

# SISTEMAS ALEATÓRIOS

---

**Random walks e parentes  
próximos**

# Sistemas aleatórios

Até agora: sistemas determinísticos

⇒ Equação diferencial + cc

- Agora: sistemas estocásticos

⇒ Grande número de graus de liberdade

⇒ 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?**

**$\sim 10^{23}$  moléculas de “creme”**

**$\sim 10^{23}$  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



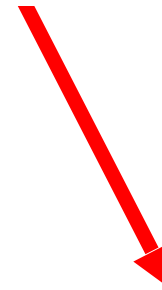
Random walk 2 dimensões



Self-avoiding walks

Passo constante

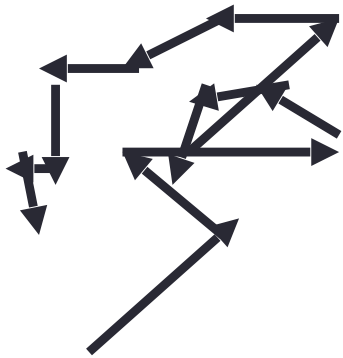
Passo aleatório



Difusão

# Random Walk – Passeio aleatório

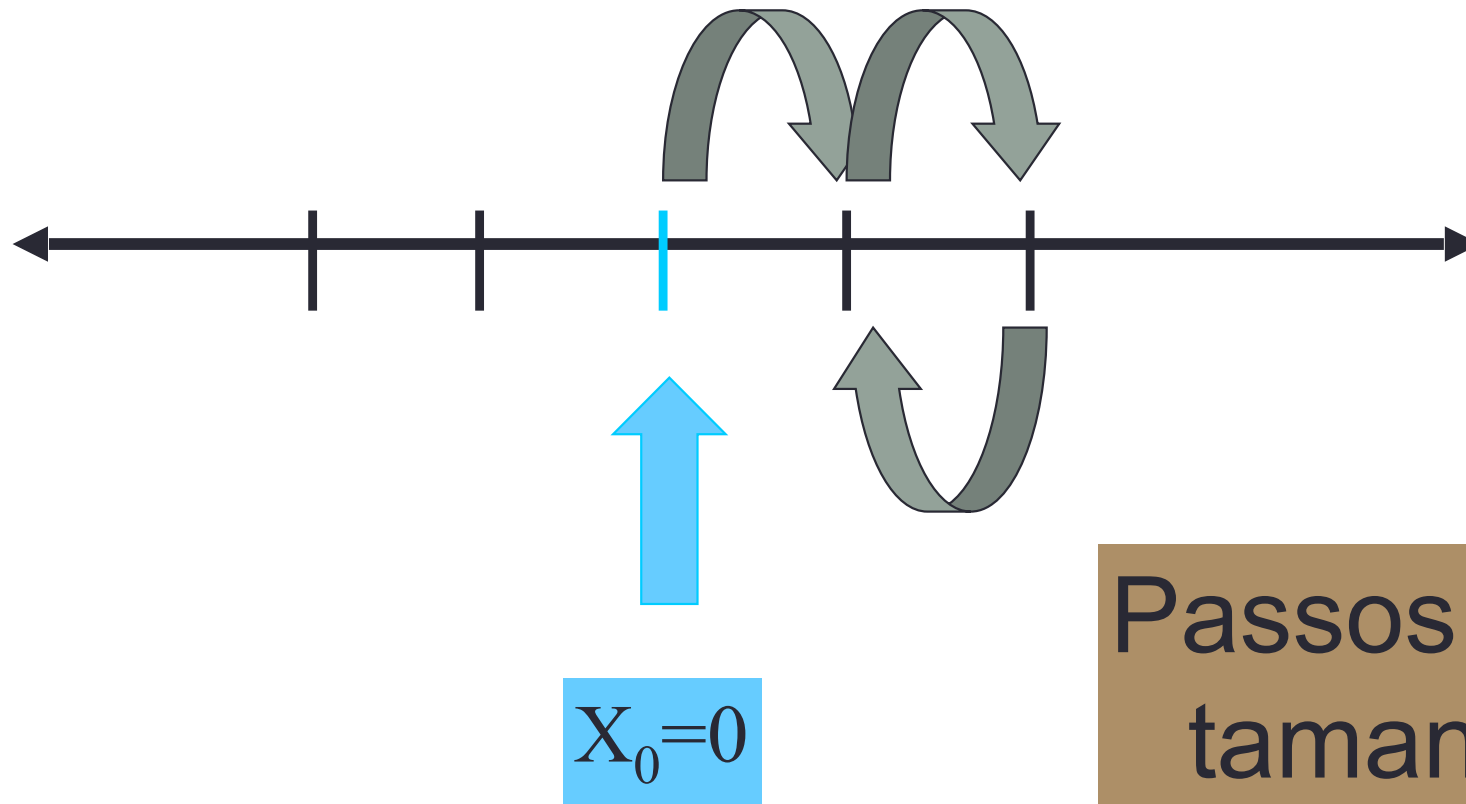
## Movimento browniano



Robert Brown – 1827  
Movimento de grãos de pólen  
suspensos em água

difusão

# Random Walk 1d

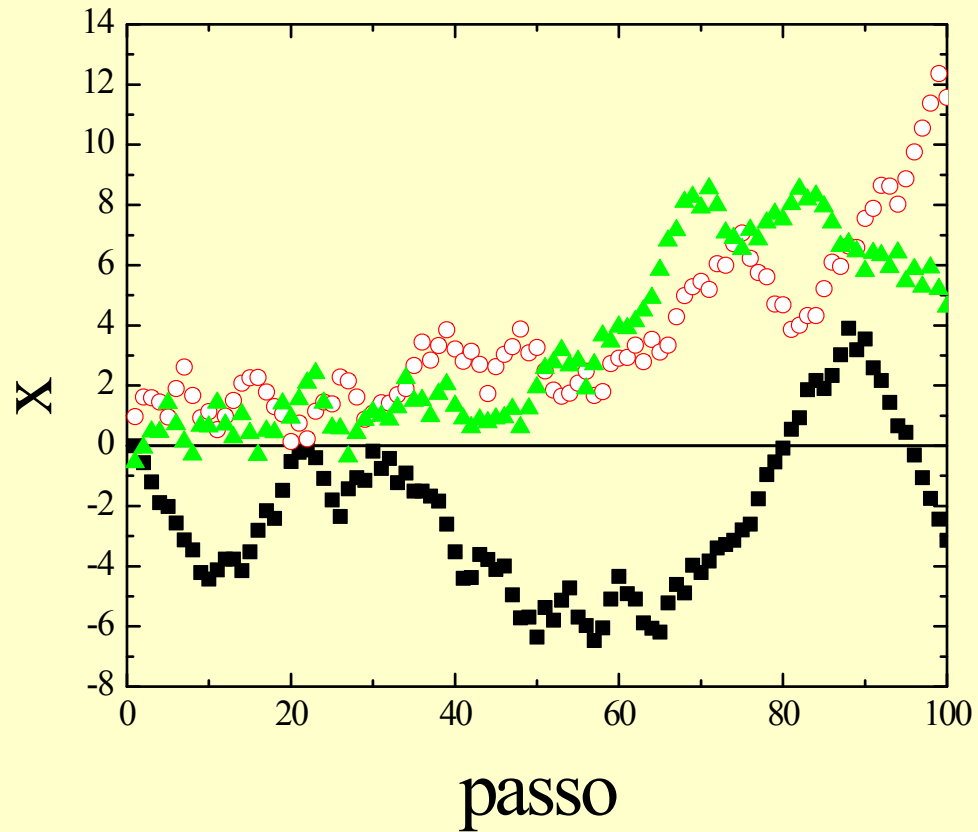




# Programa

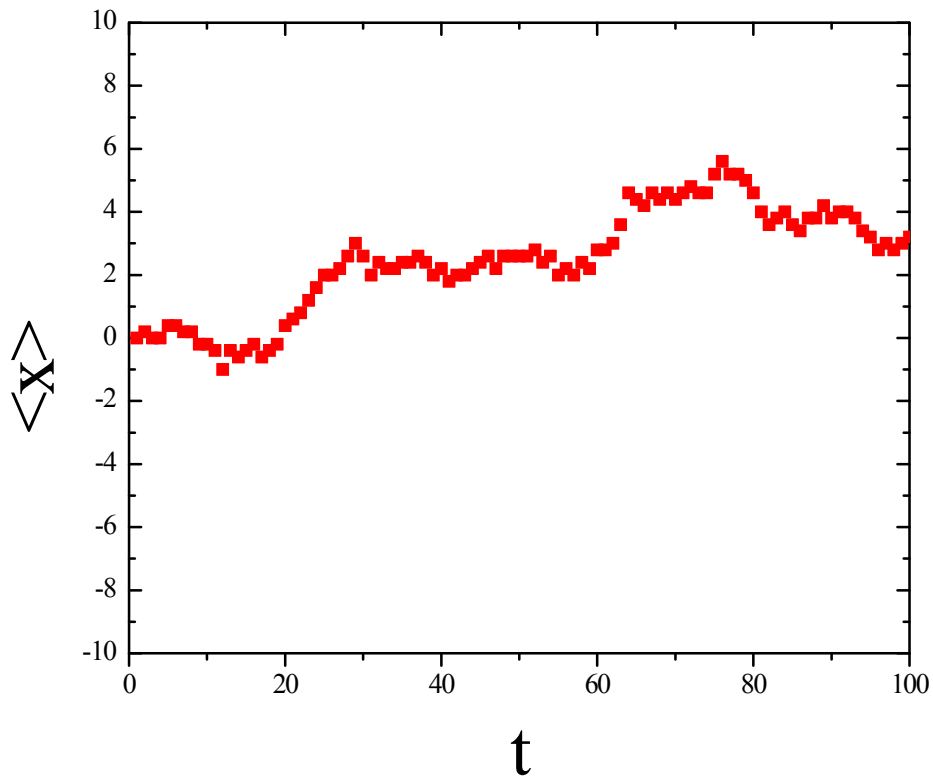
- $x=0$
- Para  $i=1$  até  $N_{\text{passos}}$
- $r=\text{random}$
- se  $(r < 0.5)$   $x=x+1$
- se  $(r \geq 0.5)$   $x=x-1$
- $\langle x(i) \rangle = \langle x(i) \rangle + x$
- $\langle x^2(i) \rangle = \langle x^2(i) \rangle + x * x$

# Random Walk 1d



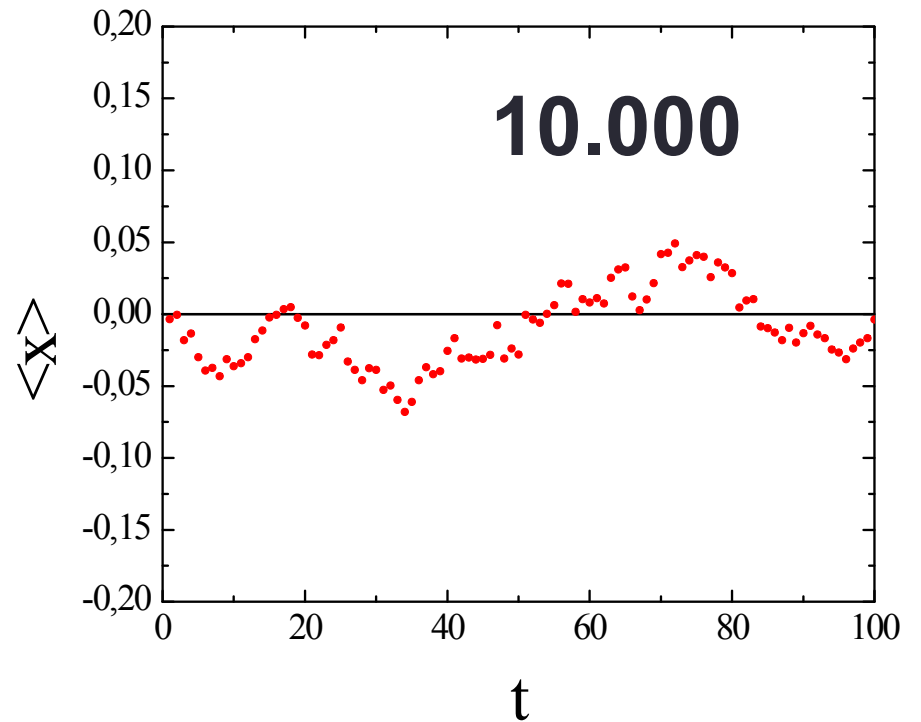
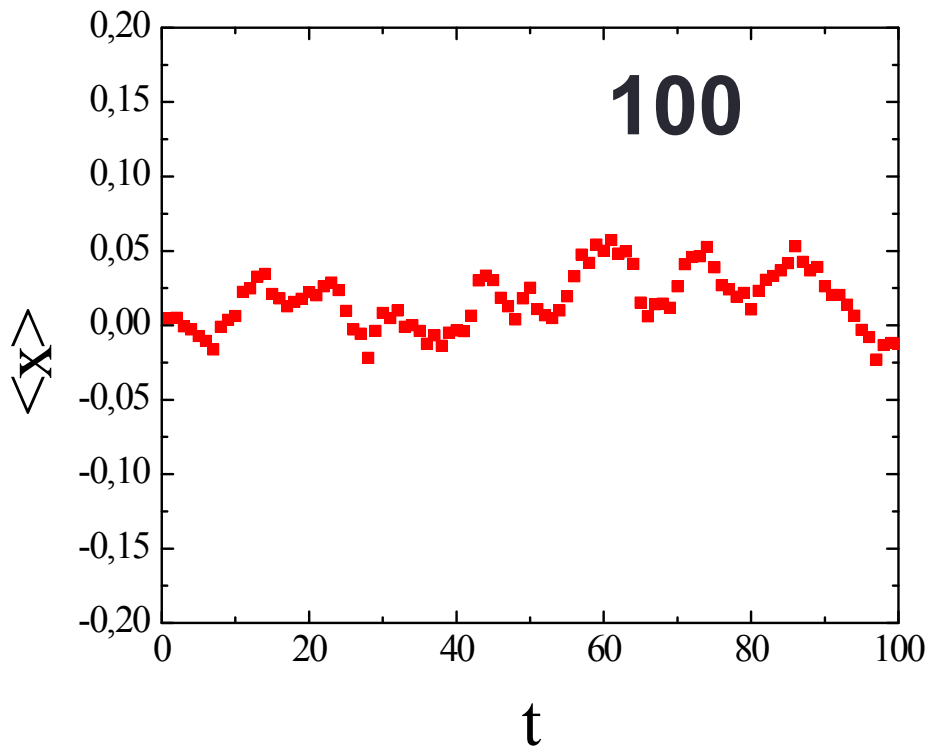
3 realizações  
diferentes

# 10 realizações diferentes



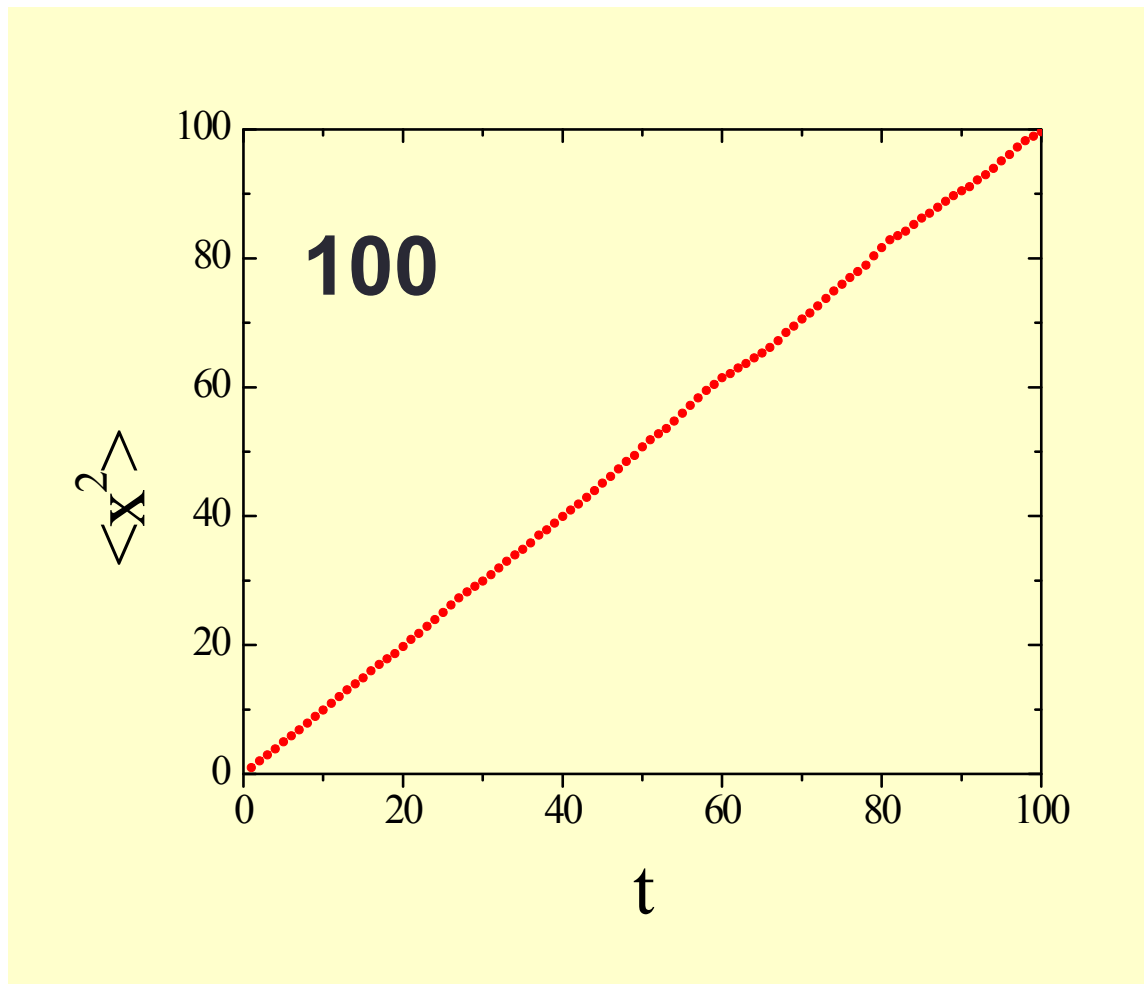
$\langle \rangle \rightarrow$  Média sobre realizações

# Aumentando o número de realizações



$\langle x \rangle \sim 0$  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

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

$$0 < \mu < 1$$



subdifusão

$$\mu = 1$$



difusão normal

$$\mu > 1$$

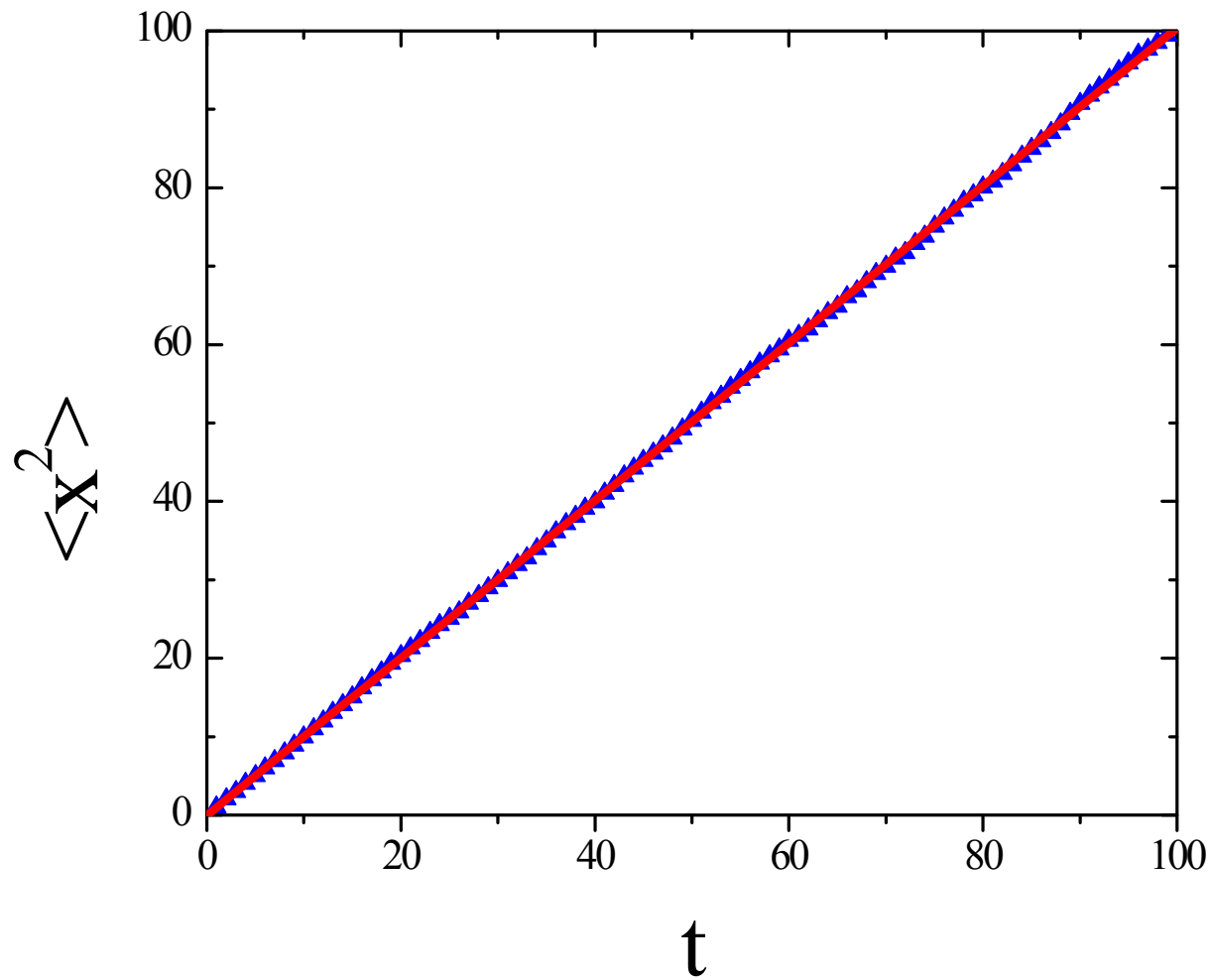


Superdifusão

$$\mu = 2$$

Regime balístico

# 10.000 realizações diferentes



$D=1/2$



# Não é surpreendente

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

$x_n$  é a posição depois de  $n$  passos

$$s_i = \pm 1$$

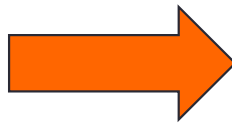
# Não é surpreendente

$$S_i = \pm 1$$

Com igual  
probabilidade



$$\langle S_i \rangle = 0$$



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

# 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

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

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

Para um número grande de  $n$

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

Lembrando que  
 $\langle s_i^2 \rangle = 1$

como  $n=t$

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

com  $D=1/2$

## Desvio padrão de $x^2$

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

$$\langle x_n^4 \rangle = \sum_{i,j,k,l=1}^n \langle S_i S_j S_k S_l \rangle$$

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

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

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

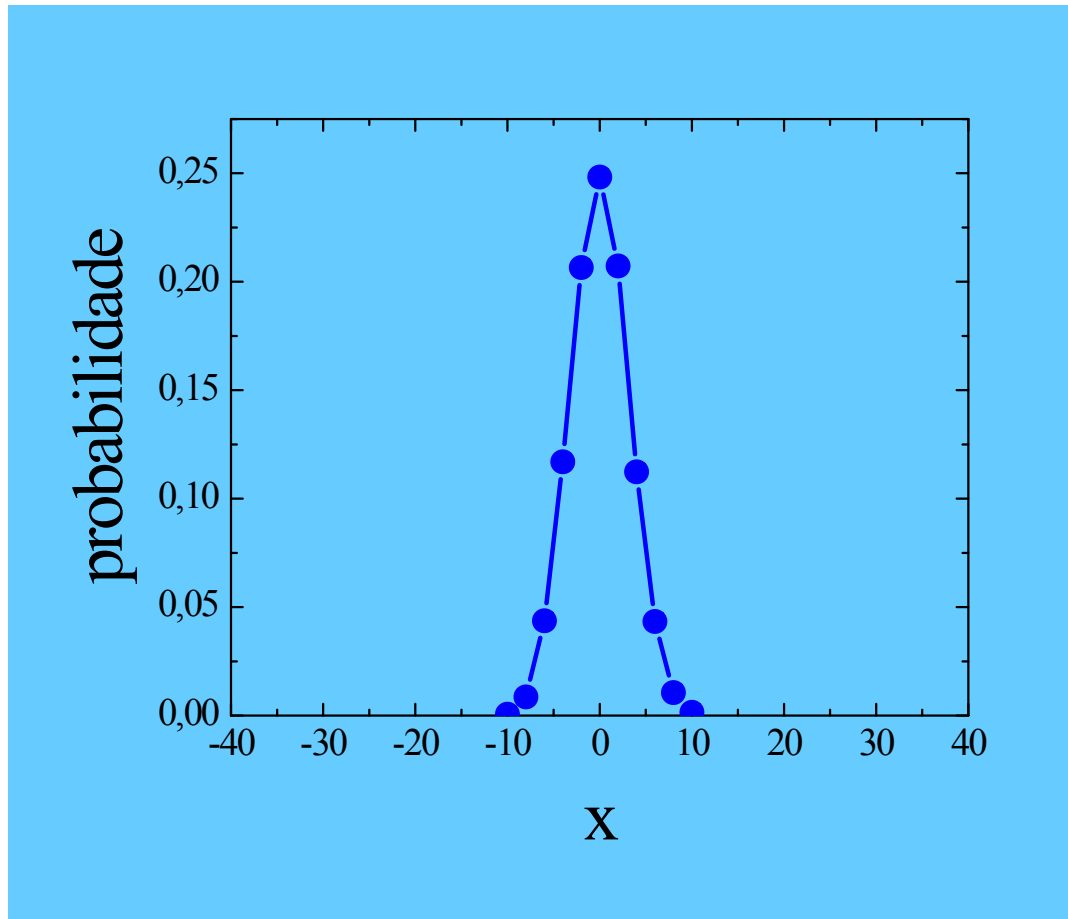
$$\langle x_n^2 \rangle = n$$

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

$$\sigma \sim \langle x_n^2 \rangle \sim n$$

A separação entre dois andarilhos cresce com  $n$

# Histogramas

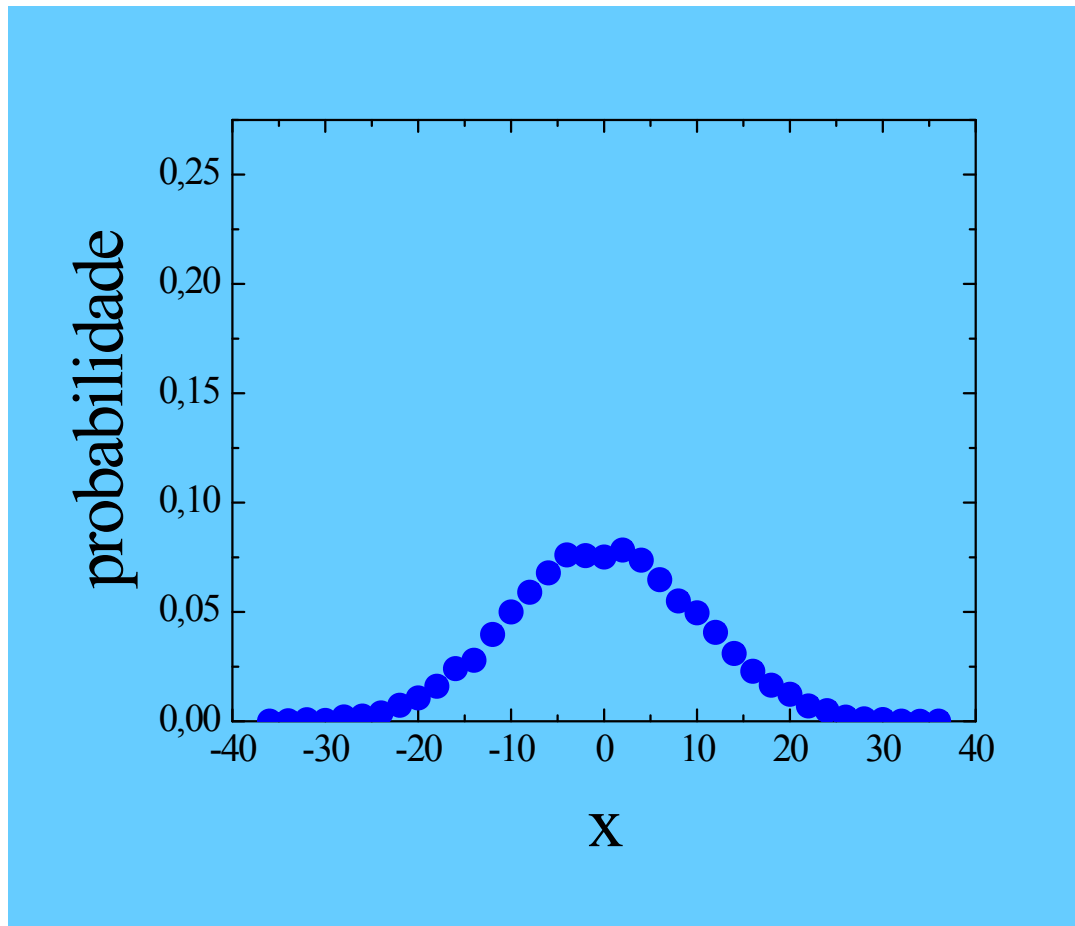


Em  $t=0$  o andarilho está na origem

10.000 realizações  
bin=2  
 $t=10$  passos

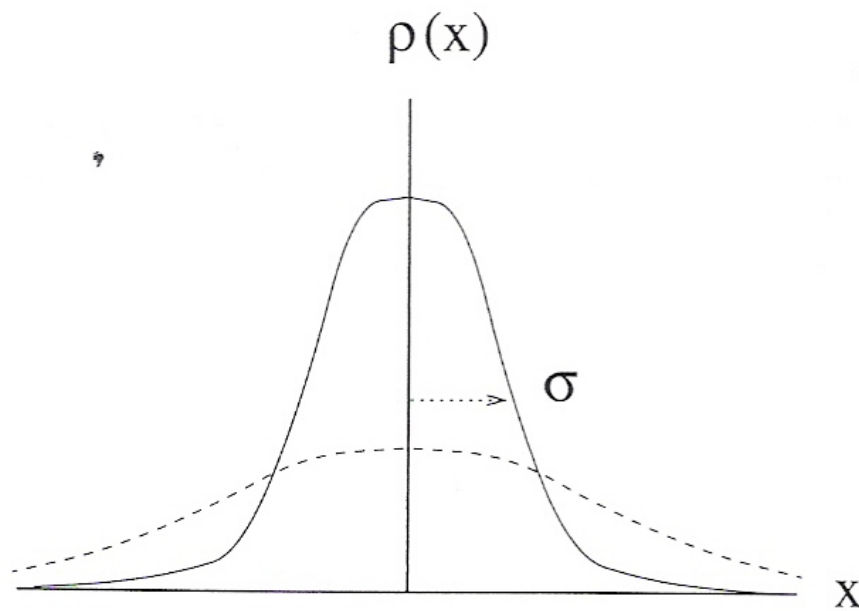


# Histogramas



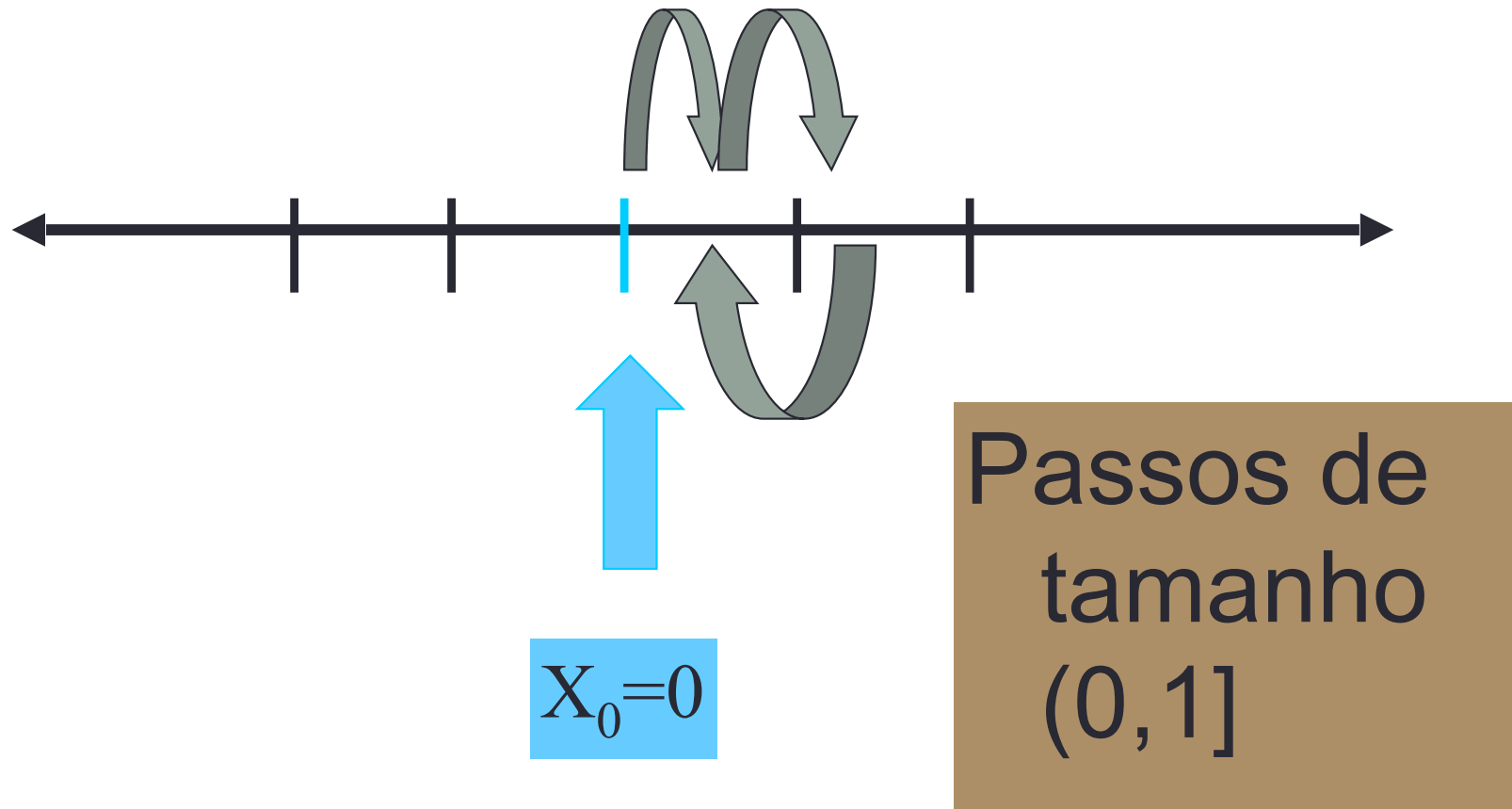
10.000 realizações  
bin=2  
t=100 passos

# Difusão



Ainda hoje...

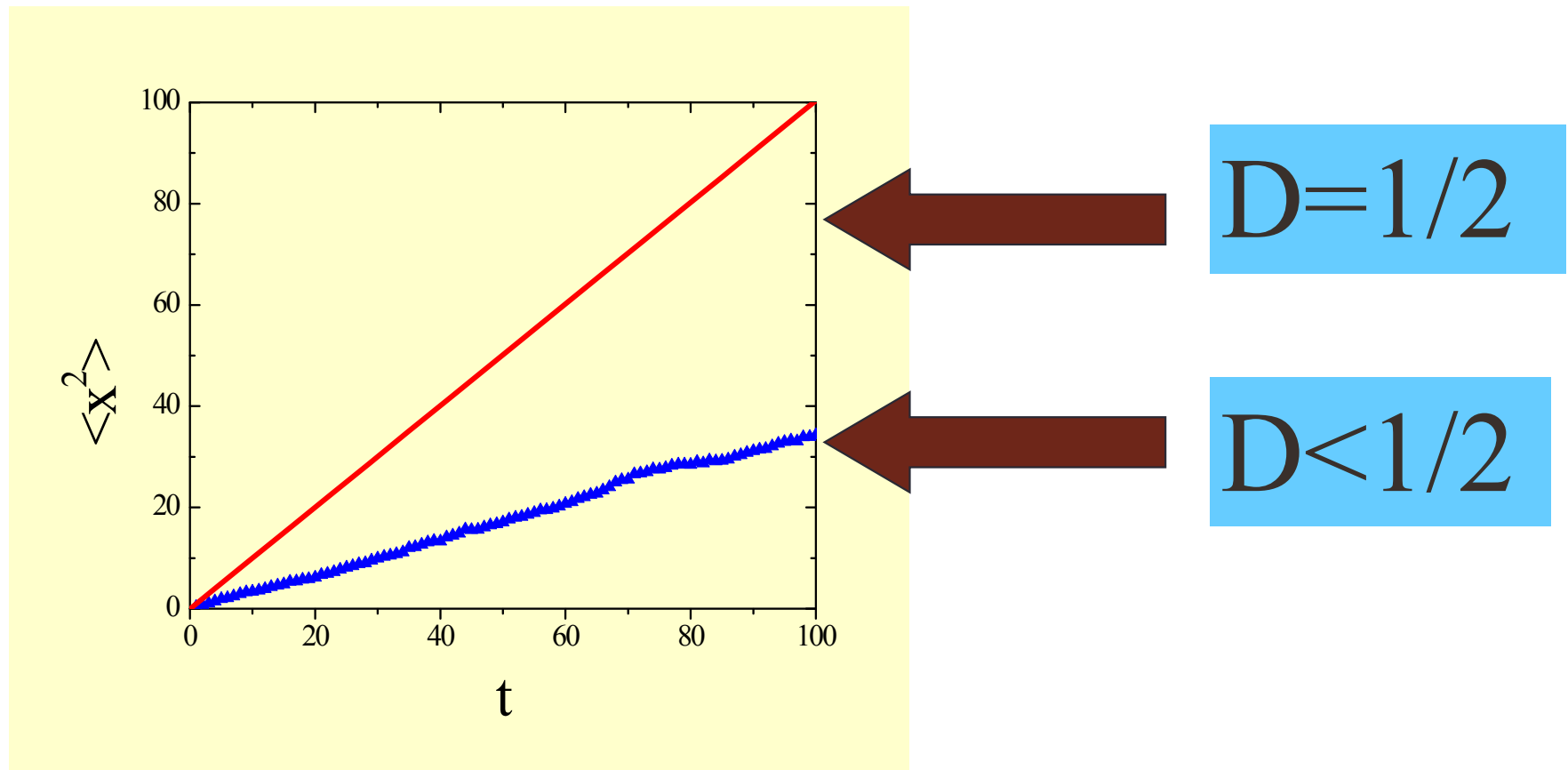
# Tamanhos de passo aleatórios



# Programa

- $x=0.d0$
- Para  $i=1$  até  $N_{\text{passos}}$
- $r=\text{random}$
- $rb=\text{random}$
- se  $(rb < 0.5)$   $x=x+(1-r)$
- se  $(rb \geq 0.5)$   $x=x-(1-r)$
- $\langle x(i) \rangle = \langle x(i) \rangle + x$
- $\langle x^2(i) \rangle = \langle x^2(i) \rangle + x * x$

# 500 realizações diferentes



# Também não é surpreendente

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

$x_n$  é a posição depois de  $n$  passos

$$-1 \leq s_i \leq 1$$

# 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

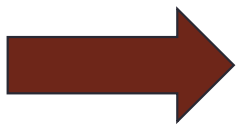
Para um número grande de rw

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



$s_i s_j = \pm(0, 1)$   
com igual probabilidade  
para  $i \neq j$

# Calculando $x_n^2$

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


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

constante



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



# Substituindo $s_i^2$

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

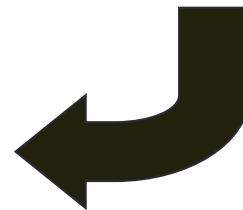
como  $n = t$

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

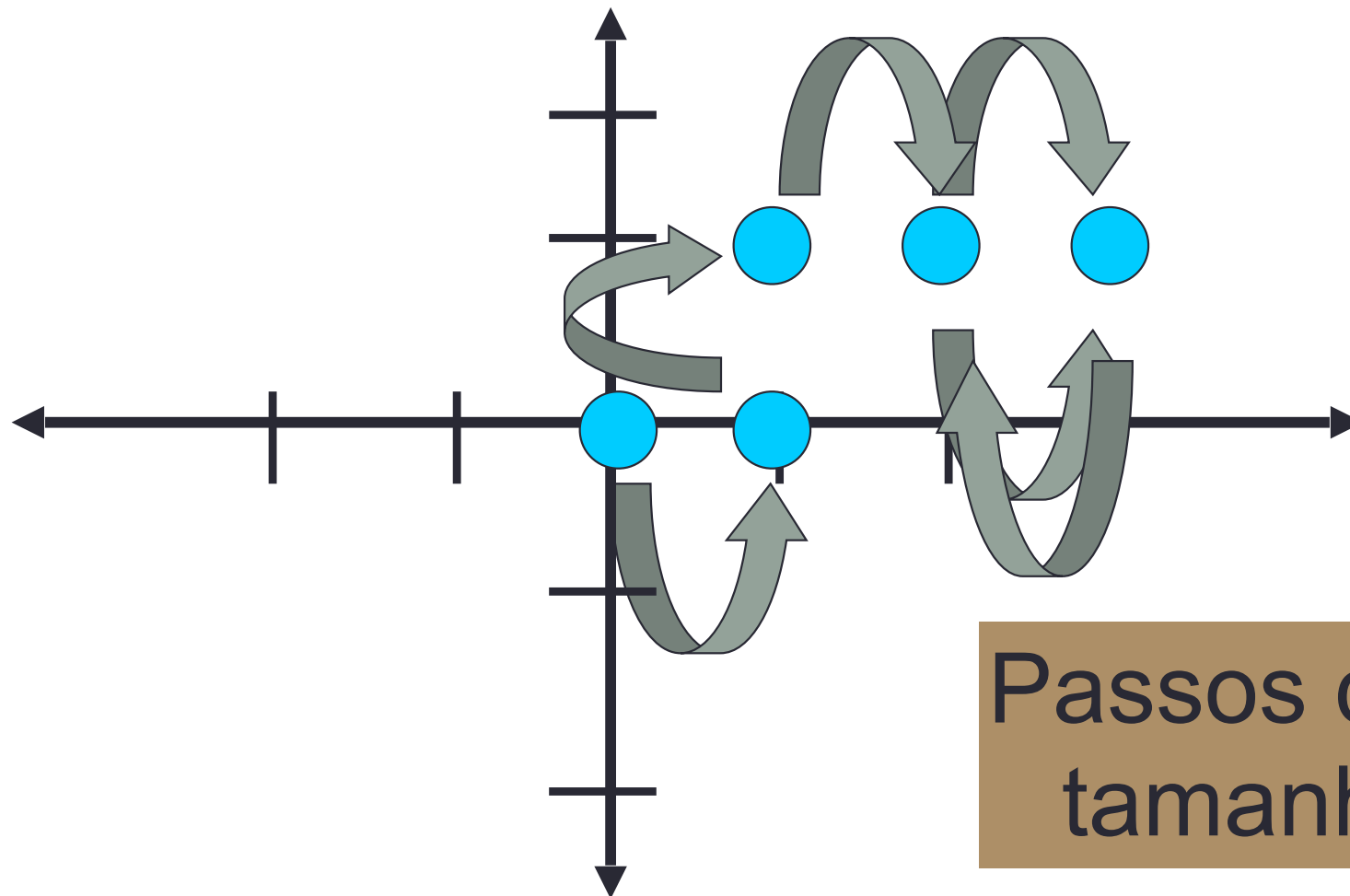


$$D = \frac{1}{6}$$

De acordo com o gráfico!

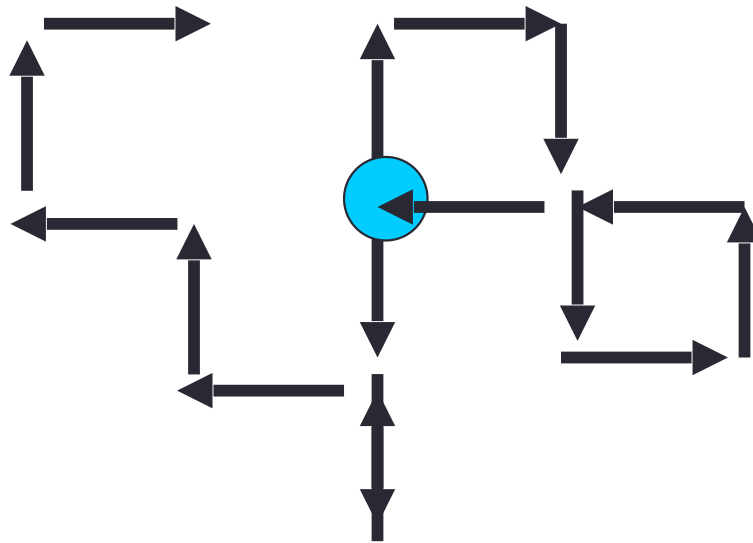


# Random Walk 2d



Passos de tamanho 1

# RandomWalk



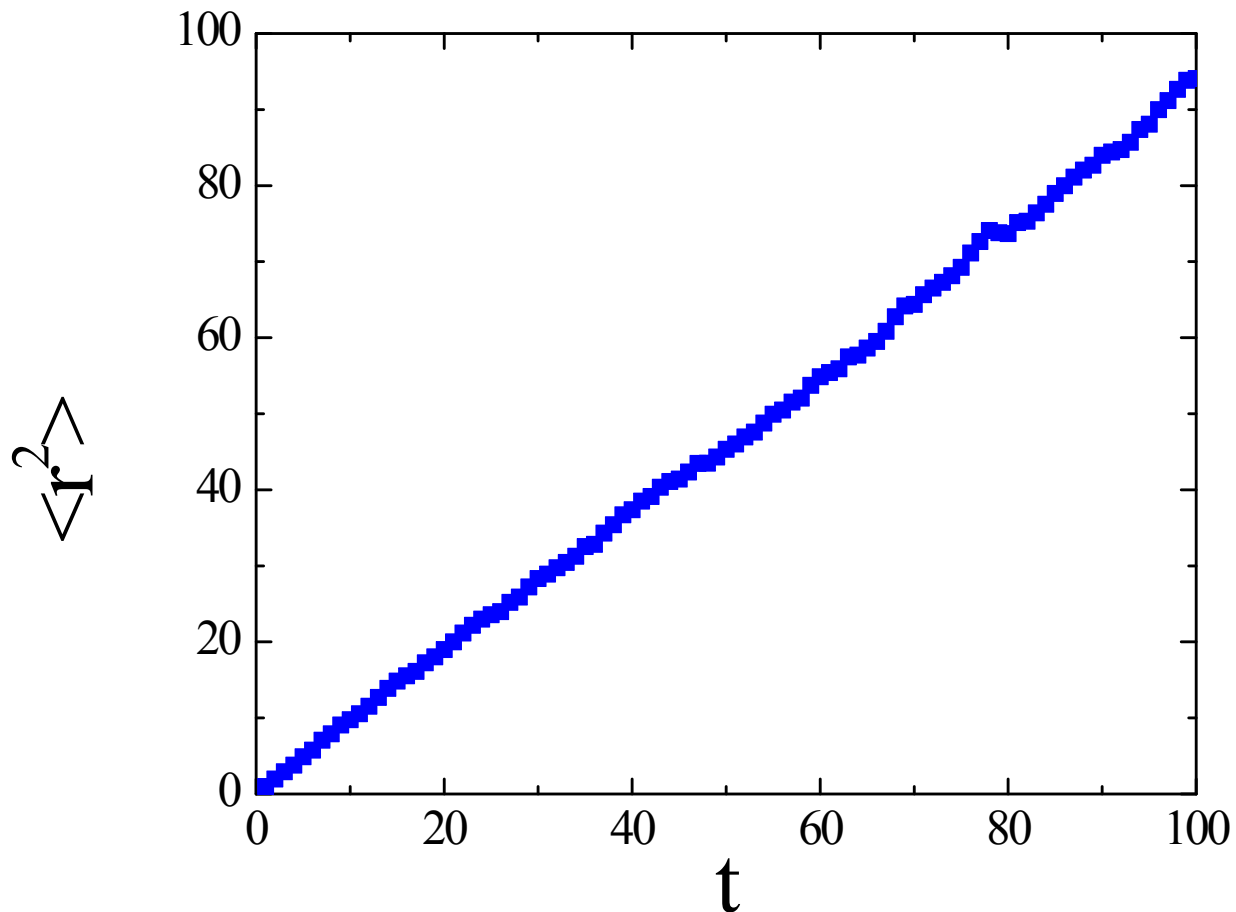
# Programa

- $x=0, y=0$
- Para  $i=1$  até  $N_{\text{passos}}$
- $r=\text{random}$
- $rb=\text{random}$
- se  $(rb < 0.5)$
- 
- 
- se  $(rb \geq 0.5)$
- $\langle r(i) \rangle = \langle r(i) \rangle + \sqrt{x^2 + y^2}$
- $\langle r^2(i) \rangle = \langle r^2(i) \rangle + x^2 + y^2$

se  $(r < 0.5)$   $x=x-1$   
se  $(r \geq 0.5)$   $x=x+1$

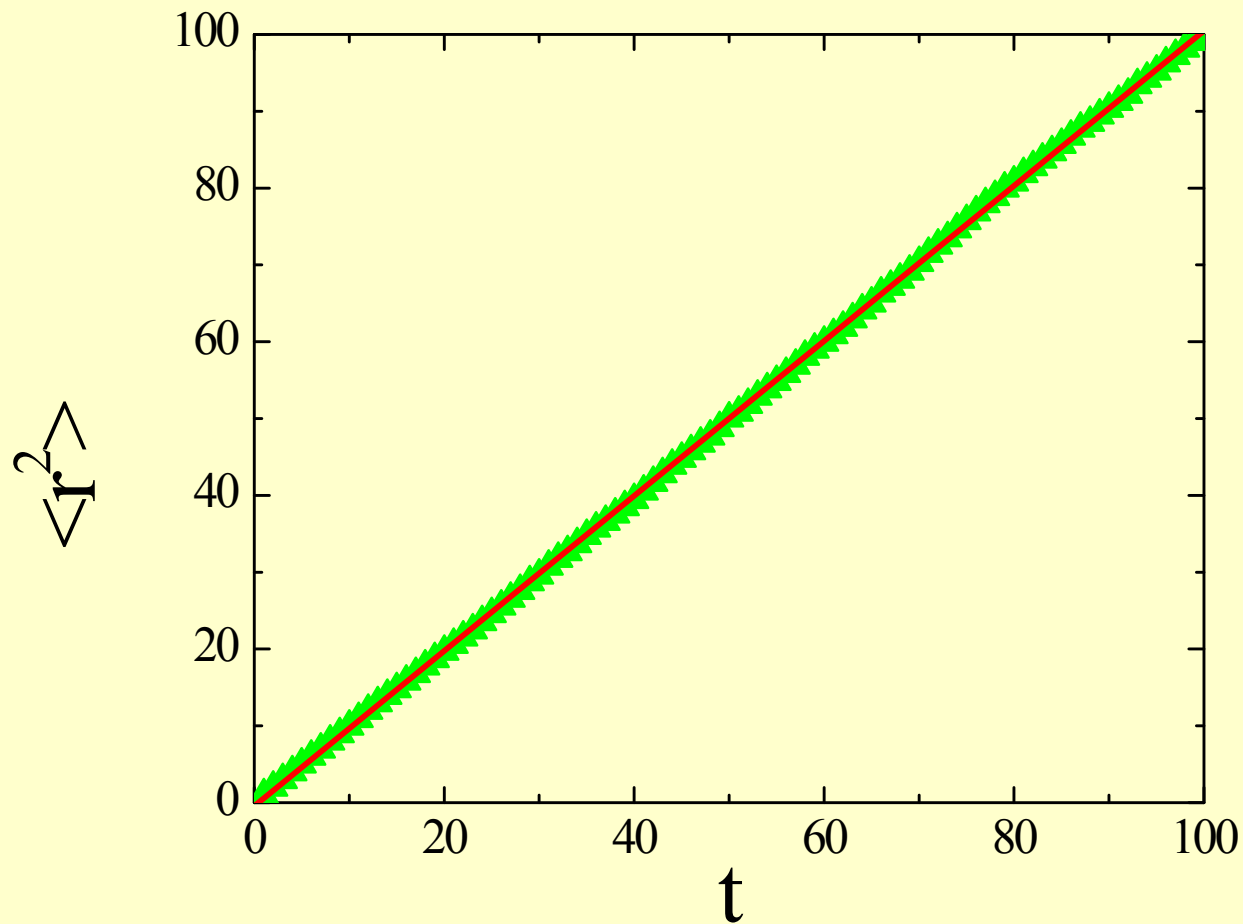
se  $(r < 0.5)$   $y=y-1$   
se  $(r \geq 0.5)$   $y=y+1$

# 500 realizações diferentes



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

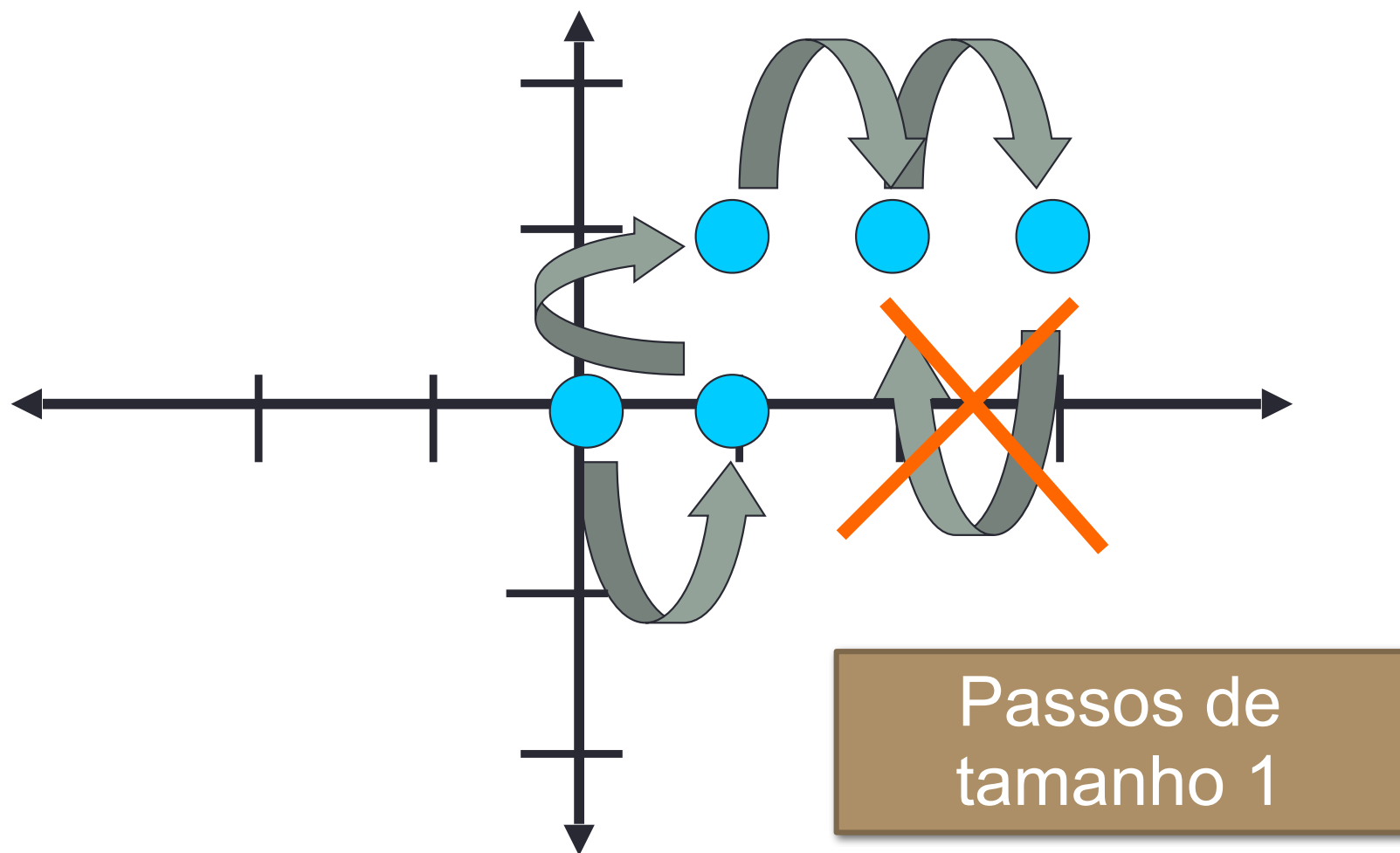
# 10.000 realizações diferentes



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

$$D = 1/6$$

# Self-avoiding Walk - SAW



# Self-avoiding Walk - SAW

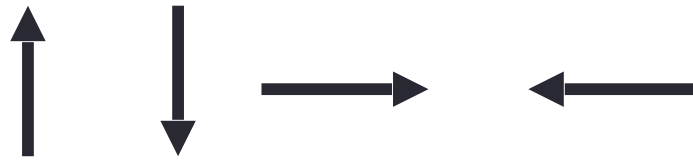
Random walk: cada passo é completamente independente de todos os anteriores

Na natureza nem sempre é assim:  
**polímeros**



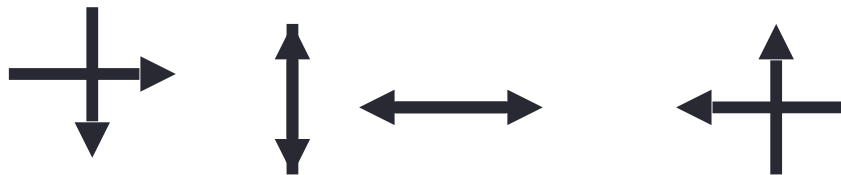
# SAW

Blocos de construção

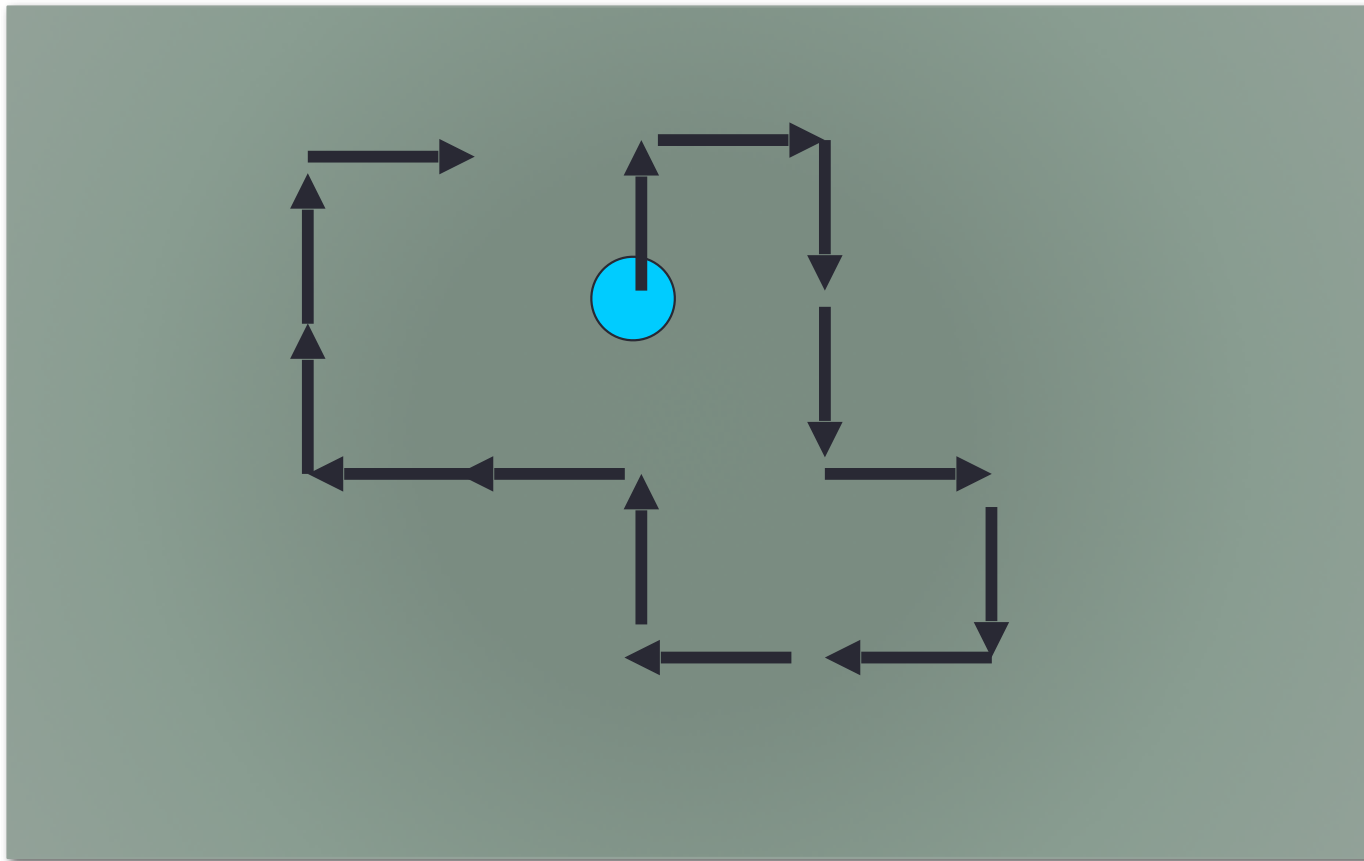


Iguais a RW

Porém: não é permitido superpor

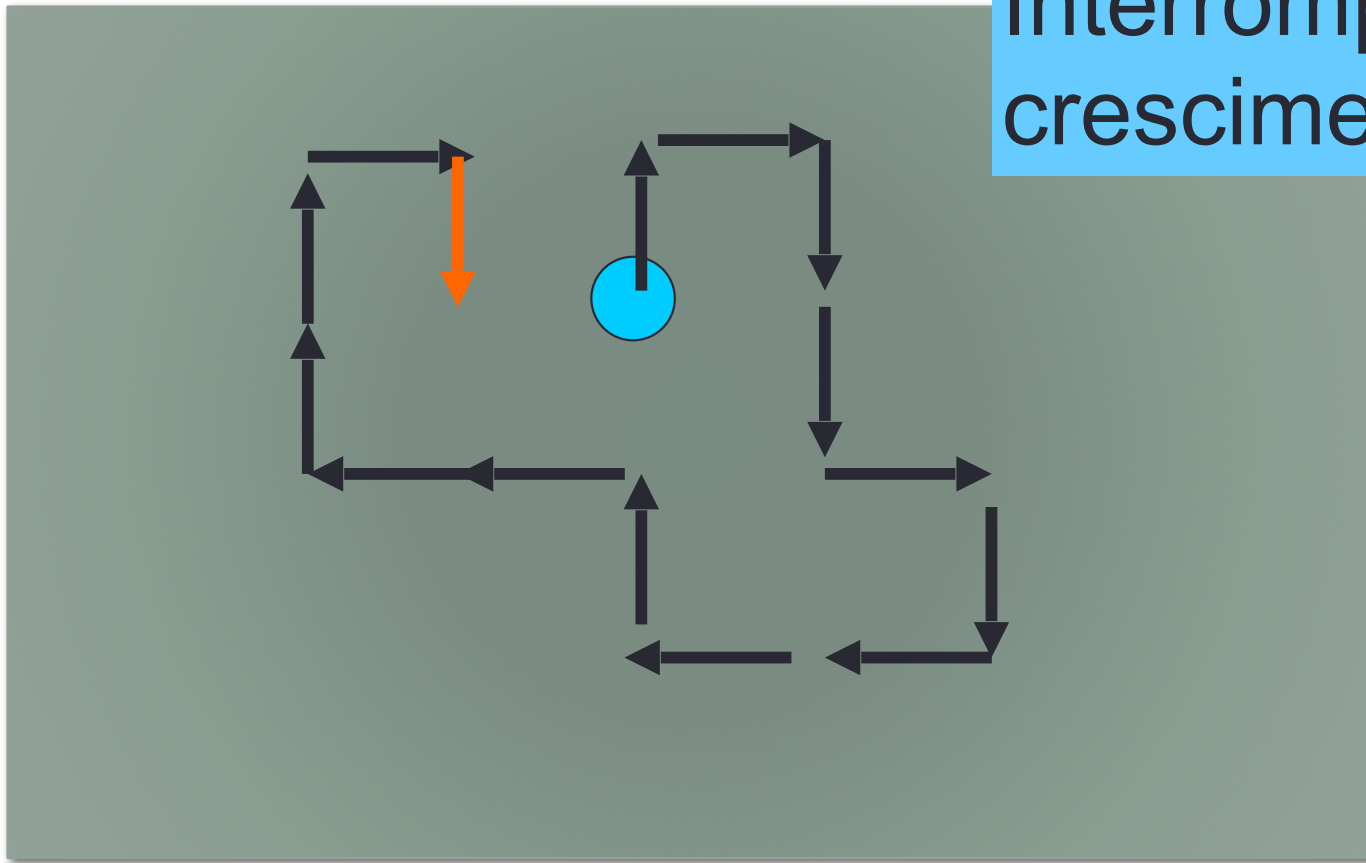


# Self-avoiding Walk - SAW



# Self-avoiding Walk - SAW

Interrompe o crescimento

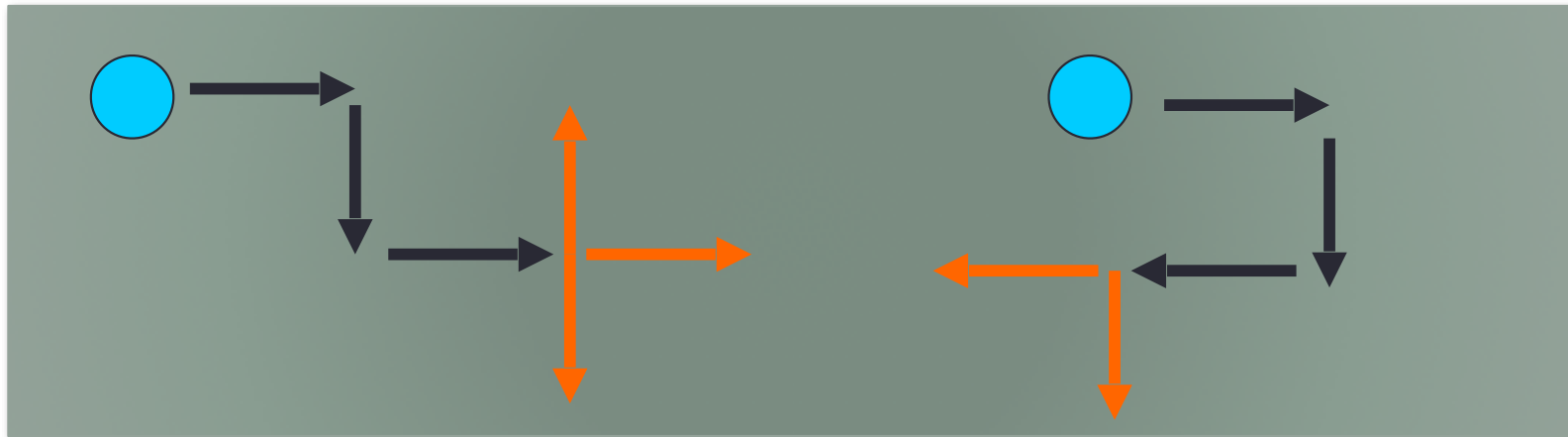


# Problema!

simulação

Growing SAWs ou  
Kinetic SAWs

Problema: probabilidades diferentes

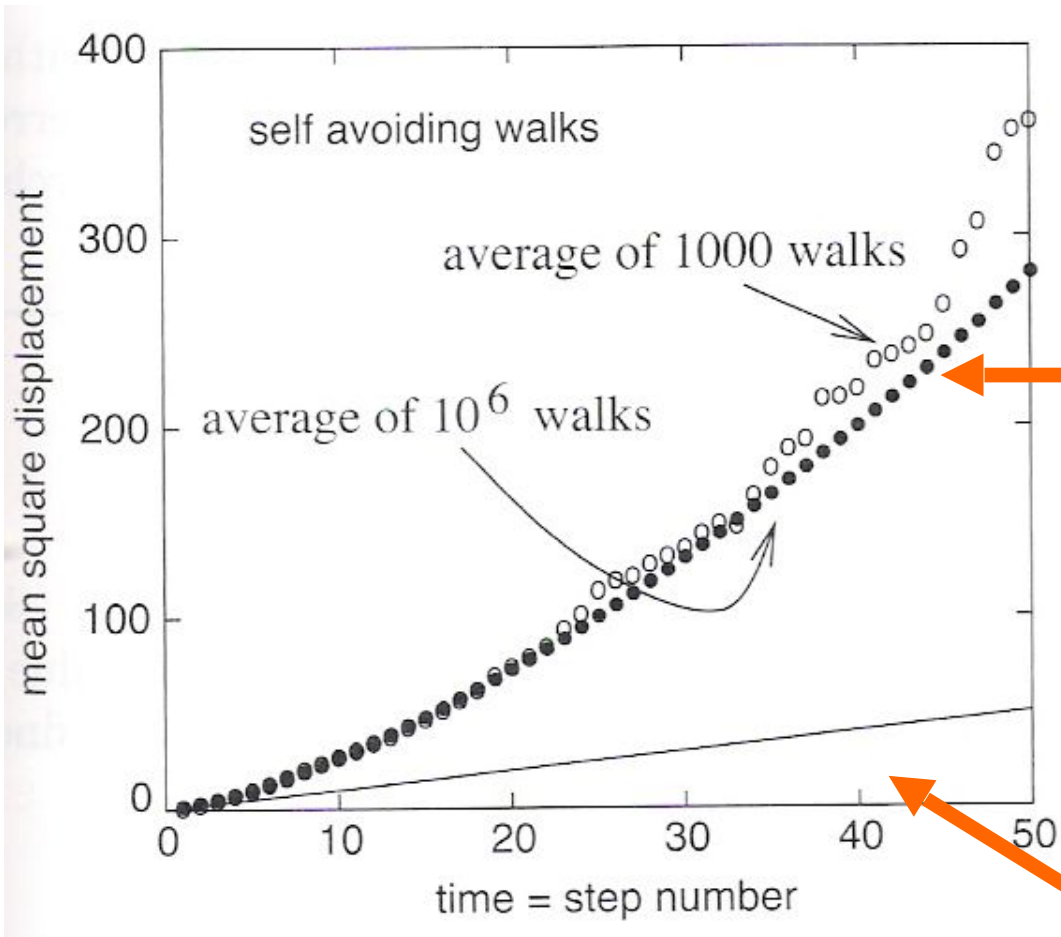


# Solução

simulação

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

# SAW



SAW

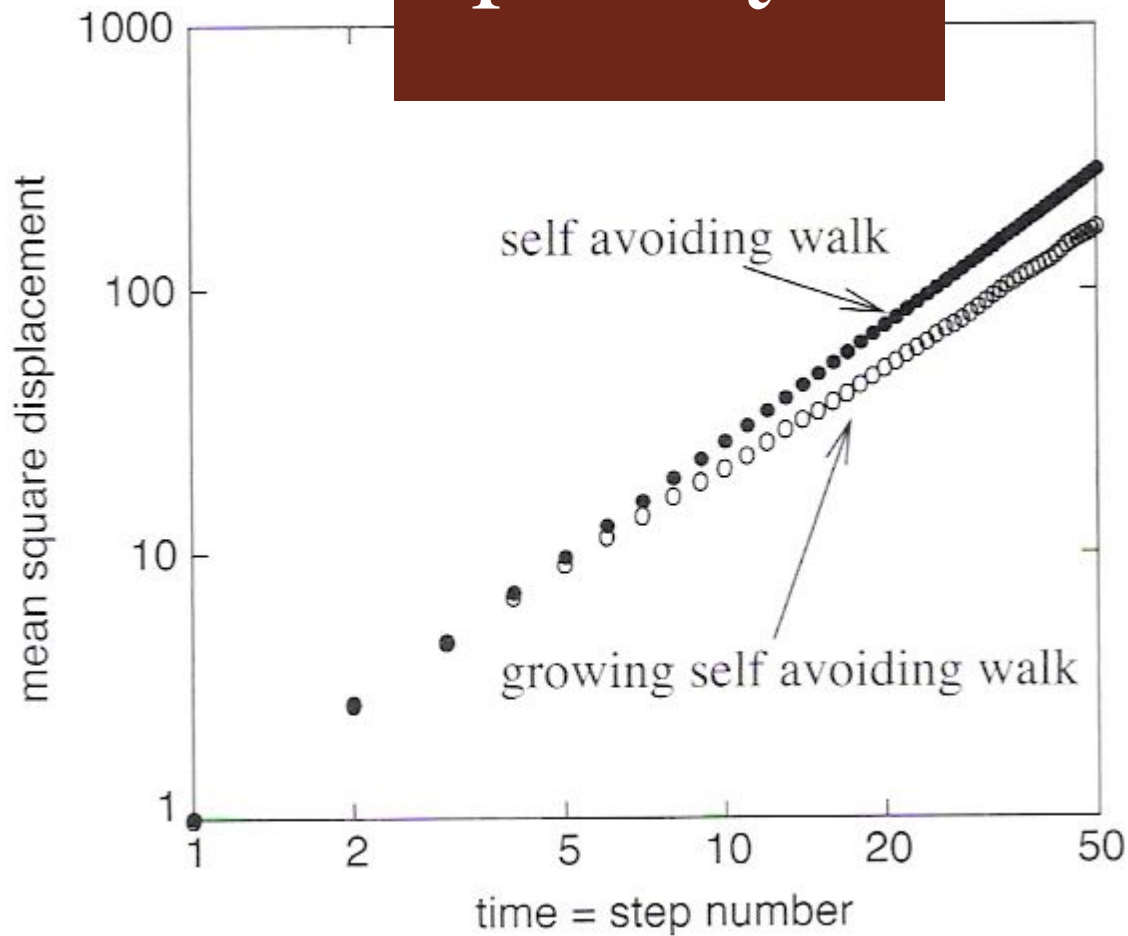


Cresce mais rápido

RW

# Expoente de Flory

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



$$\bullet \quad \nu = 0.735$$

$$\circ \quad \nu = 0.661$$

$$\text{RW } \langle r^2 \rangle \sim t, \quad \nu = 0.5$$

$$\text{livre } \langle r^2 \rangle \sim t^2, \quad \nu = 1$$

# SAW em mais dimensões

$$2d \quad v=3/4=0.75$$

$$3d \quad v=3/5=0.6$$

$$4d \quad v=0.575$$

d cresce

$$\Rightarrow v \rightarrow 0.5$$

$\Rightarrow$  RW



# Enumeração X simulação

simulação

Solução: parar e recomeçar  
ao interceptar

enumeração

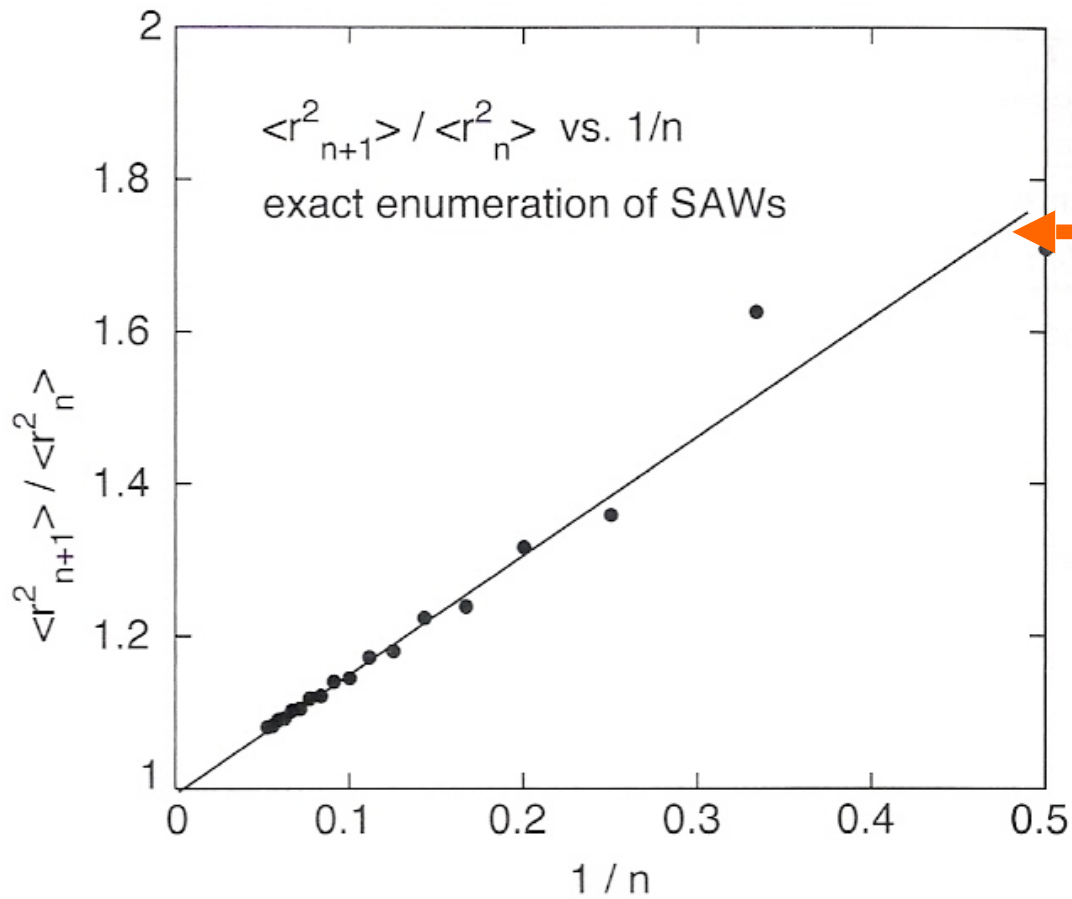
Para um dado  $n$  (pequeno!)  
enumerar todos os  
possíveis SAWs

Custo computacional alto

# Método da enumeração

<i>number of steps (n)</i>	$\langle r^2 \rangle$	<i>standard deviation</i>	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	$6.417 \times 10^6$
16	51.99	32.19	$1.726 \times 10^7$
17	56.72	35.37	$4.647 \times 10^7$
18	61.77	38.56	$1.247 \times 10^8$
19	66.77	41.93	$3.351 \times 10^8$
20	72.08	45.29	$8.977 \times 10^8$

# Método da enumeração



$$\nu = 0.735$$

$$\sqrt{\langle r^2 \rangle} \sim At^\nu$$

$$\frac{\langle r^2_{n+1} \rangle}{\langle r^2_n \rangle} \sim \left(1 + \frac{1}{n}\right)^{2\nu} \sim 1 + \frac{2\nu}{n}$$

# Depois do intervalo

Random walks  
e difusão

# Referências

**Computational Physics**

**N. J. Giordano e H. Nakanishi**

**Fundamentals of Statistical and  
Thermal Physics**

**Federick Reif**