Métodos Computacionais da Física B

Prova 3 / 2017-2 – Turma A

Aluno: **Matrícula:**

1. **(1,5 pt.)** Seja

$$\rho(x) = A \cos\left(\frac{\pi x}{2L}\right) \quad ; \; x \in \{-L, L\} \tag{1}$$

a densidade de probabilidade associada a um gerador de números aleatórios.

   (a) Determine o valor de A para que esta densidade esteja corretamente normalizada no seu intervalo de definição.

   (b) Use o método da transformada inversa para encontrar uma função que gere números aleatórios com essa distribuição a partir de um gerador uniforme definido no intervalo $[0, 1)$.

   (c) Escreva um programa que produza números aleatórios de acordo com esta distribuição. Faça um histograma mostrando os seus resultados juntamente com a equação acima. Explique o procedimento para normalizar o histograma gerado. Utilize L = 5 e 50 bins para o histograma.

   (d) Explique a razão pela qual a abordagem, mais simples, que consiste em gerar um número aleatório uniforme e aplicar na função desejada, não funciona. Faça o gráfico necessário para justificar a sua resposta.

2. **(2,5 pt.)** O método de integração Monte Carlo por amostragem pode ser usado com qualquer distribuição de números aleatórios. Considere a seguinte integral:

$$I = \int_{-L}^{L} b \left[1 - \left(\frac{x}{L}\right)^2\right] dx \quad ; \quad b = 3 \; , \; L = 5 \; . \tag{2}$$

Apresente seus resultados da seguinte forma:

   (a) Obtenha a solução analítica da integral.

   (b) Compare os resultados obtidos para esta integral utilizando *(i)* o método da tentativa e erro, *(ii)* estimativa por amostragem simples e *(iii)* por amostragem por importância. Use o gerador definido na questão 1 para integrar este último método. Faça gráficos das grandezas relevantes como função da quantidade de números aleatórios gerados.

   (c) Discuta os resultados e explique as diferenças entre as três abordagens.

   (d) Qual a importância, ou impacto, de realizar diversas repetições de uma integral quando utilizamos o Método de Monte Carlo?

3. **(1,5 pt.)** Faça um programa que simule a difusão de M caminhantes aleatórios em um espaço discreto unidimensional.

   (a) Faça histogramas da distribuição espacial de 10^5 caminhantes após 100, 1000 e 10000 passos quando esses se deslocarem 2 unidades de distância a cada passo de tempo.

   (b) Ajuste o logaritmo dos histogramas encontrados a parábolas do tipo: $f(x) = b(x^2) + \log(a)$. Apresente uma tabela com os valores de b e a.

(c) Determine o desvio quadrático médio em função do número de passos dados (tempo). Explique como esta quantidade foi calculada e apresente um gráfico com mais pontos do que os 3 anteriores.

(d) Relacione o valor do parâmetro b ajustado com a distância percorrida por passo e com o tempo.

(e) Interprete os seus resultados. Como estes se comparam aos resultados analíticos conhecidos?

4. **(1,5 pt.)** Repita a simulação dos caminhantes aleatórios da questão 3 utilizando uma distribuição uniforme $[-1 : 1]$ para os tamanhos dos passos em cada instante de tempo.

5. **(1,5 pt.)** Utilize a função

$$p(x) = \exp(-a\,x)$$

como função de amostragem para calcular a integral

$$\int_0^{\pi} \frac{1}{x^2 + \cos^2(x)}\, dx.$$

Repita o cálculo para diversos valores de a e determine qual destes que minimiza a variância da integral. Apresente este resultado em um gráfico. Compare o resultado com o método usando uma amostragem uniforme. Interprete seu resultado e apresente um gráfico que corrobore a sua interpretação.

6. **(1,5 pt.)** Ao utilizarmos o método de Monte Carlo no cálculo de integrais obtemos estimativas para estas e não o valor exato das mesmas. Explique como que é possível saber se o resultado estimado está correto e qual a sua precisão nos casos em que a resposta exata não é conhecida. Aplique a sua resposta à integral da questão 5. Apresente os gráficos que corroborem a explicação dada.