

Integración de la ecuación de Langevin unidimensional

Antonio C., Braulio; Sevilla, Francisco J.

Departamento de sistemas complejos
Instituto de Física
Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM)
Septiembre 2017

Resumen

1. Ecuación de Langevin

Se pretende dar solución numérica a la ecuación de Langevin con una distribución de temperatura $T(x)$:

$$\dot{x}(t) = -\mu U'(x) + \sqrt{T(x)}\xi(t) \quad (1.1)$$

Donde $\langle \xi(t) \rangle = 0$ y $\langle \xi(t)\xi(t') \rangle = 2\mu k_B \delta(t - t')$. Notemos que si $\eta(t)$ es un ruido blanco Gaussiano, $\sqrt{2\mu k_B}\eta(t)$ satisface las condiciones de $\xi(t)$.

En general trabajaremos en unidades adimensionales. Al tratar con partículas activas típicamente contamos con una velocidad v característica. Supongamos además que existe L , ϵ y T_0 cantidades características del problema de longitud, energía y temperatura.

Dado que es más práctico trabajar con unidades adimensionales, realizamos el campo de variable $x^* = x/L$, $U^* = U/\epsilon$ y $t^* = tL/v$. De esta manera obtenemos las siguientes relaciones

$$\dot{x}^*(t^*) = \frac{1}{L} \frac{dx}{dt^*} = \frac{1}{L} \frac{dx}{dt} \frac{dt}{dt^*} = \frac{L}{vL} \dot{x}(t) = \frac{1}{v} \dot{x}(t) \quad (1.2)$$

$$U'^*(x^*) = \frac{1}{\epsilon} \frac{dU}{dx^*} = \frac{1}{\epsilon} \frac{dU}{dx} \frac{dx}{dx^*} = \frac{L}{\epsilon} U'(x) \quad (1.3)$$

$$\langle \xi(t^*)\xi(t'^*) \rangle = \frac{v}{L} \langle \xi(t)\xi(t') \rangle \quad (1.4)$$

Sustituyendo la segunda expresión en la temperatura, usando $\xi(t) = \sqrt{2\mu k_B}\eta(t)$:

$$T(x^*) = T_0 \left[1 - \left(\frac{\mu\epsilon}{vL} \right)^2 U'^*(x^*) \right] = T_0 T^*(x^*) \quad (1.5)$$

Sustituyendo 1.2 y 1.5 en 1.1 obtenemos

$$\dot{x}^*(t^*) = - \left(\frac{\mu\epsilon}{vL} \right) U'^*(x^*) + \sqrt{T^*(x^*)} \sqrt{2 \frac{T_0 k_B \mu}{vL}} \eta(t^*)$$

Sea $\beta = \epsilon/(k_B T_0)$. Entonces el argumento de la segunda raíz se convierte en $\beta^{-1} \mu\epsilon/(vL)$. Finalmente obtenemos la ecuación adimensional a integrar:

$$\dot{x}^*(t^*) = - \left(\frac{\mu\epsilon}{vL} \right) U'^*(x^*) + \sqrt{T^*(x^*)} \sqrt{2 \frac{1}{\beta} \frac{\mu\epsilon}{vL}} \eta(t^*) \quad (1.6)$$

Típicamente escogeremos un parámetro $\chi \propto \mu\epsilon/(vL)$, cuya constante de proporcionalidad determinaremos con el problema dado.

2. Runge-Kutta 2

Los métodos RK son conocidos por no ser simplécticos y no conservar el volumen del espacio fase de un sistema dinámico. Dado que el problema estudiado es esencialmente no conservativo, pues existe intercambio de energía con los alrededores (no tomados en cuenta) emplearemos el método RK2 por ser un método de segundo orden de fácil aplicación.

En lo subsecuente denominaremos $g_1 = \mu\epsilon/(vL)$ y $g_2 = \sqrt{2\beta^{-1}g_1}$ y retiraremos los * de las cantidades adimensionales.

El método RK2 consiste en calcular un paso intermedio k_1 como método de corrección antes de calcular la evolución del sistema. El esquema es el siguiente:

$$\begin{aligned} k_1 &= hf(t_n, x_n) \\ k_2 &= hf(t_n + \frac{h}{2}, x_n + \frac{k_1}{2}) \\ x_{n+1} &= x_n + k_2 \end{aligned}$$

Donde h es la longitud del paso de integración en el tiempo, n es el número de iteración del sistema y

$$f(t, x) = -g_1 U'(x) + g_2 \sqrt{T(x)} \eta(t)$$

3. Potencial simétrico

A continuación se presenta la distribución de probabilidad obtenida de resolver numéricamente la ecuación 1.6 para el caso de un potencial de doble pozo simétrico.

$$U(x) = x^4 - 2x^2 \tag{3.1}$$

$$T(x) = 1 - \frac{27}{4} \chi^2 x^2 (x^2 - 1)^2 \tag{3.2}$$

Donde $\chi = \sqrt{4^3/3^3} \mu\epsilon/(vL)$.

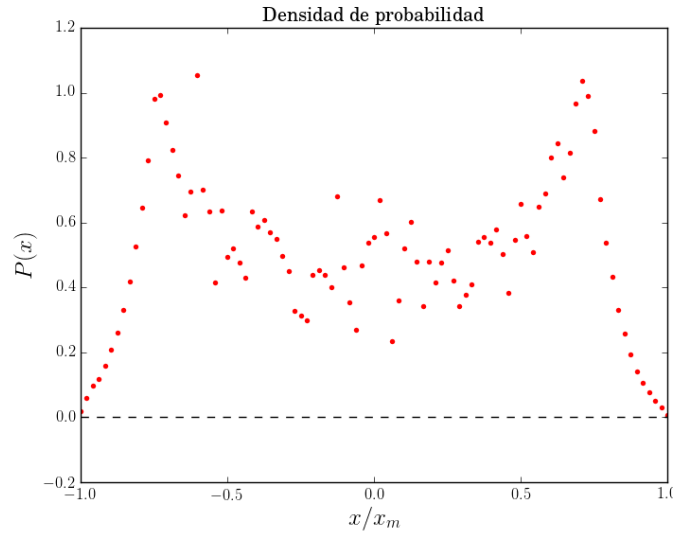


Figura 1

Por motivos de tiempo de corrida solo incluyo el resultado para $\chi = 0,1$ y $\beta = 2\beta_c$. La solución numérica difícilmente se asemeja a la distribución esperada. Coincidiendo únicamente en la presencia de dos máximos simétricos alrededor de un valle en el origen y probabilidad cero en los extremos. Sin embargo, se espera un comportamiento más suave en los máximos y menor variación en el mínimo local alrededor del cero.

Existen detalles evidentes que deben atenderse en mi código. El primero es el paso temporal. Al trabajar con potenciales con valles que localmente pueden verse como un potencial armónico, es necesario hacer un análisis de las frecuencias de oscilación de una partícula alrededor de dicho mínimo y asegurarse que el paso temporal sea capaz de resolver dichas

frecuencias. El segundo es que para cada partícula cuya dinámica es resuelta, debe esperarse un tiempo mínimo en el que se tenga buena certidumbre de un muestreo del espacio. De lo contrario la trayectoria obtenida estará fuertemente correlacionada a la condición inicial (uniformemente distribuida entre $[-x_m, x_m]$). Finalmente, el número de partículas (1000 en este caso) puede ser aumentado para que la probabilidad provenga de un número mayor de trayectorias posibles.