

Introdução à Física Computacional 1S/2019

Projeto 6 — Sistemas aleatórios

Descrição:

O computador como conhecemos hoje é um exemplo categórico de um sistema determinístico. Nesse projeto, contudo, investigaremos sistemas aleatórios usando um computador, ou seja, usando um sistema determinístico. Para reconciliar esses dois extremos, temos que discutir geradores de números aleatórios. Sequências de números aleatórios verdadeiros, isso é que não apresentam correlação alguma entre si, podem ser encontradas na internet (vide, por exemplo, <http://www.fourmilab.ch/hotbits/>). Contudo, a utilização de tais listas é pouco eficiente para as aplicações cotidianas, pois (i) o número de números aleatórios gerados é limitado e (ii) é impossível gerar a mesma sequência independentemente para conferir/reproduzir os resultados. Por isso, foram desenvolvidos geradores de números *pseudoaleatórios*. Nesse caso, geramos uma sequência de números aleatórios, mas tal sequência possui um período a partir da qual ela começa a se repetir. Na prática, buscamos então aumentar esse período ao máximo. Um dos geradores mais famosos disponíveis é o chamado Mersenne Twister (https://en.wikipedia.org/wiki/Mersenne_Twister), que possui um período de $2^{19937} - 1 \approx 10^{6001}$. Uma ótima referência sobre o assunto é o capítulo 7 do livro Numerical Recipes.

1. Números aleatórios, integrais e amostragem

Para gerarmos números aleatórios, utilizaremos a seguinte sub-rotina intrínseca do Fortran `call Random_Number(r)`, que gera um número aleatório real r contido no intervalo $0 \leq r < 1$. Alternativamente, podemos utilizar a sub-rotina `rkiss05`, como discutido no Projeto 01.

- Para testar seu código, gere $k = 10^2$ sequências de números aleatórios $\{r_n\}$ de tamanho $N = 3^m$, com $m = 1, 2, \dots, 9$. Para cada uma delas, calcule a média $\langle r \rangle$ e o desvio padrão σ (lembre-se dos códigos do Projeto 01). Apresente seus resultados graficamente, ou seja, faça um gráfico com todos os valores de $\langle r \rangle$ por N e outro gráfico de σ por N . Compare os resultados obtidos com os valores esperados $\langle r \rangle = 0.5$ e $\sigma = 1/(2\sqrt{3}) \approx 0.288675$.
- Trace num mesmo gráfico três histogramas dos valores médios $\langle r \rangle$ dessas k sequências para $N = 3^2, 3^3$ e 3^4 . Num outro gráfico log-log, trace o desvio padrão dessas médias $\delta \langle r \rangle$ como função de N (para os valores de N utilizados no item anterior) e verifique o comportamento $\delta \langle r \rangle \sim 1/\sqrt{N}$ previsto pelo teorema central do limite. (Note que essa prescrição nos fornece uma maneira de estimar erros de uma quantidade aleatória.)
- Uma vez que aprendemos a gerar números aleatórios em um computador, podemos utilizá-los para uma série de tarefas. A primeira delas será estimar o valor de π (e o erro correspondente). Para tal, calcularemos a área do círculo unitário por meio do seguinte algoritmo. Gere um par de números aleatórios (x_i, y_i) onde $-1 \leq x, y \leq 1$ e verifique se $x_i^2 + y_i^2 \leq 1$, isso é se o ponto cai dentro do círculo. Em caso de resposta positiva, faça $N_{\text{dentro}} = N_{\text{dentro}} + 1$. O valor de π é então estimado como $A_{\text{circ}} = \pi = \left(\frac{N_{\text{dentro}}}{N_{\text{total}}}\right) A_{\text{quad}}$, onde N_{total} é o número total de pares gerados e $A_{\text{quad}} = 4$. Estime o valor N_{total} para obtermos o valor de π com quatro casas decimais de precisão. Dê uma interpretação geométrica para esse algoritmo e discuta seus resultados.
- O item anterior mostrou que podemos estimar áreas por meio de números aleatórios. Essa abordagem cai dentro da classe de problemas conhecidos como integração pelo método de Monte Carlo (vide https://en.wikipedia.org/wiki/Monte_Carlo_method). Essa é uma abordagem complementar àquela discutida no Projeto 02 para o cálculo numérico de integrais. Por simplicidade, consideraremos apenas integrais unidimensionais, mas o método é trivialmente generalizado para mais variáveis, sendo essa uma de suas grandes virtudes. O algoritmo padrão para a integração por meio do método de Monte Carlo é baseado no teorema do valor médio (vide https://en.wikipedia.org/wiki/Mean_value_theorem) para integrais definidas

$$\int_a^b f(x) dx = (b-a) \langle f \rangle, \quad (1)$$

onde $\langle f \rangle$ é o valor médio da função $f(x)$ dentro do intervalo $[a, b]$. A Eq. (1) sugere então que nos foquemos no cálculo da média de $f(x)$

$$\langle f \rangle \simeq \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i), \quad (2)$$

onde agora geramos N números aleatórios $x_i \in [a, b]$ e esperamos que esse valor convirja para o valor esperado quando $N \rightarrow \infty$. O algoritmo para o cálculo de integrais é então dado por

$$\int_a^b f(x) dx = \frac{b-a}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i). \quad (3)$$

Avalie agora as seguintes integrais por meio da Eq. (3): (i) $\int_0^1 4/(x^2+1) dx$ e (ii) $\int_1^{10} (1/x) dx$. Apresente seus resultados com três casas decimais de precisão e indique o valor de N necessário para tal. Discuta seus resultados.

2. Decaimento radioativo

É um fato muito bem estabelecido que muitos núcleos são instáveis. Um exemplo clássico é o isótopo ^{235}U , que possui uma probabilidade pequena, mas ainda finita, de decair em dois núcleos mais leves. Esse é um processo aleatório no seguinte sentido: dado um único núcleo ^{235}U , não se sabe dizer com certeza quando o decaimento ocorrerá. O melhor que pode ser feito é estimar a probabilidade para o decaimento espontâneo ocorra. Essa probabilidade de que um certo número de núcleos decaia em um período infinitesimal de tempo é

$$dP = \lambda dt, \quad (4)$$

onde a constante de decaimento λ está relacionada com a vida média (não confundir com meia vida) τ como $\lambda = 1/\tau$. Tal probabilidade infinitesimal também pode ser relacionada com o número de núcleos presentes em um tempo t : $dP = -\ln(N(t))$. Logo, quanto mais núcleos presentes, maior a probabilidade de decaimento. Consideraremos agora um ensemble (amostra) contendo inicialmente (ou seja, em $t = 0$) N_0 núcleos radioativos e simularemos seu decaimento como um processo estocástico por meio de números aleatórios.

- Escreva um programa que simule o processo decaimento de N_0 núcleos radioativos de vida média τ em um intervalo de tempo $t_{\max} \gg \tau$. Defina um pequeno intervalo de tempo δt com $\delta t \ll \tau$ e use o gerador de números aleatórios para decidir se um dado núcleo decaiu ou não para um dado δt de acordo com a probabilidade em (4). Discuta cuidadosamente como você implementará sua dinâmica. Você deverá escrever um código que seja capaz de repetir a simulação k vezes, considerando em cada uma das repetições uma sequência diferentes de números aleatórios.
- Faça a simulação para $N_0 = 10^3$ e $k = 10^3$. Escolha cuidadosamente os valores de t_{\max} e δt e justifique suas escolhas. Faça um gráfico do número de núcleos restantes $N(t)$ como função do tempo t para as dez primeiras repetições juntamente com seu valor médio $\langle N(t) \rangle$ (obtido das k repetições). Estime as barras de erro desse valor médio $\langle N(t) \rangle$ por meio do desvio padrão $\sigma(t)$ dividido por \sqrt{k} . Discuta seus resultados.
- Podemos interpretar nosso modelo para o decaimento radioativo em termo de uma distribuição de exponencial

$$p(x) = \lambda e^{-\lambda x}, \quad x \geq 0 \quad (5)$$

que descreve processos nos quais eventos ocorrem continuamente, de forma independente e a uma taxa constante. Mostre que a constante λ é o inverso da média dessa distribuição. Vemos, portanto, que todas as hipóteses são satisfeitas em nosso modelo no qual assumimos núcleos instáveis independentes (sempre decaem, mas sem efeito cascata) e uma meia vida τ constante no tempo. A pergunta que gostaríamos de fazer agora é a seguinte: sabemos como gerar números aleatórios de acordo com uma distribuição uniforme no computador. A partir dela, como podemos gerar números aleatórios seguindo uma distribuição não uniforme? Essa é uma pergunta para a qual há uma resposta geral (vide https://en.wikipedia.org/wiki/Inverse_transform_sampling). Contudo, vamos apenas ilustrar um procedimento particular para a distribuição exponencial em (5). Gere números aleatórios de acordo com a seguinte prescrição

$$x = -\frac{1}{\lambda} \ln(1-r), \quad (6)$$

onde $0 < r < 1$ é uma variável aleatória distribuída de modo uniforme. Mostre que o histograma de x obedece à Eq. (5). Dica: Não se preocupe muito com uma descrição quantitativa da cauda da distribuição, $\lambda x \gg 1$, uma vez que essa é uma região na qual os eventos são exponencialmente suprimidos. Para sua curiosidade, há um procedimento similar para gerar um distribuição normal (Gaussiana) conhecido como transformação de Box-Muller (<http://mathworld.wolfram.com/Box-MullerTransformation.html>).

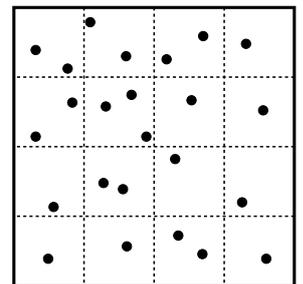
3. Passeio aleatório

Vamos considerar agora o problema do passeio aleatório, que pode ser motivado, por exemplo, pelo movimento Browniano (https://en.wikipedia.org/wiki/Brownian_motion). Nesse problema, temos uma partícula (digamos pólen) suspensa em um fluido (digamos água). Queremos descrever então seu movimento aleatório resultante da colisão do pólen com as partículas de água que se movem rapidamente devido à agitação térmica.

- (a) Vamos começar com o passeio aleatório em uma dimensão onde a partícula se encontra inicialmente na origem. Considere uma partícula que se move ao longo de uma linha por meio de passos Δx de comprimento aleatório entre 0 e 1. Em um dado instante de tempo t , essa partícula está localizada no ponto x possui a mesma probabilidade, $1/2$, de se mover para direita, $x + \Delta x$, ou para esquerda $x - \Delta x$, no instante de tempo $t + 1$. Calcule a distribuição de posição $P(x)$ para os instantes de tempo $t = 50, 100$ e 200 . Calcule o deslocamento médio $\langle x \rangle$, e deslocamento quadrático médio $\langle x^2 \rangle$, como função de t para $t \leq 200$. Apresente esses resultados em forma gráfica discutindo-os cuidadosamente. Essas quantidades são calculadas considerando um número k de diferentes movimentos, ou seja, a simulação deve ser repetida para k diferentes sequências de números aleatórios. Obtenha o valor de k a partir do qual a estimativa das médias $\langle x \rangle$ e $\langle x^2 \rangle$ têm um erro da ordem de 10%. (Para estimar o erro, use o que você aprendeu do item 1b.)
- (b) Vamos explorar agora o passeio aleatório em duas dimensões. Nesse caso, podemos ter $(x, y) \rightarrow (x \pm \Delta x, y \pm \Delta y)$ com igual probabilidade, ou seja $1/4$. Assumiremos novamente que a partícula parte da origem e $0 \leq \Delta x, \Delta y \leq 1$. Calcule o deslocamento quadrático médio $\langle r^2 \rangle = \langle x^2 + y^2 \rangle$ com função do tempo para $t \leq 200$ considerando k diferentes passeios. Verifique o k a partir do qual a curva $\langle r^2 \rangle \times t$ não muda mais com precisão de 10%. Discuta seus resultados.
- (c) Considere novamente um passeio aleatório em duas dimensões, só que agora delimitado em um recipiente. Ou seja, caso aconteça de $|x| > x_{\max}$ e/ou $|y| > y_{\max}$ nossa partícula é refletida para dentro do recipiente novamente. Aqui, considere reflexão especular, i.e., caso $x \rightarrow x + \Delta x > x_{\max}$ então faça $x \rightarrow x_{\max} - (x + \Delta x - x_{\max}) = 2x_{\max} - x - \Delta x$, e assim por diante. (O que deve ser feito quando $x \rightarrow x + \Delta x < -x_{\max}$?) Implementamos assim um passeio aleatório em um recipiente fechado. (i) Construa a curva $\langle r^2 \rangle \times t$ para $t \leq 10^4$ e $k = 10^4$ para diferentes valores de $x_{\max} = y_{\max}$ e discuta seus resultados. (ii) Considere agora $N = 10^3$ partículas de ar paradas, em $t = 0$, na origem de uma caixa quadrada de comprimento 200, ou seja $x_{\max} = y_{\max} = 100$. Tire fotos das posições dessas partículas para alguns instantes de tempo no intervalo $10 \leq t \leq 10^6$. Discuta seus resultados. (iii) Como você pôde observar na simulação anterior, após um certo tempo as partículas do nosso ar passam a ocupar todo o recipiente de maneira aparentemente uniforme e em nenhum momento da simulação há indícios de que as partículas voltariam a se concentrar todas em um determinado ponto. O curioso nesse resultado é que não há nada na nossa dinâmica microscópica que impeça as partículas de se concentrarem novamente em um único ponto. Essas são apenas configurações improváveis desse coletivo de partículas (o fato de os passos serem independentes leva o sistema a explorar todas as partes da recipiente com igual probabilidade). Podemos quantificar essa observação por meio da entropia de Gibbs, por unidade da contante de Boltzmann k_B ,

$$S = - \sum_i p_i \ln p_i, \quad (7)$$

onde p_i é a probabilidade de encontrarmos o sistema no estado i . A entropia mede o grau de desordem no sistema, pois ela é zero se apenas um estado é ocupado e máxima se todos os estados são ocupados igualmente. (Demonstre isso explicitamente para o caso de dois estados.) Para aplicarmos essa definição ao nosso problema, introduzimos divisões arbitrárias em nosso recipiente, digamos em M células quadradas iguais de tamanho $\ell \times \ell$, sendo que, agora, p_i é a probabilidade de encontrarmos uma partícula na célula i (vide figura ao lado). Calcule a entropia para $N = 10^3$ partículas, $x_{\max} = y_{\max} = 100$, $t \leq 10^5$ e diferentes número de partições M do sistema. Discuta seus resultados e os correlacione com a noção de seta do tempo.



Breve discussão sobre a execução dos problemas

Considere uma distribuição uniforme como ilustrada na Fig. 1. O valor esperado de r , $\langle r \rangle$ é dado por

$$\langle r \rangle = \int_0^1 r P(r) dr = \int_0^1 r dr = \frac{1}{2}. \quad (8)$$

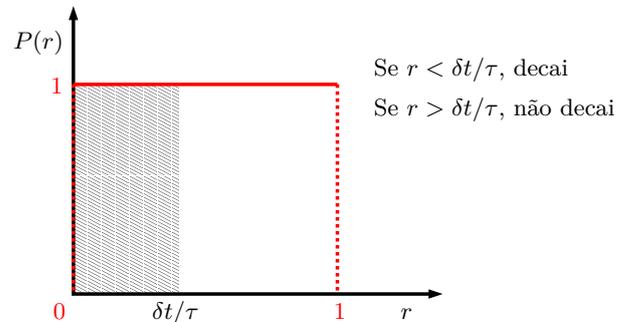


Figura 1: Distribuição uniforme $P(r)$ com $0 < r < 1$. Dada uma probabilidade de decaimento $\delta t/\tau$, temos que se $r < \delta t/\tau$ (área hachurada) o átomo decai.

Já o valor esperado de r^2 é

$$\langle r^2 \rangle = \int_0^1 r^2 dr = \frac{1}{3}, \quad (9)$$

donde vem que

$$\sigma = \sqrt{\langle r^2 \rangle - \langle r \rangle^2} = \frac{1}{\sqrt{12}} = \frac{1}{2\sqrt{3}}. \quad (10)$$

Ao utilizarmos um gerador de números aleatórios, geramos uma distribuição uniforme de números reais entre 0 e 1, ou seja todos os números entre 0 e 1 têm a mesma probabilidade de serem escolhidos em algum momento. Essa é a distribuição mostrada na Fig. 1, com seus primeiros momentos calculados acima.

Para resolver o segundo exercício, proceda da seguinte forma

- Particione o intervalo de tempo entre 0 e t_{\max} em pequenos intervalos δt ;
- Escolha $\tau = 1$ por simplicidade. Isso significa que o tempo é agora medido em unidades de τ ;
- Defina a probabilidade de decaimento $p = \delta t/\tau$, de acordo com a Eq. (4). Note que essa é uma probabilidade constante, ou seja ela independe tanto do tempo t quanto do número de átomos restantes;
- Suponha agora que você comece com N_0 átomos radioativos;
- No primeiro passo, você deve então gerar N_0 números aleatórios, um para cada átomo restante. Conte quantos desses números são menores que p . Esse será o número de átomos que decaem nesse intervalo de tempo δt . Suponha, por exemplo, que você gere ΔN_0 números menores que p . Portanto, no tempo $t = 0 + \delta t$ há $N_1 = N_0 - \Delta N_0$ átomos restantes em sua simulação;
- Gere agora N_1 números aleatórios e novamente conte quantos são menores que p . Esses são, novamente, o número de átomos que decaem;
- Continue esse procedimento até t_{\max} e gere uma curva de $N(t) \times t$.