Introdução a Métodos Computacionais em Física Módulo 5

Leonardo Cabral

19 de Setembro de 2019







Processos aleatórios

Objetivos

- Estudar como modelar processos aletórios numericamente.
 - (Pseudo-)geradores de números aleatórios.
 - Caminhantes aleatórios.
 - Processo de Monte Carlo.
- Estudar a conexão entre caminhantes aleatórios e a equação de difusão.

Mais informações sobre este assunto podem ser encontradas no Cap. 7 do H. Gould, J. Tobochnik e W. Christian, "An Introduction to Computer Simulations Methods: Applications to Physical systems", $3^{\rm rd}$ Ed.





Sequências de números pseudo-aleatórios

- Sequências de números aleatórios podem ser produzidas por eventos físicos
- Na prática, sequências de números pseudo-aleatórios podem ser construídas numericamente. Possuem um período, a partir do qual a sequência se repete.
- Diferença entre pseudo-sequências e sequências de números verdadeiramente aleatórios é irrelevante desde que o gerador de números pseudo-aleatório seja:
 - eficiente;
 - independa da máquina;
 - reprodutível;
 - e satisfaça testes estatísticos específicos.
- Gerador de números aleatórios mais utilizado é o linear congruential method. É rápido e consiste no mapa

$$x_{n+1} = (ax_n + c) \mod m,$$
 $a, c, m\{x_n\} \in \mathbb{Z}$

a partir de uma semente x_0 . Período máximo deste gerador é igual a m.





Sequências de números pseudo-aleatórios

Exemplos de sequência gerada pelo linear congruential method para m=32, $a=3,\ c=4$ e semente:

$$\begin{aligned} x_0 &= 0 \to & \{4, \, 16, \, 20, \, 0, \, 4, \ldots\} \\ x_0 &= 1 \to & \{7, \, 25, \, 15, \, 17, \, 23, \, 9, \, 31, \, 1, \, 7, \ldots\} \\ x_0 &= 2 \to & \{10, \, 2, \, 10, \ldots\} \\ x_0 &= 3 \to & \{13, \, 11, \, 5, \, 19, \, 29, \, 27, \, 21, \, 3, \, 13, \ldots\} \\ x_0 &= 6 \to & \{6, \, 22, \, 6, \ldots\} \\ x_0 &= 8 \to & \{28, \, 24, \, 12, \, 8, \, 28, \ldots\} \\ x_0 &= 14 \to & \{14, \, 14, \ldots\} \\ x_0 &= 18 \to & \{26, \, 18, \, 26 \ldots\} \\ x_0 &= 30 \to & \{30, \, 30, \ldots\} \end{aligned}$$



Para o mesmo m=32, outros exemplos podem ser gerados utilizando diferentes valores de a e c que possuam períodos mais longos (e.g., a=3, c=5 e a=5, c=7).



Generalized feedback shift register method

 Utiliza manipulação de bits para gerar sequência de números pseudo-aleatórios e operador exclusive or (xor) ou
 ⊕. Em C é denotado por ^,

$$x_n = x_{n-p} \oplus x_{n-q}, \qquad x_n, \, p, \, q \in \mathbb{Z},$$

e p>q. Por exemplo, sejam os primeiros 5 números da sequência $\{7,\,25,\,15,\,17,\,23\}.$ Se $p=5,\,q=3,$ então

$$\begin{array}{c} x_6 = x_1 \oplus x_3 = 7 \oplus 15 = \left(\begin{array}{c} \oplus & 00000111 \\ \oplus & 00001111 \\ = & 00001000 \end{array} \right) = 8; \\ x_7 = x_2 \oplus x_4 = 25 \oplus 17 = \left(\begin{array}{c} \oplus & 00011001 \\ \oplus & 00010001 \\ = & 000010001 \end{array} \right) = 8 \\ x_8 = x_3 \oplus x_5 = 15 \oplus 23 = \left(\begin{array}{c} \oplus & 00001111 \\ \oplus & 00001111 \\ = & 00011000 \end{array} \right) = 24 \\ x_9 = x_4 \oplus x_6 = 17 \oplus 8 = \left(\begin{array}{c} \oplus & 00010001 \\ \oplus & 00001000 \\ = & 00011001 \end{array} \right) = 25 \\ x_{10} = x_5 \oplus x_7 = 23 \oplus 8 = \left(\begin{array}{c} \oplus & 00001001 \\ \oplus & 000011011 \\ = & 00011111 \end{array} \right) = 31 \\ x_{11} = x_6 \oplus x_8 = 8 \oplus 24 = \left(\begin{array}{c} \oplus & 00001000 \\ \oplus & 00011000 \\ = & 00011000 \end{array} \right) = 16 \end{array}$$







Gerador rand()

```
#include < stdlib.h>
/* This algorithm is mentioned in the ISO C standard, here extended
   for 32 bits. */
int
rand r (unsigned int *seed)
  unsigned int next = *seed;
  int result;
  next *= 1103515245;
  next += 12345;
  result = (unsigned int) (next / 65536) % 2048;
  next *= 1103515245;
  next += 12345;
  result <<=10;
  result ^= (unsigned int) (next / 65536) % 1024;
  next *= 1103515245;
  next += 12345;
  result <<=10;
  result ^= (unsigned int) (next / 65536) % 1024;
  *seed = next;
  return result:
```





Na prática, o que fazer?

- Há muito mais do que rand() do C/C++!
- C++11 possui implementações de diversos algoritmos para gerar sequências de números aleatórios, inclusive com distribuições não-uniformes. Ver:
 - http://en.cppreference.com/w/cpp/numeric/random
- Se seu programa requer números aleatórios somente para produzir resultados diferentes, sem ser necessário que o número produzido seja de uma boa sequência de números aleatórios, rand() vai satisfazer suas necessidades.
- Por outro lado, se for necessária a geração de números aleatórios para produzir sequências que simulem flutuações térmicas, por exemplo, então é preciso utilizar um bom gerador de números aleatórios. Deve-se utilizar gerador melhor do que rand().





Testes

- Período
- Uniformidade
- ▶ Teste χ^2
- Preenchimento de sítios
- ► Teste do 'estacionamento'
- Correlações escondidas
- Correlações de curto alcance
- Caminhante aleatório







Caminhantes aleatórios 1D

Probabilidades: $p(\rightarrow)$ e $q=1-p(\leftarrow)$, passo $s_i=\pm a$.

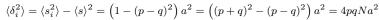
- Após N passos, $x_N = \sum_{i=1}^N s_i$ da origem.
- Média de x_N após N passos:

$$\langle x_N \rangle = \sum_{i=1}^{N} \langle s_i \rangle = N \langle s \rangle = N [p \, a + q \, (-a)] = (p-q) N a$$

Desvio quadrático médio após N passos:

$$\Delta x_N^2 = \langle (x_N - \langle x_N \rangle)^2 \rangle = \left\langle \sum_{i=1}^N \delta_i \sum_{j=1}^N \delta_j \right\rangle = \sum_{i=1}^N \langle \delta_i^2 \rangle + \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \langle \delta_i \delta_j \rangle = 4pqNa^2$$

$$\langle \delta_i \delta_j \rangle = \langle \delta_i \rangle \langle \delta_j \rangle = \langle s_i - \langle s \rangle \rangle \langle s_j - \langle s \rangle \rangle = [N(\langle s \rangle - \langle s \rangle)]^2 = 0$$
 passos independentes









Caminhante aleatório e Monte Carlo

Procedimento para gerar uma caminhada aleatória

- Para gerar uma dada caminhada aleatória numericamente, pode-se utilizar um processo de Monte-Carlo.
- 2. Seja p a probabilidade do caminhante ir para a direita. Em cada passo da caminhada, gere um número aleatório, r. Se

$$p < r$$
 for verdadeiro, vá para a direita $p < r$ for falso, vá para a esquerda

Em suma, este algoritmo é um processo de Monte-Carlo aplicado à caminhada aleatória.







Probabilidades: $p(\rightarrow)$ e $q=1-p(\leftarrow)$, passo $s_i=\pm a$.

1. Inicie com o caminhante na origem. Em cada passo, um gerador de número aleatório produz um número r tal que:

Se
$$p < r$$
, vá para \rightarrow ; Se $p \ge r$, vá para \leftarrow

- 2. Escreva um programa que implemente o caminhante aleatório em 1D. Para cada valor de p realize M tentativas (ou implemente M caminhantes independentes). Durante a execução do programa calcule $\langle x \rangle$ e $\langle x^2 \rangle$ para números de passos N diferentes. Utilize $M=10,\ M=100$ e M=10000. O que acontece com seus resultados quando M aumenta?
- 3. A distribuição de probabilidade P(x) de x_n estar no valor x no passo n pode ser obtida a partir do histograma dos valores para $x_i,\ i=1,\,2,\,\ldots,\,N$, para M>1000 caminhantes diferentes. Compare seus resultados com

$$P_N(x) = \frac{C}{\sqrt{2\pi\Delta x^2}} \exp\left(-\frac{(x - \langle x \rangle)^2}{2\Delta x^2}\right).$$

Qual é o valor de ${\cal C}$ para o qual se obtem bom ajuste?





Atividade: Caminhantes aleatórios 2D

Caminhante aleatório em uma rede quadrada:

- 4. Considere uma coleção de $M>1000\,$ caminhantes aleatórios independentes inicialmente na origem em 2D.
- 5. Em cada passo de tempo cada caminhante pode ir para qualquer uma das quatro direções possíveis com igual probabilidade (p=1/4).
- Utilize a biblioteca OpenGL para visualizar a posição de cada caminhante em diferentes passos de tempo. Realize no mínimo 500 passos de tempo. Como a figura obtida evolui com o tempo.
- 7. Calcule $\langle x \rangle$, $\langle x^2 \rangle$, $\langle y \rangle$, $\langle y^2 \rangle$ e o deslocamento médio quadrático

$$R^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 + \langle y^2 \rangle - \langle y \rangle^2,$$

(as médias devem ser calculadas sobre os ${\cal M}$ caminhantes) como função do número de passos, ${\cal N}.$

8. Estime R^2 para $N=8,\,16,\,32,\,64,\,\ldots$,, calculando as médias para um número grande de caminhantes para cada valor de N. Salve os valores obtidos e, em gráfico log-log, obtenha o valor de ν da dependência,

$$R \sim N^{\nu}, \qquad (N \gg 1)$$

Se você obtiver $\nu=1/2$ estime a magnitude do coeficiente de auto-difusão D a partir de $R^2=4DN$.





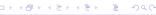
Atividade: Caminhantes aleatórios 2D

Caminhante aleatório em uma rede triangular:

- 8. Refaça os itens para um caminhante em uma rede quadrada para o caso de um caminhante aleatório percorrendo uma rede triangular, onde as probabilidades de ir nas direções \hat{x} , $-\hat{x}$, $\cos\pi/2\hat{x}+\sin\pi/2\hat{y}$, $-\cos\pi/2\hat{x}+\sin\pi/2\hat{y}$, $-\cos\pi/2\hat{x}-\sin\pi/2\hat{y}$ e $\cos\pi/2\hat{x}-\sin\pi/2\hat{y}$ são todas iguais a 1/6.
- Tente implementar o caminhante aleatório em 2D no contínuo (Problema 7.13 do Tobochnik). Neste caso, considere um passo de tamanho fixo, mas cuja orientação é aleatória. Refaça os itens anteriores.







Caminhantes aleatórios e equação de difusão

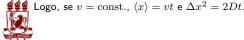
Equação de difusão:

$$\frac{\partial P}{\partial t} = D \frac{\partial^2 P}{\partial x^2} - v \frac{\partial P}{\partial x}$$

onde $P(x,\,t)$ é a distribuição de probabilidade, D o coeficiente de difusão e v, velocidade. Tem-se,

$$\begin{split} & \int_{-\infty}^{\infty} x \frac{\partial P}{\partial t} dx = D \int_{-\infty}^{\infty} x \frac{\partial^2 P}{\partial x^2} dx - v \int_{-\infty}^{\infty} x \frac{\partial P}{\partial x} dx \quad \rightarrow \quad \frac{d\langle x \rangle}{dt} = v \\ & \int_{-\infty}^{\infty} x^2 \frac{\partial P}{\partial t} dx = D \int_{-\infty}^{\infty} x^2 \frac{\partial^2 P}{\partial x^2} dx - v \int_{-\infty}^{\infty} x^2 \frac{\partial P}{\partial x} dx \quad \rightarrow \quad \frac{d\langle x^2 \rangle}{dt} = 2 \left(D + v \langle x \rangle \right) \end{split}$$

onde $\lim_{|x| \to \infty} x^n \frac{\partial^m}{\partial x^m} P(x,\,t) \to 0$, para $n,\,m=0,\,1,\,2,\,\ldots$







Caminhantes aleatórios e equação de difusão

Caminhante aleatório: equação mestre

$$P_i^{(n)} = pP_{i-1}^{(n-1)} + qP_{i+1}^{(n-1)}$$

onde $P_i^{(n)}$ é a probabilidade do caminhante estar no sítio i depois de n passos. Se cada passo é realizado em um intervalo δt e os sítios estão separados por δx ,

$$\begin{split} P_i^{\left(n\right)} &= \int_{x-\delta x/2}^{x-\delta x/2} d\eta P(\eta,t) = \delta x P(x,\,t) \\ &P(x,\,t) = p P(x-\delta x,\,t-\delta t) + q P(x+\delta x,\,t-\delta t) \\ &\frac{P(x,\,t) - P(x,\,t-\delta t)}{\delta t} = \frac{P(x-\delta x,\,t-\delta t) + P(x+\delta x,\,t-\delta t) - 2 P(x,\,t-\delta t)}{2\delta t} \\ &+ \frac{\left(p-\frac{1}{2}\right) P(x-\delta x,\,t-\delta t) + \left(q-\frac{1}{2}\right) P(x+\delta x,\,t-\delta t)}{\delta t} \end{split}$$

Mas



$$P(x\pm\delta x,\;t)=P(x,\;t)\pm\delta x\frac{\partial}{\partial x}P(x,\;t)+\frac{1}{2}\delta x^2\,\frac{\partial^2}{\partial x^2}P(x,\;t)+\mathcal{O}(\delta x^3)$$





Caminhantes aleatórios e equação de difusão

Caminhante aleatório (cont)

$$\begin{split} \frac{P(x-\delta x,\,t-\delta t)+P(x+\delta x,\,t-\delta t)-2P(x,\,t-\delta t)}{2\delta t} &= \frac{\delta x^2}{2\delta t}\,\frac{\partial^2}{\partial x^2}P(x,\,t-\delta t)+\mathcal{O}(\delta x^3) \\ \frac{\left(p-\frac{1}{2}\right)P(x-\delta x,\,t-\delta t)+\left(q-\frac{1}{2}\right)P(x+\delta x,\,t-\delta t)}{\delta t} &= \frac{(p+q-1)}{\delta t}\left(P(x,\,t-\delta t)+\frac{1}{2}\delta x^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}P(x,\,t-\delta t)\right) - \\ &-\frac{(p-q)\,\delta x}{\delta t}\,\frac{\partial}{\partial x}P(x,\,t-\delta t)+\mathcal{O}(\delta x^3) &= -\frac{(p-q)\,\delta x}{\delta t}\,\frac{\partial}{\partial x}P(x,\,t-\delta t)+\mathcal{O}(\delta x^3) \end{split}$$

Portanto.

$$\frac{P(x,\;t)-P(x,\;t-\delta t)}{\delta t}=\frac{\delta x^2}{2\delta t}\frac{\partial^2}{\partial x^2}P(x,\;t-\delta t)-\frac{(p-q)\,\delta x}{\delta t}\frac{\partial}{\partial x}P(x,\;t-\delta t)+\mathcal{O}(\delta x^3)$$

Para $\delta x \rightarrow 0$ e $\delta t \rightarrow 0$.

