Trabajo: Procesos Estocásticos

Caos y sistemas no lineales

Alumnos:

Adrián Blancas Pozo

Juan Diomedes Morales

Roger Pou López

Profesor tutor:

Juan José Mazo

Langevin (1908) : Ecuación diferencial estocástica.

$$m\frac{d^2\vec{r}}{dt^2} = -\eta\frac{d\vec{r}}{dt} + \xi(t)$$

$-\eta dr/dt$ es un rozamiento viscoso y $\xi(t)$ es una fuerza estocástica cuyas propiedades estadísticas son:

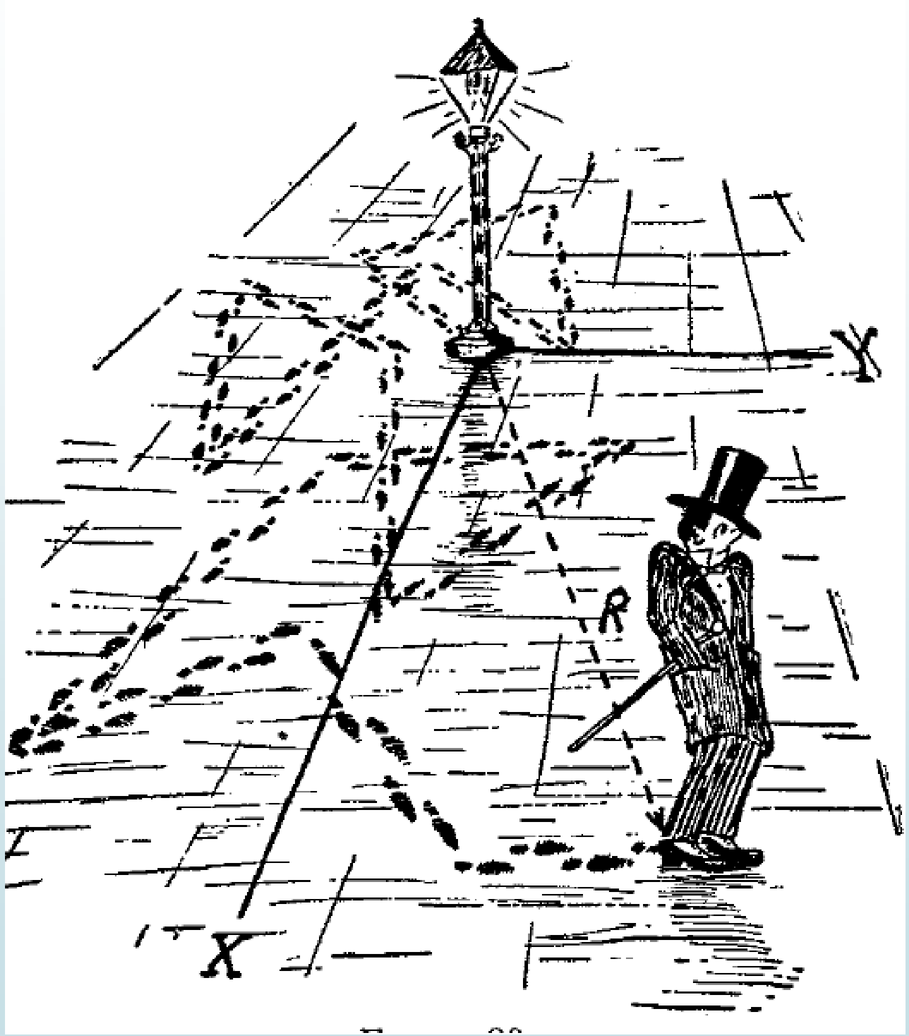
i) $<\xi(t)> = 0$ y ii) $<\xi(t)\xi(t')> = c_o\delta(t-t')$

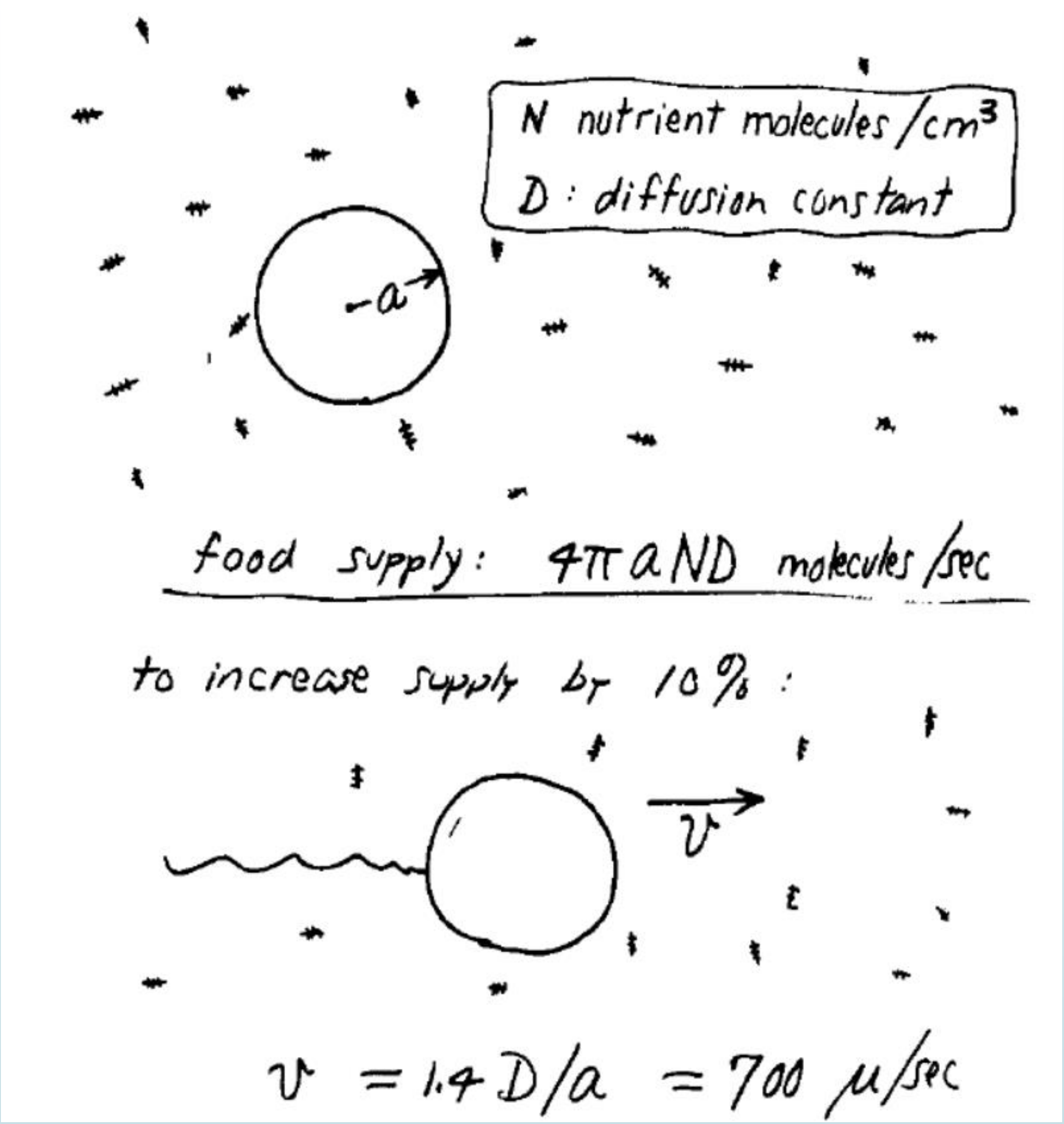
A la solución de la ecuación de Langevin le imponemos dos condiciones:

i) $mv^2 = k_B T$ (por grado de libertad) $c_o = 2\eta k_B T$ (relación de fluctuación-disipación).

ii) $<x^2> = 2Dt$ de aquí se deduce $D = k_B T/\eta$ (relación de Einstein).

¿Existe alguna relación entre la intensidad del efecto del movimiento browniano y la temperatura?




N nutrient molecules/cm³
D : diffusion constant
a
food supply: 4πaND molecules/sec
to increase supply by 10% :
v
v = 1.4 D/a = 700 μ/sec

Se considera una partícula con movimiento browniano:

$$m\ddot{x} = -V'(x) - m\gamma\dot{x} + F + \xi(t)$$

Las fluctuaciones térmicas vienen dadas por ruido de tipo gaussiano de media 0:

$$\langle \xi(t)\xi(0) \rangle = 2D_p\delta(t)$$

La ecuación del movimiento para la primera simulación es:

$$m\ddot{x} + \eta\dot{x} + kx = \xi$$

Para el siguiente caso, la ecuación del movimiento es:

$$m\ddot{x} + \eta\dot{x} + kx = \xi$$

De modo que contamos con un potencial periódico simétrico:

$$V(x) = \frac{1}{2}kx^2$$

Esperamos por tanto que el desplazamiento promedio sea nulo

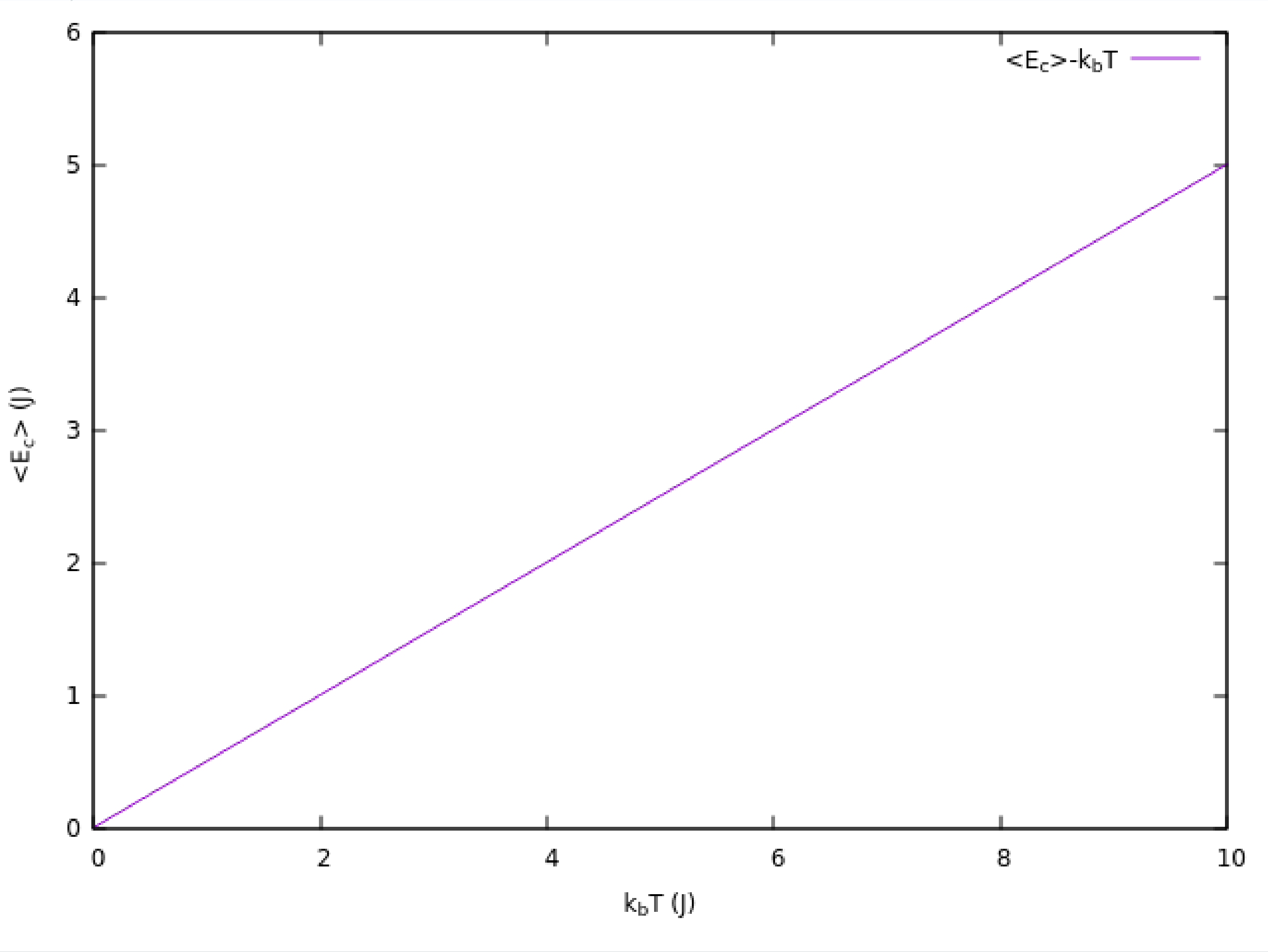
Para nuestro sistema:

$$H(\boldsymbol{X}^{N}) = \sum_{j=1}^{n} \frac{1}{2}\, \alpha_j\, x_j^2 \, .$$

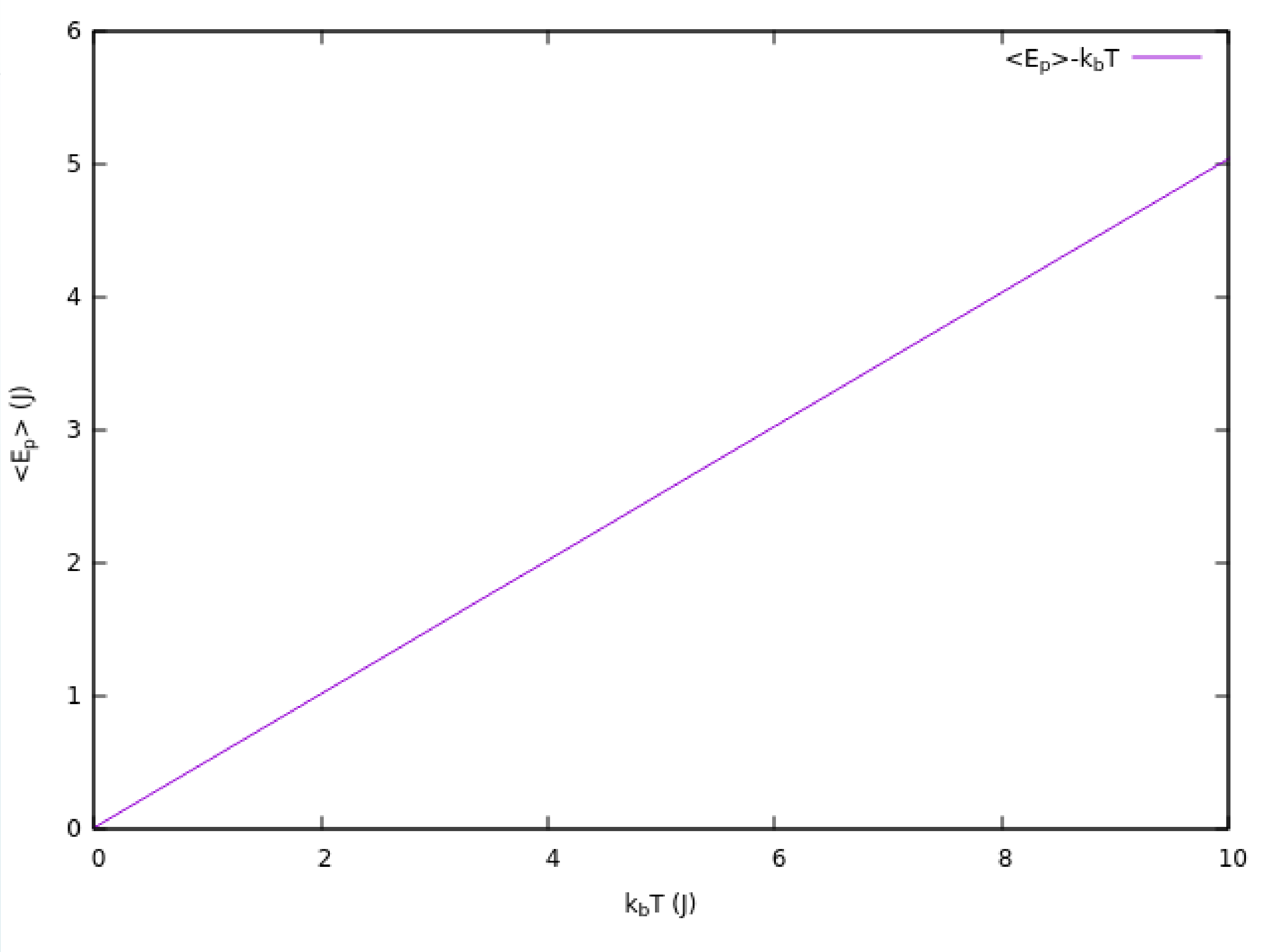
Deberíamos computacionalmente ser capaces de obtener el siguiente resultado predicho por la mecánica estadística:

Cada grado de libertad x_j contribuye a la energía interna con $\frac{1}{2}kT$, sin importar cuánto vale α_j.

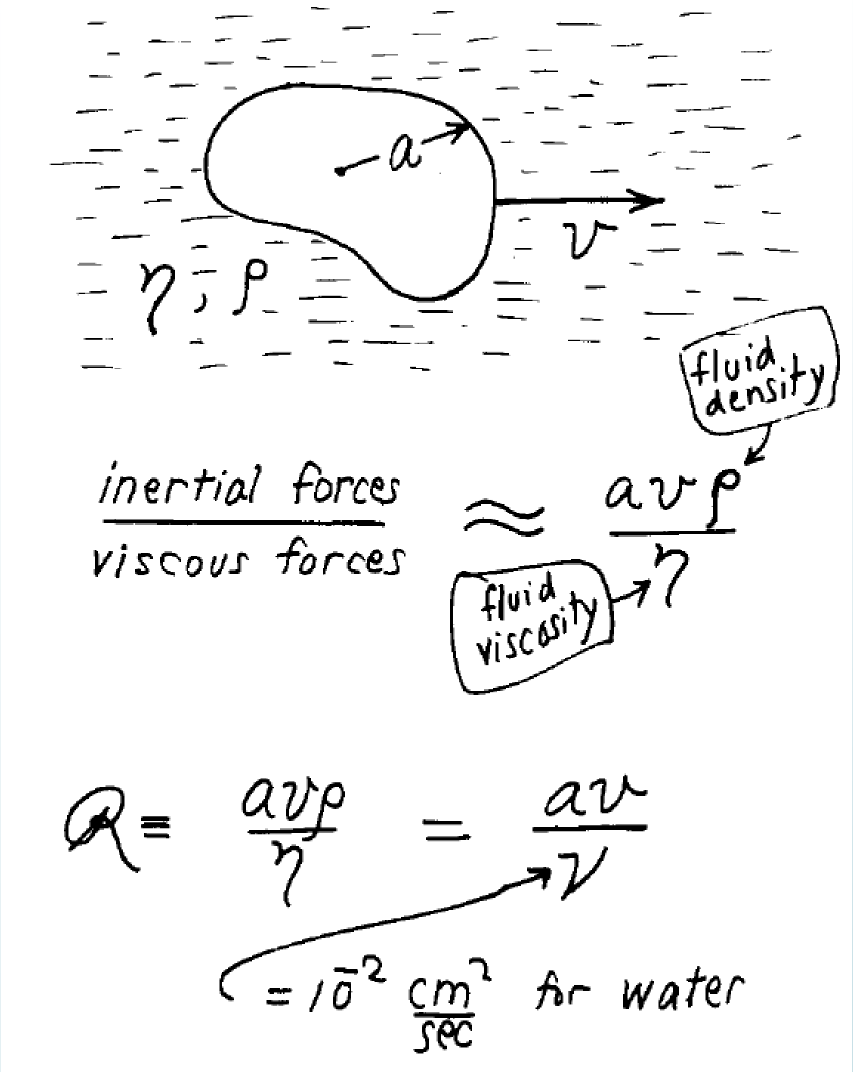
Para la energía cinética promedio



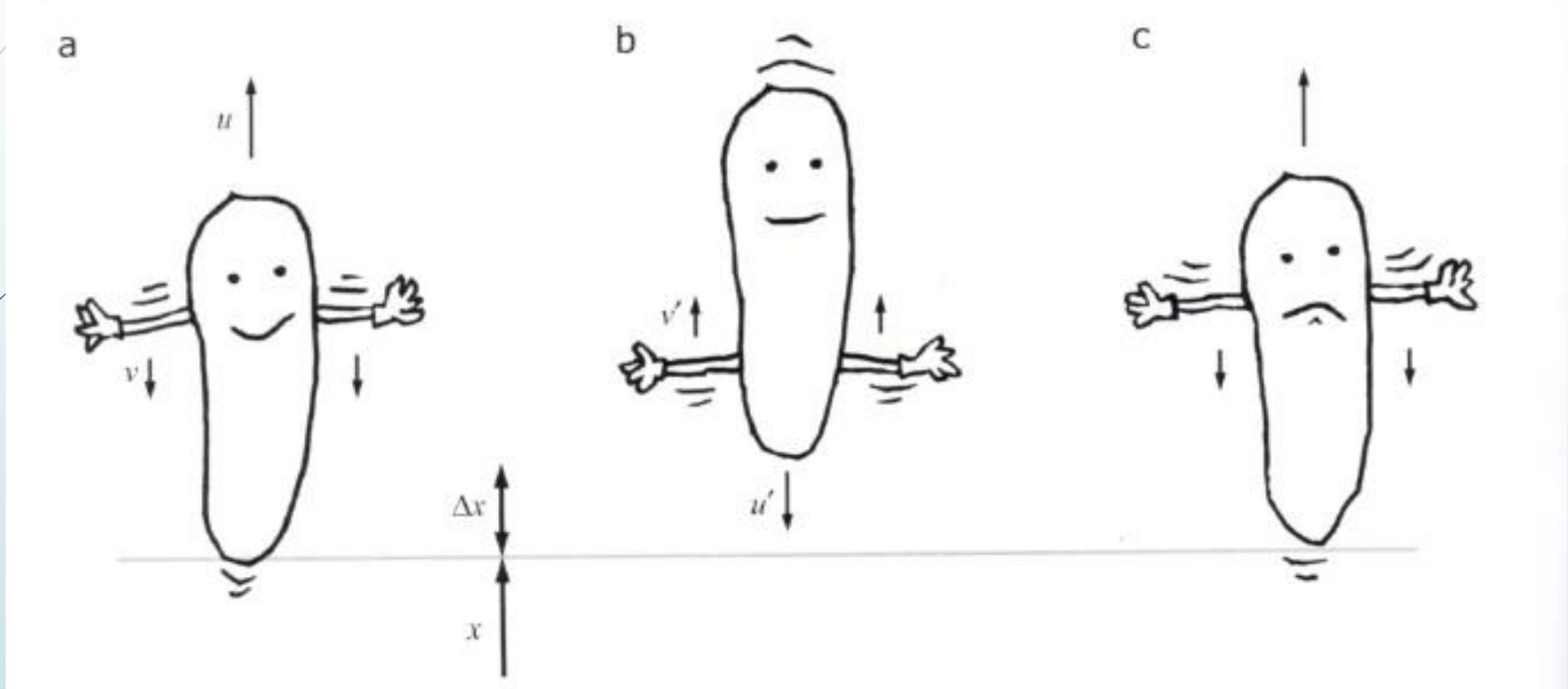
Para la energía potencial promedio



Se trata de un mundo donde R es bajo



Las fuerzas inerciales desaparecen, solo hay movimiento mientras haya autopropulsión



Idea Física: La rectificación del movimiento Browniano, mediante potenciales asimétricos (“ratchet”) proporciona un mecanismo para el movimiento direccional.

La ecuación del movimiento para la segunda simulación es:

$$m\frac{d^2x}{dt^2} + m\gamma\frac{dx}{dt} + \frac{dV(x)}{dx} = F + m\gamma\sqrt{2D}\xi(t)$$

Que no es más que la ecuación de Langevin

Así, la ecuación anterior se convierte en:

$$\dot{x} = -\partial_x \{V(x) - xF(t)\} + \xi(t)$$

Que no es más que la ecuación de Langevin para el caso amortiguado

Rocked Ratchets

El nombre viene de estructuras anisotrópicas y periódicas (ratchets) que son perturbadas de forma periódica (rocked).

Estudiamos procesos estocásticos con sistemas ratchet influenciadas por

- Ruido térmico Blanco $$\langle \xi(t)\,\xi(t')\rangle = 2D\,\delta(t-t')$$
- Fuerza periódica con media temporal nula $$F(t) = A\sin(\omega t)$$

Aplicaciones

- Punto de principio para analizar la presencia de ruido térmico
- Nanotecnología: eficiencia para separar partícula con el mismo coeficiente de difusión

Problema estudiado

Estudiamos la corriente para un sistema determinista y se cambia el sentido de la corriente media

↓

Esto no debería ocurrir para un movimiento determinista

No hay una aún explicación analítica satisfactoria según el articulo

Conclusión clara:

No podemos dejarnos llevar por la simple intuición y hace falta modelización computacional de un problema físico

- Se observa que contrariamente a lo esperado, en ciertas condiciones hay una inversión de la corriente.
- Nosotros estudiamos los casos para la corriente frente los casos de
  - Amplitud del overdamping,
  - la D (proporcional a la temperatura)
  - y para el caso Temperatura nula

Se sabe que un proceso estocástico puede ser descrito a partir de Densidad de probabilidad que satisface la ecuación de Fockker-Plant con Condiciones periódicas en el espacio:

$$\dot{W}(x, t) = -\partial_x J(x, t)$$

$$J(x, t) = [D^{(1)}(x, t) - D\partial_x] W(x, t)$$

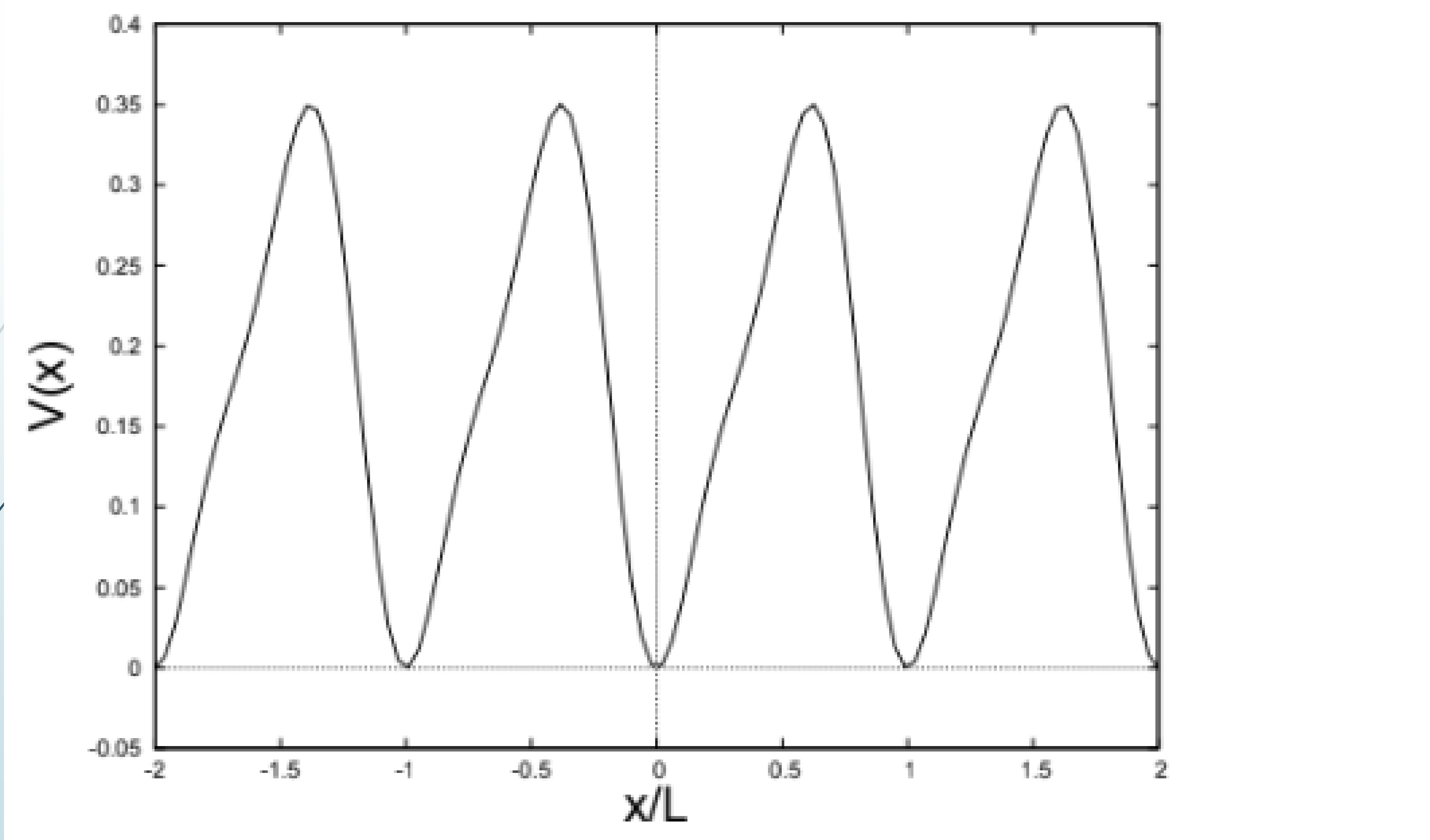
$$D^{(1)}(x, t) = \cos(kx) + (1/2)\cos(2kx) + A\sin(\omega t)$$

Donde el potencial es del tipo:

$$V(x) = -k^{-1}[\sin(kx) + (1/4)\sin(2kx)]$$

Potencial periódico y asimétrico:

$$V(x+L)=V(x)$$

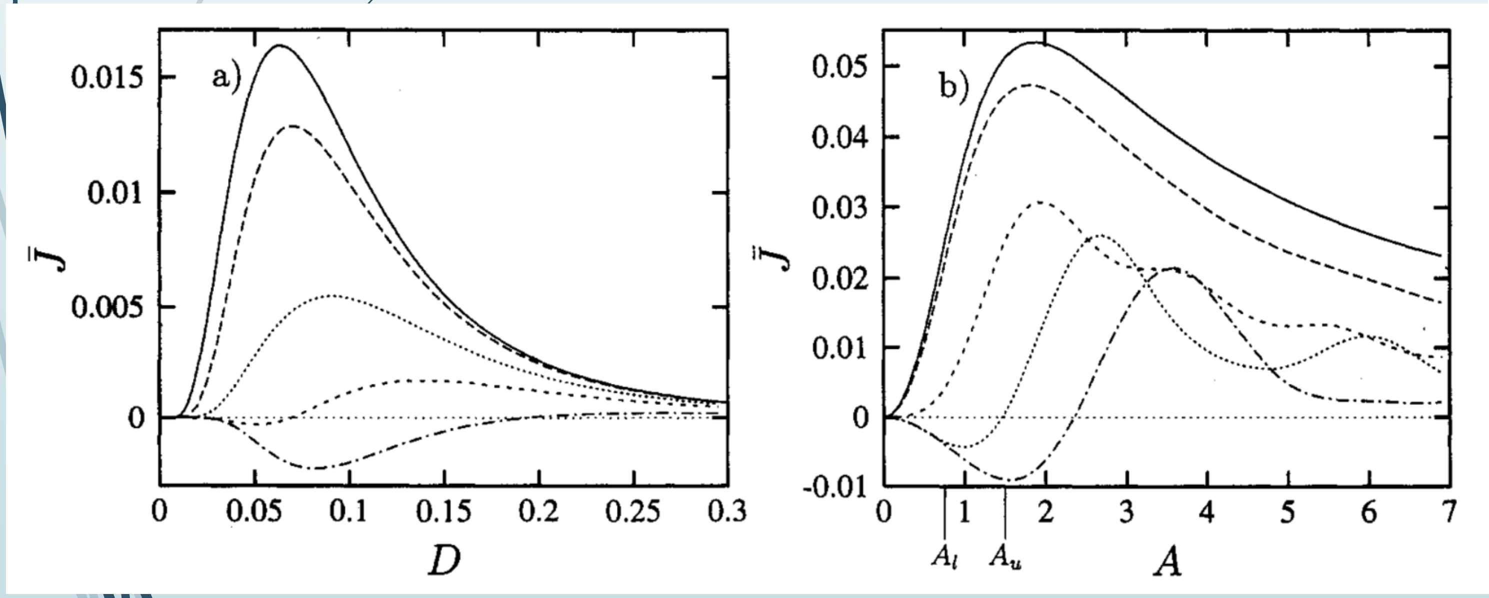

0.4
0.35
0.3
0.25
0.2
0.15
0.1
0.05
0
-0.05
V(x)
-2
-1.5
-1
-0.5
0
0.5
1
1.5
2
x/L

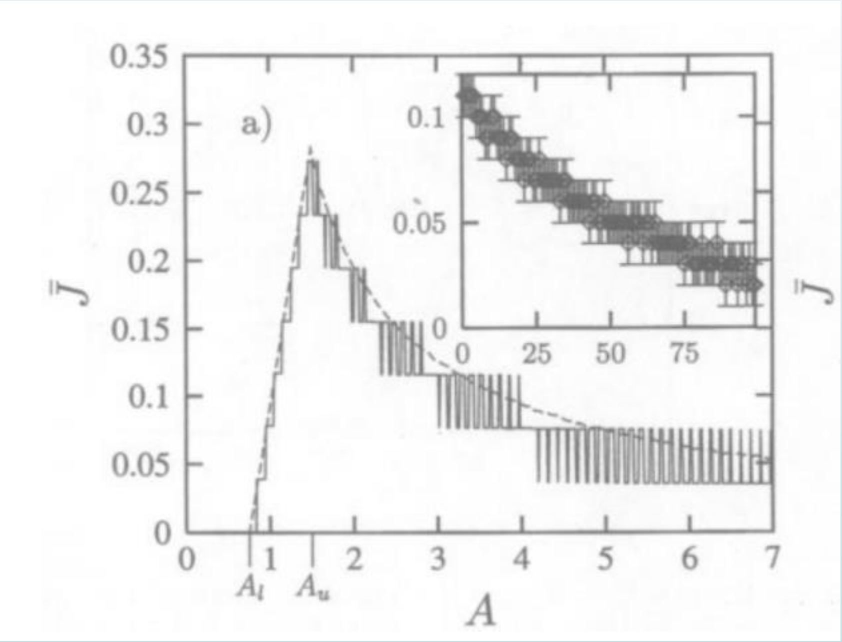
Estamos interesados en el comportamiento asimptotico

$$\bar{J} = \lim_{t \to \infty} \frac{1}{TL} \int_{t}^{T+t} \mathrm{d}t' \int_{0}^{L} \mathrm{d}x \, J(x, t'),$$

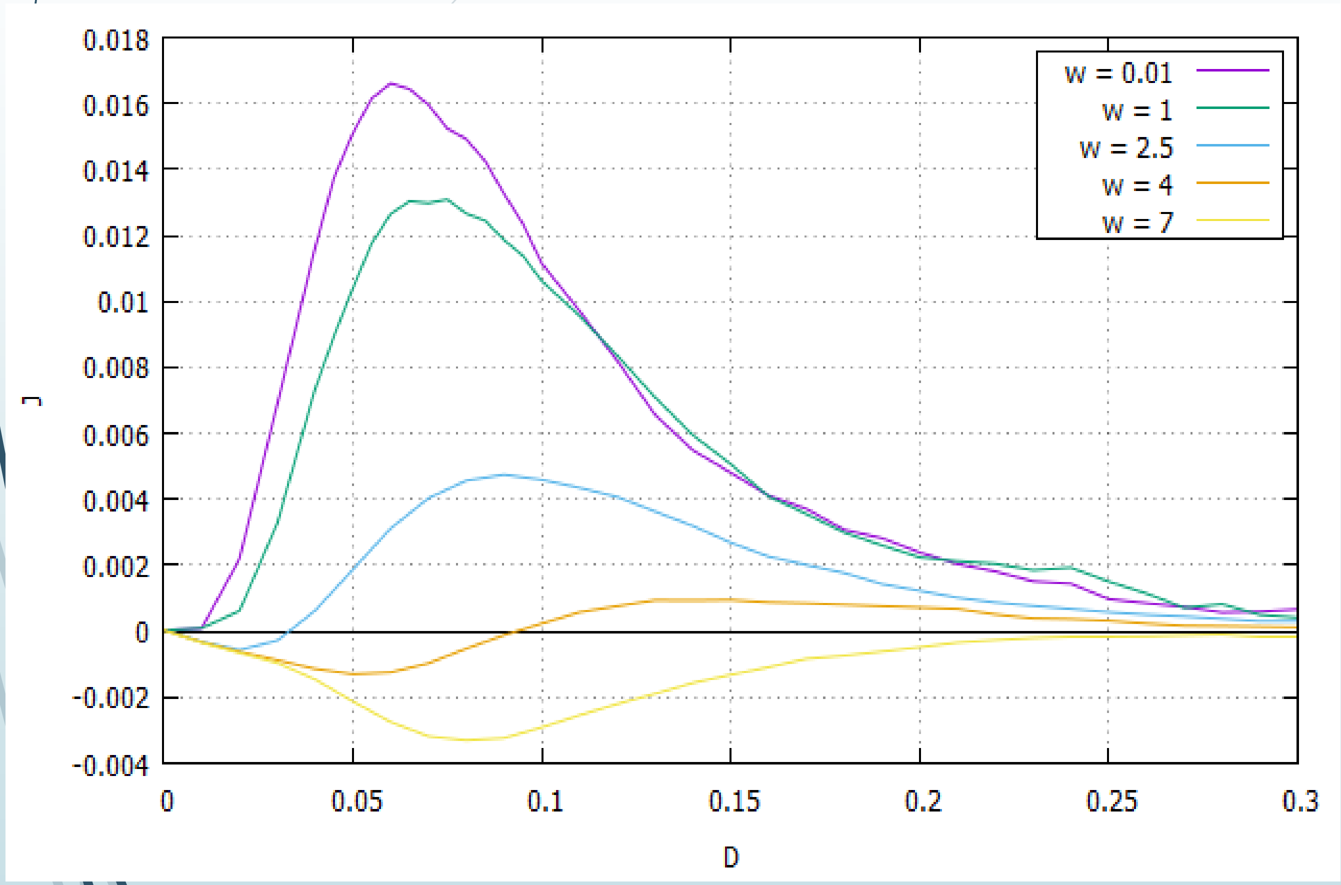
En nuestro caso la corriente media será simplemente la media de las velocidades de las distintas trayectorias de las partículas (L=1)

Simulaciones del artículo



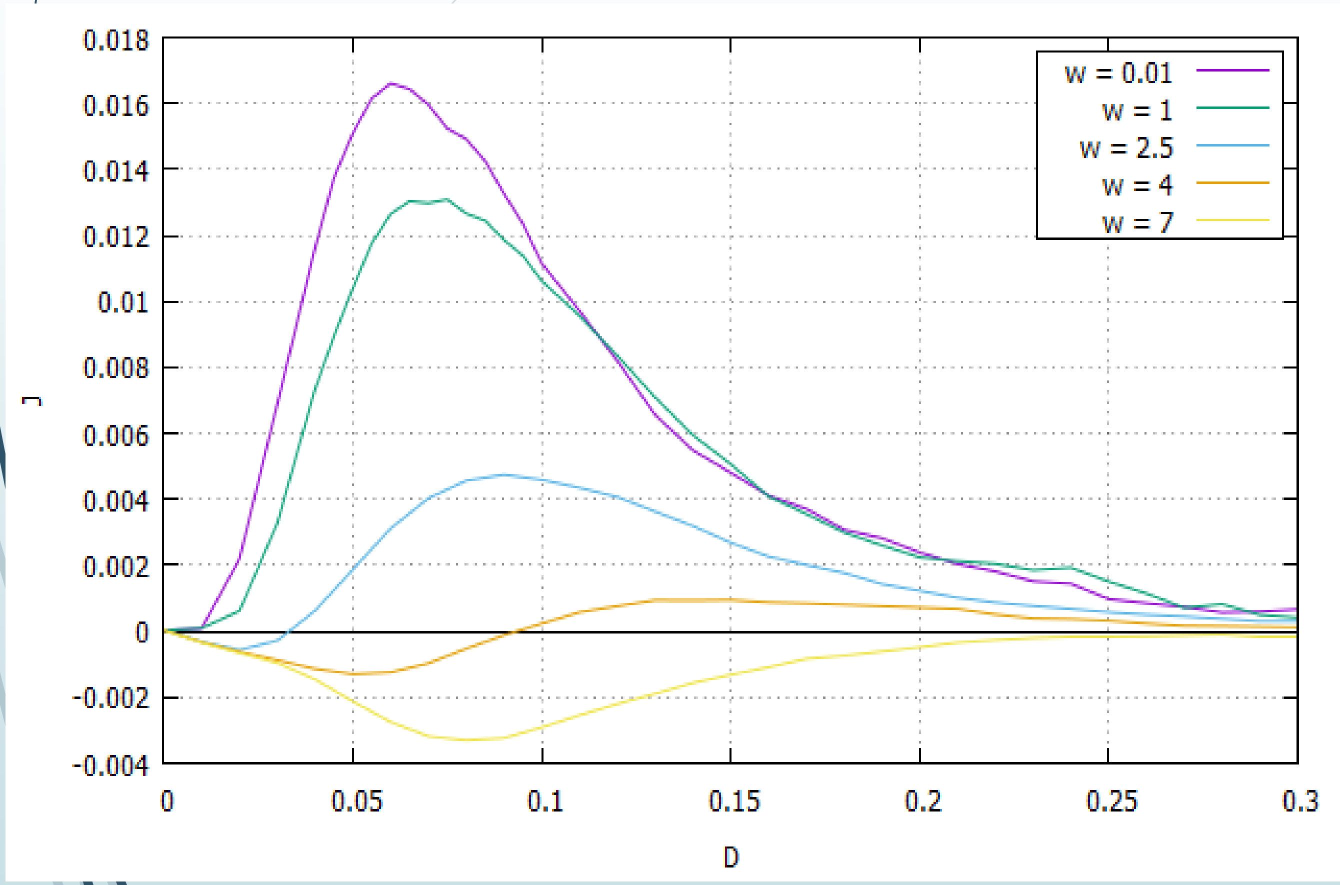


RESULTADOS

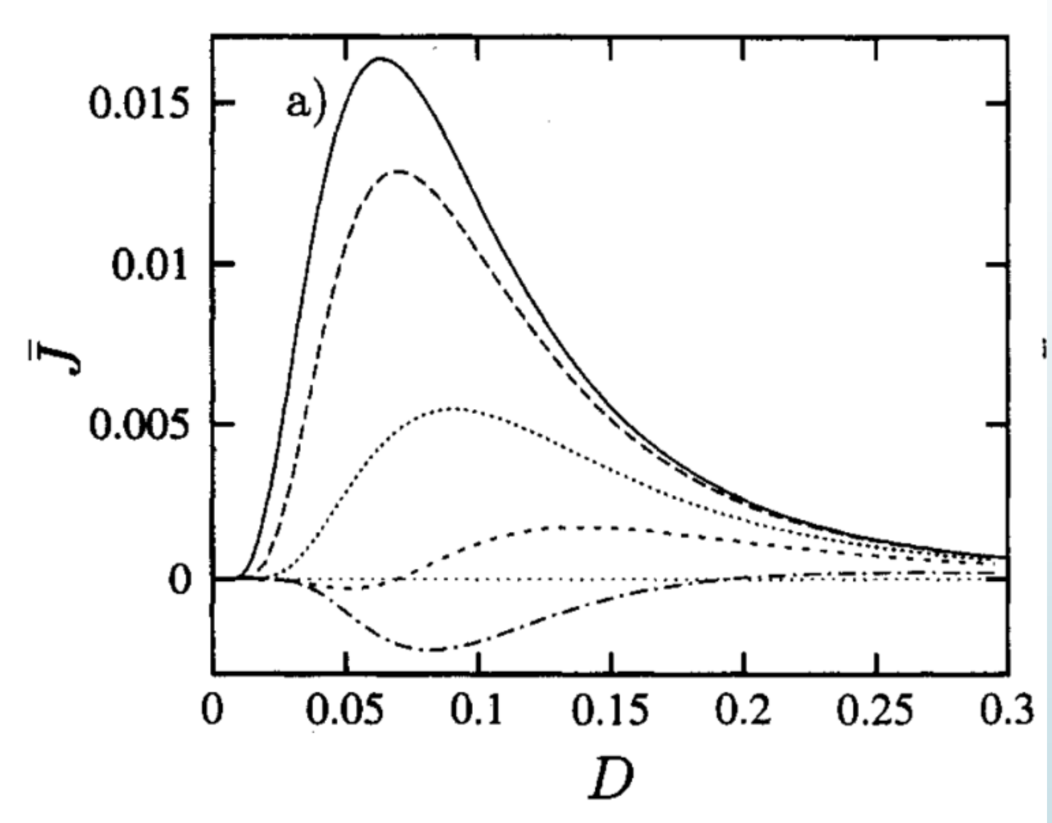


- Fijada amplitud A en 0.5
- Régimen adiabático w =0
- A partir de cierta T se supera la barrera de potencial
- Algunas frecuencias a T bajas tienen corriente negativa.

RESULTADOS

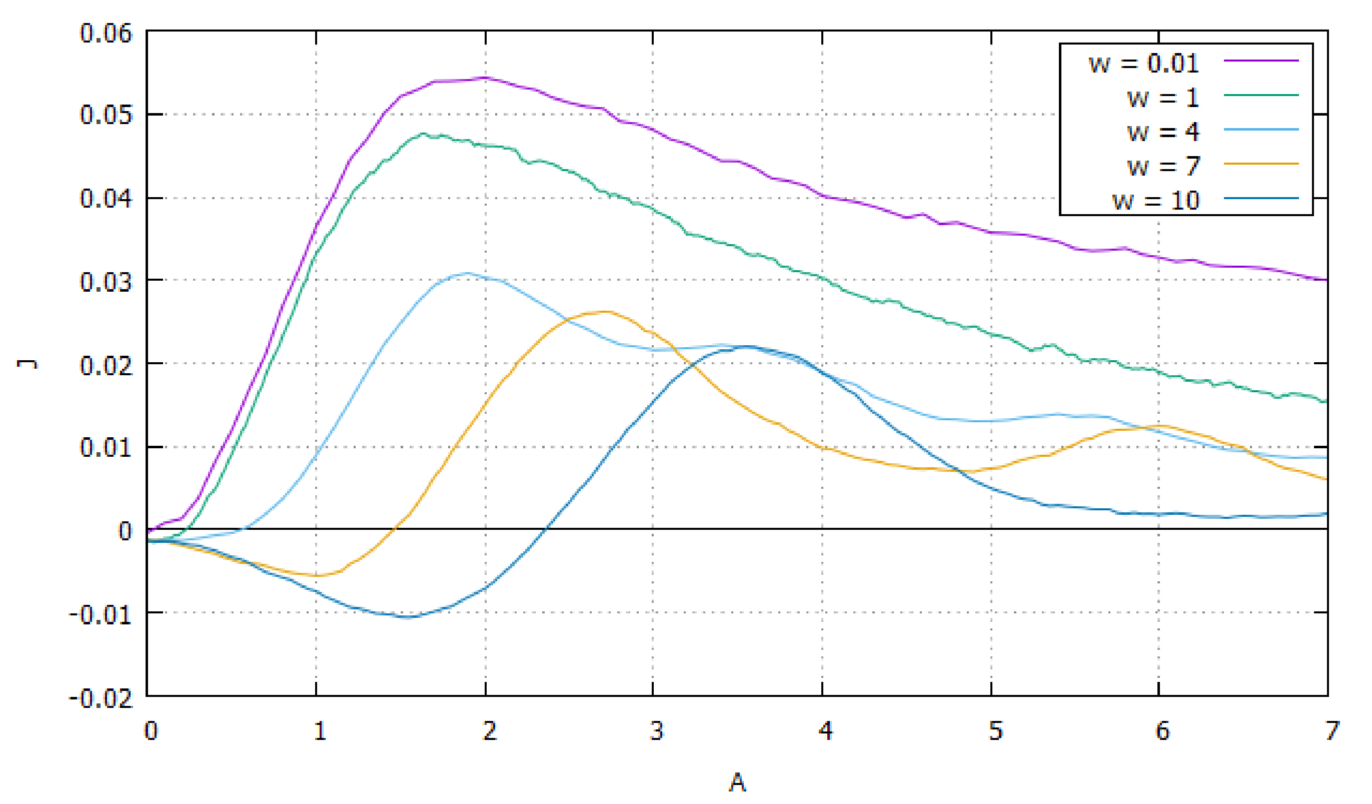


w = 0.01
w = 1
w = 2.5
w = 4
w = 7
0.018
0.016
0.014
0.012
0.01
0.008
0.006
0.004
0.002
0
-0.002
-0.004
J
0
0.05
0.1
0.15
0.2
0.25
0.3
D



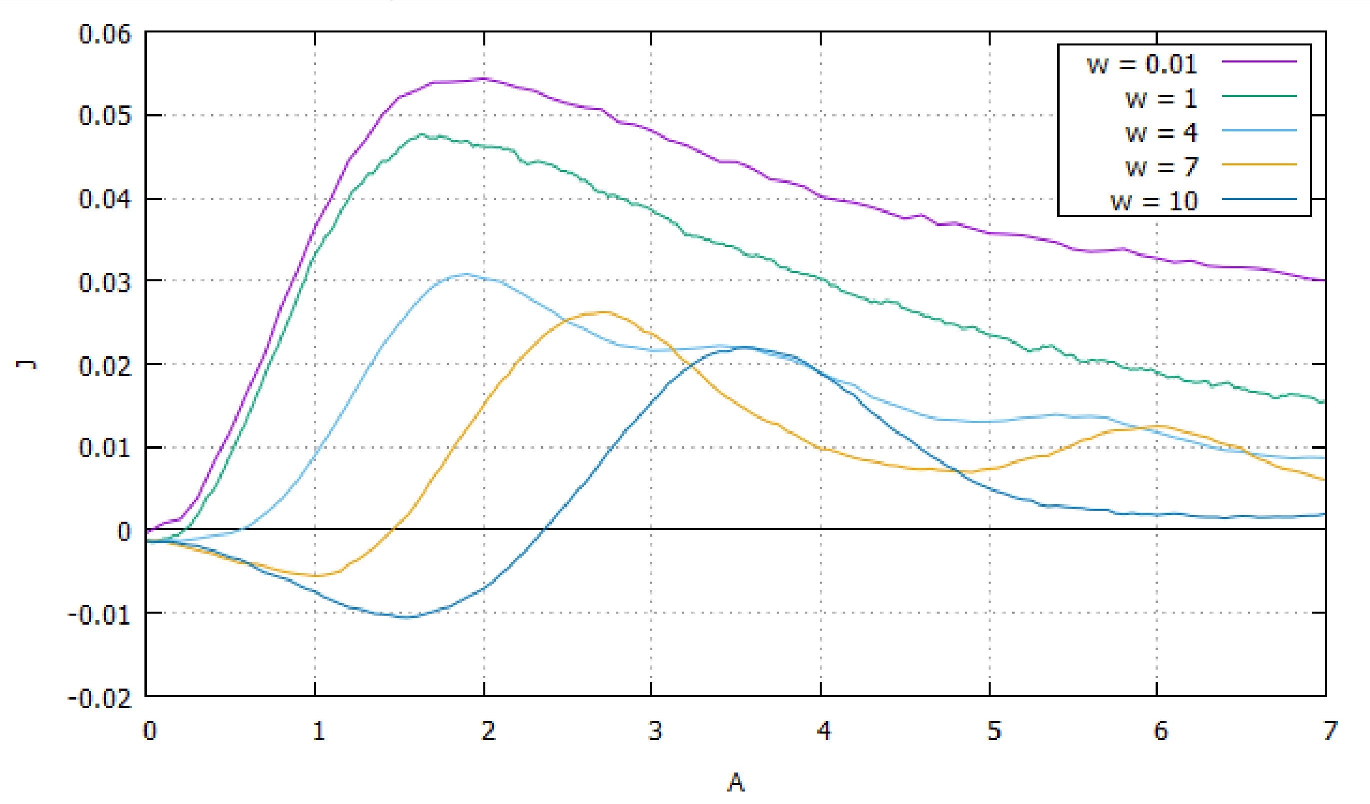
a)
0.015
0.01
0.005
0
$\bar{J}$
0
0.05
0.1
0.15
0.2
0.25
0.3
D

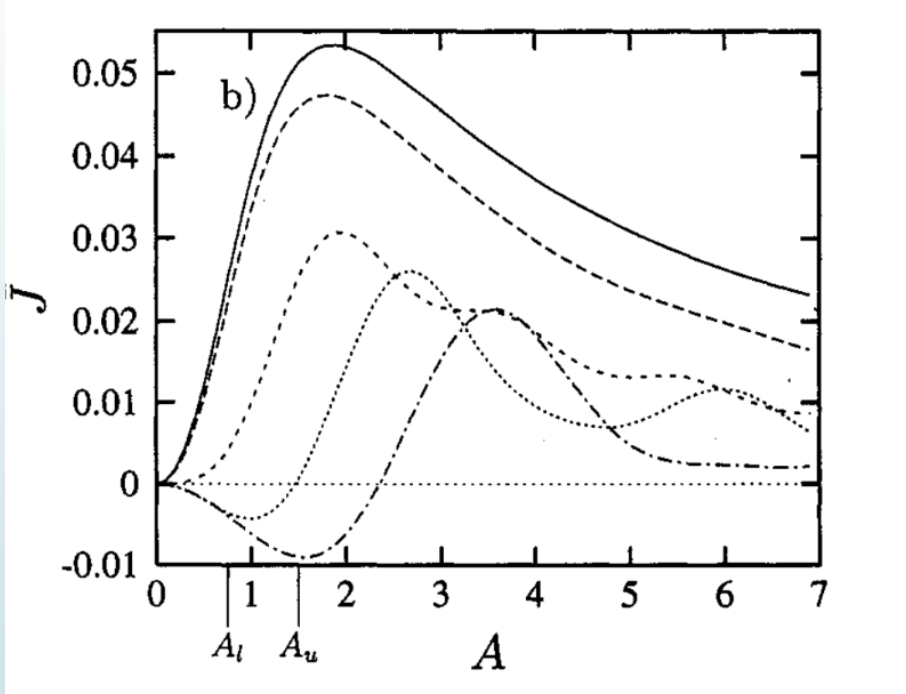
RESULTADOS



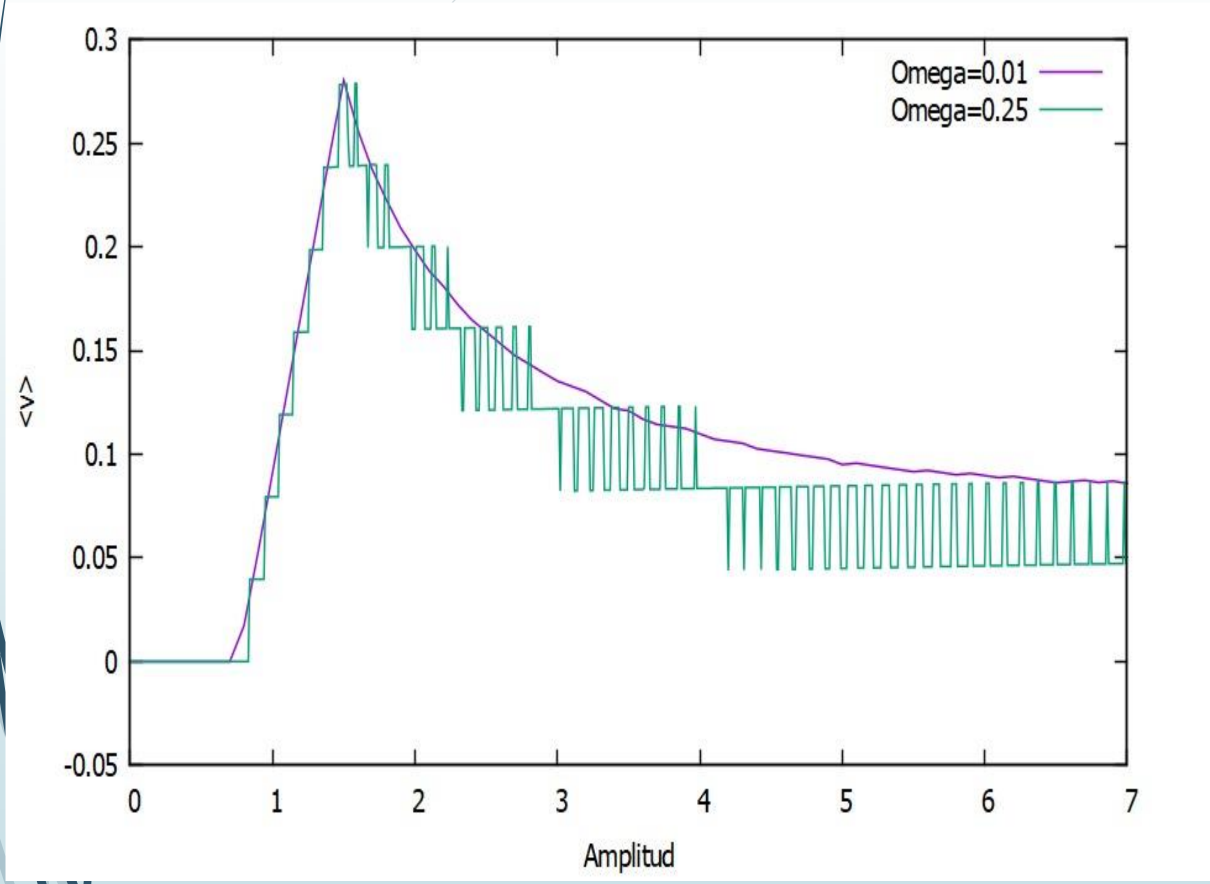
- Fijada amplitud D en 0.1
- Régimen adiabático w =0
- A partir de cierta T se supera la barrera de potencial
- Algunas frecuencias a T bajas tienen corriente negativa.

RESULTADOS





RESULTADOS



- Fijamos T = 0 (D = 0)
- Régimen adiabático w = 0
- Se forma una escalera del diablo para omega 0,25
- El Rocked Ratchet sin ruido tiende a formar caos.

RESULTADOS