Modelagem computacional de processos estocásticos

Mendeli H. Vainstein[1]

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

Semestre 2021-2

Table of Contents

Equação de Fokker-Planck unidimensional

A equação de Fokker-Planck em uma dimensão é

$$\frac{\partial}{\partial t}P(x,t) = -\frac{\partial}{\partial x}[f(x)P(x,t)] + \frac{\Gamma}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2}P(x,t), \tag{1}$$

Sua solução é a densidade de probabilidade $P(x,t)$ de encontrar a partícula cuja dinâmica é dada pela equação de Langevin superamortecida

$$\frac{dx}{dt} = f(x) + \xi(t)$$

na posição x no tempo t. Aqui,

$$\langle \xi(t) \rangle = 0 \quad \text{e} \quad \langle \xi(t)\xi(t') \rangle = \Gamma\delta(t-t')$$

Operador de evolução

Podemos escrever a eq. (1) utilizando um operador $\widehat{W}$

$$\frac{\partial}{\partial t} P(x,t) = \widehat{W} P(x,t), \tag{2}$$

onde

$$\widehat{W}\phi(x) = -\frac{\partial}{\partial x}[f(x)\phi(x)] + \frac{\Gamma}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\phi(x).$$

Para resolver a eq. (2), podemos supor que a solução pode ser escrita como uma série de Taylor ao redor de $t = 0$ para cada x:

$$\begin{aligned} P(x,t) = {} & P(x,0) + \frac{t}{1!}\frac{\partial}{\partial t}P(x,t)\bigg|_{t=0} + \frac{t^2}{2!}\frac{\partial^2}{\partial t^2}P(x,t)\bigg|_{t=0} + \cdots \\ & + \frac{t^k}{k!}\frac{\partial^k}{\partial t^k}P(x,t)\bigg|_{t=0} + \cdots \end{aligned} \tag{3}$$

Operador de evolução

Utilizando a eq. (2), podemos expressar as derivadas em termos do operador $\widehat{W}$:

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \widehat{W}P \implies \left.\frac{\partial}{\partial t}P(x,t)\right|_{t=0} = \widehat{W}P(x,0)$$

$$\frac{\partial^2 P}{\partial t^2} = \frac{\partial}{\partial t}(\widehat{W}P) = \widehat{W}\frac{\partial P}{\partial t} = \widehat{W}^2 P \implies \left.\frac{\partial^2}{\partial t^2}P(x,t)\right|_{t=0} = \widehat{W}^2 P(x,0)$$

$$\frac{\partial^3 P}{\partial t^3} = \frac{\partial}{\partial t}(\widehat{W}^2 P) = \widehat{W}^2\frac{\partial P}{\partial t} = \widehat{W}^3 P \implies \left.\frac{\partial^3}{\partial t^3}P(x,t)\right|_{t=0} = \widehat{W}^3 P(x,0)$$

$$\vdots$$

$$\frac{\partial^k P}{\partial t^k} = \frac{\partial}{\partial t}\left(\widehat{W}^{k-1} P\right) = \widehat{W}^{k-1}\frac{\partial P}{\partial t} = \widehat{W}^k P \implies \left.\frac{\partial^k}{\partial t^k}P(x,t)\right|_{t=0} = \widehat{W}^k P(x,0)$$

Operador de evolução

Voltando à eq. (3), temos então

$$P(x,t) = \left[\widehat{I} + t\widehat{W} + \frac{t^2}{2!}\widehat{W}^2 + \cdots + \frac{t^k}{k!}\widehat{W}^k + \cdots\right] P(x,0)$$

Em analogia com a série de Taylor da função exponencial, pode-se definir:

$$e^{t\widehat{W}} \equiv \sum_{k=0}^{\infty} \frac{t^k \widehat{W}^k}{k!} = \widehat{I} + t\widehat{W} + \frac{t^2}{2!}\widehat{W}^2 + \cdots$$

Assim, temos formalmente

$$\boxed{P(x,t) = e^{t\widehat{W}} P(x,0)} \tag{4}$$

Autofunções e autovalores

Se as autofunções do operador $\widehat{W}$ definidas por

$$\widehat{W}\phi_n(x) = \lambda_n\phi_n(x) \tag{5}$$

formarem uma base para as funções não-negativas (probabilidades) definidas em $[a, b]$, poderemos expressar $P(x, 0)$ em termos destas autofunções

$$P(x, 0) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n\phi_n(x).$$

Deste modo, a solução formal, eq. (4), pode ser reescrita como

$$\begin{aligned} P(x, t) &= e^{t\widehat{W}} P(x, 0) \\ &= e^{t\widehat{W}} \sum_{n=0}^{\infty} a_n\phi_n(x) \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} a_n e^{t\widehat{W}} \phi_n(x) \end{aligned}$$

Solução formal da eq. de Fokker-Planck

$$
\begin{aligned}
P(x,t) &= \sum_{n=0}^{\infty} a_n \sum_{k=0}^{\infty} \frac{t^k \widehat{W}^k}{k!} \phi_n(x) \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} a_n \sum_{k=0}^{\infty} \frac{t^k}{k!} \lambda_n^k \phi_n(x) \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} a_n e^{t\lambda_n} \phi_n(x)
\end{aligned}
$$

$$
\boxed{P(x,t) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n e^{t\lambda_n} \phi_n(x),} \tag{6}
$$

onde

$$
P(x,0) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \phi_n(x).
$$

Propriedades das autofunções

Na última aula, vimos que a condição de conservação de probabilidade

$$\int_a^b P(x,t)dx = 1 \qquad \frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} J \tag{7}$$

leva à condição

$$J(a,t) = J(b,t), \tag{8}$$

onde

$$J(x,t) \equiv f(x)P(x,t) - \frac{\Gamma}{2}\frac{\partial}{\partial x}P(x,t)$$

porque

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\int_a^b P(x,t)dx &= \int_a^b \frac{\partial}{\partial t}P(x,t)dx \\ &= -\int_a^b \frac{\partial}{\partial x}J(x,t)dx \\ &= J(a,t) - J(b,t) \\ &= 0, \quad \text{pela eq. (7)}\end{aligned}$$

Propriedades das autofunções

Repetindo esta última conta para a expansão de $P(x,t)$ em autofunções

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}\int_a^b P(x,t)dx &= \int_a^b \frac{\partial}{\partial t}P(x,t)dx \\
&= \int_a^b \frac{\partial}{\partial t}\sum_{n=0}^{\infty} a_n e^{t\lambda_n}\phi_n(x)dx \\
&= \int_a^b \sum_{n=0}^{\infty} a_n\lambda_n e^{t\lambda_n}\phi_n(x)dx \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} a_n\lambda_n e^{t\lambda_n}\int_a^b \phi_n(x)dx \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} a_n e^{t\lambda_n}\int_a^b \lambda_n\phi_n(x)dx \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} a_n e^{t\lambda_n}\int_a^b \widehat{W}\phi_n(x)dx = 0
\end{aligned}$$

Propriedades das autofunções

Como a expressão acima deve ser identicamente nula para qualquer conjunto $\{a_n\}$ (cada um define uma $P(x,t)$ distinta) e para qualquer t, visto que as funções $e^{\lambda_n t}$ são linearmente independentes, é necessário que

$$\int_a^b \widehat{W}\phi_n(x)dx = 0 \quad \text{ou, equivalentemente}$$
$$\lambda_n \int_a^b \phi_n(x)dx = 0 \quad \text{para todo } n.$$

Substituindo a expressão de $\widehat{W}$ acima, temos

$$\begin{aligned}
\int_a^b \widehat{W}\phi_n(x)dx &= -\int_a^b \frac{\partial}{\partial x}[f(x)\phi_n(x)] - \frac{\Gamma}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\phi_n(x)dx \\
&= -\int_a^b \frac{\partial}{\partial x}\left[f(x)\phi_n(x) - \frac{\Gamma}{2}\frac{\partial}{\partial x}\phi_n(x)\right]dx \\
&= f(x)\phi_n(x) - \frac{\Gamma}{2}\phi_n'(x)\Big|_{x=b}^{x=a} = 0
\end{aligned}$$

Propriedades da autofunções

Deste modo, vemos que as autofunções $\phi_n(x)$ devem obedecer à condição de fronteira

$$\boxed{f(a)\phi_n(a) - \frac{\Gamma}{2}\phi_n'(a) = f(b)\phi_n(b) - \frac{\Gamma}{2}\phi_n'(b)} \tag{9}$$

que é equivalente à eq. (8) para $P(x,t)$.

<u>Estado estacionário</u>: Para $P_\infty(x) = \lim_{t\to\infty} P(x,t)$ vale

$$\frac{\partial P_\infty}{\partial t} = 0$$

e, portanto,

$$\widehat{W}P_\infty(x) = 0.$$

- Esta equação é equivalente à equação das autofunções com autovalor $\lambda_0 = 0$

Propriedades da autofunções

$$\widehat{W}\phi_0(x) = \lambda_0\phi_0(x) = 0,$$

portanto a distribuição estacionária $P_\infty(x)$ é uma autofunção com autovetor nulo

$$\phi_0(x) = P_\infty(x).$$

Desta forma, é possível escrever a solução formal como

$$P(x,t) = P_\infty(x) + \sum_{n=1}^{\infty} a_n e^{t\lambda_n}\phi_n(x).$$

Aqui, $a_0 = 1$ porque $P_\infty(x)$ é normalizada.

- Como as funções $e^{t\lambda_n}$ são linearmente indepentes e $P(x,t)$ é normalizada, **todos** os autovalores λ_n restantes devem ser negativos. Isto é o que, de fato, ocorre.

Table of Contents

Analogia com Mecânica Quântica

De forma semelhante ao que fazemos em Mecânica Quântica, definiremos $\langle bra|$s e $|ket\rangle$s para designar vetores (funções) em espaços vetoriais duais.

- Há uma correspondência dual (CD) um-a-um entre vetores nos dois espaços:

$$|\alpha\rangle \overset{CD}{\longleftrightarrow} \langle\alpha|$$

$$|\alpha\rangle + |\beta\rangle \overset{CD}{\longleftrightarrow} \langle\alpha| + \langle\beta|$$

$$c_\alpha\,|\alpha\rangle + c_\beta\,|\beta\rangle \overset{CD}{\longleftrightarrow} c_\alpha^*\,\langle\alpha| + c_\beta^*\,\langle\beta|$$

- Como trabalhamos diretamente com probabilidades, todas as constantes são reais, de modo que

$$c^* = c$$

Produto interno

Definimos o produto interno como uma justaposição de dois vetores (um de cada espaço)

$$\langle\alpha|\beta\rangle = (\langle\alpha|)\cdot(|\beta\rangle)$$

e postulamos

1. $$\langle\beta|\alpha\rangle = \langle\alpha|\beta\rangle^* = \langle\alpha|\beta\rangle$$

2. $$\langle\alpha|\alpha\rangle \geqslant 0$$

Produto interno

Dizemos que dois *kets* $|\alpha\rangle$ e $|\beta\rangle$ são **ortogonais** se

$$\langle\alpha|\beta\rangle = 0$$

Se $|\alpha\rangle$ é um *ket* não-nulo, podemos criar um *ket* normalizado

$$|\tilde{\alpha}\rangle = \frac{1}{\sqrt{\langle\alpha|\alpha\rangle}}\,|\alpha\rangle$$

tal que

$$\langle\tilde{\alpha}|\tilde{\alpha}\rangle = 1$$

Operadores

- Um operador atua em um *ket* pela esquerda

$$\widehat{X} \cdot (|\alpha\rangle) = \widehat{X}\,|\alpha\rangle = |A\rangle$$

- Um operador atua em um *bra* pela direita

$$(\langle\beta|) \cdot \widehat{X} = \langle\beta|\,\widehat{X} = \langle B|$$

- $\widehat{X}\,|\alpha\rangle$ e $\langle\alpha|\,\widehat{X}$ geralmente NÃO são duais um do outro! Temos

$$\widehat{X}\,|\alpha\rangle \overset{CD}{\longleftrightarrow} \langle\alpha|\,\widehat{X}^\dagger,$$

  onde $\widehat{X}^\dagger$ é o **operador adjunto** de $\widehat{X}$.
- Se $\widehat{X}^\dagger = \widehat{X}$, então o operador $\widehat{X}$ é **Hermitiano**.
- O operador $\widehat{W}$, definido acima, não é Hermitiano!

Espaço vetorial de funções

O produto interno, no caso das funções definidas para $x \in [a, b]$ é

$$\langle\alpha|\beta\rangle = \langle\alpha|\widehat{I}|\beta\rangle = \langle\alpha| \int_a^b dx\,|x\rangle\,\langle x|\beta\rangle = \int_a^b \langle\alpha|x\rangle\,\langle x|\beta\rangle\,dx$$

$$= \int_a^b \alpha^*(x)\beta(x)dx = \int_a^b \alpha(x)\beta^*(x)dx = \langle\beta|\alpha\rangle\,.$$

Se $|\Psi\rangle = \widehat{W}\,|\psi\rangle$,

$= \langle\psi|\left(\hat{W}^\dagger|\alpha\rangle\right) =$

c.c.

$$\langle\alpha|\Psi\rangle = \langle\alpha|\left(\widehat{W}\,|\psi\rangle\right) = \left(\langle\psi|\,\widehat{W}^\dagger\right)|\alpha\rangle = \langle\Psi|\alpha\rangle$$

Usando o produto interno acima para funções, esta expressão pode ser reescrita como

$$\langle\alpha|\Psi\rangle = \int_a^b \alpha^*(x)\left(\widehat{W}\psi(x)\right)dx$$

$$= \int_a^b \psi(x)\left(\widehat{W}^\dagger\alpha(x)\right)dx$$

Table of Contents

Equação Adjunta

Dada a equação de Fokker-Planck

$$\frac{\partial}{\partial t}P(x,t) = \widehat{W}P(x,t), \tag{10}$$

podemos definir a equação adjunta

$$\frac{\partial}{\partial t}Q(x,t) = \widehat{W}^{\dagger}Q(x,t). \tag{11}$$

Se $\phi_n(x)$ são as autofunções de $\widehat{W}$ e $\chi_n(x)$, as de $\widehat{W}^{\dagger}$, podemos calcular o operador $\widehat{W}^{\dagger}$ usando o produto interno acima, bem como as condições de contorno das funções ϕ_n, eq. (9). Partiremos de

$$\begin{aligned}
\langle \chi_m | \widehat{W} | \phi_n \rangle &= \int_a^b \chi_m(x)\widehat{W}\phi_n(x)dx \\
&= \int_a^b \chi_m(x)\widehat{W}\phi_n(x)dx \\
&= \int_a^b \chi_m(x)\left\{-\frac{\partial}{\partial x}[f(x)\phi_n(x)] + \frac{\Gamma}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\phi_n(x)\right\}dx
\end{aligned}$$

Aplicarei integraçao por partes:

Operador adjunto

$$\begin{aligned}
\langle \chi_m | \widehat{W} | \phi_n \rangle &= -\int_a^b \chi_m(x) \frac{\partial}{\partial x} \left[f(x)\phi_n(x) - \frac{\Gamma}{2}\frac{\partial}{\partial x}\phi_n(x) \right] dx \\
&= \chi_m(x) \left[f(x)\phi_n(x) - \frac{\Gamma}{2}\phi_n'(x) \right] \Big|_{x=b}^{x=a} + \int_a^b \chi_m'(x) \left[f(x)\phi_n(x) - \frac{\Gamma}{2}\phi_n'(x) \right] dx \\
&= \chi_m(x) \left[f(x)\phi_n(x) - \frac{\Gamma}{2}\phi_n'(x) \right] \Big|_{x=b}^{x=a} + \int_a^b \phi_n(x) f(x) \chi_m'(x) dx \\
&\quad - \frac{\Gamma}{2} \int_a^b \chi_m'(x)\phi_n'(x) dx \\
&= \chi_m(x) \left[f(x)\phi_n(x) - \frac{\Gamma}{2}\phi_n'(x) \right] \Big|_{x=b}^{x=a} + \int_a^b \phi_n(x) f(x) \chi_m'(x) dx \\
&\quad - \frac{\Gamma}{2} \left[\chi_m'(x)\phi_n(x) \right] \Big|_{x=a}^{x=b} + \frac{\Gamma}{2} \int_a^b \chi_m''(x)\phi_n(x) dx \\
&= \chi_m(x) \left[f(x)\phi_n(x) - \frac{\Gamma}{2}\phi_n'(x) \right] - \frac{\Gamma}{2} \left[\chi_m'(x)\phi_n(x) \right] \Big|_{x=a}^{x=b} \\
&\quad + \int_a^b \phi_n(x) f(x) \chi_m'(x) + \frac{\Gamma}{2}\phi_n(x)\chi_m''(x) dx
\end{aligned}$$

Operador adjunto

$$
\begin{aligned}
\langle \chi_m | \widehat{W} | \phi_n \rangle &= \chi_m(x) \left[f(x)\phi_n(x) - \frac{\Gamma}{2}\phi_n'(x) \right] - \frac{\Gamma}{2} \left[\chi_m'(x)\phi_n(x) \right] \Bigg|_{x=a}^{x=b} \\
&+ \int_a^b \phi_n(x) \left[f(x)\chi_m'(x) + \frac{\Gamma}{2}\chi_m''(x) \right] dx \\
&= \chi_m(x) \left[f(x)\phi_n(x) - \frac{\Gamma}{2}\phi_n'(x) \right] - \frac{\Gamma}{2} \left[\chi_m'(x)\phi_n(x) \right] \Bigg|_{x=a}^{x=b} \\
&+ \int_a^b \phi_n(x) \left[f(x)\frac{\partial}{\partial x}\chi_m(x) + \frac{\Gamma}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\chi_m(x) \right] dx \\
&= \chi_m(x) \left[f(x)\phi_n(x) - \frac{\Gamma}{2}\phi_n'(x) \right] - \frac{\Gamma}{2} \left[\chi_m'(x)\phi_n(x) \right] \Bigg|_{x=a}^{x=b} \\
&+ \int_a^b \phi_n(x)\widehat{W}^\dagger \chi_m(x) dx
\end{aligned}
$$

Operador adjunto

Se

$$\begin{cases} \chi_m(a) = \chi_m(b) \\ \chi'_m(a)\phi_n(a) = \chi'_m(b)\phi_n(b), \end{cases}$$

então

$$\int_a^b \chi_m(x)\widehat{W}\phi_n(x)dx = \int_a^b \phi_n(x)\widehat{W}^\dagger \chi_m(x)dx,$$

onde

$$\boxed{\widehat{W}^\dagger = f(x)\frac{\partial}{\partial x} + \frac{\Gamma}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2}} \tag{12}$$

é o operador adjunto.

Solução da Eq. de Fokker-Planck

Admitimos que os conjuntos de autofunções $\{\phi_m\}$ e $\{\chi_n\}$ dos operadores $\widehat{W}$ e $\widehat{W}^\dagger$, respectivamente, formam um conjunto biortonormal, ou seja

$$\int_a^b \chi_m(x)\phi_n(x)dx = \delta_{mn} \quad \text{e}$$
$$\sum_m \phi_m(x)\chi_m(x') = \delta(x - x').$$

Podemos usar estas expressões junto com a expansão

$$P(x,0) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n\phi_n(x),$$

para determinar os coeficientes

$$a_n = \int_a^b \chi_n(x)P(x,0)dx$$

Solução da Eq. de Fokker-Planck

Finalmente, a eq. (6),

$$P(x,t) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n e^{t\lambda_n} \phi_n(x),$$

pode ser reescrita como

$$\begin{aligned} P(x,t) &= \sum_{n=0}^{\infty} \int_a^b \chi_n(x')P(x',0)dx'\, e^{t\lambda_n}\phi_n(x) \\ &= \int_a^b \sum_{n=0}^{\infty} e^{t\lambda_n}\chi_n(x')\phi_n(x)P(x',0)dx' \\ &= \int_a^b K(x,t,x',0)P(x',0)dx'. \end{aligned}$$

Se $P(x,0) = \delta(x - x_0)$,

$$P(x,t) = K(x,t,x_0,0) = \sum_{n=0}^{\infty} e^{t\lambda_n}\phi_n(x)\chi_n(x')$$

Operador Hermitiano

$\hat{w}$ não é geralmente hermitiano, mas quando vale $J(x)=0$ na solução estacionária:

$$f(x)\,P_\infty(x) - \frac{\Gamma}{2}\frac{d}{dx}P_\infty(x) = 0 \quad (*)$$

(reversibilidade microscópica)

podemos definir um operador hermitiano $\hat{K}$, tal que

$$\hat{K}\,\phi(x) = [\psi_0(x)]^{-1}\,\hat{w}\,[\psi_0(x)\,\phi(x)] \,.$$

onde $\psi_0(x) = \sqrt{P_\infty(x)}$

As autofunções de $\hat{K}$ são

$$\psi_\lambda(x) = [\psi_0(x)]^{-1}\,\phi_\lambda(x)$$

autofunções de $\hat{w}$

Porque

$$\hat{K}\,\psi_\lambda(x) = \hat{K}\{[\psi_0(x)]^{-1}\,\phi_\lambda(x)\}$$

$$= [\psi_0^{-1}]\,\hat{w}\,[\underbrace{\psi_0\,(\psi_0^{-1}}_{1}\,\phi_\lambda)]$$

$$= \psi_0^{-1}\,\underbrace{\hat{w}\,\phi_\lambda}$$

$$= \psi_0^{-1}\,\lambda_\lambda\,\phi_\lambda = \lambda_\lambda[\psi_0^{-1}(x)\,\phi_\lambda(x)]$$

$$= \lambda_\lambda\,\psi_\lambda(x)$$

$\hat{K}$ possui os mesmos autovalores de $\hat{W}$.

Obter $\hat{K}$ explicitamente

$$\hat{K}\psi(x) = \psi_0^{-1}\hat{W}[\psi_0\psi]$$

$$= \psi_0^{-1}\left\{-\frac{\partial}{\partial x}(f\psi_0\psi) + \frac{\Gamma}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2}[\psi_0\psi]\right\}$$

$$= \psi_0^{-1}\left\{-\psi_0\psi\frac{\partial f}{\partial x} - f\psi_0\frac{\partial\psi}{\partial x} - f\psi\frac{\partial\psi_0}{\partial x}\right.$$

$$\left.+\frac{\Gamma}{2}\left[\psi_0\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \psi\frac{\partial^2\psi_0}{\partial x^2} + 2\frac{\partial\psi}{\partial x}\frac{\partial\psi_0}{\partial x}\right]\right\}$$

$$= -\psi\frac{\partial f}{\partial x} - f\frac{\partial\psi}{\partial x} - f\psi\frac{1}{\psi_0}\frac{\partial\psi_0}{\partial x} + \frac{\Gamma}{2}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\Gamma}{2}\frac{\psi}{\psi_0}\frac{\partial^2\psi_0}{\partial x^2} + \Gamma\frac{\partial\psi}{\partial x}\frac{1}{\psi_0}\frac{\partial\psi_0}{\partial x}$$

→ Note que

$$\frac{1}{\psi_0}\frac{\partial\psi_0}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x}\ln\psi_0 = \frac{\partial}{\partial x}\ln\sqrt{P_{st}(x)} = \frac{\partial}{\partial x}\ln[P_{st}(x)]^{1/2}$$

$$= \frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial x}\ln P_{st}(x) = \frac{1}{2}\frac{1}{P_{st}(x)}\frac{\partial P_{st}}{\partial x}$$

$$\overset{(*)}{=} \frac{f(x)}{\Gamma} \quad \text{(condição de reversibilidade)}$$

$$\hat{K}\psi = -\psi\frac{\partial f}{\partial x} - f\frac{\partial\psi}{\partial x} - f\psi\frac{f}{\Gamma} + \frac{\Gamma}{2}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\Gamma}{2}\frac{\psi}{\psi_0}\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial\psi_0}{\partial x}\right) + \Gamma\frac{\partial\psi}{\partial x}\frac{f}{\Gamma}$$

$$= -\psi\frac{\partial f}{\partial x} - \cancel{f\frac{\partial\psi}{\partial x}} - \frac{f^2\psi}{\Gamma} + \frac{\Gamma}{2}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\Gamma}{2}\frac{\psi}{\psi_0}\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{f}{\Gamma}\psi_0\right) + \cancel{f\frac{\partial\psi}{\partial x}}$$

$$= -\psi\frac{\partial f}{\partial x} - \cancel{f\frac{\partial\psi}{\partial x}} - f^2\frac{\psi}{\Gamma} + \frac{\Gamma}{2}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\Gamma}{2}\frac{\psi}{\psi_0}\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{f}{\Gamma}\psi_0\right) + \cancel{f\frac{\partial\psi}{\partial x}}$$

$$= -\psi\frac{\partial f}{\partial x} - f^2\frac{\psi}{\Gamma} + \frac{\Gamma}{2}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\cancel{\Gamma}}{2}\frac{\psi}{\psi_0}\frac{1}{\cancel{\Gamma}}\left[\psi_0\frac{\partial f}{\partial x} + f\frac{\partial\psi_0}{\partial x}\right]$$

$$= -\psi\frac{\partial f}{\partial x} - f^2\frac{\psi}{\Gamma} + \frac{\Gamma}{2}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\psi}{2}\frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\psi}{2\cancel{\psi_0}}f\left(\frac{f}{\Gamma}\cancel{\psi_0}\right)$$

$$= -\frac{1}{2}\psi\frac{\partial f}{\partial x} \underbrace{- f^2\frac{\psi}{\Gamma}} + \frac{\Gamma}{2}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} \underbrace{+ \frac{1}{2}\frac{f^2\psi}{\Gamma}}$$

$$\hat{\kappa}\psi = -\frac{1}{2}\frac{\partial f}{\partial x}\psi - \frac{1}{2}\frac{f^2}{\Gamma}\psi + \frac{\Gamma}{2}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}$$

$$\boxed{\hat{\kappa}\psi \quad -\frac{1}{2}\left[\frac{\partial f}{\partial x} + \frac{f^2}{\Gamma}\right]\psi + \frac{\Gamma}{2}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}}$$

Agora é possível escrever formalmente o operador $\hat{\kappa}$ como proporcional ao hamiltoniano de uma partícula de massa m.

$$\hat{H}\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + V(x)\psi(x)$$

Se fizer $\Gamma = \frac{\hbar}{m}$ e $\hat{H} = -m\Gamma\hat{K}$
$= -\hbar\hat{K}$

$$\hat{H}\psi = -\hbar\hat{K}\psi$$

$$= -\hbar\left\{\frac{\Gamma}{2}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} - \frac{1}{2}\left[\frac{\partial f}{\partial x} + \frac{f^2}{\Gamma}\right]\psi\right\}$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\hbar}{2}\left[\frac{\partial f}{\partial x} + \frac{f^2}{\Gamma}\right]\psi$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \hbar\left[\frac{\partial f}{\partial x} + \frac{mf^2}{\hbar}\right]\psi$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{1}{2}\left[\hbar\frac{\partial f}{\partial x} + m f^2(x)\right]\psi(x)$$

Defino (verifique cálc

$$V(x) = \frac{1}{2}\left[\hbar\frac{\partial f}{\partial x} + m f^2(x)\right]$$

$$\hat{H}\psi = -m\Gamma\hat{K}$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + V(x)\psi(x)$$

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. J. J. Sakurai, *Modern Quantum Mechanics*, Revised Edition, Addison-Wesley Publishing Company, New York, 1994.