



Introdução à Física Computacional 1S/2018

Projeto 6 — Sistemas aleatórios

Início: 11 de Junho de 2018

Prof.: Eric C. Andrade

Data da entrega do relatório: 02 de Julho de 2018

Descrição:

Por vezes, pensamos no computador como o epítome de um sistema determinístico. Nesse projeto, contudo, investigaremos sistemas aleatórios em um computador. Para reconciliar esses dois extremos, temos que discutir geradores de números aleatórios. Sequências de números aleatórios verdadeiros, isso é que não apresentam correlação alguma entre si, podem ser encontradas na internet, por exemplo nesse [link](#). Contudo, a utilização de tais listas é pouco eficiente para as aplicações cotidianas, pois (i) o número de números aleatórios gerados é limitado e (ii) é impossível gerar a mesma sequência independentemente para conferir/reproduzir os resultados. Por isso, foram desenvolvidos geradores de números *pseudoaleatórios*. Nesse caso, geramos uma sequência de números aleatórios, mas tal sequência possui um período a partir da qual ela começa a se repetir. Na prática, buscamos então aumentar esse período ao máximo. Um dos geradores mais famosos disponíveis é o chamado [Mersenne Twister](#), que possui um período de $2^{19937} - 1 \approx 10^{6001}$. Uma ótima, e muito completa, referência sobre o assunto é o capítulo 7 do livro Numerical Recipes.

Sugestão de execução:

Exercício 1: Aula 14 . Exercício 2: Aulas 14 e 15. Exercício 3: Aulas 15 e 16

1) Números aleatórios, integrais e amostragem

Para gerarmos números aleatórios, utilizaremos a seguinte sub-rotina intrínseca do Fortran

`call Random_Number(r),`

que gera um número aleatório real r contido no intervalo $0 \leq r < 1$.

(a) Para testar seu código, gere sequências de sequências de números aleatórios r_n de tamanho N_{seq} e calcule suas médias e desvios padrões como função de N_{seq} utilizando os códigos do projeto 1. Apresente seus resultados graficamente. Compare os resultados obtidos com os valores esperados $\langle r \rangle = 0.5$ e $\sigma = 1/2\sqrt{3} = 0.288675$ (vejam, por exemplo, [essa discussão](#)).

(b) Uma vez que aprendemos a gerar números aleatórios em um computador podemos utilizá-los para uma série de tarefas. A primeira delas será estimar o valor de π e o seu erro. Para tal, calcularemos a área de um círculo unitário por meio do seguinte algoritmo. Gere um par de números aleatórios (x_i, y_i) entre -1 e 1 e verifique se $x_i^2 + y_i^2 \leq 1$, isso é se o ponto cai dentro do círculo. Em caso de resposta positiva, faça $N_{dentro} = N_{dentro} + 1$. O valor de π é então estimado como $\pi = 4 \times N_{dentro}/N_{total}$, onde N_{total} é o número total de pares gerados. Estime o valor N_{total} para obtermos o valor de π com quatro casas decimais de precisão. Dê uma interpretação geométrica para esse algoritmo e discuta seus resultados.

(c) O item anterior mostrou que podemos estimar áreas por meio de números aleatórios. Essa abordagem cai dentro da classe de problemas conhecidos como integração pelo [método de Monte Carlo](#). Essa é uma abordagem complementar àquela discutida no Projeto 2 para o cálculo numérico de integrais. Por simplicidade, consideraremos apenas integrais unidimensionais, mas o método é trivialmente generalizado para mais variáveis, sendo essa uma de suas grandes virtudes. O algoritmo padrão para a integração por meio do método de Monte Carlo é baseado no [teorema do valor médio](#) para integrais definidas

$$\int_a^b f(x) dx = (b - a) \langle f \rangle, \quad (1)$$

onde $\langle f \rangle$ é o valor médio da função $f(x)$ dentro do intervalo $[a, b]$. A Eq. (1) sugere então que nos foquemos no cálculo da média de $f(x)$

$$\langle f \rangle \simeq \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i), \quad (2)$$

onde agora geramos N números aleatórios $x_i \in [a, b]$ e esperamos que esse valor convirja para o valor esperado quando $N \rightarrow \infty$. O algoritmo para o cálculo de integrais é então dado por

$$\int_a^b f(x) dx = \frac{b-a}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i). \quad (3)$$

Avalie agora as seguintes integrais por meio da Eq. (3): (i) $\int_0^1 4/(x^2 + 1) dx$ e (ii) $\int_1^{10} (1/x) dx$. Apresente seus resultados com três casas decimais de precisão e indique o valor de N necessário para alcançar tal precisão. Discuta seus resultados.

2) Decaimento radioativo

É um fato muito bem estabelecido que muitos núcleos são instáveis. Um exemplo clássico é o isótopo ^{235}U , que possui uma probabilidade pequena, mas ainda finita, de decair em dois núcleos de aproximadamente metade de seu tamanho original, juntamente com uma coleção de elétrons, prótons, nêutrons e partículas α . Esse é um processo aleatório no seguinte sentido: se lhes for dado um único núcleo ^{235}U , vocês não são capazes de dizer com certeza quando o decaimento ocorrerá. O melhor que pode ser feito é estimar a probabilidade para o decaimento espontâneo ocorra. Essa probabilidade de que um certo número de núcleos decaia em um período infinitesimal de tempo é

$$dP = \lambda dt, \quad (4)$$

onde a constante de decaimento λ está relacionada com a meia vida τ como $\lambda = 1/\tau$. Tal probabilidade infinitesimal também pode ser relacionada com o número de núcleos presentes em um tempo t : $dP = -d\ln(N(t))/dt$. Logo, quanto mais núcleos presentes, maior a probabilidade de decaimento.

Consideraremos agora um ensemble (amostra) contendo inicialmente (ou seja, em $t = 0$) N_0 núcleos radioativos e simularemos seu decaimento como um processo estocástico por meio de números aleatórios.

(a) Escreva um programa que simule o processo decaimento de N_0 núcleos radioativos de meia vida τ em um intervalo de tempo $t_{\max} \gg \tau$. Defina um pequeno intervalo de tempo δt com $\delta t \ll \tau$ e use o gerador de números aleatórios para decidir se um dado núcleo decai ou não para um dado δt de acordo com a probabilidade em (4). Discuta cuidadosamente como você implementará sua dinâmica. Você deverá escrever um código que seja capaz de repetir a simulação R vezes, considerando em cada uma das repetições uma sequência diferentes de números aleatórios.

(b) Faça a simulação para $N_0 = 1000$ e $R = 1000$. Escolha cuidadosamente os valores de t_{\max} e δt e justifique suas escolhas. Faça um gráfico do número de núcleos restantes $N(t)$ como função do tempo t para $R_i = 1, \dots, 10$ (as dez primeiras repetições) juntamente com seu valor médio $\langle N(t) \rangle$. Estime as barras de erro desse valor médio $\langle N(t) \rangle$ por meio do desvio padrão $\sigma(t)$. Discuta seus resultados.

(c) Podemos interpretar nosso modelo para o decaimento radioativo em termo de uma distribuição de exponencial

$$p(x) = \lambda e^{-\lambda x}, \quad x \geq 0 \quad (5)$$

que descreve processos nos quais eventos ocorrem continuamente, de forma independente e a uma taxa constante. A constante λ é o inverso da média dessa distribuição (mostre isso!). Vemos, portanto, que todas as hipóteses são satisfeitas em nosso modelo no qual assumimos núcleos instáveis independentes (sempre decaem, mas sem efeito cascata) e uma meia vida τ constante no tempo. A pergunta que gostaríamos de fazer agora é a seguinte: aprendemos a gerar números aleatórios de acordo com uma distribuição uniforme no computador. A partir dessa distribuição, como podemos gerar números aleatórios seguindo uma distribuição não uniforme? Essa é uma pergunta para a qual há uma [resposta geral](#). Contudo, vamos apenas ilustrar um procedimento particular para a distribuição exponencial em (5). Gere números aleatórios de acordo com a seguinte prescrição

$$x = -\frac{1}{\lambda} \ln(1 - r), \quad (6)$$

onde $0 < r < 1$ de modo uniforme. Mostre que o *histograma* dos números gerados obedece então à Eq. (5). Dica: Não se preocupe muito com uma descrição quantitativa da cauda da distribuição, $\lambda x \gg 1$, uma vez que essa é uma região na qual os eventos são exponencialmente suprimidos. Para os(as) mais curiosos(curiosas), há um procedimento similar para gerar um distribuição normal, ou Gaussiana, conhecido como [transformação de Box-Muller](#).

3) Passeio aleatório

Vamos considerar agora o problema do passeio aleatório, que pode ser motivado, por exemplo, pelo [movimento Browniano](#). Nesse problema, temos uma partícula (digamos pólen) suspensa em um fluido (digamos água). Queremos descrever então seu movimento aleatório resultante da colisão do pólen com as partículas de água que se movem rapidamente devido à sua agitação térmica.

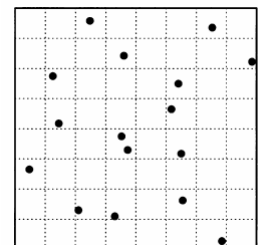
(a) Vamos começar com o passeio aleatório em uma dimensão. Considere uma partícula que se move ao longo de uma linha por meio de passos de comprimento unitário. Em um dado instante de tempo t , essa partícula está localizada no ponto x possui a mesma probabilidade, $1/2$, de se mover para direita, $x + 1$, ou para esquerda $x - 1$, no instante de tempo $t + 1$. Calcule $\langle x \rangle$, deslocamento médio, e $\langle x^2 \rangle$, deslocamento quadrático médio, como função de t assumindo que a partícula inicie o movimento a partir da origem. Apresente esses resultados em forma gráfica discutindo-os cuidadosamente. Essas médias são calculadas considerando-se um número N de diferentes movimentos, ou seja rodamos a simulação para N diferentes sequências de números aleatórios. Utilize $t \leq 200$ e verifique o valor de N a partir do qual essas médias permanecem estáveis.

(b) Vamos explorar agora o passeio aleatório em duas dimensões. Nesse caso, podemos ter $(x, y) \rightarrow (x \pm 1, y \pm 1)$ com igual probabilidade, ou seja $1/4$. Assumiremos novamente que a partícula sempre parta da origem bem como consideraremos passos unitários de tempo. Calcule o deslocamento quadrático médio $\langle \mathbf{r}^2 \rangle = \langle x^2 + y^2 \rangle$ com função do tempo para $t \leq 200$ considerando N diferentes movimentos. Verifique o N a partir do qual a curva $\langle \mathbf{r}^2 \rangle \times t$ não muda mais. Discuta seus resultados. Dica: Para esse problema pode valer a pena implementar a construção [elseif](#).

(c) Considere novamente um passeio aleatório em duas dimensões, só que agora na presença de paredes rígidas. Ou seja, se tivermos $|x| > x_{\max}$ e $|y| > y_{\max}$ nossa partícula é refletida para dentro do recipiente novamente. Em termos de código temos, por exemplo, [if](#) ($x < -x_{\max}$) $x = x + 1$ e assim por diante. Implementamos assim um passeio aleatório em um recipiente fechado. (i) Construa a curva $\langle \mathbf{r}^2 \rangle \times t$ para $t \leq 10^4$ e $N = 10^4$ para diferentes valores de $x_{\max} = y_{\max}$ e discuta seus resultados. (ii) Considere agora $N = 10^3$ partículas de ar paradas, em $t = 0$, na origem de uma caixa quadrada de comprimento 200, ou seja $x_{\max} = y_{\max} = 100$. Por causa das paredes rígidas, temos uma densidade fixa de partículas com o passar do tempo. Tire fotos da posição dessas partículas para alguns instantes de tempo no intervalo $10 \leq t \leq 10^6$. Discuta seus resultados. (iii) Como você pôde observar na simulação anterior, após um certo tempo as partículas do nosso ar passam a ocupar todo o recipiente de maneira aparentemente uniforme e em nenhum momento da simulação há indícios de que as partículas voltariam a se concentrar todas em um determinado ponto. O curioso nesse resultado é que não há nada na nossa dinâmica microscópica, o salto para os vizinhos com igual probabilidade, que impeça as partículas de se concentrarem novamente em um único ponto. Essas são apenas configurações improváveis desse coletivo de partículas (o fato de os passos serem independentes leva o sistema a explorar todas as partes da recipiente com igual probabilidade). Podemos quantificar essa observação por meio da entropia de Gibbs, por unidade da contante de Boltzmann k_B ,

$$S = - \sum_i p_i \ln p_i, \quad (7)$$

onde p_i é a probabilidade de encontrarmos o sistema no estado i . A entropia mede o grau de desordem no sistema, pois ela é zero se apenas um estado é ocupado e máxima se todos os estados são ocupados igualitariamente (verifique isso explicitamente para o caso de dois estados!). Para aplicarmos essa definição ao nosso problema, introduzimos divisões arbitrárias em nosso recipiente, digamos em N_i células quadradas iguais de tamanho $\ell \times \ell$, sendo que p_i é agora a probabilidade de encontrarmos uma partícula na célula i , veja a figura ao lado. Calcule a entropia para $N = 10^3$ partículas, $x_{\max} = y_{\max} = 100$, $t \leq 10^5$ e diferentes número de partições N_i do sistema. Discuta seus resultados e os correlacione com a noção de seta do tempo.



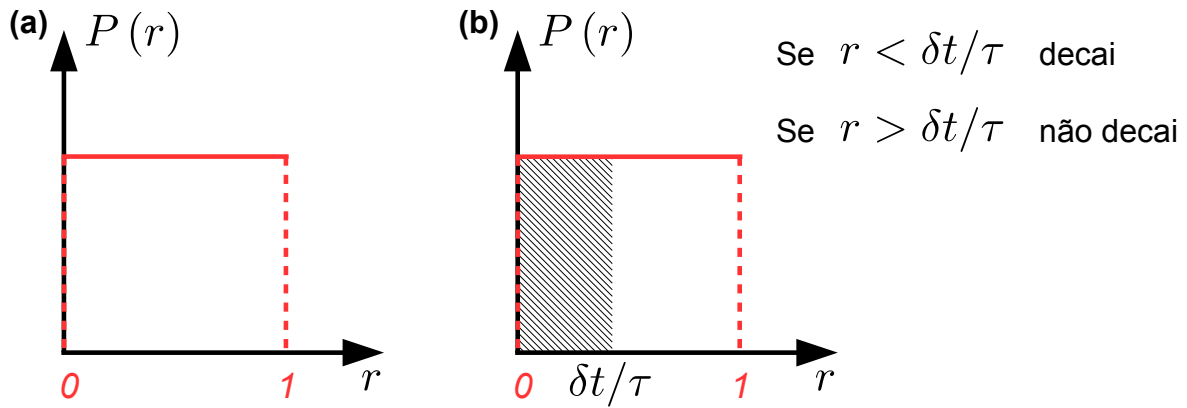


Figura 1: (a) Distribuição uniforme com $0 < r < 1$. (b) Dada uma probabilidade de decaimento $\delta t / \tau$, temos que se $r < \delta t / \tau$, área hachurada, o átomo decai.

Breve discussão sobre a execução dos problemas

Considere uma distribuição uniforme de probabilidade como na Fig. 1(a). O valor esperado de r , $\langle r \rangle$ é dado por

$$\langle r \rangle = \int_0^1 r P(r) dr = \int_0^1 r dr = \frac{1}{2}. \quad (8)$$

Já o valor esperado de r^2 é

$$\langle r^2 \rangle = \int_0^1 r^2 dr = \frac{1}{3}, \quad (9)$$

donde vem que

$$\sigma = \sqrt{\langle r^2 \rangle - \langle r \rangle^2} = \frac{1}{\sqrt{12}} = \frac{1}{2\sqrt{3}}. \quad (10)$$

Ao utilizarmos um gerador de números aleatórios, geramos uma distribuição uniforme de números reais entre 0 e 1, ou seja todos os números entre 0 e 1 têm a mesma probabilidade de serem escolhidos em algum momento. Essa é a distribuição mostrada na Fig. 1(a), com seus primeiros momentos calculados acima.

Para resolver o segundo exercício, proceda da seguinte forma

- Particione o intervalo de tempo entre 0 e t_{\max} em pequenos intervalos δt ;
- Escolha $\tau = 1$ por simplicidade. Isso significa que o tempo é agora medido em unidades de τ ;
- Defina a probabilidade de decaimento $p = \delta t / \tau$, de acordo com a Eq. (4). Note que essa é uma probabilidade constante, ou seja ela independe tanto do tempo t quanto do número de átomos restantes;
- Suponha agora que você comece com 1000 átomos radioativos e escolha $\delta t = 10^{-2}$. Você tem então que $p = 10^{-2}$ e $N_0 = N(t=0) = 1000$;
- No primeiro passo, você deve então gerar 1000 números aleatórios, um para cada átomo restante. Conte quantos desses números são menores que $p = 10^{-2}$. Esse será o número de átomos que decaem nesse intervalo de tempo δt , veja a Fig. 1(b). Suponha, por exemplo, que você gere 11 números menores que p . Portanto, no tempo $t = 0 + \delta t = 0.01$ há 989 átomos restantes em sua simulação: $N(t=0.01) = 989$;
- Gere agora $N(0 + \delta t)$ números aleatórios e novamente conte quantos são menores que p . Esses são, novamente, o número de átomos que decaem;
- Continue esse procedimento até t_{\max} e gere uma curva de $N(t) \times t$.

Conexão entre passeio aleatório e difusão em uma dimensão.