

LISTA 10: FIS670 - Métodos Computacionais da Física. (Prof. Leandro Rizzi)

Exercício 1. Diversas abordagens de problemas na Física requerem o uso de números pseudo-aleatórios. Bons geradores de números pseudo-aleatórios usualmente possuem [1]:

- **aleatoriedade:** números da sequência assumem valores entre 0 e 1 amostrados de acordo com uma distribuição uniforme em uma sequência minimamente correlacionada;
- **período longo:** um número grande de chamadas pode ser feito sem que a sequência se repita;
- **eficiência computacional:** execução rápida e que requer pouca memória;
- **reprodutibilidade:** estado inicial (*semente*) determina totalmente a sequência de números aleatórios;
- **portabilidade:** sequências idênticas para computadores/compiladores/sistemas operacionais diferentes;
- **homogeneidade:** até mesmo os bits são aleatórios.

Considere, por exemplo, o gerador de números pseudo-aleatórios disponível no arquivo `marsaglia.f90`, o qual é uma adaptação do gerador desenvolvido por Marsaglia [1] e que possui todas as características descritas acima. Tal gerador consiste de três subrotinas:

`ranmar(xr)`: subrotina principal que fornece um número aleatório `xr` entre 0 e 1 a cada vez que é chamada;

`rmaget()`: armazena o **estado atual** do gerador no arquivo `seedou.rng`;

`rmaset()`: inicializa o gerador dependendo das variáveis lógicas `seed_list` e `get_seed`; três tipos de inicialização são possíveis:

- ◇ **valores default:** `seed_list=.FALSE.` e `get_list=.FALSE.`, nesse caso não é necessário nenhum arquivo de entrada para inicializar o gerador;
- ◇ **utilizando lista:** `seed_list=.TRUE.` e `get_list=.FALSE.`, aqui é preciso tanto do arquivo `seeds.txt` (que contém uma lista de sementes) quanto do arquivo `input.dat` (o qual define qual semente da lista será utilizada);
- ◇ **continuando sequência:** `seed_list=.FALSE.` e `get_list=.TRUE.`, nesse caso é necessário renomear o arquivo `seedou.rng` para `seedin.rng`, o qual será lido para inicializar o estado do gerador exatamente do ponto onde foi chamado pela última vez.

a) Mostre através de um gráfico que uma sequência de números pseudo-aleatórios x_n com $n = 1, \dots, 100$ pode ser também obtida por partes, isto é, obtendo primeiro x_n com $n = 1, \dots, 50$ e depois utilizando a inicialização **continuando sequência** para obter x_n com $n = 51, \dots, 100$.

b) A partir de uma sequência de números x_n com N números, obtenha histogramas $H_m = H(x_m)$ normalizados, isto é, $\sum_m H_m \Delta x = 1$, com $\Delta x = 0.1$ para $N = 10^3, 10^4$ e 10^6 .

c) A partir de uma sequência com N números pseudo-aleatórios é possível obter sua auto-correlação, que é dada por

$$C(i) = \frac{1}{\sigma^2(n_k - i)} \sum_{s=1}^{n_k-i} (x_s - \bar{x})(x_{s+i} - \bar{x}) \quad , \quad (1)$$

sendo as estimativas para a média e a variância da sequência calculadas, respectivamente, como

$$\bar{x} = \frac{1}{n_k} \sum_{l=1}^{n_k} x_l \quad (2)$$

$$\sigma^2 = \frac{1}{n_k} \sum_{l=1}^{n_k} (x_l - \bar{x})^2 \quad . \quad (3)$$

Assim, o tempo de auto-correlação integrado pode ser estimado como [2,3]

$$\tau_{\text{int}} = \frac{1}{2} C(0) + \sum_{i=1}^{n_k} C(i) \quad , \quad (4)$$

onde o valor $2\tau_{\text{int}}$ indica o número médio de passos necessários para que a sequência x_n torne-se decorrelacionada; note que esse valor **não** deve depender do valor n_k . Faça um gráfico de $2\tau_{\text{int}}$ em função de $n_k = 2^k$ com $k = 1, \dots, 20$ utilizando a subrotina `ranmar()`. Grafique a auto-correlação $C(i)$ em função de $i = 0, \dots, 30$ utilizando um n_k grande, isto é, onde $2\tau_{\text{int}}$ é aproximadamente constante.

Exercício 2. Considere a sequência de números pseudo-aleatórios com $N = 2^{20}$ valores do arquivo `random_seq.dat`.
a) Calcule a média \bar{x} (Eq. 2) e a variância σ^2 (Eq. 3) dos valores x_n dessa sequência. Comente se o valor de 2σ estimado numericamente é compatível com o intervalo de valores observados no gráfico da sequência x_n .
b) Faça um gráfico (log-log se necessário) do tempo de auto-correlação integrado $2\tau_{\text{int}}$ em função de $n_k = 2^k$ e forneça uma estimativa para o valor aproximadamente constante de $2\tau_{\text{int}}$ para n_k grande.
c) Grafique a auto-correlação $C(i)$ em função de i assumindo $n_k \approx 4 \times (2\tau_{\text{int}})$.
d) De acordo com o método de *Jackknife* [1], estimativas menos viesadas para a média e a variância de sequências correlacionadas podem ser obtidas através de uma análise onde a sequência com N pontos é dividida em N_a subintervalos com n_a pontos cada, ou seja, $N = N_a \times n_a$. Nesse método a média e a variância são definidos como

$$\bar{x}_J = \frac{1}{N_a} \sum_{j=1}^{N_a} \bar{x}_j \quad \text{e} \quad \sigma_J^2 = \frac{1}{N_a} \sum_{j=1}^{N_a} \sigma_j^2, \quad (5)$$

onde

$$\bar{x}_j = \frac{1}{N - n_a} \sum_{k \notin \{j\}}^N x_k, \quad \bar{x}_j^2 = \frac{1}{N - n_a} \sum_{k \notin \{j\}}^N x_k^2 \quad \text{e} \quad \sigma_j^2 = \bar{x}_j^2 - \bar{x}_j^2, \quad (6)$$

sendo que a notação $k \notin \{j\}$ indica que k percorre toda a sequência com N valores, **exceto** os n_a pontos que pertencem ao j -ésimo subintervalo. Calcule $2\sigma_J$ utilizando $N_a = 256$ e compare com 2σ obtido no item (a). Discuta os resultados em relação ao intervalo de valores (flutuações) observado no gráfico da sequência x_n .

Exercício 3. Considere a simulação de um gás ideal onde $N = 1000$ moléculas puntuais não-interagentes de massa $m = 10^{-26}$ kg estão em um recipiente fechado aproximadamente bidimensional ($d = 2$) de lado $L = 100 \text{ \AA}$ à uma temperatura constante igual à $T = 303 \text{ K}$.

a) Crie uma subrotina que forneça condições iniciais para as posições das moléculas $(r_{x,i}, r_{y,i})$ distribuídas uniformemente no recipiente e as velocidades $(v_{x,i}, v_{y,i})$ distribuídas de acordo com a distribuição de Maxwell com variância $\sigma^2 = k_B T / m$. Note que é possível obter variáveis v_x e v_y amostradas de acordo com uma distribuição gaussiana (vide pág. 23 de [1]) com média zero e variância σ^2 fazendo

$$r = \sigma \sqrt{-2 \ln(1 - u)} \quad , \quad v_x = r \cos \phi \quad , \quad \text{e} \quad v_y = r \sin \phi \quad , \quad (7)$$

com u e ϕ sendo números aleatórios distribuídos uniformemente, isto é, $u \in (0, 1)$ e $\phi \in (0, 2\pi)$.

b) Considerando a evolução temporal das posições das moléculas $\vec{r}_i(t_{n+1}) = \vec{r}_i(t_n) + \vec{v}_i \Delta t$, com $\Delta t = t_{n+1} - t_n = 0.1 \text{ ps}$, grafique a energia cinética do sistema $K = \sum_{i=1}^N m v_i^2 / 2$ em função do tempo t_n assumindo que cada vez que a molécula choca-se com a parede do recipiente a velocidade dela seja alterada aleatoriamente de acordo com 7.

c) Forneça a evolução temporal das estimativas numéricas para a média (sobre as moléculas) do módulo das velocidades $|v|$ e para a raiz da média das velocidades quadráticas $v_{\text{rms}} = (v^2)^{1/2}$ das moléculas do gás, comparando com os resultados teóricos esperados para essas duas grandezas.

Exercício 4. Considere o modelo de urna Ehrenfest, onde N partículas são inicialmente distribuídas aleatoriamente entre duas urnas A e B. Então, a partir da condição inicial definida por $i = i_0$ partículas na urna A, é possível obter a evolução do número de partículas i_n nesta caixa após o n -ésimo sorteio realizando uma simulação onde a partícula sorteada é transferida para a outra caixa (note que a partícula sorteada pode estar tanto na caixa A quando na B). Considerando M condições iniciais distintas, podemos obter uma estimativa para a distribuição de probabilidades $\pi^{(n)} = (\pi_0^{(n)}, \pi_1^{(n)}, \dots, \pi_N^{(n)})$, com os valores $\pi_k^{(n)}$ estimados por

$$\pi_k^{(n)} \approx \frac{H_k^{(n)}}{M}, \quad (8)$$

onde $H_k^{(n)}$ é o número de vezes que observa-se um número de partículas $i = k$ na caixa A logo após ao n -ésimo sorteio. Obtenha estimativas para $\pi^{(n)}$ em tempos $n = 0, 1000, 2000, 3000, \dots, 10000$ assumindo $N = 599$ partículas e $M = M^{(1)} + M^{(2)} = 10^7$ condições iniciais diferentes, sendo $M^{(1)} = 0,5 \times 10^7$ condições iniciais com $i_0 = 534$ e $M^{(2)} = 0,5 \times 10^7$ condições iniciais com $i_0 = 535$. Inclua também o gráfico do número médio de partículas $\langle i \rangle$ em função do número de sorteios n .

Referências:

- [1] B. A. Berg. Markov Chain Monte Carlo Simulations and Their Statistical Analysis (World Scientific, 2004).
- [2] A. D. Sokal. Monte Carlo Methods in Statistical Mechanics: Foundations and New Algorithms. Lectures at the Cargese Summer School on “Functional Integration: Basics and Applications” (1996).
- [3] <http://www.hep.fsu.edu/~berg/teach/mcmc08/material/lecture07mcmc3.pdf>