FFI 202 – Física Computacional II

Primeiro Projeto

Instruções

- Crie um diretório "PROJ1_nome" em /home/public/FISCOMP2/PROJ1
- Proteja seu diretório para nao ser lido por "g" e "o"
- Deixe no diretório um arquivo de nome "rel_proj1.pdf", com um relatório (elaborado utilizando `latex`) sobre o projeto, incluindo texto, listagens dos códigos, gráficos e tabelas.

Exercícios

1. **Distribuição (contínua) uniforme**: Utilizando o gerador de números aleatórios `rand()` do fortran, calcule os primeiros *momentos* da distribuição uniforme em 0,1

   $$< x^n > \quad \text{para} \;\; n = 1, 2, 3, 4\,,$$

   onde a média $<>$ é tomada sobre as N amostras geradas para x. Compare seus resultados aos resultados exatos, obtidos a partir de

   $$< x^n > = \int_0^1 x^n \, dx\,.$$

   Considerando a variável aleatória x, você é capaz de representar graficamente a sua distribuição de probabilidades? e para a variável x^2?

   A média $< x >$ calculada numericamente também é uma variável aleatória, com valor central dado pelo resultado exato para $< x >$ e "largura" dependente de N. À medida que N aumenta, seu resultado para a média (e os outros momentos) torna-se cada vez mais preciso, pois a largura desta distribuição diminui com N. Qual o número de amostras necessário para obter precisão de 10% no resultado? e de 1%? interprete seus resultados a partir da distribuição de probabilidade para a variável $< x >$, e.g. invocando a lei dos grandes números e o teorema central do limite. Você consegue calcular exatamente qual deve ser a largura desta distribuição?

2. **Distribuição discreta**: Considere agora "andarilhos aleatórios" (e.g. bêbados) em uma dimensão. Cada passo do percurso é aleatório e independente dos demais, dado com probabilidade p para a frente (valor +1) e $q = 1 - p$ para trás (valor -1). Qual o valor do passo em média (previsto exatamente e calculado em seu programa)? Sendo s a distância percorrida, calcule (exatamente e numericamente) os valores de $< s >$ e $< s^2 >$ após T passos (i.e. "tempo" $t = T$). Use $p = 1/2, 1/3, 1/4, 1/5$. Note que $s = \sum_{t=1}^{T} x_t$, onde cada passo é representado pela variável aleatória x_t. Em seus cálculos exatos utilize as relações para médias e variâncias dadas no Apêndice.

   Tomando $p = q = 1/2$ considere N andarilhos partindo da origem $s = 0$ em $t = 0$. Faça gráficos das trajetórias de cada andarilho (para N pequeno) e um histograma para a posição dos andarilhos no tempo $t = 1000$. O que esse gráfico representa? qual a relação com os valores de $< s >$ e $< s^2 >$ calculados acima?

   Faça um gráfico de $< s^2 >$ em função de t. Você consegue explicar a inclinação deste gráfico? como mudaria sua resposta se o passeio aleatório fosse dado por passos de tamanho variável, com distribuição uniforme entre -1 e 1? (dica: relacione com o problema 1 acima)

3. **Generalização para duas dimensões**: Vamos agora chamar os andarilhos de moléculas. Elas se movem aleatoriamente em duas dimensões, dando passos para cima, baixo, esquerda e direita com probabilidade 1/4. Faça gráficos da distribuição espacial de N moléculas (partindo da origem em $t = 0$) após tempo $t = 10, 100, 1000, 10000, 10^5, 10^6$. Utilizando o código do exercício anterior, faça um histograma da coordenada x das moléculas no tempo $t = 1000$ e compare com o caso unidimensional.

   Verifique que a função *entropia* do sistema aumenta com o tempo. Use a definição
   $$S \;=\; -\sum P_i \,\ln P_i \,,$$
   onde P_i é a probabilidade de encontrar o sistema em um *micro-estado* i. No nosso caso, podemos tomar P_i como a probabilidade de uma molécula estar em uma dada "célula"i do espaço, obtida e.g. dividindo o plano em caixinhas de lado um pouco maior que um passo temporal. (O mesmo critério pode ser usado para o histogramas produzidos acima.)

Apêndice: Breve Introdução à Probabilidade

Seja x uma variável aleatória com distribuição discreta. A probabilidade de obter para x o valor X, dada por $P(x = X) \equiv \mu(X)$, é um número positivo e menor do que 1. A distribuição de probabilidades para x é normalizada, ou seja

$$\sum_X \mu(X) \;=\; 1\,.$$

Podemos calcular médias de funções $A(x)$ de x somando para cada possível valor X de x o produto de sua probabilidade pelo valor da função em X

$$< A(x) > \equiv \sum_X A(X)\,\mu(X)\,.$$

(Claramente $A(x)$ também é uma variável aleatória.) Da mesma forma, aplicando a fórmula acima, temos a *variância* da função $A(x)$

$$\sigma^2(A) \;\equiv\; < [A(x) - < A(x) >]^2 > \;=\; < [A(x)]^2 > \;-\; < A(x) >^2 \;.$$

Note que com $A(x) = x$ obtemos a média e variância da variável x.

Considere agora as variáveis aleatórias x_1 e x_2, com mesma distribuição de probabilidade ou não. Dizemos que as variáveis são *independentes* se a distribuição de probabilidade conjunta dessas variáveis satisfizer: $P(x_1; x_2) = P(x_1)\,P(x_2)$, ou seja a probabilidade de obter ao mesmo tempo determinados valores para x_1 e x_2 é igual ao produto das respectivas probabilidades nas duas distribuições independentes. Em outras palavras, para x_1 e x_2 independentes vale

$$\begin{aligned}
< A(x_1)\,B(x_2) >_{12} \;&=\; \sum_{X_1}\sum_{X_2} A(x_1)\,B(x_2)\,P(x_1 = X_1; x_2 = X_2)\\
&=\; \sum_{X_1} A(x_1)\,P(x_1 = X_1)\;\; \sum_{X_2} A(x_2)\,P(x_2 = X_2)\\
&=\; < A(x_1) >_1 < B(x_2) >_2 \;.
\end{aligned}$$

Com as fórmulas acima é simples então demonstrar

$$\begin{aligned}
< A(x_1) \;+\; B(x_2) > \;&=\; < A(x_1) > \;+\; < B(x_2) >\\
< a\,A(x) > \;&=\; a\; < A(x) >\\
\sigma^2(a\,A) \;&=\; a^2\; < A(x) > \;.
\end{aligned}$$

para variáveis aleatórias x, x_1, x_2 quaisquer (a é uma constante) e

$$\sigma^2[A(x_1) \;+\; B(x_2)] \;=\; \sigma^2[A(x_1)] \;+\; \sigma^2[A(x_2)]\,.$$

para variáveis aleatórias x_1, x_2 independentes.

Os resultados acima podem ser generalizados para somas de números arbitrários de variáveis aleatórias e para distribuições de variáveis contínuas.