Simulación de la ecuación de Langevin

Descripción del modelo

Vamos a simular en este ejercicio el movimiento de una partícula sometida e una fuerza aleatoria. La ecuación de movimiento de la partícula según la 2ª ley de Newton viene dada por

$$\frac{dv}{dt} = -v - 1 + f(t) \quad \text{con} \quad \langle f(t) f(t') \rangle = 2\Gamma \delta(t - t') \tag{1}$$

El primer paso consiste en discretizar nuestra ecuación para poder simularla en el ordenador, transformándola en,

$$\frac{v_{n+1} - v_n}{\Delta t} = -v_n - 1 + F_n \tag{2}$$

donde la fuerza aleatoria tiene la siguiente propiedad

$$\langle F_n F_m \rangle = 2\Gamma \frac{\delta_{nm}}{\Delta t} \quad \Rightarrow \begin{cases} \langle F_n^2 \rangle = \frac{2\Gamma}{\Delta t}, & n = m \\ \langle F_n F_m \rangle = 0, & n \neq m \end{cases}$$

Una buena forma de implementar esta fuerza aleatoria es considerar que se distribuye de forma gaussiana

$$P(F_n) \sim e^{-F_n^2 \alpha}$$

pudiéndose extraer la constante α de la siguiente forma

$$\left\langle F_n^2 \right\rangle = \frac{2\Gamma}{\Delta t} = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} dF_n e^{-F_n^2 \alpha} F_n^2}{\int_{-\infty}^{+\infty} dF_n e^{-F_n^2 \alpha}}$$

Se obtiene que $\alpha = \frac{\Delta t}{4\Gamma}$, de manera que la ley de distribución de las fuerzas es

$$P(F_n) \sim e^{-\frac{1}{2} \frac{F_n^2}{(2\Gamma/\Delta t)}}$$

Luego entonces para obtener una fuerza hay que tomar un gaussiano de media $\mu = 0$ y varianza $\sigma^2 = \frac{2\Gamma}{\Delta t}$ y esto lo escribo como $N(\mu, \sigma)$. Sin embargo, es fácil obtener un $N(\mu, \sigma)$ a partir de un $N(0, 1)$, con un simple cambio de variable $t = \frac{x-\mu}{\sigma}$ tal y como se muestra a continuación

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x-\mu}{\sigma}\right)^2} = \int_{-\infty}^{+\infty} dt \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{t^2}{2}}$$

En definitiva, vamos a generar gaussianos $t \in N(0, 1)$ mediante el *método de la transformada inversa* que describiremos a continuación, y a éstos le hacemos la transformación $x = \sigma t + \mu$ de manera que $x \in N(\mu, \sigma)$.

Entonces la ec. (2) queda (para $\sigma = \sqrt{\frac{2\Gamma}{\Delta t}}$ y $\mu = 0$) de la siguiente forma

$$\boxed{v_{n+1} = v_n(1 - \Delta t) - \Delta t + \sqrt{2\Gamma\Delta t}\,\xi_n} \tag{3}$$

siendo $\xi_n \in N(0,1)$.

Método de la transformada inversa (MTI)

El motivo de incluir este apartado es porque siempre que tengamos que generar gaussianos es más rentable usar el MTI al método de Metrópolis (MM). La razón radica, como veremos a continuación, en que para $1D$ el MTI tiene un 100% de eficiencia mientras que el MM sólo un 50%. Cuando hablo de eficiencia me refiero al número de uniformes $U(0,1)$ que tengo que generar para conseguir un $N(0,1)$. Consideremos primero el caso general y después lo aplicaremos a nuestro caso concreto:
Dados puntos x's que se distribuyen según $f(x)$, busco un cambio de variable $y = h(x)$ que transforma los puntos x's en y's, los cuales se distribuyen según $g(y)$.
Supongo $f(x) = U(0,1)$ de manera que

$$\begin{aligned} h : [0,1] &\longrightarrow [a,b] \\ x &\longrightarrow y \end{aligned}$$

cumpliéndose $h^{-1}(a) = 0$, $h^{-1}(b) = 1$. El cambio de variable debe mantener la densidad de probabilidad $f(x)dx = g(y)dy$, y como $x = h^{-1}(y)$, $dx = dh^{-1}(y)$, entonces

$$f(h^{-1}(y))dh^{-1}(y) = g(y)dy \;\;\Rightarrow\;\; h^{-1}(Y) = \int_0^Y g(y)dy$$

donde se ha usado el hecho de que $f(x) = 1$ por ser la distribución uniforme.
Ahora apliquemos éste método para muestrear una gaussiana en $2D$,

$$g(x_1, x_2) = \frac{1}{2\pi}e^{-\frac{x_1^2+x_2^2}{2}}$$

¿Cual es el cambio de variable adecuado en este caso? Para verlo pasamos a coordenadas polares con $\varphi \in [0, 2\pi]$ y $r \in [0, \infty)$

$$x_1 = r\cos\varphi$$
$$x_2 = r\sin\varphi$$

Entonces $g(x_1, x_2)dx_1dx_2 = g(r,\varphi)drd\varphi$, o lo que es lo mismo

$$g(r,\varphi) = J\, g(x_1(r,\varphi), x_2(r,\varphi))$$

siendo el jacobiano de la transformación $J = r$. La función que tenemos que muestrear es entonces

$$g(r, \varphi) = \frac{1}{2\pi} r e^{-\frac{r^2}{2}}$$

La maquinaria anterior hace lo siguiente

$$h^{-1}(\Psi, R) = G(\Psi, R) = \int_0^R g(r, \varphi) dr \int_0^\Psi d\Psi = \int_0^R r e^{-\frac{r^2}{2}} dr \int_0^\Psi \frac{1}{2\pi} d\varphi$$

Preocupándonos de la variable r tenemos

$$G(R) = \int_0^R r e^{-\frac{r^2}{2}} dr = 1 - e^{-\frac{R^2}{2}}$$

por lo que

$$h^{-1}(R) = 1 - e^{-\frac{R^2}{2}} \quad \Rightarrow \quad h(R) = \sqrt{-2\log(1-R)}, \;\; R \in U(0,1)$$

Pero si $R \in U(0,1)$, necesariamente $(1 - R) \in U(0,1)$, quedándonos un cambio de variable para la r de la forma

$$\boxed{r = h^{-1}(R) = \sqrt{-2\log R}}$$

El algoritmo es es el siguiente:

1. Genero dos uniformes $z_1\,, z_2\, \in U(0,1)$
2. Obtengo los gaussianos $N(0,1)$ haciendo el cambio de variable

$$x_1 = \sqrt{-2\log z_1}\, cos(2\pi z_2)$$
$$x_2 = \sqrt{-2\log z_2}\, sin(2\pi z_1)$$

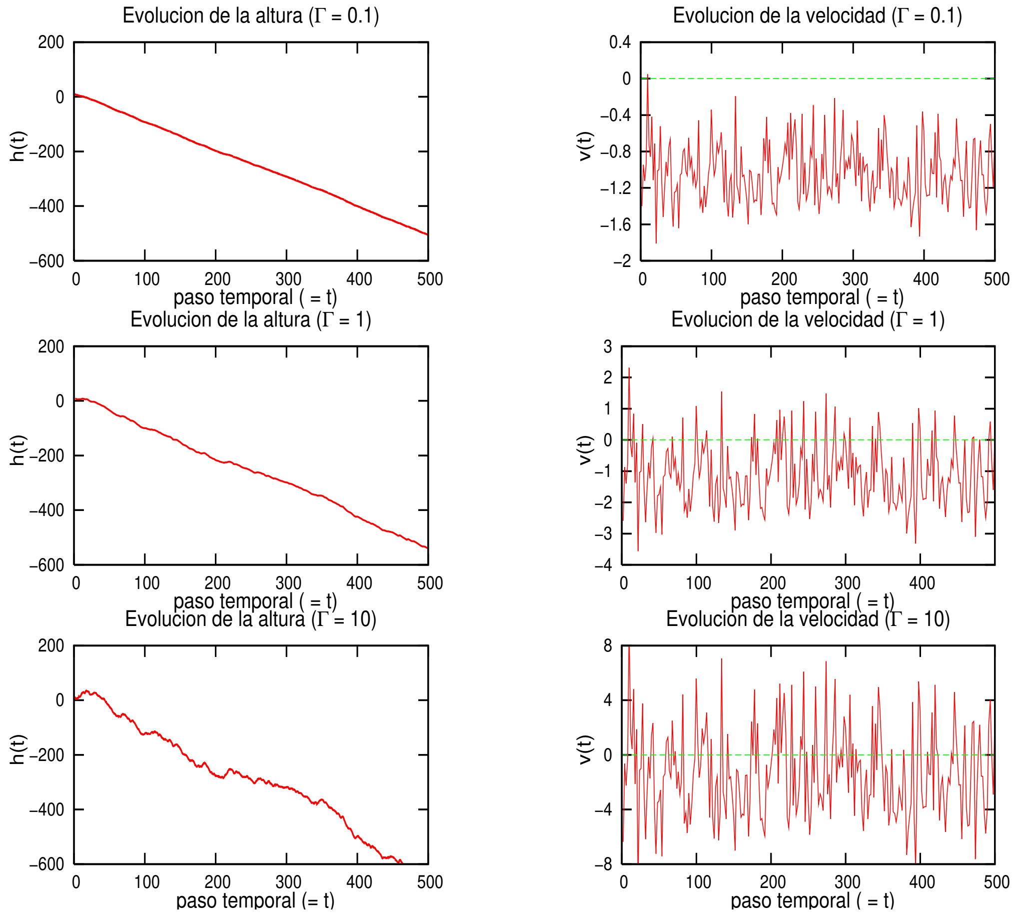
3. Repito el proceso tantas veces como quiera

Resutados de la simulación

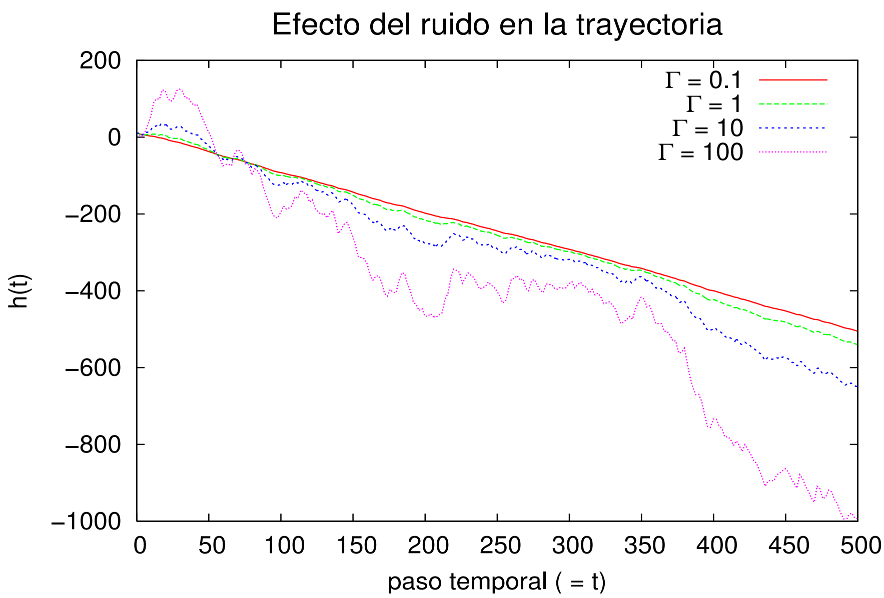
Consideramos una partícula cuyas velocidades en sucesivos pasos temporales vienen dadas por ec. (3). Además puesto que $v = \frac{dh}{dt}$, las posiciones sucesivas se pueden calcular a través de

$$h_{n+1} = h_n + v_n\, \Delta t \tag{4}$$

Nos planteamos qué ocurre con la partícula. Para ello suponemos que la partícula se encuentra a una altura inicial h_0 con una velocidad inicial v_0. En la siguiente figura se muestra la evolución de las ecs. (3) y (4) para distintas elecciones del ruido Γ.



En esta figura podemos ver cómo la partícula en promedio cae y esto lo indica el valor predominantemente negativo en la velocidad. Sin embargo, en ciertas ocasiones la velocidad es positiva, lo que nos dice que la partícula está subiendo. Este efecto es muy importante cuando la intensidad del ruido Γ es grande y para verlo se han superpuesto varias trayectorias para distintos valores de Γ en la siguiente gráfica. A la partícula le cuesta más trabajo caer para Γ grande como se puede apreciar.



Una vez entendido el proceso nos planteamos calcular el tiempo promedio que la partícula está subiendo. Para ello contabilizo en una variable cada vez que la velocidad de la partícula es positiva. El experimento lo realizo con un número grande de partículas con la finalidad de promediar. El resultado que obtenemos para distintos valores Γ se sintetiza en la siguiente tabla.

Resultados promedio de 10000 partículas		
Ruido (Γ)	t_{total}/t_{subida}	Porcentaje de subida (%)
0.1	166.22	0.601
0.5	10.89	9.179
1.0	5.98	16.698
5.0	3.10	32.224
10	2.72	36.741
50	2.32	43.128
100	2.24	44.688

Hay que señalar que el porcentaje de subida se va estabilizando y cabría pensar que pronto alcanzaremos el 50%. Sin embargo la progresión es geométrica, en el sentido de que cada vez hay que aumentar más la fuerza para aumentar en poco el porcentaje. Por ejemplo, para un $\Gamma = 100000$ aún se tiene un 48% de subida. Es muy costoso llegar al 50%, por este motivo partículas en suspensión siempre caen por colisiones.