Dinâmicas Estocásticas

- Identificar o espaço de estados do sistema,
  - exemplos:
    - sistemas de N partículas clássicas: o estado microscópico é o conjunto das coordenadas e momentos lineares das partículas, $\underline{\mathscr{P}} = \{q_i, p_i\}, i = 1, \cdots, 3N$
    - gases ideais quânticos de partículas indiscerníveis: o estado microscópico é o número de partículas, $\underline{\mathscr{P}} = \left\{ n_{\vec{k}} \right\}$ com um dado vetor de onda $\vec{k}$.

Dinâmicas Estocásticas

- Exemplos:
  - Npartículas discerníveis com dois estados: o estado microscópico é $\underline{\mathscr{P}} = \{X_i\}, i = 1, \cdots, N$ com $X_i \in \{A, B\}$.
  - Npartículas indiscerníveis com dois estados: o estado microscópico é $\underline{\mathscr{P}} = \{n_A\}$ com $n_A =$ número de partículas no estado A e $n_B = N - n_A =$ número de partículas no estado B.
- Energia do estado microscópico, $E(\underline{\mathscr{P}})$
- Perturbação aleatória do estado microscópico: pequena variação numa das coordenadas do estado $\underline{\mathscr{P}}$.

Algoritmo de Monte Carlo - *Demon*

aproximadamente
Sistemas com energia fixa

- A dinâmica estocástica deve conservar a energia.
- Introduz-se um *demon* com energia $E_D > 0$ e força-se a conservação da energia total, $E(\mathscr{P}) + E_D$.

E_D vai ser pequeno

$E_{total} = E + E_D$

- Durante um tempo t_{max}= número máximo de passos
  - O estado microscópico, é perturbado.
  - Calcula-se a variação de energia do sistema, ΔE .
  - Se $\Delta E \leq 0$ aceita-se o novo estado e faz-se $E_D \rightarrow E_D - \Delta E$. Se $\Delta E > 0$ a perturbação só é aceite se $\Delta E < E_D$ e faz-se $E_D \rightarrow E_D - \Delta E$.
  - O sistema permanece no mesmo estado se a perturbação não for aceite.

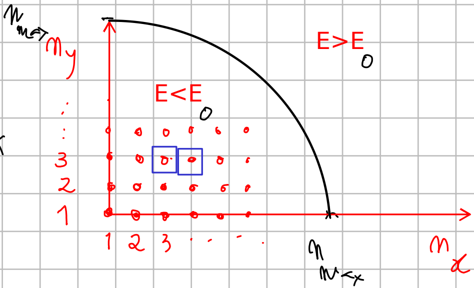
$\Delta E_{tot} = 0$

$= \Delta E + \Delta E_D$

$\Delta E_D = -\Delta E$

- Calculam-se médias em regime estacionário das observáveis físicas.

Exercicio 28



Estados de 1 partícula (fotão)

$$E = \hbar c k = \hbar c \frac{\pi}{L} \sqrt{n_x^2 + n_y^2}$$

$$\vec{k} = \frac{\pi}{L} (n_x, n_y)$$

$$k = \frac{\pi}{L} \sqrt{n_x^2 + n_y^2}$$

$$k = |\vec{k}|$$

$$\hbar = \frac{h}{2\pi}$$

$$E = \frac{h c \cancel{\pi}}{2 \cancel{\pi} L} \sqrt{n_x^2 + n_y^2}$$

$$E = \frac{hc}{2L} \sqrt{n_x^2 + n_y^2}$$

$$u_E = \frac{hc}{2L}$$

$$\boxed{E^* = \frac{E}{u_E} = \sqrt{n_x^2 + n_y^2}}$$

adimensional

E_0 = energia total do sistema

$$E_0 = \frac{hc}{2L}\sqrt{n_{max}^2 + 1}$$

$$\left(E_0 \frac{2L}{hc}\right)^2 = n_{max}^2 + 1$$

$$n_{max} = \sqrt{\left(\frac{E_0 \times 2L}{hc}\right)^2 - 1}$$

Estado do sistema: $nk = \text{Zeros}(nmax, nmax)$

Perturbação do estado:

(1) Escolher (nx, ny) ao acaso

(2) com probabilidade 0.5 criar um fotao em (nx,ny)
nk(nx,ny)=nk(nx,ny)+1

(3) com probabilidade 0.5 aniquilar um fotão

nk(nx,ny)=nk(nx,ny)-1

Calcular a energia média do sistema

Energia do sistema

$$E = \sum_{k_x, k_y} n_{\vec{k}} \, E_{\vec{k}}$$

Matlab

```
E=0;
for nx = 1:nmax
    for ny = 1:nmax
        E = E + nk(nx,ny) * sqrt(nx^2 + ny^2)
    end
end
```

Energia media=media temporal dos valores de energia observados

Demon

$$0 \leq E_D \leq E_0 \qquad P(E_D) = \frac{1}{k_B T} e^{-E_D/k_B T}$$

Distribuição exponencial

Energia média do Demon

$$\bar{E}_D = \int_0^{E_0} \frac{E_D}{k_B T} e^{-E_D/k_B T} dE_D$$

$$\beta = \frac{1}{k_B T}$$

$$\simeq \int_0^{\infty} \beta E_D e^{-\beta E_D} dE_D = \beta \left(-\frac{d}{d\beta} \underline{\int_0^{\infty} e^{-\beta E_D} dE_D} \right)$$

$$\bar{E}_D = \beta \left(-\frac{d}{d\beta} \frac{1}{\beta} \right) \qquad \left. \frac{e^{-\beta E_D}}{-\beta} \right|_0^{\infty} = \frac{1}{\beta}$$

$$= \beta \cdot \left(-\frac{1}{\beta^2} \right) = \frac{1}{\beta} = k_B T$$

$$\boxed{u_T = u_E / k_B}$$

$$E_D^* = E_D / u_E \qquad \bar{E}_D^* = \bar{E}_D / u_E = k_B T / u_E$$

$$= \frac{T}{u_E / k_B} = \frac{T}{u_T} = T^*$$

$$p(E_D)\, dE_D = p(E_D^*)\, dE_D^*$$

$$p(E_D^*) = p(E_D) \frac{dE_D}{dE_D^*} = p(E_D) \frac{1}{u_E}$$

$E_D^* = E_D / u_E$

$\frac{dE_D^*}{dE_D} = \frac{1}{u_E}$

$$p(E_D^*) = \frac{1}{k_B T} e^{-E_D/k_B T} \frac{1}{u_E} = \frac{1}{T^*} e^{-E_D^*/T^*}$$

$$\bar{n}_{\vec{k}} = \frac{1}{e^{\beta E_{\vec{k}}} - 1} \qquad \beta = \frac{1}{k_B T}$$

$\downarrow$

nº médio de fotões com dado $\vec{k}$

$$E = \sum_{k_x, k_y} n_{\vec{k}} \; E_{\vec{k}} \Rightarrow \bar{E} = \sum_{k_x k_y} \overline{n_{\vec{k}}} \; E_{\vec{k}}$$

$k = |\vec{k}|$ $\quad \vec{k} = (k_x, k_y)$

$$= \int_0^{\infty} g(k)\, dk \; \frac{E_k}{e^{\beta E_k} - 1}$$

$$g(k) = \frac{2\pi k}{4(\pi/L)^2}$$ = densidade de estados no espaço k

Volume ocupado por 1 estado de fotões no espaço $\vec{k}$ é $\left(\frac{\pi}{L}\right)^2$

$\vec{k} = (k_x, k_y, k_z)$

$$g(k) = \frac{4\pi k^2}{8} \; \frac{dk}{(\pi/L)^3}$$

Volume ocupado por 1 estado no espaço $\vec{k}$ $= \left(\frac{\pi}{L}\right)^3$

$$g(k)\, dk = \frac{2\pi k\, dk}{4(\pi/L)^2}$$

densidade de estados

nº de estados de fotões com dado k

$0 < k < \infty$

$$\bar{E} = \int_0^{\infty} g(k)\,dk \, \frac{E_k}{e^{\beta E_k} - 1} = \frac{L^2}{2\pi} \int_0^{\infty} k \frac{\hbar c k}{e^{\beta \hbar c k} - 1} dk$$

Substituição

$$x = \beta \hbar c k$$

$$dx = \beta \hbar c \, dk$$

$$= \frac{L^2 \hbar c}{2\pi} \int_0^{\infty} \left(\frac{x}{\beta \hbar c}\right)^2 \frac{1}{e^x - 1} \frac{dx}{\beta \hbar c}$$

$$\bar{E} = \frac{L^2}{2\pi} \frac{\beta^{-3}}{(\hbar c)^2} \underbrace{\int_0^{\infty} \frac{x^2}{e^x - 1} dx}$$

$$= \frac{L^2}{\hbar^2 c^2 \, 2\pi} T^3 k_B^3 \qquad (1{,}202056\ldots) \times 2$$

(no Matlab zeta(3))

$$\bar{E}^* = \frac{\bar{E}}{u_E} = \frac{1}{u_E^2} \pi \frac{k_B^3}{\cancel{2} u_E} T^3 \cancel{2} \times 1{,}202\ldots$$

$$= \pi \frac{1}{u_E^3} k_B^3 T^3 \quad 1{,}202$$

$$\boxed{u_E = \frac{\hbar c}{2L}}$$

$$E^* = \pi \, T^{*3} \, 1{,}202056$$

Da Wikipedia - Riemann zeta function

The Riemann zeta function $\zeta(s)$ is a function of a complex variable $s = \sigma + it$. (The notation s, σ, and t is used traditionally in the study of the zeta function, following Riemann.) When $\operatorname{Re}(s) = \sigma > 1$, the function can be written as a converging summation or integral:

$$\zeta(s) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^s} = \frac{1}{\Gamma(s)} \int_0^{\infty} \frac{x^{s-1}}{e^x - 1} \, \mathrm{d}x \,,$$

where

$$\Gamma(s) = \int_0^{\infty} x^{s-1} \, e^{-x} \, \mathrm{d}x$$

is the gamma function. The Riemann zeta function is defined for other complex values via analytic continuation of the function defined for $\sigma > 1$.

Leonhard Euler considered the above series in 1740 for positive integer values of s, and later Chebyshev extended the definition to $\operatorname{Re}(s) > 1$.[3]