Pràctica 6: Números aleatoris 2, grup B2

Qüestió 6: 0) Nom del programa fermionsP6.f, fes una subrutina per a cada apartat.

L'apartat 1a és idèntic al 2a de la prepràctica.

- 1) Distribució Gaussiana: Box Müller Subrutina subgauss.
 - a) Genera fent servir el mètode de Box-Müller N=10000 números aleatoris distribuïts segons la distribució gaussiana de mitjana 0 i desviació estàndard 1. Genera un histograma (fent servir el màxim i minim o l'interval [-5:5]) normalitzat amb 100 caixes i fes una figura $\mathbf{histogaus.png}$ comparant-lo, incloent l'estimació binomial de l'error de cada barra, amb la distribució exacta.
 - b) Calcula, fent servir els números generats, la integral següent i escriu el seu valor i l'error estimat en un fitxer valors I3.dat,

$$I_3 = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-x^2/2} \cosh^2(x) \, dx = \frac{1}{2} (1 + e^2)$$
 (1.43)

Nota: I_3 es pot "llegir" com a valor esperat . . .

2) Integral MCarlo multidimensional: Normalització de fermions. Subrutina mcarloMD.

Un dels problemes habituals treballant amb fermions, partícules que obeeixen l'estadística de Fermi, és calcular la normalització de la seva funció d'ona. Considerem un sistema unidimensional de 5 fermions no interactuants atrapats en un potencial d'oscil·lador en el primer estat excitat del sistema ². En unitats d'oscil·lador la densitat de probabilitat de trobar als 5 fermions s'escriu,

$$\rho(x_1, x_2, x_3, x_4, x_5) = \frac{64}{45\pi^{5/2}} \frac{1}{120} e^{-(x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 + x_4^2 + x_5^2)} (x_1 + x_2 + x_3 + x_4 + x_5)^2 \prod_{i < j=1}^{5} (x_i - x_j)^2.$$
(1.44)

Fent servir els números aleatoris generats a 1) (via COMMON) calcula la següent integral 10 vegades utilitzant per a cada càlcul $N=1000\times k$ números aleatoris, $k=1,\ldots,10$. Escriu en un fitxer $\mathbf{multiMD.dat}$ el nombre de punts, N, el valor d' I_4 i l'error estimat amb el mètode de Montecarlo.

$$I_4 = \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \int_{-\infty}^{\infty} dx_2 \int_{-\infty}^{\infty} dx_3 \int_{-\infty}^{\infty} dx_4 \int_{-\infty}^{\infty} dx_5 \, \rho(x_1, x_2, x_3, x_4, x_5)$$
(1.45)

Nota 1: Explica, breument, dins del programa la teva estratègia.

Nota 2: Comença escrivint el $\prod_{i< j=1}^5 (x_i-x_j)^2$ explícitament i assegura't que el resultat és correcte abans d'intentar programar-lo de manera elegant.

Extra: Estudia la convergència d' I_4 depenent de l'estratègia d'integració.

Entregable: fermionsP6.f, histogaus.png, valorsI3.dat, multiMD.dat

²Experiments amb un nombre molt petit d'àtoms fermiònics a temperatures ultrafredes, explorant les propietats d'estats com aquest s'han fet fa dos anys al grup del Prof. S. Jochim, http://www.lithium6.de/.