
Física Estatística Computacional



Tereza Mendes

IFSC – USP

<http://lattice.ifsc.usp.br/cbpf.html>

Física Estatística Computacional

Vamos trabalhar com **sistemas estocásticos**, em que um **grande número de integrantes** estará em um **estado** ou outro **aleatoriamente**, de acordo com uma **distribuição de probabilidades**.

Em geral não será possível fazer as contas de forma analítica,  portanto usaremos **simulação numérica**. 

A **evolução do sistema** será implementada **no computador**, com regras (aleatórias) para a escolha das variáveis de um sítio (em relação aos sítios vizinhos).

⇒ Vale tanto para **bactérias** quanto para **quarks!!**

Plano do Curso

- Introdução ([Aula 1](#))
- Problema do Bêbado ([Aula 2](#))
- Aglomerados ([Aula 3](#))
- Autômatos Celulares ([Aula 4](#))
- Monte Carlo ([Aula 5](#))

Plano do Curso

- Introdução ([Aula 1](#))
 - sistemas estocásticos
 - simulação numérica
 - números pseudo-aleatórios
- Problema do Bêbado ([Aula 2](#))
- Aglomerados ([Aula 3](#))
- Autômatos Celulares ([Aula 4](#))
- Monte Carlo ([Aula 5](#))

Plano do Curso

- Introdução ([Aula 1](#))
- Problema do Bêbado ([Aula 2](#))
 - caminho aleatório
 - aplicação ao fenômeno de difusão
 - verificação da segunda lei da termodinâmica
- Aglomerados ([Aula 3](#))
- Autômatos Celulares ([Aula 4](#))
- Monte Carlo ([Aula 5](#))

Plano do Curso

- Introdução ([Aula 1](#))
- Problema do Bêbado ([Aula 2](#))
- Aglomerados ([Aula 3](#))
 - modelos de crescimento (e.g. modelo de Eden e de difusão limitada por agregação)
 - cálculo da dimensão fractal de aglomerados
 - percolação
- Autômatos Celulares ([Aula 4](#))
- Monte Carlo ([Aula 5](#))

Plano do Curso

- Introdução ([Aula 1](#))
- Problema do Bêbado ([Aula 2](#))
- Aglomerados ([Aula 3](#))
- Autômatos Celulares ([Aula 4](#))
 - autômatos unidimensionais: regras de Wolfram
 - autômatos bidimensionais (e.g. jogo da vida e modelo da pilha de areia)
- Monte Carlo ([Aula 5](#))

Plano do Curso

- Introdução ([Aula 1](#))
- Problema do Bêbado ([Aula 2](#))
- Aglomerados ([Aula 3](#))
- Autômatos Celulares ([Aula 4](#))
- Monte Carlo ([Aula 5](#))
 - introdução ao método de Monte Carlo
 - aplicação ao estudo do modelo de spins de Ising

Bibliografia

- Nicholas J. Giordano e Hisao Nakanishi, Computational Physics, 2ª edição, Benjamin Cummings, 2005.
- Willian H. Press et al., Numerical Recipes: The Art of Scientific Computing, 3ª edição, Cambridge University Press, 2007.

Material no site

<http://lattice.ifsc.usp.br/cbpf.html>

Aula 1: INTRODUÇÃO

Mecânica Estatística



Em vez de descrever a **evolução temporal** de $N \approx 10^{23}$ **partículas**. Calcula **observáveis termodinâmicos** em termos da distribuição de probabilidades das possíveis **configurações do sistema**

Entropia

$$S = k \ln W$$

$W(E)$ = *Wahrscheinlichkeit* é o **número de maneiras** de obter um **estado macroscópico** com certa energia E

Gás Ideal

Moléculas não interagentes (só colisões). Gás inicialmente em metade do volume, abre portinha. Qual a probabilidade de encontrar **todas** as partículas do lado esquerdo (i.e. no volume inicial)?

$$2 \text{ moléculas} = 1/4$$

$$10 \text{ moléculas} = 1/2^{10} \approx 10^{-3} \text{ (1 segundo a cada 17 minutos)}$$

$$50 \text{ moléculas} = 1/2^{50} ?$$

Como calcular S ?

$$\Delta S = k [\ln V^N - \ln(2V)^N] = -Nk \ln 2$$

⇒ para N grande as medidas **convergem** para uma média.

Transições com $\Delta S < 0$ são proibidas (segunda lei da termodinâmica)

Formulação Canônica

Probabilidade de uma configuração σ para um sistema em equilíbrio à **temperatura** T é dada (no **ensemble canônico**) em termos de sua **hamiltoniana** $\mathcal{H}(\sigma)$ pela **distribuição de Boltzmann**

$$P(\sigma) = \frac{e^{-\beta\mathcal{H}(\sigma)}}{Z}; \quad Z = \int d\sigma e^{-\beta\mathcal{H}(\sigma)}; \quad \beta = 1/KT$$

Média termodinâmica do observável A dada por

$$\langle A \rangle = \int d\sigma A(\sigma) P(\sigma)$$

e.g. energia: $E = \langle \mathcal{H}(\sigma) \rangle$

Integral (multi-dimensional) muito complicada!

Sistema Estocástico

Portanto, o comportamento dos integrantes de um sistema com muitas partículas pode ser visto como **aleatório**, mesmo no caso de dinâmica bem definida (determinística) para cada partícula, na **mecânica estatística de equilíbrio**.

Note: no método de Monte Carlo será re-introduzida uma evolução temporal.

Ao mesmo tempo, discussão em comum com sistemas definidos por regras estocásticas (ou mesmo determinísticas) simples, em que cada ponto (sítio) do sistema “decide” o que fazer no instante de tempo seguinte com base na configuração dos sítios vizinhos.

⇒ Sistemas Complexos

- O **que é** a Simulação Computacional?

- O **que é** a Simulação Computacional?

- ⇒ Experimento Virtual (Teórico!)

-
- O **que é** a Simulação Computacional?
⇒ Experimento Virtual (Teórico!)
 - E **para que** serve?

- O **que é** a Simulação Computacional?

 - ⇒ Experimento Virtual (Teórico!)

- E **para que** serve?

 - ⇒ Importância para **pesquisa aplicada**

- O **que é** a Simulação Computacional?

- ⇒ Experimento Virtual (Teórico!)

- E **para que** serve?

- ⇒ Importância para **pesquisa aplicada**

- ⇒ **Modelagem** de sistemas

- O **que é** a Simulação Computacional?

- ⇒ Experimento Virtual (Teórico!)

- E **para que** serve?

- ⇒ Importância para **pesquisa aplicada**

- ⇒ **Modelagem** de sistemas

- ⇒ Crucial para o entendimento das **interações entre quarks!**

Simulação Computacional

*A simulação é um processo de **projetar** um **modelo** computacional de um sistema real e **conduzir experimentos** com este modelo com o propósito de entender seu comportamento e/ou avaliar estratégias para sua operação.*

D. Pegden (1990)

Simulação Computacional

*A simulação é um processo de **projetar** um **modelo computacional de um sistema real** e **conduzir experimentos** com este modelo com o propósito de entender seu comportamento e/ou avaliar estratégias para sua operação.*

D. Pegden (1990)

Usos

- experimentos que não podemos/não queremos realizar (projeto de aviões, guerra nuclear, evolução)
- reconstrução para melhor compreensão de eventos ocorridos (e.g. acidentes)

Simulação Computacional

*A simulação é um processo de **projetar** um **modelo computacional de um sistema real** e **conduzir experimentos** com este modelo com o propósito de entender seu comportamento e/ou avaliar estratégias para sua operação.*

D. Pegden (1990)

Usos

- experimentos que não podemos/não queremos realizar (**projeto de aviões**, **guerra nuclear**, **evolução**)
- reconstrução para melhor compreensão de eventos ocorridos (e.g. acidentes)
- modelagem de sistemas (e.g. bactérias)

Simulação Computacional

*A simulação é um processo de **projetar** um **modelo computacional de um sistema real** e **conduzir experimentos** com este modelo com o propósito de entender seu comportamento e/ou avaliar estratégias para sua operação.*

D. Pegden (1990)

Usos

- experimentos que não podemos/não queremos realizar (projeto de aviões, guerra nuclear, evolução)
- reconstrução para melhor compreensão de eventos ocorridos (e.g. acidentes)
- modelagem de sistemas (e.g. bactérias)
- estudo de problemas sem solução analítica (e.g. QCD)

Simulação: Outros Exemplos...



House's Head, Episódio 15 da quarta temporada.

Evolução Temporal (Dinâmica)

É o que **caracteriza** uma simulação.

Sistema **evolui** no tempo, tem **vida própria!**

Realizamos **medidas**, analisamos **dados**

Evolução Temporal (Dinâmica)

É o que **caracteriza** uma simulação.

Sistema **evolui** no tempo, tem **vida própria!**

Realizamos **medidas**, analisamos **dados**

Regra de evolução (dinâmica) pode ser **clássica** ou mesmo **quântica**. Sistema real, com dinâmica conhecida, em **condições fictícias** (exemplos: dinâmica molecular, Gedankenexperiment)

Evolução Temporal (Dinâmica)

É o que **caracteriza** uma simulação.

Sistema **evolui** no tempo, tem **vida própria!**

Realizamos **medidas**, analisamos **dados**

Regra de evolução (dinâmica) pode ser **clássica** ou mesmo **quântica**. Sistema real, com dinâmica conhecida, em **condições fictícias** (exemplos: dinâmica molecular, Gedankenexperiment)

Casos em que não há formulação física: **Sistema fictício**
⇒ modelagem (**in silico**)

Evolução Temporal (Dinâmica)

É o que **caracteriza** uma simulação.

Sistema **evolui** no tempo, tem **vida própria!**

Realizamos **medidas**, analisamos **dados**

Regra de evolução (dinâmica) pode ser **clássica** ou mesmo **quântica**. Sistema real, com dinâmica conhecida, em **condições fictícias** (exemplos: dinâmica molecular, Gedankenexperiment)

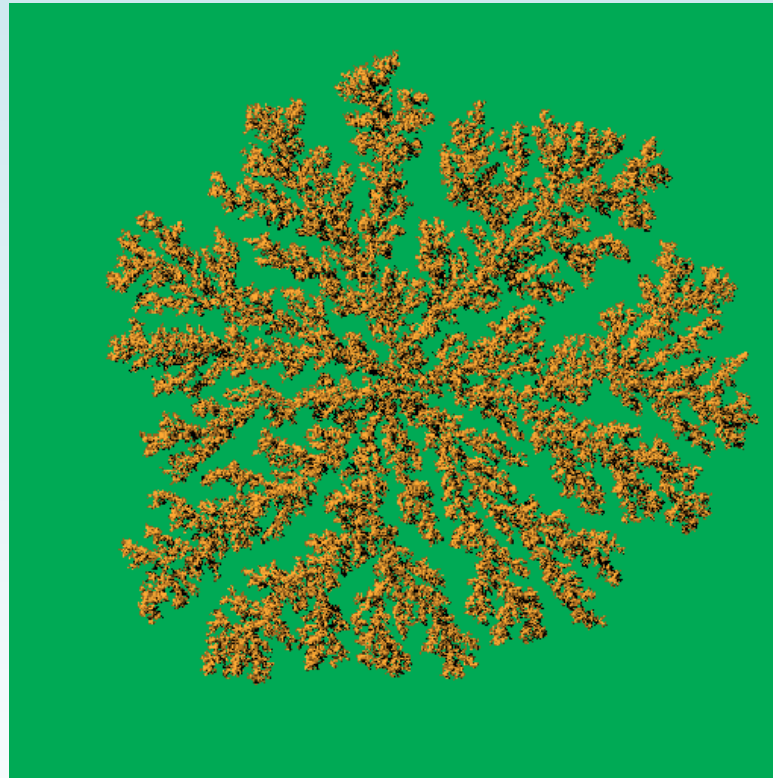
Casos em que não há formulação física: **Sistema fictício**
⇒ modelagem (**in silico**)

Ou: sistema real, **dinâmica fictícia** (**truque!**)

Autômato Celular

Células assumem valores finitos a cada instante de tempo.

Regras **locais** de transição \Rightarrow comportamento **emergente**,
solução numérica de equações diferenciais, geração de padrões
visuais interessantes, e.g. **agregação limitada por difusão**



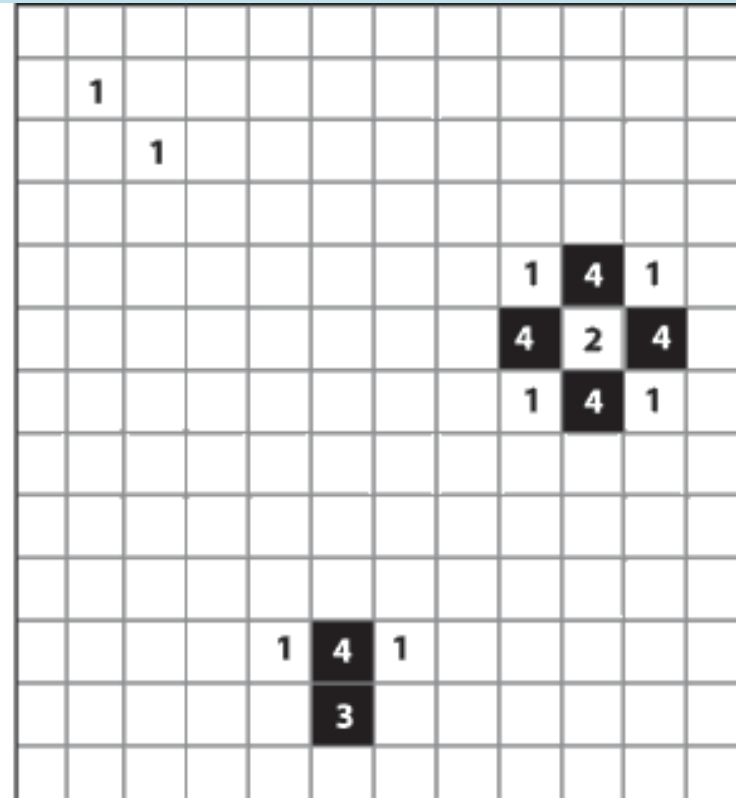
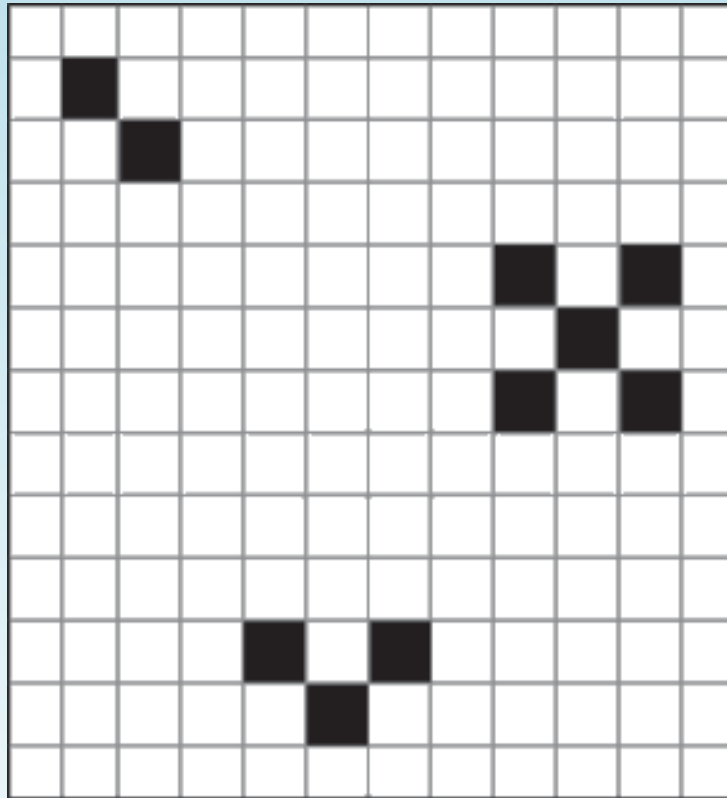
O Jogo da Vida

Autômatos **determinísticos**, com regras simples, ilustram o comportamento de diversos sistemas físicos (e.g. autômatos unidimensionais de Wolfram)

⇒ **Jogo da Vida**, proposto em 1970 por J. Conway, pode modelar a dinâmica populacional de formas simples de vida (e.g. colônias de **bactérias**).

Tabuleiro de células, com as regras:

- células com menos de 2 ou mais de 3 vizinhos **morrem**
- células com 2 ou 3 vizinhos vivos **sobrevivem**
- indivíduos **nascem** em células vazias com 3 vizinhos



<http://www.kyphilom.com/www/java/life/life.html>

Método de Monte Carlo

Sistemas estocásticos são simulados no computador usando um **gerador de números aleatórios**



⇒ tratamento teórico, com aspectos experimentais:

- dados, erros
- “medidas” no tempo



Gerador de Números Aleatórios

Anyone who considers arithmetical methods of producing random digits is, of course, in a state of sin.

John Von Neumann (1951)

gerador = **prescrição algébrica** que produz sequência de números r_i com distribuição desejada (em geral **uniforme em $[0,1]$**) dada uma **semente**.

Nota: esta sequência é **determinística**, a operação repetida a partir do mesmo ponto inicial gera a mesma sequência \Rightarrow números **pseudo-aleatórios**.

Exemplo: rand()

```
! inicializacao  
iseed = 2012  
call srand(iseed)  
! numero aleatorio  
r = rand( )
```

- semente: número inteiro
- a cada passo um novo inteiro é produzido e usado como semente para o passo sucessivo
- inteiros são convertidos em reais em $[0,1]$
- número aleatório em $[a, b]$: $a + \text{rand}() * (b-a)$

Método Congruencial Linear

$$i_{n+1} = (a i_n + c) \bmod m$$

$$r_{n+1} = \frac{\text{dble}(i_{n+1})}{\text{dble}(m)}$$

onde a , c e m são números inteiros fixos.

Para um gerador com período longo é necessário m muito grande.

Nota: m pode ser maior do que o maior inteiro que pode ser armazenado no computador. Nestes casos resolve-se o problema fatorizando m .

Características de um bom gerador

- distribuição dos r_i é uniforme \Rightarrow testes
- período muito maior do que o comprimento da sequência usada na simulação
- possível armazenar a cada momento a semente associada a um número da sequência
- sequência produzida a partir de uma semente é a mesma em computadores diferentes
- tempo para geração dos r_i é o menor possível

Exercícios

Como sortear uma variável que assume dois valores com igual probabilidade (cara ou coroa)?

E um número q de valores discretos entre 0 e 1?

Pintar um quadrado com coordenadas x, y tomando valores entre -1 e +1

Consegue pintar um círculo?