Física Teórica 3
Serie 11: Ecuaciones maestras.

1^{er} Cuatrimestre de 2013

1. Problemas curriculares

Problema 1: Langevin postuló un método para tratar el movimiento difusivo en una dimensión introduciendo un ruido estocástico $\xi(t)$, el cual imita el efecto de las colisiones. Se asume que este ruido fluctúa en tiempos microscópicamente pequeños y que no depende de la posición x de la partícula. Además se postula que $< \xi(t) >= 0$, es decir que las colisiones no conspiran para dar una componente neta para la velocidad. El ruido se modela asumiendo que $< \xi(t)\xi(t') >= \Gamma\delta(t-t')$, siendo Γ una constante. La ecuación que describe el problema es entonces

$$\frac{dx(t)}{dt} = \xi(t).$$

a) Estime el valor medio $< x^2 >$.

b) Muestre que la distribución de probabilidades es una gaussiana.

c) Calcule $< \Delta x^2 >$ y muestre que la velocidad típica $v \simeq \Delta x/\Delta t$ diverge para tiempos cortos.

d) Para corregir la divergencia del inciso anterior Langevin propuso modificar su ecuación por

$$\frac{dv(t)}{dt} = \xi(t) - \gamma v,$$

siendo $-\gamma v$ la fuerza friccional sobre la partícula que se analiza debido al fluído. Calcule $< v(t) >$ y $< v^2(t) >$. Muestre que los coeficientes γ y Γ no son independientes y halle su relación explícita, asumiendo equilibrio térmico.

e) Lea el enunciado del teorema de fluctuación-disipación en algún libro de texto de la materia e interprete el resultado obtenido en d).

Problema 2: Considere una partícula browniana de masa m unida a un resorte de constante elástica k y que se mueve en la recta.

a) Escriba la ecuación de Langevin correspondiente a esta situación.

b) Halle la condición para que este proceso sea estacionario.

c) Calcule la función de correlación $< v(t)v(t')_\xi >_T$.

d) Calcule la densidad espectral $S_{v,v}(\omega)$ para dicha partícula.

Problema 3: Considere una red unidimensional con partículas de una sola especie A, las cuales pueden moverse hacia la izquierda o derecha con probabilidad $1/2$, de tal forma que cuando dos partículas coinciden en un mismo sitio se tiene $A + A \rightarrow A$ (coalescencia). Sea $V_n(t)$ la densidad de vacíos entre partículas de largo n. Asumiendo la condición $V_n(0) = \delta_{n,0}$, es decir que todos los sitios están inicialmente ocupados.

a) Demuestre que dicha densidad viene descripta por la siguiente ecuación maestra

$$\frac{dV_n(t)}{dt} = V_{n+1}(t) + V_{n-1}(t) - 2V_n(t)$$

c) Postule una solución de la forma $V_n(t) = I_n(t)e^{-t}$ y halle $I_n(t)$, asumiendo que $V_{-1}(0) = 0$. Obtenga la distribución para $t \to \infty$.

d) Considere el límite continuo $n \to x$ y muestre que la ecuación maestra descripta anteriormente se convierte en la ecuación de difusión

$$\frac{\partial V(x,t)}{\partial t} = D\frac{\partial^2 V(x,t)}{\partial^2 x}$$

Halle la solución general de esta ecuación mediante un escaleo apropiado de las variables.

e) Estime el valor medio $< x^2 >$ por argumentos de análisis dimensional y compruebe explícitamente la validez de la solución (sugerencia: utilize los resultados obtenidos en el problema 1).

Problema 4: Durante emisión termoiónica los electrones cruzan la superficie de un metal o semiconductor. Asumiendo que las emisiones son estadísticamente independientes y que la probabilidad de emisión de un electrón en un intervalo infinitesimal de tiempo dt es λdt, siendo λ una constante, determine la probabilidad de emisión de n electrones en un tiempo t.

Problema 5: El introducir funciones generatrices puede ser una herramienta muy útil. Para ilustrarlo considere la ecuación maestra del problema de la caminata al azar en una dimensión.

a) Muestre que la función generatriz $F(z) = \sum P_n(t)z^n$ genera los momentos

$$F(1,t) = 1$$

$$\frac{\partial F}{\partial z}|_{z=1} =< n >_t,$$

$$\frac{\partial^2 F}{\partial^2 z}|_{z=1} =< n^2 >_t - < n >_t^2 .$$

b) Compruebe que dicha función satisface la ecuación diferencial

$$\frac{\partial F}{\partial t} = \frac{(z-1)^2}{z}F.$$

c) Halle la solución general de la ecuación del ítem anterior y a partir de ello las probabilidades $P_n(t)$ y las funciones de correlación $< n(t) >$ y $< n^2(t) > - < n(t) >^2$.

Problema 6: Considere una red unidimensional con espaciado l que puede absorber dímeros (molécula compuesta por dos unidades a distancia fija l). Definimos E_m como la probabilidad de encontrar un intervalo con m sitios desocupados al menos. En particular E_1 es la densidad de estados vacíos y $\rho = 1 - E_1$ la densidad de estados ocupados.

a) Mostrar que la ecuación que describe este proceso es

$$\frac{dE_m(t)}{dt} = -(m-1)E_m(t) - 2E_m(t)$$

b) Postule una anzatz de la forma $E_m(t) = \Phi(t)e^{-(m-1)t}$ y halle la solución explícita, con la condición inicial $E_m(0) = 1$.

c) Calcule $E_1(\infty)$ y la fracción de estados ocupados $\rho = 1 - E_1(\infty)$.

Problema 7: Considere el análogo al problema anterior para polímeros formados por k moléculas.

a) Muestre que la ecuación que describe el proceso es

$$\frac{dE_m(t)}{dt} = -(m-k-1)E_m(t) - 2\sum_{j=1}^{k-1} E_{m+j}(t), \qquad k \leq m,$$

$$\frac{dE_m(t)}{dt} = -(k-m-1)E_m(t) - 2\sum_{j=1}^{m-1} E_{m+j}(t), \qquad m < k.$$

b) Utilizando un método análogo al del problema anterior, muestre que la solución de estas ecuaciones es

$$E_m(t) = \exp\Big(- (m-k+1)t - \sum \frac{1-e^{jt}}{j}\Big) \qquad k \leq m$$

c) Considere el límite $k \to \infty$, correspondiente al problema de estacionamiento irreversible de autos (porque tiene ese nombre?), y halle la solución para dicho caso.

2. Problemas opcionales

Problema 8: Considere dos urnas A y B, junto con tres bolas rojas y dos bolas blancas distribuídas en ellas de tal forma que hay dos bolas en la urna A y tres bolas en la urna B. Se intercambian dos bolas entre ambas urnas, de forma tal que el número de bolas permanece constante en cada urna, y se repite la acción sucesivamente.

a) Enumere las configuraciones posibles para este el problema.

b) Halle la matriz de transición Q y la probabilidad condicional $P_{1|1}(n, t_0; m, t)$ correspondiente.

c) Asumiendo que inicialmente se tiene $P_1(1, 0) = 1$ y $P(k, 0) = 0$ para $k = 2, 3$, siendo 1 la configuración correspondiente a dos bolas blancas en la urna B, calcule $P(k, t)$ para un tiempo t arbitrario.

d) Considere la realización $y(n) = n$. Halle las funciones de correlación $< y(t) >$ y $< y(0)y(t) >$ con las condiciones iniciales del ítem anterior.

Problema 9: Considere una caminata al azar asimétrica que tiene lugar en una red abierta con cuatro sitios. Las amplitudes de transición no nulas son $w_{1,2} = w_{4,3} = 1$, $w_{2,3} = w_{3,4} = 3/4$, $w_{2,1} = w_{3,2} = 1/4$.

a) Escriba la matriz de transición $W_{n,m}$ para este sistema y verifique que se cumple la condición de equilibrio detallado.

b) Muestre que en las condiciones de equilibrio detallado es posible definir una variable $\widetilde{P}_n(t)$ y una matriz de transición modificada $V_{n,m}(t)$ tal que la ecuación maestra que describe al sistema tiene la forma

$$\frac{d\widetilde{P}_n(t)}{dt} = \sum_{n=1}^{N} \widetilde{P}_m V_{m,n}.$$

c) Halle explícitamente la matriz V correspondiente al problema, sus autovalores y la solución explícita de la ecuación del inciso anterior.

d) Halle $P(n,t)$ con la condición inicial $P(n,0) = \delta_{n,0}$.

e) Considere ahora una caminata al azar con amplitudes de transición $w_{1,2} = w_{2,3} = w_{3,4} = w_{4,1} = 3/4$, $w_{2,1} = w_{3,2} = w_{4,3} = w_{1,4} = 1/4$. Muestre que en este caso no se satisface la condición de equilibrio detallado.

Problema 10: Considere ahora una caminata al azar con cinco sitios, de forma tal que el quinto sitio absorbe completamente a la partícula. Las amplitudes de transición no nulas son $w_{1,2} = w_{1,3} = w_{1,4} = w_{1,5} = 1/4$, $w_{2,1} = w_{2,3} = w_{2,5} = w_{3,1} = w_{3,2} = w_{3,4} = w_4, 1 = w_{4,3} = w_{4,5} = w_{5,1} = w_{5,2} = w_{5,4} = 1/3$.

a) Halle la matriz de transición M, sus autovalores y sus autovectores por izquierda y por derecha.

b) Halle el tiempo medio de paso, asumiendo que a $t = 0$ el caminante se hallaba en el sitio $n = 3$.

Problema 11: Considere ahora N bolas distinguibles, las cuales se distribuyen inicialmente en dos urnas A y B. Se selecciona luego al azar una de ellas y se coloca en la otra urna, y se repite este paso sucesivamente.

a) Halle la matriz de transición correspondiente a este proceso.

b) Muestre que la solución estacionaria es una distribución binomial.

Problema 12: Polya, autor del libro Çomo se resuelve?", un libro lleno de juegos de ingenio para estudiantes secundarios y universitarios iniciales, se hizo la siguiente pregunta: dada una partícula que efectúa una caminata al azar en una red D dimensional, siempre volverá a su posición inicial? Para resolverlo es necesario calcular la probabilidad de escape del origen. Considere los siguientes pasos:

a) Demuestre que en una caminata al azar unidimensional la probabilidad de hallarse en el punto l luego de t pasos viene dada por la fórmula integral

$$P_t(l) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \cos^t(\varphi) e^{i\varphi} d\varphi.$$

b) Generalize la fórmula del inciso anterior para dos y tres dimensiones.

c) Definiendo los polinomios

$$u_t(z,l) = \sum_{t=0}^{\infty} P_t(l) z^t, \qquad F(z) = \sum_{t=0}^{\infty} f_j z^j$$

siendo f_j la probabilidad que la partícula vuelva al origen por primera vez en el j-ésimo paso, demuestre que

$$F(z) = 1 - \frac{1}{u(z,0)}.$$

Que significado tiene $F(1)$?

d) En base a lo hallado en el inciso anterior halle la condición necesaria y suficiente para que la partícula tenga una probabilidad de escape no nula. Demuestre que en una y dos dimensiones la respuesta a la pregunta de Polya es afirmativa, mientras que en tres dimensiones no lo es.