Simulações Computacionais de Sistemas Complexos

Thadeu Penna

Instituto de Física
Universidade Federal Fluminense
tjpp@if.uff.br

V Escola do CBPF, 2004

Aula III

1. Aula I

Aula III

Universidade Federal Fluminense

Aula III

1. Aula I
2. Aula II
3. Testes de Números Aleatórios
   - Integração
   - Rejeição
   - Método da Transformação

Aula III

Universidade Federal Fluminense

Aula III

Universidade Federal Fluminense

Tabela Verdade

Operações Booleanas

	AND	OR	XOR
00	0	0	0
01	0	1	1
10	0	1	1
11	1	1	0

LCG

Operações Booleanas

LCG

Operações Booleanas

Da forma

$$x(n) = (a * x(n-1) + b) \mod M$$

LCG

Operações Booleanas

Da forma

$$x(n) = (a * x(n-1) + b) \mod M$$

com valores especiais para a e M

LCG

Operações Booleanas

Da forma

$$x(n) = (a * x(n-1) + b) \mod M$$

com valores especiais para a e M
Exemplos: $a = 16807$ (Park e Muller),65539 (IBM RANDU), $69621, 1103515245$ e $M = 2^{31} - 1$

LCG

Operações Booleanas

Da forma

$$x(n) = (a * x(n-1) + b) \mod M$$

com valores especiais para a e M

Exemplos: $a = 16807$ (Park e Muller),65539 (IBM RANDU), 69621, 1103515245 e $M = 2^{31} - 1$

Para 64 bits $a = 13^{13}$,44485709377909

LCG

Operações Booleanas

Da forma

$$x(n) = (a * x(n-1) + b) \mod M$$

com valores especiais para a e M

Exemplos: $a = 16807$ (Park e Muller),65539 (IBM RANDU), $69621, 1103515245$ e $M = 2^{31} - 1$

Para 64 bits $a = 13^{13}$,44485709377909

Rápidos e gastam pouca memória

Universidade Federal Fluminense

Outros Geradores

Outros Geradores

- Recursivos Múltiplos $x_n = (a_1 x_{n-1} + a_2 x_{n-2}) \mod m$ com $a_1 = 271828183$, $a_2 = 314159269$ e $m = 2^{31} - 1$.

Universidade Federal Fluminense

Outros Geradores

Outros Geradores

- Recursivos Múltiplos $x_n = (a_1 x_{n-1} + a_2 x_{n-2}) \mod m$ com $a_1 = 271828183$, $a_2 = 314159269$ e $m = 2^{31} - 1$.
- Kirkpatrick and Stoll $x_n = x_{n-103} \otimes x_{n-250}$

Outros Geradores

Outros Geradores

- Recursivos Múltiplos $x_n = (a_1 x_{n-1} + a_2 x_{n-2}) \mod m$ com $a_1 = 271828183$, $a_2 = 314159269$ e $m = 2^{31} - 1$.
- Kirkpatrick and Stoll $x_n = x_{n-103} \otimes x_{n-250}$
- RANLUX (período de 10^{171})

Outros Geradores

Outros Geradores

- Recursivos Múltiplos $x_n = (a_1 x_{n-1} + a_2 x_{n-2}) \mod m$ com $a_1 = 271828183$, $a_2 = 314159269$ e $m = 2^{31} - 1$.
- Kirkpatrick and Stoll $x_n = x_{n-103} \otimes x_{n-250}$
- RANLUX (período de 10^{171})
- Tausworthe $x_n = (s1_n \otimes s2_n \otimes s3_n)$, com três números embaralhados com $\otimes$.

Universidade Federal Fluminense

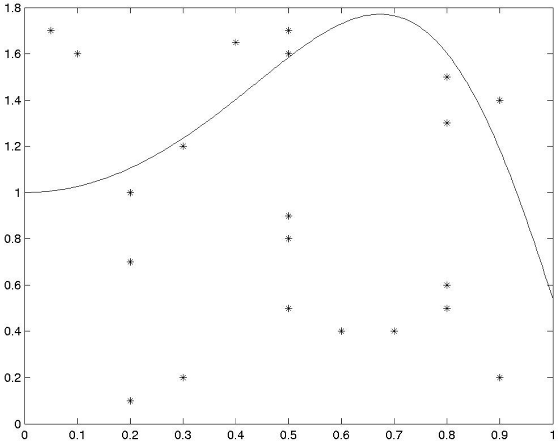
Outros Geradores

Outros Geradores

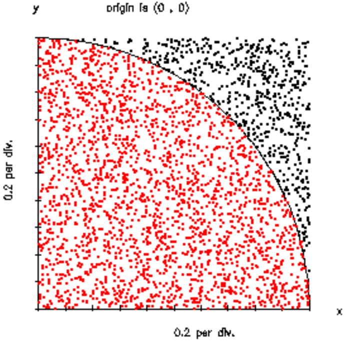
- Recursivos Múltiplos $x_n = (a_1 x_{n-1} + a_2 x_{n-2}) \mod m$ com $a_1 = 271828183$, $a_2 = 314159269$ e $m = 2^{31} - 1$.
- Kirkpatrick and Stoll $x_n = x_{n-103} \otimes x_{n-250}$
- RANLUX (período de 10^{171})
- Tausworthe $x_n = (s1_n \otimes s2_n \otimes s3_n)$, com três números embaralhados com $\otimes$.
- Lagged Fibonacci $r_n = r_{n-A} \otimes r_{n-B} \otimes r_{n-C} \otimes r_{n-D}$ com $A = 471, B = 1586, C = 6988, D = 9689$.

Universidade Federal Fluminense

Método de Monte Carlo

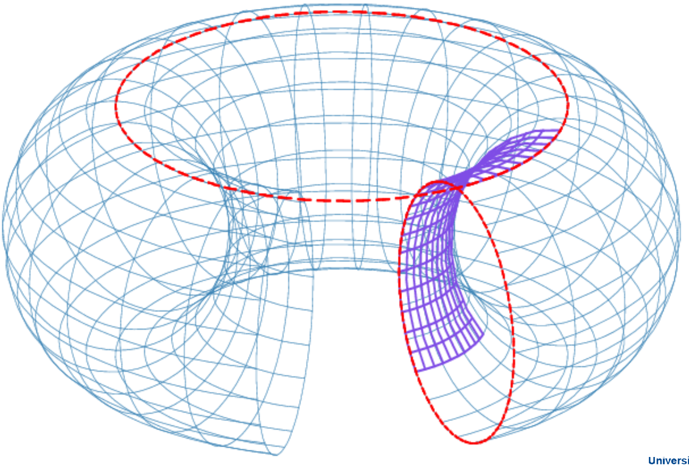


Cálculo de Pi



Prob: Calcule o volume de uma esfera de raio unitário para $d = 2..10$ dimensões.

Volume do Torus Cortado

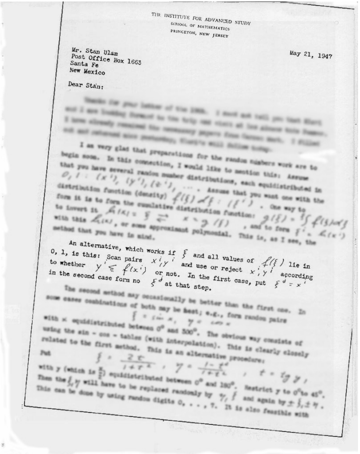


Universidade Federal Fluminense

Rejeição por von Neumann

Universidade Federal Fluminense

Rejeição por von Neumann



THE INSTITUTE FOR ADVANCED STUDY
SCHOOL OF MATHEMATICS
PRINCETON, NEW JERSEY

Mr. Stan Ulam
Post Office Box 1663
Santa Fe
New Mexico

May 21, 1947

Dear Stan:

I am very glad that preparations for the random numbers work are to begin soon. In this connection, I would like to mention this: Assume that you have several random number distributions, each equidistributed in 0, 1: (x^i), (y^i), (z^i), ... Assume that you want one with the distribution function (density) $f(\xi)d\xi$: (ξ^i). One way to form it is to form the cumulative distribution function: $g(\xi) = \int^{\xi} f(\xi)d\xi$ to invert it $h(x) = \xi \rightleftarrows x = g(\xi)$, and to form $\xi^i = h(x^i)$ with this $h(x)$, or some approximant polynomial. This is, as I see, the method that you have in mind.

An alternative, which works if ξ and all values of $f(\xi)$ lie in 0, 1, is this: Scan pairs x^i, y^i and use or reject x^i, y^i according to whether $y^i \leq f(x^i)$ or not. In the first case, put $\xi^j = x^i$ in the second case form no ξ^j at that step.

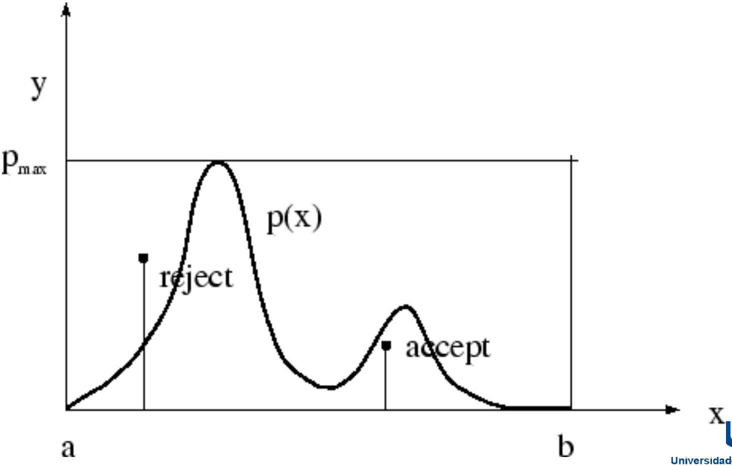
The second method may occasionally be better than the first one. In some cases combinations of both may be best; e.g., form random pairs $\xi = \sin\alpha$, $\eta = \cos\alpha$ with α equidistributed between 0° and 360°. The obvious way consists of using the sin - cos - tables (with interpolation). This is clearly closely related to the first method. This is an alternative procedure: Put

$$\xi = \frac{2t}{1+t^2}, \quad \eta = \frac{1-t^2}{1+t^2}, \quad t = tg\, \gamma,$$

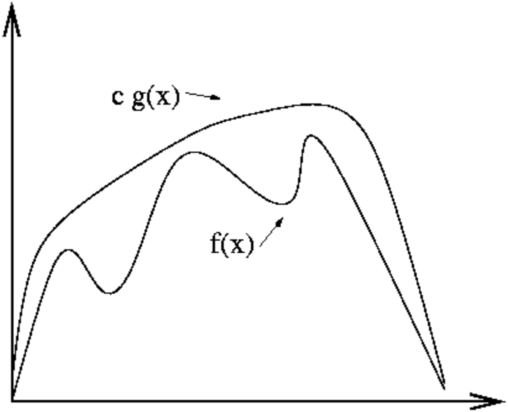
with γ (which is $\frac{\alpha}{2}$) equidistributed between 0° and 180°. Restrict γ to 0° to 45°. Then the ξ, η will have to be replaced randomly by η, ξ and again by $\pm\xi, \pm\eta$. This can be done by using random digits 0, . . . , 7. It is also feasible with

Universidade Federal Fluminense

Método da Rejeição



Método da Rejeição Otimizado



Definição

Transformação

Seja $p(x)$ a distribuição desejada, com $y = P(x) = \int p(x')dx'$.
$P^{-1}(y)$ é conhecida.
Se y é aleatório (uniforme), então
$x = P^{-1}(y)$ é distribuida segundo $p(x)$.

Exemplos: $p(x) = e^{-x}$, $y = e^{-x}$, $x = -\ln(y)$

Universidade Federal Fluminense

Definição

Transformação

Seja $p(x)$ a distribuição desejada, com $y = P(x) = \int p(x')dx'$.
$P^{-1}(y)$ é conhecida.
Se y é aleatório (uniforme), então
$x = P^{-1}(y)$ é distribuida segundo $p(x)$.

Exemplos: $p(x) = e^{-x}$, $y = e^{-x}$, $x = -\ln(y)$

Prob: Adapte o método da transformação para a Lorentziana. Teste-o.

Box-Muller

Gerando Gaussianas

$$
\begin{aligned}
z_1 &= \sqrt{-2\ln x_1}\cos(2\pi x_2) \\
z_2 &= \sqrt{-2\ln x_1}\sin(2\pi x_2)
\end{aligned}
$$

Box-Muller

Gerando Gaussianas

$$
\begin{aligned}
z_1 &= \sqrt{-2\ln x_1}\cos(2\pi x_2) \\
z_2 &= \sqrt{-2\ln x_1}\sin(2\pi x_2)
\end{aligned}
$$

Prob: Implemente o método de Box-Muller e compare-o com o método da rejeição (tempo e convergência)

Caminhada Aleatória

A cada intervalo de tempo, o caminhante dá um passo de tamanho unitário.
4 direções possíveis: $\mathcal{N}, \mathcal{S}, \mathcal{L}, \mathcal{O}$

Caminhada Aleatória

A cada intervalo de tempo, o caminhante dá um passo de tamanho unitário.

4 direções possíveis: $\mathcal{N}, \mathcal{S}, \mathcal{L}, \mathcal{O}$

Caminhada aleatória em duas dimensões

Universidade Federal Fluminense

Caminhada Aleatória

A cada intervalo de tempo, o caminhante dá um passo de tamanho unitário.

4 direções possíveis: $\mathcal{N}, \mathcal{S}, \mathcal{L}, \mathcal{O}$

Caminhada aleatória em duas dimensões

Podemos calcular médias em diversas configurações.

Podemos dividir o espaço em blocos e verificar a ocupação.

Difusão de 10 caminhantes

Caminhada Aleatória

A cada intervalo de tempo, o caminhante dá um passo de tamanho unitário.

4 direções possíveis: $\mathcal{N}, \mathcal{S}, \mathcal{L}, \mathcal{O}$

Caminhada aleatória em duas dimensões

Podemos calcular médias em diversas configurações.

Podemos dividir o espaço em blocos e verificar a ocupação.

Difusão de 10 caminhantes

Microesferas de poliestireno em suspensão: 2,1 e 0.5 mícrons.

Sistema Real 10s

Universidade Federal Fluminense

Caminhada Aleatória

A cada intervalo de tempo, o caminhante dá um passo de tamanho unitário.
4 direções possíveis: $\mathcal{N}, \mathcal{S}, \mathcal{L}, \mathcal{O}$
Caminhada aleatória em duas dimensões
Podemos calcular médias em diversas configurações.
Podemos dividir o espaço em blocos e verificar a ocupação.
Difusão de 10 caminhantes
Microesferas de poliestireno em suspensão: 2,1 e 0.5 mícrons.
Sistema Real 10s
Comportamento do $< R >$ e $< R^2 >$ Lei de Einstein

Universidade Federal Fluminense

Percolação

- Rede $L \times L$

Percolação

- Rede $L \times L$
- Sítios ocupados com probabilidade p

Percolação

- Rede $L \times L$
- Sítios ocupados com probabilidade p
- p_c: Qual o menor p tal que a informação percorra a rede ?

Percolação

- Rede $L \times L$
- Sítios ocupados com probabilidade p
- p_c: Qual o menor p tal que a informação percorra a rede ?

Gerando a configuração inicial

Universidade Federal Fluminense

Percolação

- Rede $L \times L$
- Sítios ocupados com probabilidade p
- p_c: Qual o menor p tal que a informação percorra a rede ?

Checando a configuração

Percolação

- Rede $L \times L$
- Sítios ocupados com probabilidade p
- p_c: Qual o menor p tal que a informação percorra a rede ?

Burning

- Verdes: nunca queimaram

Burning

- Verdes: nunca queimaram
- Vermelhas: estão queimando (sítios ativos)

Burning

- Verdes: nunca queimaram
- Vermelhas: estão queimando (sítios ativos)
- Pretas: queimaram em algum instante anterior

Universidade Federal Fluminense

Burning

- Verdes: nunca queimaram
- Vermelhas: estão queimando (sítios ativos)
- Pretas: queimaram em algum instante anterior
- Queimarão no passo seguinte

Burning

- Verdes: nunca queimaram
- Vermelhas: estão queimando (sítios ativos)
- Pretas: queimaram em algum instante anterior
- Queimarão no passo seguinte

Burning em ação

Burning

- Verdes: nunca queimaram
- Vermelhas: estão queimando (sítios ativos)
- Pretas: queimaram em algum instante anterior
- Queimarão no passo seguinte

Identificando o cluster percolante

Universidade Federal Fluminense

Burning

- Verdes: nunca queimaram
- Vermelhas: estão queimando (sítios ativos)
- Pretas: queimaram em algum instante anterior
- Queimarão no passo seguinte