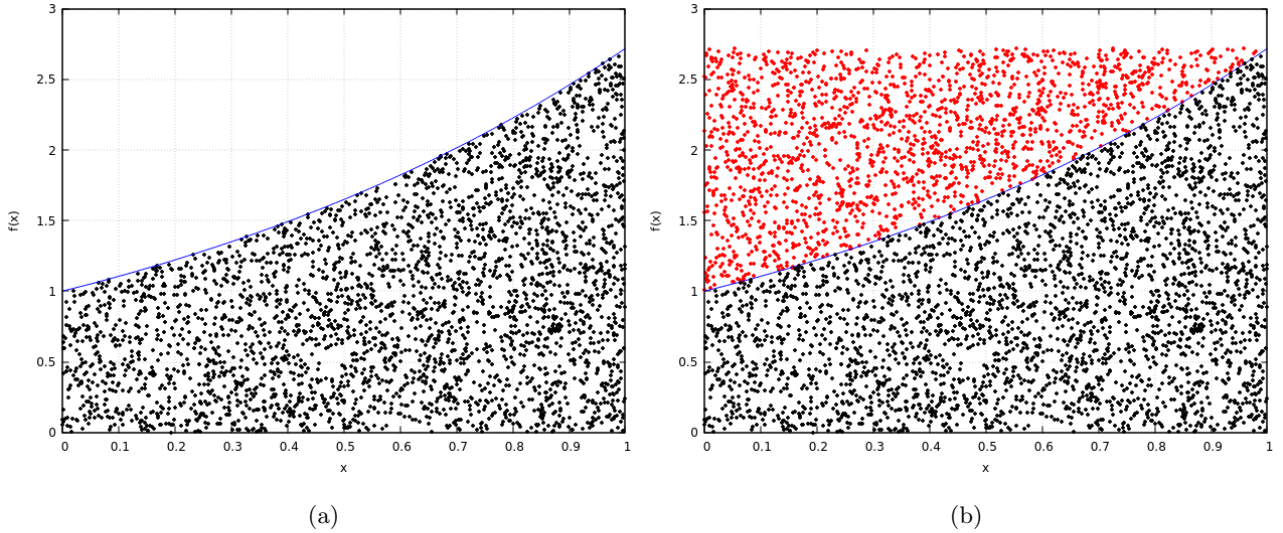


Figure 6: Pontos sob a função $f(x) = e^x$ (traço contínuo azul) escolhidos para o quadrado de lados $l_1 = 1$ e $l_2 = e$ utilizando $N = 5000$. Em (a) apenas os pontos válidos (preto) são mostrados, enquanto em (b), todos eles aparecem, em cores distintas.

A integral estimada de cada um dos casos acima citados (não-uniforme e uniforme, respectivamente) podem ser observados na figura (10). Há uma diferença entre a representatividade de cada uma das medidas, com a primeira (figura (10a)) não convergindo para o valor exato da integral. Isto deve-se à escolha de pontos de baixa representatividade, diferentemente do segundo caso, que converge para o resultado esperado.

4.3 Método de Monte Carlo - Cálculo generalizado de integrais

Para que se possa calcular integrais de modo mais eficiente que nos modelos anteriores, pode-se abordar uma distribuição de pontos unidimensional que, acumulados sob o intervalo da função integrada, se obtêm um valor estimado da integral.

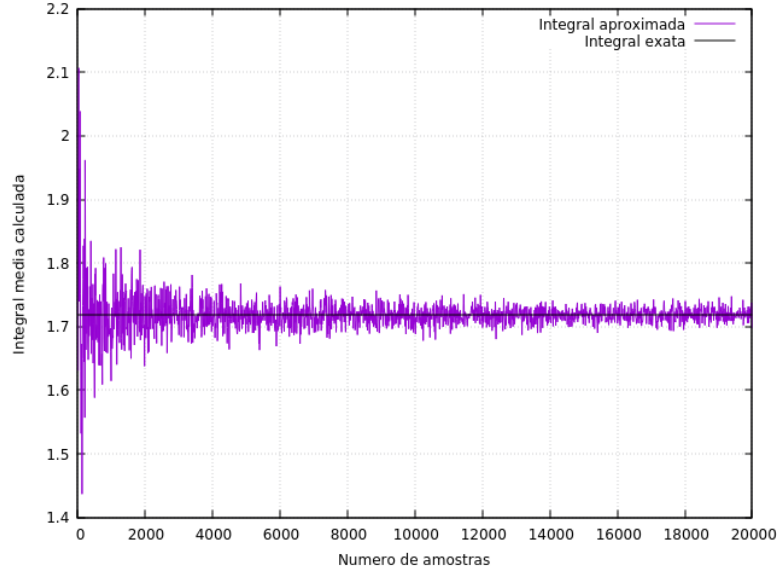


Figure 7: Convergência da integral estimada com o valor exato dado por $e - 1$ ao considerar pontos distribuídos no retângulo de lados $l_1 = 1$ e $l_2 = e$.

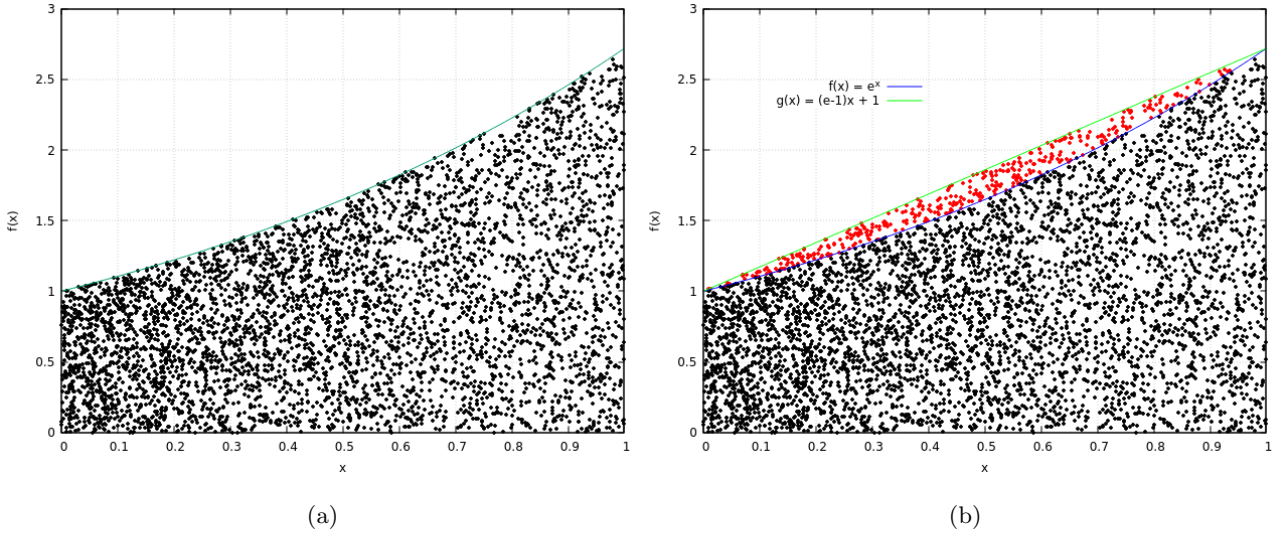


Figure 8: Pontos sob a função $f(x) = e^x$ escolhidos sob o trapézio de bases menor $l_1 = 1$ e maior $l_2 = e$, descrita por $g(x) = (1 + e)x - 1$ utilizando (a) e em todo o espaço sob a função $g(x)$ (b), utilizando-se $N = 5000$ amostras. A função $f(x) = e^x$ é apresentada em traço azul em ambas as figuras. Nota-se o acúmulo de pontos na região próxima à origem, dado que a distribuição é não-uniforme.

Com a equação (11) foi observado o comportamento de convergência para a integral exata utilizando-se, assim como nos modelos da sessão anterior, $f(x) = e^x$. A figura (11) representa tal convergência, juntamente com o desvio padrão à ela associado.

Considerando, por fim, a amostragem por importância, a convergência para o valor exato de $\int_0^1 e^x dx$ é observado na figura (12), tal como seu desvio padrão.

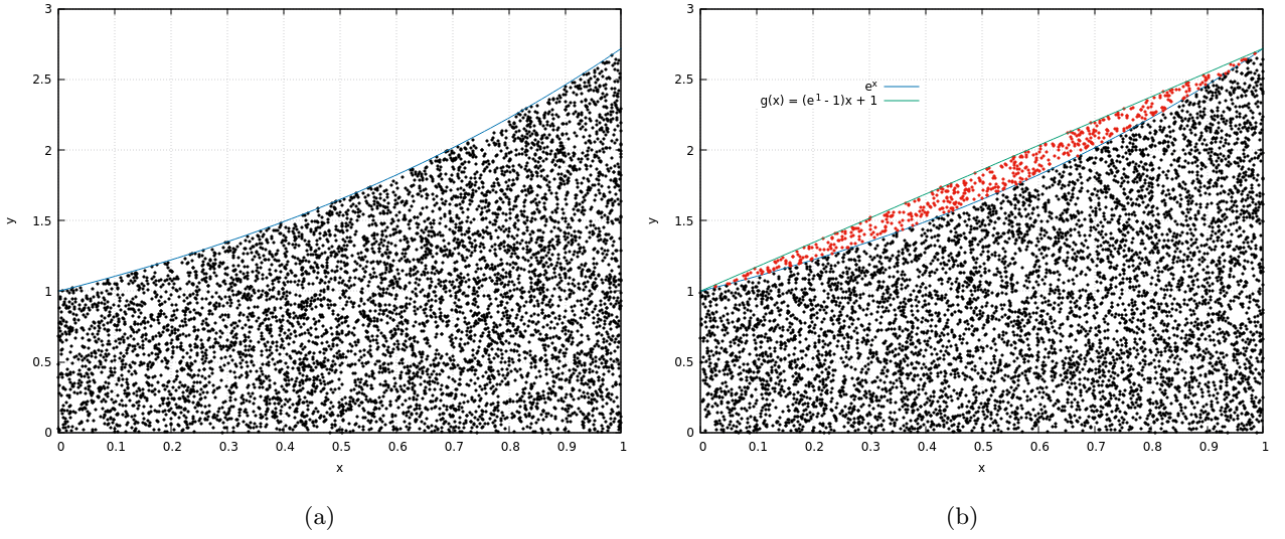


Figure 9: Pontos sob a função $f(x) = e^x$ escolhidos sob o trapézio de bases menor $l_1 = 1$ e maior $l_2 = e$, descrita por $g(x) = (1 + e)x - 1$ utilizando (a) e em todo o espaço sob a função $g(x)$ (b), utilizando-se $N = 5000$ pontos distribuídas uniformemente sob o trapézio. A função $f(x) = e^x$ é apresentada em traço azul em ambas as figuras.

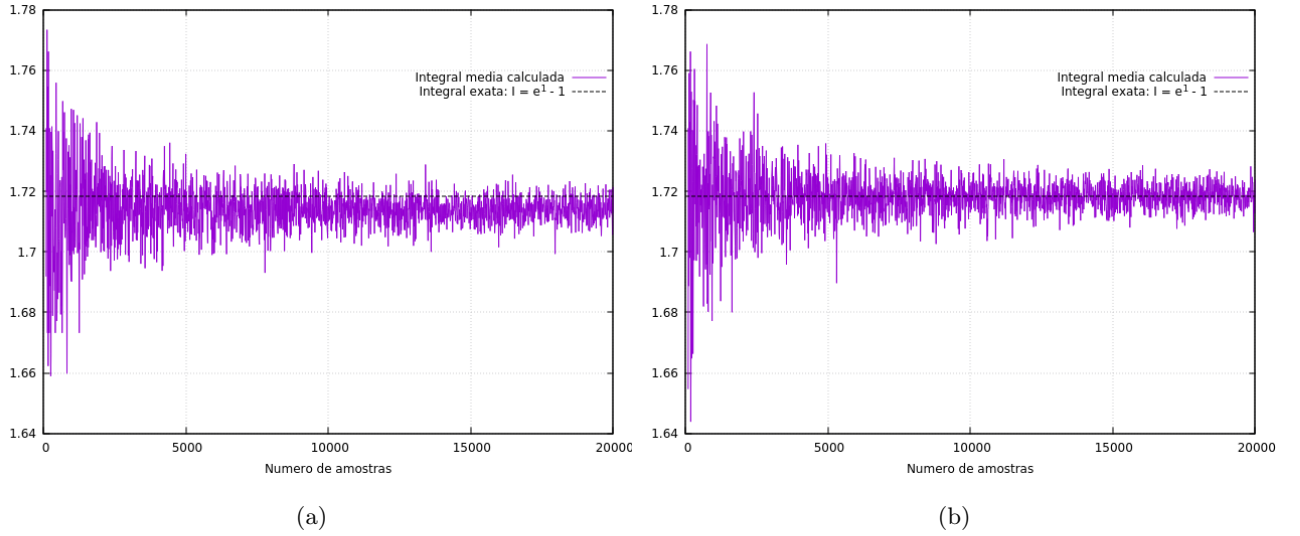


Figure 10: Convergência para o valor exato da integral utilizando-se o método do trapézio para uma distribuição de números aleatórios (a) não-uniforme e (b) uniforme com o aumento do número N de amostras. Por não serem representativos, a integral não converge para o caso não-uniforme, o que é revertido quando a distribuição é uniforme no espaço de integração.

Ao comparar os dois tipos de amostragem, conclui-se que 'por importância' apresenta convergência mais rápida ao valor exato. Como a representação logarítmica de uma dada função $f(a.x)$, com a constante, faz esta grandeza ser expressa como coeficiente linear dado por $\log(a)$ e dispondo dos parâmetros obtidos através da regressão linear do desvio padrão apresentados tabela (2), pode-se concluir que o desvio padrão, respectivos à amostragem

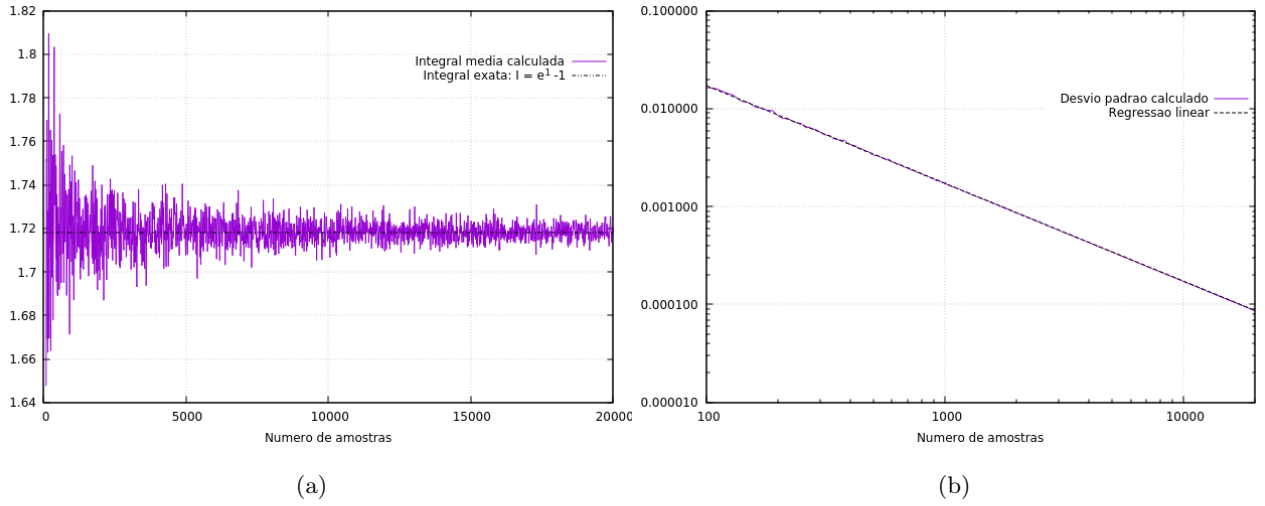


Figure 11: Convergência para a integral exata de $f(x) = e^x$ com o método de Monte Carlo por amostragem simples (a) e variação do desvio padrão $\sigma(N)$ (b) em escala logarítmica em ambos os eixos apresentados. Através da regressão linear obtém-se o coeficiente angular $\alpha = -0.9977 \pm 0.0006$.

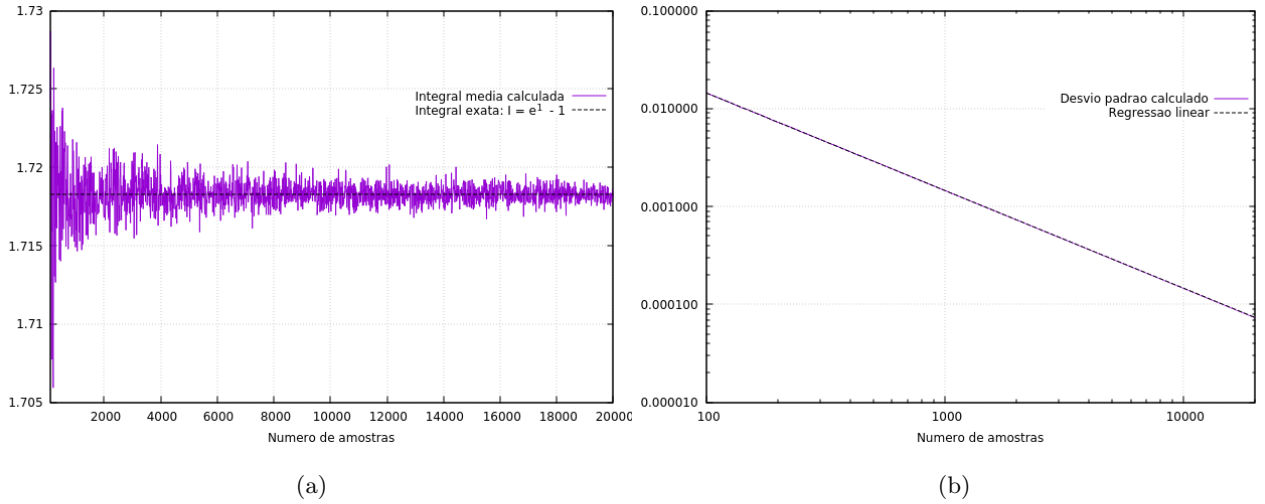


Figure 12: Convergência para a integral exata de $f(x) = e^x$ com o método de Monte Carlo por amostragem por importância (a) e variação do desvio padrão $\sigma(N)$ (b) em escala logarítmica em ambos os eixos apresentados. Através da regressão linear obtém-se o coeficiente angular $\alpha = -0.99652 \pm 0.00008$.

simples e por importância, é dado por $\sigma_s(N) = k_s/N$ e $\sigma_i(N) = k_i/N$, com $k_s = 0.636$ e $k_i = 1.0438$, resultando em uma taxa de convergência $k_i/k_s \approx 1.64$.

Fato curioso associada a ambas amostragens se dá pelo desvio padrão ter forma $\sigma(N) = 1/N$ ao invés de $1/\sqrt{N}$, como para os demais métodos descritos.

Nenhum motivo foi encontrado para que o desvio padrão fosse alterado nestes casos, o que é um possível indicador da existência de algum erro de análise considerado para a simulação, o qual infelizmente não foi

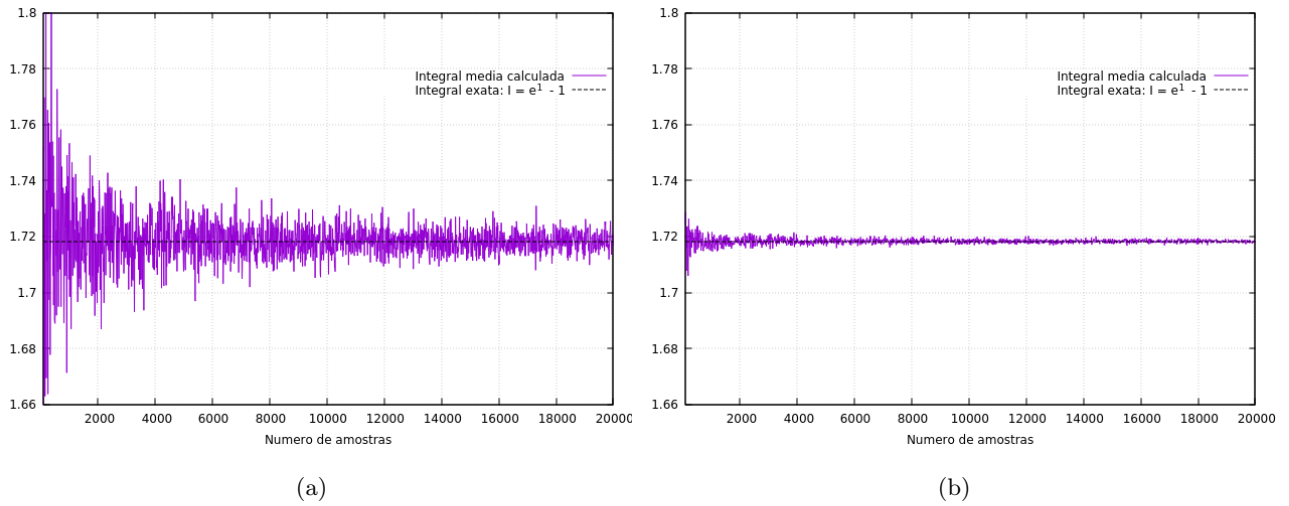


Figure 13: Convergência para a integral exata de $f(x) = e^x$ com o método de Monte Carlo por amostragem simples (a) e por importância (b) mantendo-se a mesma escala para ambas as representações. A amostragem por importância faz-se mais rápida na convergência ao valor exato esperado.

<i>Amostragem</i>	α	$\Delta\alpha$	β	$\Delta\beta$
Simple	-0.9977	$6 \cdot 10^{-4}$	0.529	$3 \cdot 10^{-3}$
Importância	-0.99652	$8 \cdot 10^{-5}$	0.3521	$5 \cdot 10^{-4}$

Table 2: Parâmetros linear β e angular α obtidos pela regressão linear do desvio padrão da amostragem simples e por importância para a integral da função $f(x) = e^x$ juntamente com seus respectivos desvios padrão.

possível solucionar para a elaboração de melhores resultados para esta última sessão.

5 Conclusão

Através dos métodos aqui apresentados, é possível concluir que o método de Monte Carlo para integração possui importante uso para a avaliação numérica de integrais, especialmente multidimensionais que teriam elevado custo computacional caso fossem tomadas por métodos de diferença (método de Euler, e.g.). Em particular o método por amostragem de importância apresenta alta convergência mesmo para números reduzidos de amostras utilizadas, fazendo com que o custo computacional para se obter uma dada precisão seja bastante reduzido quando comparado aos demais métodos aqui abordados.

6 Referências

- [1] Harrison, R L. Introduction To Monte Carlo Simulation. AIP conference proceedings. 2010; v. 1204, p. 17-21
- [2] Cromer, A. Stable Solutions Using Euler Approximation. Am. J. Phys. 1981; v. 49, n. 5, p. 455-459.
- [3] Salinas, Sílvia R A. (2008) Introdução à Física Estatística. Ed. 2, pp. 48-52.

7 Códigos

7.1 Acerto e erro

Para cada um dos M experimentos, N amostragens são feitas, coletando d pontos aleatórios relativos a cada coordenada de um espaço de dimensão d . Aplicando a eles a condição de validade pela equação (17), soma-se o número de pontos a ser considerado para a estimativa de π juntamente com seu respectivo desvio padrão.

```
arq1 = open('pi_precis3D.dat', 'w')

M=2000 #Numero de experimentos
N=100 #Numero de amostras

m=0
while m<M: #Inicializacao de experimento
    S = 0
    Sn = 0
    var = 0
    v = 0

    n = 0
    while n < N:
        #Condicional de pertencer ao dominio da esfera de d dimensoes
        if np.random.random() ** 2 + np.random.random() ** 2 + np.random.random() ** 2 <= 1:
            v += 1

        S = 4* 120**(1/5) * (v / N)**(1/5) #Expressao valida para d=3 para a estimativa de pi
        Sn += S
        var = (var + (Sn / N - S) ** 2) / N
        n += 1

    dev=np.sqrt(var)
    arq1.writelines([str(N), '\t', str(S), '\t', str(dev), '\n'])
```

```

N+=10
m+=1
print(m)

arq1.close()

```

O cálculo da integral da função $f(x) = e^x$ possui o mesmo código, porém considerando apenas um valor aleatoriamente gerado (i.e. $d = 1$).

7.2 Método de Monte Carlo - Cálculo generalizado de integrais

O programa tem funcionalidade similar àquela apresentada no código da sub-sessão anterior, com distinção à operação feita para cada número aleatório (agora apenas um é suficiente, isto é, $d = 1$) variando entre utilizar amostras distribuídas pelo retângulo ou pelo trapézio.

7.2.1 Amostragem simples

```

arq1 = open('simple_int.dat', 'w')

N=100 #Numero de amostras
M=2000 #Numero de experimentos

m=0
while m<M: #Inicializacao de experimento
    var = 0
    f = 0
    n=0
    while n<N:
        #Estimativa de integral para um numero x aleatorio
        x=np.random.random()
        fi=np.exp(x)/N
        f+=fi
        var += (var + (f / N - fi) ** 2) / N

        n+=1

    dev=np.sqrt(var)
    arq1.writelines([str(N), '\t', str(f), '\t', str(f/N), '\n'])
    N+=10

```



```

m+=1
print(m)

arq1.close()

```

7.2.2 Amostragem por importância

```

arq1 = open('importance_int.dat', 'w')

N=100 #Numero de amostras
M=2000 #Numero de experimentos

m=0
while m<M: #Inicializacao de experimento
    S=0
    S2=0
    var=0
    var2=0
    n=0
    while n<N:
        u=np.random.random() #Variavel aleatoria uniformemente distribuida em {0,1}
        x=((u*(np.exp(1)**2-1)+1)**(1/2) -1)/((np.exp(1)-1)) #Mudanca de variavel para uniformizacao
            no intervalo [0,g(x)]
        y=np.exp(x)
        w=2*((np.exp(1)-1)*x+1)/(np.exp(1)+1) #Ponderacao de importancia
        Sn=(y/w)*(1/N)
        S+=Sn
        var += (var + (S / N - Sn) ** 2) / N

        S2n=np.exp(u)/N
        S2+=S2n
        var2 += (var2 + (S2 / N - S2n) ** 2) / N

    n+=1
    dev=np.sqrt(var)
    dev2=np.sqrt(var2)
    arq1.writelines([str(N), '\t', str(S), '\t', str(dev), '\t', str(S2), '\t', str(dev2), '\n'])
    N+=10
print(m)

```

`m+=1`

`arq1.close()`
