Métodos Computacionais em Física: Mecânica Estatística

Aula: random walk e processos difusivos.

Aula: Random Walk e difusão- Objetivos

Ao final desta aula, você deverá ser capaz de:

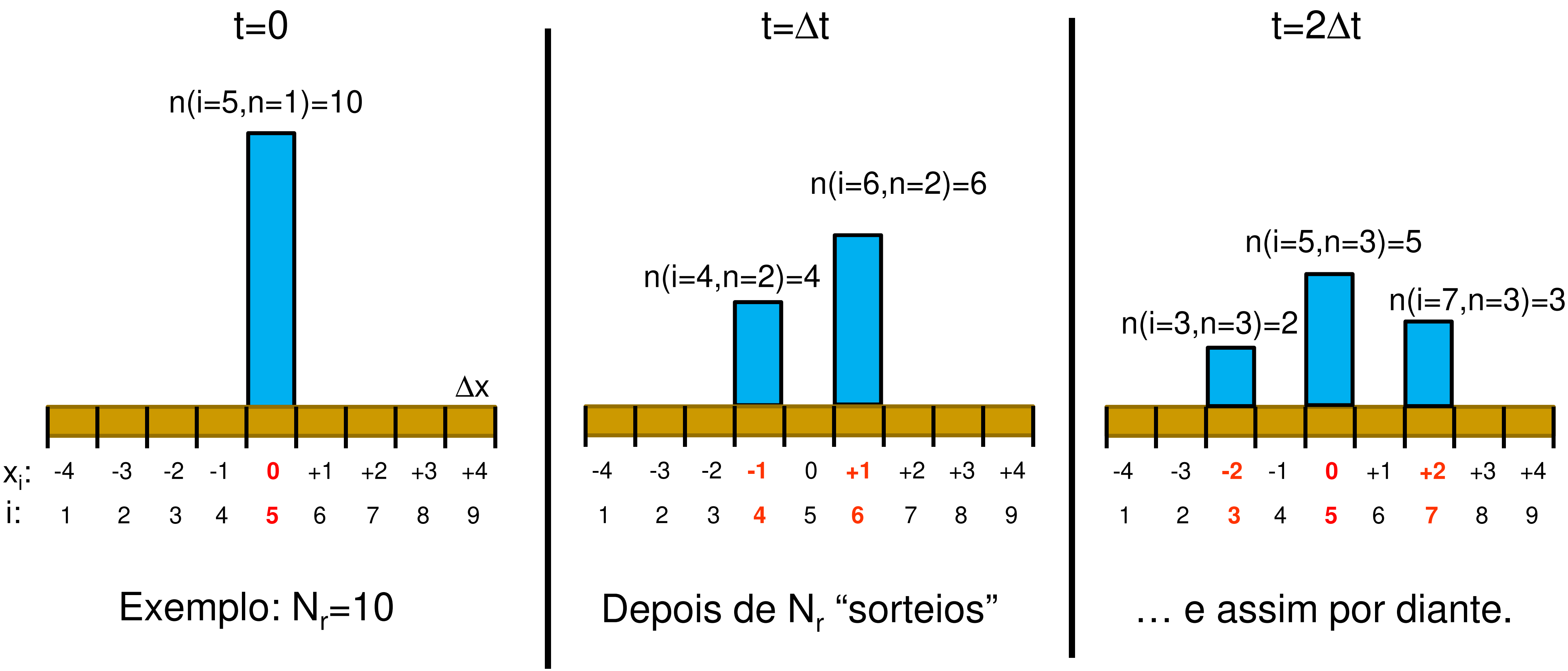
1) Calcular numericamente a função densidade de probabilidade (pdf) gerada por um processo tipo random walk.
2) Mostrar que, no limite contínuo, a pdf obedece a uma *equação de difusão*.
3) Comparar diretamente o resultado numérico com uma solução analítica de uma equação de difusão.

Tarefa: Calcular numericamente a ocupação n(i,n) e a densidade de probabilidade p(i,n) de um processo tipo random walk e comparar com uma solução analítica da equação de difusão.

Tempo aproximado: 40 a 50 min (lembrando que o *debug* é a maior parte disso!).

Random Walk e Difusão

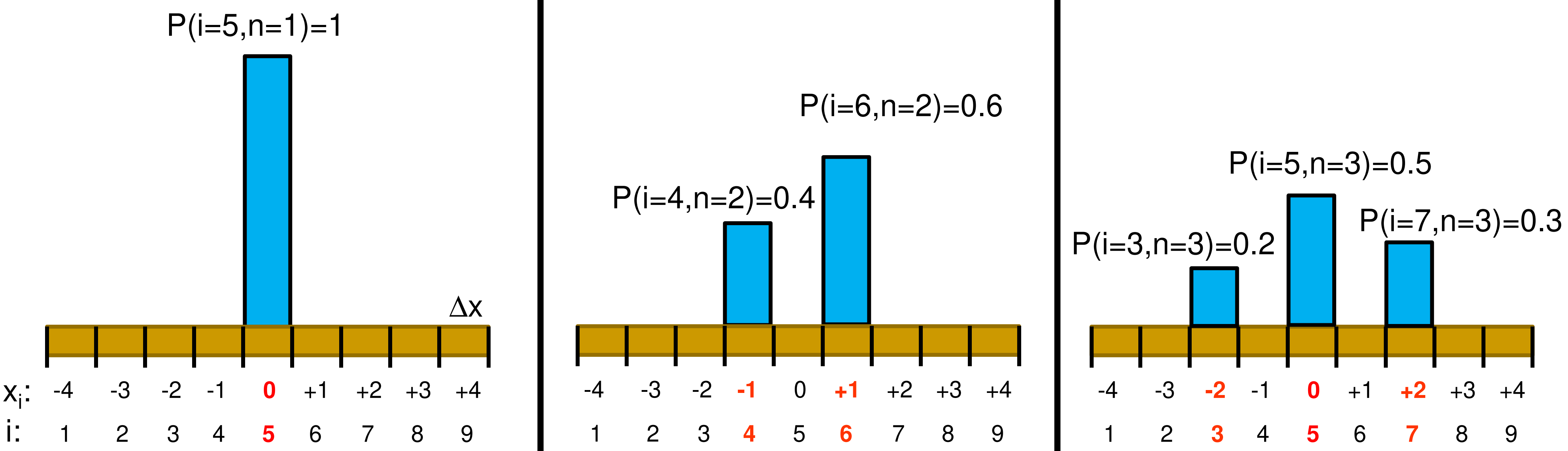
Dado um *ensemble* de N_r walkers, seja n(i,n) o número de walkers na posição $x_i=(i-i_0)\Delta x$ no tempo $t_n=(n-1)\Delta t$ para uma realização do "walk".



Random Walk e Difusão

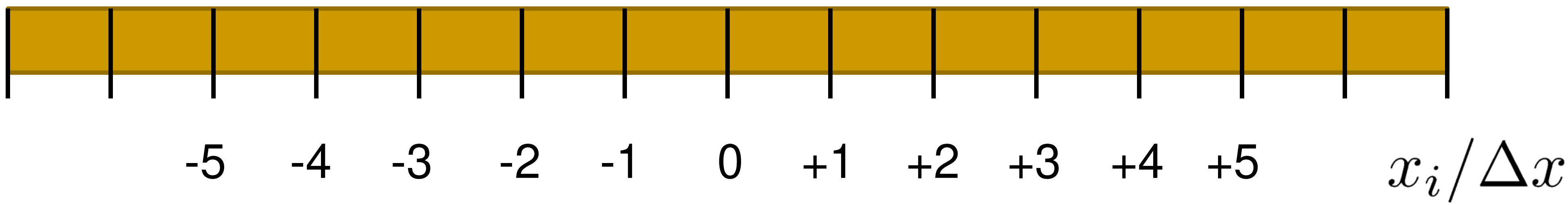
Dado um *ensemble* de N_r walkers, seja $P(i,n)=n(i,n)/N_r$ a probabilidade de encontrar um walker na posição $x_i=(i-i_0)\Delta x$ no tempo $t_n=(n-1)\Delta t$ para uma dada realização do "walk".

$t=0$ | $t=\Delta t$ | $t=2\Delta t$



Exemplo: $N_r=10$ | Depois de N_r "sorteios" | … e assim por diante.

Random Walk e Difusão



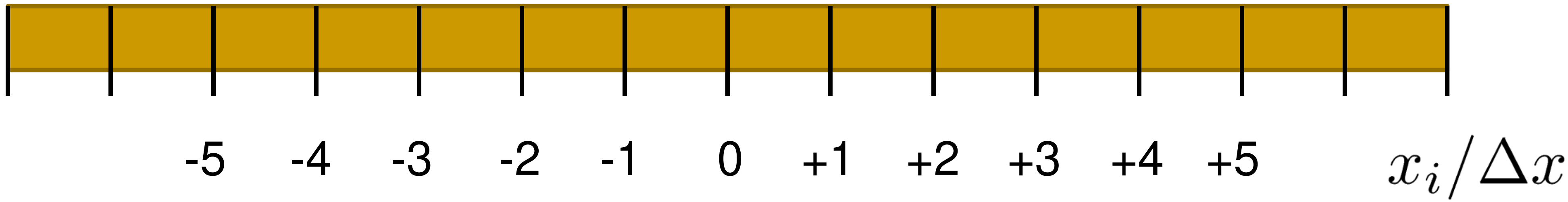
Dado um *ensemble* de walkers, seja P(i,n) a probabilidade de um walker estar na posição $x_i=(i-i_0)\Delta x$ no tempo $t_n=(n-1)\Delta t$ para um <u>número grande de realizações.</u>

- 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!)

Random Walk e Difusão



Dado um *ensemble* de walkers, seja P(i,n) a probabilidade de um walker estar na posição $x_i=(i-i_0)\Delta x$ no tempo $t_n=(n-1)\Delta t$ para um número grande de realizações.

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

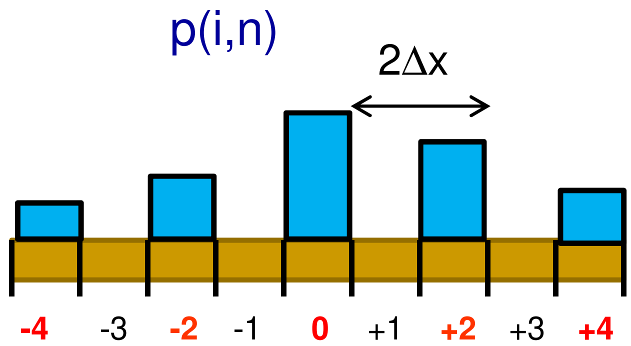
$$P(i,n+1) - P(i,n) = \frac{1}{2}\left[P(i-1,n) - 2P(i,n) + P(i+1,n)\right]$$

- 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

- Podemos definir a *densidade de probabilidade* p(i,n) tal que



$$P(i,n) = p(i,n)(2\Delta x) \Rightarrow \sum_i p(i,n)(2\Delta x) = 1$$

onde o fator "2" vem do fato de, para um dado *n*, P(i,n)≠0 apenas para *i* par ou ímpar.

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

- No limite contínuo, temos que p(x,t) obedece uma equação diferencial de **difusão**:

$$\frac{\partial p(x,t)}{\partial t} = D\frac{\partial^2 p(x,t)}{\partial x^2} \qquad \int p(x,t)dx = 1$$

onde associamos o *coeficiente de difusão* com $D = \lim_{\Delta x,\Delta t\to 0} \frac{\Delta x^2}{2\Delta t}$

Solução analítica da Eq. de Difusão

- Vamos considerar a Eq. de Difusão com condição inicial na forma:

$$\frac{\partial p(x,t)}{\partial t} = D\frac{\partial^2 p(x,t)}{\partial x^2} \qquad p(x,t=0) = \delta(x) \qquad \int p(x,t)dx = 1$$

que representa uma "concentração" inicial de todos os "walkers" em x=0.

- Pode-se mostrar por substituição direta (<u>verifique!</u>) que uma solução analítica para a densidade de probabilidade que obedece à c.i. é dada por:

$$p(x,t) = \frac{e^{-x^2/(4Dt)}}{\sqrt{4\pi Dt}} = \frac{e^{-x^2/(2\sigma^2(t))}}{\sigma(t)\sqrt{2\pi}} \qquad \sigma^2(t) \equiv 2Dt$$

uma **distribuição normal** centrada em zero e com variância $\sigma^2(t) \sim t$ (*linear* com t).

Random Walk e Difusão – Tarefa

Calcular p(i,n) para um random walk e comparar com a solução analítica da Eq. de Difusão.

- *Considere N_w=1000 "walkers" em x=0 (i=i_0) e t=0 (n=1).*
- *Logo, a condição inicial é: $n(i_0,1)=N_w$, $P(i_0,1)=1$ e $p(i_0,1)=1/(2\Delta x)$.*

No passo $n \rightarrow n+1$:

- *Dados todos os n(i,n), determine n(i,n+1) sendo que todas as partículas executam um random walk.*
- *Calcule p(i,n+1) (use unidades em que $\Delta t=1$ e $\Delta x=1$).*
- *Faça um "filme" comparando a evolução temporal de p(i,n) com a solução analítica da Eq. de Difusão p(x,t) para t>0 com $p(x,0)=\delta(x)$.*
- Responda (comentário no script):

1) A comparação é qualitativamente/quantitativamente válida?
2) Como melhorar a aproximação da solução numérica?

Random Walk e Difusão – Tarefa - Dicas

- *Use um grid espacial de* $-x_{max} \leq x \leq +x_{max}$ *com* $x_{max} = 300$ $(\Delta x = 1)$ *e determine* i_0 *a partir de* $-x_{max} = (1 - i_0)\Delta x$ *(use* int16() *para converter!)*
- *Use como número máximo de passos temporais* $Nt =$ int16($Nx/2$).
- *Exemplo de gráfico após Nt=301passos:*