

Métodos Computacionais em Física: Mecânica Estatística

Aula: Random Walk.

Mecânica Estatística – Visão geral

- Sistemas aleatórios: *random walk*, processos difusivos, variáveis estocásticas.
- Modelo de Ising em 1D: transições de fase.
- Método de Monte Carlo.
- Autômatos celulares.

Aula: Random walk - Objetivos

Ao final desta aula, você deverá ser capaz de:

- 1) Implementar um script em Octave/MatLab para simular um random walk (passeio aleatório) em 1D.
- 2) Caracterizar quantidades relevantes em um conjunto “grande” de *walkers* tais como: o deslocamento médio e a variância σ^2 em função do tempo.
- 3) Identificar a assinatura do comportamento difusivo $\sigma^2 \sim t$ para a variância.

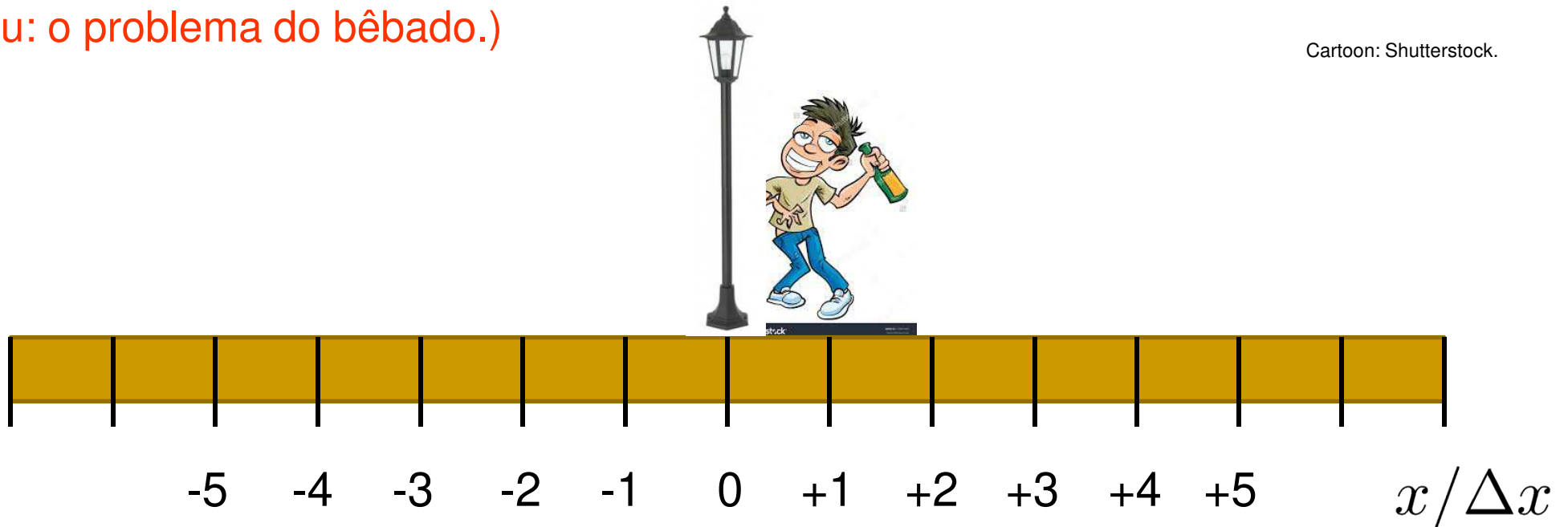
Tarefa (Partes 1 e 2): Calcular os deslocamentos $x_i(t_n)$, o deslocamento médio $\langle x \rangle(t_n)$, e a variância $\sigma^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$ de um ensemble de “random walkers” em 1D.

Tempo aproximado: 20 a 30 min (**lembrando que o *debug* é a maior parte disso!**).

Random Walk (passeio aleatório)

(ou: o problema do bêbado.)

Cartoon: Shutterstock.



- O bêbado (ou “walker”) parte da posição $x(1)=0$ no tempo $t_1=0$ (poste).
- Deslocamento após n passos: $x(n+1)$ no tempo $t_n=(n-1) \Delta t$
- A cada passo (de tamanho fixo Δx): probabilidade de 50% de ser para a direita [$x(n+1)=x(n)+\Delta x$] ou 50% esquerda [$x(n+1)=x(n)-\Delta x$].
- A probabilidade do passo é *independente de $x(n)$* !

Aula 17 – Tarefa – Parte 1

Calcule o deslocamento $x(n)$ de um random walk em 1D

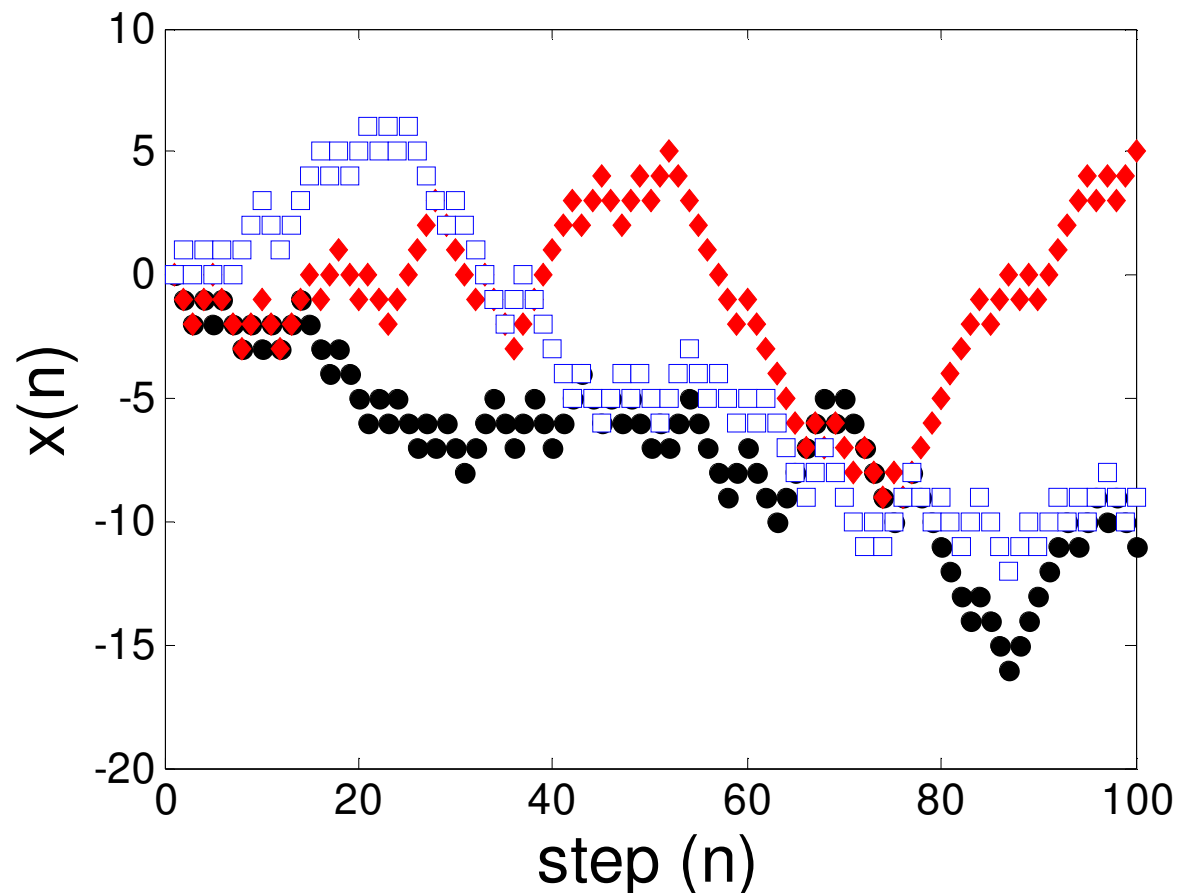
- *A cada passo, decida se o walker vai para a direita ou para a esquerda usando o comando `rand` (que retorna um número “aleatório” entre 0 e 1). Use $\Delta x=1$.*
 - *Exemplo: $p=\text{rand}$;*
 - *Se $p \geq 1/2$: passo para a direita. Se $p < 1/2$, esquerda.*
- *Começando em $x(1)=0$ Faça um plot de $x(n+1)$ para n de 0 a 100 passos.*
- *Repita o processo (outra realização ou outro “bêbado”) mais duas vezes e plote os 3 deslocamentos no mesmo gráfico.*

Random Walk – Tarefa – Parte 1

Calcule o deslocamento $x(n)$ de um random walk em 1D

- *Dica: não é necessário armazenar todos os $x(n)$!*
(plote um de cada vez)
- *Exemplo:*

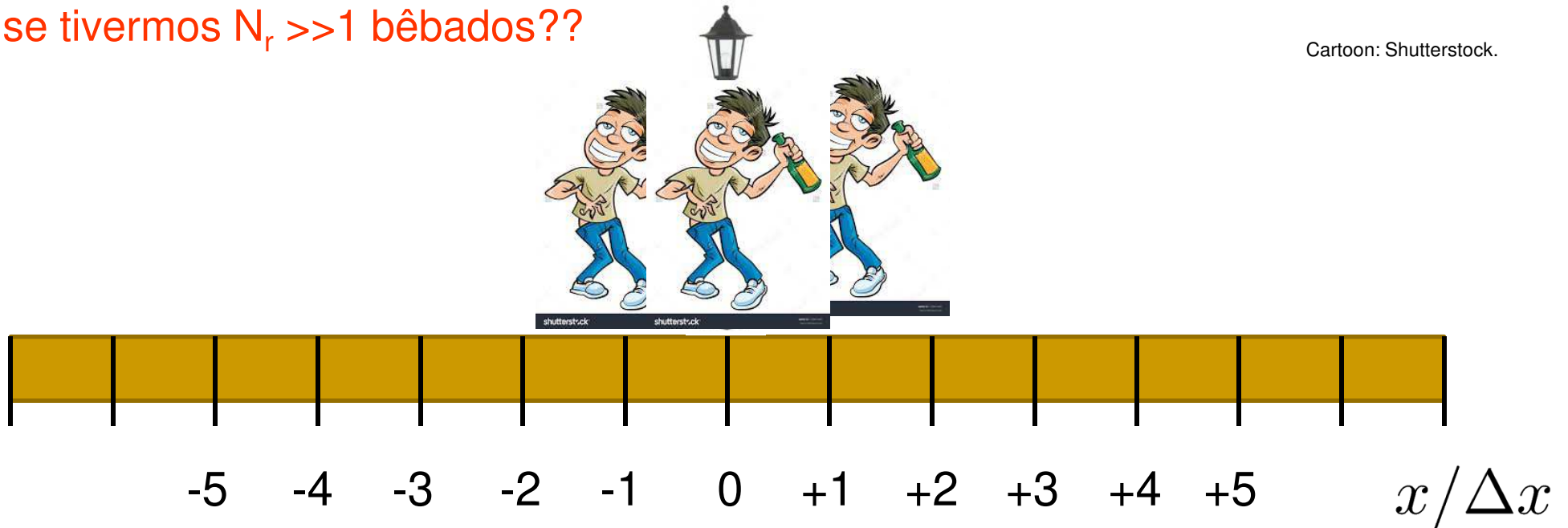
E esse? É um random walk?



Random Walk: vários “walkers”.

E se tivermos $N_r \gg 1$ bêbados??

Cartoon: Shutterstock.



Perguntas a serem respondidas:

- Qual o *deslocamento médio* $\langle x(n) \rangle_{N_r}$ do grupo após n passos?
- Qual a *deslocamento quadrado médio* $\langle x^2(n) \rangle_{N_r}$ do grupo após n passos?
- Como a *variância* $\sigma(n) = \sqrt{\langle x^2(n) \rangle_{N_r} - \langle x(n) \rangle_{N_r}^2}$ depende de n ?

Random Walk: vários “walkers”.

Deslocamento do r-ésimo walker após n passos: $x_r(n)$

Agora fazemos *estatística sobre o grupo de walkers*.

- *Deslocamento médio após n passos:*

$$\langle x(n) \rangle_{N_r} = \frac{1}{N_r} \sum_{r=1}^{N_r} x_r(n)$$

- *Deslocamento quadrado médio:*

$$\langle x^2(n) \rangle_{N_r} = \frac{1}{N_r} \sum_{r=1}^{N_r} x_r^2(n)$$

- *Variância da distribuição:*

$$\sigma^2(n) = \langle x^2(n) \rangle_{N_r} - \langle x(n) \rangle_{N_r}^2$$

Random Walk – Tarefa – Parte 2

Calcule os deslocamentos $x_r(n)$ de $N_r=500$ walkers em 1D.

- *Faça gráficos de:* $\langle x(n) \rangle_{N_r}$ $\langle x^2(n) \rangle_{N_r}$

$$\sigma(n) = \sqrt{\langle x^2(n) \rangle_{N_r} - \langle x(n) \rangle_{N_r}^2}$$

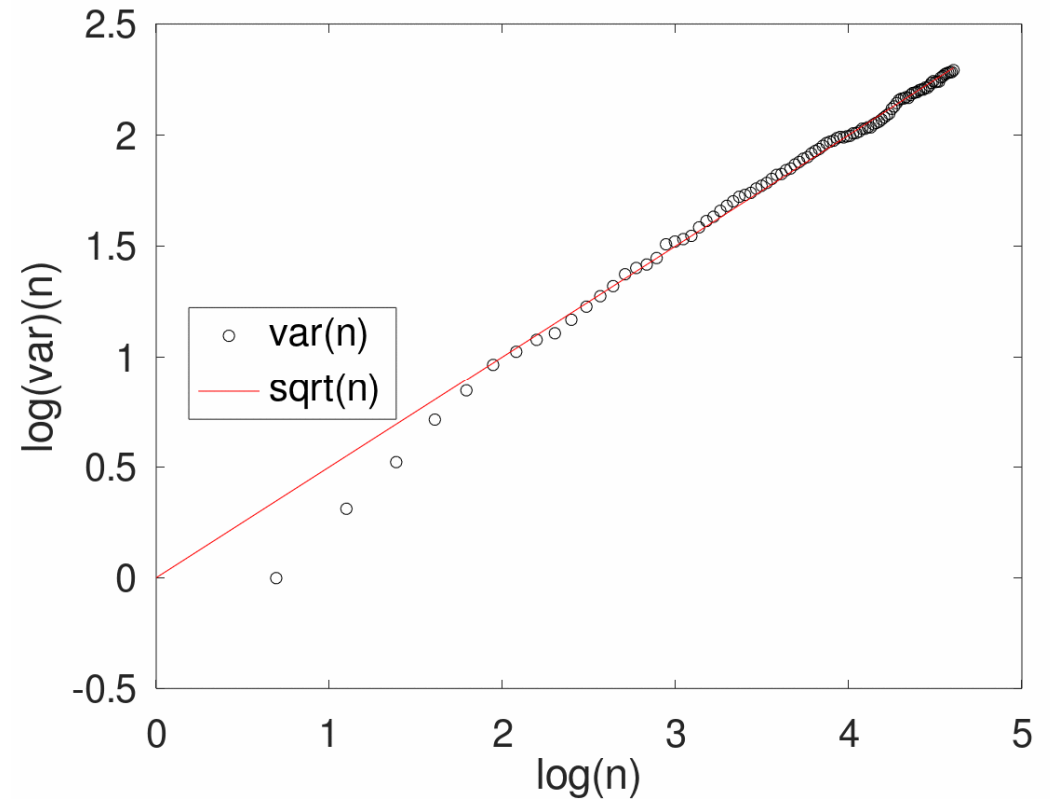
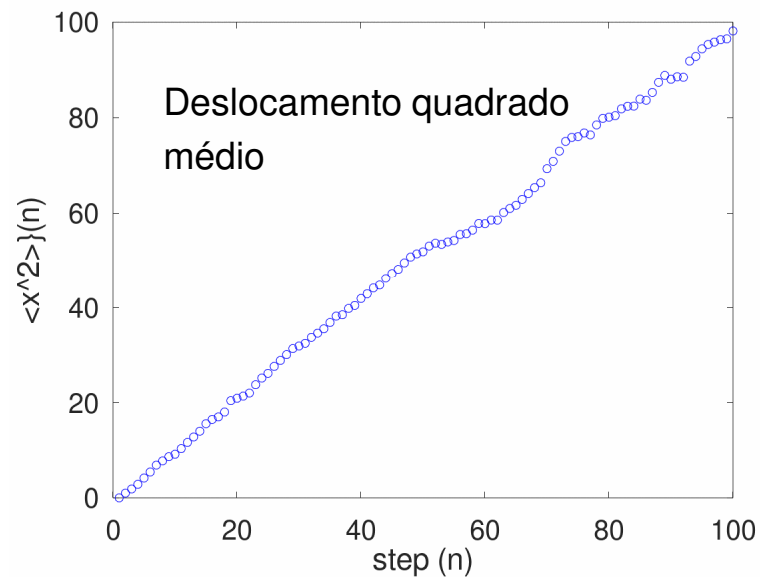
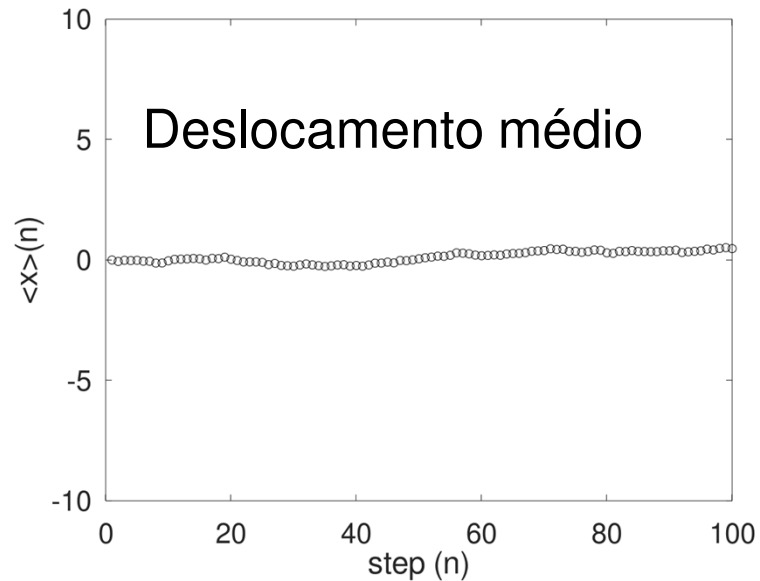
de n de 0 a 100 passos.

- *Mostre (graficamente) que, para n e N_r “grandes”,*

$$\langle x(n) \rangle_{N_r} \sim 0 \quad \text{e} \quad \langle x^2(n) \rangle_{N_r} \sim n$$

- *Isto resulta na assinatura de um processo difusivo: $\sigma(n) \sim n^{1/2}$*

Random Walk – Tarefa – Parte 2



Variância (gráfico log-log)