SISTEMAS ALEATÓRIOS

Random walks e parentes próximos

Sistemas aleatórios

Até agora: sistemas determinísticos

$\Rightarrow$ Equação diferencial + cc

- Agora: sistemas estocásticos

$\Rightarrow$ Grande número de graus de liberdade

$\Rightarrow$ Descrição estatística

Líquido, spins, difusão

Suponho que já sabem:

Met Comp I

Décima Terceira Aula:
Números aleatórios
Geração de distribuições não-uniformes

Décima Quarta Aula:
Método de Monte-Carlo: Resolução de Integrais

Café com creme

1 gota de creme numa xícara de café

Como espalha?

~10^{23} moléculas de "creme"

~10^{23} equações de movimento

Método de Euler **Não !!!**

Café com creme

1 gota de creme numa xícara de café

Como espalha?

Modelo →

- **Random walk**

Do mais simples para o mais complicado ...

Random walk 1 dimensão

↓

Passo constante

Passo aleatório

Random walk 2 dimensões

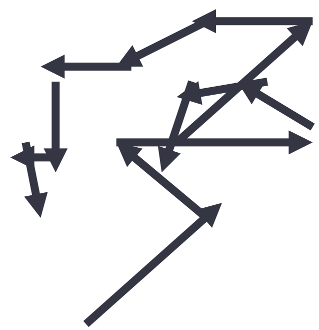
↓

Self-avoiding walks

Difusão

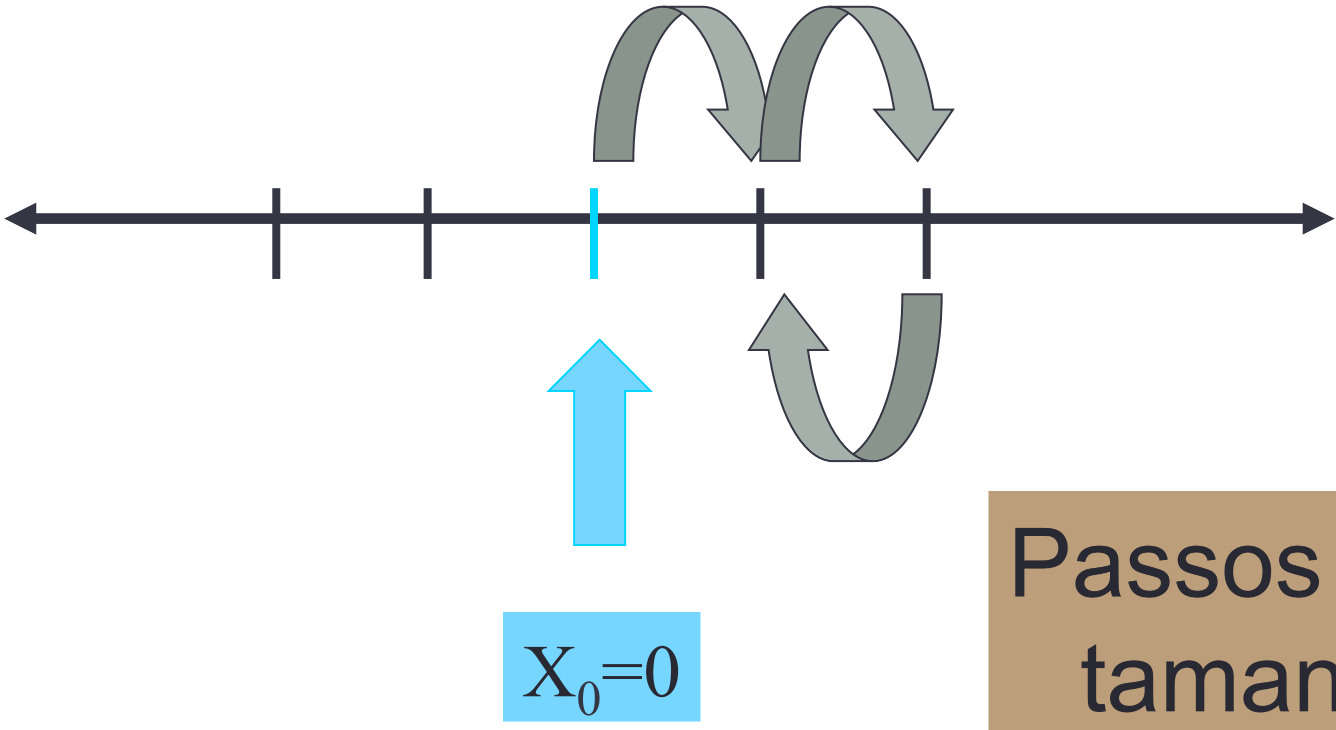
Random Walk – Passeio aleatório

Movimento browniano



difusão

Random Walk 1d

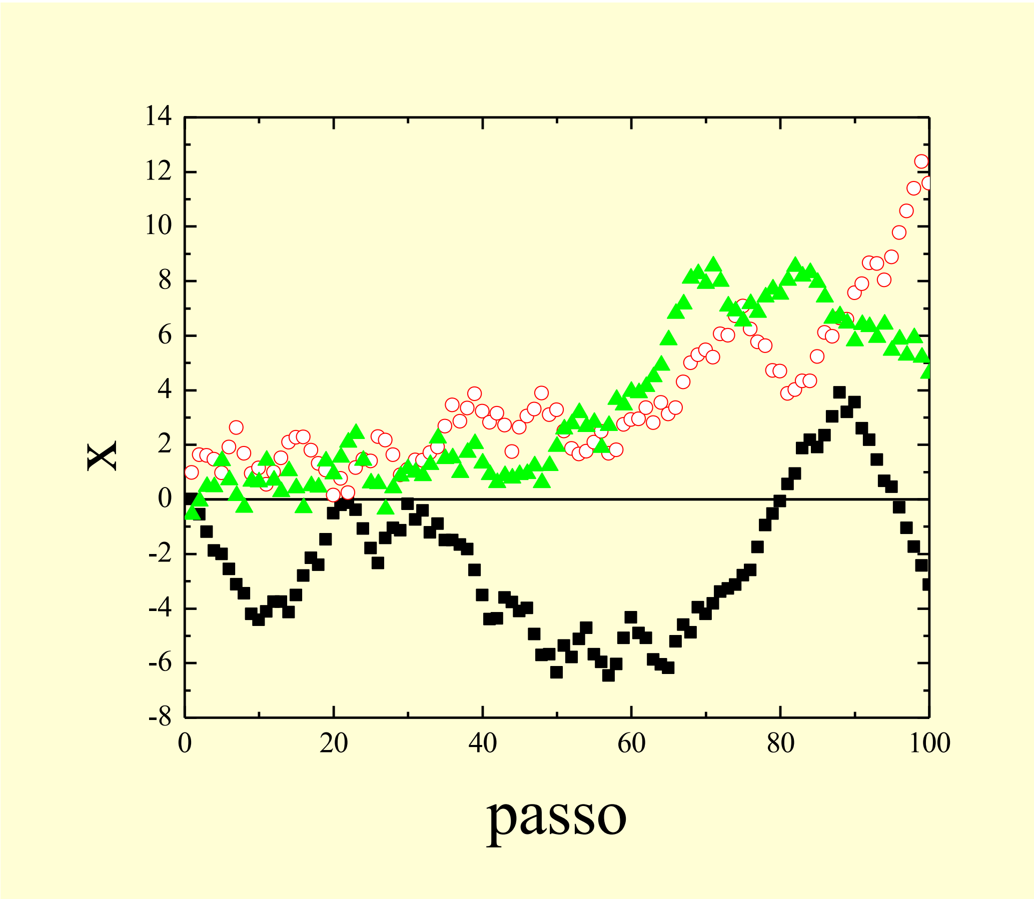


Passos de tamanho 1

Programa

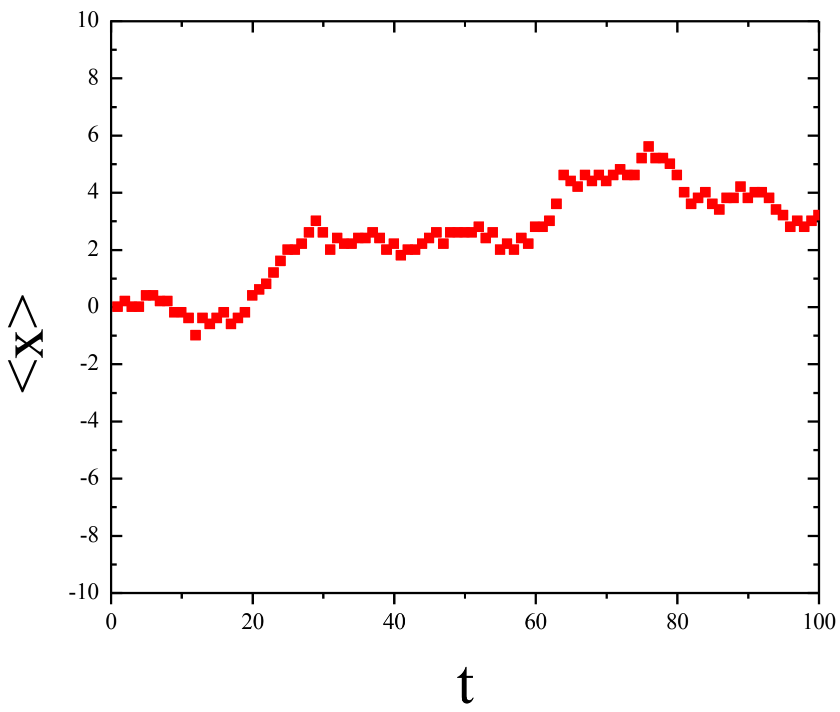
- x=0
- Para i=1 até Npassos
- r=random
- se (r<0.5) x=x+1
- se (r>=0.5) x=x-1
- $<x(i)>=<x(i)>+x$
- $<x^2(i)>=<x^2(i)>+x*x$

Random Walk 1d



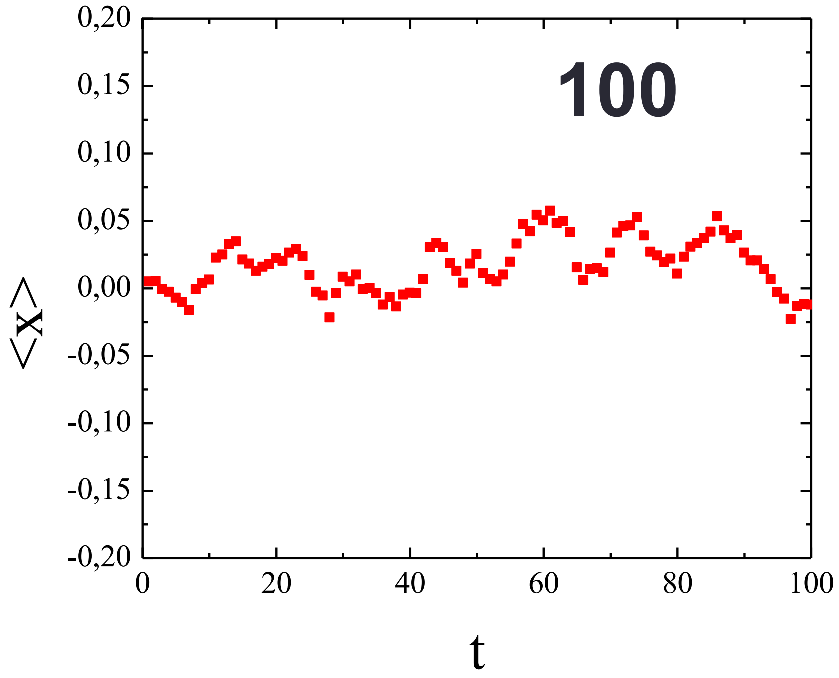
3 realizações
diferentes

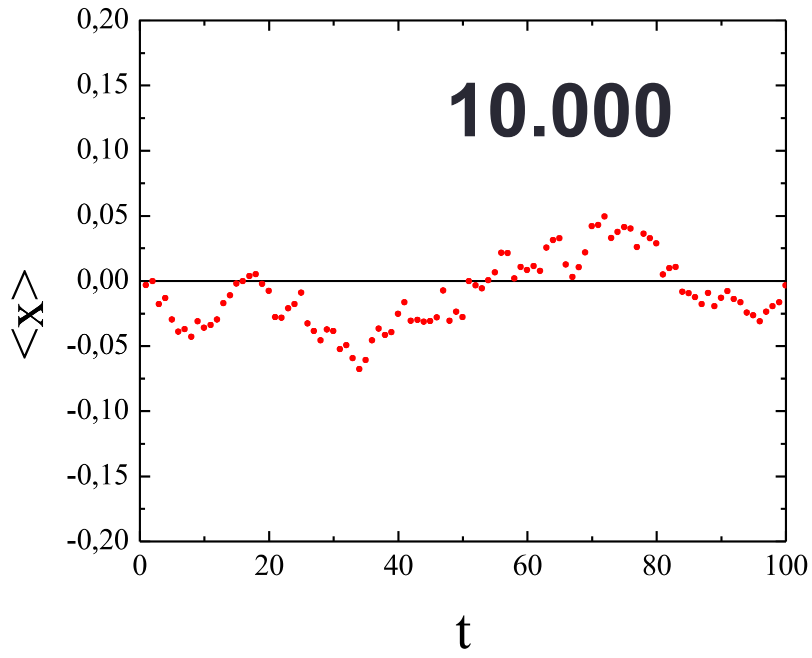
10 realizações diferentes



< > → Média sobre realizações

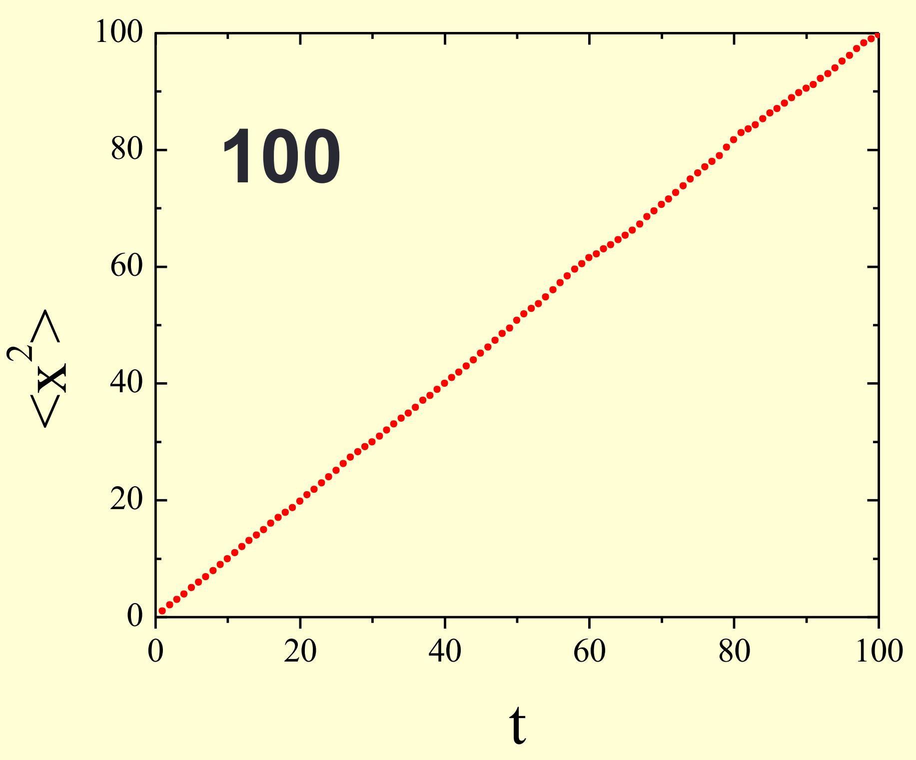
Aumentando o número de realizações





<x>~0 Flutuações!

Calculando $\langle x^2 \rangle$



$$\langle x^2 \rangle = 2Dt$$

Em d dimensões

$$\langle x^2 \rangle = 2dDt$$

Comparando com uma partícula livre

Random walk $\langle x^2 \rangle = 2Dt$

Mais devagar

Livre $x = x_0 + vt$ $\langle x^2 \rangle \sim t^2$

Difusão anômala

$$\text{Lim}_{\,t \to \infty} \langle x^2 \rangle \sim t^{\mu}$$

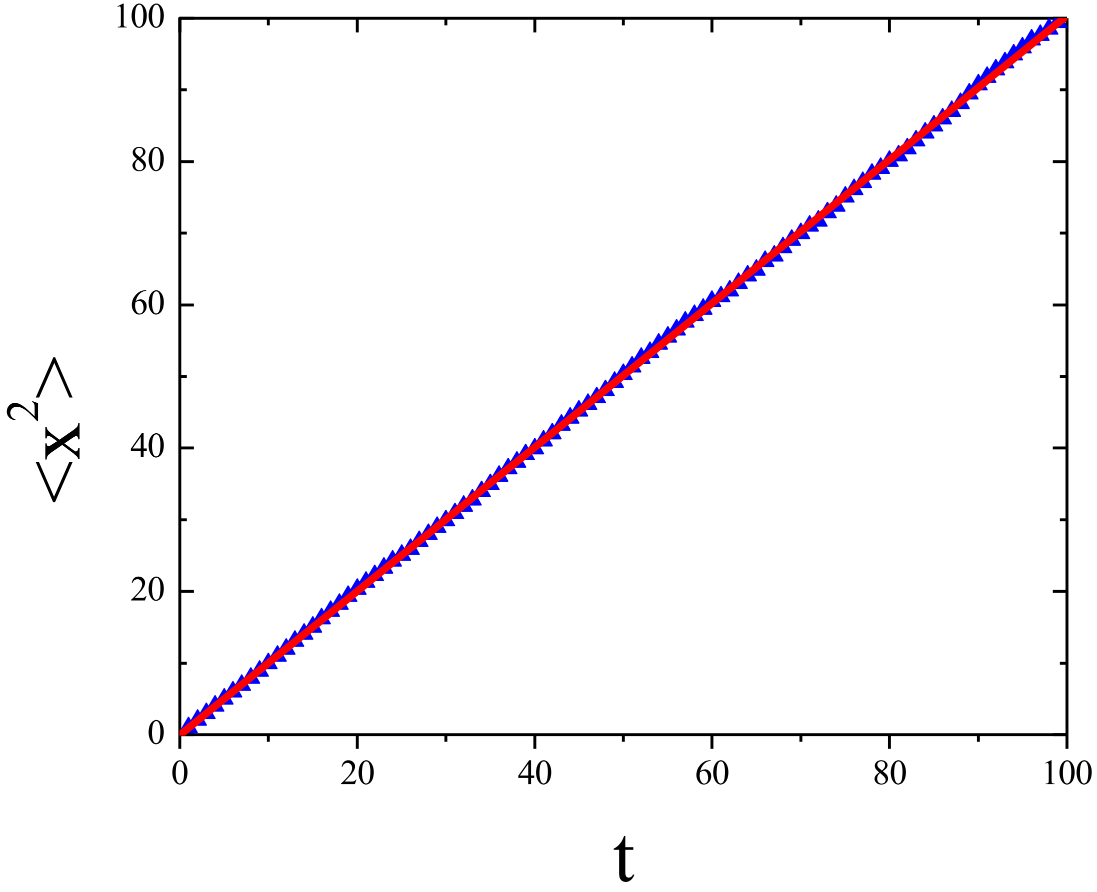
$0 < \mu < 1$ → subdifusão

$\mu = 1$ → difusão normal

$\mu > 1$ → Superdifusão

$\mu = 2$ Regime balístico

10.000 realizacões diferentes



D=1/2

Não é surpreendente

$$x_n = \sum_{i=1}^{n} s_i$$

Xn é a posição depois de n passos

S_i =+-1

Não é surpreendente

S_i =+-1

Com igual probabilidade

$<S_i>=0$

$$\langle x_n \rangle = \sum_{i=1}^{n} \langle s_i \rangle = 0$$

Fazendo o mesmo para x^2

$$x_n^{\ 2} = \sum_{i=1}^{n}\left(\sum_{j=1}^{n} s_i s_j\right)$$

Como os passos são independentes entre si

$S_i S_j = +-1$ com igual probabilidade para $i \neq j$

$\langle S_i S_j \rangle = 0$ para $i \neq j$

Para um número grande de rw

$$< x_n^2 >= \sum_{i=1}^{n} < s_i^2 > = n$$

Lembrando que $S_i^2=1$

como n=t

$$<x^2>=2Dt$$

com D=1/2

Desvio padrão de x²

$$\sigma = \sqrt{\left\langle \left(x_n^2 - \left\langle x_n^2 \right\rangle \right)^2 \right\rangle} = \sqrt{x_n^4 - \left\langle x_n^2 \right\rangle^2}$$

$$< x_n^{\ 4} >= \sum_{i,j,k,l=1}^{n} < s_i s_j s_k s_l >$$

Não nulo quando i,j,k e l são iguais ou quando são iguais aos pares

$$\sigma = \sqrt{\left\langle \left(x_n^2 - \left\langle x_n^2 \right\rangle\right)^2 \right\rangle} = \sqrt{x_n^4 - \left\langle x_n^2 \right\rangle^2}$$

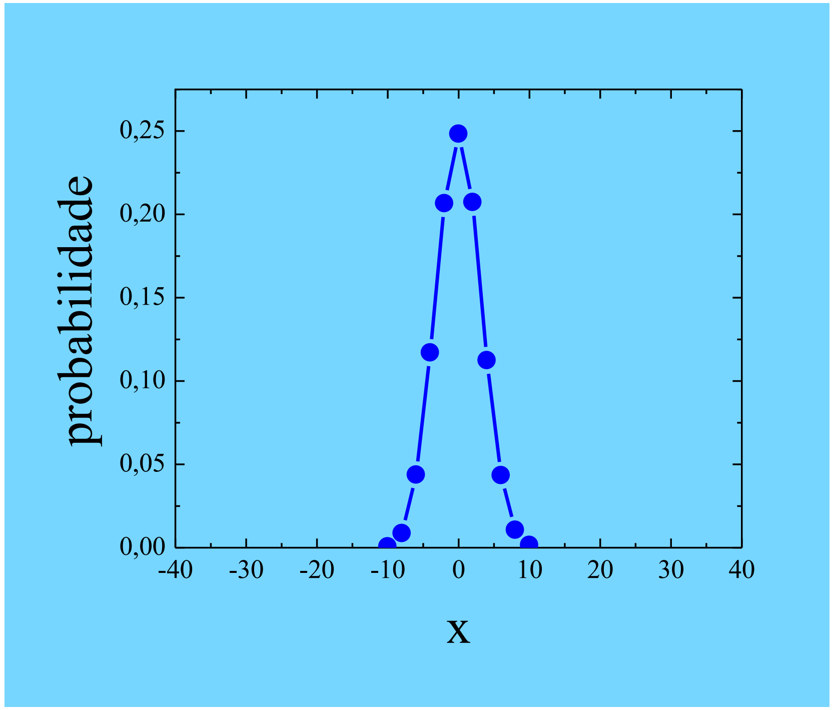
$$< x_n{}^4 >= \sum_{i=1}^{n} s_i^4 + 3\sum_{i=1}^{n}\left[s_i^2 \sum_{j\neq i} s_j^2\right] = 3n^2 - 2n$$

$$\sigma = \sqrt{2n^2 - 2n} \approx \sqrt{2}n$$

$$\boxed{\sigma \sim \left\langle x_n^2 \right\rangle \sim n}$$

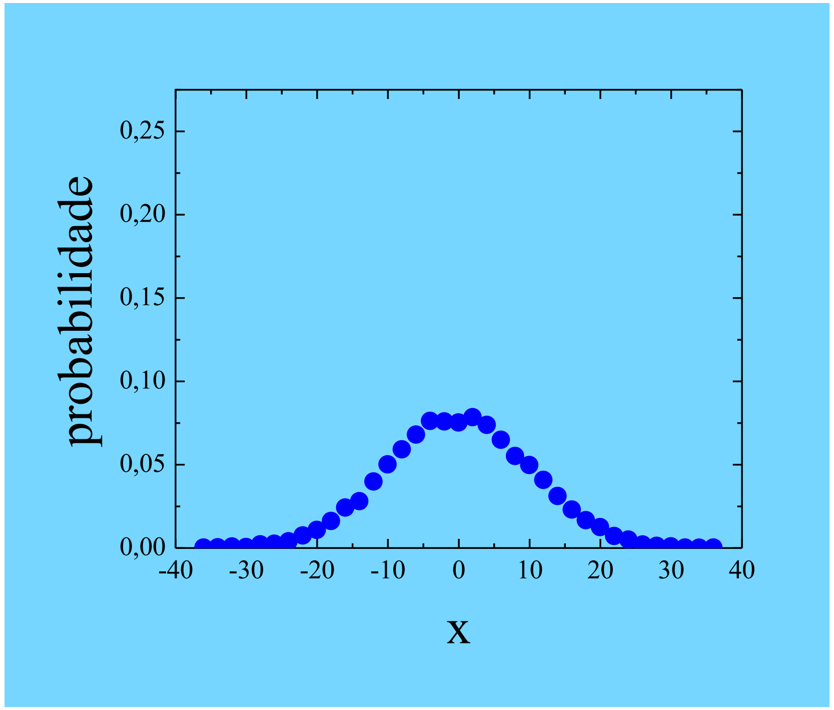
A separação entre dois andarilhos cresce com *n*

Histogramas



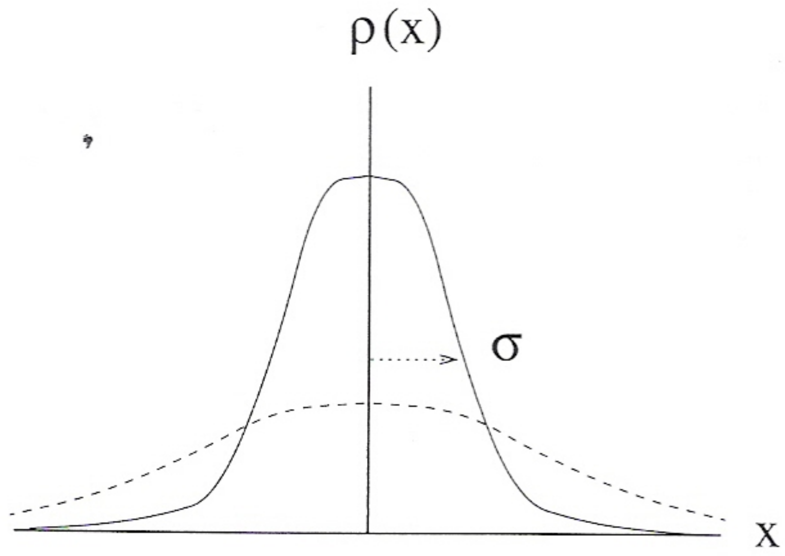
10.000 realizações
bin=2
t=10 passos

Histogramas



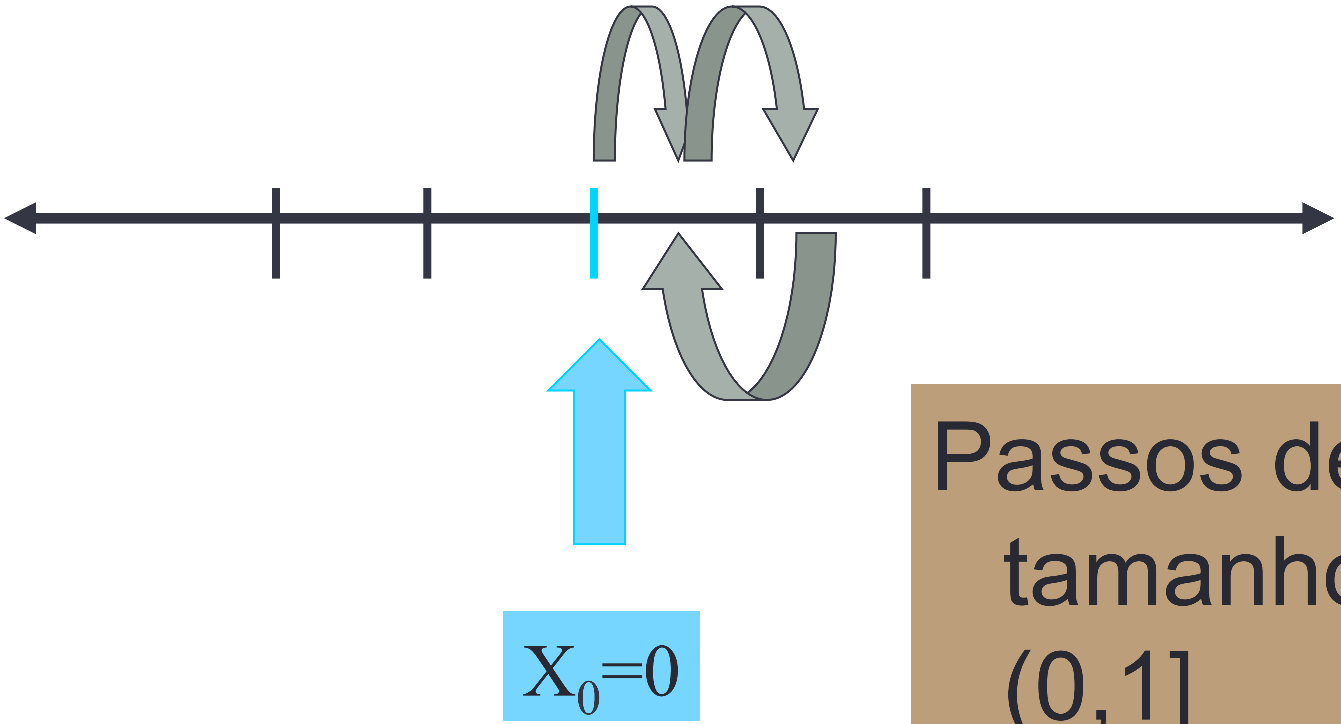
10.000 realizações
bin=2
t=100 passos

Difusão



Ainda hoje...

Tamanhos de passo aleatórios

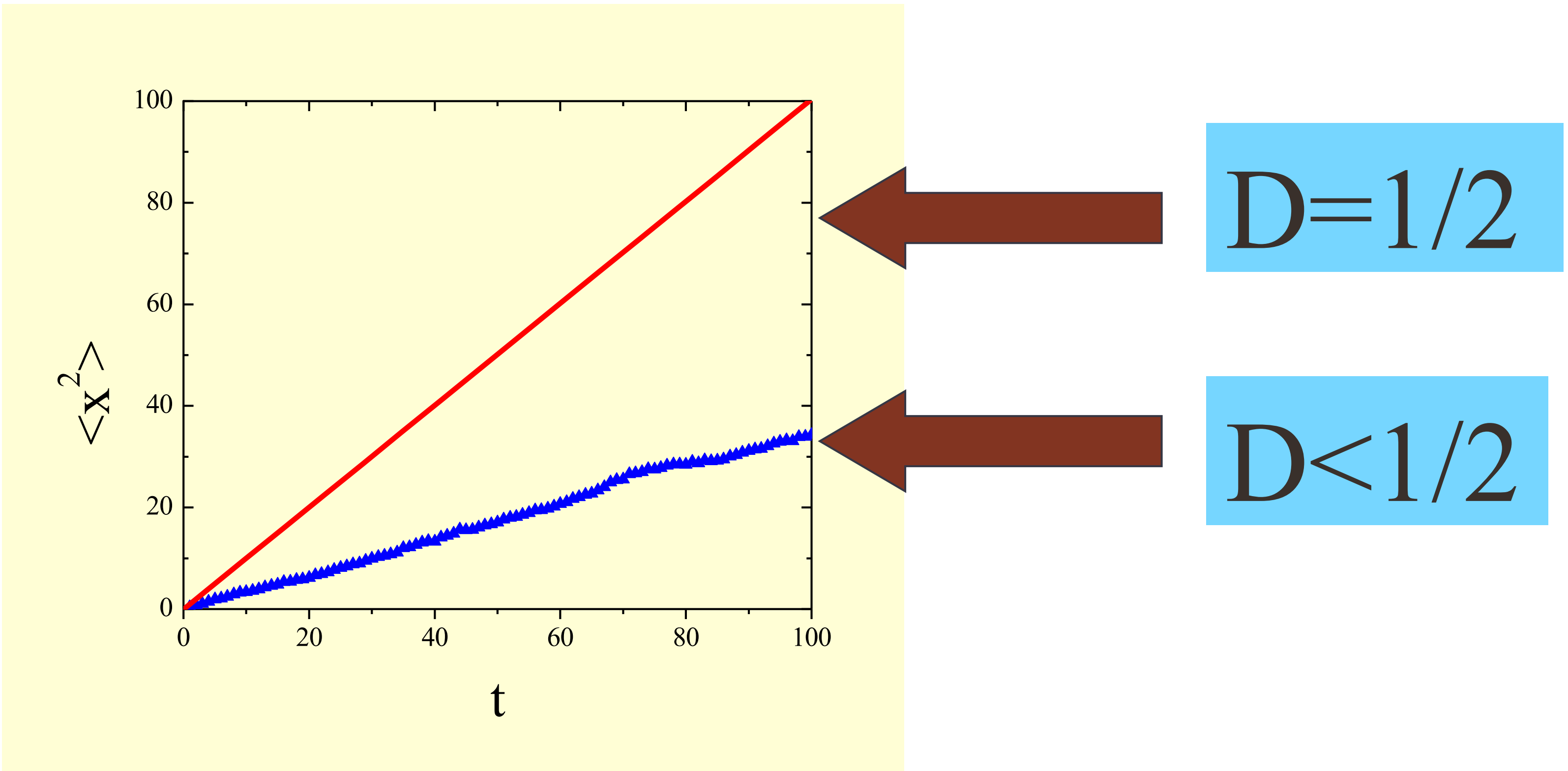


Passos de tamanho (0,1]

Programa

```
x=0.d0
Para i=1 até  Npassos
        r=random
        rb=random
        se (rb<0.5)   x=x+(1-r)
        se (rb>=0.5) x=x-(1-r)
   <x(i)>=<x(i)>+x
   <x2(i)>=<x2(i)>+x*x
```

500 realizações diferentes



Também não é surpreendente

$$x_n = \sum_{i=1}^{n} s_i$$

Xn é a posição depois de n passos

$-1 =< S_i =< 1$

Calculando x_n^2

$$x_n^2 = \sum_{i=1}^{n}\left(\sum_{j=1}^{n} s_i s_j\right)$$

Como os passos são independentes entre si

S_iS_j=+-(0,1) com igual probabilidade para i≠j

Para um número grande de rw

$$\sum_{i \neq j}^{n} s_i s_j = 0$$

Calculando x_n^2

$$< x_n^2 > = \sum_{i=1}^{n} < s_i^2 >$$

Lembrando que S_i^2 está distribuído uniformemente no intervalo (0,1]

$$< s_i^2 > = \int_0^1 y^2 P(y) dy = \int_0^1 y^2 dy = \frac{1}{3}$$

constante

Substituindo s_i^2

$$\langle x_n^2 \rangle = \sum_{i=1}^{n} \frac{1}{3} = \frac{n}{3}$$

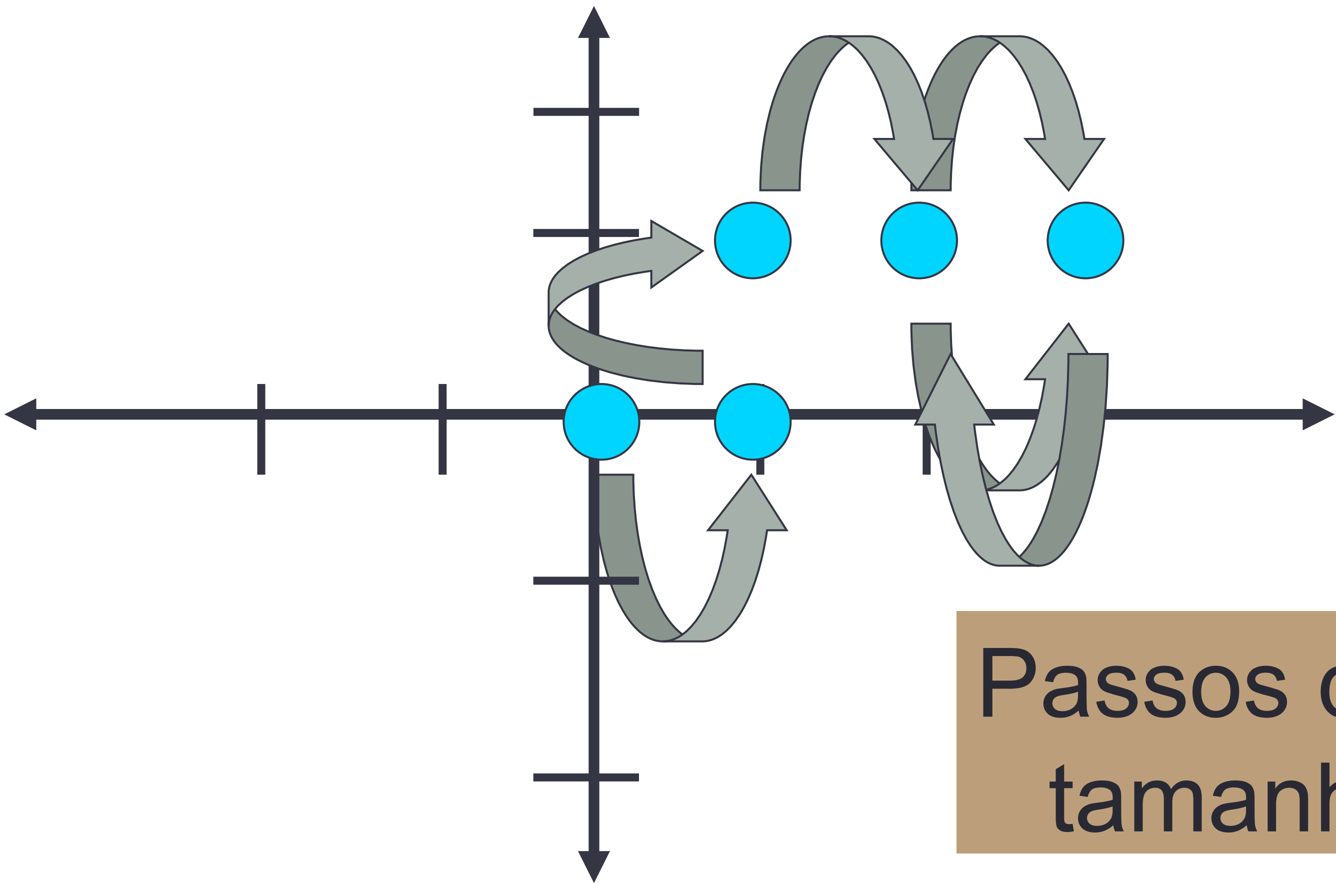
como n = t

$$\langle x^2 \rangle = 2Dt$$

$$D = \frac{1}{6}$$

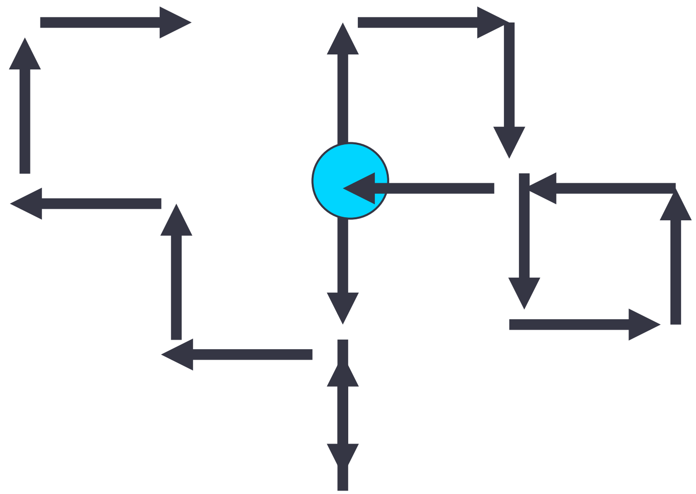
De acordo com o gráfico!

Random Walk 2d



Passos de tamanho 1

RandomWalk



Programa

- x=0, y=0
- Para i=1 até Npassos
- r=random
- rb=random
- se (rb<0.5)

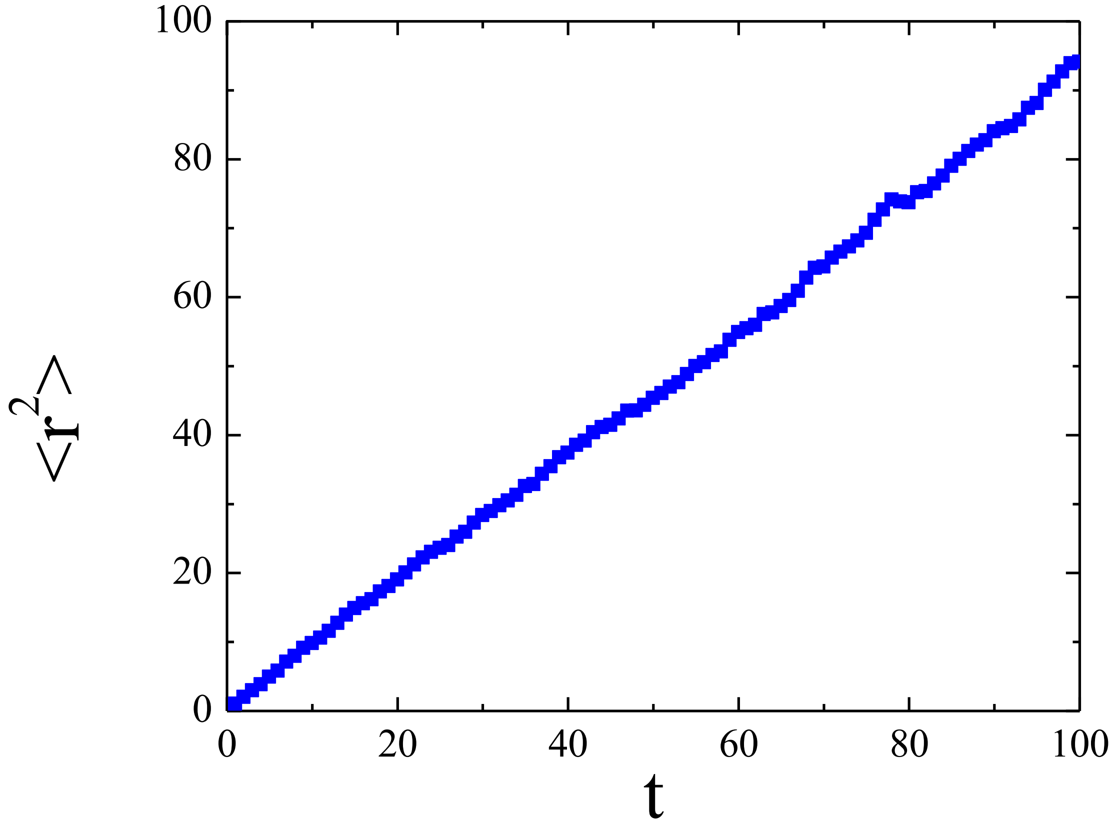
  se (r<0.5) x=x-1

  se (r>=0.5) x=x+1
-
-
- se (rb>=0.5)

  se (r<0.5) y=y-1

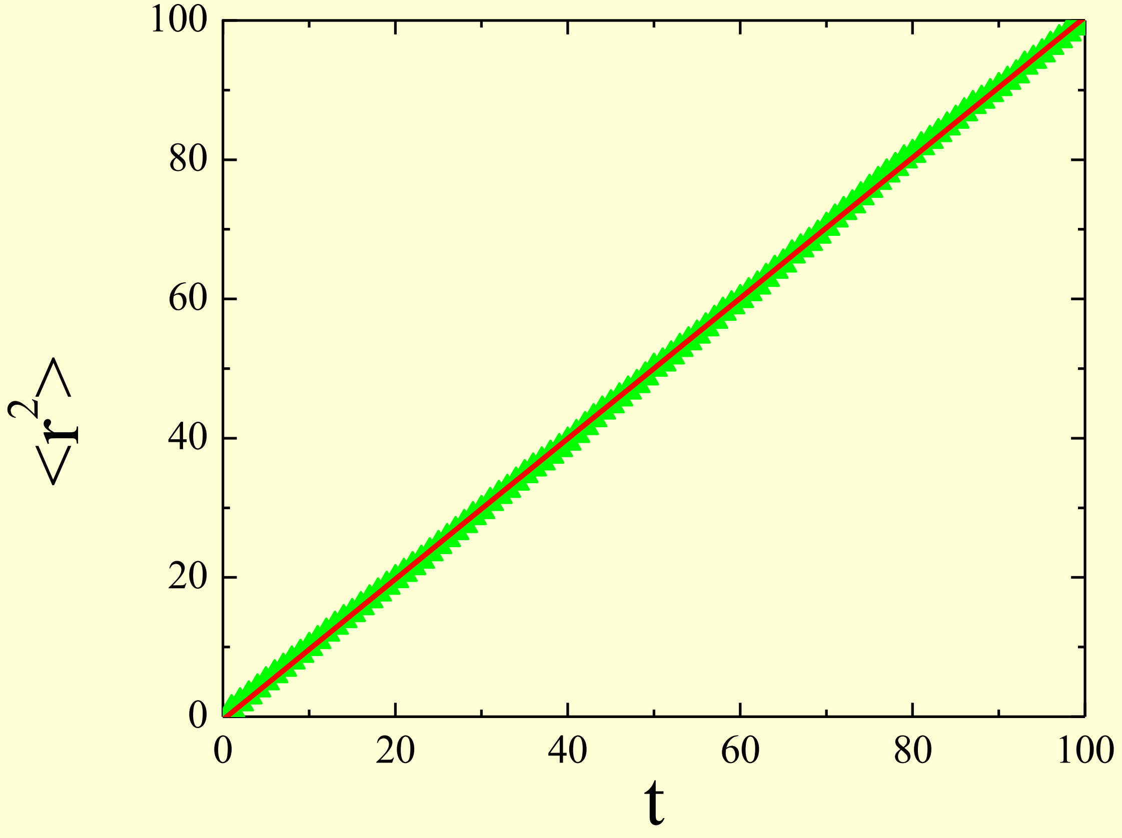
  se (r>=0.5) y=y+1
- <r(i)>=<r(i)>+sqrt(x*x+y*y)
- <r^2(i)>=<r^2(i)>+x*x+y*y

500 realizações diferentes



$$\langle x^2 \rangle \sim t$$

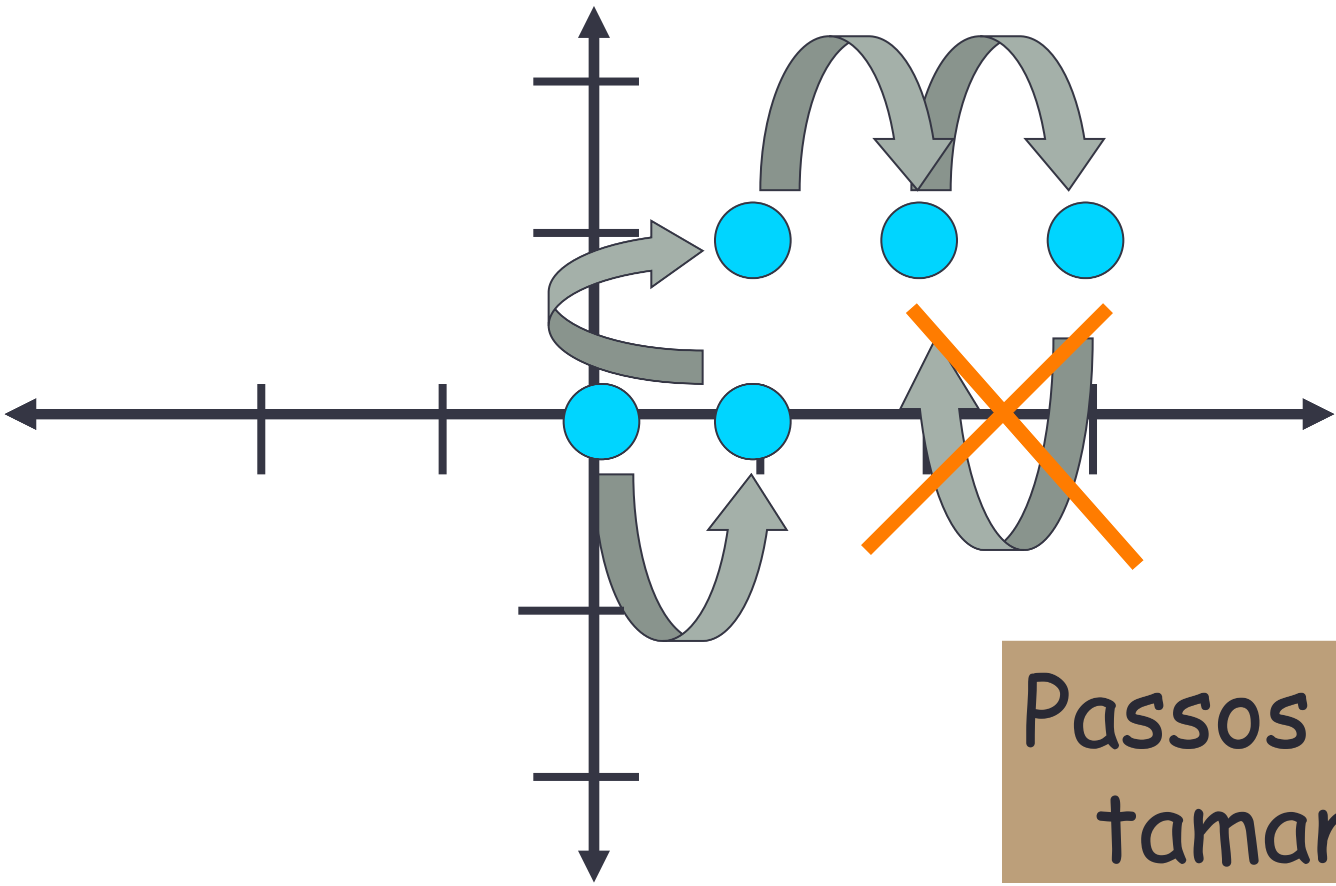
10.000 realizações diferentes



$$\langle x^2 \rangle = 2dDt$$

$$D = 1/6$$

Self-avoiding Walk - SAW



Passos de tamanho 1

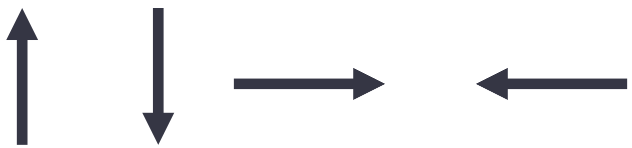
Self-avoiding Walk - SAW

Random walk: cada passo é completamente independente de todos os anteriores

Na natureza nem sempre é assim: polímeros

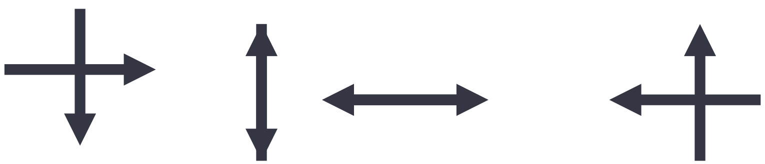
SAW

Blocos de construção

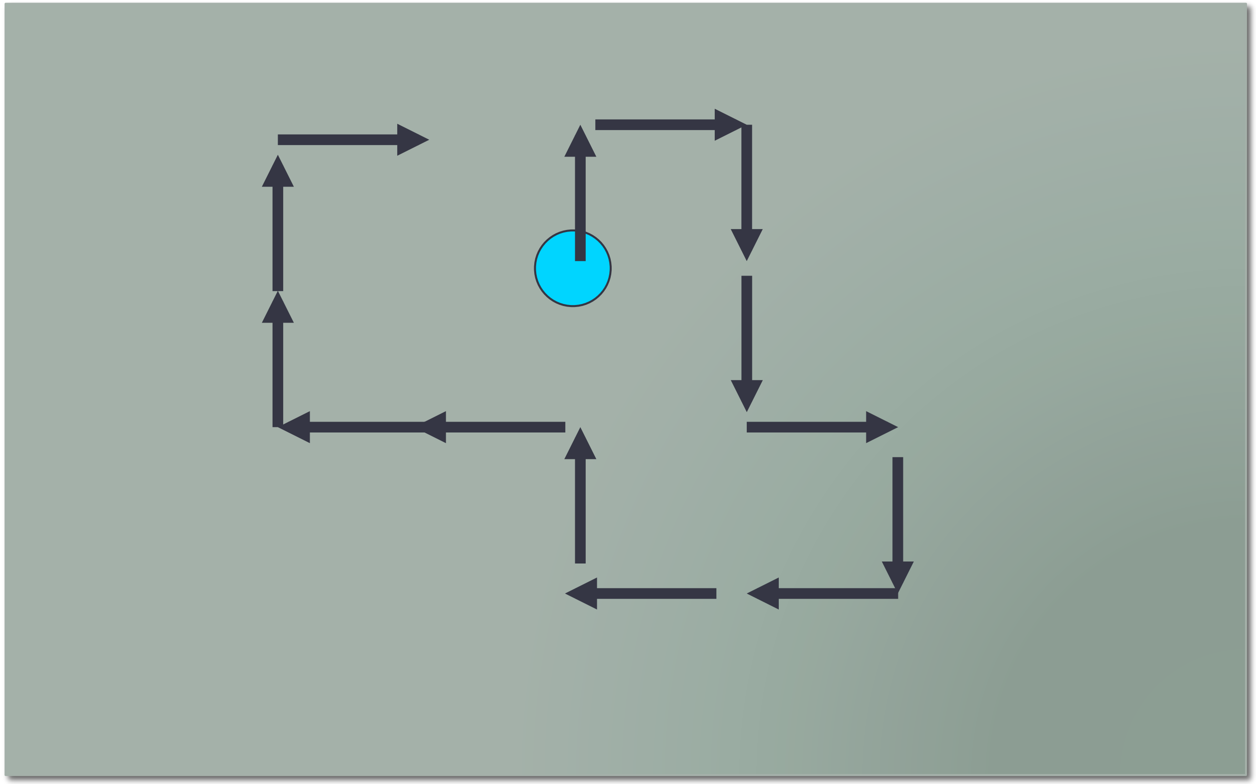


Iguais a RW

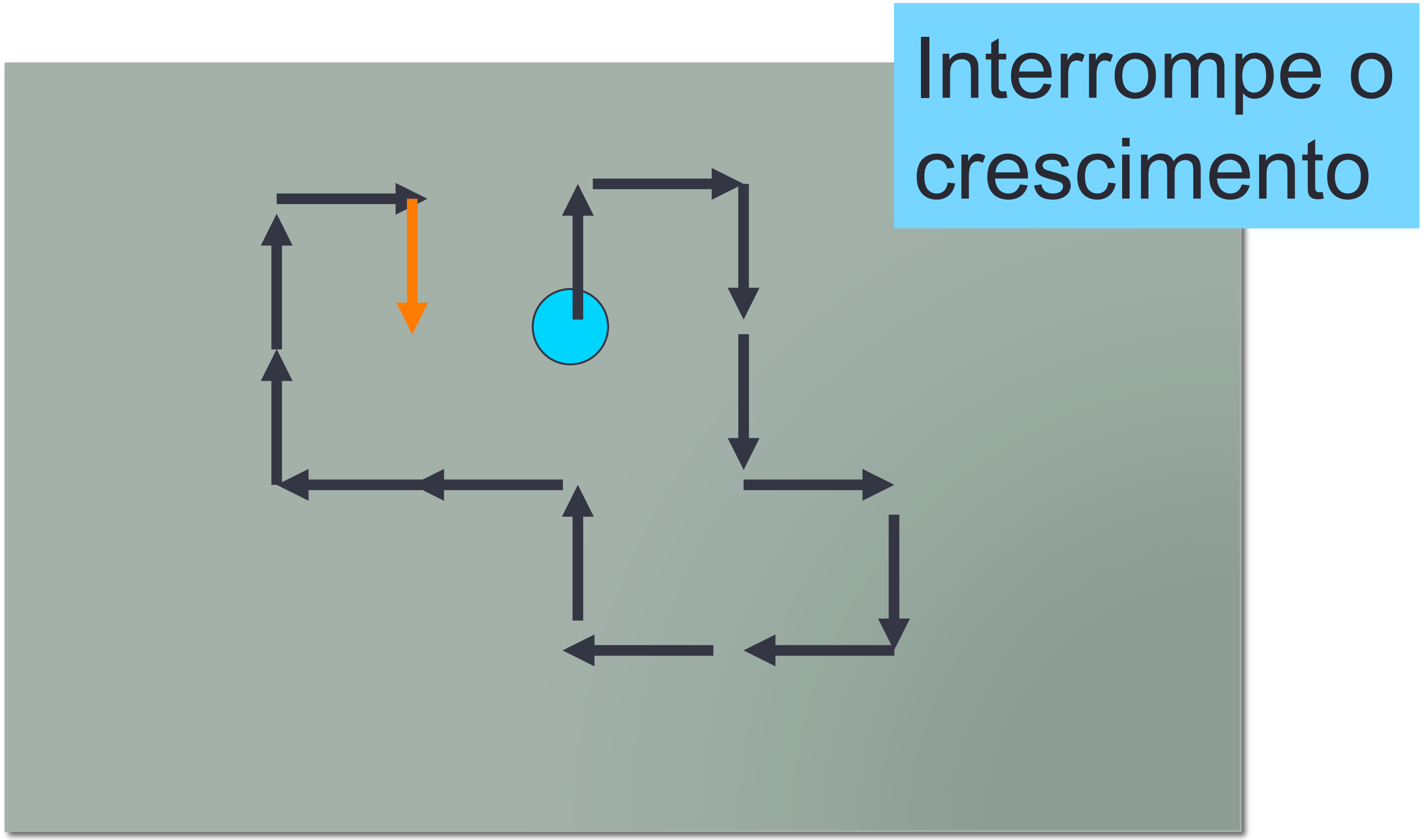
Porém: não é permitido superpor



Self-avoiding Walk - SAW



Self-avoiding Walk - SAW

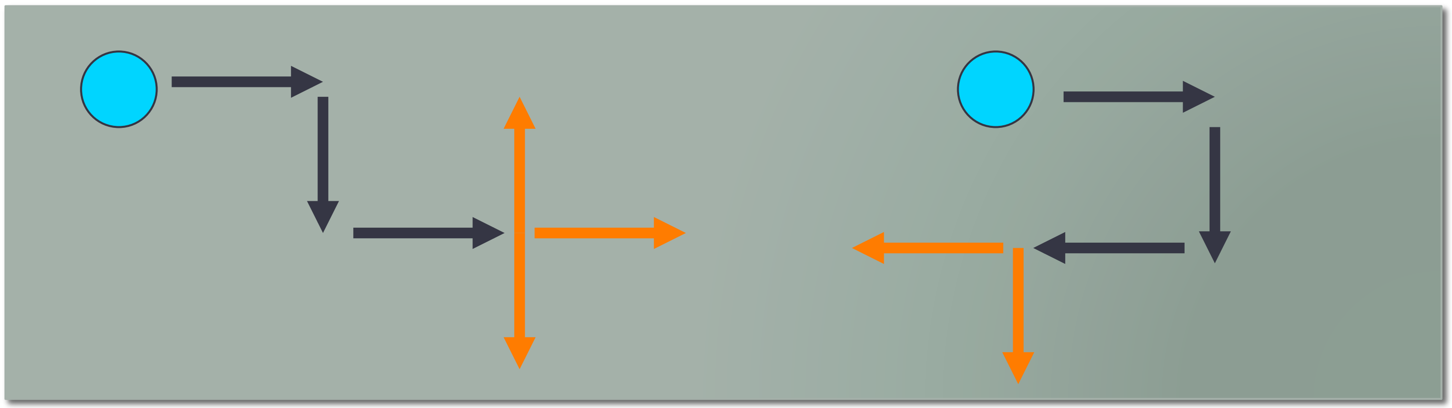


Problema!

simulação

Growing SAWs ou Kinetic SAWs

Problema: probabilidades diferentes

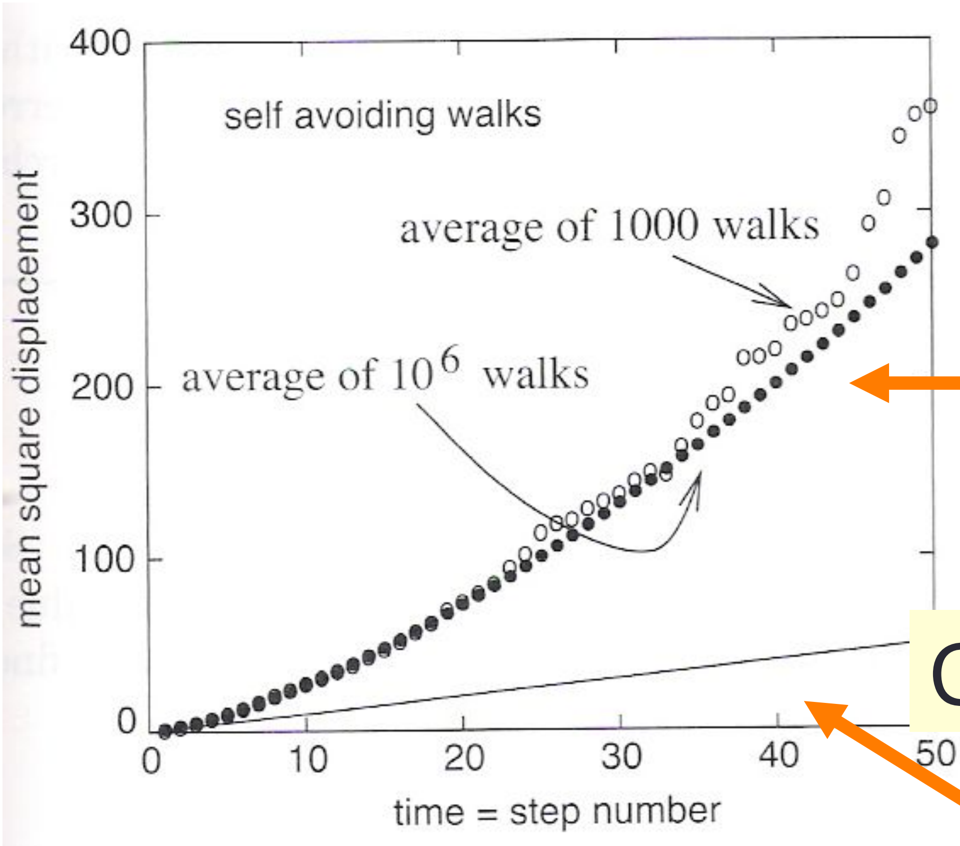


Solução

simulação

Escolher o próximo passo entre TODAS as direções e parar se interceptar

SAW



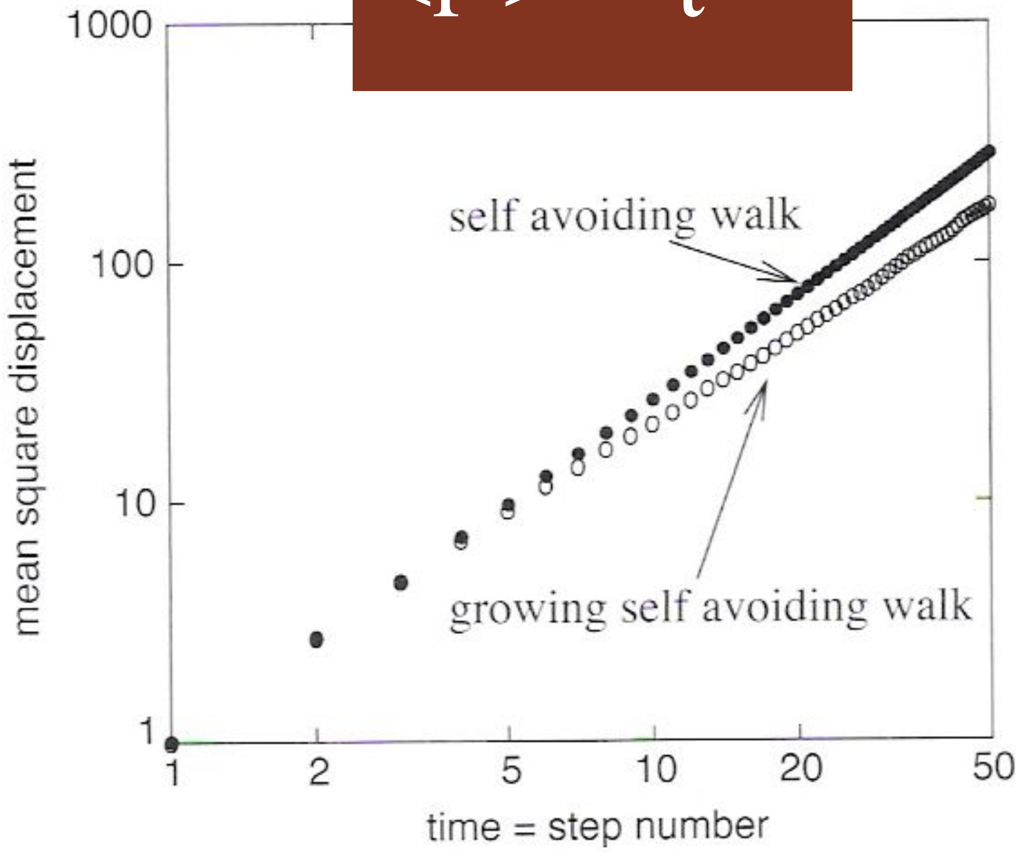
SAW

Cresce mais rápido

RW

Expoente de Flory

$$\langle r^2 \rangle \sim t^{2\nu}$$



● $\nu = 0.735$

○ $\nu = 0.661$

RW $\langle r^2 \rangle \sim t$, $\nu = 0.5$

livre $\langle r^2 \rangle \sim t^2$, $\nu = 1$

SAW em mais dimensões

2d $\nu = 3/4 = 0.75$

3d $\nu = 3/5 = 0.6$

4d $\nu = 0.575$

d cresce

$\Rightarrow \nu \rightarrow 0.5$

$\Rightarrow$ RW

Enumeração X simulação

simulação

Solução: parar e recomeçar ao interceptar

enumeração

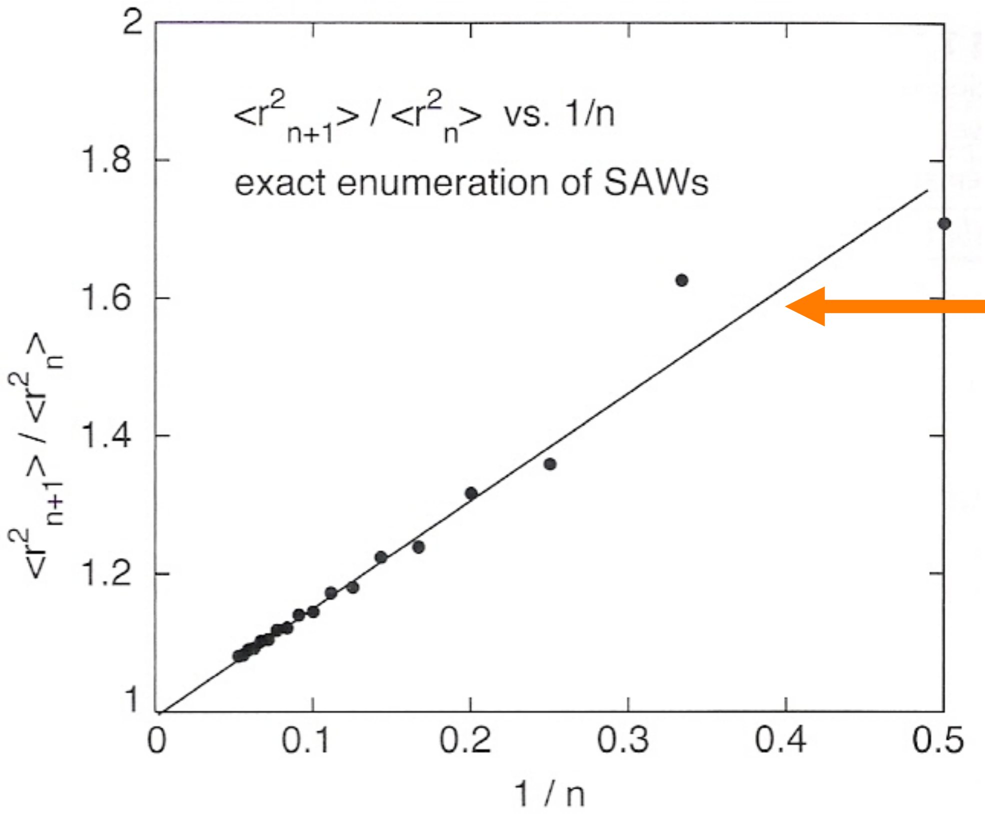
Para um dado n (pequeno!) enumerar todos os possíveis SAWs

Custo computacional alto

Método da enumeração

number of steps (n)	$\langle r^2 \rangle$	*standard deviation*	Number of SAWs
1	1.00	0.00	4
2	2.67	0.94	12
3	4.56	2.27	36
4	7.04	3.54	100
5	9.56	5.21	284
6	12.57	6.90	780
7	15.56	8.93	2,172
8	19.01	10.94	5,916
9	22.41	13.25	16,268
10	26.24	15.55	44,100
11	30.02	18.10	120,292
12	34.19	20.65	324,932
13	38.30	23.43	881,500
14	42.79	26.21	2,374,444
15	47.22	29.20	6.417×10^6
16	51.99	32.19	1.726×10^7
17	56.72	35.37	4.647×10^7
18	61.77	38.56	1.247×10^8
19	66.77	41.93	3.351×10^8
20	72.08	45.29	8.977×10^8

Método da enumeração



$\nu = 0.735$

$$\frac{\langle r_{n+1}^2 \rangle}{\langle r_n^2 \rangle} \sim \left(1 + \frac{1}{n}\right)^{2\nu} \sim 1 + \frac{2\nu}{n}$$

Depois do intervalo

Random walks
e difusão

Referências

Computational Physics
N. J. Giordano e H. Nakanishi

Fundamentals of Statistical and Thermal Physics
Federick Reif