Notas de Aula da Disciplina Física Computacional

Alexandre Souto Martinez
Universidade de São Paulo - USP
Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto - FFCLRP
Departamento de Física - DF

tel.: 0xy16 3315-3720
email: asmartinez@ffclrp.usp.br

1 de Junho de 2018

Resumo

bla

Palavras-Chave:

Conteúdo

Capítulo 1

Caminhadas Aleatórias

1.1 Difusão Clássica

A teoria da difusão clássica está baseada em dois princípios físicos: (i) o transporte total de matéria através de uma superfície unitária é proporcional ao gradiente da densidade do material na direção perpendicular à área unitária, e (ii) no espaço livre, o material é conservado de modo que durante o movimento, unidades difusivas não são nem criadas nem destruídas.

A lei de Fick

$$\vec{J} = -D\vec{\nabla}n(\vec{r},t) \ . \tag{1.1}$$

e a equação da continuidade

$$\partial_t n + \vec{\nabla} \cdot \vec{J} = 0 \ . \tag{1.2}$$

são as duas equações que modelam estes conceitos na teoria da difusão clássica. Aqui, $n(\vec{r},t)$ é a densidade de número de partículas de interesse na posição $\vec{r}$ e no instante t, $D[\vec{r},n(\vec{r},t)]$ é o coeficiente de difusão, que pode ser função tanto de $\vec{r}$ quanto de $n(\vec{r},t)$ e finalmente $\vec{J}(\vec{r},t)$ é a densidade de corrente de partículas, que é definida em termos da velocidade local, $\vec{v}(\vec{r},t)$

$$\vec{J}(\vec{r},t) = n(\vec{r},t)\vec{v}(\vec{r},t) \ . \tag{1.3}$$

Destas três equações básicas pode-se derivar duas equações diferenciais básicas, uma para a densidade de partículas e a outra para a velocidade local da partícula. A teoria tradicional enfatiza que a equação de difusão é obtida pela substituição da Eq. 1.1 na Eq. 1.2

$$\partial_t n = \vec{\nabla} \cdot (D\vec{\nabla}n) \ . \tag{1.4}$$

Quando o coeficiente de difusão for uma constante independente da posição e densidade de partículas a Eq. 1.4 se torna:

$$\partial_t n = D\vec{\nabla}^2 n \ , \tag{1.5}$$

que em uma dimensão é escrita como:

$$\partial_t n = D\partial_x^2 n \ . \tag{1.6}$$

Quando a densidade de partículas for conhecida, a densidade de corrente $\vec{J}$ é obtida da Eq. 1.1.[1]

Um problema frequentemente discutido na teoria de difusão é o *problema de valor inicial*, i.e., determinar a distribuição de concentração $n(x,t)$, no instante t, quando a distribuição inicial $n(x,0)$ for conhecida. Uma vez que parte considerável de nossa discussão será relativa aos domínios espaciais sem fronteiras, apresentamos a solução para o problema do valor inicial em um domínio unidimensional infinito.

1.2 Caminhadas Aleatórias

Considere uma rede unidimensional com espaçamento regular ℓ. Da posição x_0, sai um caminhante, que em cada intervalo de tempo Δt, pode dar um passo à direita $(+)$, com probabilidade p, ou à esquerda $(-)$, com probabilidade $q = 1 - p$. Para descrever este processo consideramos a variável aleatória $\Delta x = \pm\ell$.

1.2.1 Estatística de Um Único Passo

O tamanho de passo médio é dado por:

$$\langle \Delta x \rangle = \ell p - \ell(1-p) = (2p-1)\ell \ . \tag{1.7}$$

Para calcular a variância, vamos primeiro calcular o segundo momento do comprimento dos passos, que é dado por:

$$\langle (\Delta x)^2 \rangle = \ell^2 p + (-\ell)^2(1-p) = \ell^2 \ . \tag{1.8}$$

[1] Um modo alternativo para descrever a difusão é encontrar a equação diferencial para o campo de velocidade $\vec{v}$. Quando $\vec{v}$ for conhecido, a densidade de partícula é obtida combinando as Eqs. 1.1 e 1.3. Nós nos restringimos ao caso de coeficiente de difusão constante. Assim: $\vec{v} = -D\vec{\nabla}(\log n)$. Uma equação diferencial para $\vec{v}$ é obtida notando que das Eqs. 1.2 e 1.3 que $\partial_t \vec{v} = -D\vec{\nabla}(\partial_t \log n) = D\vec{\nabla}[\vec{\nabla}\cdot(n\vec{v})/n] = -D\vec{\nabla}(\vec{\nabla}\cdot\vec{v} + \vec{v}\cdot\vec{\nabla}\log n)$. Portanto, incorporando $\vec{v} = -D\vec{\nabla}(\log n)$ nesta expressão obtem-se a equação a derivadas parciais para o campo de velocidade: $\partial_t \vec{v} = \vec{\nabla}(D\vec{\nabla}\cdot\vec{v} - \vec{v}^2)$. Portanto, até mesmo a teoria de diffusão elementar é não-linear se formulada em termos da variável errada.

A variância é dada por:

$$\sigma^2_{\Delta x} = \langle (\Delta x)^2 \rangle - \langle \Delta x \rangle^2 = 4\ell p(1-p) \; . \tag{1.9}$$

1.2.2 Estatística de Alguns Passos

Para descrever a trajetória de um caminhante, considere que ele avançou n_+ passos à direita e n_- passos à esquerda. O número total de passos é:

$$n = n_+ + n_- \; . \tag{1.10}$$

A posição do caminhante no instante de tempo $t = n\Delta t$, é:

$$x_n = x_0 + \sum_{i=1}^{n} \Delta x_i = x_0 + \ell(n_+ - n_-) \; , \tag{1.11}$$

e seu deslocamento :

$$\begin{aligned} \Delta s_n &= x_n - x_0 = \sum_{i=1}^{n} \Delta x_i = \ell(n_+ - n_-) \\ &= 2\ell(n_+ - n) \; . \end{aligned} \tag{1.12}$$

Uma vez que a probabilidade p não se altera e os passos são independentes, a probabilidade do viajante dar n_+ ? direita em n passos é dada pela distribuição binomial:

$$\begin{aligned} b_{n,p}(n_+) &= \binom{n}{n_+} p^{n_+}(1-p)^{1-n_+} \\ &= \frac{n! \; p^{n_+}(1-p)^{n-n_+}}{n_+!(n-n_+)!} \; . \end{aligned} \tag{1.13}$$

Esta distribuição tem média: $\langle n_+ \rangle = np$ e $\sigma^2_{n_+} = np(1-p)$.

Assim, a probabilidade do caminhante se deslocar Δs_n em n passos é dada pela distribuição binomial negativa:

$$\tilde{b}_{n,p}(\Delta s_n) = \frac{n! p^{(\Delta s_n - n)/2}(1-p)^{(\Delta s_n + n)/2}}{[(\Delta s_n - n)/2]![(\Delta s_n + n)/2]!} \; , \tag{1.14}$$

que tem média:

$$\langle \Delta s_n \rangle = 2\ell(\langle n_+ \rangle - n) = n\ell(2p-1) \, , \tag{1.15}$$

e variância ($\mathrm{Var}(ax+b) = a^2 \mathrm{Var}(x)$):

$$\sigma^2_{\Delta s_n} = 4\ell^2 \sigma^2_{n_+} = 4\ell^2 np(1-p) \; . \tag{1.16}$$

1.2.3 Estatística de Muitos Muitos Passos

Para $n \gg 1$, a Eq. 1.14 se torna uma distribuição normal:

$$G_{\langle \Delta s_n \rangle, \sigma^2_{\Delta s_n}}(\Delta s_n) = \frac{e^{(\Delta s_n - \langle \Delta s_n \rangle)^2/(2\sigma^2_{\Delta s_n})}}{\sqrt{2\pi\sigma^2_{\Delta s_n}}} \; . \tag{1.17}$$

Poderíamos de um modo muito simples chegar no resultado acima utilizando o *teorema do limite central* na Eq. 1.12. Para isto considere a Eq. 1.12, onde o deslocamento do caminhante é dado por: $\Delta s_n = \sum_{i=1}^{n} \Delta x_i$. Como o comprimento dos passos é uma variável aleatória, que não depende dos passos anteriores e tem variância finita, a distribuição de Δs_n se aproxima de uma gaussiana a medida que n aumenta. Esta gaussiana está centrada em $\langle \Delta s_n \rangle = \sum_{i=1}^{n} \langle \Delta x \rangle = n\ell(2p-1)$ e tem variância $\sigma^2_{\Delta s} = \sum_{i=1}^{n} \sigma^2_{\Delta x} = 4n\ell^2 p(1-p)$.

1.2.4 Algumas Aplicações

Paramagnetismo: Spins de Ising Independentes

Considere N partículas localizadas de spin 1/2 e momento magnético $\tilde{\mu}_0$ e independentes. Na presença de um campo magnético H, o hamiltoniano é dado por:

$$\mathcal{H} = -HM \tag{1.18}$$

$$M = \tilde{\mu}_0 \sum_{i=1}^{N} \sigma_i \tag{1.19}$$

$$\sigma_i = \pm 1 \; , \tag{1.20}$$

onde identifica-se o estado $\sigma = 1$ como spin up e o estado $\sigma = -1$ como spin down e M é a *magnetização* do sistema.

Fixada a energia em E, o sistema apresenta grande degenerescência com N_+ representando o número de spins $+1$ e N_- o número de spins -1. Assim:

$$N = N_+ + N_- \tag{1.21}$$

$$E = -(N_+ - N_-)\tilde{\mu}_0 H \tag{1.22}$$

com

$$N_\pm = \frac{N}{2}(1 \mp x) \tag{1.23}$$

$$x = \frac{E/N}{\tilde{\mu}_0 H} \; . \tag{1.24}$$

O número de configurações de N spins com energia E vale:

$$\begin{aligned}\Omega(E,N) &= \frac{N!}{N_+!N_-!} \\ &= \frac{N!}{\left[\frac{N}{2}(1-x)\right]!\left[\frac{N}{2}(1+x)\right]!}\end{aligned} \tag{1.25}$$

Portanto:

$$\begin{aligned}\ln\Omega(E,N) &= \ln N! - \ln\left[\frac{N}{2}(1-x)\right]! - \\ &\quad \ln\left[\frac{N}{2}(1+x)\right]!\end{aligned} \tag{1.26}$$

A entropia é calculada no limite termodinâmico ($N \gg 1$ e $E \gg \tilde{\mu}_0 H$, com E/N fixo). Deste modo, devemos imperativamente utilizar a aproximação de Stirling ($\ln N! = N\ln N$) que resulta na entropia:

$$\begin{aligned}\frac{S(E,N)}{K_B N} &= \frac{1}{2}[\ln 4 - (1-x)\ln(1-x) - \\ &\quad (1+x)\ln(1+x)]\end{aligned} \tag{1.27}$$

Observe que poderíamos ter considerado a aproximação de Stirling mais completa $\ln N! = N\ln N - N$ o que leva ao mesmo resultado pois os termos que não tem o logaritmo se anulam.

A entropia quando escrita em função de grandezas extensivas é uma equação fundamental, ou seja, ela contém toda a informação termodinâmica de equilíbrio.

O inverso da temperatura é dada por: $1/T = \partial_E S|_N$ e definindo:

$$\begin{aligned}\beta &= \frac{1}{K_B T} = \frac{1}{K_B}\partial_E S\Big|_N \\ &= \frac{1}{2\tilde{\mu}_0 H}\ln\left(\frac{1-x}{1+x}\right)\end{aligned} \tag{1.28}$$

A entropia é uma função côncava da energia e a região física, correspondente a temperaturas positivas, se verifica apenas para $E < 0$. Para $E = -N\tilde{\mu}_0 H$, todos os spins devem estar alinhados com o campo. Existe um único estado microscópico acessível ao sistema e a entropia deve ser nula. Quando $E = 0$, a entropia é máxima, nesta situação metade dos spins estão orientados para cima e a outra metade para baixo.

Da Eq. 1.28 obtemos a energia por partícula em função da temperatura:

$$\frac{E}{N} = -\tilde{\mu}_0 H \tanh(\beta H \tilde{\mu}_0)\ . \tag{1.29}$$

A magnetização do sistema é escrita como $M = -E/H$ assim a *magnetização por partícula* é escrita como:

$$m = \frac{M}{N} = \frac{-E/N}{H} = \tilde{\mu}_0 \tanh(\beta \tilde{\mu}_0 H) \ , \tag{1.30}$$

o que revela a saturação $m/\tilde{\mu}_0 = 1$ para baixas temperaturas ($\beta \gg \tilde{\mu}_0 H$) e o comportamento linear $m = \beta H$ para altas temperaturas ($\beta \ll \tilde{\mu}_0 H$).

A *susceptibilidade magnética* vale:

$$\chi_m(\beta, H) = \partial_H m|_\beta = \frac{\beta \tilde{\mu}_0^2}{\cosh^2(\beta \tilde{\mu}_0 H)} \ . \tag{1.31}$$

É interessante considerar o comportamento a campo nulo $H = 0$

$$\chi_{m,0}(\beta) = \beta \tilde{\mu}_0^2 = \frac{\tilde{\mu}_0}{K_B T} \ , \tag{1.32}$$

que é a *lei de Curie* para o magnetismo e verificada experimentalmente para uma grande variedade de sais paramagnéticos. Nota-se que a campo nulo a magnetização é nula, mas não a susceptibilidade.

Efeito Schottky: Spins de Bernoulli Independentes

Considere N partículas que podem ser encontradas em dois estados, com energia 0 ou $\tilde{\epsilon}$. O hamiltoniano do sistema vale:

$$\mathcal{H} = \tilde{\epsilon} \sum_{i=1}^{N} b_i \tag{1.33}$$

$$b_i = \begin{cases} 1 \\ 0 \end{cases} \ , \tag{1.34}$$

onde chamamos b_i como sendo o spin de Bernoulli em contraste ao spin de Ising $\sigma_i = \pm 1$. Estes dois spins estão relacionados pela transformação:

$$\sigma_i = 2b_i - 1 \ . \tag{1.35}$$

O número de partículas no estado 0 ? N_0 e o número de partículas nos estado $\tilde{\epsilon}$ é N_1. A energia e o número de partículas estão relacionados por:

$$N = N_0 + N_1 \tag{1.36}$$

$$E = N_0 \times 0 + N_1 \times \tilde{\epsilon} \tag{1.37}$$

o que implica em:

$$
\begin{aligned}
N_0 &= N(1-x) && (1.38)\\
N_1 &= Nx && (1.39)\\
x &= \frac{E/N}{\tilde{\epsilon}} \; . && (1.40)
\end{aligned}
$$

Para uma energia fixa E, o número de configurações para N spins é:

$$
\begin{aligned}
\Omega(E,N) &= \frac{N!}{N_0!N_1!}\\
&= \frac{N!}{(Nx)!\,[N(1-x)]!} \; . && (1.41)
\end{aligned}
$$

No limite termodinâmico ($N \gg 1$, $E \gg \tilde{\epsilon}$ de modo que E/N fixo), é possível calcular a entropia:

$$\frac{S(E,N)}{K_B N} = -[(1-x)\ln(1-x) + x\ln x] \tag{1.42}$$

que é a equação fundamental do sistema termodinâmico. Uma equação de estado é:

$$\beta = \frac{1}{K_B T} = \frac{1}{\tilde{\epsilon}} \ln\left(\frac{1-x}{x}\right) \; . \tag{1.43}$$

Isolando a energia por partícula temos:

$$\frac{E}{N} = \frac{\tilde{\epsilon} e^{-\beta\tilde{\epsilon}}}{1+e^{-\beta\tilde{\epsilon}}} \; . \tag{1.44}$$

O calor específico é dado por:

$$c = \partial_T(E/N) = \frac{K_B(\beta\tilde{\epsilon})^2 e^{-\beta\tilde{\epsilon}}}{(1+e^{-\beta\tilde{\epsilon}})^2} \; . \tag{1.45}$$

O calor específico se anula para altas ($\beta\tilde{\epsilon} \ll 1$) e baixas ($\beta\tilde{\epsilon} \gg 1$) temperaturas. O valor máximo do calor específico ocorre quando $\beta\tilde{\epsilon} \sim 1$ que é conhecido como *efeito Schottky*.

1.3 Caminhadas Aleatórias Persistentes

Como na seção anterior, considere uma rede unidimensional com espaçamento regular ℓ. Da posição x_0, sai um caminhante, que em cada intervalo de tempo Δt, pode dar um passo para a direita (+) com probabilidade p_0 ou para à esquerda $(-)$ com probabilidade $q_0 = 1 - p_0$. Nos passos subsequentes (também de tamanho ℓ), a probabilidade do caminhante manter o sentido da caminhada ? p e a probabilidade do caminhante reverter o sentido da caminhada é $q = 1 - p$. Para descrever este processo consideramos a variável aleatória $\sigma = \pm 1$, assim $\sigma_{i+1} = \sigma_i$ com probabilidade p e $\sigma_{i+1} = \sigma_i$ com probabilidade $1 - p$. Assim:

$$\langle \sigma \rangle = p - (1-p) = 2p - 1 \ , \tag{1.46}$$

e $\langle \sigma^2 \rangle = 1$, assim:

$$\mathrm{Var}(\sigma) = \langle \sigma^2 \rangle - \langle \sigma \rangle^2 = 4p(1-p) \ . \tag{1.47}$$

A posição do caminhante no instante de tempo $t = n\Delta t$, é:

$$x_n = x_0 + \ell \sum_{i=1}^{n} \prod_{j=1}^{i} \sigma_j \ , \tag{1.48}$$

O deslocamento do caminhante ?:

$$\Delta s_n = x_n - x_0 = \ell \sum_{i=1}^{n} \prod_{j=1}^{i} \sigma_j \ . \tag{1.49}$$

O deslocamento médio do caminhante após n passos vale: $\langle \Delta s_n \rangle = \ell \sum_{i=1}^{n} \langle \prod_{j=1}^{i} \sigma_j \rangle$. Como os passos são independentes: $\langle \prod_{j=1}^{i} \sigma_j \rangle = \langle \sigma \rangle^i = (2p-1)^i$, o que leva a:

$$\begin{aligned} \langle \Delta s_n \rangle &= \ell \sum_{i=1}^{n} \langle \sigma \rangle^i \\ &= \ell \langle \sigma \rangle \, \frac{1 - \langle \sigma \rangle^n}{1 - \langle \sigma \rangle} \ . \end{aligned} \tag{1.50}$$

Para $n \gg 1$, $\langle \Delta s_n \rangle = \ell \langle \sigma \rangle / (1 - \ell \langle \sigma \rangle)$.

Para calcular o segundo momento do deslocamento do caminhante após n passos, considere primeiramente o segundo momento do deslocamento para o primeiro passo: $\langle (\Delta s_1)^2 \rangle = \ell^2 \langle \sigma_1^2 \rangle = \ell^2$. Para o segundo passo tem-se: $\langle (\Delta s_2)^2 \rangle = \ell^2 \langle [\sigma_1 (1 + \sigma_2)]^2 \rangle = 2\ell^2 (1 + \langle \sigma \rangle$. Para o terceiro passo: $\langle (\Delta s_3)^2 \rangle = \ell^2 \langle \{\sigma_1 [1 + \sigma_2 (1 + \sigma_3)]\}^2 \rangle = \ell^2 (1 + 2 \langle \Delta s_2 \rangle / \ell + \langle (\Delta s_2)^2 \rangle / \ell^2$. É possível mostrar que para n arbitrário:

$$\begin{aligned}
\frac{\langle(\Delta s_n)^2\rangle}{\ell^2} &= 1 + 2\,\frac{\langle\Delta s_{n-1}\rangle}{\ell} + \frac{\langle(\Delta s_{n-1})^2\rangle}{\ell^2} \\
&= 1 + 2\,\frac{\langle\Delta s_{n-1}\rangle}{\ell} + 1 + 2\,\frac{\langle\Delta s_{n-2}\rangle}{\ell} + \frac{\langle(\Delta s_{n-2})^2\rangle}{\ell^2} \\
&= n - 1 + \frac{2}{\ell}\,\sum_{j=1}^{n-1}\langle\Delta s_{n-j}\rangle + \frac{\langle(\Delta s_1)^2\rangle}{\ell^2} \\
&= n + \frac{2\langle\sigma\rangle}{1-\langle\sigma\rangle}\,\sum_{j=1}^{n-1}(1-\langle\sigma\rangle^{n-j}) \\
&= n + \frac{2(n-1)\langle\sigma\rangle}{1-\langle\sigma\rangle} - \frac{2\langle\sigma\rangle}{1-\langle\sigma\rangle}\,\sum_{j=1}^{n-1}\langle\sigma\rangle^{n-j} \\
&= n + \frac{2(n-1)\langle\sigma\rangle}{1-\langle\sigma\rangle} - \frac{2\langle\sigma\rangle^2}{1-\langle\sigma\rangle}\,\sum_{j=0}^{n-2}\langle\sigma\rangle^{n-j} \\
&= n + \frac{2(n-1)\langle\sigma\rangle}{1-\langle\sigma\rangle} - \frac{2\langle\sigma\rangle^2}{1-\langle\sigma\rangle}\,\frac{1-\langle\sigma\rangle^{n-1}}{1-\langle\sigma\rangle} \\
&= \frac{n(1-\langle\sigma\rangle^2) - 2\langle\sigma\rangle(1-\langle\sigma\rangle^n)}{(1-\langle\sigma\rangle)^2}\,.
\end{aligned} \tag{1.51}$$

Para $n \gg 1$, expressão simplifica para

$$\langle(\Delta s_n)^2\rangle \approx \ell^2 n(1+\langle\sigma\rangle)/(1-\langle\sigma\rangle)\,. \tag{1.52}$$

A variância de do deslocamento do caminhante após n passos é dado por:

$$\begin{aligned}
\sigma^2_{\Delta s_n} &= \langle(\Delta s_n)^2\rangle - \langle\Delta s_n\rangle^2 \\
\frac{\sigma^2_{\Delta s_n}}{\ell^2} &= \frac{n(1-\langle\sigma\rangle^2) - 2\langle\sigma\rangle(1-\langle\sigma\rangle^n) - \langle\sigma\rangle^2(1-\langle\sigma\rangle^n)^2}{(1-\langle\sigma\rangle)^2}\,.
\end{aligned} \tag{1.53}$$

Assim se $n/\langle\sigma\rangle \gg 1$, então:

$$\sigma^2_{\Delta s_n} = \langle(\Delta s_n)^2\rangle = \ell^2 n\,\frac{1+\langle\sigma\rangle}{1-\langle\sigma\rangle}\,. \tag{1.54}$$

Problemas

1. Considere um caminhante que a partir do sítio x_0 da um passo de comprimento ℓ com probabilidade p para a direita e com probabilidade

$q = 1 - p$ para a esquerda. Assim este processo é modelado pela recorrência:

$$x_{i+1} = x_i + \Delta x_i$$

com

$$\Delta x = \begin{cases} +\ell & p \\ -\ell & q = 1 - p \end{cases}$$

de modo que $\mathrm{E}(\Delta x) = (2p - 1)\ell$ e $\mathrm{Var}(\Delta x) = \mathrm{E}[(\Delta x)^2] - \mathrm{E}^2(\Delta x) = 4npq\ell^2$. Sabemos que para $n \gg 1$, a variável deslocamento $d_n = x_n - x_0$ segue uma distribuição normal com média $\mathrm{E}(d) = (2p-1)\ell n$ e variância $\mathrm{Var}(d) = 4npq\ell^2$.

Implemente o código abaixo e verique as afirmações acima

```
clear;
N   = 100;         // # max de passos
M   = 1000;      // # de realizacoes
x0  = 0;          // condicao inicial
rand('seed',2);  // semente do gerador
                 // de #'s aleatorios
p   = .7;        // prob. ir direita
ell = 1
s = x0;
for m = 1:M
   xn = x0;
   for n = 1:N
      if (rand() < p)
        xn = xn + ell;
      else
        xn = xn - ell;
      end
    end
    s=[s;xn];
end
clf();
scf(1);
plot2d(s)
scf(2);
histplot(100,s)
media = mean(s)
var   = variance(s)
```

Obtenha a distribuição de d_n para n pequeno.

2. Comente o seguinte código em Scilab

```
clear;
N   = 100;        // # max de passos
M   = 1000;     // # de realizacoes
x0  = 0;         // condicao inicial
rand('seed',2);  // semente do gerador
                 // de #'s aleatorios
p   = .7;        // prob. ir direita
ell = 1
s = x0;
for m = 1:M
   x    =  rand(1:N);
   i    =  find(x < p);
   j    =  find(x >= p);
   x(i) =  ell;
   x(j) = -ell;
   xn   =  sum(x) + x0;
   s    = [s;xn];
end
clf();
scf(1);
plot2d(s)
scf(2);
histplot(100,s)
media = mean(s)
var   = variance(s)
```

3. **Caminhada Aleatória Persistente em Uma Dimensão** Em uma caminhada aleatória persistente, a probabilidade de transição (ou pulo) depende da transição ocorrida no instante anterior. Considere uma rede unidimensional e suponha que $N-1$ passos tenham sido dados. O passo N é dado na mesma direção com probabilidade α e na direção oposta com probabilidade $1-\alpha$. Uma caminhada aleatória persistente pode ser considerada como uma caminhada multi estados na qual o estado em que a caminhada está definido pela última transição. Escreva um programa de Monte Carlo para uma caminhada aleatória persistente em uma dimensão.

(a) Calcule: $\langle x(N)\rangle$, $\langle x^2(N)\rangle$, $\langle \Delta x^2(N)\rangle$ e a distribuição $P_N(x)$. Obseve que é necessário especificar ambos, a posição inicial x_0 e a direção inicial do viajante.

(b) Determine $\langle \Delta x^2(N)\rangle$ para $N = 8, 64, 256$ e 512 com $\alpha = 1/4$ e $\alpha = 3/4$.

   i. Mostre graficamente que $\langle \Delta x^2(N)\rangle \sim N^{2\nu}$.

   ii. Do gráfico, usando o método dos mínimos quadrados (tome o logaritmo de ambas variáveis e use a função lsq() no Scilab), estime o valor de μ para $N \gg 1$.

(c) Como que uma caminhada aleatória persistente se diferencia de uma caminhada aleatória tendenciosa com $p \neq q$?

4. **Caminhada Aleatória em Duas Dimensões.** Construa uma caminhada aleatória em duas dimensões em uma rede quadrada. A probabilidade de ir para o norte é p_N, a de ir para o oeste é p_W, para o sul p_S e para o leste p_E de modo que $p_N + p_W + p_S + p_E = 1$. Faça um histograma da distância entre a posição inicial e final das M realiza??es (part?culas) ap?s N passos (tempo) e calcule a posi??o m?dia assim como o deslocamento quadrático médio $\langle R^2\rangle = \langle x^2 + y^2\rangle$. Utilize os seguites valores:

   (a) $M = 10000$, $p_N = p_W = p_S = p_E$ (caso isotrópico),

   (b) $M = 10000$, $p_N \gg p_S$ e $p_W = p_E$,

   (c) $M = 10000$, $p_N = p_S$ e $p_W \ll p_E$,

   (d) $M = 10000$, $p_N \neq p_W \neq p_S \neq p_E$.

```
clear;
N   = 100;        // # max de passos
M   = 10;         // # de realizacoes
x0  = 0;          // condicao inicial
y0  = 0;
rand('seed',2);   // semente do gerador
                  // de #'s aleatorios
p_N   = .25;      // prob. ir norte
p_W   = .25;      // prob. ir oeste
p_S   = .25;      // prob. ir sul
              // p_E = 1 - p_N - p_W - p_S
ell = 1
s = [x0, y0];
```

```
for m = 1:M
   xn = x0;
   yn = y0;
   for n = 1:N
      r = rand();
      if (r < p_N) then
        yn = yn + ell;
      elseif (r < p_W + p_N) then
        xn = xn - ell;
      elseif (r < p_S + p_W + p_N) then
        yn = yn - ell
      else
        xn = xn + ell
    end;
   end
    s=[s;[xn,yn]];
end
clf();
scf(1);
plot2d(s)  // tirar as linhas e
           // deixar somente os pontos
media = mean(s)
var   = variance(s)
```

5. **Caminhadas Aleatórias Restritas em Uma e Duas Dimensões**

   (a) **Armadilhas (1D).** Considere uma rede unidimensional com armadilhas nos sítios $x = 0$ e $x = a$ com $(a > 0)$. Um viajante inicia a caminhada no sítio x_0 $(0 < x_a < a)$ e realiza passos unitários com a mesma probabilidade à esquerda e à direita. Quando o viajante cai em uma armadilha, ele morre. Faça uma simulação de Monte Carlo e verique que o número médio de passos τ de sobrevivência do viajante (tempo de primeira passagem) é dado por:
   $$\tau = \frac{x_0(a - x_0)}{2D} \ ,$$
   onde D é o coeficiente de auto-difusão na ausência de armadilhas. A média é realizada sobre todas as possíveis configurações de caminhadas.

   (b) **Barreiras Reflexivas (1D).** Considere um rede unidimensional com sítios reflexivos em $x = -a$ e $x = a$. Se um viajante chega em

$x = a$, ele é refletido no próximo passo para $x = a - 1$. Em $t = 0$, o viajante começa a caminhada em $x_0 = 0$ e dá passos unitários com a mesma probabilidade à esquerda e à direita. Escreva um programa de Monte Carlo para determinar a probabilidade de que o viajante esteja na posição x após N passos $P_N(x)$ com e sem as barreiras reflexivas. Qual é o valor mínimo de N para qual é possível distingir as duas distribuições de probabilidade?

(c) **Queda de um floco de Neve (2D).** Considere uma marcha aleatória que inicia em um sítio a uma distância $y = h$ acima de uma linha horizontal ($y = 0$). Se a probabilidade de um passo para baixo for maior do que a probabilidade para um passo para cima, o viajante vai eventualmente alcançar um sítio na linha horizontal $y = 0$. Esta caminhada é um modelo do caimento de um floco de neve. Faça uma simulação de Monte Carlo ($p_N = 0,1$, $p_S = 0,6$ e $p_W = p_E = 0,15$)

   i. para determinar o tempo médio τ para um floco de neve alcançar algum sítio na linha $y = 0$ e encontre a dependência funcional de τ e h.

   ii. É possível definir uma velocidade para a direção vertical?

   iii. Como o floco de neve pode variar em x ele sofre um deslocamento Δx em $y = 0$. Como que $\langle \Delta x^2 \rangle$ depende de τ e h?

```
clear;
close;
M  = 2; // # de realizacoes
y0 = 100;//altura
x0 =0; // condicao inicial
rand('seed',2); // semente do gerador de #?s aleatorios
p_N = .05; // prob. ir norte
p_W = .4;  // prob. ir oeste
p_S = .15; // prob. ir sul
p_E = 1 - p_N - p_W - p_S;
ell = 1;
r= sqrt((x0*x0) + (y0*y0));
tempo=[0];
for m = 0:M
  x  = [x0];//para limpar o grafico da trajet?tia
  y  = [y0];
  xn = x0
  yn = y0;
  cont=0;//contador
    while yn ~= 0
      r = rand();
      if (r < p_N) then
       yn = yn + ell;

      elseif (r < p_W + p_N) then
       xn = xn - ell;

      elseif (r < p_S + p_W + p_N) then
       yn = yn - ell;

      else
       xn = xn + ell;

      end;
      cont=cont+1;                 //tempo
      x = [x,xn];
      y =  [y,yn];
    end
    xg=x+.10*m;
    scf(m);
    plot2d(xg,y,style=[-9])
```

```
    legend('trajet?ria')
    x1    = [x,xn];
    tempo = [tempo,cont];                  //tempo de todas inteira??es
    r     = [r,sqrt((xn*xn) + (yn*yn))]; //dist?ncia percorrida
end
scf(m+1)
histplot(5,tempo)       //histograma da m?dia temporal
legend('tempo m?dio')
tempo_m  = mean(tempo)   //m?dia
vel_em_Y = y0/tempo_m    //velocidade m?dia em y
var      = variance(x1)
```

6. Gás na rede Considere uma rede quadrada com densidade de partículas ρ. Cada partícula se movimenta indo aleatoriamente para os sítios mais próximos. Duas ou mais partículas não podem ocupar o mesmo sítio em um dado instante. Este modelo é um modelo de gás na rede, onde observa-se que é necessário armazenar as posições das M partículas. Considere o seguinte algoritmo:

   - Ocupe aleatoriamente os $L \times L$ sítios de um rede quadrada com M partículas sendo que duas ou mais partículas não podem ocupar o mesmo sítio. A densidade de partículas é: $\rho = M/L^2$. Indexe cada partícula (para distinguir umas da outras) e grave a posição inicial em um vetor.
   - Em cada passo de tempo escolha aleatoriamente uma partícula e um sítio primeiro vizinho. Se o sítio estiver vazio, movimente a partícula, caso contrário a partícula permanece na mesma posição. Repita este procedimento N vezes.

   Calcule o coeficiente de difusão:

   $$D(N) = \frac{\langle \Delta R^2 \rangle}{2dN} ,$$

   onde $\langle \Delta R^2 \rangle$? o deslocamento quadrático médio por partícula em N passos ($N \gg 1$).

7. Considere os seguintes problemas:

   (a) Marcha aleatória no contínuo (12.7),

   (b) Marcha aleatória com tamanho de passo variável (12.8)

   (c) Teorema central do limite (12.9)

(d) Gerando uma gaussiana (12.10)

(e) Marcha aleatória em redes contendo armadilhas (12.11)