FISICA COMPUTACIONAL

PRÁCTICA 3 - 2020

Entregar todos problemas 2 y 3 el 08/05/20 y los de posgrado el 6 también

1. Generadores de números aleatorios. Usar diferentes algoritmos de generación de números aleatorios con distribución uniforme (por ejemplo: `ran0`, `ran2` del Numerical Recipes, `MZRAN` de Marsaglia y Zaman, y el "Mersenne Twister"), para tener una secuencia con distribución: a) ley de potencias ($f(x) = x^{-2}$; $x \in [1, \infty]$) b) gaussiana ($f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}}$; $x \in [-\infty, \infty]$), c) exponencial ($f(x) = \frac{1}{\lambda} e^{-x/\lambda}$; $x \in [0, \infty]$). Verificar obteniendo el histograma en cada caso.

2. Caminatas al azar   entregar

   En una red cuadrada bidimensional implementar un algoritmo que realice una caminat al azar de n pasos. Iniciar la caminata en el sitio central de la red $R(0) = (0, 0)$.

   a) Hallar el desplazamiento cuadrático medio $\langle (R(n) - R(0))^2 \rangle$ en función del número de pasos n, promediando ($\langle \ldots \rangle$) sobre $N = 10^6$ realizaciones de la caminata. Se verifica la ley $\langle R^2 \rangle \sim n$?

   b) Subdividir la red en cuatro cuadrantes y contabilizar la cantidad de veces que el caminante termina en un dado cuadrante, comparar con el valor esperado $N/4$. Grafique estos resultados en función de n, comparando los resultados de distintos generadores (emplear como generadores de números al azar, el `ran2` del Numerical Recipes; el `MZRAN` y el "Mersenne Twister").

   c) Idem a) pero para una partícula real en 3 dimensiones (por ejemplo una molécula aromática que se difunde en una sala).

3. Integración de Monte Carlo.   entregar

   a) Escriba un programa que estime la integral de la función $f(x) = x^n$ en el intervalo $[0, 1]$ usando el método de Monte Carlo. Para el caso $n = 3$, estime la integral usando $N = 10 \times i, i = 1, 2, 3, ...$ evaluaciones de la función. Calcule la diferencia entre el valor exacto de integral, $I = 1/(n+1)$, y el obtenido usando el método de Monte Carlo, y grafique el valor absoluto de ésta en función de N (use escala logarítmica). El error debe "escalear" como $N^{-1/2}$.

   b) Modifique el programa del inciso anterior para calcular la misma integral, pero ahora utilizando "importance sampling", con la distribución de probabilidad

$p(x) = (k+1)\ x^k$, con $k < n$. Recuerde que puede obtener números aleatorios distribuidos de acuerdo a una ley de potencias, transformando números aleatorios, x, distribuidos uniformemente en el intervalo $[0,1]$, de la siguiente manera:

$$y = x^{\frac{1}{k+1}}.$$

Calcule la diferencia entre el valor exacto de integral, $I = 1/(n+1)$, y el obtenido usando el método de Monte Carlo con “importance sampling” para el caso $k = 2{,}3$ y grafique el valor absoluto de ésta (*i.e.* el error) en función de N. Compare con los resultados del inciso anterior (en la misma gráfica).

4. La Hiperesfera. entregar posgrado

Calcular numéricamente el volumen $V(n)$ de una esfera n-dimensional de radio 1, integrando la función $f(x_1, \ldots, x_{n-1}) = 2\sqrt{1 - \sum_i^{n-1} x_i^2}$, sobre la esfera ($n$-1)-dimensional de los siguientes modos:

a) Utilizando, para n=2, 3 y 4, el método del trapecio, generalizado a n dimensiones. Elija una cantidad de puntos, $Np = 2^{24}$, y manteniéndolo fijo, grafique el error relativo de la integral versus n. Encuentra la dependencia esperada?

b) Utilizando el método de Monte Carlo. Éste debe funcionar hasta al menos $n = 100$ (dando el valor correcto al 1 por mil de error en unos pocos minutos de CPU). Observe que el volumen de la hiperesfera rápidamente se hace mucho menor que el del hipercubo (una distribución uniforme muestrearía el hipercubo, por lo tanto, arrojaría casi todos los puntos fuera del dominio de integración). Además tenga en cuenta que para la distribución Gaussiana unidimensional: $\langle x^2 \rangle = \sigma^2$.

Nota: el resultado analítico para n par es: $V(n) = \pi^{n/2}/(n/2)!$; y para n impar es $V(n) = \pi^{\frac{n-1}{2}} 2^n (\frac{n-1}{2})!/n!$. Para $n = 100$ da: $V(100) = 2{,}3682... \times 10^{-40}$.