SFI5704 – Mecânica Estatística A

Projeto Computacional: Passeios Aleatórios

Instruções

Elabore o presente projeto na forma de um artigo (com 5 páginas no máximo), utilizando preferencialmente o programa `latex`. Os códigos podem ser escritos na linguagem computacional de sua preferência. Seu artigo deve conter gráficos e tabelas, resumo, introdução e conclusão, além de um apêndice, como descrito abaixo. Data de entrega: 30/09/2011.

Introdução

Utilizando um *gerador de números aleatórios* (e.g. a função `rand()` do fortran) — que fornece um valor r distribuído uniformemente entre 0 e 1 — podem ser "sorteados" eventos que devem ocorrer com uma probabilidade p (onde $0 \leq p \leq 1$), da seguinte forma:

- se $r \leq p$ dizemos o evento ocorreu;
- se $r > p$ dizemos que o evento não ocorreu.

Analogamente, a média $\langle x \rangle$ de uma variável aleatória x pode ser calculada gerando-se um número N grande de valores para x e tomando-se a sua média aritmética. (Claramente, o mesmo procedimento pode ser aplicado ao cálculo de momentos $\langle x^n \rangle$ da distribuição de x.) Note que a média assim calculada também é uma variável aleatória, com valor central dado pelo resultado exato para $\langle x \rangle$ e "largura" dependente de N. À medida que N aumenta, seu resultado para a média (e os outros momentos) torna-se cada vez mais preciso, pois a largura desta distribuição diminui com N. De fato, você pode demonstrar que a largura da distribuição desta variável (i.e. o erro na cálculo da média $\langle x \rangle$) é proporcional a $1/\sqrt{N}$. Onde apropriado, no presente projeto, verifique este comportamento e certifique-se de que as médias calculadas sejam suficientemente precisas.

Como um **exercício inicial**, calcule a média e a variância (i.e. $\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$) para as duas distribuições de x abaixo.

1. distribuição discreta: $x = +1, -1$ com probabilidade 1/2.

2. distribuição contínua: x uniforme em $[-1, 1]$.

Nos dois casos, compare o valor calculado numericamente (verificando a convergência, como descrito acima) ao valor previsto analiticamente. Para o caso da distribuição contínua, note que o momento $\langle x^n \rangle$ é dado por

$$\langle x^n \rangle \;=\; \frac{1}{2}\int_{-1}^{1} x^n \, dx \,.$$

Neste caso, você é capaz de representar graficamente a distribuição de probabilidades para a variável x? e para a variável x^2? seus resultados são os esperados? Inclua a resolução deste exercício, assim como outros comentários de caráter geral que considerar oportunos, como um apêndice de seu artigo. **Opcional**: faça o mesmo para a distribuição em semi-círculo (ver Reichl) e para a distribuição gaussiana.

1 Passeio Aleatório em Uma Dimensão

Considere "andarilhos aleatórios" (e.g. bêbados) em uma dimensão. Cada passo do percurso é aleatório e independente dos demais, dado com probabilidade p para a frente (valor +1) e $q = 1 - p$ para trás (valor -1). Seja s a distância percorrida

$$s = \sum_{t=1}^{T} x_t \,,$$

onde cada passo é representado pela variável aleatória x_t. Calcule (exatamente e numericamente) os valores de $\langle s \rangle$ e $\langle s^2 \rangle$ após T passos (i.e. "tempo" $t = T$). Use $p = q = 1/2$. (Em seus cálculos exatos utilize as relações para médias e variâncias dadas no Apêndice.)

Considere N andarilhos partindo da origem $s = 0$ em $t = 0$. Faça gráficos das trajetórias de cada andarilho (para N pequeno) e um histograma para a posição dos andarilhos no tempo $t = 1000$. O que esse gráfico representa? qual a relação com os valores de $\langle s \rangle$ e $\langle s^2 \rangle$ calculados acima?

Faça um gráfico de $\langle s^2 \rangle$ em função de t. Você consegue explicar a inclinação deste gráfico? como mudaria sua resposta se o passeio aleatório fosse dado por passos de tamanho variável, com distribuição uniforme entre -1 e 1?

2 Generalização para duas dimensões

Vamos agora chamar os andarilhos de moléculas. Elas se movem aleatoriamente em duas dimensões, dando passos para cima, baixo, esquerda e direita com probabilidade

1/4. Faça gráficos da distribuição espacial de N moléculas (partindo da origem em $t = 0$) após tempo $t = 10, 100, 1000, 10000, 10^5, 10^6$. Utilizando o código do exercício anterior, faça um histograma da coordenada x das moléculas no tempo $t = 1000$ e compare com o caso unidimensional.

Verifique que a função *entropia* do sistema aumenta com o tempo. Use a definição

$$S = -\sum P_i \ln P_i \,,$$

onde P_i é a probabilidade de encontrar o sistema em um *micro-estado* i. No nosso caso, podemos tomar P_i como a probabilidade de uma molécula estar em uma dada "célula" i do espaço, obtida e.g. dividindo o plano em caixinhas de lado um pouco maior que um passo temporal. (O mesmo critério pode ser usado para os histogramas produzidos acima.)

3 Agregação limitada por difusão (DLA)

Nesse modelo, que descreve inúmeros sistemas da natureza (como flocos de neve e o crescimento de cristais), consideramos um aglomerado (ou *cluster*) que incorpora a si partículas do meio em que se encontra, à medida que tais partículas "colidem" com o cluster durante seu processo de difusão no meio. Mais precisamente, já que o processo de difusão pode ser simulado por um passeio aleatório para as partículas, são considerados passeios aleatórios de partículas do meio, e quando o passeio interceptar qualquer ponto da superfície do cluster a partícula será incorporada a ele. Desta forma, cria-se um objeto pouco denso, com *dimensão fractal* menor que a dimensão do espaço considerado.

Simule um modelo DLA em duas dimensões, partindo de um cluster com apenas um sítio na origem no tempo zero (como no exercício acima), considerando a agregação de uma partícula de cada vez. Você pode "soltar" a partícula de uma distância grande comparada ao raio do cluster r_{cluster} (definido como a maior distância de um sítio do cluster até a origem), por exemplo tomando a posição inicial da partícula com distribuição uniforme no círculo de raio $5 \times r_{\text{cluster}}$. Para simplificar, siga apenas o passeio aleatório de partículas que se movimentem "na direção certa", isto é, abandone o passeio (e "solte" uma nova partícula) quando ele se afastar demais do cluster (e.g. se ele estiver a uma distância maior do que 1.5 vezes o raio inicial onde a partícula foi solta). Faça gráficos do crescimento do cluster para vários valores de t e calcule a dimensão fractal do cluster, obtida a partir de um gráfico da "massa" (i.e. número de pontos ocupados) do cluster em função do raio r, tomando-se a inclinação da curva no gráfico log-log. Como você colocaria barras de erro em seu gráfico?

Repita o exercício para o caso tridimensional.

Apêndice: Breve Introdução à Probabilidade

Seja x uma variável aleatória com distribuição discreta. A probabilidade de obter para x o valor X, dada por $P(x = X) \equiv \mu(X)$, é um número positivo e menor do que 1. A distribuição de probabilidades para x é normalizada, ou seja

$$\sum_X \mu(X) \;=\; 1\,.$$

Podemos calcular médias de funções $A(x)$ de x somando para cada possível valor X de x o produto de sua probabilidade pelo valor da função em X

$$\langle A(x)\rangle \;\equiv\; \sum_X A(X)\,\mu(X)\,.$$

(Claramente $A(x)$ também é uma variável aleatória.) Da mesma forma, aplicando a fórmula acima, temos a *variância* da função $A(x)$

$$\sigma^2(A) \;\equiv\; \langle [A(x) - \langle A(x)\rangle]^2\rangle \;=\; \langle [A(x)]^2\rangle \;-\; \langle A(x)\rangle^2\,.$$

Note que com $A(x) = x$ obtemos a média e variância da variável x.

Considere agora as variáveis aleatórias x_1 e x_2, com mesma distribuição de probabilidade ou não. Dizemos que as variáveis são *independentes* se a distribuição de probabilidade conjunta dessas variáveis satisfizer: $P(x_1; x_2) = P(x_1)\,P(x_2)$, ou seja a probabilidade de obter ao mesmo tempo determinados valores para x_1 e x_2 é igual ao produto das respectivas probabilidades nas duas distribuições independentes. Em outras palavras, para x_1 e x_2 independentes vale

$$\begin{aligned}
\langle A(x_1)\,B(x_2)\rangle_{12} \;&=\; \sum_{X_1}\sum_{X_2} A(x_1)\,B(x_2)\,P(x_1 = X_1; x_2 = X_2)\\
&=\; \sum_{X_1} A(x_1)\,P(x_1 = X_1) \;\; \sum_{X_2} A(x_2)\,P(x_2 = X_2)\\
&=\; \langle A(x_1)\rangle_1\,\langle B(x_2)\rangle_2\,.
\end{aligned}$$

Com as fórmulas acima é simples então demonstrar

$$\begin{aligned}
\langle A(x_1) \;+\; B(x_2)\rangle \;&=\; \langle A(x_1)\rangle \;+\; \langle B(x_2)\rangle\\
\langle a\,A(x)\rangle \;&=\; a\,\langle A(x)\rangle\\
\sigma^2(a\,A) \;&=\; a^2\,\langle A(x)\rangle\,.
\end{aligned}$$

para variáveis aleatórias x, x_1, x_2 quaisquer (a é uma constante) e

$$\sigma^2[A(x_1) \;+\; B(x_2)] \;=\; \sigma^2[A(x_1)] \;+\; \sigma^2[A(x_2)]\,.$$

para variáveis aleatórias x_1, x_2 independentes.

Os resultados acima podem ser generalizados para somas de números arbitrários de variáveis aleatórias e para distribuições de variáveis contínuas.