

## PROJETO 2 - Introdução à Física Computacional - IFSC - USP - 2020

### SISTEMAS ALEATÓRIOS

Data de entrega: 01/04/2020 (quarta feira) - Início da aula

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 (  $1\text{cm} \sim 10^6$  dim. microscópica do espaço,  $1\text{seg} \sim 10^{10}\Delta t$  microscópico,  $1\text{g} \sim 10^{23}$  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:

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

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 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. 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  $\Delta t$  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.