

# Física Estatística Computacional

## Primeiro Projeto

### Instruções

- Crie um diretório “PROJ1\_nome” em /home/public/FISESTCOMP/PROJ1
- Proteja seu diretório para não 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

$$\langle x^n \rangle \quad \text{para } n = 1, 2, 3, 4,$$

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

$$\langle x^n \rangle = \int_0^1 x^n dx.$$

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

A média  $\langle x \rangle$  calculada numericamente também é uma variável aleatória, com valor central dado pelo resultado exato para  $\langle x \rangle$  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  $\langle x \rangle$ , 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  $\langle s \rangle$  e  $\langle s^2 \rangle$  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  $\langle s \rangle$  e  $\langle s^2 \rangle$  calculados acima? Faça um gráfico de  $\langle s^2 \rangle$  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  $X$

$$\langle A(x) \rangle \equiv \sum_X A(X) \mu(X).$$

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

$$\sigma^2(A) \equiv \langle [A(x) - \langle A(x) \rangle]^2 \rangle = \langle [A(x)]^2 \rangle - \langle A(x) \rangle^2.$$

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

$$\begin{aligned} \langle A(x_1) B(x_2) \rangle_{12} &= \sum_{X_1} \sum_{X_2} A(x_1) B(x_2) P(x_1 = X_1; x_2 = X_2) \\ &= \sum_{X_1} A(x_1) P(x_1 = X_1) \sum_{X_2} A(x_2) P(x_2 = X_2) \\ &= \langle A(x_1) \rangle_1 \langle B(x_2) \rangle_2. \end{aligned}$$

Com as fórmulas acima é simples então demonstrar

$$\begin{aligned} \langle A(x_1) + B(x_2) \rangle &= \langle A(x_1) \rangle + \langle B(x_2) \rangle \\ \langle a A(x) \rangle &= a \langle A(x) \rangle \\ \sigma^2(a A) &= a^2 \langle A(x) \rangle. \end{aligned}$$

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.