Curso de Pós-graduação em Física - UFF

Introdução a Sistemas Estocásticos e Modelos com Estados Absorventes - 2016.2

Prof. Nuno Crokidakis

2ª Série de Exercícios

1. Considere a equação de Langevin para uma partícula livre executando um movimento browniano:

$$m\,\frac{dv}{dt} = -\alpha v + F(t),$$

com $\langle F(t)\rangle = 0$ e $\langle F(t)\,F(t')\rangle = B\,\delta(t-t')$.

a) Mostre que

$$\langle v(t_0)\,v(t_0+t)\rangle = \exp\left(-\frac{\alpha|t|}{m}\right)\langle v^2(t_0)\rangle.$$

b) Determine a autocorrelação de equilíbrio

$$K(t) = \lim_{t_0\to\infty}\langle v(t_0)\,v(t_0+t)\rangle$$

e sua transformada de Fourier

$$\hat{K}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} K(t)\,e^{i\omega t}dt.$$

2. Considere a equação de Langevin para uma partícula browniana sujeita a uma força harmônica:

$$m\frac{d^2x}{dt^2} = -\alpha\frac{dx}{dt} - kx + F(t),$$

com $\langle F(t)\rangle = 0$ e $\langle F(t)\,F(t')\rangle = B\,\delta(t-t')$.

a) Transforme a equação acima num sistema linear de duas equações diferenciais ordinárias de primeira ordem e obtenha $x(t)$ e $v(t)$ para a condição inicial $x(0) = 0$ e $v(0) = 0$.

b) Determine $\langle x^2 \rangle$, $\langle xv \rangle$ e $\langle v^2 \rangle$ como funções do tempo.

c) Mostre que para $t \ll \gamma^{-1}$, onde $\gamma = \alpha/m$, o resultado para $\langle x^2 \rangle$ é idêntico ao obtido a partir do teorema da equipartição para a situação de equilíbrio termodinâmico.

3. Considere o conjunto de equações de Langevin

$$\frac{dx_i}{dt} = \sum_{j=1}^{N} A_{i,j} x_j + \zeta_i(t),$$

com $i = 1, 2, \ldots, N$, $\langle \zeta_i(t) \rangle = 0$ e $\langle \zeta_i(t) \zeta_j(t') \rangle = \Gamma_{i,j}\, \delta(t - t')$. Construa as equações de Fokker-Planck correspondentes.

4. Determine as autofunções e os autovalores do operador de evolução

$$\mathcal{W}\phi = -\frac{d}{dx}[f(x)\phi(x)] + \frac{\Gamma}{2}\frac{d^2}{dx^2}\phi(x),$$

para uma força dada por

$$f(x) = \begin{cases} -\alpha, & \text{se } x > 0, \\ 0, & \text{se } x = 0, \\ \alpha, & \text{se } x < 0; \end{cases}$$

sendo α uma constante positiva.

5. Mostre que a solução dependente do tempo da equação de Kramers com força externa elástica $F_e(x) = -kx$ é do tipo $P = A \exp[-ax^2/2 - bv^2/2 - cxv]$, onde a, b, c e A são funções do tempo. Demonstre que para essa densidade de probabilidade vale:

$$\langle x^2 \rangle = \frac{b}{ab - c^2}, \ \langle v^2 \rangle = \frac{a}{ab - c^2}, \ \text{e } \langle xv \rangle = \frac{-c}{ab - c^2}.$$

Determine a, b e c como funções do tempo, invertendo essas equações e usando os resultados para a dependência temporal de $\langle x^2 \rangle$, $\langle v^2 \rangle$ e $\langle xv \rangle$ obtidos no exercício 2.

6. Considere uma cadeia linear de N sítios, com condições de contorno periódicas. A cada sítio i está associada uma variável real x_i. A energia da configuração $\{x_1, x_2, \ldots, x_N\}$ é dada por

$$V = -\sum_{i=1}^{N} \left(\frac{a}{2} x_i^2 - \frac{b}{4} x_i^4 \right) - c \sum_{i=1}^{N} x_i x_{i+1},$$

onde a, b e c são constantes positivas. Aplique o método estocástico de Langevin a este problema, escolhendo $\tau = 0,01$ como passo temporal para obter o histograma da variável $m = (x_1 + x_2 + \ldots + x_N)/N$. Adote $a = b = c = 1$ e obtenha o histograma para algumas temperatures (até valores da ordem de 1,5), discutindo os seus resultados. Escolha um número de sítios N suficientemente grande para que efeitos de tamanho finito sejam pequenos, mas sem levar a tempos de processamento exagerados. Faça também escolhas sensatas para o número de iterações iniciais desprezadas e do número de iterações utilizadas para levantar o histograma. As variáveis aleatórias ξ_i das equações de Langevin podem ser escolhidas de maneira a assumirem os valores ± 1 com igual probabilidade, assim como discutido em sala.