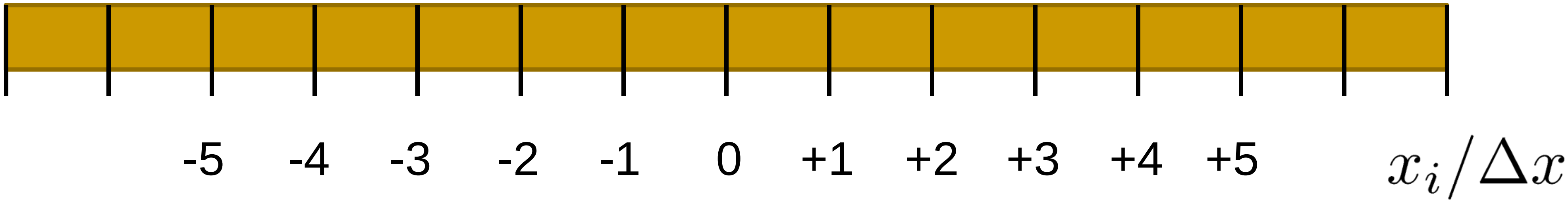
Random Walk e Difusão



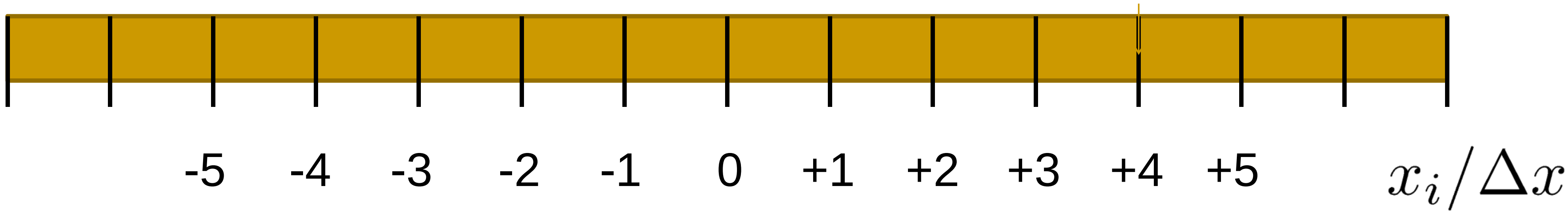
Dado um *ensemble* de walkers, seja P(i,n) a probabilidade de um walker estar na posição $x_i=(i-1)\Delta x$ no passo n.

- Como os walkers dão um passo aleatório por vez ou para a esquerda (i-1) ou para direita (i+1) (com igual probabilidade) e não pode ficar parado:

$$P(i,n+1) = \frac{1}{2}\left[P(i-1,n) + P(i+1,n)\right]$$

- Ou seja: **se** existe um walker na posição i no passo n+1, há 50% de chance do walker ter vindo da posição x_{i-1} e outros 50% de chance dele ter vindo da posição x_{i+1} (na verdade, estamos somando probabilidades!)
- Lembrando que as probabilidade são *independentes de* x_i!

Random Walk e Difusão



Dado um *ensemble* de walkers, seja P(i,n) a probabilidade de um walker estar na posição $x_i=(i-1)\Delta x$ no passo n.

- Subtraindo P(i,n) dos dois lados:

$$P(i,n+1)-P(i,n)=\frac{1}{2}\left[P(i-1,n)-2P(i,n)+P(i+1,n)\right]$$

- Agora, considerando que os passos ocorrem em intervalos de tempo iguais

$t_n=(n-1)\Delta t$ e dividindo por Δt e Δx^2 dos dois lados:

$$\frac{P(i,n+1)-P(i,n)}{\Delta t}=\frac{\Delta x^2}{2\Delta t}\left[\frac{P(i-1,n)-2P(i,n)+P(i+1,n)}{\Delta x^2}\right]$$

Random Walk e Difusão

- Agora vem a aproximação crucial: a *densidade* ρ(i,n) de partículas na posição x_i e tempo t_n será diretamente proporcional à probabilidade P(i,n) de se encontrar uma partícula nesta posição e tempo. Logo:

$$\frac{\rho(i,n+1)-\rho(i,n)}{\Delta t} = \frac{\Delta x^2}{2\Delta t}\left[\frac{\rho(i-1,n)-2\rho(i,n)+\rho(i+1,n)}{\Delta x^2}\right]$$

- Isto é uma aproximação discreta para uma equação diferencial de **difusão**:

$$\frac{\partial \rho(x,t)}{\partial t} = D\frac{\partial^2 \rho(x,t)}{\partial x^2}$$

onde associamos o *coeficiente de difusão* com $D = \dfrac{\Delta x^2}{2\Delta t}$

Solução Numérica da Equação de Difusão

Contínuo
$$\frac{\partial \rho(x,t)}{\partial t} = D\frac{\partial^2 \rho(x,t)}{\partial x^2}$$

Discreto
$$\frac{\rho(i,n+1)-\rho(i,n)}{\Delta t} = D\left[\frac{\rho(i-1,n)-2\rho(i,n)+\rho(i+1,n)}{\Delta x^2}\right]$$

- De modo similar ao que fizemos com a equação de onda, definimos: $k = \dfrac{2\Delta t D}{\Delta x^2}$

- Assim. dado ρ(i,n) para todo i, encontramos ρ(i,n+1) através de:

$$\boxed{\rho(i,n+1) = (1-k)\,\rho(i,n) + (k/2)\left[\rho(i-1,n)+\rho(i+1,n)\right]}$$

- Usaremos k≤ 1 e o passo em x será dado por $\Delta x = \sqrt{\dfrac{2D\Delta t}{k}}$

Aula 18 – Tarefa (Fazer upload!)

Resolva numericamente a equação de difusão para ρ(x,t) entre $-1 \leq x \leq 1$.

- *Considere que inicialmente $\rho(x,0)$ tem o perfil gaussiano centrado em $x_c=0m$ e com desvio padrão inicial $\sigma=0.1\ m^{-1}$:*

$$\rho(x,t=0) = \frac{e^{-x^2/(2\sigma^2)}}{\sigma\sqrt{2\pi}}$$

- *Faça um script que calule $\rho(x,t)$ de $t=0$ a $t=0{,}05s$ com passo $\Delta t=0{,}0001$ e $k=2\Delta t D/\Delta x^2 =1$ (determine o Δx a ser usado).*

- *Use condições de contorno $\rho(x=\pm 1,t)=0$.*

- *Faça um "filme" (vide script de ondas!) da evolução temporal.*

Aula 18 – Tarefa – Dicas e Debug

- *Para os parâmetros mencionados, obtemos Δx=0.0141.*

- *Assim, o valor de x mais próximo de "0" será x=0.0041 em i=72.*

- *Seguem os valores de ρ(i=71,72,73,n=1,2,3,4,5).*

```
n=1: tempo=0.0000  rho(71,n)=3.9693 rho(72,n)=3.9861 rho(73,n)=3.9237
n=2: tempo=0.0001  rho(71,n)=3.9302 rho(72,n)=3.9465 rho(73,n)=3.8859
n=3: tempo=0.0002  rho(71,n)=3.8923 rho(72,n)=3.9081 rho(73,n)=3.8492
n=4: tempo=0.0003  rho(71,n)=3.8554 rho(72,n)=3.8708 rho(73,n)=3.8136
n=5: tempo=0.0004  rho(71,n)=3.8196 rho(72,n)=3.8345 rho(73,n)=3.7789
```