Introdução à Física Computacional - 7600017 - 2S/2023
Projeto 2 — Sistemas aleatórios
Data de entrega: até 24/09

DESCRIÇÃO

Números aleatórios são fazem parte de nosso dia-a-dia. Por exemplo, estão presentes em loterias, cassinos, jogos de azar, protocolos de encriptação e simulações computacionais.

A descrição de fenômenos macroscópicos a partir de modelos microscópicos muitas vezes passa por simulações que utilizam números aleatórios para modelar flutuações de alguma natureza, comumente térmicas e/ou quânticas.

Além disso, descrever o "macro" em termos do "micro" resolvendo-se $\sim 10^{23}$ equações determinísticas (geralmente equações diferenciais acopladas) se torna impraticável computacionalmente. Para circundar tal obstáculo abrimos mão de uma formulação determinística e passamos a uma formulação probabilística, onde os detalhes microscópicos são promediados. Tal fato é justificável pois para cada caracterização macroscópica existe um número altamente elevado de caracterizações microscópicas compatíveis, isto é, todas elas conduzindo aos mesmos valores macroscópicos.

O primeiro passo para uma modelagem probabilística de fenômenos físicos, computacionalmente falando, é a introdução de um gerador de número aleatórios (mais precisamente, pseudo-aleatórios). No computador o que fazemos é produzir uma sequência de números pseudo-aleatórios que se aproxima, dentro de certo intervalo (o período da sequência) a uma sequência verdadeiramente aleatória. Uma maneira simples de se gerar tais sequências é dada pelo métod de geradores congruentes lineares. Basicamente, itera-se a relação de recorrência

$$x_{n+1} = (ax_n + b) \mod m, \; n = 0, 1, 2, \ldots \tag{1}$$

onde a e b são co-primos positivos e menores que m e m (máximo período da sequência) em geral é o maior inteiro disponível no computador. A função $\alpha \mod \beta$ dá o resto da divisão de α por β. No caso da linguagem FORTRAN existe a função intrínseca rand() (vide tutorial), que nos fornece diretamente uma sequência pseudo-aleatória com números reais entre 0 e 1.

1. A fim de testarmos o gerador de números aleatórios calculemos alguns momentos da distribuição "aleatória" gerada, isto é:

   $$\langle x^n \rangle \,, \quad \text{para } n = 1, 2, 3, 4. \tag{2}$$

   Faça a média acima gerando um número grande N de números aleatórios (escolha apropriadamente N).
   Que resultado você esperaria? Compare com os resultados esperados e explique os obtidos.

2. Vamos considerar agora o problema de andarilhos aleatórios em uma dimensão. Aqui, em cada unidade de tempo, cada caminhante, independentemente onde esteja, dá um passo à direita (esquerda) com probabilidade p ($q = 1 - p$). O caso $p = q = 1/2$ corresponde a um caminhante tão desnorteado que ele não se lembra de onde veio e nem qual o rumo certo a tomar. O caso em que $p \neq q$ corresponde ao viajante aleatório em uma ladeira. A questão nesta tarefa é calcular $\langle x \rangle$ e $\langle x^2 \rangle$ após um certo número N de passos.

   (a) Considere $p = q = \frac{1}{2}$ e um número grande M de andarilhos todos partindo da origem ($x = 0$) no tempo inicial ($t = 0$). Após $N = 1\,000$ passos faça um histograma do número de andarilhos $n(x)$ em função de x. Que tipo de curva você obteve? Calcule $\langle x \rangle$ e $\langle x^2 \rangle$.

   (b) Refaça o item anterior considerando $p = \frac{1}{3}, \frac{1}{4}, \frac{1}{5}$. Qual seria a forma analítica em termos de N, p e q para $\langle x \rangle$ e $\langle x^2 \rangle$?

3. Considere agora o caso do andarilho bidimensional não enviesado, i.e., com iguais chances ($\frac{1}{4}$) ele dá um passo em qualquer direção dos pontos cardeais: norte, sul, leste e oeste. Calcule $\langle \vec{r} \rangle$ e $\Delta^2 = \langle \vec{r} \cdot \vec{r} \rangle - \langle \vec{r} \rangle \cdot \langle \vec{r} \rangle$.
   Repare que estes andarilhos perfazem o mesmo tipo de movimento que moléculas no processo de difusão, como por exemplo a difusão de um pingo de leite numa xícara de café. Faça um diagrama das posições das moléculas após um número N de passos ($N = 10, 10^2, 10^3, 10^4, 10^5, 10^6$).

4. Vamos verificar o aumento da entropia e a flecha do tempo no exercício anterior. Calcule a entropia como função do número de passos N das moléculas (que é proporcional ao tempo $t = N\Delta t$, onde Δt é o intervalo de tempo médio entre passos). A entropia é dada por

$$S = -\sum_i P_i \ln P_i, \tag{3}$$

onde P_i é a probabilidade de se encontrar o sistema em um certo micro-estado i. Para se definir o micro-estado i definimos um reticulado (muito maior que o tamanho de um passo) e vemos quantas moléculas encontramos em cada célula do reticulado.

VIAJANTE ALEATÓRIO EM 1D

Considere o processo de dar passos aleatórios com probabilidade p para a direita e com probabilidade complementar $q = 1 - p$ para a esquerda. Esses passos são tais que não guardam memória, i.e., o passo seguinte não é influenciado por nenhum dos passos anteriores. Qual a probabilidade de, após N passos, ter-se obtido n_d passos para a direita? Este é um problema de combinatória simples, e a resposta é

$$P\left(n_d, N\right) = \left(\begin{array}{c} N \\ n_d \end{array}\right) p^{n_d} q^{n_e} = \frac{N!}{n_d! n_e!} p^{n_d} q^{n_e}, \tag{4}$$

onde $n_e = N - n_d$ é o número de passos dados para a esquerda. Note que essa probabilidade está normalizada:

$$\sum_{n_d=0}^{N} \frac{N!}{n_d! \left(N - n_d\right)!} p^{n_d} q^{N-n_d} = \left(p + q\right)^N = 1^N = 1,$$

onde usamos a soma da binomial na primeira passagem.

Note que este problema pode ser pensado de outra forma. Qual a probabilidade de se ter obtido n_d caras ao jogar-se uma moeda N vezes. Aqui, p é a probabilidade de se obter cara e q é a probabilidade de se obter coroa. No caso de moedas não enviesadas, $p = q = \frac{1}{2}$.

Podemos perguntar qual o valor médio de passos para a direita $\langle n_d \rangle$ dado que o viajante deu N passos. Por definição,

$$\begin{aligned}
\langle n_d \rangle &= \sum_{n_d=0}^{N} n_d P\left(n_d, N\right) = \sum_{n_d=0}^{N} n_d \frac{N!}{n_d! \left(N - n_d\right)!} p^{n_d} q^{N-n_d} \\
&= p \sum_{n_d=0}^{N} n_d \frac{N!}{n_d! \left(N - n_d\right)!} p^{n_d - 1} q^{N-n_d} = p \frac{\partial}{\partial p} \left(\sum_{n_d=0}^{N} \frac{N!}{n_d! \left(N - n_d\right)!} p^{n_d} q^{N-n_d} \right) \\
&= p \frac{\partial}{\partial p} \left(p + q\right)^N = pN \left(p + q\right)^{N-1} = pN. \qquad (5)
\end{aligned}$$

Analogamente, o número médio de passos para a esquerda é $\langle n_e \rangle = qN$. Este resultado pode ser obtidido de outra maneira: $\langle n_e \rangle = \langle N - n_d \rangle = N - \langle n_d \rangle = \left(1 - p\right) N = qN$.

Qual é a posição média do viajante $\langle x \rangle$ após N passos? Se cada passo tem comprimento a, então

$$\langle x \rangle = a \left(\langle n_d \rangle - \langle n_e \rangle\right) = a \left(p - q\right) N = a \left(2 \langle n_d \rangle - N\right). \tag{6}$$

Note que para $p = q$ $\langle x \rangle = 0$, ou seja, o viajante não sai do lugar *em média*. Entretanto, quanto maior o número de passos, mais raro é encontrá-lo na origem. Para entender essa afirmação, é preciso calcular a dispersão. Calculemos então $\left\langle x^2 \right\rangle$. Certamente esse valor médio não é zero para $p = q$.

$$\left\langle x^2 \right\rangle = \left\langle a^2 \left(n_d - n_e\right)^2 \right\rangle = \left\langle a^2 \left(2n_d - N\right)^2 \right\rangle = a^2 \left\langle 4n_d^2 - 4Nn_d + N^2 \right\rangle = a^2 \left(4 \left\langle n_d^2 \right\rangle - 4N \langle n_d \rangle + N^2\right).$$

Precisamos então calcular

$$\left\langle n_d^2 \right\rangle = \sum_{n_d=0}^{N} n_d^2 \frac{N!}{n_d! \left(N - n_d\right)!} p^{n_d} q^{N-n_d}.$$

Note que seria conveniente ter $n_d \left(n_d - 1\right)$ para podermos usar o truque da derivada. Isso não é problema. Vamos calcular

$$\begin{aligned}
\langle n_d \left(n_d - 1\right) \rangle &= \sum_{n_d=0}^{N} n_d \left(n_d - 1\right) \frac{N!}{n_d! \left(N - n_d\right)!} p^{n_d} q^{N-n_d} \\
&= p^2 \sum_{n_d=0}^{N} n_d \left(n_d - 1\right) \frac{N!}{n_d! \left(N - n_d\right)!} p^{n_d - 2} q^{N-n_d} = p^2 \frac{\partial^2}{\partial p^2} \sum_{n_d=0}^{N} \frac{N!}{n_d! \left(N - n_d\right)!} p^{n_d} q^{N-n_d} \\
&= p^2 \frac{\partial^2}{\partial p^2} \left(p + q\right)^N = p^2 N \left(N - 1\right) \left(p + q\right)^{N-2} = p^2 N \left(N - 1\right).
\end{aligned}$$

Mas $\langle n_d (n_d - 1) \rangle = \langle n_d^2 \rangle - \langle n_d \rangle = \langle n_d^2 \rangle - pN$. Logo, $\langle n_d^2 \rangle = p^2 N (N-1) + pN = pN (p(N-1)+1) = pN (pN+q)$. A variância é

$$\sigma_{n_d}^2 \equiv \langle n_d^2 \rangle - \langle n_d \rangle^2 = p^2 N (N-1) + pN - p^2 N^2 = pN - p^2 N = pN (1-p) = pqN.$$

Analogamente, $\sigma_{n_e}^2 = \sigma_{n_d}^2 = pqN$.

Voltando para $\langle x^2 \rangle$, temos que

$$\begin{aligned} \sigma_x^2 &= \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = a^2 \left(4 \langle n_d^2 \rangle - 4N \langle n_d \rangle + N^2\right) - \left(a \left(2 \langle n_d \rangle - N\right)\right)^2 \\ &= 4a^2 \left(\langle n_d^2 \rangle - \langle n_d \rangle^2\right) = 4a^2 \sigma_{n_d}^2 = 4a^2 pqN. \end{aligned}$$

Note que $\langle x^2 \rangle \propto N$. Como o número de passos é proporcional ao tempo decorrido, então temos a lei de difusão $\sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} \propto x^{1/2}$.

Em dimensões superiores, o problema é muito similar. Na verdade, pode ser pensado como um passeio aleatório independente em cada uma das dimensões. A figura abaixo e a esquerda ilustra uma possível trajetória de um viajante aleatório em 2D onde cada passo (de comprimento a) é dado para as quatro direções com igual probabilidade. No total são dados $N = 10^4$ passos. O caminhante inicia seu trajeto na origem (vide círculo preto) e finaliza em $(34, -56)\,a$ (vide $\times$ preto). A figura abaixo e a direita ilustra 500 possíveis posições finais desse mesmo caminhante aleatório.