Métodos Computacionais em Física: Mecânica Estatística

Aula: Método de Monte Carlo.

Aula: Método de Monte Carlo - Objetivos

Ao final desta aula, você deverá ser capaz de:

1) Descrever a “filosofia” do método de Monte Carlo: como usar números aleatórios e amostragem para calcular quantidades “não aleatórias”, tais como valores esperados.

2) Implementar o Método de Monte Carlo para cálculo de integrais.

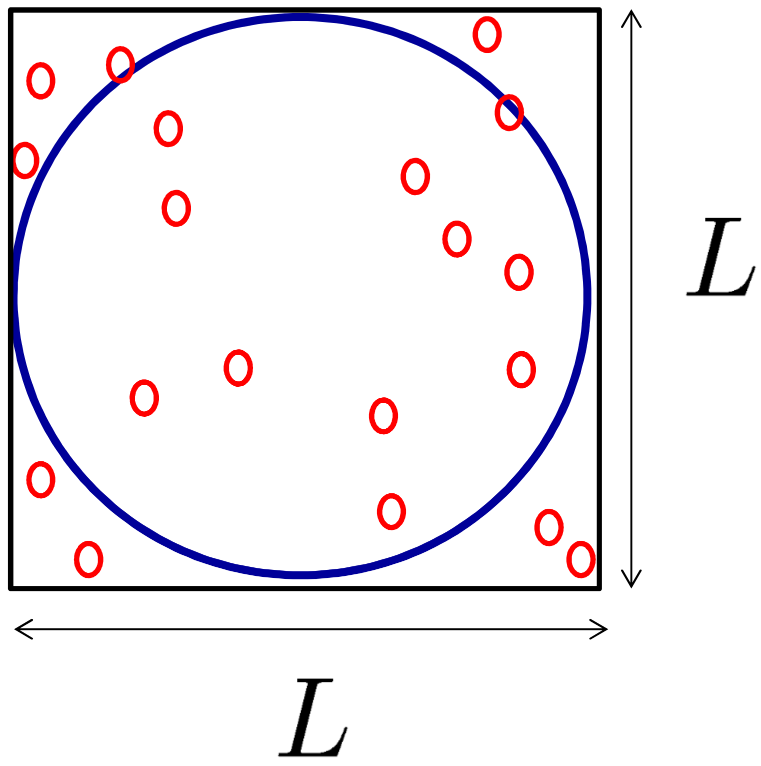
Tarefa: Calcular π com duas casas decimais usando o método de Monte Carlo.

Tempo aproximado: 20 a 30 min (lembrando que o *debug* é a maior parte disso!).

Método de Monte Carlo: cálculo de π

É possível calcular π usando números aleatórios?

- Imagine uma tábua quadrada de área $A_{tot}=L^2$ em que um macaco esteja jogados dardos (de forma aleatória).
- Todos os dardos atingem a tábua e a preenchem de forma aleatória.
- Pergunta: qual a probabilidade de um dardo atingir um círculo de raio $R \leq L$ no interior da tábua?



Método de Monte Carlo: cálculo de π

É possível calcular π usando números aleatórios?

- Fica claro que a probabilidade de um dardo atingir o círculo depende da razão entre as áreas:

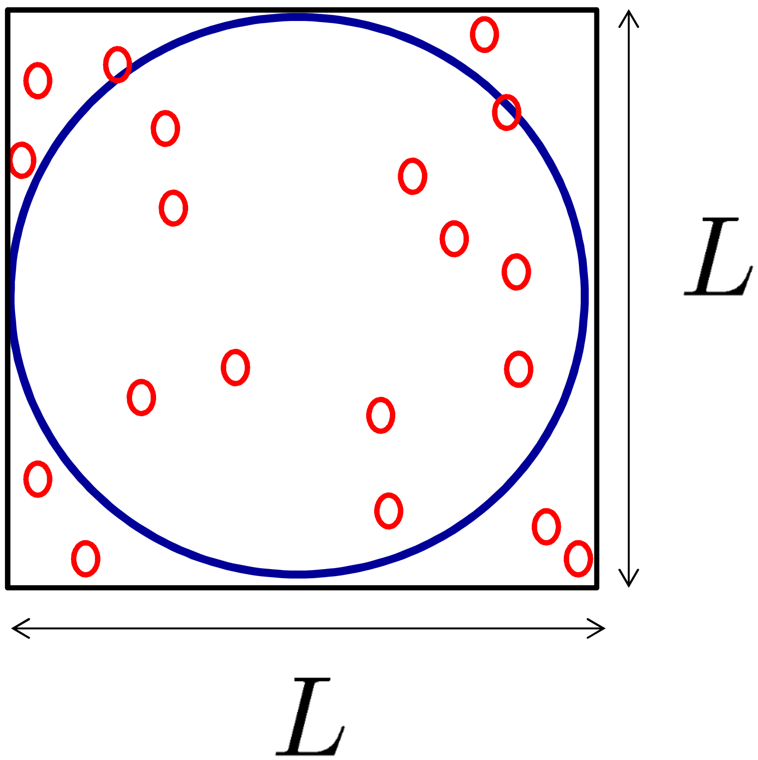
$$P_{\text{circ}} = \frac{A_{\text{circ}}}{A_{\text{tot}}} = \frac{\pi R^2}{L^2}$$

- Se forem jogados N_{tot} dardos e N_{circ} atingirem o círculo, teremos:

$$P_{\text{circ}}^{N_{\text{tot}}} = \frac{N_{\text{circ}}}{N_{\text{tot}}}$$

- No limite de N_{tot} grande, recuperamos o contínuo::

$$P_{\text{circ}} = \lim_{N_{\text{tot}} \to \infty} P_{\text{circ}}^{N_{\text{tot}}}$$



Método de Monte Carlo: cálculo de π

- Consideremos o caso R=1 e L=2 (vide figura). Neste caso:

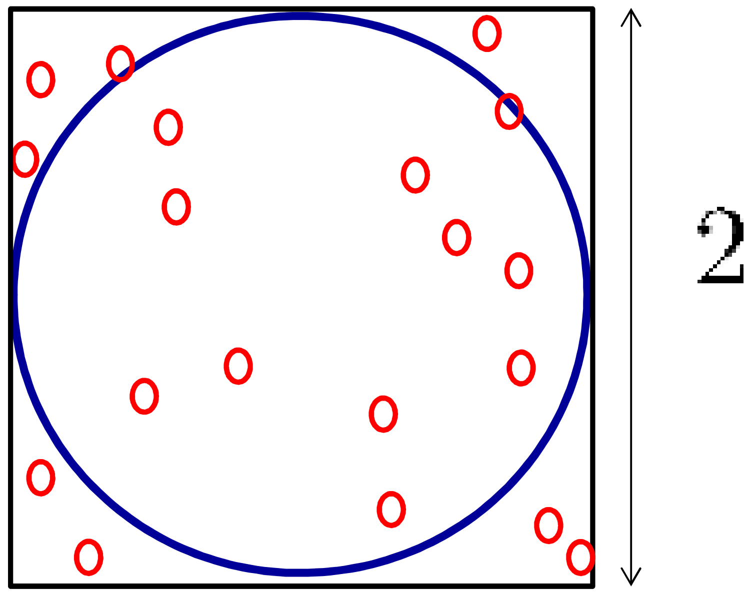
$$\frac{\pi}{4} = \lim_{N_{\rm tot}\to\infty} \frac{N_{\rm circ}}{N_{\rm tot}}$$

- Ou seja:

$$\boxed{\pi = \lim_{N_{\rm tot}\to\infty} \frac{4N_{\rm circ}}{N_{\rm tot}}}$$

- Logo, se forem jogados um número grande N_{tot} de dardos e N_{circ} atingirem o círculo. temos uma aproximação para π:

$$\boxed{\pi^{N_{\rm tot}} \approx \frac{4N_{\rm circ}}{N_{\rm tot}}}$$



Método de Monte Carlo: integração

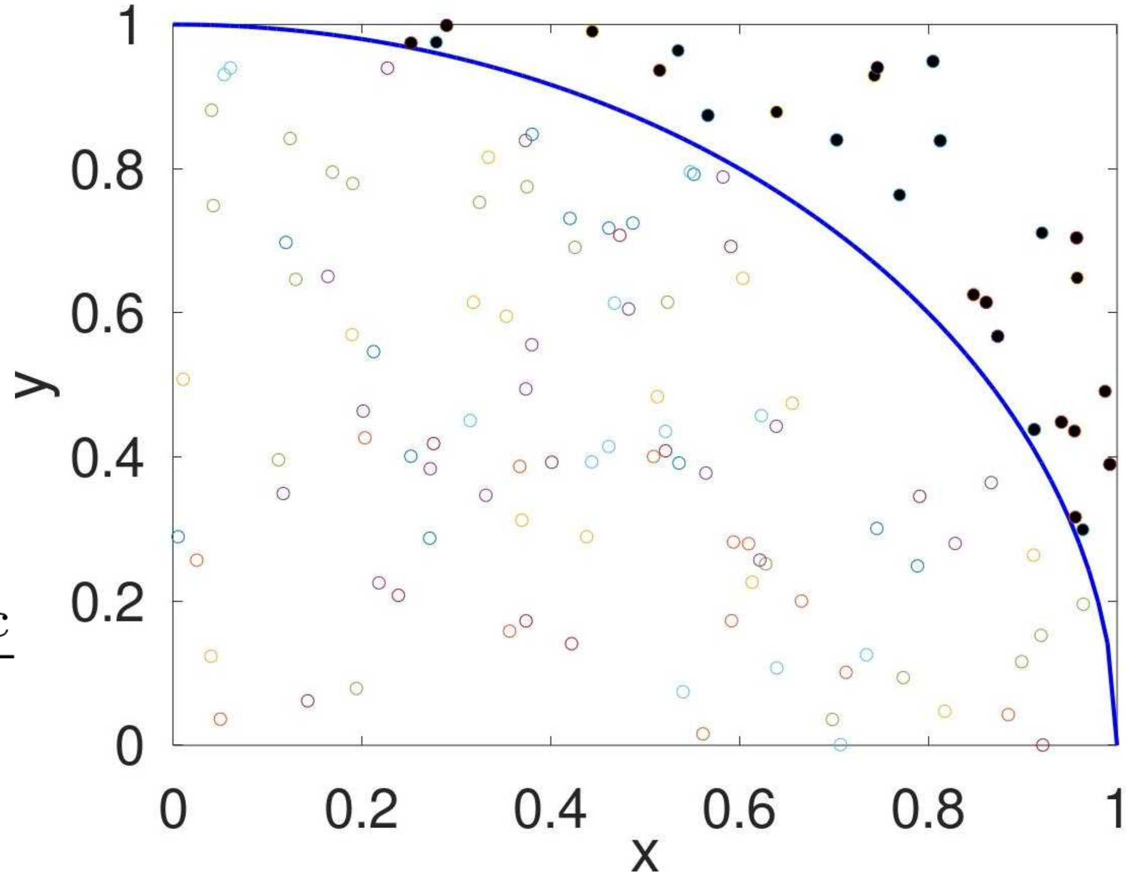
- Por simetria, podemos considerar apenas ¼ de círculo e ainda teremos:

$$\frac{\pi}{4} = \lim_{N_{\text{tot}} \to \infty} \frac{N_{\text{circ}}}{N_{\text{tot}}}$$

- Note que o que estamos fazendo é, no fundo, o cálculo da integral:

$$\int_0^1 \sqrt{1 - x^2}\, dx = \lim_{N_{\text{tot}} \to \infty} \frac{N_{\text{circ}}}{N_{\text{tot}}}$$

- Este é um exemplo de integração via *método de Monte Carlo*.



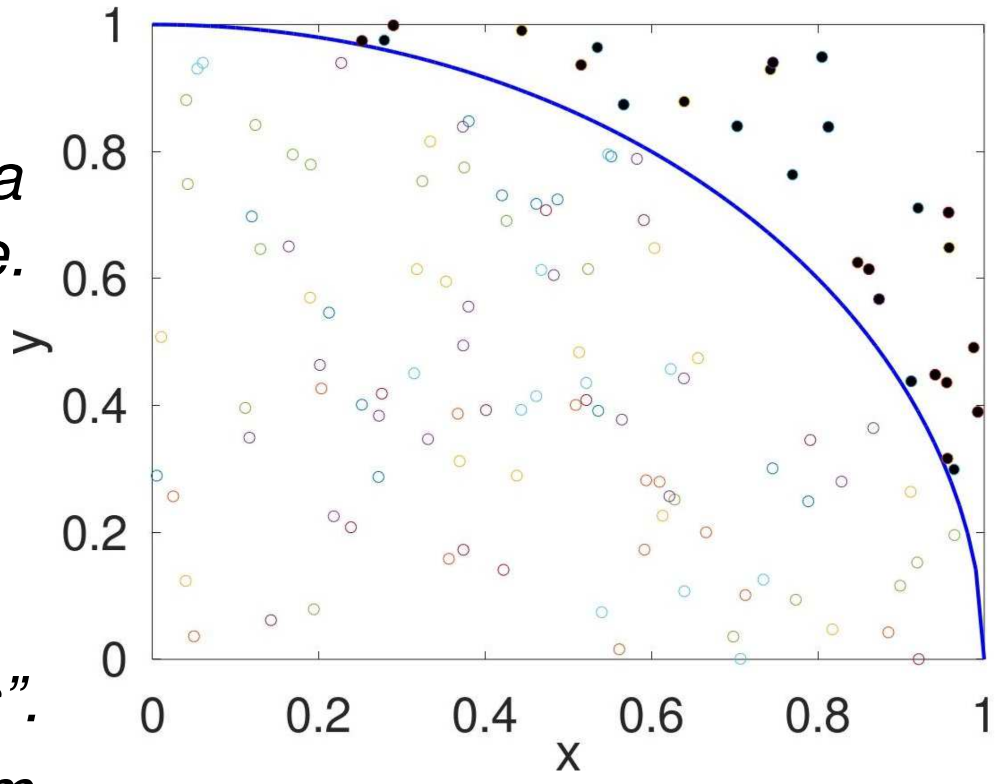
Aula : Monte Carlo – Tarefa

Utilize o método de Monte Carlo para calcular π com 2 casas decimais.

- *Sorteie N_{tot} pares (x,y) entre 0 e 1 e verifique destes quais estão dentro da área do círculo (N_{circ}) no 1º quadrante.*
- *Calcule a aproximação para π via:*

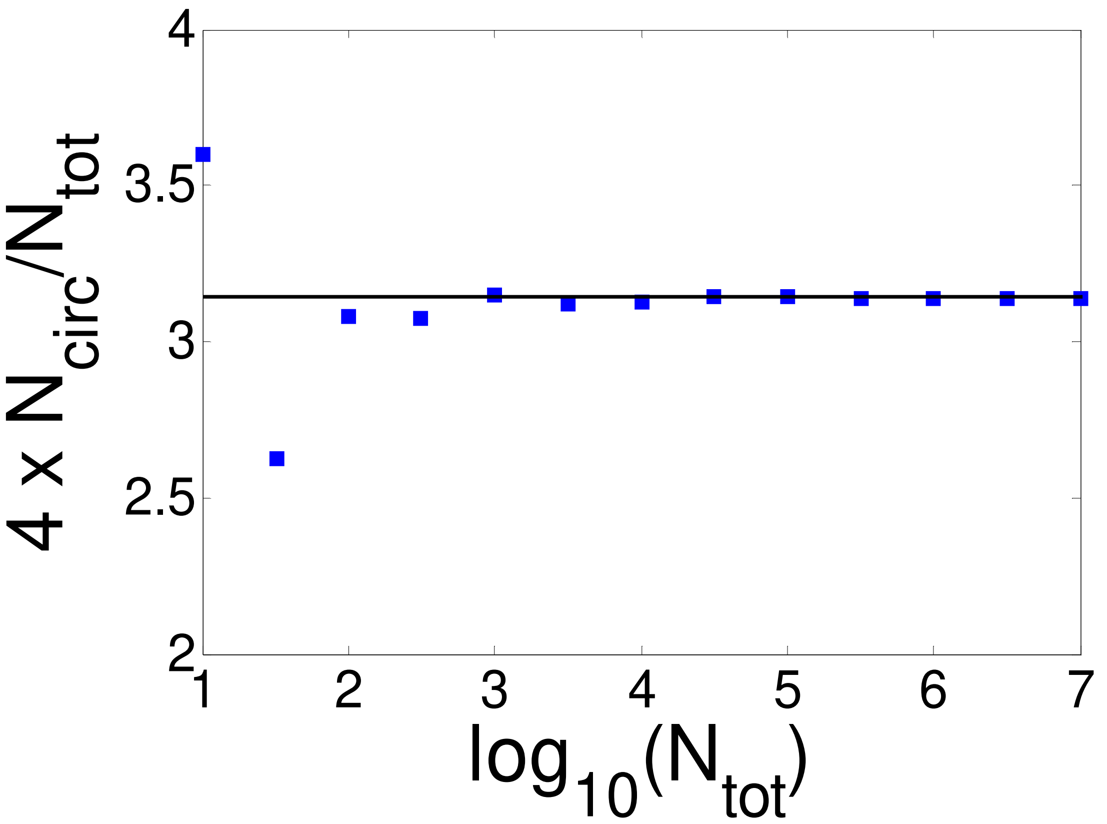
$$\pi^{N_{\rm tot}} = \frac{4N_{\rm circ}}{N_{\rm tot}}$$

- *Aumente N_{tot} até convergir para um valor com 2 casas decimais "estáveis".*
- *Para verificar a convergência, faça um gráfico* $\pi^{N_{\rm tot}} \text{vs} \ \log_{10} N_{\rm tot}$



Aula: Monte Carlo – Tarefa – Dicas

- *Exemplo de gráfico* $\pi^{N_{\rm tot}}\,\text{vs}\ \log_{10} N_{\rm tot}$ *com* N_{totmax} *=*10^7 *(!).*
- *A linha preta mostra o valor exato de* π*.*




```
Ntot=10: pi ~ 4*Narea/Ntot =3.6000
Ntot=32: pi ~ 4*Narea/Ntot =2.6250
Ntot=100: pi ~ 4*Narea/Ntot =3.0800
Ntot=316: pi ~ 4*Narea/Ntot =3.0759
Ntot=1000: pi ~ 4*Narea/Ntot =3.1480
Ntot=3162: pi ~ 4*Narea/Ntot =3.1208
Ntot=10000: pi ~ 4*Narea/Ntot =3.1260
Ntot=31623: pi ~ 4*Narea/Ntot =3.1420
Ntot=100000: pi ~ 4*Narea/Ntot =3.1452
Ntot=316228: pi ~ 4*Narea/Ntot =3.1380
Ntot=1000000: pi ~ 4*Narea/Ntot =3.1402
Ntot=3162278: pi ~ 4*Narea/Ntot =3.1404
Ntot=10000000: pi ~ 4*Narea/Ntot =3.1402
```

- Cuidado com a “ falsa convergência”.