Modelagem computacional de processos estocásticos

Mendeli H. Vainstein[1]

[1]Instituto de Física, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Brasil

Semestre 2021-2

1. Equação de Langevin unidimensional

Equação de Langevin unidimensional

$$\frac{d}{dt}x(t) = v(t),$$
$$\frac{d}{dt}v(t) = -\gamma v(t) + \xi(t),$$

com $x(0) = x_0$, $v(0) = v_0$ e

$$\langle \xi(t) \rangle = 0$$
$$\langle \xi(t)\xi(t') \rangle = \Gamma \delta(t - t').$$

As soluções, demonstradas nas últimas aulas, são dadas por

$$v(t) = v_0\, e^{-\gamma t} + e^{-\gamma t} \int_0^t e^{\gamma s} \xi(s)\, ds \tag{1}$$
$$x(t) = x_0 + \frac{v_0}{\gamma}\left(1 - e^{-\gamma t}\right) + \frac{1}{\gamma}\int_0^t \left(1 - e^{-\gamma(t-s)}\right) \xi(s)\, ds. \tag{2}$$

Equação de Langevin unidimensional

Também calculamos os valores médios e as variâncias:

$$\langle v(t)\rangle = v_0 e^{-\gamma t}$$

$$\langle v^2(t)\rangle - \langle v(t)\rangle^2 = \frac{\Gamma}{2\gamma}\left(1 - e^{-\gamma t}\right)$$

$$\langle x(t)\rangle = x_0 + \frac{v_0}{\gamma}\left(1 - e^{-\gamma t}\right)$$

$$\langle x^2(t)\rangle - \langle x(t)\rangle^2 = \frac{\Gamma}{\gamma^2}\left[t - \frac{2}{\gamma}\left(1 - e^{-\gamma t}\right) + \frac{1}{2\gamma}\left(1 - e^{-2\gamma t}\right)\right]$$

$t \ll 1$: $\approx \frac{\Gamma}{\gamma^2}\left[t - \frac{2}{\gamma}\left(\cancel{1} - \cancel{1} + \gamma t - \frac{\gamma^2 t^2}{2}\right) + \frac{1}{2\gamma}\left(\cancel{1} - \cancel{1} + 2\gamma t - \frac{\gamma^2 t^2}{2}\right)\right] = \frac{\Gamma}{\gamma^2}\left[\cancel{t} - \cancel{2t} + \cancel{t} + \gamma t^2 - \frac{\gamma t^2}{4} \dots\right]$

$= \frac{\Gamma}{\gamma^2}\left[\frac{3\gamma}{4} t^2 \dots\right]$

Para que a energia cinética média da partícula browniana seja igual à de uma molécula do meio,

$$\Gamma = \frac{2\gamma k_B T}{m}.$$

Deslocamento quadrático médio a partir da origem

A partir da solução, Eq. (2), podemos escrever

$$x(t) - x_0 = \frac{v_0}{\gamma}\left(1 - e^{-\gamma t}\right) + \frac{1}{\gamma}\int_0^t (1 - e^{-\gamma(t-s)})\xi(s)\,ds.$$

Daí,

$$(x(t) - x_0)^2 = \frac{v_0^2}{\gamma^2}\left(1 - e^{-\gamma t}\right)^2 + \frac{2}{\gamma^2}\int_0^t \left(1 - e^{-\gamma t}\right)(1 - e^{-\gamma(t-s)})v_0\xi(s)\,ds$$
$$+\frac{1}{\gamma^2}\int_0^t\int_0^t (1 - e^{-\gamma(t-s)})\left(1 - e^{-\gamma(t-s')}\right)\xi(s)\xi(s')\,ds ds'.$$

Agora, calculamos a média sobre o ruído, ou seja, sobre partículas independentes

$$\langle (x(t) - x_0)^2\rangle = \frac{v_0^2}{\gamma^2}\left(1 - e^{-\gamma t}\right)^2 + \frac{2}{\gamma^2}\int_0^t \left(1 - e^{-\gamma t}\right)(1 - e^{-\gamma(t-s)})\cancelto{0}{\langle v_0\xi(s)\rangle} ds$$
$$+\frac{1}{\gamma^2}\int_0^t\int_0^t (1 - e^{-\gamma(t-s)})(1 - e^{-\gamma(t-s')})\underbrace{\langle \xi(s)\xi(s')\rangle}_{=\Gamma\delta(s-s')} ds ds'.$$

Equação de Fürth

Assim

$$\langle (x(t)-x_0)^2\rangle = \frac{v_0^2}{\gamma^2}\left(1-e^{-\gamma t}\right)^2 + \frac{\Gamma}{\gamma^2}\int_0^t (1-e^{-\gamma(t-s)})^2 ds.$$

Após algum trabalho (*notebook* Julia), obtemos

Deslocamento quadrático médio →

$$\langle (x(t)-x_0)^2\rangle = 2D\left[t-\frac{1}{\gamma}\left(1-e^{-\gamma t}\right)\right]$$

$t \ll 1$: (tempos pequenos)

$$\langle (x(t)-x_0)^2\rangle = 2D\left\{t-\frac{1}{\gamma}\left[1-\left(1-\gamma t+\frac{\gamma^2 t^2}{2}+\cdots\right)\right]\right\}$$

$$= 2D\left\{t-\frac{1}{\gamma}\left[\cancel{1}-\cancel{1}+\gamma t-\frac{\gamma^2 t^2}{2}+\cdots\right]\right\}$$

$$= 2D\left\{\cancel{t}-\cancel{t}+\frac{\gamma t^2}{2}+\cdots\right\} = D\gamma t^2+\cdots$$

$x \propto t$

$(x(t) = ut)$

$\langle (x-x_0)^2\rangle \propto t^2$

Para t pequeno

BALLÍSTICO.

Equação de Fürth

$t \gg 1$

$$\langle (x(t)-x_0)^2 \rangle = 2D\left[t - \frac{1}{\gamma}\left(1 - \cancel{e^{-\gamma t}}\right)\right] \quad {}^{0}$$

$$\simeq 2D\left(t - \frac{1}{\gamma}\right)$$

$$\langle (x(t)-x_0)^2 \rangle \simeq 2Dt$$

tempos grandes

$\Rightarrow$ Limite difusivo

$$(x - x_0) \propto \sqrt{t}$$

Langevin Superamortecida

força externa

$$m\frac{dv}{dt} = -\alpha v + f(x) - \xi(t)$$

$$\frac{dv}{dt} = -\frac{\alpha}{m} v + \frac{1}{m} f(x) - \frac{1}{m}\xi(t)$$

• Se $\frac{\alpha}{m} \gg 1$

$$0 = -\frac{\alpha}{m} v + \frac{1}{m} f(x) - \frac{1}{m}\xi(t)$$

$$v = \frac{1}{\alpha} f(x) + \frac{1}{\alpha}\xi(t)$$

$\Downarrow$

$$\boxed{\frac{dx}{dt} = -\frac{1}{\alpha} f(x) + \frac{1}{\alpha}\xi(t)}$$

Discretização da Eq. de Langevin

$$\frac{d}{dt}v(t) = -\gamma v(t) + \sqrt{\frac{2\gamma k_B T}{m}}\,\eta(t)$$

$$\Downarrow \qquad\qquad \Downarrow$$

$$\frac{v_{n+1} - v_n}{\tau} = -\gamma v_n + \sqrt{\frac{2\gamma k_B T}{m}}\frac{1}{\sqrt{\tau}}N(0,1),$$

onde $N(0,1)$ representa um sorteio de uma variável aleatória gaussiana de média 0 e variância 1.
Simplificando, temos

$a = 1 - \gamma\tau$

$$\boxed{v_{n+1} = (1-\gamma\tau)v_n + \sqrt{\Gamma\tau}\,\xi_n}$$

Aqui,

$$\xi_n = \xi(t_n) = \xi(n\tau)$$

$$\langle \xi_j \xi_k \rangle = \langle \xi(j\tau)\xi(k\tau) \rangle = \delta((j-k)\tau) = \delta_{jk} = \begin{cases} 1, & j = k \\ 0, & j \neq k \end{cases}$$

Distribuição de velocidades

$$v_{n+1} = a\, v_n + \sqrt{\tau\Gamma}\, \xi_n$$

$$v_1 = a\, v_0 + \sqrt{\tau\Gamma}\, \xi_0$$

$$v_2 = a v_1 + \sqrt{\tau\Gamma}\, \xi_1 = a(a v_0 + \sqrt{\tau\Gamma}\, \xi_0) + \sqrt{\tau\Gamma}\, \xi_1$$

$$= a^2 v_0 + a\sqrt{\tau\Gamma}(\xi_0 + \xi_1)$$

$$v_3 = a v_2 + \sqrt{\tau\Gamma}\, \xi_2 = a(a^2 v_0 + ($$

Contas em outro arquivo devido a problemas na caneta

Lista de exercícios

- Cap 3: 2, 6 (numericamente), 7, 8
- Faça um gráfico em escala log-log da equação de Fürth com ajustes (*fits*) a tempos curto $(x^2 \propto t^2)$ e longo $(x^2 \propto t)$
- Simule a equação de Langevin: calcule $x^2(t)$, $v^2(t)$, autocorrelações da força e velocidade, faça histograma da distribuição de velocidades

Referências

1. T. Tomé, M. J. de Oliveira, *Dinâmica estocástica e irreversibilidade*, 2^a edição, EdUSP, São Paulo, 2014. ISBN13: 9788531414800
   `https://www.edusp.com.br/livros/dinamica-estocastica-e-irreversibilidade/`
2. L. E. Reichl, *A Modern Course in Statistical Physics*, 2^a edição, Wiley-Interscience, New York, 1998. ISBN13: 9780471595205
   Link para 4^a edição:
   `https://onlinelibrary.wiley.com/doi/book/10.1002/9783527690497`