Tarea 6: FIM8451 - Mecánica Estadística Avanzada
Instituto de Física
Pontificia Universidad Católica de Chile
Prof: B. Loewe,
Segundo Semestre 2024
Fecha de Entrega: 26 de Noviembre, 2024

Problema 1:

Movimiento debido únicamente a un forzamiento aleatorio

I) Considere la ecuación de Langevin que describe el movimiento de una partícula de masa m sujeta a un forzamiento puramente aleatorio

$$m\dot{v} = f(t)$$

donde la fuerza aleatoria es un ruido blanco de media cero:

$$\langle f(t)\rangle = 0\,; \quad \langle f(t)f(t')\rangle = \kappa\,\delta(t-t')$$

donde la constante κ establece la magnitud de la fuerza. Integre analíticamente la ecuación diferencial para obtener $v(t)$, luego integre una vez más para obtener una expresión para el desplazamiento $x(t)$. Utilice esta última para calcular $\langle x^2\rangle$. Para simplificar, asuma condiciones iniciales $x(0) = v(0) = 0$.

II) Escriba un programa para integrar la ecuación de Langevin del problema anterior (con las mismas condiciones iniciales) y con $m = 1$. Use el método de Euler con un paso de tiempo fijo $\Delta t = 0{,}02$. Para generar la fuente de ruido f, en cada paso elija un número aleatorio con probabilidad uniforme en el intervalo $[-1, 1]$.

(a) ¿A qué valor de κ corresponde este procedimiento?

(b) Para una única ejecución de 500 pasos de tiempo (de modo que t va de cero a 10), haga gráficos de $f(t)$, $v(t)$ y $x(t)$.

(c) Para la misma ejecución utilizada en la parte (a), evalúe numéricamente los promedios temporales de las seis cantidades f, f^2, v, v^2, x y x^2.

(d) Ahora, simule una ejecución más larga de 50,000 pasos de tiempo, y repita la parte (b). Esta ejecución es 100 veces más larga que la anterior, por lo que se podría esperar que $\langle x^2\rangle$ sea mayor. Use su respuesta a la parte I) para predecir cuánto más grande debería ser y compare esto con los resultados de su simulación.

Problema 2

Un proceso $z(t)$ se dice Gaussiano si

$$W_n(z_1, t_1; z_2, t_2; \ldots; z_n, t_n) = C \exp\left[-\frac{1}{2}\sum_{j=1}^{n}\sum_{k=1}^{n} a_{jk}(z_j - m_j)(z_k - m_k)\right],$$

donde $m_j = \langle z_j \rangle$ y $(a_{jk}) = A$ es una matriz definida positiva.
Usando las funciones característica y de cúmulos vistas en clase, demuestre que las componentes de la matriz inversa A^{-1} son las funciones de correlación del proceso $z(t)$, es decir,

$$(A^{-1})_{jk} = \langle (z_j - m_j)(z_k - m_k) \rangle = \langle [z(t_j) - \langle z(t_j) \rangle][z(t_k) - \langle z(t_k) \rangle] \rangle \,.$$

Problema 3

Oscilador armónico con ruido

I) Considere la ecuación de movimiento para una masa en un resorte amortiguado y forzado, restringido a moverse en una dimensión:

$$m\ddot{x} = -b\dot{x} - kx + f(t)$$

donde m es la masa, k es la constante del resorte, b es el coeficiente de fricción, y la fuerza f es un ruido blanco

$$\langle f(t) \rangle = 0\,; \quad \langle f(t)f(s) \rangle = \kappa\delta(t-s)$$

(a) Encuentre la densidad espectral de potencia para x, como una función de m, b, k y κ. La forma más sencilla de hacerlo es introducir las transformadas de Fourier $x(\omega)$ y $f(\omega)$ para convertir la ecuación diferencial en una ecuación algebraica, resolver para $x(\omega)$ y luego usar la definición

$$I_x(\omega) = \lim_{T\to\infty} \frac{1}{2\pi T}|\tilde{x}|^2$$

Recuerde que nuestra definición para la Transformada de Fourier es

$$x(t) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} x(\omega)e^{i\omega t}d\omega$$

(b) Grafique su resultado usando los valores de los parámetros $k = 4\pi^2$, $m = 1$, $\kappa = 1\times 10^{-4}$, $b = 1$.

II) Escriba un programa para integrar la ecuación de Langevin de la parte I). Para hacer esto, primero reescribimos la ecuación de segundo orden como un sistema de ecuaciones de primer orden:

$$\dot{x} = v$$

$$\dot{v} = \frac{f}{m} - \left(\frac{k}{m}\right)x - \left(\frac{b}{m}\right)v$$

y luego aproximamos la derivada (método de Euler).

(a) Suponga que genera el ruido f eligiendo en cada paso de tiempo un nuevo número aleatorio con probabilidad uniforme en el intervalo $[-A, A]$, y suponga que utiliza un paso de tiempo de $\Delta t = 0{,}01$. ¿Qué valor de A necesita usar para que su simulación corresponda a una intensidad de ruido de $\kappa = 1 \times 10^{-4}$?

(b) Usando los valores de los parámetros $k = 4\pi^2$, $m = 1$, $\kappa = 1 \times 10^{-4}$, $b = 1$ y $\Delta t = 0{,}01$, integre numéricamente la ecuación de movimiento para generar una única corrida de 50,000 pasos de tiempo. Trace la serie temporal para $x(t)$ para los primeros 1000 pasos de tiempo (es decir, para $t \in [0, 10]$).

(c) Tome la transformada de Fourier (discreta) de su serie temporal larga $x(t)$, determine la densidad espectral de potencia de x, y grafique su resultado. En su gráfico, use la misma escala para los ejes x y t que usó para la parte (b) de la parte I) para que sea fácil comparar ambos visualmente. (Si puede, superponga ambos gráficos en el mismo conjunto de ejes).

(d) Probablemente encontrará que la densidad espectral de potencia muestra una cantidad considerable de dispersión, aunque aún puede detectar la forma general. En la práctica, generalmente se realiza un promedio adicional para obtener un resultado más suave. Haga esto ejecutando su programa N veces, generando $I(\omega)$ a partir de $x(t)$ para cada corrida, sumando las funciones $I(\omega)$ y dividiéndolas por N para obtener un promedio conjunto de la densidad espectral $\langle I(\omega)\rangle$. Realice esto y grafique sus resultados para $\langle I(\omega)\rangle$ con $N = 1, 10, 100$ para ver qué tan bien (o mal) funciona esto.

Problema 4

Una partícula con auto-propulsión sobreamortiguada en 2D satisface la siguiente ecuación de Langevin:

$$\begin{aligned}\frac{d\mathbf{x}}{dt} &= \boldsymbol{v}(\theta(t)) \\ \frac{d\theta}{dt} &= \sqrt{2D_r}\,\xi(t),\end{aligned}$$

donde $\boldsymbol{v}(\theta) = v_0\,(\cos(\theta), \sin(\theta))$ es la velocidad de auto-propulsión (con rapidez constante v_0 y orientación θ) y D_r es la constante de difusión rotacional. Como se puede ver, θ evoluciona estocásticamente en el tiempo, impulsada por el ruido blanco ξ (con $\langle \xi(t)\rangle = 0$ y $\langle \xi(t_1)\xi(t_2)\rangle = \delta(t_1 - t_2)$).

a) Calcule el desplazamiento cuadrático medio $\langle x(t)^2\rangle$ de forma analítica.

a) ¿Cuál es el tiempo característico que determina la transición entre el comportamiento balístico y el comportamiento difusivo?

a) Obtenga la constante de difusión efectiva.