Post P4, pre P5

Bruno Juliá-Díaz (brunojulia@ub.edu)

Dpto. Física Quàntica i Astrofísica

Facultat de Física

Universitat de Barcelona

Curso 2016/2017

Sobre la práctica 4

> La mayoría de los programas están bien trabajados y estructurados.

> La práctica estaba pensada para poder realizarse sin tocar para nada las subroutinas trabajadas en la prepráctica

+ derifun
+ bisecció
+ newtonraphson

> Si las habéis tenido que “adaptar”, algo ha fallado

Sobre la práctica 4

- Problemas con el uso de external
- Problemas con subroutina derifun
- Problemas function/vector
- Problemas por no compilar durante demasiado tiempo

- La mayoria de los códigos no tienen elementos de cross-check
  - El código tiene que ir escribiendo datos que nos permitan después saber donde falla

```
IMPLICIT NONE
double precision P, Pol, A, B, eps, t, dP
double precision xarrel, x0, fu(90), x(90), dfu(90)
integer niter, ierr, miter, i, ndat
Cridem les funcions
external P, Pol, dP

Definim els puntes del vector de dimencio 5
v(1)=0.34d0
v(2)=0.5d0
v(3)=1.d0
v(4)=1.1d0
v(5)=1.4d0

-----------------------------------------------------------
Apartat 1)
open (9,FILE="P4-2016-b1-res1.dat")

ndat=90
x(1)=1.d0/3.d0+0.2d0
fu(1)=P(x(1))
Bucle que ens calcula la posicio de cada x
do i=2,ndat,1
        x(i)=x(i-1)+0.045d0
        fu(i)=P(x(i))

enddo
Cridem la subrutina derivada
call derifun(ndat,fu,x,dfu)
do i=1,ndat,1
        write(9,90) x(i),  dfu(i), fu(i)

enddo

close(9)



-----------------------------------------------------------
Apartat 2)

open (10,FILE="P4-2016-b1-res2.dat")

ndat=90
x(1)=1.d0/3.d0+0.2d0
fu(1)=P(x(1))
Bucle que ens calcula la posicio de cada x
do i=2,ndat,1
```

Escribe en pantalla
"comienzo el apartado 1)"

Escribe en pantalla
"comienzo el apartado 2)"

Sobre la práctica 4

> Problemas con el uso del **common** para pasar el valor de la temperatura

```
      Creem una funció amb l'equació de Van der Waals
      double precision function Pol(v)
      IMPLICIT NONE
      double precision v, t

      t=0.91d0

      Pol=4.d0*T*V**3.d0-9*V**2.d0+6.d0*v-1.d0

      end
```

```
      function pol(v)

           real*8 pol,v,t
           common t
           pol=4.d0*t*(v**3.d0)-9.d0*(v**2.d0)+6.d0*v-
           return

           end
```

Al **common block** es mejor darle un nombre:

Pero basta con un solo nombre:

```
      function dfun(x)

      implicit none
      double precision x,dfun,t
      common/variables/t

      dfun=12*t*x**2-18*x+6

      return

      end
```

```
      double precision Tpol,Twaals
      common/TEMPWAALS/Twaals
      common/TEMPERATURA/Tpol
      integer ii,j
```

Sobre la práctica 4

— Nom del programa **P4-2016-c2.f**.
Precisió de reals: **double precision**. Utilitza les subroutines desenvolupades a la prepràctica. Tots els resultats a: **P4-2016-c2.res.dat**, afegeix una línia descriptiva separant els diferents resultats.

L'equació de Van der Waals per descriure la transició líquid gas es pot escriure com (en unitats reduïdes T, P i V) ,

$$P = \frac{8T}{3V-1} - \frac{3}{V^2},$$

on els valors físics del volum reduït son $V > 1/3$ (valors $V \leq 1/3 \Rightarrow$ pressions negatives).

1) La estabilitat de les isotermes pot analitzar-se a partir de la primera derivada de $P(V)$ de la equació d'estat.

Genera una taula amb 90 punts equiespaiats de V, $V \in [1/3 + 0.15, 4]$, de la isoterma, (V, P) per a $T = 0.93$. Calcula numèricament la seva derivada $P'(V)$ amb la subroutina **derifun(ndat,fu,x,dfu)** de la prepractica i escriu-la en el fitxer de resultats: $V, P'(V), P(V)$. Fes una gràfica **P4-2016-c2-fig1.png** amb la isoterma anterior que contingui només els punts (V, P) que siguin estables, $P'(V) < 0$.

pista: plot "fichero.dat" u 1:($2<0?$3: 1/0) w l t"P(V)"

Las cosas fáciles hay que tenerlas claras

~ 1 hora

Sobre la práctica 4

```
DERIVADES
      subroutine derifun(ndat,fu,x,dfu)
      implicit none
      double precision fu200,x200,dfu200,fu10,x10,dfu10,pv
      dimension x(ndat)
      dimension fu(ndat)
      dimension dfu(ndat)

      COMMON/VECTORS/fu10,x10,dfu10
      COMMON/VECTORS2/fu200,x200,dfu200

      double precision h, fu, dfu, x
      integer i, ndat


     h=((1.d0/3.d0)+0.2d0-4.d0)/(89.d0)


      do i=1,ndat

        if (i.eq.1) then
          dfu(i)=((fu(i+1)-fu(i))/h)
        else if (i.eq.ndat) then
          dfu(i)=((fu(i)-fu(i-1))/h)
        else
          dfu(i)=((fu(i+1)-fu(i-1))/(2.d0*h))
        endif
      enddo
      end
```

No perdais generalidad

h=x(2)-x(1)

No hacia falta modificar nada

Ni añadir vectores "específicos" para cada problema.

Sobre la práctica 4

```
      implicit none
      real*8  T1, P, V, Pol, T2, Pol2, Vol2, A, B, eps, xarrel, x0, dpol
      integer*8 i, ndat, niter, ierr, l
      double precision Vol(90), Pr(90), dPr(90), vo(5)
      external pol, dPol
      COMMON/TEMP/ T2

      open(14, file='p4_2016_c2_res.dat')
      open(15, file='p4_2016_c2_res1.dat')

      write(14,*) "apartat 1: equacio de Van der Waals. V, P'(V), P(V)"
      T1 = 0.93d0
      do i = 0, 89
       V = 0.03907d0*i + (1.d0/3.d0 + 0.15d0)
       Vol(i +1 ) = V
       Pr(i+1) = P(V,T1)
      enddo
      ndat = 90
      call derifun(ndat,Pr,Vol,dPr)
      do i = 1, 90
       write(14,400) Vol(i), dPr(i), Pr(i)
       write(15,*) Vol(i), dPr(i), Pr(i)
      enddo
 400   format(3(f12.8, 2x))
      close(15)
```

No perdais generalidad

h=x(2)-x(1)

Escribid los números de forma que sea facil comprobar sin son correctos….

```
C Genero les dades per tal de representar el polinomi a l'interval (0.2+1/3)<V<2
      do ii=54,200,5
         vv=ii/1.d2
         ff=POL(vv)
         write(14,100)vv,ff
100      format(f4.2,5x,e20.12)
      enddo
```

Sobre la práctica 4

Recordad que no se puede usar el IGUAL para buscar condiciones con numeros reales. La precisión hara que casi nunca se cumplan las condiciones o dependerá de máquina

```
IF(XIN.EQ.2.54D0) THEN
  WRITE(3,25) NITER, XARREL
ELSE IF(XIN.EQ.2.55D0) THEN
  WRITE(4,25) NITER, XARREL
ELSE IF (XIN.EQ.2.7D0) THEN
  WRITE(5,25) NITER, XARREL
ENDIF
```

Práctica 5

Pre-Pràctica 5: Números aleatoris 1

Objectius: generació de nombres aleatoris, histogramas, Box-Müller

— Nom del programa principal **P5-2016.f**.
Precisió de reals: **double precision**.
Tots les sortides de dades a **P5-2016-res.dat**.

La pràctica consistirà a estudiar problemes físics fent servir números aleatoris.

- Movimiento Browniano. Caminante aleatório

Práctica 5, apartado 1

1) **Estimació de la densitat de probabilitat: histograma**

Escriu una subrutina **histograma(ndat,data,ncaixes,histo,errhisto)** que generi un histograma normalitzat de **ncaixes** fent servir les **ndat** dades de **data(ndat)**. La sortida és: **histo(ncaixes)** amb l'error de cada barra a **errhisto(ncaixes)**.

Como estimar la función de distribución

> Un procedimiento para estimar su distribución de probabilidad es la construcción de un histograma. Un histograma es una función escalonada (barras) construida como sigue:

+ Determinanos los valores máximo y mínimo, Xm y XM
+ Generamos una partición del intervalo [Xm,XM] de NB subintervalos

$$z_1=Xm < z_2 < z_3 < \ldots < z_{NB+1}=XM$$

+ La anchura del subintervalo k-ésimo es $w_k=z_{k+1}-z_k$
+ Contamos el número de valores x_j dentro de cada subintervalo, N_k
+ Un estimador de la distribución viene dado por la función:

$$p_N(x)=p_k\ W(x;z_k,z_k+1) \qquad \text{donde } p_k=N_k/(N\ w_k)$$

Y W(x;a,b) es 1 si a<x<=b y 0 en cualquier otro caso

Incertidumbre de p_k

- La incertidumbre estadística del valor de cada columna, pk se puede estimar considerando que que la variable Nk es sigue una distribución Binomial (cada número o esta en el intervalo k o no lo está)

  + Podemos utilizar la distribución binomial

    $B(N_k;N,N_k/N)$

    Esto es:

    - Variable N_k :Numero de aciertos del problema de Bernouilli: Cae el número en el intervalo k: si o no?
    - Probabilidad p del problema de Bernouilli equivalente, $p=N_k/N$ (número de cuentas que han caido en este subintervalo)

Incertidumbre de p_k

- Ahora podemos por ejemplo calcular la varianza de p_k
  - $Var(p_k) = Var(N_k)/(w_k^2 N^2)$
  - Utilizando las fórmulas para la distribución binomial obtenemos:

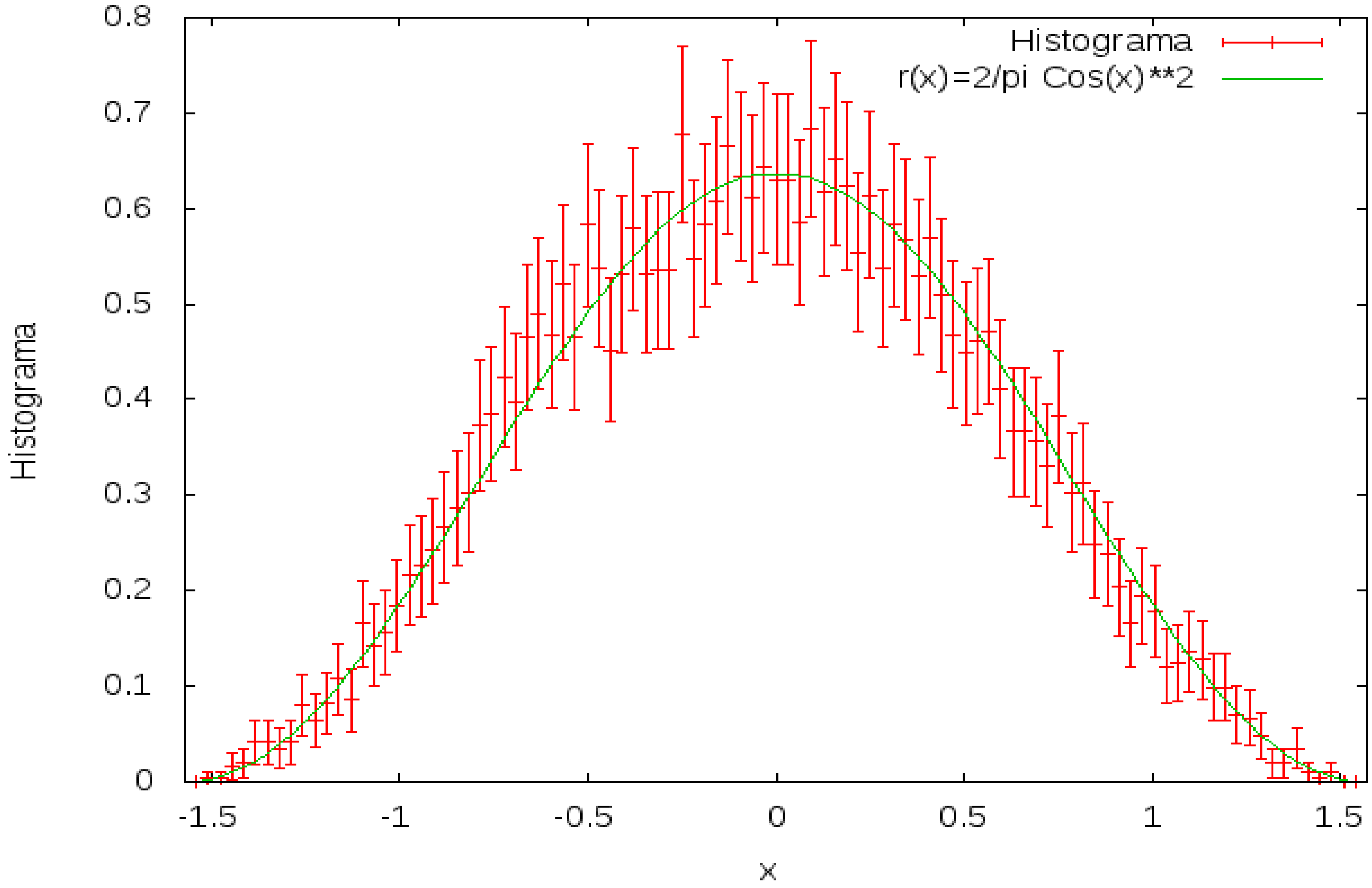
$$Var(p_k) = Np(1-p)/(w_k^2 N^2) = N_k (1-N_k/N)/(w_k^2 N^2)$$

Y la desviación estandard,

$$\sigma = \frac{1}{\omega_k}\sqrt{\frac{1}{N}\left[\frac{N_k}{N}\left(1-\frac{N_k}{N}\right)\right]}$$

Ejemplo

Error estimado como 2 sigma



Sobre histogramas

> Casi todo el mundo suele hacer:

```
Do i=1,todos los números
    x=rand()
    Do j=1, todas las cajas
        Está el numero en la caja j?
            Si: suma uno a la caja j
            No: sigue probando
    Enddo
Enddo
```

Número de repeticiones:

Ncajas x Nnúmeros

En el ejemplo

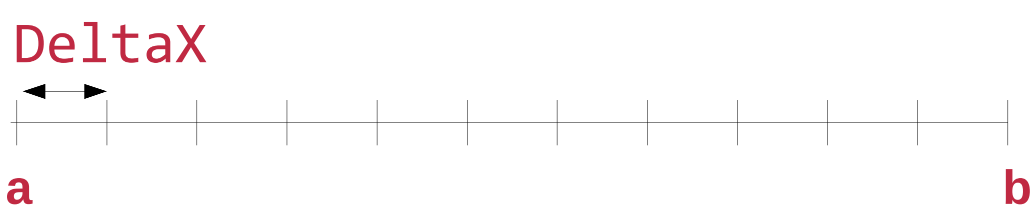
100x10000 = muchas

Sobre histogramas (II)

> Método (más) hábil/eficiente

```
DeltaX=(b-a)/Ncajas

Do i=1,todos los números
   x=rand()
   Indicedecaja= int((x-a)/DeltaX)+1
   Suma 1 a la caja(indicedecaja)
Enddo
```



Número de repeticiones:
Nnúmeros
En el ejemplo
10000 = 100 veces menos

Ejemplo:
a=0, b=1, 80 cajas
DeltaX=1/80=0.125
Número que llega x=0.3452
(x-a)/deltaX=27.616
Indicecaja=int(27.616)+1=28

Práctica 5, apartado 1

1) **Distribució Gaussiana**

Escriu una subrutina **subgauss(ndat,xgaus)** que generi **ndat** números gaussians de valor mitjà zero i variància igual a 1.

Dins de la subrutina:

a) Genera a partir de la funció intrínseca **rand** i el metòde de Box-Müller, una seqüència de **ndat** valors de la variable aleatòria x distribuïda segons la distribució Gaussiana, $p(x) = e^{-x^2}/\sqrt{2\pi}$, i escriu-els al fitxer de sortida. Fes servir com a llavor el teu número NIUB,

```
ISEED=NUMERO NIUB
CALL SRAND(ISEED)
...
XX=RAND()
.....
```

Solo llamamos a SRAND UNA VEZ

b) Calcula estimacions del valor mitjà, la variància i la desviació estàndard de la variable x i compara'ls amb els valors exactes per a la distribució normal per **ndim=10000**. Escriu els resultats al fitxer de sortida.

c) Calcula les següents estimacions dels moments centrals d'ordre superior,

$$\overline{(x-\overline{x})^m} = \quad \text{amb } m = 2, \ldots, 10 \tag{0.17}$$

i compara'ls amb els valors exactes per **ndim=10000**. Escriu els resultats al fitxer de sortida.

c) Genera un histograma amb els valors d'**x** de **ncaixes=100** i fes una gràfica de l'histograma normalitzat **P5-2016-fig1.png** amb els errors corresponents.

Propiedades de números aleatórios

> Supongamos que nos dan una secuencia de N números generados aleatoriamente que suponemos corresponden a una variable aleatória x

$$x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, \ldots, x_N$$

> Al tener todos los valores "posibles" de la variable, podemos construir probabilidades a "posteriori",

$$p(x_k)=(\text{Numero de veces que aparece } x_k)/N$$

> Esto es equivalente a escribir $p_k=1/N$ y contarlos todos

Ejemplo, N=8: 1,3,4,1,2,5,6,10

Media= $(1+3+4+1+2+5+6+10)/8 = 4$

Var= $[(1-4)^2+(3-4)^2+(4-4)^2+(1-4)^2+(2-4)^2+(5-4)^2+(6-4)^2+(10-4)^2]/8 = 8$

Mn= $(1^n+3^n+4^n+1^n+2^n+5^n+6^n+10^n)/8$

Práctica 5

2) **Mètode d'acceptació i rebuig**

Escriu una subrutina **subair(ndat,xnums,fun,a,b,M)** que generi nombres aleatoris, **xnums(ndat)** distribuïts segons la distribució **fun(x)**, definida entre **a** i **b** i amb una cota superior **M**. (**fun** com a external). Prova la teva subroutina **ndat=10000** amb la distribució,

$$p(x) = 4/3 \begin{cases} x & \text{si } 0 < x < 1 \\ -2x+3 & \text{si } 1 < x < 3/2 \end{cases} \tag{0.18}$$

Fes servir l'algoritme següent:

A1) Treu dos nombres a l'atzar: $x \in U(a,b)$ i $p \in U(0,M)$. Aquests números es poden generar de $x_1, x_2 \in U(0,1)$ amb el canvi de variable, $x = (b-a)x_1 + a$ i $p = Mx_2$.

A2) Si **fun**(x)$\geq p$ acceptem el valor d'x, en cas contrari tornem a A1).

A3) Quan tinguis **ndat** números acceptats surt.

b) Fes que la subrutina calculi el valor mitjà, la variància i la desviació estàndard dels nombres **x** i els escrigui dins del fitxer de sortida.

c) Genera un histograma amb els valors d'**x** de **ncaixes=50**, i compara l'histograma normalitzat amb els errors corresponents amb el valor exacte **fun**(x), **P5-2016-fig2.png**.

Aceptación y rechazo

> Caso $\rho(y) = (1/\pi)\sin^2(y)$ y en (0,2pi), rho(y)<M

+ Generamos números aleatorios x_1,x_2 U(0,1) con rand()
+ Generamos un y en U(0,2pi), y=2pi x_1
+ Generamos un p en U(0,M), p=M x_2
+ Aceptamos y si rho(y) > p
+ El histograma nos muestra que efectivamente tenemos números y sorteados según rho(y), después:
+ Calculamos:

$$\mu_y = \frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N} y_k$$

$$\overline{(y-\mu_y)^m} = \frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N}(y_k-\mu)^m$$

Estimador estadístico

y lo comparamos:

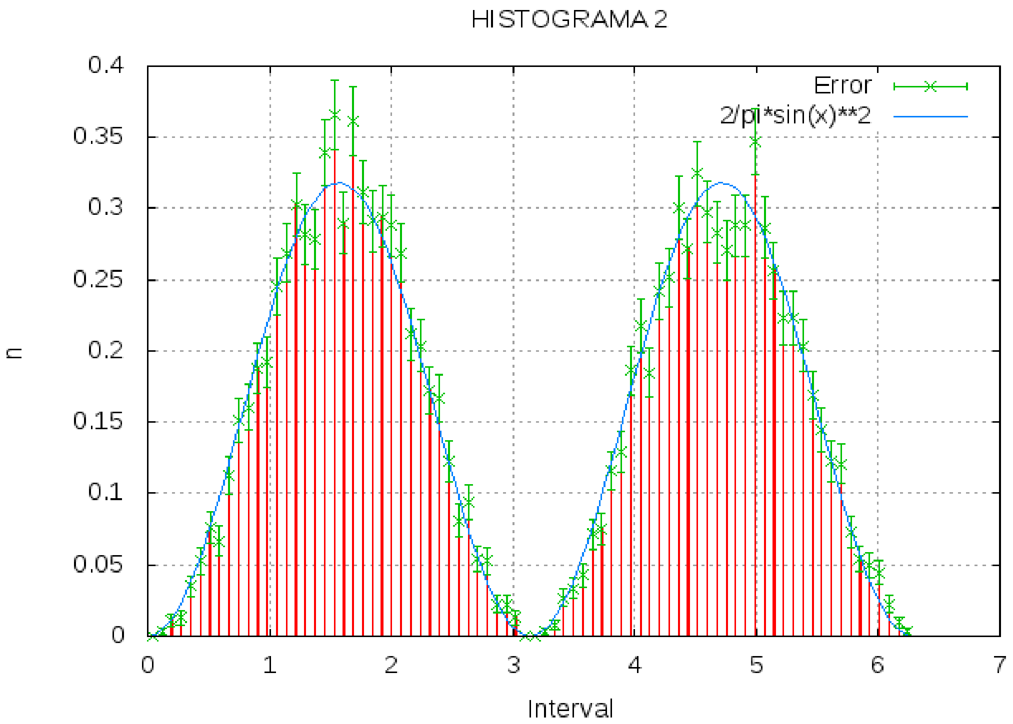
$$\langle y \rangle = \int_a^b y\rho(y)dy$$

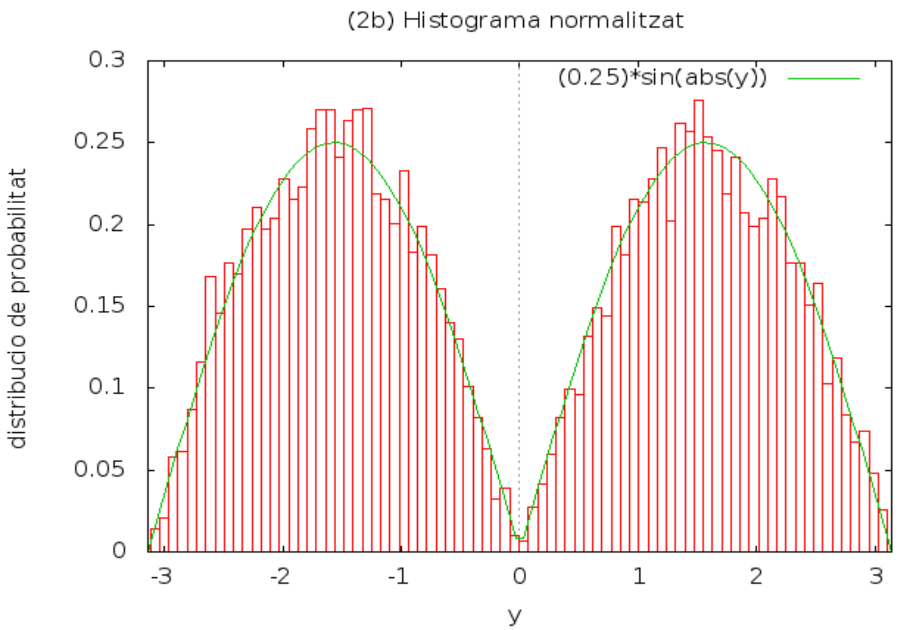
$$\langle (y-\langle y \rangle)^m \rangle = \int_a^b (y-\langle y \rangle)^m \rho(y)dy$$

Ejemplo (real)

$$\rho(y) = (1/\pi)\sin^2(y)$$

$$\rho(y) = (1/4)\sin(|y|)$$






```
VALOR CALCULAT VM:    3.1029313287035776       VAR:    2.7880113937487643
VALOR REAL     VM:    3.1415926535897931       VAR:    2.7898681336964528
```

De la prepráctica 5 a la práctica 5

Bruno Juliá-Díaz (brunojulia@ub.edu)
Dpto. Física Quàntica i Astrofísica
Facultat de Física
Universitat de Barcelona

Curso 2016/2017

Subrutinas histograma, subgaus y subair

> Durante la prepráctica el objetivo es poner a punto 3 subrutinas:

+ **subair** : genera puntos con una función especificada por el usuario

+ **subgaus**: genera puntos según una distribución normal

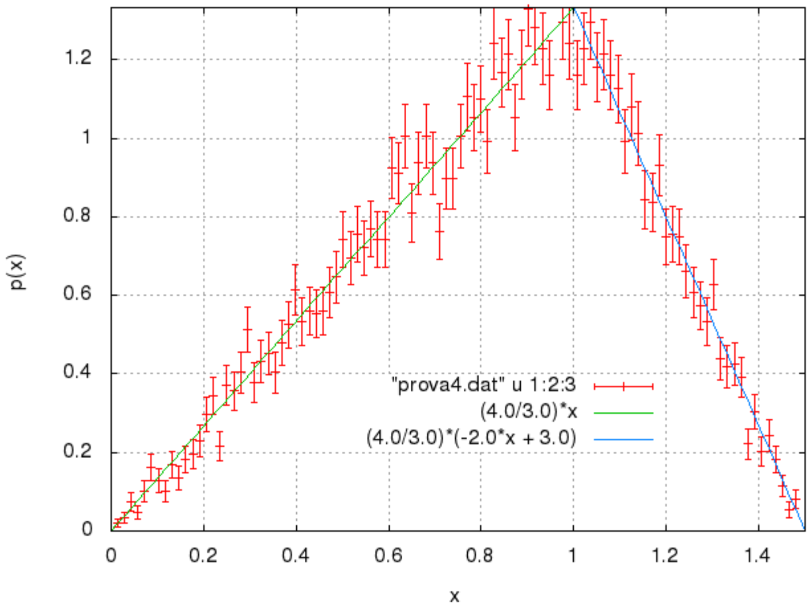
+ **histograma**: genera un histograma normalizado (distribución de probabilidad)

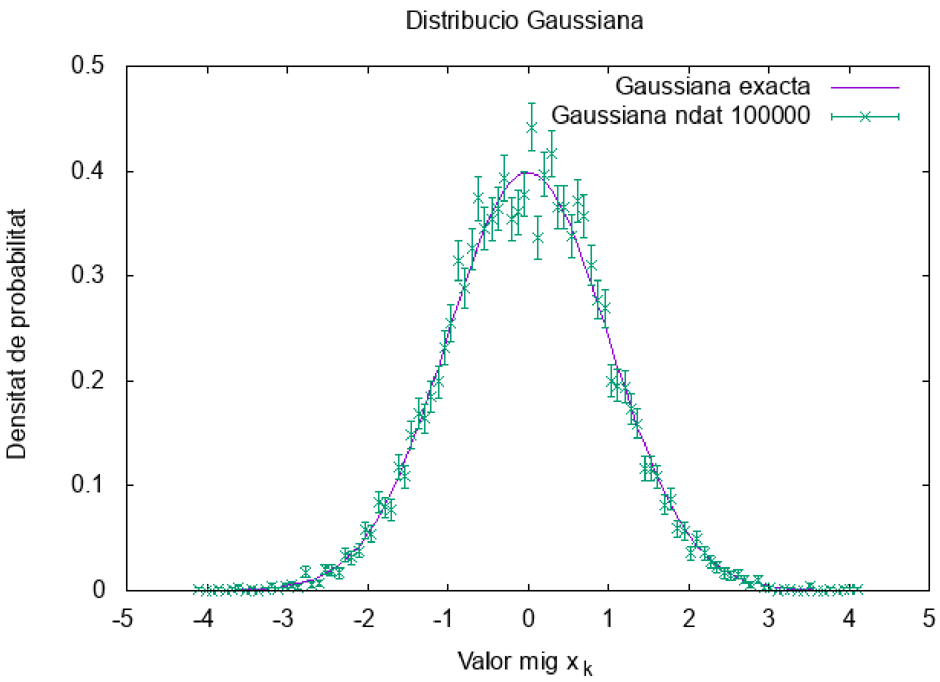
Tests a la subrutinas

- Durante la prepráctica se ponen a prueba las 3 subrutinas

  - Generando números y construyendo histogramas

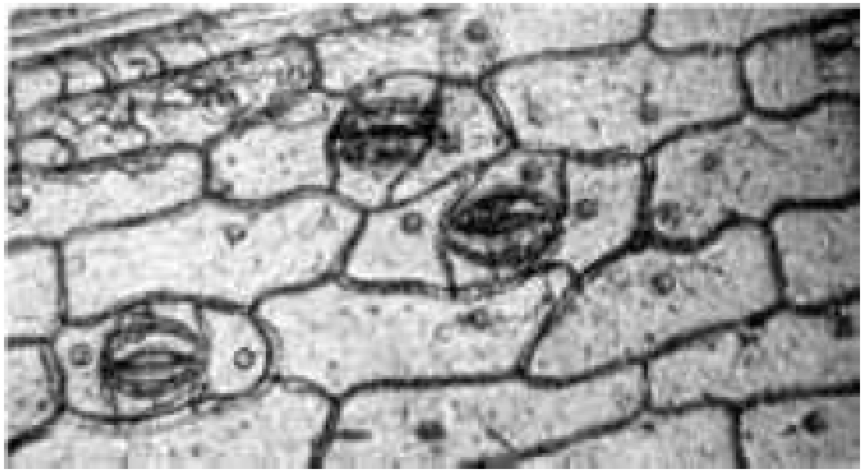
  - Calculando los momentos de la distribución

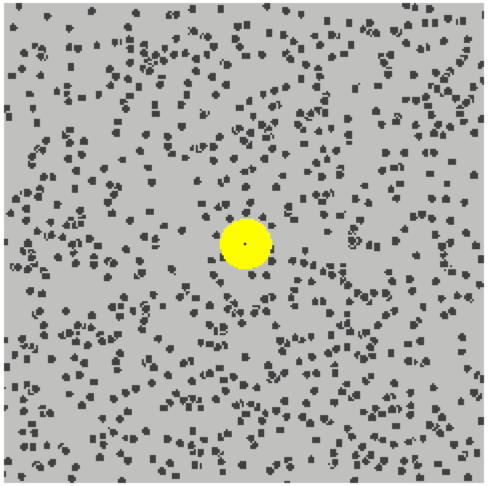




Movimiento browniano

> Descubierto por el botánico escocés Robert Brown en 1827 mientras estudiaba el polén con el microscópio.





Wikipedia
(simulación)

Observa un movimiento errático del polén .....

Movimiento browniano

>Interpretaciones:

+ El propio Brown:
  - Primero sospecha que el polen se mueve por propulsión propia: estaría vivo
  - Después observa el mismo fenómeno en materia inorgánica
+ Desaulx (1877)
  - Especula con que el movimiento sea debido al choque de las partículas debido a su temperatura

+ G. L. Gouy (1889)
  - Observa que el movimiento es más rápido si las partículas son más pequeñas.

Movimiento browniano

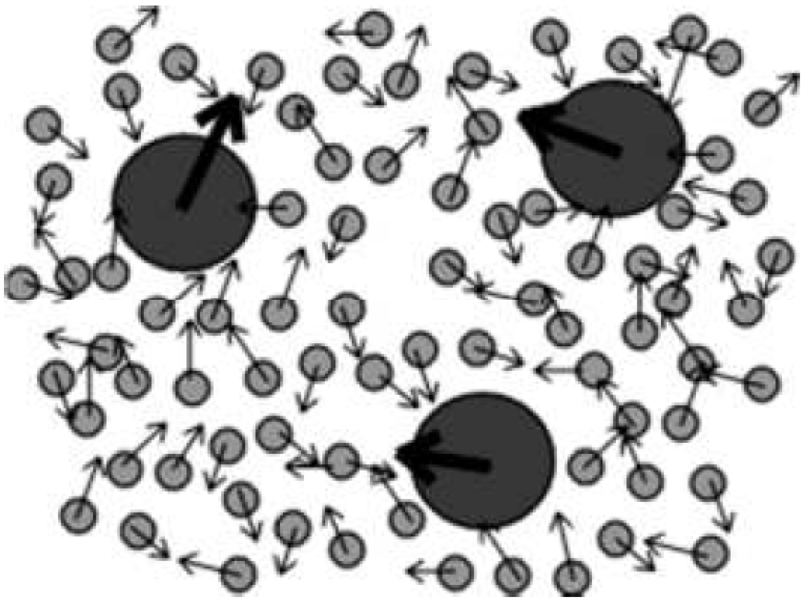
Avances posteriores:

+ F. M. Exner (1900)

- Estudios cuantitativos: partículas más pequeñas y en medios a más temperatura se mueven más rapido.

+ Einstein (1905 *)

- Desarrolla un teoria cuántitativa basada en la teoría cinético-molecular del calor.



* el mismo año descubre el efecto fotoeléctrico y la relatividad especial, un buen año.

Movimiento browniano

Interpretación de Einstein

+ primera evidencia directa a favor de la teoría cinético molecular del calor

> La materia está hecha de moléculas o átomos
> En los gases las moléculas se mueven libremente
> La energía interna promedio de cualquier sistema es proporcional a la temperatura.

Movimiento browniano

Langevin (1908)

+ Desarrolla una derivación directa. Plantea la segunda ley de Newton

$$m\frac{d\vec{v}}{dt} = -\lambda\vec{v} + \vec{\chi}(t)$$

viscosidad

Ruido térmico

Descrito como variables gaussianas de varianza proporcional a la temperatura.

$$\langle \chi_i(t)\chi_j(t')\rangle = 2\lambda k_B T\delta_{i,j}\delta(t-t')$$

T: en Kelvin
k_B :Constante de Boltzman

Movimiento browniano

Langevin (1908)

+En el caso "sobreamortiguado", despreciamos la aceleración

$$0 = -\lambda\vec{v} + \vec{\chi}(t) \Rightarrow \frac{d\vec{r}}{dt} = \frac{\vec{\chi}}{\lambda}$$

$$\langle \chi_i(t)\chi_j(t')\rangle = 2\lambda k_B T \delta_{i,j}\delta(t-t')$$

Ruido térmico

Descrito como variables aleatorias (gaussianas normalmente) de varianza proporcional a la temperatura.

T: en Kelvin
k_B :Constante de Boltzman

Durante la práctica

> Estudiaremos la difusión de partículas en 2D

+ Discretizaremos el tiempo
+ Todas las partículas estarán incialmente en el origen de coordenadas
+ A casa paso de tiempo, la nueva coordenada, x o y, de cada partícula será la antigua más un Delta x o Delta y.

+ Estas variables, Delta x y Delta y serán variables aleatórias con una distribución determinada.

> Iremos viendo como se mueven las distintas partículas.

Durante la práctica

PASOS:

1) Generaremos números aleatórios, muchos, y haremos un histograma

2) Consideraremos un número de partículas determinado, Np

3) Haremos un bucle para un número de pasos de tiempo

4) Calcularemos la posición de cada partícula utilizando los numeros generados en 1)

5) Calcularemos promedios para todo el grupo de partículas

Estructura del código

```
Incializamos variables, vectores, etc
Generamos Nnum numeros aleatorios que nos pidan

Empieza bucle de tiempos

     Bucle de partículas
          Recalculo la posición de cada partícula
          usando 1 numero aleatorio para cada
          coordenada en cada paso de tiempo
     Fin bucle de particulas
     Calculo “cosas” que sean función del tiempo

Fin bucle de tiempos

Calculo magnitudes a “tiempo final”
```