FFI 202 – Física Computacional II

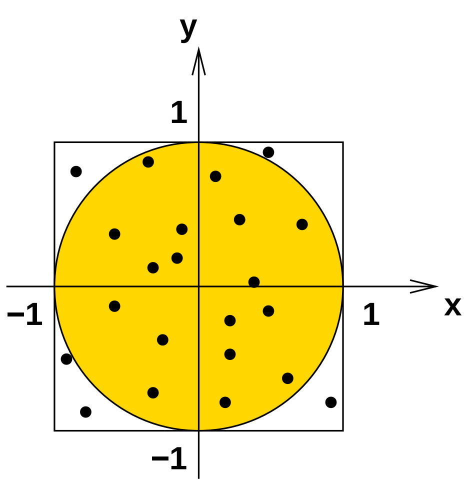
Segundo Projeto

Instruções

- Crie um diretório “PROJ2_nome” em /home/public/FISCOMP2/PROJ2
- Proteja seu diretório para nao ser lido por “g” e “o”
- Deixe no diretório um arquivo de nome “rel_proj2.pdf”, com um relatório (elaborado utilizando `latex`) sobre o projeto, incluindo texto, listagens dos códigos, gráficos e tabelas.

Exercícios

1) Método de Monte Carlo: a área de um círculo de raio 1 pode ser estimada através do lançamento de pontos aleatórios uniformemente no quadrado definido por $x \in [-1, 1]$, $y \in [-1, 1]$ e contagem da fração destes pontos que estiver contida no círculo, como ilustrado na figura abaixo.



No limite de grande número de pontos N, obtém-se assim um valor cada vez mais próximo da verdadeira área do círculo. Obtenha desta forma uma estimativa numérica para π. Qual a precisão de seu resultado? como ela varia com N? você consegue explicar esta dependência? exprima seu resultado para π com o respectivo erro estatístico (i.e. desvio padrão) para $N = 100, 10000, 10^6$.

2) Generalização para dimensão d: Repita o exercício acima para o caso da hiper-esfera de raio 1 em d dimensões (por exemplo para d $= 3, 4, 10$), verificando que o comportamento do erro de Monte Carlo com o inverso da raiz quadrada do número de amostras produzido é independente da dimensão do espaço de integração. Note que o volume no caso geral é dado por $\pi^{d/2}/\,\Gamma(d/2+1)$, onde Γ é a chamada *função gama*. Calcule também o raio médio dos pontos gerados dentro da hiper-esfera, verificando o resultado exato

$$<r>= \int_0^1 r^d\, dr \,/ \int_0^1 r^{d-1}\, dr \;=\; d/(d+1)\,,$$

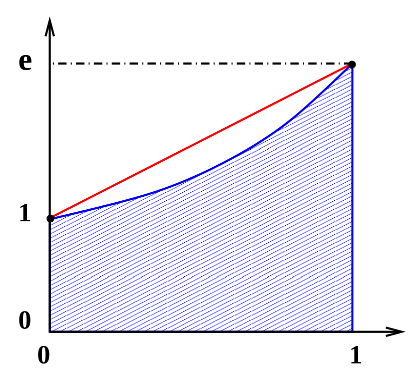
que reflete o fato de a distribuição uniforme concentrar-se na superfície à medida que a dimensão d aumenta (o raio médio tende a 1).

3) Aplicação ao cálculo de integrais: o método acima pode ser usado no cálculo de integrais definidas em geral. Para a integral de uma função positiva $f(x)$ no intervalo $[a,b]$ considera-se a razão entre a área sob o gráfico da função e a área do retângulo definido por $x \in [a,b]$, $y \in [0, f_{max}]$, onde f_{max} é o valor máximo de $f(x)$ no intervalo $[a,b]$. Utilize o método para calcular a integral

$$\int_0^1 e^x\, dx\,. \tag{1}$$

Seus resultados devem conter média e erro (i.e. raiz quadrada da variância) para vários valores no número N de amostras. Note que nosso método se torna claramente ineficiente se a área do retângulo onde são gerados os pontos for grande demais comparada à área que queremos estimar.

No caso acima, por exemplo, ao invés de gerar pontos uniformemente no retângulo definido por $x \in [0,1]$, $y \in [0,e]$, podem-se produzir pontos no trapézio dado pela área sob a reta $g(x) \equiv (e-1)\,x + 1$ no intervalo $[0,1]$, como na figura ao lado. Esta região também engloba a área desejada e possui uma área menor. Faça o cálculo da integral (1) gerando pontos uniformemente nesta figura. Verifique que o erro na estimativa da área é menor por um fator aproximadamente 3 quando comparado ao caso anterior, ou seja a convergência neste caso é quase 10 vezes mais rápida. [**Sugestão**: as coordenadas (x,y) podem ser geradas a partir de pares de números aleatórios (r_1, r_2) uniformemente distribuídos em $[0,1]$. Suponhamos que $x = x(r_1)$. Uma vez gerado x, a distribuição para y será uniforme entre 0 e $g(x)$, ou seja $y(r_1, r_2) \;=\; r_2\, g(x(r_1))$. Para garantir que x, y sejam gerados uniformemente no trapézio devemos construir $x(r_1)$ de forma que o Jacobiano $\partial(r_1, r_2)/\partial(x,y)$ seja uma constante.]



Extra: Verifique graficamente as distribuições uniformes dos pontos nas áreas das figuras consideradas nos Exercícios 1, 2 e 3 acima. Faça gráficos de (x,y) respectivamente para o quadrado, o retângulo e o trapézio, usando todos os pontos gerados.

Considere agora somente os pontos dentro da área desejada, gerando gráficos para o círculo e para a região sob a exponencial.

4) Amostragem simples: Seguindo a idéia do método de Monte Carlo introduzida acima — baseada em estimar-se uma integral (determinística) a partir de uma média de variáveis aleatórias — podemos calcular de maneira geral a integral

$$I = \int_a^b \frac{f(x)}{b-a}\, dx \tag{2}$$

simplesmente gerando pontos x_i uniformemente no intervalo $[a,b]$ e tomando a média dos valores $f(x_i)$. Este procedimento corresponde a interpretar a integral I como a média estatística da variável $f(x)$ na distribuição uniforme

$$u(x)\,dx \;\equiv\; \frac{dx}{b-a}\,, \tag{3}$$

normalizada de maneira que $\int_a^b u(x)\,dx \;=\; 1$. Escrevemos portanto a estimativa para o valor de I

$$\overline{f} \;\equiv\; \frac{1}{N}\,\sum_{i=1}^{N} f(x_i), \tag{4}$$

a qual convergirá, no limite de N tendendo a infinito, para a integral desejada. O erro estatístico associado à estimativa $\overline{f}$, dado pela raiz quadrada de sua variância, terá o comportamento familiar dos métodos de Monte Carlo, $1/\sqrt{N}$. Este procedimento, chamado de amostragem simples, é claramente mais geral do que o método geométrico discutido no exercício anterior, já que nem sempre será possível encontrar uma figura apropriada onde saibamos lançar pontos uniformemente.

Repita a integral da função exponencial usando o método de amostragem simples e compare a eficiência à do método geométrico do exercício anterior.

5) Amostragem por importância: O método de amostragem simples (discutido acima) gera pontos uniformemente no espaço de integração. Claramente, se a função $f(x)$ for fortemente concentrada em alguma região deste espaço o algoritmo perderá grande parte do tempo adicionando termos $f(x_i)$ à média para valores x_i "pouco importantes", ou seja para pontos em que a função f possui valor desprezível. Em casos como este, gostaríamos de considerar médias em que os valores de x_i gerados possuíssem contribuição significativa para a soma. Isso é possível se redefinirmos a função a ser integrada, como descrito a seguir. Escrevamos a integral (2) da forma

$$I \;=\; \int_a^b \frac{f(x)}{b-a}\, dx \;=\; \int_a^b \frac{f(x)}{w(x)}\,\frac{w(x)}{b-a}\, dx \tag{5}$$

onde $w(x)$ é uma função positiva em $[a,b]$ satisfazendo

$$\int_a^b w(x)\,dx \;=\; b-a\,. \tag{6}$$

Neste caso estamos calculando a média da função $f(x)\,/\,w(x)$ em $[a,b]$ com x distribuído neste intervalo segundo a medida normalizada $w(x)/(b-a)$. Note que estamos integrando uma função diferente, e a variável x não é mais distribuída uniformemente no intervalo $[a,b]$. Consideremos agora a mudança de variáveis

$$y(x) \;=\; a \,+\, \int_a^x w(x')\,dx'\;, \tag{7}$$

a qual satisfaz as condições $y(b) = b$ e $y(a) = a$. Se a relação $y = y(x)$ puder ser invertida — ou seja se pudermos determinar a função $x = x(y)$ — e já que $dy/dx = w(x)$, podemos finalmente escrever a integral I como

$$I = \int_a^b \frac{f[x(y)]}{w[x(y)]}\,\frac{dy}{(b-a)}\;. \tag{8}$$

Esta é a média de $f[x(y)]/w[x(y)]$ em $[a,b]$ com y distribuído uniformemente neste intervalo. Claramente, se a função $w(x)$ for convenientemente escolhida, o cálculo da média acima será uma maneira mais eficiente de se determinar a integral I. De fato, se $w(x) \approx f(x)$ no intervalo $[a,b]$ então a razão $f(x)\,/\,w(x)$ — que é a nova função a ser integrada — é quase constante e as flutuações de $f(x_i)$ em torno do valor médio I serão reduzidas. Esta redução na largura dos valores que podem ser assumidos pela função de integração é exatamente o que buscávamos, ou seja, os termos somados para o cálculo da média serão de importância equivalente, já que para a nova função as abscissas x (geradas a partir da distribuição uniforme para y) serão pontos onde a função assume valores significativos.

Considerando mais uma vez a integral da função exponencial em $[0,1]$, efetue uma mudança de variáveis

$$w(x) \;=\; 2\,[\,(e-1)\,x \,+\, 1\,]\,/\,(e+1)\,. \tag{9}$$

Verifique que a convergência do método é cerca de 60 vezes mais rápida do que no caso de amostragem simples do exercício anterior. Faça um gráfico da função dada pela razão $f(x)/w(x)$, verificando que ela é suave no intervalo $[0,1]$, e portanto apropriada para a amostragem por importância da variável x.

Note: As várias versões de métodos de Monte Carlo discutidas acima constituem exemplos de **métodos de Monte Carlo estático**, por serem baseadas na geração dos N pontos aleatórios de maneira independente. Em outras palavras, não há a noção de tempo associada aos dados produzidos.