Introdução à Física Computacional Sistemas Aleatórios

Luiz Fernando S. E. Santos N^o USP: 10892680

Junho de 2019

1 Introdução

Na presente prática, trabalhamos com alguns aspectos dos sistemas aleatórios, bem como suas utilidades em áreas dês do cálculo numérico (possibilitando técnicas como o *Monte Carlo*), até na simulação de decaímento atômico e dos passeios aleatórios.

Os códigos foram feitos em C++ em sua maior parte, com auxílio do Python 3 com as bibliotecas Numpy, Scipy e Matplotlib para manipulação e visualização dos dados.

Os scripts de graficagem são executados automáticamente após a execução do programa "príncipal" (em C++)

Para a compilação, recomenda-se usar

g++ -O3 [nomedoprograma].cpp -o [nomedoprograma]

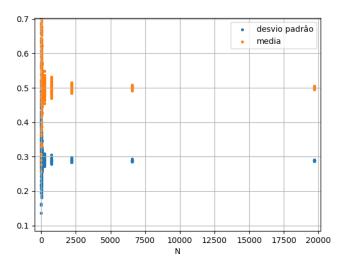
no terminal.

2 Métodos e Resultados

2.1 Números aleatórios, integrais e amostragem

2.1.1 A

Foi garado um total de $k=10^2$ sequências de números aleatórios, cada uma composta por um total de $N=10^m$ números. O comportamento de convergência da média e do desvio padrão desses conjuntos foram observados para m variando entre 1 até 9. Os resultados obtidos para cada amostra, em relação à N, podem ser obsevados:



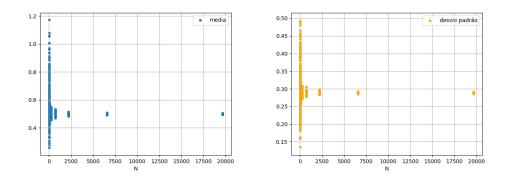


Figura 1: Convergência da média e desvio padrão.

Pode-se observar, conforme o esperado, a convergência da média para < r> = 0.5 e do desvio para $\sigma \approx 0.288675$. Isso fica mais claro aproximando dos resultados para $N=3^9$:

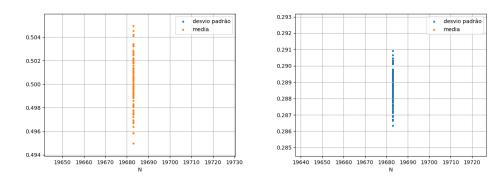


Figura 2: Valores de convergência da média e do desvio padrão.

2.1.2 B

Agora, com o gerador de números aleatórios introduzido em $\bf A$, fazemos os histogramas para os valores médios < r>>, para os tamanhos $N=3^2, 3^3$ e 3^4 :

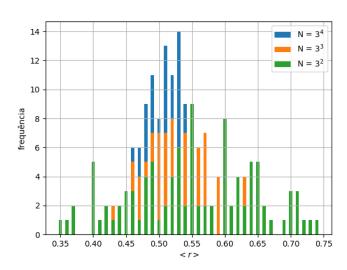


Figura 3: Histogramas de $\langle r \rangle$ para os diferentes valores de N.

De acordo com o esperado, conforme N aumenta, o histograma adquire um pico mais acentuado, bem diferente por exemplo do caso $N=3^2$, em que

a distribuição é mais "espalhada" ao longo do eixo.

Aqui também podemos observar algo interessante: de acordo com o teorma central do limite, espera-se que o desvio das médias seja proporcional ao inverso da raíz quadrada do número N de valores, isso é $\delta < r > \propto 1/\sqrt{N}$. Podemos verificar isso no nosso algorítmo simplesmente variando N e calculando o erro relacionado à média final de cada um.

Fazendo isso e plotando em um gráfico em escala logarítmica, obtemos:

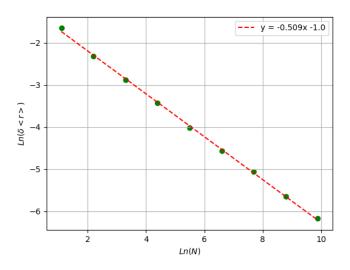


Figura 4: Plot em escala log-log de $\delta < r >$ em relação à N.

Podemos verificar que o coef. angular da reta ajustada para os pontos está razoávelmente próximo ao valor de 0.5 esperado para essa situação.

2.1.3 C

Aqui, implementarmos pela primeira vez o famoso método de Monte-Carlo! Isso será feito gernado um par de números aleatórios (x, y) entre -1 e 1 e tomando-os como cordenadas do R^2 . Sua probabilidade de estar dentro do círculo unitário será usada para fazermos uma aproximação da área deste círculo.

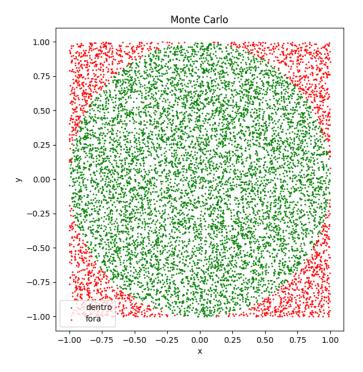


Figura 5: Representação gráfica do algorítmo usado.

Vamos repetir esse processo, variando o tamanho do nosso conjunto de pontos e tendo como objetivo obter, através dos dados, uma aproximação para a constante π com uma precisão da ordem de 10^{-4} .

Executando o algorítmo, obtemos que o valor de N para que nos seja possível obter essa precisão é de, aproximadamente, N=268435456 iterações. Realmente um grande número!

2.1.4 D

Ainda com o método de Monte-Carlo, agora este será usado como uma forma de aproximar o valor da integral de duas funções, sendo elas:

$$f_1(x) = \frac{4}{x^2 + 1} \tag{1}$$

$$f_2(x) = \frac{1}{x} \tag{2}$$

A primeira no intervalo [0,1] e a segunda em [1,10].

Aplicando o método para ambas funções, vamos novamente variar nossa amostra N e observer o comportamento de convergência em ambas:

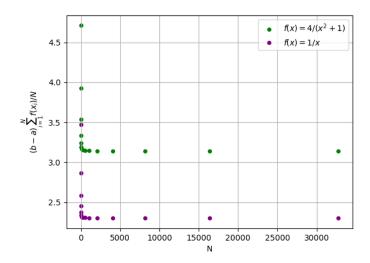


Figura 6: Convergência da média das amostras para a integral de cada função.

O valor final (para o maior N) calculado de cada integral sendo 3.142 para f_1 e 2.303 para f_2 . Podemos notar que há uma boa convergência, tendo em vista que:

$$\int_0^1 \frac{4}{x^2 + 1} \, dx = \pi \approx 3.14159 \tag{3}$$

$$\int_{1}^{10} \frac{1}{x} dx \approx 2.30259 \tag{4}$$

Também podemos ver a evolução do erro destas ao aumentarmos N:

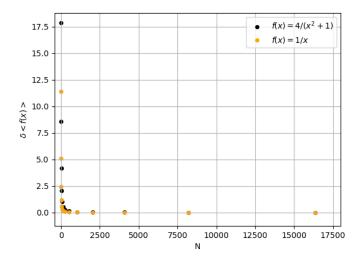


Figura 7: Convergência do desvio padrão das amostras para a integral de cada função.

Em ambos os casos, ele parece estar convergindo para zero.

2.2 Decaimento radioativo

2.2.1 A e B

Aqui, começamos por aproximar o comportamento de decaímento radioatívo de um conjunto N_0 de núcleos que decaem de acordo com a probabilidade:

$$dP = \lambda \, dt \tag{5}$$

Isso é feito gerando k amostras, que são respectivamente iteradas ao longo de um tempo t discreto (com dt=0.005). Em cada iteração, é checada a probabilidade de cada núcleo decair. Caso isso ocorra, o número de núcleos é atualizado e a iteração continua.

Foi escolhido um dt suficientemente pequeno, ao mesmo tempo que um t=10, o que garante que ao final provavelmente não haverão mais núcleos em nenhuma das amostras.

Executando o algoritmo para $k=N_0=1000$, obtemos:

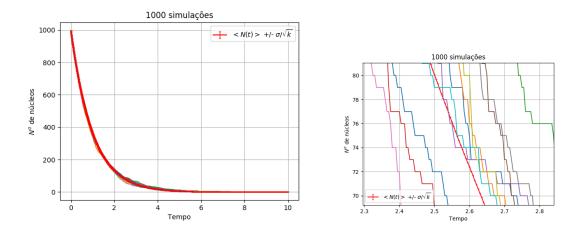


Figura 8: No gráfico, representação de 10 das amostras, junto com a média das 1000.

2.2.2 C

Tomando a interpretação do decaimento radioativo:

$$p(x) = \lambda e^{-\lambda x} \tag{6}$$

Pelo teorema central do limite, obtemos que:

$$\langle p(x) \rangle = \frac{1}{(b-a)} \int_a^b \lambda e^{-\lambda x} = \frac{e^{-\lambda a} - e^{-\lambda b}}{b-a}$$

O que, se a = 0:

$$\langle p(x) \rangle = \frac{1 - e^{-\lambda b}}{b} \tag{7}$$

Para simular uma distribuição de números aleatórios que siga esta equação, usaremos:

$$x = -\frac{1}{\lambda}ln(1-r) \tag{8}$$

Onde r é um número aleatório no intervalo (0,1).

Fazendo isso e para um certo número de amostras realizando o histograma de x, obtemos:

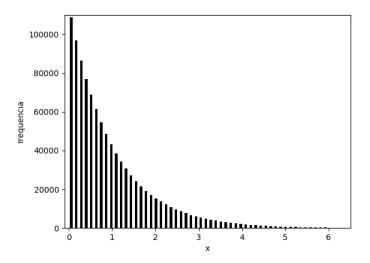


Figura 9: Representação gráfica da distribuição descrita pela equação [6].

Podemos checar que de fato há o comportamento exponencial representando esse histograma em escala logarítmica:

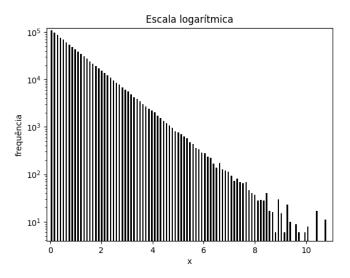


Figura 10: Histograma em escala log.

2.3 Passeio aleatório

2.3.1 A

Para primeiramente ilustar o passeio aleatório, faremos sua representação em uma única dimensão.

Tomemos um número k de amostras, tendo como ponto de partida a origem, iteramos o "caminho" de cada uma sorteando um número no intervalo [-1,1], para os tempos t=50,100 e 200. Os histogramas do ponto final de cada caminho, em relação o intervalo de tempo, são:

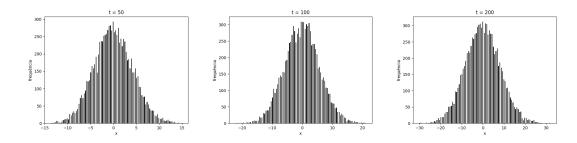


Figura 11: Histogramas do final do passeio aleatório para diferentes tempos.

É possível reparar que, embora mais espaço seja abrangido em um tempo maior, o histograma ainda aponta um grande pico na origem.

Vamos analisar um pouco melhor este comportamento agora repetindo o passeio aleatório para um tempo t < 200, para um número de amostras de tamanho variável que tem como única condição atingir a precisão de 10% tanto para o deslocamento médio total (< x >) quanto para o deslocamente quadrático médio $(< x^2 >)$.

Fazendo isso, obtemos:

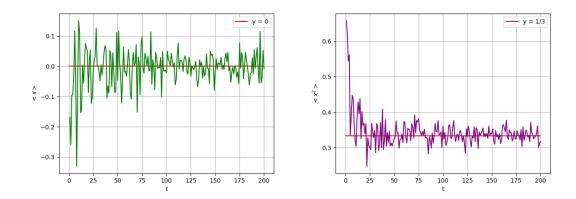


Figura 12: Evolução de $\langle x \rangle$ e $\langle x^2 \rangle$ ao longo do tempo.

Assim como se é esperado, bem como o deslocamento médio oscila sempre em torno da origem (como foi visto nos histogramas), o deslocamente quadrático médio tem um comportamento interessante que pode ser explicado fazendo:

$$\langle x^2 \rangle = \int_0^1 x^2 dx = \frac{1}{3}$$

2.3.2 B

Agora fazemos um algoritmo muito similar ao de A, porém com a diferença de ser bidimensional, tendo seu deslocamente em x e em y. Consideremos o deslocamento quadrático médio $< r^2 >$ como sendo:

$$\langle r^2 \rangle = \langle x^2 + y^2 \rangle$$
 (9)

Novamente iterando o deslocamente ao longo do tempo, para t < 200, e mantendo a condição de parada para o aumento do tamanho das amostras como o alcance da precisão desejada, obtemos:

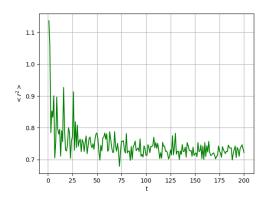


Figura 13: Evolução de < $r^2 >$ ao longo do tempo.

Vemos que, desta vez, a oscilação se dá em torno de aproximadamente $0.75.\,$