

PROJETO 2 - Introdução à Física Computacional - IFSC - USP - 2023-2
SISTEMAS ALEATÓRIOS

Data de entrega: 28/09/2023 (quinta)

Se quisermos entender os fenômenos macroscópicos em termos de seus constituintes microscópicos o fato das escalas macroscópicas serem extremamente elevadas em comparação com as microscópicas (1cm $\sim 10^6$ dim. microscópica do espaço, 1 seg $\sim 10^{10}\Delta t$ microscópico, 1 g $\sim 10^{23}$ dim. de massa microscópica) indica que o entendimento do mundo "macro" em termos do "micro" não deve ser feito por meio da solução de equações diferenciais acopladas (tipicamente em número de 10^{23}). Primeiramente seria inadmissível computacionalmente e mais ainda não saberíamos o que fazer com tais resultados.

Para circundar tal fato 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. No computador o que fazemos é produzir uma sequência de números "pseudo-aleatórios". Tal sequência de números se aproxima, dentro de certo intervalo (o período da sequência) a uma sequência aleatória. Uma maneira simples de se gerar tais sequências é dada pela relação de recorrência:

$$x_{n+1} = (ax_n + b) \text{ mod } m, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (1)$$

onde a e b são co-primos e m (período da sequência) em geral é o maior inteiro disponível no computador. No caso da linguagem FORTRAN existe a função intrínseca $rand()$, que

nos fornece diretamente uma sequência pseudo-aleatória com números compreendidos entre 0 e 1.

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

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

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.

(B) Vamos considerar agora o problema de andarilhos aleatórios em uma dimensão. Neste problema em cada unidade de tempo cada caminhante, independentemente onde esteja, tem uma probabilidade p de dar um passo à direita e uma probabilidade complementar $q = 1 - p$ de dar um passo à esquerda. Esta situação, no caso em que $p = q = 1/2$, corresponde a de um caminhante tão desorientado (por exemplo devido ao excesso de bebida) que ele não se lembra de onde veio e qual o rumo certo a tomar. O caso em que $p \neq q$ corresponde ao viajante aleatório em uma ladeira. A questão neste problema é o cálculo de $\langle x \rangle$ e $\langle x^2 \rangle$ após um certo número N de passos.

(b1) Considere um número grande M de andarilhos (escolha M e use $p = q = \frac{1}{2}$), todos partindo da origem ($x = 0$) no tempo inicial ($t = 0$). Após $N = 1000$ passos faça um histograma do número de andarilhos $n(x)$ em intervalos de espaço ($n(x) \times x$). Que tipo de curva você obteve? Calcule $\langle x \rangle$ e $\langle x^2 \rangle$?

(b2) 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 $\langle x^2 \rangle$?

(C) Generalize o problema do item (B) para o caso bidimensional. Agora o andarilho anda com iguais chances ($\frac{1}{4}$) em qualquer direção dos pontos cardeais: norte, sul, leste e oeste. Calcule $\langle \vec{r} \rangle$ e $\Delta^2 = \langle \vec{r}^2 \rangle - \langle \vec{r} \rangle \cdot \langle \vec{r} \rangle$.

Reparem 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 na xícara de café . Faça um diagrama das posições das moléculas após um número N de passos ($N = 10, 100, 1000, 10000, 10^5, 10^6$).

(D) 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 médio entre passos). A entropia é dada por

$$S = - \sum_i P_i \ln P_i, \quad (3)$$

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 (maior que o tamanho de um passo) e vemos quantas moléculas encontramos em cada célula do reticulado.