

SISTEMAS DINÂMICOS GOVERNADOS POR RUÍDOS GAUSSIANOS BRANCO E COLORIDO

Este exemplar corresponde à redação final da tese devidamente corrigida e defendida por Antonio Justino Ruas Madureira e aprovada pela comissão Julgadora.

Campinas, 14 de maio de 1996.



Prof. Dr. Vincent Buonomano
Orientador

Dissertação apresentada ao Instituto de Matemática Estatística e Ciência da Computação, UNICAMP, como requisito parcial para a obtenção do título de doutor em Matemática Aplicada - Física-Matemática.

UNICAMP
BIBLIOTECA CENTRAL

UNIDADE	78C
N.º CHAMADA:	T UNICAMP
	M 2672
V	E
	27978
P.	667/96
C	☐ D ☒
PREÇO	R\$ 11,00
DATA	05/07/96
N.º CPD	01.00089812-8

**FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA
BIBLIOTECA DO IMECC DA UNICAMP**

Madureira, Antonio Justino Ruas

M267s Sistemas dinâmicos governados por ruídos gaussianos branco e colorido / Antonio Justino Ruas Madureira -- Campinas, [S.P. :s.n.], 1996.

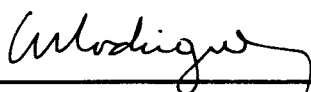
Orientador : Vincent Buonomano

Dissertação (doutorado) - Universidade Estadual de Campinas, Instituto de Matemática, Estatística e Ciência da Computação.

1. Processo estocástico. 2. Difusão. 3. Modelos não lineares (Estatística). 4. Fokker-Planck, Equação de. I. Buonomano, Vincent. II. Universidade Estadual de Campinas. Instituto de Matemática, Estatística e Ciência da Computação. III. Título.

Tese defendida e aprovada em, 14 de maio de 1996

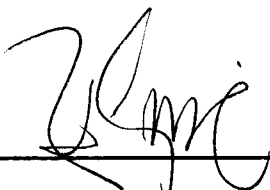
Pela Banca Examinadora composta pelos Profs. Drs.



Prof(a) . Dr(a) . WALDYR ALVES RODRIGUES JÚNIOR



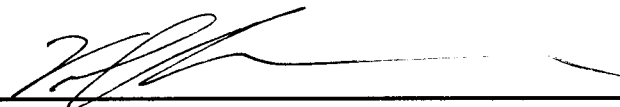
Prof(a) . Dr(a) . MAURO SÉRGIO DE FREITAS MARQUES



Prof(a) . Dr(a) . ROBERTO LUZZI



Prof(a) . Dr(a) . JOSÉ GALVÃO DE PISÁPIA RAMOS



Prof(a) . Dr(a) . VINCENT BUONOMANO

Universidade de Brasília
Instituto de Ciências Exatas
Departamento de Matemática

Sistemas Dinâmicos Governados por Ruídos Gaussianos Branco e Colorido

por
Antonio Justino Ruas Madureira

Brasília
1996

Agradecimento

Agradeço ao Prof. Dr. Vincent Buonomano e ao Prof. Dr. Peter Hänggi pela orientação.

Em especial agradeço ao Prof. Dr. Waldyr Alves Rodrigues Jr. pelo apoio e incentivo que me tem dado durante toda a minha vida acadêmica.

Agradeço ao Prof. Dr. Alcebiades Rigas pelo fundamental apoio e incentivo para que eu fosse trabalhar com o Prof. Hänggi, na Alemanha.

Também agradeço ao Departamento de Matemática Aplicada, e em especial, ao Grupo de Física-Matemática.

Meus agradecimentos aos Professores e colegas do Instituto de Física da Universidade de Augsburg, Alemanha.

Agradeço ao DAAD pelo curso de Alemão e pelo suporte burocrático durante minha estadia na Alemanha.

Agradeço ao João Paulo por ter cuidado de minhas plantas, móveis, livros, discos, etc. Aos meus demais amigos, meus agradecimentos pela companhia e paciência durante este longo período de doutorado.

Enfim, agradeço à FAPESP e ao CNPq, pelo suporte financeiro sem o qual este trabalho não poderia ter sido realizado.

Resumo

Estudamos o escape, governado por um ruído térmico, através de uma barreira flutuante de potencial, em um duplo poço de potencial simétrico. Consideramos o caso em que as flutuações da barreira são dadas por um ruído gaussiano colorido não correlacionado ao ruído térmico (branco), como também no caso em que ambos os ruídos são brancos e correlacionados, o que pode provocar uma grande supressão na taxa de transição. Estudamos também as propriedades estacionárias da intensidade do campo de um laser de corante com ruído quântico e de bombeamento. Precisas soluções numéricas são comparadas com nossas aproximações e com outras aproximações encontradas na literatura. Nossas aproximações concordam muito bem com os resultados numéricos num largo intervalo no espaço dos parâmetros.

Abstract

We study thermally driven escape, over a fluctuating potential barrier, in a symmetrical double well. We consider the case where the barrier fluctuations are given by a colored gaussian noise not correlated with thermal noise (white), as well as the case when both noises are white and correlated. The latter can provoke a giant suppression of the transition rate. We study also the stationary properties of field intensity of a dye laser with pump and quantum noise. Precise numerical solutions are compared with our approximations and with other approximations found in literature. Our approximations agree very well with numerical results in a wide range in the parameter space.

Sumário

Introdução	1
1 Preliminares	4
1.1 Processo Estocástico	4
1.1.1 Variável Aleatória	4
1.1.2 Densidade de Probabilidade	6
1.1.3 Densidade de Probabilidade Conjunta e Condicional	7
1.1.4 Esperança, Correlação e Variáveis Gaussianas	7
1.2 Processo de Markov	9
1.3 Equação de Langevin	9
1.3.1 Expansão de Kramers-Moyal	11
2 Equação Master para Ruídos Gaussianos	13
2.1 Método da Derivada Funcional	13
2.1.1 Aproximação “Small- τ ”	16
2.2 Método dos Cumulantes	17
2.2.1 “The Best Fokker-Planck Equation”	20
3 Aproximação Markoviana da Equação de Langevin	22
4 Escape de Poço de Potencial Flutuante	27
4.1 Escape de uma Barreira de Potencial Fixa	30

4.2	Escape de um Poço de Potencial Flutuante	32
4.2.1	Flutuações com Ruídos Brancos Não Correlacionados	33
4.2.2	Flutuações com Ruídos Brancos Correlacionados	36
4.2.3	Flutuações com Ruído Colorido e Branco	40
5	Laser de Corante com Ruído Quântico e de Bombeamento	50
5.1	Densidade de Probabilidade Estacionária	51
	Conclusão	58
	Apêndice	60
	Bibliografia	61

Introdução

O estudo de sistemas dinâmicos perturbados por fontes de ruídos é de uma grande importância para o entendimento detalhado dos coeficientes de transporte e a caracterização de fenômenos não lineares. Neste contexto, os efeitos de fontes de ruído não brancos (i.e., ruído colorido) têm atraído um grande interesse nos últimos anos [1, 2]. O objetivo aqui é o estudo de uma classe de sistemas estocásticos que são caracterizados pelo fato de que duas fontes de ruídos atuam simultaneamente sobre o sistema dinâmico [3, 4, 5]. Assumiremos que - além do ruído térmico - um ruído colorido adicional (sendo intrínscico ou de origem externa) perturba o sistema dinâmico. Isto torna a análise teórica bastante complexa devido à natureza não markoviana do problema. Devido a esse caráter não markoviano, a maioria dos autores tem restringido a investigação da dinâmica ao caso envolvendo uma simples fonte de ruído colorido, negligenciando a influência de um ruído branco adicional (possivelmente forte), ou considerando ambos, mas o primeiro como "pink", i.e., fracamente correlacionado no tempo, com fraca memória [6, 7, 8, 9, 10]. Como exemplo do primeiro caso podemos citar "Unified Colored Noise Approximation" (UCNA) [11, 12] e a teoria de UCNA generalizada [13], para o segundo caso citamos a aproximação obtida através do método de derivadas funcionais [6, 14] e aquela obtida através do método dos cumulantes ("The Best Fokker-Planck Equation" - BFPE) [7, 15, 16]. Estas duas últimas serão apresentadas com certo detalhe neste trabalho. Com o objetivo de construir uma nova aproximação que cobrisse um mais largo intervalo de valores dos parâmetros, ou seja, desde pequenos, intermediários, até grandes valores dos parâmetros, é que surgiu o projeto deste trabalho.

Em nosso estudo consideramos sistemas dinâmicos governados por dois ruídos gaussianos: um branco e um colorido, exponencialmente correlacionado (Ornstein-Uhlenbeck [3, 5]). Obtemos aproximações markovianas para processo original, transformando-

o em um outro processo somente com fontes de ruídos gaussianos brancos [3, 4, 5]. Para tal, introduzimos um processo não linear auxiliar $\dot{u}$, o que consideramos como nossa principal descoberta. Com isso, nosso processo unidimensional não markoviano, $X(t)$, passa a ser descrito por um processo bidimensional markoviano $(X(t), \dot{u}(t))$. Explorando propriedades dessa variável auxiliar, conseguimos então obter um novo processo, agora markoviano, equivalente ao processo original para longos tempos de observação, ou seja, válido para um regime próximo do estacionário. Com este esquema genérico em mãos, estudamos dois importantes e interessantes sistemas físicos, a saber, o duplo poço de potencial simétrico com uma altura da barreira flutuando estocasticamente através de um ruído gaussiano exponencialmente correlacionado no tempo [3, 4, 17, 18, 19, 20, 21]; o outro é um laser de corante com ruído quântico (que tem como origem as emissões espontâneas dentro da cavidade do laser) e um ruído colorido de bombeamento (o parâmetro de bombeamento tem flutuações gaussianas exponencialmente correlacionadas) [5, 22, 23, 24, 25].

Ademais, investigamos o tempo médio de escape no já citado duplo poço de potencial simétrico, com a altura da barreira flutuando estocasticamente através de um ruído gaussiano branco, mas com uma correlação diferente de zero entre este e o ruído térmico [26]. Observamos que a taxa de transição entre os estados estáveis pode cair fortemente, por exemplo para seis ordens de magnitude menor do que a taxa correspondente ao caso em que a correlação é nula.

Resultados numéricos precisos, obtidos através do método "Matrix Continued Fraction" (MCF), são comparados com os resultados de nossas aproximações, bem como com outras aproximações encontradas na literatura e citadas acima.

Organizamos a exposição deste trabalho de seguinte maneira: no primeiro capítulo, apresentamos os conceitos básicos da teoria de probabilidade e processos estocásticos; no segundo capítulo, apresentamos o método das derivadas funcionais e o método dos cumulantes, ou seja, a equação da evolução da densidade de probabilidade estacionária e as equações de Fokker-Planck aproximadas; nossas aproximações são apresentadas, em termos gerais, no terceiro capítulo; nos capítulos restantes, nossas aproximações, assim como aquelas descritas no segundo capítulo, serão empregadas e comparadas no estudo de dois sistemas físicos, a saber, escape através de uma barreira

flutuante (quarto capítulo) e laser de corante com ruído quântico e de bombeamento (quinto capítulo).

Capítulo 1

Preliminares

Daremos aqui os preliminares matemáticos, i.e., a teoria de processos estocásticos necessária à compreensão dos capítulos seguintes deste trabalho. Não discutiremos a teoria na situação mais geral; faremos uma breve revisão de alguns resultados da teoria de processos estocásticos, a saber: 1.1) Processo Estocástico [27, 28], 1.2) Processo de Markov [27, 28, 29], 1.3) Equação de Langevin[28].

1.1 Processo Estocástico

Antes de definir formalmente um processo estocástico, apresentaremos alguns conceitos básicos de probabilidade, principalmente para desenvolvermos a notação a ser usada.

1.1.1 Variável Aleatória

Seja Ω um conjunto e $\mathcal{F}$ uma σ -álgebra de subconjuntos de Ω , i.e, $\mathcal{F}$ satisfaz:

- i) Se $A_n \in \mathcal{F}$ para $n = 1, 2, \dots$, então $\sum_n \cup_n A_n \in \mathcal{F}$, onde $\cup_n A_n$ é a união dos A_n , $n = 1, 2, \dots$;
- ii) Se $A \in \mathcal{F}$ então o seu complementar $A^c \in \mathcal{F}$;
- iii) $\emptyset \in \mathcal{F}$, onde $\emptyset$ denota o conjunto vazio.

A σ -álgebra de Borel $\mathcal{B}$ em $\mathbb{R}$ é a σ -álgebra gerada por todas as bolas(intervalos) abertos em $\mathbb{R}$.

Um elemento A de uma σ -álgebra $\mathcal{F}$ é denominado um conjunto mensurável, o qual chamaremos evento.

Medida é uma função μ não negativa, definida em uma σ -álgebra $\mathcal{F}$ tal que:

i) $\mu(\emptyset) = 0$;

ii) Se A_n é uma sequência de subconjuntos disjuntos em $\mathcal{F}$, então $\mu(\cup_n A_n) = \sum_n \mu(A_n)$, $n = 1, 2, \dots$.

Uma medida P_r definida em $\mathcal{F}$ é denominada medida de probabilidade se $P_r(\Omega) = 1$. O número $P_r(A)$, $A \in \mathcal{F}$, é chamado a probabilidade do evento A . Um conjunto Ω , junto com uma σ -álgebra $\mathcal{F}$ e uma medida de probabilidade P_r em $\mathcal{F}$, constitui o que chamaremos de um espaço de probabilidade, e denotamos por $(\Omega, \mathcal{F}, P_r)$ ou $\Omega(\mathcal{F}, P_r)$ ou simplesmente (Ω, P_r) . Com esses conceitos em mente, definiremos variável aleatória e então processo estocástico.

Definição: Uma variável aleatória é uma aplicação X tal que

$$X : \Omega \longrightarrow \mathbb{R},$$

e

$$X^{-1}(B) \in \mathcal{F}, \quad \forall B \in \mathcal{B}$$

onde $(\Omega, \mathcal{F}, P_r)$ é o espaço de probabilidade e $\mathcal{B}$ a σ -álgebra de Borel em $\mathbb{R}$.

Definiremos agora um processo estocástico.

Definição: Seja D um subconjunto conexo dos números reais, e $(\Omega, \mathcal{F}, P_r)$ um espaço de probabilidade. Um processo estocástico $X(t)$ é uma função de duas variáveis:

$$\begin{aligned} X : \quad D \times \Omega &\longrightarrow \mathbb{R} \\ (t, \omega) &\longrightarrow X(t, \omega), \end{aligned}$$

onde $t \in D$ e $\omega \in \Omega$, e tal que para cada t fixo,

$$X(t) : \Omega \longrightarrow \mathbb{R},$$

definida por

$$X(t, \omega) = x ,$$

é uma variável aleatória. Isto é, um processo estocástico é uma família de variáveis aleatórias indexadas pelo conjunto D .

Fixando um evento elementar $\omega \in \Omega$, obtemos uma função

$$X(\omega) : D \longrightarrow \mathbb{R},$$

que é denominada trajetória ou realização do processo.

No que se segue consideraremos $X(t)$ contínua em $D \equiv \mathbb{R}$.

1.1.2 Densidade de Probabilidade

Dado um número real x , consideraremos o evento

$$I_{X(t)} = \{\omega : X(t, \omega) \leq x\},$$

para t fixo. Sua probabilidade $P_r(I_{X(t)}) = P_{X(t)}$ depende de x e é denominada a função distribuição da variável aleatória $X(t)$, a qual é definida por

$$\begin{aligned} P_{X(t)} : \quad \mathbb{R} &\longrightarrow \mathbb{R}_+, \\ x &\longmapsto P_{X(t)}(x), \end{aligned}$$

para qualquer $x \in \mathbb{R}$ e $\omega \in \Omega$. $P_{X(t)}(x)$ pode ser escrita na forma integral

$$P_{X(t)}(x) = \int P_r(\omega) \Theta(x - X(t, \omega)) d\omega, \quad (1.1)$$

onde Θ é a função de Heaviside.

Se a função $P_{X(t)}$ for absolutamente contínua e diferenciável para todo x , então sua derivada

$$\frac{d}{dx} P_{X(t)} = p(x), \quad (1.2)$$

existe (o que assumiremos daqui por diante), e é denominada densidade de probabilidade. Derivando a Eq.(1.1) em relação a x obtemos a densidade de probabilidade

em termos da função delta de Dirac δ

$$\begin{aligned} p(x) &= \frac{dP_{X(t)}}{dx} \\ &= \int d\omega P_r(\omega) \frac{d}{dx} \Theta(x - X(t, \omega)) \\ &= \langle \delta(X(t) - x) \rangle. \end{aligned} \quad (1.3)$$

A partir da Eq.(1.2) vemos que

$$dP_{X(t)} = p(x)dx.$$

isto é, $p(x)dx$ é a probabilidade de encontrar o valor da variável aleatória X no intervalo $(x, x + dx)$, pois

$$dP_{X(t)} = P_r(\omega : X(t, \omega) \leq x + dx) - P_r(\omega : X(t, \omega) \leq x).$$

1.1.3 Densidade de Probabilidade Conjunta e Condicional

Podemos estender o conceito de densidade de probabilidade para calcular a probabilidade em que as variáveis aleatórias $X(t_1), \dots, X(t_n)$ estejam no intervalo $(x_1, x_1 + dx_1); \dots; (x_n, x_n + dx_n)$, no tempo $t_1, \dots, t_n$, respectivamente. Denotamos tal probabilidade por $p(x_1 t_1, \dots, x_n t_n) dx_1 \dots dx_n$, e denominamos $p(x_1 t_1, \dots, x_n t_n)$ a densidade de probabilidade conjunta.

A densidade de probabilidade condicional que $X(t_{n+1})$ assumia valor no intervalo $(x_{n+1}, x_{n+1} + dx_{n+1})$ no tempo t_{n+1} , dado que $X(t_1)$ assumiu o valor $x_1, \dots, X(t_n)$ assumiu o valor x_n , nos tempos $t_1, \dots, t_n$, respectivamente, é definida por

$$p(x_1 t_1, \dots, x_n t_n / x_{n+1} t_{n+1}) = \frac{p(x_1 t_1, \dots, x_n t_n, x_{n+1} t_{n+1})}{p(x_1 t_1, \dots, x_n t_n)}, \quad (1.4)$$

desde que $p(x_1 t_1, \dots, x_n t_n) \neq 0$.

1.1.4 Esperança, Correlação e Variáveis Gaussianas

Muito importante na teoria de probabilidade e em suas aplicações são certos parâmetros que são obtidos de acordo com regras específicas, através da densidade de probabilidade. Eles podem descrever quantitativamente as variáveis aleatórias.

Seja $X_1, \dots, X_r$, r variáveis aleatórias. Denotamos a esperança ou valor médio ou simplesmente média da variável X_i por $\langle X_i \rangle$ e a definimos por

$$\langle X_i \rangle = \int x_i p(x_i) dx_i.$$

Em termos gerais a esperança da variável aleatória $f(X_1, \dots, X_r)$ é dada por

$$\langle f(X_1, \dots, X_r) \rangle = \int f(x_1, \dots, x_r) p(x_1, \dots, x_r) dx_1 \dots dx_r,$$

se a integral à direita existe. Se duas variáveis aleatórias, digamos X_i e X_k , são independentes, a sua probabilidade conjunta $p(x_i, x_k)$ se desacopla, i.e.,

$$p(x_i, x_k) = p(x_i) p(x_k),$$

e a correlação entre elas, definida por $\langle (X_i - \langle X_i \rangle)(X_k - \langle X_k \rangle) \rangle$, se anula.

De fundamental importância neste trabalho são as variáveis aleatórias gaussianas, as quais são determinadas conhecendo apenas os seus valores médios e as correlações entre elas. As variáveis aleatórias $X_1, \dots, X_r$ são chamadas gaussianas se a sua probabilidade conjunta for dada por

$$p(x_1, \dots, x_r) = (2\pi)^{-r/2} (Det \sigma_{jk})^{-1/2} \exp \left[-\frac{1}{2} \sum_{j,k} (\sigma^{-1})_{jk} (x_j - a_j)(x_k - a_k) \right],$$

onde a_j é o valor médio de X_j e σ_{jk} a correlação entre X_j e X_k , i.e.,

$$a_j = \langle X_j \rangle$$

$$\sigma_{jk} = \langle (X_i - \langle X_i \rangle)(X_k - \langle X_k \rangle) \rangle.$$

A matriz $\sigma_{jk} = \sigma_{kj}$ é assumida ser positiva definida. Então a matriz inversa $(\sigma^{-1})_{jk} = (\sigma^{-1})_{kj}$, sua raiz quadrada $(\sigma^{1/2})_{jk} = (\sigma^{1/2})_{kj}$, e a sua raiz quadrada inversa $(\sigma^{-1/2})_{jk} = (\sigma^{-1/2})_{kj}$ existem. Definindo novas variáveis aleatórias gaussianas

$$Y_j = X_j - a_j,$$

pode-se mostrar que os momentos de ordem r , $\langle Y_1 \dots Y_r \rangle$, se decompõem em produtos de momentos de ordem 2, com momentos de ordem $r - 2$, i.e.,

$$\langle Y_1 \dots Y_r \rangle = \sum_{k=2}^r \langle Y_1 Y_k \rangle \langle \hat{Y}_1 \dots \hat{Y}_k \dots Y_r \rangle, \quad (1.5)$$

onde o acento circunflexo em $\hat{Y}_k$ significa que esta variável está ausente no produto $\hat{Y}_1 \dots \hat{Y}_k \dots Y_r$. Com isto podemos facilmente ver que os momentos de ordem ímpar de variáveis aleatórias gaussianas com médias nulas são nulos.

1.2 Processo de Markov

Um processo estocástico $X(t)$ é chamado um processo de Markov quando

$$p(x_1 t_1, \dots, x_n t_n / x_{n+1} t_{n+1}) = p(x_n t_n / x_{n+1} t_{n+1}), \quad (1.6)$$

onde $t_1 < t_2 < \dots < t_n < t_{n+1}$, para todo $n = 2, 3, \dots$.

Em outras palavras, isto significa que a probabilidade de $X(t_{n+1})$ assumir valor no intervalo $(x_{n+1}, x_{n+1} + dx_{n+1})$ em t_{n+1} , dado que em t_n , $X(t_n)$ tinha valor exato x_n , não depende do conhecimento do comportamento em tempos anteriores $t < t_n$. O processo de Markov $X(t)$ é dito não ter memória.

Usando as Eqs.(1.4) e (1.6) podemos mostrar que

$$\begin{aligned} p(x_1 t_1, \dots, x_n t_n) &= p(x_{n-1} t_{n-1} / x_n t_n) p(x_{n-2} t_{n-2} / x_{n-1} t_{n-1}) \\ &\dots p(x_1 t_1 / x_2 t_2) p(x_1 t_1). \end{aligned} \quad (1.7)$$

Para um processo de Markov as infinitas hierarquias das densidade de probabilidades, $p(x_1 t_1)$, $p(x_1 t_1, x_2 t_2)$, $p(x_1 t_1, x_2 t_2, x_3 t_3)$, ..., para todo t_i , i.e., a completa informação a respeito do processo, está contido em $p(x_1 t_1, x_2 t_2)$. Pode-se mostrar também que se um processo é markoviano, então a densidade probabilidade condicional satisfaz a equação de Chapman-Kolmogorov

$$p(x_1 t_1 / x_3 t_3) = \int p(x_1 t_1 / x_2 t_2) p(x_2 t_2 / x_3 t_3) dx_2. \quad (1.8)$$

1.3 Equação de Langevin

Uma completa informação sobre um processo estocástico pode ser tanto dado pelas infinitas hierarquias das densidade de probabilidade, como exposta na

seção (1.2), como também através da equação diferencial (estocástica) que descreve a evolução temporal do próprio processo $X(t)$. A usual maneira de definir a evolução do processo é através de uma equação diferencial (ou um sistema acoplado de equações) de primeira ordem em tempo, a qual contém variáveis estocásticas (ruídos),

$$\dot{X} = \mathcal{L}(X, \Gamma(t)) . \quad (1.9)$$

O ponto sobre a variável X , em $\dot{X}$, denota derivada em relação a t . $\mathcal{L}(X, \Gamma(t))$ é em geral uma função não linear de seus argumentos, e $\Gamma(t)$ é um processo estocástico (ruído) com estatística conhecida. Uma interessante situação aparece, e será o tema deste trabalho, é quando $\mathcal{L}(X, \Gamma(t))$ é linear em $\Gamma(t)$, i.e., (multidimensional)

$$\dot{X}_i(t) = f_i(\mathbf{X}(t)) + g_{ij}(\mathbf{X}(t)) \Gamma_j(t) , \quad (1.10)$$

onde $\mathbf{X}(t)$ significa $(X_1(t), X_2(t), \dots, X_N(t))$, e um somatório sobre índices repetido é subentendido (isto será assumido em todo este trabalho a menos que se diga o contrário), com $j = 1, \dots, M$. Esta equação é chamada equação de Langevin. Nela $f_i(\mathbf{X}(t), t)$ e $g_{ij}(\mathbf{X}(t), t)$ são funções determinísticas (as f_i 's, por exemplo, podem ser forças externas aplicadas ao sistema, o qual é representado pelo processo estocástico $\mathbf{X}(t)$).

Os fundamentos matemáticos para o caso que $\Gamma_i(t)$ é gaussiano, com correlação dada por uma função delta de Dirac (ruído branco), foi motivo para grandes discussões [3], e não serão apresentadas aqui. Assumiremos que a equação de Langevin, com ruído branco, será entendida no senso de Stratonovich (S) [28]. Para entender melhor isto, escrevemos a Eq.(1.10) na forma integral

$$X_i(t) = X_i(t_o) + \int_{t_o}^t f_i(\mathbf{X}(s), s) ds + \int_{t_o}^t g_{ij}(\mathbf{X}(s), s) dW_j(s) , \quad (1.11)$$

onde $dW_i(s) = \Gamma_i(t) dt$, ou seja, é um processo de Wiener [27, 28]. Substituindo a variável estocástica $X_i(t)$ recursivamente em (1.11), podemos eliminá-la e obter integrais da forma

$$A_S = \int_{t_o}^t \Phi(W(s), s) dW(s) , \quad (1.12)$$

a qual deve ser entendida no senso de Stratonovich (S), i.e.,

$$A_S = \lim_{\Delta \rightarrow 0} \sum_{i=0}^{n-1} \Phi \left(\frac{W(s_i) + W(s_{i+1})}{2}, \frac{s_i + s_{i+1}}{2} \right) [W(s_{i+1}) - W(s_i)] , \quad (1.13)$$

onde

$$\Delta = \max(s_{i+1} - s_i) \quad ; \quad t_o = s_o < s_1 < \dots < s_n = t .$$

Com isto, as regras usuais de integração e diferenciação, como o teorema fundamental do cálculo, integração por partes, substituição de variáveis, regra da cadeia, etc, ou seja, as regras formais do cálculo clássico são mantidas válidas.

Como as equações de Langevin em geral são não lineares, os valores médios, $\langle \rangle$, são muito difíceis de serem obtidos. Então tentaremos obter uma equação para a densidade de probabilidade.

1.3.1 Expansão de Kramers-Moyal

Segue da definição da densidade de probabilidade condicional, Eq.(1.4) na forma multidimensional, que a densidade de probabilidade $p(\mathbf{x}, t + \Delta t)$, no tempo $t + \Delta t$, e a densidade de probabilidade $p(\mathbf{x}, t)$ no tempo t estão conectadas por ($\Delta t \geq 0$)

$$p(\mathbf{x}, t + \Delta t) = \int p(\mathbf{x}' t / \mathbf{x} t + \Delta t) p(\mathbf{x}', t) d^N x' . \quad (1.14)$$

Pode-se mostrar [28] que a densidade de probabilidade $p(\mathbf{x}, t)$ satisfaz a equação

$$\frac{\partial p(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = \sum_{\nu=1}^{\infty} \frac{(-\partial)^\nu}{\partial x_{j_1} \dots \partial x_{j_\nu}} D_{j_1 \dots j_\nu}^{(\nu)}(\mathbf{x}, t) p(\mathbf{x}, t) , \quad (1.15)$$

onde

$$D_{j_1 \dots j_\nu}^{(\nu)}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{\nu!} \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \langle [X_{i_1}(t + \Delta t) - x_{i_1}] \dots [X_{i_\nu}(t + \Delta t) - x_{i_\nu}] \rangle \quad (1.16)$$

$$k = 1, 2, \dots, N .$$

Temos também que a densidade de probabilidade condicional $p(\mathbf{x}' t' / \mathbf{x} t)$ satisfaz a Eq.(1.15), a qual escrevemos em termo do operador de Kramers-Moyal $L_{KM}(\mathbf{x}, t)$

[28],

$$\frac{\partial p(\mathbf{x}' t' / \mathbf{x} t)}{\partial t} = L_{KM}(\mathbf{x}, t) p(\mathbf{x}' t' / \mathbf{x} t) , \quad (1.17)$$

$$L_{KM}(\mathbf{x}, t) = \sum_{\nu=1}^{\infty} \frac{(-\partial)^{\nu}}{\partial x_{j_1} \dots \partial x_{j_{\nu}}} D_{j_1 \dots j_{\nu}}^{(\nu)}(\mathbf{x}, t) . \quad (1.18)$$

A condição inicial para a densidade de probabilidade condicional é dada por

$$p(\mathbf{x}' t' / \mathbf{x} t') = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') . \quad (1.19)$$

Observamos que na Eq.(1.17) ocorrem operadores diferenciais com relação a $\mathbf{x}$ e t , i.e., com respeito ao valor da variável estocástica $\mathbf{X}(t)$ no tempo posterior $t > t'$. Esta equação é conhecida como equação Master posterior. Uma equação para $p(\mathbf{x}' t' / \mathbf{x} t')$, em termos de operadores diferenciais em relação a $\mathbf{x}'$ e t' , pode ser obtida e é chamada a equação Master anterior

$$\frac{\partial p(\mathbf{x}' t' / \mathbf{x} t)}{\partial t'} = -L_{KM}^{\dagger}(\mathbf{x}', t') p(\mathbf{x}' t' / \mathbf{x} t) , \quad (1.20)$$

com o operador de Kramers-Moyal anterior dado por

$$L_{KM}^{\dagger}(\mathbf{x}', t') = \sum_{\nu=1}^{\infty} D_{j_1 \dots j_{\nu}}^{(\nu)}(\mathbf{x}, t) \frac{(\partial)^{\nu}}{\partial x_{j_1} \dots \partial x_{j_{\nu}}} , \quad (1.21)$$

o qual é o adjunto do operador de Kramers-Moyal anterior L_{KM} .

A esperança $\langle \rangle$ na Eq.(1.15) denota média condicional, e é definida em termos da densidade de probabilidade condicional de $\mathbf{X}(t + \Delta t)$ assumir valor em $(\mathbf{x}, \mathbf{x} + d\mathbf{x})$, em $t + \Delta t$, dado que em t , $\mathbf{X}(t)$ assume valor exato $\mathbf{x}$.

Para processos não markovianos, a densidade de probabilidade condicional em (1.13) depende de valores da variável estocástica $\mathbf{X}(t')$ para todos os tempos anteriores $t' < t$. Portanto os coeficientes D^{ν} , na Eq.(1.14), dependem desses tempos se o processo for não markoviano. Se o processo for markoviano, D^{ν} não dependerá dos valores de $\mathbf{X}(t')$ nesses tempos anteriores. Isso aparecerá mais claro no Cap. 2 onde daremos a equação da evolução da densidade de probabilidade de processos estocásticos governados por ruídos gaussianos.

Capítulo 2

Equação Master para Ruídos

Gaussianos

Muitos métodos têm sido propostos para obter a evolução temporal de densidade de probabilidade (equação Master ou ainda equação de Kramer), para processos estocásticos governados por ruídos coloridos gaussianos. O método das derivadas funcionais [6, 14] e o método dos cumulantes [9] são os mais populares. Faremos aqui uma breve apresentação destes métodos, e das aproximações obtidas a partir destes, válidas no regime de fracos ruídos coloridos ("pink noise"). Essas teorias são conhecidas por "small- τ theory" [6, 14] and "the Best Fokker-Planck Equation (BFPE)" [7, 15, 16].

2.1 Método da Derivada Funcional

Seja $\mathbf{X}(t)$ um processo estocástico com evolução temporal dada pela Eq.(1.10), com ruídos $\Gamma_i(t)$ gaussianos (portanto caracterizado pelo seu valor médio e correlação), com média e correlação dados, respectivamente, por

$$\langle \Gamma_i(t) \rangle = 0 \quad (2.1)$$

$$\langle \Gamma_i(t) \Gamma_j(s) \rangle = F_{ij}(t, s) , \quad (2.2)$$

para todo t, s .

A equação de Langevin não linear, Eq.(1.10), pode ser transformada em uma equação

diferencial parcial linear. Para tanto introduzimos o funcional [2, 9, 8]

$$\begin{aligned}\rho(t) &= \delta(\mathbf{X}(t) - \mathbf{x}) \\ &\equiv \delta(X_1(t) - \mathbf{x}_1) \dots \delta(X_N(t) - \mathbf{x}_N) .\end{aligned}\quad (2.3)$$

Pode-se mostrar que $\rho(t)$ satisfaz a seguinte equação operador (ver Apêndice)

$$\dot{\rho}(t) = \left(-\frac{\partial}{\partial x_i} f_i(\mathbf{x}, t) - \frac{\partial}{\partial x_i} g_i(\mathbf{x}, t) \Gamma_j(t) \right) \rho(t) . \quad (2.4)$$

Para obtermos uma equação para $p(\mathbf{x}, t)$, tomamos o valor médio de ambos os membros da Eq.(2.4)

$$\frac{\partial p(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = -\frac{\partial f_i(\mathbf{x}) p(\mathbf{x}, t)}{\partial x_i} - \frac{\partial g_{ij}(\mathbf{x}) \langle \Gamma_j(t) \delta(\mathbf{X}(t) - \mathbf{x}) \rangle}{\partial x_i} . \quad (2.5)$$

Notamos aqui a correlação existente entre os ruídos $\Gamma_j(t)$ e o funcional $\mathcal{G}[\Gamma_1, \dots, \Gamma_M] \equiv \mathcal{G}[\Gamma] = \delta(\mathbf{X}(t) - \mathbf{x})$ das fontes de ruídos $\Gamma_i(s)$, $t_o \leq s \leq t$ (t_o é o tempo inicial). Até aqui não fizemos nenhuma asserção a respeito dos ruídos, mas para que possamos expressar $\langle \rangle$ na Eq.(2.5) em termos conhecidos do processo, isto deve e será feito.

Usando o teorema de Novikov [30] que permite expressar a correlação entre os ruídos gaussianos $\Gamma_i(t)$, de média zero, e um funcional dos mesmos, $R[\Gamma]$, em termos da esperança da derivada funcional deste em relação ao ruídos, i.e.,

$$\langle \Gamma_j(t) R[\Gamma] \rangle = \int_{t_o}^t ds F_{jk}(t, s) \left\langle \frac{\delta R[\Gamma]}{\delta \Gamma_k(s)} \right\rangle . \quad (2.6)$$

A derivada funcional de $R[\Gamma]$ em relação a $\Gamma_k(s)$ e' dada por [31]

$$\frac{\delta R[\Gamma]}{\delta \Gamma_k(s)} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\epsilon} \left\{ R(\Gamma_1(z), \dots, \Gamma_k(z) + \epsilon \delta(z - s), \dots, \Gamma_M(z)) - R(\Gamma(z)) \right\} , \quad (2.7)$$

asumindo que ambos os membros existem. Usaremos o mesmo símbolo para derivada funcional e para indicar a função generalizada delta de Dirac, dado que seu significado é bastante claro ao usá-lo em ambas situações.

Substituindo a Eq.(2.6), com $R[\Gamma] = \delta(\mathbf{X}(t) - \mathbf{x})$, na Eq.(2.6), e usando a regra da cadeia para derivadas funcionais (a Eq.(1.10) define $\mathbf{X}(t)$ como um funcional de Γ), obtemos

$$\begin{aligned}\frac{\partial p(\mathbf{x}, t)}{\partial t} &= -\frac{\partial f_i(\mathbf{x}) p(\mathbf{x}, t)}{\partial x_i} + \\ &+ \frac{\partial}{\partial x_i} g_{ij}(\mathbf{x}) \frac{\partial}{\partial x_j} \int_{t_o}^t ds F_{jk}(t, s) \left\langle \delta(\mathbf{X}(t) - \mathbf{x}) \frac{\delta X_l(t)}{\delta \Gamma_k(s)} \right\rangle .\end{aligned}\quad (2.8)$$

Se os ruídos forem, além de gaussianos, também delta correlacionados (ruído branco), mesmo que correlacionados entre si, i.e.,

$$F_{jk} = C_{jk} \delta(t - s) , \quad (2.9)$$

a integral na Eq.(2.8) só dependerá do limite superior t . Neste caso obteremos a equação de Fokker-Planck

$$\begin{aligned} \frac{\partial p(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = & - \frac{\partial f_i(\mathbf{x}) p(\mathbf{x}, t)}{\partial x_i} + \\ & + \frac{\partial}{\partial x_i} g_{ij}(\mathbf{x}) \frac{\partial}{\partial x_l} C_{jk} g_{lk}(\mathbf{x}) p(\mathbf{x}, t) , \end{aligned} \quad (2.10)$$

onde temos usado os fatos que

$$\frac{\delta X_l(t)}{\delta \Gamma_k(t)} = g_{lk}(\mathbf{X}(t)) , \quad (2.11)$$

e

$$\begin{aligned} \langle \delta(\mathbf{X}(t) - \mathbf{x}) g_{lk}(\mathbf{X}(t)) \rangle &= g_{lk}(\mathbf{x}) \langle \delta(\mathbf{X}(t) - \mathbf{x}) \rangle \\ &= g_{lk}(\mathbf{x}) p(\mathbf{x}, t) . \end{aligned} \quad (2.12)$$

É fácil ver que podemos colocá-la em termos dos coeficientes da expansão de Kramers-Moyal (EKM) (ver Eqs.(1.15) e (1.16))

$$\frac{\partial p(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = - \frac{\partial b_i(\mathbf{x}) p(\mathbf{x}, t)}{\partial x_i} + \frac{\partial^2 D_{ij}(\mathbf{x}) p(\mathbf{x}, t)}{\partial x_i \partial x_j} , \quad (2.13)$$

onde o coeficiente "drift" b_i ($\equiv D_i^{(1)}$ da EKM) é dado por

$$b_i(\mathbf{x}) = f_i(\mathbf{x}) + C_{jk} g_{jk}(\mathbf{x}) \frac{\partial g_{ij}(\mathbf{x})}{\partial x_j} , \quad (2.14)$$

e a semi-definida matriz de difusão D_{ij} ($\equiv D_{ij}^{(2)}$ na EKM) é dada por

$$D_{ij}(\mathbf{x}) = C_{jk} g_{ij}(\mathbf{x}) g_{jk}(\mathbf{x}) . \quad (2.15)$$

Neste caso, os coeficientes da EKM de ordem superior a dois ($D_{j_1 \dots j_\nu}^{(\nu)}(\mathbf{x}, t) = 0$, para $\nu > 2$).

2.1.1 Aproximação “Small- τ ”

De especial interesse são os processos estocásticos governados por ruídos gaussianos brancos e coloridos. Daremos aqui a equação de Fokker-Planck aproximada para o caso em que um dos ruídos é branco e o outro, um processo de Ornstein-Uhlenbeck [3, 5, 28, 32] (ruído exponencialmente correlacionado), usando o método de derivadas funcionais [6, 14]. Restringir-nos-emos aqui, sem perda de generalidade, ao caso unidimensional

$$\dot{X}(t) = f(X(t)) + g(X(t)) \epsilon(t) + \sqrt{D} h(X(t)) \xi(t) , \quad (2.16)$$

$$\langle \epsilon(t) \epsilon(s) \rangle = \frac{Q}{\tau} e^{-|t-s|/\tau} , \quad (2.17)$$

$$\langle \xi(t) \xi(s) \rangle = 2 \delta(t-s) , \quad (2.18)$$

$$\langle \xi(t) \rangle = \langle \epsilon(t) \rangle = 0 , \quad (2.19)$$

para todo t, s . Os ruídos $\epsilon(t)$ e $\xi(t)$ são assumidos gaussianos.

Neste caso a Eq.(2.8) torna-se

$$\begin{aligned} \frac{\partial p(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = & - \frac{\partial f(x)p(x, t)}{\partial x} + D \frac{\partial}{\partial x} h(x) \frac{\partial}{\partial x} h(x) p(x, t) + \\ & + \frac{\partial}{\partial x} g(x) \frac{\partial}{\partial x} \int_{t_0}^t ds \frac{Q}{\tau} e^{-|t-s|/\tau} \left\langle \delta(X(t) - x) \frac{\delta X(t)}{\delta \epsilon(s)} \right\rangle , \end{aligned} \quad (2.20)$$

onde temos usado a Eq.(2.18) e o fato de que

$$\frac{\delta X(t)}{\delta \xi(t)} = \sqrt{D} h(X(t)) , \quad (2.21)$$

para obtermos o segundo termo do membro direito da Eq.(2.20).

Para pequenos valores do tempo de correlação τ , $\tau \ll 1$, somente os valores de $s \cong t$ contribuem na integral da Eq.(2.20), pois a exponencial no seu integrando decai muito rapidamente para zero. Para tais valores de τ , podemos expandir a derivada funcional $\delta X(t)/\delta \xi(s)$ em série de Taylor até primeira ordem em $t-s$ [6, 14, 31], i.e.,

$$\begin{aligned} \frac{\delta X(t)}{\delta \xi(s)} &= \left(\frac{\delta X(t)}{\delta \xi(s)} \right)_{s=t} + \left(\frac{d}{ds} \frac{\delta X(t)}{\delta \xi(s)} \right)_{s=t} (s-t) + \dots \\ &\cong g(X(t)) - g^2(X(t)) \left[\left(\frac{f(X(t))}{g(X(t))} \right)' + \sqrt{D} \left(\frac{h(X(t))}{g(X(t))} \right)' \xi(t) \right] \\ &+ O(t-s) . \end{aligned} \quad (2.22)$$

Substituindo (2.22) em (2.20), obtemos

$$\begin{aligned}
\frac{\partial p(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = & - \frac{\partial f(x)p(x, t)}{\partial x} + D \frac{\partial}{\partial x} h(x) \frac{\partial}{\partial x} h(x) p(x, t) + \\
& + Q \frac{\partial}{\partial x} g(x) \frac{\partial}{\partial x} g(x) p(x, t) + \tau Q \frac{\partial}{\partial x} g(x) \frac{\partial}{\partial x} g^2(x) \left(\frac{f(x)}{g(x)} \right)' p(x, t) + \\
& + \tau Q D \frac{\partial}{\partial x} g(x) \frac{\partial}{\partial x} g(x) \frac{\partial}{\partial x} g(x) h(x) \left(\frac{h(x)}{g(x)} \right)' p(x, t) \\
& + O(\tau^2) + O((t - t_o)^2) .
\end{aligned} \tag{2.23}$$

Vemos que não existe uma equação de Fokker-Planck não negligenciando todos os termos de ordem τ , ou seja, existe termos de ordem τ que possuem derivadas de terceira ordem em x_i , $i = 1, 2, \dots, N$. O que Aguado et al. (A) [6, 14] têm usado é negligenciar termos de orden $O(\tau D Q)$, ou seja, é suposto $\tau, D, Q < 1$. Com isto obtemos a equação de Fokker-Planck para pequenos valores de τ

$$\frac{\partial p(x, t)}{\partial t} = - \frac{\partial b_A(x) p(x, t)}{\partial x} + \frac{\partial^2 D_A(x) p(x, t)}{\partial x^2} , \tag{2.24}$$

onde

$$b_A(x) = f(x) + Q g(x) g'(x) + \tau Q g'(x) g^2(x) \left(\frac{f(x)}{g(x)} \right)' + D h(x) h'(x) , \tag{2.25}$$

e

$$D_A(x) = D \left[h^2(x) + R g^2(x) + \tau R g^3(x) \left(\frac{f(x)}{g(x)} \right)' \right] . \tag{2.26}$$

A validade desta equação é restrita para x tal que $D_A(x) \geq 0$.

2.2 Método dos Cumulantes

Nesta seção apresentaremos brevemente a obtenção da equação Master, associada às Eqs(2.16)–(2.19), através do método dos operadores cumulantes ordenados [9]. Para tanto partimos da Eq.(2.4), que para este caso unidimensional, e em termos de operadores, é dada por

$$\frac{\partial \rho(x, t)}{\partial t} = - (L_o + L(t)) \rho(x, t) , \tag{2.27}$$

onde

$$L_o = \frac{\partial}{\partial x} f(x) \quad ; \quad L(t) = L_c(t) + L_w(t) , \quad (2.28)$$

e

$$L_c(t) = \epsilon(t) \frac{\partial}{\partial x} g(x) \quad (2.29)$$

$$L_w(t) = \sqrt{D} \xi(t) \frac{\partial}{\partial x} h(x) \quad (2.30)$$

Para obter a densidade de probabilidade $p(x, t)$, introduzimos a seguinte transformação:

$$\rho(x, t) = e^{-t L_o} \sigma(x, t) . \quad (2.31)$$

Consequentemente $\sigma(x, t)$ satisfaz

$$\frac{\partial \sigma(x, t)}{\partial t} = -e^{t L_o} L(t) e^{-t L_o} \sigma(x, t) , \quad (2.32)$$

com a condição inicial

$$\sigma(x, 0) = \rho(x, 0) . \quad (2.33)$$

Como

$$\left[e^{t L_o} L(t) e^{-t L_o} , e^{s L_o} L(s) e^{-s L_o} \right] \neq 0 , \quad (2.34)$$

onde $[]$ denota comutador. A solução da Eq.(2.32) precisa ser expressa em termos de uma exponencial ordenada no tempo

$$\sigma(x, t) = \overleftarrow{\mathbb{T}} \exp \left\{ - \int_0^t ds e^{s L_o} L(s) e^{-s L_o} \right\} \sigma(x, 0) . \quad (2.35)$$

A exponencial ordenada no tempo significa

$$\overleftarrow{\mathbb{T}} \exp \left\{ \int_0^t M(s) ds \right\} = \mathbb{1} + \sum_{n=1}^{\infty} \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \dots \int_0^{t_{n-1}} dt_n M(t_1) M(t_2) \dots M(t_n) .$$

Tomando a esperança de ambos os membros da Eq.(2.35), obtemos

$$\langle \sigma(x, t) \rangle = \overleftarrow{\mathbb{T}} \exp \left\{ \sum_{n=1}^{\infty} \int_0^t ds K^{(n)}(s) \right\} \sigma(x, 0) . \quad (2.36)$$

Aqui $K^{(n)}(s)$ denota operador cumulante de ordem n do operador $-e^{sL_o} L(s) e^{-sL_o} \equiv A(s)$. A forma explícita dos cumulantes pode ser encontrada na Ref.[9] e não serão apresentadas aqui.

As Eqs.(2.27) e (2.31) implicam que

$$p(x, t) = e^{-tL_o} \langle \sigma(x, t) \rangle . \quad (2.37)$$

Diferenciando em relação a t , obtemos

$$\frac{\partial p(x, t)}{\partial t} = -L_o p(x, t) + e^{-tL_o} \sum_{n=1}^{\infty} K^{(n)}(t) e^{tL_o} p(x, t) . \quad (2.38)$$

Pode-se mostrar que o operador cumulante de $A(t)$ pode ser descrito como uma soma do operador cumulante de $-e^{tL_o} L_c(t) e^{-tL_o}$, $K_c^{(n)}(t)$, com o operador cumulante de $-e^{tL_o} L_w(t) e^{-tL_o}$, $K_w^{(n)}(t)$, i.e.,

$$K^n(t) = K_c^n(t) + K_w^n(t) . \quad (2.39)$$

Pode-se também mostrar que o fato de $K_w^n(t)$ envolver somente ruído gaussiano $\xi(t)$, com média zero, implica que

$$K_w^n(t) = 0 \quad , \quad \text{para} \quad n = 1, 3, 4, \dots , \quad (2.40)$$

e

$$\begin{aligned} K_w^{(2)}(t) &= \int_0^t ds \langle e^{tL_o} L_w(t) e^{-(t-s)L_o} L_w(s) e^{-sL_o} \rangle \\ &= D \int_0^t ds e^{tL_o} \frac{\partial}{\partial x} h(x) e^{-(t-s)L_o} \frac{\partial}{\partial x} h(x) e^{-sL_o} \langle \xi(t) \xi(s) \rangle \\ &= D e^{tL_o} \frac{\partial}{\partial x} h(x) \frac{\partial}{\partial x} h(x) e^{-tL_o} . \end{aligned} \quad (2.41)$$

Substituindo (2.39)–(2.41) em (2.38), obtemos

$$\begin{aligned} \frac{\partial p(x, t)}{\partial t} &= -L_o p(x, t) + D \frac{\partial}{\partial x} h(x) \frac{\partial}{\partial x} h(x) p(x, t) + \\ &+ e^{-tL_o} \sum_{n=1}^{\infty} K_c^n(t) e^{tL_o} p(x, t) . \end{aligned} \quad (2.42)$$

Fox [9] mostrou que o fato de $\xi(t)$ ser gaussiano com média zero, implica que todos os cumulantes $K_c^{(2n+1)}(t)$ de ordem ímpar são nulos. Ele mostrou também que os cumulantes $K_c^{(2n)}(t)$ dependem de τ , e que a menor potência de τ em $K_c^{(2)}$ é τ^0 , em $K_c^{(4)}$ é τ^1 , em $K_c^{(6)}$ é τ^2 , e em geral é τ^{n-1} para $K_c^{(2n)}$.

2.2.1 “The Best Fokker-Planck Equation”

A aproximação conhecida como “The Best Fokker-Planck” (BFPE), válida para pequenos valores de τ , é obtida a partir da Eq.(2.42), negligenciando termos de ordem superior a τ^0 , i.e., negligenciando todos os $K_c^{(n)}(t)$, $n = 1, 3, 4, \dots$ [7]. Usando tais aproximações, podemos colocar a Eq.(2.42) na simplificada forma

$$\begin{aligned} \frac{\partial p(x, t)}{\partial t} = & - L_o p(x, t) + D \frac{\partial}{\partial x} h(x) \frac{\partial}{\partial x} h(x) p(x, t) + \\ & + \int_0^t ds \langle L_c(t) e^{-s L_o} L_c(t-s) e^{s L_o} \rangle p(x, t) . \end{aligned} \quad (2.43)$$

Usando a formula de Baker-Campbell-Hausdorf [7]

$$e^G B e^{-G} = B + [G, B] + \frac{1}{2!}[G, [G, B]] + \frac{1}{3!}[G, [G, [G, B]]] + \dots , \quad (2.44)$$

podemos calcular o integrando da Eq.(2.43). Identificando G com $e^{-s L_o}$, B com $L_c(t-s)$, pode-se provar, por indução, que a série (2.44) pode ser escrita como

$$e^{-s L_o} L_c(t-s) e^{s L_o} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{s^n}{n!} \frac{\partial}{\partial x} F^n(x) \epsilon(t-s) , \quad (2.45)$$

onde

$$F^0(x) = g(x) , \quad (2.46)$$

e

$$F^n(x) = F^{n-1}(x) \frac{\partial f(x)}{\partial x} - f(x) \frac{\partial F^{n-1}(x)}{\partial x} . \quad (2.47)$$

Usando esses resultados, Peacock et al. (P) [7, 15, 16] obtêm

$$\langle L_c(t) e^{-s L_o} L_c(t-s) e^{s L_o} \rangle = \frac{Q}{\tau} e^{-|s|/\tau} \frac{\partial}{\partial x} g(x) \frac{\partial}{\partial x} F(x, s) , \quad (2.48)$$

onde

$$F(x, s) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{s^n}{n!} F^n(x) . \quad (2.49)$$

Introduzindo a função $H(x, t)$ definida por

$$F(x, t) = g(x) H(x, t) , \quad (2.50)$$

temos que

$$\left\langle L_c(t) e^{-s L_o} L_c(t-s) e^{s L_o} \right\rangle = \frac{Q}{\tau} e^{-|s|/\tau} \frac{\partial}{\partial x} g(x) \frac{\partial}{\partial x} g(x) H(x, s) , \quad (2.51)$$

onde $H(x, t)$ satisfaz a seguinte equação diferencial parcial

$$\frac{\partial H(x, t)}{\partial t} + f(x) \frac{\partial H(x, t)}{\partial x} = \left[f'(x) - f(x) \frac{g'(x)}{g(x)} \right] H(x, t) , \quad (2.52)$$

com a condição inicial

$$H(x, 0) = 1 . \quad (2.53)$$

Substituindo a Eq.(2.52) na Eq.(2.43), obtemos a equação de Fokker-Planck (BFPE)

$$\begin{aligned} \frac{\partial p(x, t)}{\partial t} = & - \frac{\partial}{\partial x} \{ [f(x) + g(x) g'(x) Q(x, t) + D h(x) h'(x)] p(x, t) \} + \\ & + \frac{\partial^2}{\partial x^2} \{ [D h^2(x) + g^2(x) Q(x, t)] p(x, t) \} , \end{aligned} \quad (2.54)$$

onde

$$Q(x, t) = \frac{Q}{\tau} \int_0^t ds e^{-|s|/\tau} H(x, t) . \quad (2.55)$$

É importante frisar que esta equação está definida somente para x tal que o coeficiente de difusão é não nulo, i.e., $D h^2(x) + g^2(x) Q(x, t) \geq 0$.

Para pequeno tempo de correlação τ , estende-se o limite superior de integração na Eq.(2.55) para o infinito (e isto será assumido neste trabalho), tornando $Q(x, t)$ independente do tempo.

Capítulo 3

Aproximação Markoviana da Equação de Langevin

Nosso principal objetivo consistirá em obter uma aproximação para a dinâmica de longo tempo do processo não markoviano, unidimensional e não linear descrito pelas Eqs.(2.16)–(2.19). Fazendo isto, procuramos um processo de Markov unidimensional com as propriedades estacionárias, tais como o potencial generalizado (mas não necessariamente sua dinâmica para tempos curtos - próximos à preparação do sistema), sejam próximas às propriedades, para grandes valores do tempo t , do original processo não markoviano [3].

O processo original pode ser enriquecido acrescentando mais uma variável $\epsilon(t)$, e tornar-se markoviano. Fazendo isto, a dinâmica em (2.16) com (2.17)–(2.19) torna-se equivalente ao processo de Markov bidimensional descrito por $(X(t), \epsilon(t))$. Sua correspondente equação de (Stratonovich) Langevin é dada por [3, 4, 5]

$$\dot{X}(t) = f(X(t)) + g(X(t)) \epsilon(t) + \sqrt{D} h(X(t)) \xi_1(t) , \quad (3.1)$$

$$\dot{\epsilon}(t) = -\frac{\epsilon}{\tau} + \frac{\sqrt{Q}}{\tau} \xi_2(t) , \quad (3.2)$$

$$\langle \xi_i(t) \rangle = 0 , \quad (3.3)$$

$$\langle \xi_i(t) \xi_j(s) \rangle = 2 \delta_{ij} \delta(t - s) , \quad (3.4)$$

para todo t, s . Os ruídos $\xi_{1,2}(t)$ denotam ruídos brancos gaussianos não correlacionados com média zero. É fácil ver que as propriedades estatísticas de $\epsilon(t)$, já anteriormente citadas (ver Eqs.(2.17) e (2.19)), estão contidas em (3.2).

No limite do tempo de correlação zero, $\tau = 0$, $\epsilon(t)$ torna-se um ruído branco, e a Eq.(3.1) uma equação descrevendo a evolução de um processo markoviano com dois ruídos brancos. Neste caso a densidade de probabilidade satisfaz a equação de Fokker-Planck, como já vimos no Cap.(2).

Na construção da aproximação para a dinâmica com ruído colorido nas Eqs.(3.1) e (3.2), nós tentaremos cobrir um largo regime do tempo de correlação τ . Entretanto, focalizaremos em uma não sistemática abordagem a qual globalmente cobre um largo regime de valores dos parâmetros. Em contraste, as teorias anteriormente descritas (Cap.(2)) são de natureza assintótica cobrindo somente o regime de pequenos valores do tempo de correlação $\tau \ll 1$. Para construir uma aproximação que cubra um mais largo regime, seguiremos o raciocínio da teoria descrita na Ref.[3,5].

Construiremos uma efetiva aproximação markoviana para a Eq.(3.1), baseado no princípio da eliminação adiabática para pequenos valores de τ . Neste regime, uma simples eliminação do processo ϵ resulta em um aproximação markoviana, com ruído branco, para a Eq.(3.1). Então, de modo a cobrir valores do tempo de correlação τ de pequenas à intermediárias ordens, é necessária uma mais criteriosa escolha do processo que será posteriormente eliminado adiabaticamente. Esse procedimento, por sua vez, resultará em uma aproximação markoviana unidimensional em $X(t)$ para o processo conjunto $(X(t), \epsilon(t))$. Com isto, a densidade de probabilidade estacionária poderá ser expressa em termos de quadraturas. Ao fazer isto, transformamos o processo (X, ϵ) em um novo processo $(X, \dot{u})$. Isto terá um preço, o novo processo auxiliar $\dot{u}$ não terá mais um simples significado físico, mas leva a uma efetiva aproximação markoviana que cobre também moderados valores do tempo de correlação.

Introduzimos então um novo processo auxiliar

$$\dot{u} = \epsilon + \frac{f(X)/g(X)}{A(X, \tau)}, \quad (3.5)$$

com

$$A(X, \tau) = 1 + \frac{h^2(X)}{Rg^2(X)} \left[1 - \tau g(X) \left(\frac{f(X)}{g(X)} \right)' \right]. \quad (3.6)$$

Aqui, $R \equiv Q/D$ é a razão entre as intensidades dos ruídos, e $(')$ denota diferenciação

em relação a X . A Eq.(3.1) pode ser posta em termos de $\dot{u}$

$$\dot{X} = g \dot{u} - \frac{1-A}{A} f + h \sqrt{2D} \xi_1 . \quad (3.7)$$

Como o processo $\dot{u}$ não contém ruído branco, podemos derivá-lo com respeito ao tempo, resultando

$$\ddot{u} = \dot{\epsilon} + \left(\frac{(f/g)}{A} \right)' \dot{X} \quad (3.8)$$

$$\begin{aligned} &= -\gamma(X, \tau) \dot{u} + \frac{(f/g)}{A\tau} \left[1 - \tau g(1-A) \left(\frac{(f/g)}{A} \right)' \right] \\ &\quad + \frac{\sqrt{Q}}{\tau} \xi_2 + \left(\frac{(f/g)}{A} \right)' h(X) \sqrt{D} \xi_1 , \end{aligned} \quad (3.9)$$

com o “efetivo coeficiente de atrito” $\gamma(X, \tau)$ dado por

$$\gamma(X, \tau) = \frac{1}{A} \left\{ \left[\frac{1}{\tau} - g(f/g)' \right] \left(1 + \frac{h^2 D}{g^2 Q} \right) + f \frac{A'}{A} \right\} . \quad (3.10)$$

Os pre-requisitos para uma efetiva eliminação adiabática do processo $\dot{u}$ são:

- (i) O efetivo coeficiente de atrito precisa assumir grandes valores,
- (ii) A redução para um simples processo requer que $\left(K(x, \tau)/\gamma(x, \tau) \right)'$, onde $K(x, \tau)$ é dado pelo segundo termo da Eq.(3.8), não assuma valores grandes.

Para $\tau < 1$, o efetivo coeficiente de atrito $\gamma(x, \tau)$ assume valores positivos (assumindo que $1 - \tau g(x) \left(f(x)/g(x) \right)' > 0$) grandes. Fazendo $\ddot{u} = 0$ na Eq.(3.8) e substituindo a expressão para $\dot{u}$, daí obtida, na Eq.(3.7), obtemos a seguinte (Stratonovitch) equação diferencial estocástica

$$\dot{X}(t) = \frac{1}{\tau \gamma(X, \tau)} \left[f(X) + g(X) \sqrt{Q} \xi_2(t) + \sqrt{D} h(X) \xi_1(t) \right] . \quad (3.11)$$

Usando as Eqs.(2.13)–(2.15) com $C_{ij} = 0$, podemos obter imediatamente a associada equação de Fokker-Planck

$$\frac{\partial p(x, t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} \left[\left(\frac{f(x)}{\tau \gamma(x, \tau)} + \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x} D_{eff}(x) \right) p(x, t) \right] + \frac{\partial^2}{\partial x^2} [D_{eff}(x) p(x, t)] \quad (3.12)$$

com o coeficiente de difusão dado por

$$D_{eff}(x) = \frac{D \left(h^2(x) + R g^2(x) \right)}{\tau^2 \gamma^2(x, \tau)} , \quad (3.13)$$

o qual é não negativo para todo x , R , D e τ , o que não acontece com as duas teorias anteriormente apresentadas, “small- τ ” e BFPE. Fazendo $\partial p(x, t)/\partial t = 0$ e usando condições de contorno naturais, i.e., a corrente de probabilidade $J(x)$

$$J(x) = b(x) p(x) - \frac{\partial D(x) p(x)}{\partial x}$$

nula no infinito, obtemos facilmente a densidade de probabilidade estacionária em termos de quadraturas

$$p(x, \tau) = \frac{Z^{-1}}{[D_{eff}(x)]^{1/2}} \exp \{ -\Phi(x, \tau)/D \} , \quad (3.14)$$

onde Z^{-1} é uma constante de normalização. O potencial generalizado $\Phi(x, \tau)$ é dado por

$$\Phi(x, \tau) = - \int^x \frac{f(y) \left(1 - \tau g(y) \left(\frac{f(y)}{g(y)} \right)' \right) dy}{R g^2(y) A(y, \tau)} - \tau \int^x \frac{f^2(y) A'(y, \tau) dy}{A^2(y, \tau) [h^2(y) + R g^2(y)]} \quad (3.15)$$

No limite oposto $\tau \gg 1$, a variável auxiliar $\dot{u}$ vai para zero quando $\tau \rightarrow \infty$. Então o primeiro termo do membro da direita da Eq.(3.7) vai para zero, enquanto o segundo termo vai para $f(X)$. Uma equação diferencial estocástica markoviana aproximada, para grandes valores do tempo de correlação, pode portanto, ser obtida fazendo $\dot{u} = 0$ na Eq.(3.7)

$$\dot{X} = \frac{f(X) \left(1 - \tau g(X) \left(\frac{f(X)}{g(X)} \right)' \right) h^2(X)}{A(X, \tau) R g^2(X)} + h(X) \sqrt{2D} \xi_1 . \quad (3.16)$$

A solução estacionária é dada pela Eq.(3.14) com o coeficiente de difusão $D_{eff}(x)$ substituído por

$$D_{eff}(x) = D h^2(x) \quad (3.17)$$

o qual também é não negativo para todo x . O correspondente $\Phi(x, \tau)$ coincide precisamente com o primeiro termo do membro da direita da Eq.(3.15).

Observando que $\Phi(x, \tau)$, para $\tau > 1$, aproxima o correto limite, tanto para $\tau = 0$, quanto para $\tau \longrightarrow \infty$, podemos criar uma aproximação “crossover” (C) - válida para todo τ . Com a parte “drift” (termo determinístico) da Eq.(3.1), encontramos

$$\dot{X} = f(X) + \sqrt{D_C(X, \tau)} h(X) \xi(t), \quad (3.18)$$

onde

$$D_C(x, \tau) = \frac{D R A(x, \tau) g^2(x)}{\left[1 - \tau g(x) \left(\frac{f(x)}{g(x)}\right)'\right] h^2(x)}. \quad (3.19)$$

Seu efetivo coeficiente de difusão é dado por $D_C(x, \tau) h^2(x)$ e $\Phi(x, \tau)$ coincide novamente com o primeiro termo da Eq.(3.15).

Para o caso de uma força linear, i.e., $f(x) = a x$, $g(x) = h(x) = 1$, reproduzimos exatamente a densidade de probabilidade estacionária. O segundo termo da Eq.(3.15) se anula neste caso, e obtemos o mesmo $\Phi(x)$ para todo o valor de τ . A expressão obtida é válida para todos os valores dos parâmetros D , Q e τ . Vale a pena dizer que todas as presentes aproximações tais como small- τ [6, 14], teoria do decoplamento, the Unified Colored Approximation (UCNA) [11, 12, 13], ou o método perturbativo em path-integral [10], falham em reproduzir com exatidão este caso.

Capítulo 4

Escape de Poço de Potencial

Flutuante

Desde a pioneira contribuição de Svante Arrhenius and Hendrik Antoine Kramers [33], o problema de escape de um estado meta-estável tem sido ubíquo em quase todas as áreas científicas [1]. Uma interessante variedade desse problema é o transporte em sistemas complexos como ocorre em vidros [34, 35], ou em sistemas biológicos [36, 37], os quais possuem muitos estados meta-estáveis. Esses sistemas complexos são sistemas abertos, e estão em contato com um ou mais ambientes com flutuações. Então as flutuações não são mais relacionadas à dissipação via um teorema de flutuação- dissipação do tipo de Einstein-Nyquist [38, 39], o qual relaciona atrito às propriedades de correlação das flutuações. Escape de estados de estabilidade local pode ocorrer - em ausência de tunelamento quântico - através de saltos devidos aos ruídos (noise-assisted hopping events) somente. Para tais sistemas fora do equilíbrio, o problema de calcular o tempo de escape são desencorajadores, porque mesmo a densidade de probabilidade estacionária não é mais, em geral, dada pela distribuição de Boltzmann; ela precisa ser calculada autoconsistentemente das propriedades das flutuações. Neste contexto, uma interessante questão relacionada com escape de estados meta-estáveis surge quando a configuração da barreira não é mais estática, mas é em si uma quantidade flutuante. Estudaremos aqui o tempo de escape médio através de uma barreira de potencial com flutuações governadas por um processo de Ornstein-Uhlenbeck [3, 5, 32], como também para o caso em que as flutuações são descritas por um ruído branco, correlacionado a um segundo ruído branco, que simultaneamente governam a dinâmica do sistema. Antes disso apresentaremos um resumo do tempo

de escape ou “Mean-first-passage-time” (MFPT) de uma região unidimensional, com um contorno de reflexão, e o outro de absorção, para uma partícula com posição descrita pela equação de Fokker-Planck [29].

Seja x a posição inicial de uma partícula, em $t = 0$, e perguntamos quanto tempo é necessário para ela deixar o intervalo (a, b) o qual é assumido conter x . Assumimos também que em a existe uma barreira refletiva, e em b , uma barreira de absorção. Portanto a partícula não visita novamente o intervalo (a, b) , se ela já saiu desse intervalo alguma vez. Seja T o tempo necessário para que ela deixe este intervalo. Então a probabilidade que a partícula deixe (a, b) , depois de t , é a probabilidade que ela mantenha dentro dele até o tempo t , ou seja,

$$\begin{aligned} P_r(T \geq t) &= \int_a^b dx' p(x, 0/x', t) \\ &\equiv G(x, t) . \end{aligned} \quad (4.1)$$

O tempo médio de escape, $T(x)$, é dado por

$$\begin{aligned} T(x) &= \langle T \rangle \\ &= \int_0^\infty t p(t) dt , \end{aligned} \quad (4.2)$$

onde

$$\begin{aligned} p(t) = \frac{dP(t)}{dt} &= \frac{d}{dt} P_r(T < t) \\ &= \frac{d}{dt} \{1 - P_r(T \geq t)\} \\ &= -\frac{d}{dt} P_r(T \geq t) \\ &= -\frac{dG(x, t)}{dt} . \end{aligned} \quad (4.3)$$

Substituindo (4.3) em (4.2), obtemos

$$T(x) = \int_0^\infty dt G(x, t) \quad (4.4)$$

onde temos usado os seguintes fatos:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} t G(x, t) = \int_a^b dx' \lim_{t \rightarrow \infty} t p(x, 0/x', t) = 0 , \quad (4.5)$$

e

$$\begin{aligned}
G(x, 0) &= \int_a^b dx' p(x, 0/x', 0) \\
&= \int_a^b dx' \delta(x - x') \\
&= 1 ,
\end{aligned} \tag{4.6}$$

pois a condição inicial da densidade de probabilidade condicional aqui assumida é $p(x, 0/x', 0) = \delta(x - x')$.

Derivaremos uma simples equação diferencial ordinária para $T(x)$. Para isto assumiremos que o processo é homogêneo no tempo, i.e.,

$$\begin{aligned}
p(x, 0/x', t) &= p(x, h/x', t + h) \\
&= p(x, -t/x', 0) .
\end{aligned} \tag{4.7}$$

A densidade de probabilidade condicional satisfaz a equação de Fokker-Planck anterior (Eq.(1.20) com $D^\nu = 0$ para $\nu = 3, 4, \dots$)

$$\frac{\partial p(x, -t/x', 0)}{\partial(-t)} = -b(x) \frac{\partial p(x, -t/x', 0)}{\partial x} - D(x) \frac{\partial^2 p(x, -t/x', 0)}{\partial x^2} . \tag{4.8}$$

Usando a homogeneidade no tempo do processo, podemos reescrever a Eq.(4.8) como

$$\frac{\partial p(x, 0/x', t)}{\partial t} = b(x) \frac{\partial p(x, 0/x', t)}{\partial x} + D(x) \frac{\partial^2 p(x, 0/x', t)}{\partial x^2} . \tag{4.9}$$

Integrando a Eq.(4.9) sobre x' de a até b , com a Eq.(4.1) em mente, obtemos

$$\frac{\partial G(x, t)}{\partial t} = b(x) \frac{\partial G(x, t)}{\partial x} + D(x) \frac{\partial^2 G(x, t)}{\partial x^2} . \tag{4.10}$$

Integrando agora em relação a t de 0 até o infinito, e usando a Eq.(4.4), nós obtemos uma equação para $T(x)$, i.e.,

$$b(x) \frac{\partial T(x)}{\partial x} + D(x) \frac{\partial^2 T(x)}{\partial x^2} = -1 , \tag{4.11}$$

com as condições de contorno

$$\left. \frac{dT(x)}{dx} \right|_{x=a} = 0 , \tag{4.12}$$

e

$$T(b) = 0 . \quad (4.13)$$

A condição de contorno em $x = a$ foi obtida usando o fato de que em uma barreira refletiva

$$\left. \frac{\partial p(x, 0/x', t)}{\partial x} \right|_{x=a} = 0 , \quad (4.14)$$

e em uma barreira de absorção, $x = b$,

$$p(b, 0/x', t) = 0 . \quad (4.15)$$

A solução da Eq.(4.11) com as condições (4.12) e (4.13) é dada por

$$T(x) = \int_x^b dy \frac{1}{D(y) p(y)} \int_a^y dz p(z) , \quad (4.16)$$

onde $b(y)$, $D(y)$ e $p(y)$ são o coeficiente drift, o coeficiente de difusão e a solução estacionária da equação de Fokker-Planck, respectivamente.

4.1 Escape de uma Barreira de Potencial Fixa

Nós supomos que um ponto se mova governado por um potencial $U(x)$ que não varia no tempo, e uma força estocástica $\xi(t)$. Ela se move segundo a equação de Langevin [1, 3, 29]

$$\dot{X}(t) = -U'(x) + \sqrt{D} \xi(t) , \quad (4.17)$$

$$\langle \xi(t) \xi(s) \rangle = 2 \delta(t - s) . \quad (4.18)$$

Sua densidade de probabilidade satisfaz a equação de Fokker-Planck

$$\frac{\partial p(x, t)}{\partial t} = \frac{\partial U'(x) p(x, t)}{\partial x} + D \frac{\partial^2 p(x, t)}{\partial x^2} . \quad (4.19)$$

Vamos supor aqui que o potencial possui máximo e mínimo como apresentado abaixo.

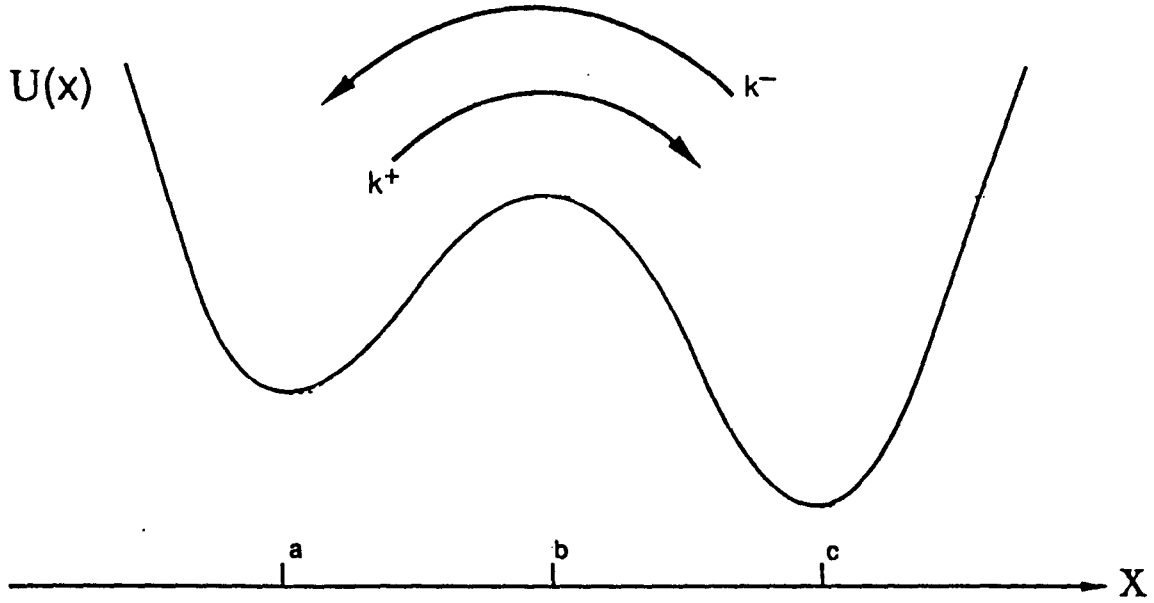


Fig. 4.1 Duplo poço de potencial $U(x)$ com dois estados meta-estáveis, $x = a$ e $x = c$, e um estado instável $x = b$. κ^+ e κ^- denotam a taxa de transição $a \rightarrow b$ e $b \rightarrow a$, respectivamente.

Também vamos supor aqui que o movimento é em toda a reta real, o que significa que sua densidade de probabilidade estacionária é dada por

$$p(x) = Z^{-1} \exp\{-U(x)/D\}, \quad (4.20)$$

a qual assumiremos ser bimodal, o que significa que há uma relativamente alta probabilidade do ponto, em movimento, ser encontrado à esquerda ou à direita de b , mas não próximo de b . Desejamos calcular o tempo médio de escape do poço da esquerda, ou ainda, o Mean-first-passage-time de a até o ponto c , $T(a \rightarrow c)$. Usando a Eq.(4.16), temos

$$T(a \rightarrow c) = \frac{1}{D} \int_a^c dy \exp\{U(y)/D\} \int_{-\infty}^y dz \exp\{-U(z)/D\}. \quad (4.21)$$

Se o máximo central de $U(x)$ for grande e D for pequeno, então $\exp\{U(x)/D\}$ terá um máximo acentuado em $x = b$, enquanto $\exp\{-U(x)/D\}$ será pequeno próximo de $z = b$. Portanto, $\int_{-\infty}^y \exp\{-U(x)/D\} dz$ será uma função de y com uma lenta variação próxima ao ponto $y = b$. Isto significa que o valor de $\int_{-\infty}^y \exp\{-U(x)/D\} dz$ será aproximadamente uma constante para os valores de y tais que o valor de $\exp\{U(y)/D\}$ é significativamente diferente de zero. Portanto podemos colocar $y = b$ na integral interna da Eq.(4.21), e aproximá-la por

$$T(a \rightarrow c) \simeq \frac{1}{D} \int_{-\infty}^b dy \exp\{-U(x)/D\} \int_a^c dz \exp\{U(z)/D\} . \quad (4.22)$$

Para fraca intensidade do ruído branco, $D \ll 1$, podemos usar a aproximação de “steepest descent” para calcular as integrais da Eq.(4.22). Fazendo isto, obtemos

$$T(a \rightarrow c) \simeq \frac{2\pi}{[U''(a)|U''(b)]} \exp\left\{\frac{U(b) - U(a)}{D}\right\} . \quad (4.23)$$

Essa é a fórmula clássica de Arrhenius da teoria de reações químicas. Em uma reação química, pode-se modelar a reação introduzindo uma coordenada tal que $x = a$ é a espécie A e $x = c$ é a espécie C. A reação é modelada pelo processo de difusão acima e as duas espécies são separadas pela barreira de potencial acima em $x = b$. Nas reações químicas, a mecânica estatística dá o valor

$$D = k T ,$$

onde k é a constante de Boltzmann e T é a temperatura absoluta. A mais importante dependência vem do fator exponencial, o qual é frequentemente escrito como

$$\exp\left[\frac{\Delta E}{k T}\right] ,$$

e representa a probabilidade que a energia das moléculas seja maior do que aquela da barreira, quando o sistema estiver em equilíbrio térmico.

4.2 Escape de um Poço de Potencial Flutuante

Estudaremos aqui o tempo de escape médio através da barreira existente entre os dois mínimos de um poço de potencial bi-estável, dado por $U(x) = -ax^2/2 +$

$bx^4/4$, com $a > 0$ e $b > 0$ [3, 4, 26]. A evolução do processo é dado pela equação de Langevin com ruídos gaussianos. Consideraremos os casos em que: ambos os ruídos são brancos e não correlacionados, sendo um deles multiplicativo e o outro aditivo (4.2.1); ambos são brancos, mas correlacionados (4.2.2); o ruído multiplicativo é colorido, o aditivo é branco e não são correlacionados (4.2.3).

4.2.1 Flutuações com Ruídos Brancos Não Correlacionados

Admitamos inicialmente um sistema dinâmico governado por um poço de potencial simétrico bi-estável e uma força estocástica (ruído branco gaussiano) $\xi(t)$, com esperança nula, e delta correlacionada, i.e., $\langle \xi(t) \rangle = 0$ e $\langle \xi(t) \xi(s) \rangle = 2\delta(t-s)$, ou seja, a bem conhecida dinâmica de Smoluchowski [3, 40] (daqui em diante usaremos tanto x para o valor que a variável estocástica X assume, quanto para a própria variável X , visto ser claro o significado usado em ambos os casos)

$$\dot{x} = ax - bx^3 + \sqrt{D}\xi(t) , \quad (4.24)$$

para a qual o tempo de escape T é obtido por simples quadraturas. No limite de baixa intensidade do ruído, D , esse tempo de escape para uma partícula deixar o estado meta-estável $x_{\pm} = \pm\sqrt{a/b}$, e atingir o estado meta-estável vizinho, pode ser obtido usando a aproximação steepest descent

$$T = \frac{\pi\sqrt{2}}{a} \left[1 + \frac{3}{2} \frac{b}{a^2} D \right] \exp \left[\frac{a^2}{4bD} \right] , \quad (4.25)$$

com $\Delta\Phi = (a^2/4b)$ sendo a energia de Arrhenius (altura da barreira).

Suponhamos agora que a curvatura da barreira não seja uma quantidade fixa, mas uma quantidade flutuante. Seguindo a Ref.[22] fazemos

$$a \longrightarrow a + \epsilon(t) , \quad (4.26)$$

onde $\epsilon(t)$ é assumido não ser correlacionado com a fonte de ruído branco $\xi(t)$, i.e., $\langle \epsilon(t) \xi(s) \rangle = 0$. A dinâmica estocástica torna-se então um processo governado por duas fontes de ruídos, sendo uma aditiva e a outra multiplicativa, ou seja,

$$\dot{x} = ax - bx^3 + x\epsilon(t) + \sqrt{D}\xi(t) . \quad (4.27)$$

Com $a \longrightarrow a + \epsilon(t)$, a altura da barreira torna-se também uma quantidade flutuante, $\Delta\Phi = [a + \epsilon(t)]^2/4b$.

Até o momento não especificamos a estatística do ruído $\epsilon(t)$. Assumiremos então que ele é um processo de Markov gaussiano, i.e., um ruído gaussiano exponencialmente correlacionado, com correlação

$$\langle \epsilon(t) \epsilon(s) \rangle = \frac{Q}{\tau} \exp(-|t - s|/\tau) , \quad (4.28)$$

onde τ denota o tempo de correlação do ruído. A dinâmica de nosso duplo poço de potencial flutuante é caracterizado por três parâmetros: a intensidade do ruído branco D , a intensidade do ruído colorido Q , onde $R \equiv Q/D$ é mantido fixo, mas de valor arbitrário, e o tempo de correlação τ .

Para $\tau = 0$, a Eq.(4.27) reduz-se a uma equação de Langevin com duas fontes de ruídos brancos: $\xi(t)$ e $\epsilon(t) \longrightarrow \sqrt{2Q}\xi_2(t)$, com $\xi_2(t)$ um ruído branco não correlacionado a $\xi(t)$. A equação de Fokker-Planck para a densidade de probabilidade é dada por

$$\frac{\partial p(x, t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} \left\{ (ax - bx^3 + Qx) p(x, t) \right\} + D \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left\{ (1 + Rx^2) p(x, t) \right\} . \quad (4.29)$$

A solução estacionária pode ser facilmente obtida

$$\begin{aligned} p(x) &= \frac{Z^{-1}}{1 + Rx^2} \exp[-\Phi(x)/D] \\ &= \frac{Z^{-1}}{(1 + Rx^2)^{1/2}} \exp \left\{ \int_0^x \frac{ay - by^3}{D(1 + Rx^2)} dy \right\} \\ &= \frac{Z^{-1}}{(1 + Rx^2)^{1/2}} \exp \left\{ -1 \frac{1}{2RD} \left[bx^2 - \left[a + \frac{b}{R} \right] \ln(1 + Rx^2) \right] \right\} , \end{aligned} \quad (4.30)$$

onde Z^{-1} é uma constante de normalização. Assumiremos aqui que $p(x)$ é bimodal, i.e., a densidade de probabilidade estacionária tem um máximo em cada estado meta-estável $x = x_{\pm}$. Isto implica na restrição $Q = RD < a$.

O ponto principal aqui é o cálculo do tempo de escape através da barreira central, o que ocorrerá somente se $D > 0$. O MFPT de atingir o estado $x_+ = +\sqrt{a/b}$ quando o estado inicial é $x_- = -\sqrt{a/b}$, é dado pela equação

$$\begin{aligned} T(R) &= T_{MFPT}(x_- \rightarrow x_+) \\ &= D^{-1} \int_{x_-}^{x_+} \frac{dx}{(1 + Rx^2)} \int_{-\infty}^x p(y) dy . \end{aligned} \quad (4.31)$$

O MFPT pode ser colocado na seguinte forma

$$T(R) = D^{-1} \int_{x_-}^{x_+} H_1(x) \exp \left[\frac{\Phi(x)}{D} \right] \int_{-\infty}^x H_2(y) \exp \left[-\frac{\Phi(y)}{D} \right] dy. \quad (4.32)$$

Em nosso caso, Eq.(4.31), temos que $H_1(x) = H_2(x) = (1 + Rx^2)^{-1/2}$. Para $D \ll 1$, podemos usar steepest descent para calcular (4.32). Expandimos $H_1(x)$ e $\Phi(x)$ em série de Taylor, em torno do ponto de máximo de $\Phi(x)$, $x = x_o$, na integral externa; e $H_2(y)$ e $\Phi(y)$ em torno do ponto de mínimo de $\Phi(y)$ na integral interna da Eq.(4.32) [3]. Fazendo isto obtemos

$$T(R) = \exp \left[\frac{\Delta\Phi}{D} \right] \frac{2\pi H_1(x_o) H_2(x_-)}{[|\Phi''(x_o)| |\Phi''(x_-)|]^{1/2}} \{1 + O(D)\}, \quad (4.33)$$

onde $\Delta\Phi = \Phi(x_o) - \Phi(x_-)$ é a energia de Arrhenius. A Eq.(4.33) nos diz que o tempo médio de escape, para $D \ll 1$, é dominado pelo prefator que multiplica os termos entre chaves, ou seja, o MFPT é dado predominantemente pela energia de Arrhenius, a qual é, em nosso caso, dada por

$$\begin{aligned} \Delta\Phi(R) &= \int_0^{\sqrt{a/b}} \frac{ay - by^3}{(1 + Ry^2)} dy \\ &= \frac{1}{2R} \left\{ -a + \left[a + \frac{b}{R} \right] \ln \left(1 + R \frac{a}{b} \right) \right\} \\ &< \Delta\Phi(R = 0). \end{aligned} \quad (4.34)$$

Em concordância com as Refs.[18,22,35], o tempo médio de escape decresce exponencialmente com o aumento de R , i.e., $T(R = 0) > T(R \neq 0)$. A fonte de ruído adicional $x \sqrt{2Q} \xi_2(t)$ contribui com a dinâmica de escape de Smoluchowski, aumentando a “temperatura efetiva” $D \longrightarrow D(x)$ em uma maneira dependente dos estados, i.e.,

$$D \longrightarrow D(x) = D + Q x^2 \geq D \quad (4.35)$$

a qual consequentemente acelera a dinâmica de escape. Podemos ver isto diretamente assumindo $R \ll 1$, além de $D \ll 1$, nas Eqs.(4.33) e (4.34). Fazendo isto, obtemos uma expressão explícita para o MFPT, ou seja,

$$T(R) \simeq T(R = 0) \exp \left\{ -\frac{a^3}{12b^2D} R + O(R^2) \right\}. \quad (4.36)$$

4.2.2 Flutuações com Ruídos Brancos Correlacionados

Consideraremos aqui a mesma equação de Langevin da seção (4.2.1) com $a = b = 1$, e uma correlação entre os ruídos brancos [26], ou seja,

$$\dot{x} = x - x^3 + \sqrt{Q} x \xi_1(t) + \sqrt{D} \xi_2(t) , \quad (4.37)$$

$$\langle \xi_i(t) \rangle = 0 , \quad (4.38)$$

$$\langle \xi_i(t) \xi_j(s) \rangle = 2 C_{ij} \delta(t - s) , \quad (4.39)$$

onde

$$\{C_{ij}\} = \begin{pmatrix} 1 & \rho \\ \rho & 1 \end{pmatrix} . \quad (4.40)$$

Os ruídos $\xi_1(t)$ e $\xi_2(t)$ denotam ruídos brancos gaussianos com a intensidade da correlação entre eles dada por ρ . Aqui $|\rho| \leq 1$. Quando $\rho = 0$, nós reproduzimos o caso discutido na seção (4.2.1), com $a = b = 1$. É fácil ver que a equação de Fokker-Planck associada é dada por

$$\begin{aligned} \frac{\partial p(x, t)}{\partial t} = & -\frac{\partial}{\partial x} \left[\left(x - x^3 + Q x + \rho \sqrt{Q D} \right) p(x, t) \right] \\ & + D \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left[\left(1 + R x^2 + 2\rho \sqrt{R} x \right) p(x, t) \right] , \end{aligned} \quad (4.41)$$

com solução estacionária

$$P_{st}(x) = \frac{Z^{-1}}{\left(1 + R x^2 + 2\rho \sqrt{R} x \right)^{1/2}} \exp \left(-\frac{\Phi(x)}{D} \right) , \quad (4.42)$$

e

$$\Phi(x) = - \int^x \frac{(y - y^3) dy}{\left(1 + R y^2 + 2\rho \sqrt{R} y \right)} . \quad (4.43)$$

A forma da densidade de probabilidade estacionária foi investigada na Ref.[42]. Em particular, esses autores consideraram a mudança de uma forma unimodal para uma bimodal, para a densidade de probabilidade estacionária, Eq.(4.42). Apresentaram

que a transição depende de um valor limiar característico, a_c , para a taxa de relaxação na Eq.(4.37). Em nosso caso a_c é dado por

$$a_c = RD + 3 \left(\frac{\rho^2 RD^2}{4} \right)^{1/3}. \quad (4.44)$$

Em nosso sistema, a taxa de relaxação linear a sempre está acima deste valor limiar, i.e., $1 > a_c$ ($a = 1$ em nosso caso), para $0 \leq R \leq R_{bm}$, onde R_{bm} é o valor limiar da bimodalidade da densidade de probabilidade estacionária. Para nosso conjunto de valores dos parâmetros escolhido, o mínimo da taxa de transição, ver figuras (4.2) e (4.3), ocorrem sempre dentro do intervalo de bimodalidade da densidade de probabilidade estacionária. Acima deste valor limiar, o Mean-first-passage-time ainda existe, mas não é mais dominado pela exponencial da energia de Arrhenius.

O principal ponto aqui é o estudo da taxa de transição κ , definida aqui como $1/T$, o inverso do Mean-first-passage-time do estado estável $x_- = -1$, para o estado estável $x_+ = +1$ ($x_- \rightarrow x_+$). Essa quantidade determina o transporte no sistema bi-estável. Ela é dada pela Eq.(4.32) com

$$H_1(x) = H_2(x) = \left(1 + R x^2 + 2\rho\sqrt{R}x \right)^{-1/2}. \quad (4.45)$$

Podemos deduzir da simetria do sistema que $\kappa^+(R, \rho) = \kappa^-(R, -\rho)$.

Nas figuras (4.2) e (4.3) apresentamos as curvas da taxa de transição relativa $\nu = \kappa/\kappa_s$ como função de R [26]. O símbolo κ_s denota a taxa de transição no limite de um processo de Smoluchowski ($R = 0$). Pode-se ver que para cada valor fixo de R , e $\rho > 0$, a força generalizada, dada pelo integrando na Eq.(4.43) cresce com x no intervalo $x_- < x < 0$, quando o valor de ρ aumenta. A barreira para a transição $x_- \rightarrow x_+$ também cresce. Isto provoca um aumento no MFPT e consequentemente um decaimento exponencial na taxa de transição.

Com uma anti-correlação, i.e., $\rho < 0$, a barreira diminui com o aumento de ρ . Isto por sua vez provoca um efeito oposto, ou seja, um aumento exponencial para a taxa de transição. Quando $\rho = +1$, a força generalizada diverge em $x = 1/\sqrt{R}$, e se $R > 1$, a taxa de transição se anula ($\kappa^+ = 0$). As figuras (4.2) e (4.3) mostram

esse comportamento. Para decrescente valores da intensidade do ruído aditivo D , o decaimento da taxa de transição torna-se mais dramático. Também apresentamos a curva, em ambas figuras, para a aproximação steepest descent da taxa de transição relativa, para $\rho = 0.9$.

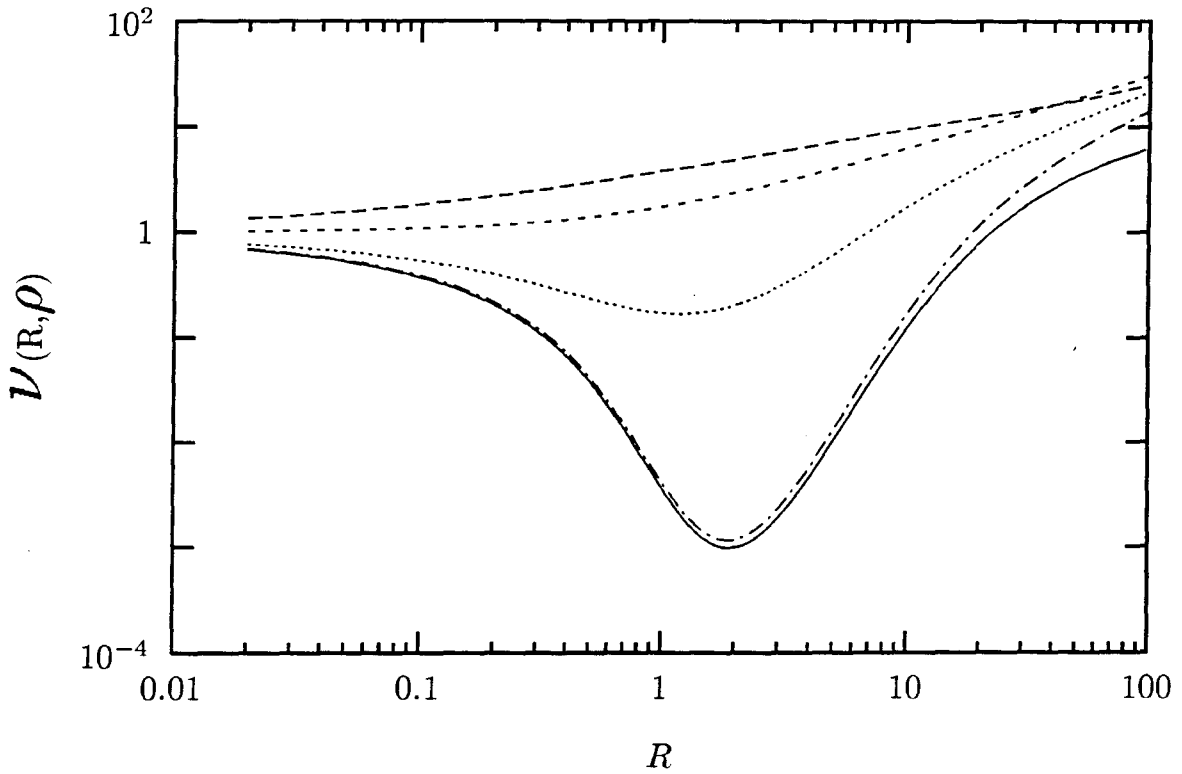


Fig. 4.2 A taxa de transição relativa $\nu(R, \rho) = \kappa(R, \rho)/\kappa_S$ é apresentada para $D = 0.1$, com diferentes valores da intensidade da correlação ρ entre os ruídos. A linha com longos traços representa um caso com anti-correlação ($\rho = -0.9$). A linha com curtos traços é o caso sem correlação ($\rho = 0$). As curvas para os casos com a intensidade de correlação ρ positiva são mostradas em linha pontilhada para $\rho = 0.7$, e em linha traço-pontilhada para $\rho = 0.9$. A linha sólida representa a aproximação steepest descent ($\rho = 0.9$).

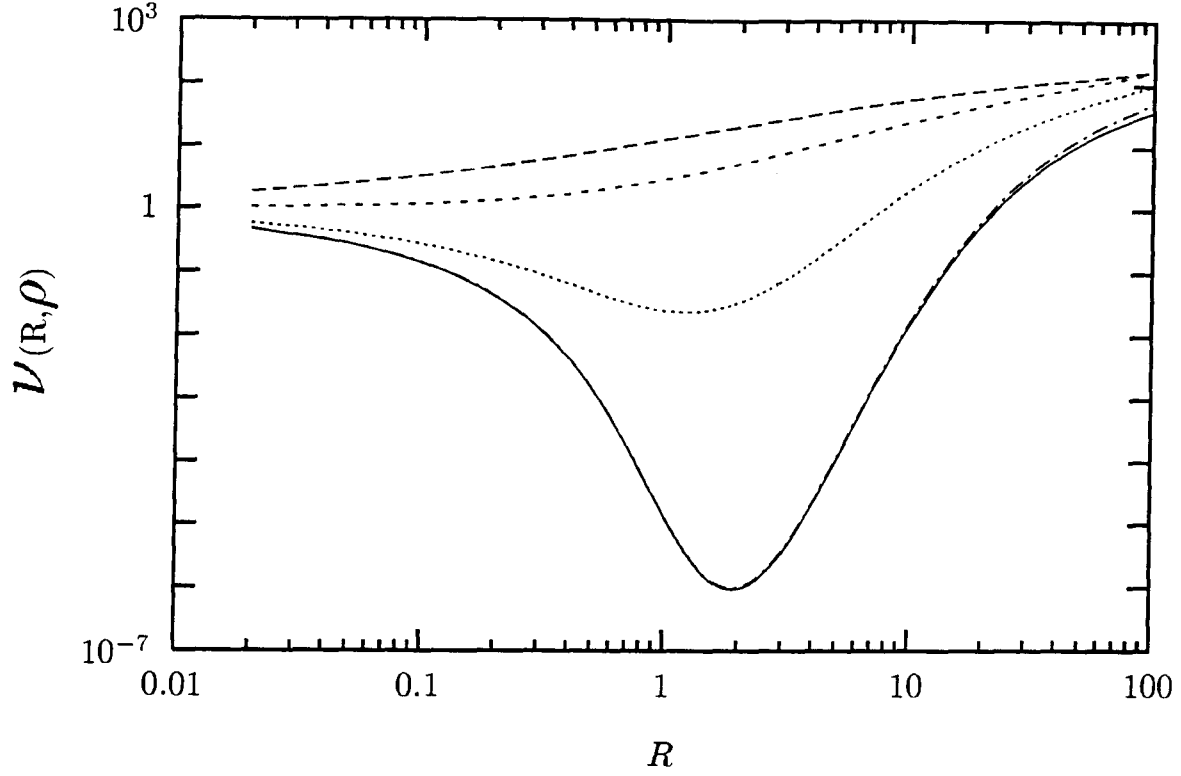


Fig. 4.3 A taxa de transição relativa $\nu(R, \rho) = \kappa(R, \rho)/\kappa_S$ é apresentada para $D = 0.05$, com diferentes valores da intensidade da correlação ρ entre os ruídos. A linha com longos traços representa um caso com anti-correlação ($\rho = -0.9$). A linha com curtos traços é o caso sem correlação ($\rho = 0$). As curvas para os casos com a intensidade de correlação ρ positiva são mostradas em linha pontilhada para $\rho = 0.7$, e em linha traço-pontilhada para $\rho = 0.9$. A linha sólida representa a aproximação steepest descent ($\rho = 0.9$).

Usando a aproximação steepest descent (ver Eq.(4.33)) podemos obter alguns interessantes resultados analíticos. Para pequenos valores de D , $D \ll 1$, os termos dominantes da taxa de transição relativa podem ser dados por

$$\begin{aligned} \nu(R, \rho) &= \frac{\kappa(R, \rho)}{\kappa_S} \\ &= \exp \left[\left(\frac{1}{4} - \Delta\Phi \right) \right], \end{aligned} \quad (4.46)$$

onde

$$\Delta\Phi = \Phi(0) - \Phi(-1) . \quad (4.47)$$

Para $R \ll 1$ temos

$$\nu(R \gg 1, \rho) = \nu(R, \rho = 0) \exp \left[\frac{2\rho}{RD\sqrt{R}} \right] , \quad (4.48)$$

enquanto que para $R \gg 1$, nós temos

$$\nu(R \gg 1, \rho) = \nu(R, \rho = 0) \exp \left[\frac{2\rho}{RD\sqrt{R}} \right] . \quad (4.49)$$

É sabido que a taxa de transição aumenta com o aumento de R , quando os ruídos não são correlacionados Seção (4.2.1) [3]. Agora, com ruídos correlacionados, o denominador na força generalizada

$$\frac{(x - x^3)}{(1 + Rx^2 + 2\rho\sqrt{R}x)} ,$$

tem uma dependência em ρ que é muito importante para moderados e pequenos valores de R . Se ρ for negativo (positivo), a força generalizada será menor (maior) do que no caso em que $\rho = 0$. Para $R \gg 1$, a correlação entre os ruídos torna-se negligenciável ($Rx^2 \gg 2\rho\sqrt{R}x$), e a curva da taxa de transição aproxima assintoticamente a curva correspondente ao caso em que os ruídos não são correlacionados ($\rho = 0$); fato este que segue da Eq.(4.49).

4.2.3 Flutuações com Ruído Colorido e Branco

Voltaremos agora às Eqs.(4.27) e (4.28), ou seja, ao caso em que a flutuação da barreira de potencial é dado pelo ruído colorido gaussiano e exponencialmente correlacionado, $\epsilon(t)$, com tempo de correlação τ . Assumiremos aqui também $a = b = 1$, o que pode ser obtido introduzindo as seguintes variáveis adimensionais: $x \longrightarrow x\sqrt{a/b}$, $t \longrightarrow at$, $D \longrightarrow Db/a^2$, e $Q \longrightarrow Q/a$. Usando o mesmo raciocínio usado no Cap.(3), as Eqs.(4.27) e (4.28) podem ser escritas na forma dada pelas Eqs.(3.1)–(3.4) com $f(x) = x - x^3$, $g(x) = x$ e $h(x) = 1$.

Aproximação para Pequenos Valores de τ

Nossa aproximada equação markoviana para este caso, Eq.(3.11), é dada por

$$\dot{x} = \frac{1}{\tau \gamma(x, \tau)} \left[x - x^3 + x \sqrt{Q} \xi_2(t) + \sqrt{D} \xi_1(t) \right], \quad (4.50)$$

com o coeficiente de atrito efetivo

$$\gamma(x, \tau) = \frac{1}{\tau} \left\{ \frac{(1 + 2\tau x^2)(1 + Rx^2)}{1 + (R + 2\tau)x^2} - \frac{2R\tau x^2(1 - x^2)}{[1 + (R + 2\tau)x^2]^2} \right\}. \quad (4.51)$$

Usando os resultados do Cap.(3), podemos obter a densidade de probabilidade estacionária e o MFPT. Podemos usar a aproximação steepest descent, Eq.(4.32), e obter o termo dominante do MFPT. Para $\tau \ll 1$, nós temos que

$$\frac{T(R, \tau \ll 1)}{T(R, \tau = 0)} = \exp \left\{ -\frac{R\tau^2}{D} \int_{-1}^0 dx (x - x^3) \left[\left(\frac{x(x - x^3)}{1 + Rx^2} \right)' \right]^2 + O(\tau^4) \right\}. \quad (4.52)$$

Para $\tau < 1$ e $R \gg 1$,

$$T(R \gg 1, \tau < 1) = T(R, \tau = 0) \exp \left\{ \frac{\tau^2}{Q} \left[\frac{1}{3R} + O(R^{-2}) \right] \right\}. \quad (4.53)$$

O MFPT cresce exponencialmente proporcional a τ^2 . Este comportamento concorda com o resultado assintótico, $\tau \ll 1$ e $(\tau/D) \gg 1$, obtido usando “Path Integral” [10, 43, 44, 45, 46]. Em contraste, as aproximações para pequeno τ , Sancho et. al. [6, 14] e Peacock et. al. [7, 15, 16], descritas no Cap.(2), predizem um crescimento exponencial linear em τ [3].

Também vale a pena dizer que para $\epsilon(t)$ com variância independente de τ , $\langle \epsilon(t)^2 \rangle = Q$, i.e., $Q \longrightarrow Q\tau$, nossa aproximação para $\tau < 1$ mantém-se válida. Diferentemente do caso até agora estudado, $\langle \epsilon(t)^2 \rangle = Q/\tau$, o limite de Smoluchowski é obtido fazendo $\tau = 0$. Em concordância com muitos cálculos recentes do MFPT (energia de Arrhenius) para este caso [20], predizemos um decrescimento para crescentes valores de $\tau < 1$, i.e.,

$$\Delta\Phi(R\tau, \tau) < \Delta\Phi(\tau = 0). \quad (4.54)$$

Aproximação para Grandes Valores de τ

Para $\tau > 1$ nossa equação markoviana unidimensional aproximada é dada por (ver Eq.(3.16))

$$\dot{x} = \frac{(x - x^3)(1 + 2\tau x^2)}{1 + (R + 2\tau)x^2} + \sqrt{D} \xi_1(t) . \quad (4.55)$$

Nossas aproximações, para $\tau < 1$ e para $\tau > 1$, concordam com UCNA, elucidada anteriormente por vários autores [11, 13, 43, 47], quando $D = 0$.

A equação de Fokker-Planck associada e sua solução estacionária podem facilmente ser obtidas usando os resultados genéricos do Cap.(3), e não serão apresentados aqui [3]. Usando novamente a aproximação steepest descent, podemos obter dois interessantes comportamentos assintóticos para o MFPT: Para $\tau \gg 1$

$$T(R, \tau \gg 1) = T(R = 0) \exp \left\{ \frac{R}{8\tau D} \left[-1 + \frac{R \ln(\tau)}{\tau} + \frac{R}{2\tau} + O(\tau^{-2}) \right] \right\} , \quad (4.56)$$

e para $R \gg 1$ ($D \ll 1$)

$$\frac{T(R \gg 1, \tau > 1)}{T(R, \tau = 0)} = \exp \left\{ \frac{\tau}{Q} \left[\frac{1}{2} + \frac{3 - \tau - 2 \ln(R)}{R} + O(R^{-2}, R^{-2} \ln(R)) \right] \right\} . \quad (4.57)$$

Podemos dar uma explicação física para este último resultado, Eq.(4.57). Com $R \gg 1$ e $\tau \gg 1$ as flutuações para x e ϵ são muito pequenas, e suas dinâmicas estocásticas aproximam a dinâmica determinística. Esta é obtida fazendo $D = Q = 0$ nas Eqs.(3.1) e (3.2), i.e.,

$$\dot{x} = x - x^3 + x \epsilon , \quad (4.58)$$

$$\dot{\epsilon} = \frac{\epsilon}{\tau} . \quad (4.59)$$

Na Figs.(4.4a)–(4.4c) apresentamos essa dinâmica determinística para vários valores de τ . As linhas de fluxo apresentam uma simetria de reflexão em torno do eixo ϵ , e a separatriz é dada pela curva $x = 0$. Estas linhas possuem pontos de retorno caracterizados por $d\epsilon/dx = \infty$. Fazendo isto em

$$\begin{aligned} \dot{x} &= \frac{dx}{d\epsilon} \frac{d\epsilon}{dt} \\ &= -\frac{\epsilon}{\tau} \frac{dx}{d\epsilon} , \end{aligned}$$

obtemos $\dot{x} = 0$. Substituindo isto na Eq.(4.58), obtemos o conjunto de pontos de retorno dado pela seguinte curva no espaço (ϵ, x)

$$\epsilon = S(x) = -1 + x^2. \quad (4.60)$$

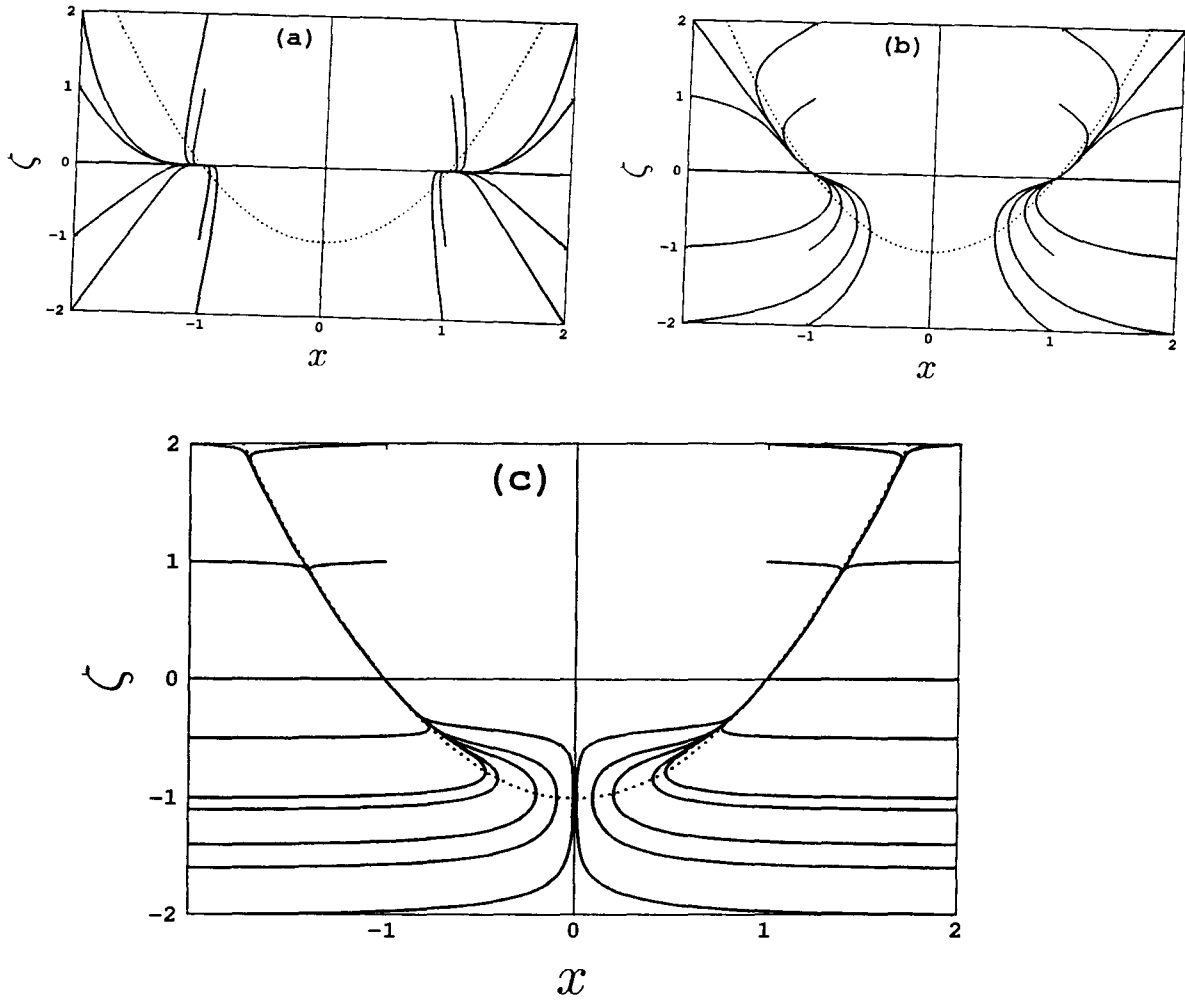


Fig. 4.4 Trajetórias determinísticas do sistema em (4.58) e (4.59), com $\zeta \equiv \epsilon$. (a)-(c) são para diferentes tempos de correlação τ : (a) $\tau = 0.1$, (b) $\tau = 1$, (c) $\tau = 15$. A curva pontilhada representa a curva dos pontos de retorno $S(x) = -1 + x^2$, Eq.(4.60), onde $\dot{x} = 0$.

É importante notar que as linhas de fluxo, na ausência de ruído branco $\xi_1(t)$ (i.e., $D = 0$), não podem atravessar a linha separatriz $x = 0$; i.e., não há escape de $x_- \rightarrow x_+$ e vice-versa. A dinâmica estocástica descrita em (4.57) segue *aproximadamente* as linhas de fluxo determinísticas (ver Fig.(4.4c)). O escape então acontece ao longo da curva de pontos de retorno $S(x)$, levando o passeador aleatório (random walker) próximo ao ponto $(x = 0, \epsilon = -1)$. A força estocástica (ruído branco $\xi_1(t)$), de baixa intensidade D , impulsiona o passeador a atravessar a separatriz $x = 0$, próximo a $\epsilon = -1$. Com a densidade de probabilidade estacionária $p(\epsilon)$ obedecendo

$$p(\epsilon) = \sqrt{\frac{\tau}{2\pi Q}} \exp\left[-\frac{\tau \epsilon^2}{2Q}\right], \quad (4.61)$$

o tempo de escape para atingir $\epsilon = -1$, dado que iniciou em $(x = -1, \epsilon = 0)$, é então dominado pela energia de Arrhenius $1/p(\epsilon = -1)$. Portanto o tempo de escape é predominantemente dado por

$$T(R \gg 1, \tau > 1) \propto \exp\left[\frac{\tau}{2Q}\right], \quad (4.62)$$

estando em concordância com a Eq.(4.57).

Comparações Numéricas

Em nossos cálculos numéricos [4], partimos da equação de Fokker-Planck para a densidade de probabilidade conjunta $p(x, \epsilon, t)$, associada ao processo de Markov bidimensional dada pelas Eqs.(3.1)–(3.4), com $f(x) = x - x^3$, $g(x) = h(x) = 1$, ou seja,

$$\frac{\partial p(x, \epsilon, t)}{\partial t} = L_{FP}(x, \epsilon) p(x, \epsilon, t), \quad (4.63)$$

onde o operador de Fokker-Planck, $L_{FP}(x, \epsilon)$, é dado por

$$L_{FP}(x, \epsilon) = -\frac{\partial}{\partial x}(x - x^3 + x\epsilon) + \frac{\partial}{\partial \epsilon} \frac{\epsilon}{\tau} + D \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{Q}{\tau^2} \frac{\partial^2}{\partial \epsilon^2}. \quad (4.64)$$

Estamos interessados na densidade de probabilidade estacionária de x , i.e., $p(x; \tau)$, a qual segue da densidade de probabilidade conjunta estacionária

$$p(x; \epsilon) = \lim_{t \rightarrow \infty} p(x, \epsilon, t), \quad (4.65)$$

através da sua integração em relação a ϵ

$$p(x; \tau) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\epsilon p(x; \epsilon) . \quad (4.66)$$

Essa função pode ser obtida numericamente usando o método Matrix Continued Fraction (MCF) [48, 28, 49]. Uma outra quantidade que podemos obter por este método, é o menor e não nulo autovalor $\lambda_1(\tau)$ do operador de Fokker-Planck, Eq.(4.64).

Os detalhes do cálculo não serão apresentados aqui (similar cálculo numérico pode ser encontrado nas Refs.[47] e [48]. Citamos apenas que expandimos a densidade de probabilidade conjunta em polinômios de Hermite

$$p(x, \epsilon, t) = \sum_{n=0}^{\infty} p_n(x, \epsilon) e^{-\lambda_n t} , \quad (4.67)$$

ou seja, $p_n(x, \epsilon)$ é dado por um produto de um polinômio de Hermite em x por outro em ϵ . Para $n = 0$, p_o é a densidade de probabilidade estacionária e $\lambda_o = 0$.

Para o caso de escape em duplo poço de potencial simétrico, esse autovalor é relacionado ao MFPT, T , de um mínimo ao outro através de

$$\lambda_1(\tau) \simeq \frac{2}{T} . \quad (4.68)$$

Essa aproximação é válida no limite de baixa intensidade dos ruídos, D e Q , e este autovalor é nitidamente separado dos restantes dos autovalores.

A densidade de probabilidade estacionária $p(x, \tau)$ são apresentadas na Fig.(4.5). Nós apresentamos somente o intervalo $x \geq 0$, desde que $p(x, \tau) = p(-x, \tau)$. Na Fig.(4.5a) mostramos os resultados para $\tau = 1$. Esse valor do tempo de correlação é o mais crítico, porque as aproximações (4.50) e (4.55) aproximam melhor o processo original para valores de $\tau \ll 1$ e $\tau \gg 1$, respectivamente. Entretanto o resultado numérico (linha sólida) concorda melhor com a aproximação para pequenos valores de τ (linha tracejada). Em adição às aproximações dadas acima, consideraremos a aproximação “crossover” já descrita no Cap.(3). Para o duplo poço de potencial simétrico, ela é dada por

$$\dot{x} = x - x_3 + \sqrt{D_C(x, \tau)} \xi_1(t) , \quad (4.69)$$

com

$$D_C(x, \tau) = \frac{D (1 + R x^2 + 2 \tau x^2)}{1 + 2 \tau x^2} \quad (4.70)$$

O resultado para esta aproximação é apresentado nas figuras em linhas pontilhadas. Na Fig.(4.5a) essa aproximação crossover concorda também com a aproximação para grandes valores de τ , Eq.(4.55). Na Fig.(4.5b) traçamos as curvas para a densidade de probabilidade para $\tau = 0.1$ e para grande tempo de correlação $\tau = 10$. Há uma muito boa concordância entre o resultado numérico preciso (linha sólida) e o resultado obtido com a aproximação para pequenos valores de τ , dado na Eq.(4.50), enquanto a aproximação crossover apresenta pequenos desvios (linha pontilhada). Os resultados numéricos (linha sólida) coincidem com aqueles da aproximação para grandes valores de τ , Eq.(4.55), e a aproximação crossover (linha com cruces) é praticamente indistinguível do preciso resultado numérico. A densidade de probabilidade estacionária para $\tau = 10$ apresenta um pico mais estreito, ou seja, os estados estão distribuídos mais próximos ao estado mais provável. Isto acontece devido à efetiva redução da influência do ruído colorido, i.e., $\langle Q/\tau \rangle$ decresce com o aumento de τ .

Os resultados para o autovalor $\lambda_1(\tau)$ são apresentados na Fig.(4.6). Na Fig.(4.6a) usamos as mesmas intensidades dos ruídos usados na Fig.(4.5). O autovalor cresce monotonicamente desde seu valor mínimo, em $\tau = \infty$ – onde o ruído colorido está ausente (é nulo) – até seu valor máximo, em $\tau = 0$ – onde a dinâmica é governada por duas fontes de ruído branco, $\xi_1(t)$ e $\xi_2(t)$. No último limite, o efetivo coeficiente de difusão, $S = D + Q x^2$, é dado nos estados estáveis $x = x_{\pm}$ por $S = D + Q = 0.1$. Neste caso de não baixa intensidade dos ruídos, a relação envolvendo o MFPT, na Eq.(4.68), consistentemente subestima o autovalor exato para pequenos valores de τ , ver Fig.(4.6a). Para $\tau \rightarrow \infty$ essa diferença torna-se menos detectável devido à redução do efetivo coeficiente de difusão, $S \xrightarrow{\tau \rightarrow \infty} D = 0.05$. De fato, para intensidades mais baixas $Q = D = 0.02$, ver Fig.(4.6b), até mesmo a diferença em $\tau = 0$ agora também desaparece.

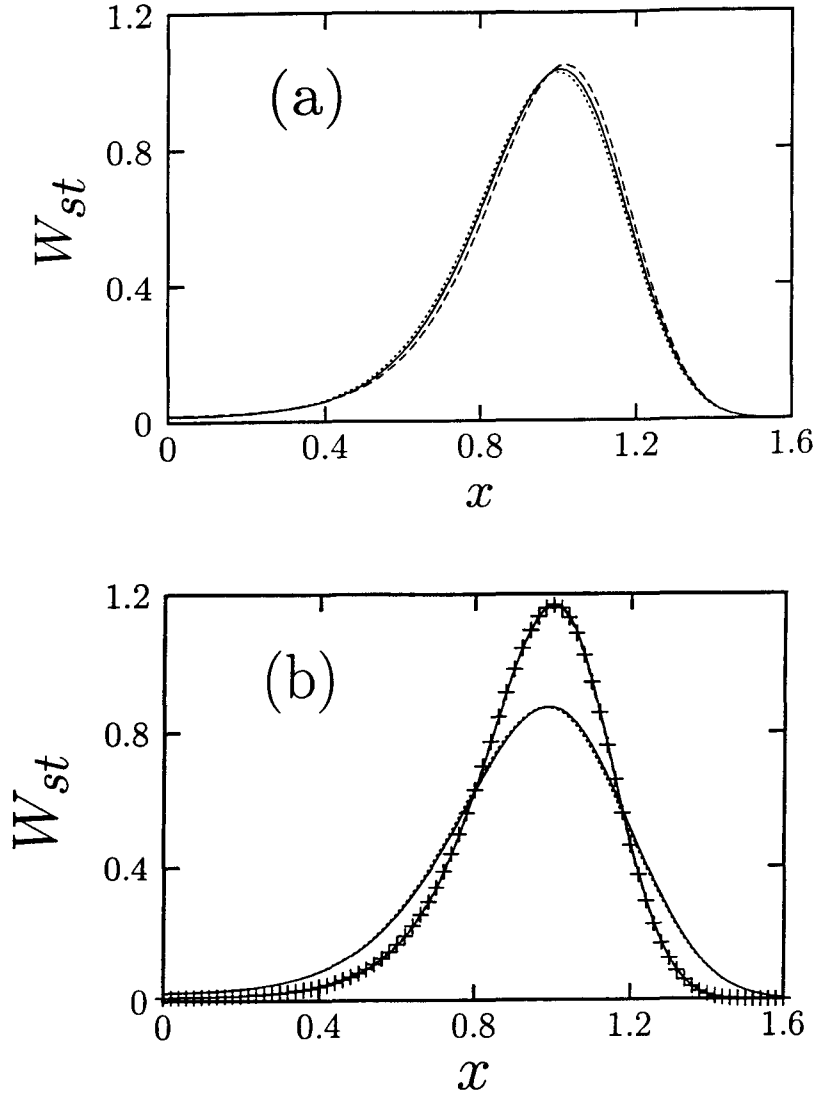


Fig. 4.5. (a) A densidade de probabilidade estacionária para valores positivos de x , $p(x, \tau) \equiv W_{st}(x, \tau) = W_{st}(x, \tau)$, é apresentada para intensidades de ruídos $Q = D = 0.05$. O tempo de correlação é $\tau = 1$. A linha sólida representa o resultado numérico (MCF), a linha tracejada representa a aproximação para pequenos valores de τ , enquanto a linha pontilhada é obtida usando a aproximação crossover, a qual concorda muito bem com a aproximação para grandes valores de τ . (b) O mesmo que em (a) para diferentes tempos de correlação: O resultado para $\tau = 10$ são dados através de cruzes para a aproximação crossover, e com linhas sólidas para os resultados numéricos. Os resultados da aproximação para grandes valores de τ , Eq.(4.55), concordam muito bem com os resultados numéricos para $\tau = 10$. As outras curvas representam os resultados para $\tau = 0.1$: os resultados numéricos (sólido) e a aproximação crossover (pontilhada); os resultados da aproximação obtida usando eliminação adiabática concorda muito bem com os resultados numéricos.

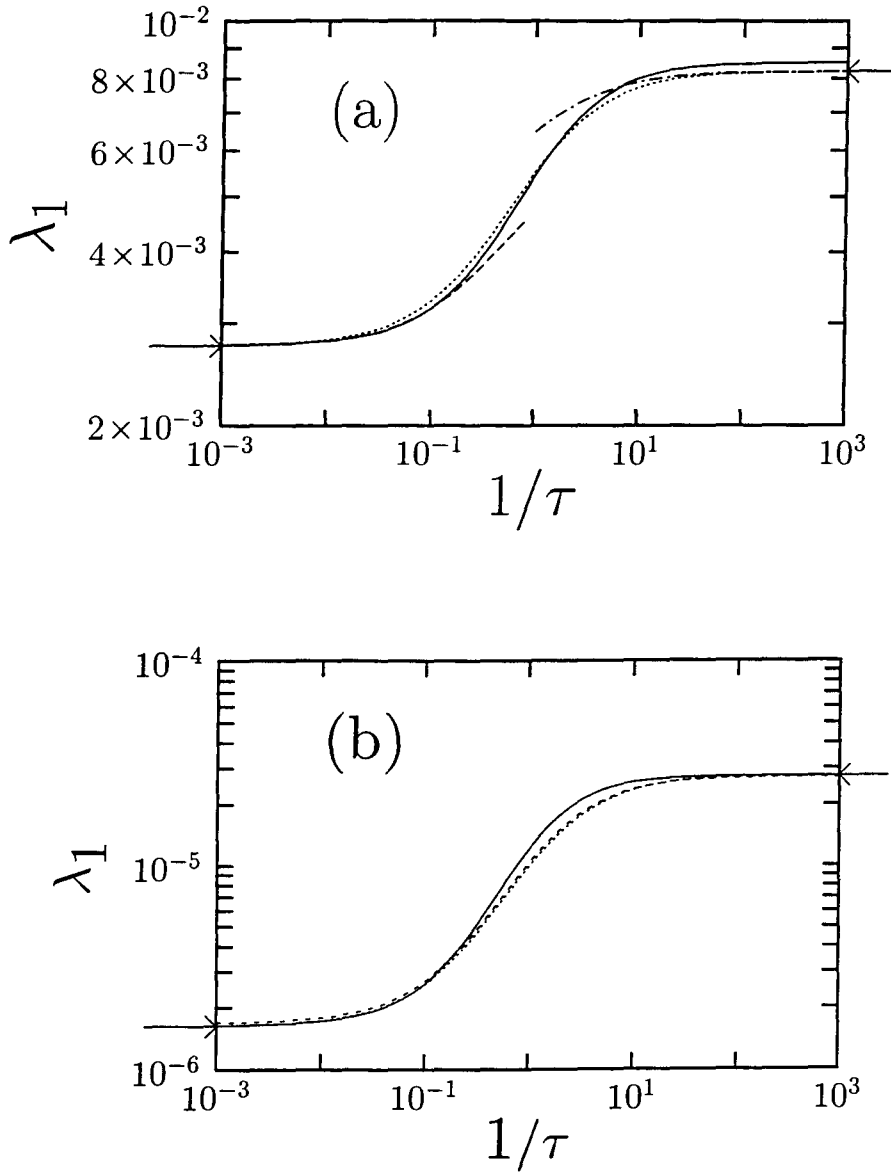


Fig. 4.6. (a) O primeiro autovalor diferente de zero, $\lambda_1(\tau)$, do operador de Fokker-Planck bidimensional, Eq.(4.64), versus o inverso do tempo de correlação. Os valores das intensidades dos ruídos são $Q = D = 0.05$. O resultado numérico é representado por linha sólida, enquanto a linha tracejada representa a aproximação válida para grandes valores de τ , Eq.(4.55). Os resultados da aproximação crossover são dados pela curva pontilhada. As setas indicam os limites exatos do inverso do MFPT em $\tau = 0$ e $\tau \rightarrow \infty$, respectivamente. (b) $\lambda_1(\tau)$ para intensidades dos ruídos $Q = D = 0.02$. O resultado numérico é representado pela linha sólida, e a aproximação crossover por uma linha pontilhada. A aproximação steepest descent para duas vezes o inverso do MFPT, usando a aproximação crossover, Eq.(4.71), é representada pela linha tracejada.

A aproximação crossover para duas vezes o inverso do MFPT é apresentado na Fig.(4.6) pela linha pontilhada. Ela aproxima suavemente os correspondentes resultados aproximados para pequenos valores de τ (linha traço-pontilhada na Fig.(4.6a)), e para grandes valores de τ (linha tracejada na Fig.(4.6a)). Ela conecta, com bastante concordância, o regime de valores intermediários do tempo de correlação $\tau \sim O(1)$. De fato, o erro máximo entre o resultado numérico preciso e a aproximação crossover ocorre próximo a $\tau = 1$. Na Fig.(4.6b), o erro máximo ocorre próximo a $\tau \sim O(1)$ e não excede 18 %. Apresentamos também na Fig.(4.6b), o resultado da aproximação crossover (linha tracejada), sem resolver a Eq.(4.32) numericamente, mas resolvendo-a explicitamente usando steepest descent. Fazendo isto em primeira ordem em D , obtemos

$$\begin{aligned} \lambda_{cross} \simeq \frac{2}{T} = \frac{\sqrt{2}}{\pi} & \left\{ 1 + D \frac{18 + 36R + 72\tau + 17(R + 2\tau)^2}{12(1 + 2\tau)^3(1 + R + 2\tau)} \right\}^{-1} \\ & \times \exp \left\{ -\frac{1}{D} \left[\frac{(R + 2\tau)(2\tau - 1) + \tau}{2(R + 2\tau)^2} - \frac{\tau}{2(R + 2\tau)} \right. \right. \\ & \left. \left. + \frac{[(R + 2\tau)^2 - (R + 2\tau)(2\tau - 1) - 2\tau] \ln(1 + R + 2\tau)}{2(R + 2\tau)^3} \right] \right\} . \quad (4.71) \end{aligned}$$

Capítulo 5

Laser de Corante com Ruído Quântico e de Bombeamento

Nós consideraremos um laser de corante monomodo com dois ruídos gaussianos: um ruído de bombeamento (colorido), e um outro quântico (branco) [1, 5, 22, 23, 24, 50]. Aplicaremos nossos resultados do Cap.(3) para estudar as propriedades estatísticas das flutuações da intensidade do campo elétrico para tempos de correlação do ruído de bombeamento arbitrários. Compararemos nossos resultados [5], aqueles obtidos usando derivadas funcionais (Aguado et. al.) [6, 14] e BFPE (Peacock et. al.) [7, 15, 16] (ver Cap.(2)), com os precisos resultados numéricos.

É conhecido na literatura que a equação para a intensidade do campo elétrico de um laser de corante [5, 25, 28], a qual descreve muito bem os resultados experimentais [22, 50], é dado por

$$\dot{\bar{I}} = 2(\bar{a} - \bar{B}\bar{I})\bar{I} + \frac{\bar{D}}{2} + 2\bar{I}\bar{\epsilon}(\bar{t}) + \sqrt{\bar{D}\bar{I}}\bar{\xi}_1(\bar{t}) , \quad (5.1)$$

onde o ruído de bombeamento $\bar{\epsilon}(\bar{t})$ é um ruído gaussiano exponencialmente correlacionado, i.e., ele satisfaz a Eq.(3.2)

$$\dot{\bar{\epsilon}} = -\frac{\bar{\epsilon}}{\bar{\tau}} + \frac{\sqrt{\bar{Q}}}{\bar{\tau}}\bar{\xi}_2(\bar{t}) . \quad (5.2)$$

As flutuações $\bar{\xi}_{1,2}(\bar{t})$ denotam ruídos gaussianos brancos não correlacionados, com valor médio zero, i.e., $\langle \bar{\xi}_i(\bar{t}) \rangle = 0$ e $\langle \bar{\xi}_i(\bar{t})\bar{\xi}_j(\bar{s}) \rangle = 2\delta_{ij}\delta(\bar{t} - \bar{s})$.

Valores reais do parâmetro de bombeamento $\bar{a}$, do parâmetro de saturação $\bar{B}$, e das intensidades dos ruídos $\bar{D}$ e $\bar{Q}$ do modelo do laser de corante [5, 22, 50], têm sido obtidos comparando resultados experimentais com simulações do modelo. Operando

com o laser bem acima do limiar ($\bar{a} \gg 1$), temos que um típico conjunto de parâmetros é: $\bar{a} = 0.7 \times 10^6 s^{-1}$, $\bar{B} = 0.114 \times 10^6 s^{-1}$, $\bar{D} = 8 \times 10^{-3} s^{-1}$, $\bar{Q} = 4.9 \times 10^3 s^{-1}$ e $\bar{\tau} = 5 \times 10^{-7} s$.

Adotaremos uma forma adimensional da equação do laser, ou seja, uma equação com variáveis e parâmetros adimensionais. Para isso, introduziremos o parâmetro de bombeamento adimensional a , fazendo $\bar{a} \longrightarrow a \bar{a}$ na Eq.(5.1). Em seguida fazemos as seguintes mudança de variáveis: $t = \bar{a} \bar{t}$, $\tau = \bar{a} \bar{\tau}$, $Q = \bar{Q}/\bar{a}$, $D = \bar{D}/\bar{a}^2$, $I(t) = (\bar{B}/\bar{a}) \bar{I}(\bar{t}/\bar{a})$, $\xi_i(t) = \bar{\xi}_i(\bar{t}/\bar{a})/\sqrt{\bar{a}}$, $i = 1, 2$, $\epsilon(t) = \bar{\epsilon}(\bar{t}/\bar{a})/\bar{a}$. Com isto as Eqs.(5.1) e (5.2) podem ser reescritas como

$$\dot{I} = 2(a - I)I + \frac{D}{2} + 2 I \epsilon(t) + \sqrt{D I} \xi_1(t) , \quad (5.3)$$

e

$$\dot{\epsilon} = -\frac{\epsilon}{\tau} + \frac{\sqrt{Q}}{\tau} \xi_2(t) , \quad (5.4)$$

respectivamente. Com a nova escala, os típicos valores para o tempo de correlação estão entre $\tau = 0.1$ e $\tau = 1$. Para o conjunto de parâmetros citado acima, o seu valor na nova escala é $\tau = 0.35$.

5.1 Densidade de Probabilidade Estacionária

Compararemos aqui a densidade de probabilidade estacionária da intensidade do campo do laser, $p(I, \tau)$, obtidas através de nossas aproximações descritas no Cap(3), bem como aquelas obtidas por Aguado [6, 14] e Peacock [7, 15, 16], ver Cap(2), com os resultados numéricos obtidos usando o método Matrix Continued Fraction [5, 25, 49]. Para encontrar a densidade de probabilidade estacionária, usando o método Matrix Continued Fraction, partimos, de maneira semelhante aos cálculos feitos no Cap.(4), da equação de Fokker-Planck bidimensional exata associada às Eqs.(5.3) e (5.4), i.e.,

$$\frac{\partial}{\partial t} p(I, \epsilon, t) = L_{FP} p(I, \epsilon, t) , \quad (5.5)$$

onde

$$L_{FP} = \mathbf{A} + \epsilon \mathbf{B} + \mathbf{L}_\epsilon , \quad (5.6)$$

$$\mathbf{A} = -\frac{\partial}{\partial I} [2(a - I) I + D] + D \frac{\partial^2}{\partial I^2} I \quad , \quad \mathbf{B} = -2 \frac{\partial}{\partial I} I , \quad (5.7)$$

$$\mathbf{L}_\epsilon = \frac{1}{\tau} \frac{\partial}{\partial \epsilon} \epsilon + \frac{Q}{\tau^2} \frac{\partial^2}{\partial \epsilon^2} . \quad (5.8)$$

Para resolver a Eq.(5.5), expandimos a densidade de probabilidade $p(I, \epsilon, t)$ em conjuntos completos $\Psi_m(\epsilon)$ e $L_n(\alpha I) \exp(-\alpha I)$, os quais são as funções de Hermite e Laguerre, respectivamente. O produto $\Psi_o(\epsilon) \Psi_m(\epsilon)$ são autofunções do operador $\mathbf{L}_\epsilon$, na Eq.(5.8), com autovalor m/τ . A densidade de probabilidade, $p(I, \epsilon, t)$, então é dada por

$$p(I, \epsilon, t) = \alpha \Psi_o(\epsilon) \sum_{m,n \geq 0} C_m^n L_n(\alpha I) \exp(-\alpha I) \Psi_m(\epsilon) , \quad (5.9)$$

onde α é uma constante arbitrária que será determinada posteriormente (variando-a pode-se mudar a velocidade de convergência [28]). No caso estacionário, a derivada temporal, na Eq.(5.5), é nula e a equação diferencial parcial para a densidade de probabilidade estacionária $p(I, \epsilon)$ resulta

$$L_{FP} p(I, \epsilon) = 0 . \quad (5.10)$$

A densidade de probabilidade estacionária da intensidade I , $p(I)$, segue da Eq.(5.10) e

$$p(I) = \int_{-\infty}^{\infty} p(I, \epsilon) d\epsilon . \quad (5.11)$$

Usando a expansão (5.9) e a ortogonalidade das funções de Hermite, pode-se [25] obter uma expressão para $p(I)$ em termos dos coeficientes C_o^n

$$p(I) = \alpha e_{-\alpha I} \sum_{n \geq 0} C_o^n L_n(\alpha I) , \quad (5.12)$$

onde os coeficientes C_o^n são obtidos usando Matrix Continued Fraction.

Usando os resultados do Cap.(3), com $f(x) = 2(a - x)x + D/2$, $g(x) = 2x$ e $h(x) = \sqrt{x}$, podemos obter as aproximadas equações de Markov para o sistema de Eqs.(5.3) e (5.4). Para $\tau < 1$

$$\dot{I} = \frac{1}{\tau\gamma(I, \tau)} \left\{ 2(a - I)I + \frac{D}{2} + \sqrt{D(4RI^2 + I)} \xi_1(t) \right\}, \quad (5.13)$$

onde

$$\gamma(I, \tau) = \frac{(1 + 4RI)(4\tau I^2 + 2I + \tau D)}{\tau [(8R + 4\tau)I^2 + 2I + \tau D]} - \frac{8RI(4I(a - I) + D)(I + \tau D)}{[(8R + 4\tau)I^2 + 2I + \tau D]^2}. \quad (5.14)$$

A densidade de probabilidade estacionária é dada pela Eq.(3.14) com

$$D_{eff} = \frac{D(I + 4RI^2)}{[\tau\gamma(I, \tau)]^2}, \quad (5.15)$$

e

$$\begin{aligned} \Phi(I, \tau) = & - \frac{1}{2} \int^I dx \frac{(-4x^2 + 4ax + D)(4\tau x^2 + 2x + \tau D)}{x[(8R + 4\tau)x^2 + 2x + \tau D]} + \\ & + 4 \int^I dx \frac{\tau R(-4x^2 + 4ax + D)^2(x + \tau D)}{[(8R + 4\tau)x^2 + 2x + \tau D]^2(1 + 4Rx)}. \end{aligned} \quad (5.16)$$

Para $\tau > 1$ temos que

$$\dot{I} = \frac{1}{2} \frac{(-4x^2 + 4ax + D)(4\tau x^2 + 2x + \tau D)}{x[(8R + 4\tau)x^2 + 2x + \tau D]} + \sqrt{DI} \xi_1(t). \quad (5.17)$$

A densidade de probabilidade estacionária de I é obtida da Eq.(3.14), com o potencial generalizado $\Phi(I, \tau)$ dado pelo primeiro termo do membro da direita da Eq.(5.16), e o coeficiente de difusão efetivo $D_{eff}(I, \tau) = D$. Para valores arbitrários de τ , a equação markoviana aproximada para a intensidade I , é dada pela aproximação crossover

$$\dot{I} = 2(a - I)I + \frac{D}{2} + \sqrt{ID_C(I, \tau)} \xi_1(t), \quad (5.18)$$

onde

$$D_C(I, \tau) = \frac{D[(8R + 4\tau)x^2 + 2x + \tau D]}{2(4\tau x^2 + 2x + \tau D)}. \quad (5.19)$$

A densidade de probabilidade estacionária é obtida pela Eq.(3.14) com o mesmo potencial generalizado $\Phi(I, \tau)$ da aproximação para grandes valores do tempo de correlação, $\tau > 1$, e o coeficiente de difusão dado por $D_{eff}(I, \tau) = I D_C(I, \tau)$.

Com a teoria de Aguado et. al. (A) para pequenos valores de τ , ver Eqs(2.24)–(2.25), e a teoria de Peacock et. al. (P), ou seja, BFPE (ver Eqs.(2.52)–(2.55)), obtemos as seguintes densidades de probabilidade estacionária:

$$p(I, \tau) = \frac{Z^{-1} \sqrt{I}}{\sqrt{D_{A,P}(I, \tau)}} \exp \left[\int_0^I \frac{2y(a-y) dy}{D_{A,P}(y, \tau)} \right], \quad (5.20)$$

onde

$$D_A(I, \tau) = DI \left(-8\tau RI^2 + 4RI + 1 - 2\tau RD \right), \quad (5.21)$$

para a teoria de Aguado et. al., e

$$D_P(I, \tau) = DI \left[1 + 2R \left(\frac{-4\tau(1-2\tau a)I^2 + 2(1-4\tau^2 a^2)I - \tau D(1+2\tau a)}{(1-4\tau^2 a^2 - 4\tau^2 D)} \right) \right] \quad (5.22)$$

segundo a aproximação de Peacock et. al. (BFPE). Esses efetivos coeficientes de difusão não são positivos quando I assume grandes valores. Entretanto, eles assumem valores positivos para $\tau \leq 1$. Em contraste, o efetivo coeficiente de difusão $D_{eff}(I, \tau)$, associado às nossas aproximações (para $\tau < 1$, $\tau > 1$ e a aproximação crossover), assumem valores não negativos para todo o domínio de I , i.e., $(0, \infty)$.

Os resultados para o laser de corante operando no limiar(threshold), $a = 0$, são apresentados na Fig.(5.1). Para $\tau = 0.1$, ambas as aproximações (Aguado e Peacock) concordam muito bem com os resultados numéricos, ver Fig.(5.1a). Nossa aproximação para pequeno valores de τ (eliminação adiabática) é apresentada na Fig.(5.1b), e a concordância com os resultados numéricos é qualitativamente a mesma das teorias de Aguado e Peacock, ver Fig.(5.1a). Na Fig.(5.1c) $\tau = 1.0$, o que está além do regime de validade das teorias de Aguado e Peacock ($D_A(I, \tau) < 0$ e $D_P(I, \tau) < 0$ para um largo e importante domínio da intensidade I). Com $\gamma(I, \tau = 1) > 0$, nossa aproximação usando eliminação adiabática, Eq.(5.13), ainda concorda razoavelmente com os resultados numéricos. A aproximação crossover concorda ainda melhor. Para $\tau = 10$, ver Fig.(5.1d), as aproximações para grandes valores de τ e crossover concordam muito bem entre si e com os precisos resultados numéricos.

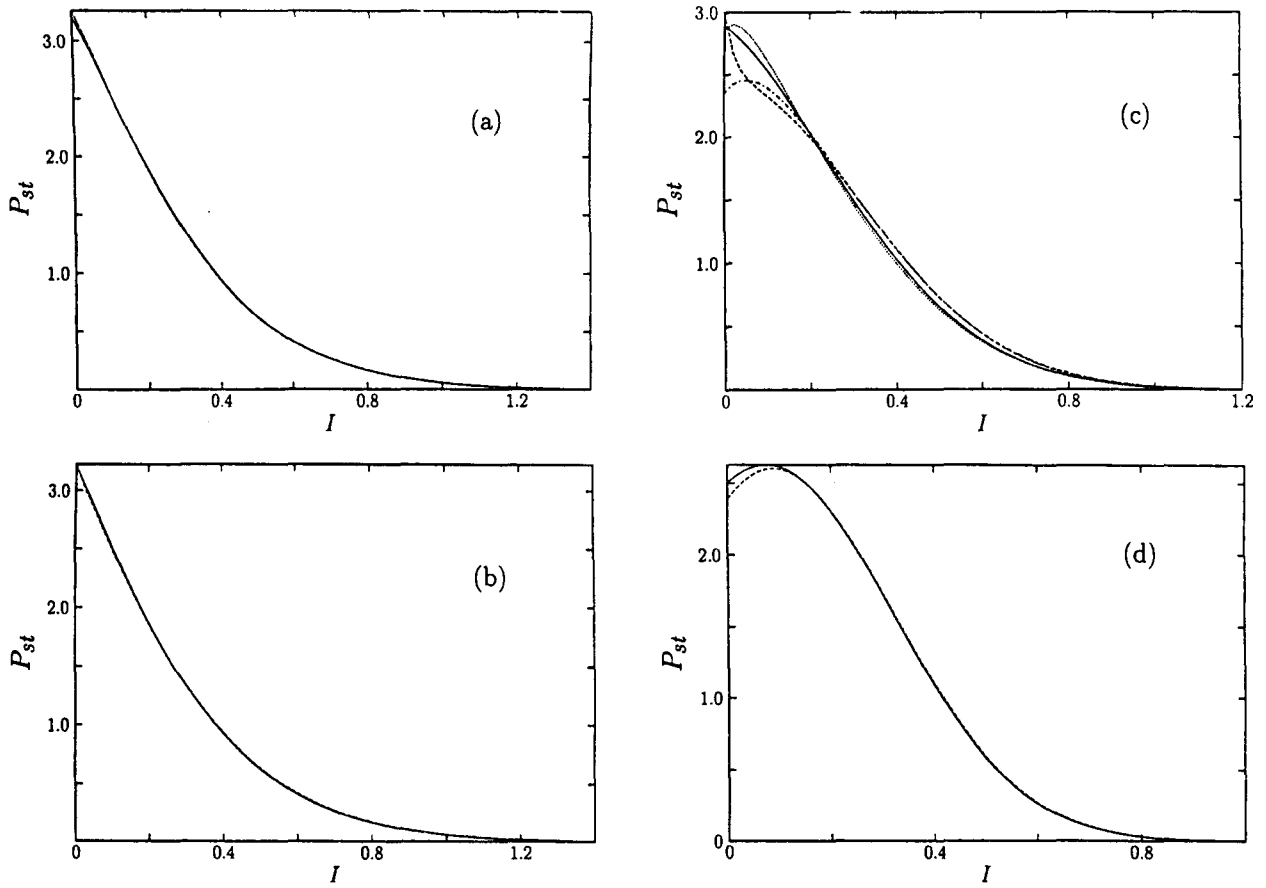


Fig. 5.1 A densidade de probabilidade estacionária $p(I, \tau)$ é apresentada para $a = 0$, $R = 1$ e $D = 0.1$ e diferentes valores do tempo de correlação τ . Na figura (a) comparamos os resultados de Peacock et. al. (tracejado), Aguado et. al. (pontilhado), para $\tau = 0.1$, com os resultados numéricos (linha sólida). A figura (b) apresenta os resultados de nossa aproximação obtida usando eliminação adiabática (tracejado), e os resultados numéricos (linha sólida) para $\tau = 0.1$. Na figura (c) comparamos a aproximação válida para pequenos valores de τ (linha tracejada), a aproximação válida para grandes valores de τ (traço-pontilhado) e a aproximação crossover (pontilhado), com os resultados numéricos (linha sólida), para $\tau = 1$. Para $\tau = 10$, a aproximação para grandes valores de τ (tracejado) é comparado com os resultados numéricos, na figura (d).

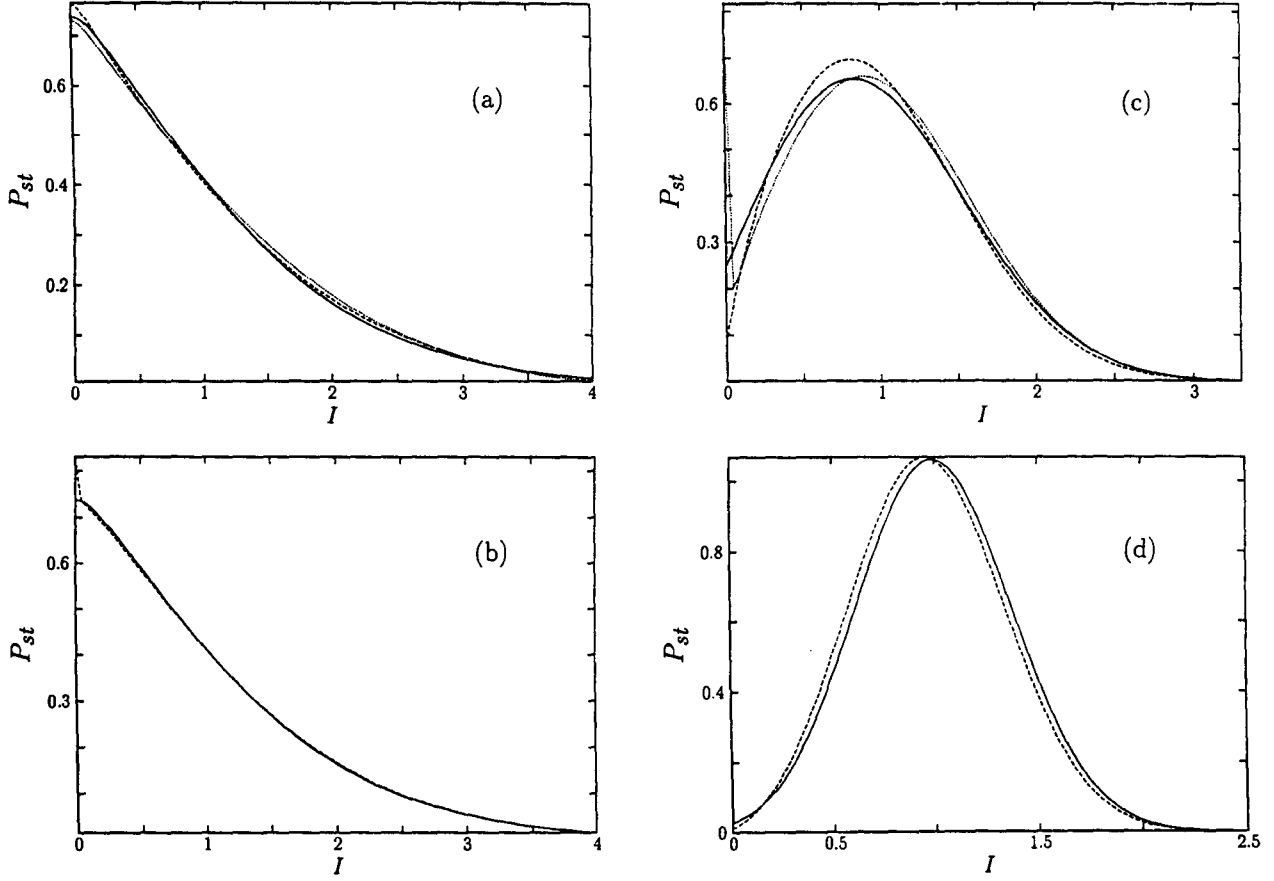


Fig. 5.2 A densidade de probabilidade estacionária $p(I, \tau)$ é apresentada para $a = 1$, $R = 5$ e $D = 0.1$ e diferentes valores do tempo de correlação τ . Na figura (a) comparamos os resultados de Peacock et. al. (tracejado), Aguado et. al. (pontilhado), para $\tau = 0.1$, com os resultados numéricos (linha sólida). A figura (b) apresenta os resultados de nossa aproximação obtida usando eliminação adiabática (tracejado), e os resultados numéricos (linha sólida) para $\tau = 0.1$. Na figura (c) comparamos a aproximação válida para pequenos valores de τ (linha tracejada), a aproximação válida para grandes valores de τ (traço-pontilhado) e a aproximação crossover (pontilhado), com os resultados numéricos (linha sólida), para $\tau = 1$. Para $\tau = 10$, a aproximação para grandes valores de τ (tracejado) é comparado com os resultados numéricos, na figura (d).

O comportamento acima do limiar, em $a = 1$, é apresentado nas Figs.(5.2a)–(5.2d). Em $\tau = 0.1$, a teoria de Aguado et. al. e a de Peacock et. al. são comparadas com os resultados numéricos na Fig.(5.2a). Há pequenos desvios próximo a $I \simeq 0$. A teoria de Peacock et. al. aproxima melhor os resultados numéricos, para grandes valores de I , do que a teoria de Aguado et. al. . Nossa teoria, baseada na eliminação adiabática da variável $\dot{u}$, é apresentada na Fig.(5.2b). A concordância é superior se comparada com a Fig.(5.2a), exceto para intensidades muito pequenas, $I \simeq 0$, onde ocorrem sistemáticos desvios. Essa diferença não é de origem numérica (ver parágrafo abaixo), e torna-se mais acentuada em $\tau = 1$, ver Fig.(5.2c). O comportamento para grandes valores do tempo de correlação é muito bem caracterizado dentro da aproximação para grandes valores de τ , Eq.(5.17), ver Fig.(5.2d).

Em termos gerais, encontramos boa concordância entre os resultados numéricos, para a densidade de probabilidade estacionária, e nossas aproximações, Eqs.(5.13), (5.17) e (5.18). O atrito efetivo $\gamma(I, \tau)$ assume valores positivos para um extenso intervalo do tempo de correlação $\tau \leq 1$. Seu comportamento assintótico, para pequenos valores de τ é dado por

$$\gamma(I, \tau) = \begin{cases} \frac{4RI}{(\tau+2R)} & , I \gg 1 \\ \frac{1}{\tau} - \frac{4RDI}{(\tau D+4I)} & , I \ll 1 \end{cases} \quad (5.23)$$

Os sistemáticos desvios entre os resultados obtidos através da eliminação adiabática e os resultados numéricos, acima mencionados, para valores da intensidade I muito pequenos, tem origem na quebra da condição (ii) (ver parágrafo abaixo da Eq.(3.10)), i.e., $[K(I, \tau)/\gamma(I, \tau)]'$ assume *grandes* valores em $I \approx 0$. Então a aproximação adiabática começa a perder a validade quando $I \rightarrow 0$, ver Figs.(5.2b) e (5.2c). Em termos operacionais do laser, a aproximação falha ao descrever as estatísticas dos fótons quando $I \rightarrow 0$.

Conclusão

Neste trabalho investigamos, por meios analíticos, a dinâmica estocástica de sistemas governados simultaneamente por ruído branco e colorido (não correlacionados), bem como por dois ruídos brancos correlacionados. Os resultados foram aplicados para o modelo de Landau-Ginsburg [3] (duplo poço de potencial simétrico) com a curvatura da barreira variando estocasticamente, e para a obtenção da densidade de probabilidade estacionária da intensidade do campo de um laser de corante governado por um ruído (colorido) de bombeamento, e flutuações quânticas (ruído branco) originadas das emissões espontâneas na cavidade. Em ambos sistemas, consideramos os regimes de pequenos, moderados e grandes valores do tempo de correlação. Nosso principal achado é certamente o uso do refinado processo não linear $\dot{u}$ na Eq.(3.5), o qual leva para diferentes esquemas de aproximações markovianas, para as propriedades estacionárias do fluxo governado pelo ruído colorido. Ao fazer isto, temos generalizado a teoria UCNA comumente usada [11, 48, 13, 43, 47] para situações com duas fontes de ruído. Essas aproximações markovianas fornecem resultados exatos para o oscilador harmônico, para todos os valores do tempo de correlação τ . A convencional teoria de UCNA é obtida, por nossa teoria, fazendo $D = 0$.

Para o caso do modelo de Landau-Ginsburg governado simultaneamente por aditivo e multiplicativo ruídos brancos correlacionados, apresentamos que a correlação pode induzir uma imensa supressão (ou com uma anti-correlação, $\rho < 0$, o oposto efeito de aumento) da taxa de transição $x_- \rightarrow x_+$ (por exemplo, seis ordens de magnitude na Fig.(4.3)). É claro que, de um ponto de vista matemático, poderíamos transformar o problema original (com duas fontes de ruídos brancos correlacionados) em um outro com apenas um único ruído, e então usar a abordagem padrão. Entretanto, tal procedimento obscureceria a física da dinâmica de escape, que ocorre no problema original.

Uma questão que surge aqui é se esse comportamento (supressão da taxa de transição) pode ocorrer também quando um dos ruídos é colorido. Entretanto, a mais relevante questão é se esse novo fenômeno pode ser implementado em sistemas físicos reais. Esperamos que este estudo venha a estimular os experimentais a pesquisar esse útil efeito tecnológico.

Tanto para o caso do duplo poço de potencial simétrico com flutuações da barreira exponencialmente correlacionadas, como para o caso do laser de corantes com ruído quântico e de bombeamento, nossos resultados concordam muito bem com os precisos resultados numéricos. Inspeccionando nossas figuras, e em especial, as Figs.(4.5a) e (4.5b), ficamos surpresos com o fato de que a aproximação crossover também fornece bons resultados para moderados valores do tempo de correlação $\tau \sim O(1)$, i.e., também no regime longe dos exatos comportamentos assintóticos, $\tau = 0$ e $\tau \longrightarrow \infty$. Para a densidade de probabilidade estacionária da intensidade do campo do laser de corante, nossas aproximações também fornecem, qualitativamente, corretas previsões neste regime de valores intermediários do tempo de correlação $\tau \sim O(1)$, onde nenhuma outra estimativa teórica existe no momento. Para muito pequenos valores de τ , nossa teoria fornece essencialmente as mesmas previsões qualitativas que a teoria de Aguado et. al. e a de Peacock et. al. .

Apêndice

Demostramos aqui que $\rho(t) = \delta(\mathbf{X}(t) - \mathbf{x})$ satisfaz a Eq.(2.4), ou seja,

$$\dot{\rho}(t) = \left(-\frac{\partial}{\partial x_i} f_i(\mathbf{x}, t) - \frac{\partial}{\partial x_i} g_i(\mathbf{x}, t) \Gamma_j(t) \right) \rho(t) . \quad (\text{A.1})$$

Prova: Aplicando o operador do membro da esquerda na função teste $V(\mathbf{X}(t)) \equiv V(X_1(t), \dots, X_N(t))$, obtemos

$$\begin{aligned} \int \frac{\partial \rho(t)}{\partial t} V(\mathbf{X}(t)) d^N X(t) &= \int \frac{\partial \delta(\mathbf{X}(t) - \mathbf{x})}{\partial t} V(\mathbf{X}(t)) d^N X(t) \\ &= \int \frac{\partial \delta(\mathbf{X}(t) - \mathbf{x})}{\partial X_i(t)} \dot{X}_i(t) V(\mathbf{X}(t)) d^N X(t) \\ &= - \int \delta(\mathbf{X}(t) - \mathbf{x}) \frac{\partial}{\partial X_i(t)} [\dot{X}_i(t) V(\mathbf{X}(t))] d^N X(t) \end{aligned}$$

Usando a Eq.(1.10) no membro direita, obtemos

$$\int \frac{\partial \rho(t)}{\partial t} V(\mathbf{X}(t)) d^N X(t) = - \frac{\partial}{\partial x_i} \{ [f_i(\mathbf{x}) + g_{ij}(\mathbf{x}) \Gamma_j(t)] V(\mathbf{x}) \} \quad (\text{A.2})$$

Voltando $V(\mathbf{x})$, no membro direito da Eq.(I.2), à representação integral, obtemos

$$\begin{aligned} \int \frac{\partial \rho(t)}{\partial t} V(\mathbf{X}(t)) d^N X(t) &= - \frac{\partial}{\partial x_i} [f_i(\mathbf{x}) + g_{ij}(\mathbf{x}) \Gamma_j(t)] \int \delta(\mathbf{X}(t) - \mathbf{x}) V(\mathbf{X}(t)) d^N X(t) \\ &= - \int \frac{\partial}{\partial x_i} \{ [f_i(\mathbf{x}) + g_{ij}(\mathbf{x}) \Gamma_j(t)] \delta(\mathbf{X}(t) - \mathbf{x}) V(\mathbf{X}(t)) \} d^N X(t) \\ &= \int \left\{ \left[-\frac{\partial}{\partial x_i} f_i(\mathbf{x}) - \frac{\partial}{\partial x_i} g_{ij}(\mathbf{x}) \Gamma_j(t) \right] \delta(\mathbf{X}(t) - \mathbf{x}) \right\} \\ &\quad \times V(\mathbf{X}(t)) d^N X(t) \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

Como $V(\mathbf{X}(t))$ é uma função teste arbitrária, segue a Eq.(2.4).

Bibliografia

- [1] Ver o recente review: P. Hänggi, P. Talkner e M. Borkovec, *Rev. Mod. Phys.*, **62**, 251 (1990); e o grande número de referências citadas lá.
- [2] N. G. van Kampem, *Phys. Rep.* **24C**, 171 (1976).
- [3] A. J. R. Madureira, P. Hänggi, V. Buonomano e W. A. Rodrigues Jr., *Phys. Rev.* **E51**, 3849 (1995).
- [4] R. Bartussek, A. J. R. Madureira e P. Hänggi, *Phys. Rev.* **E52**, 2149 (1995),
- [5] A. J. R. Madureira, P. Jung e P. Hänggi, *Phys. Rev.* **A53**, maio (1996).
- [6] M. Aguado and M. San Miguel, *Phys. Rev.* **A37**, 450 (1988).
- [7] E. Peacock-López, F. J. de la Rubia, B. J. West, K. Lindenberg, *Phys. Rev.* **A39**, 4026 (1989).
- [8] H. Dekker, *Phys. Lett.* **90A**, 26 (1982).
- [9] R. Fox, *Phys. Lett.* **94A**, 281 (1983); *Phys. Rep.* **48**, 179 (1978).
- [10] K. M. Rattray e A. J. McKane, *J. Phys.* **A24**, 1215 (1991).
- [11] P. Jung e P. Hänggi, *Phys. Rev.* **A35**, 4464 (1987).
- [12] P. Jung e P. Hänggi, *J. Opt. Soc. Am.* **135**, 979 (1988).
- [13] L. H'walisz, P. Jung, P. Hänggi, P. Talkner, e L. Schimansky-Geier, *Z. Phys.* **B77**, 471 (1989).
- [14] J. M. Sancho, M. San Miguel, S. L. Katz, e J. D. Gunton, *Phys. Rev.* **A26**, 1589 (1982).

- [15] K. Lindenberg, B. J. West, e G. P. Tsironis, Rev. Solid State Sci. **3**, 143 (1989).
- [16] E. Peacock-Lopez, F. J. de la Rubia, B. J. West, e K. Lindenberg, Phys. Lett. **A136**, 96 (1989).
- [17] D. L. Stein, R. G. Palmer, J. L. van Hemmen, e Ch. Doering, Phys. Lett. **A136**, 353 (1989).
- [18] D. L. Stein, Ch. Doering, R. G. Palmer, J. L. van Hemmen, e R. McLaughlin, J. Phys. **A23**, L203 (1990).
- [19] (a) C. R. Doering e J. C. Gadoua, Phys. Rev. Lett. **69**, 2318 (1992); (b) U. Zürcher e C. R. Doering, Phys. Rev. **E47**, 3862 (1993); (c) C. van den Broeck, ibid., **47**, 4579 (1993); (d) M. Bier e R. Dean Astumian, Phys. Rev. Lett. **71**, 1649 (1993).
- [20] (a) P. Reimann, Phys. Rev. **E49**, 4938 (1994); (b) P. Hänggi, Chem. Phys. **180**, 157 (1994); (c) P. Pechukas e P. Hänggi, Phys. Rev. Lett. **73**, 2772 (1994).
- [21] P. Hänggi, Phys. Lett. **78A**, 304 (1980).
- [22] S. Zhou, A.W. Yu, and R. Roy, Phys. Rev. **A34**, 4333 (1986).
- [23] A. Schenzle and R. Graham, Phys. Lett. **A98**, 319 (1983).
- [24] P. Jung, and H. Risken, Phys. Lett. **A103**, 38 (1984).
- [25] Th. Leiber, P. Jung, and H. Risken, Z. Phys. **B 68**, 123 (1987).
- [26] A. J. R. Madureira, P. Hänggi, e H. S. Wio, Phys. Lett. **A**, aceito para publicação.
- [27] A. J. R. Madureira, *Tese de Mestrado*, Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP), Instituto de Física (IFGW), (1988).
- [28] H. Risken, *The Fokker-Planck Equation*, Springer, Berlin, Heidelberg, New York, (1984).

- [29] C. W. Gardiner, *Handbook of Stochastic Methods*, segunda edição, Springer, Ser. Syn., Vol. 15, Springer, Berlin, Heidelberg (1985).
- [30] E. A. Novikov, Sov. Phys. **JEPT** **20**, 1290 (1965).
- [31] K. Namsrai, *Nonlocal Quantum Field Theory and Stochastic Quantum Mechanics*, Série: "Fundamental Theories of Physics", D. Reidel Publishing Co., Dordrecht (1986).
- [32] G. E. Uhlenbeck, L. S. Ornstein, Phys. Rev. **36**, 823 (1930).
- [33] H. A. Kramers, Physica (Utrecht) **7**, 284 (1940).
- [34] K. Binder e A. P. Young, Rev. Mod. Phys. **58**, 801 (1986).
- [35] J. Wong e C. A. Angell, *Glass: Structure by Spectroscopy* (Dekker, New York, 1976).
- [36] H. Frauenfelder e P. G. Wolynes, Science **229**, 337 (1985).
- [37] D. L. Stein, Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A. **82**, 3670 (1985).
- [38] R. Kubo, Rep. Prog. Phys. **29**, 255 (1966).
- [39] A. Einstein, Ann. Phys. (Leipzig) **29**, 549 (1905); N. Niquist, Phys. Rev. **42**, 105 (1928).
- [40] M. V. Smoluchowski, Ann. Physik **48**, 1103 (1915).
- [41] T. Fonseca, P. Grigolini, e P. Marin, Phys. Lett. **88A**, 117 (1982).
- [42] A. Fulinski and T. Telejko, Phys. Lett. A **A152**, 11 (1991).
- [43] H. S. Wio, P. Colet, M. San Miguel, L. Pesquera, e M. A. Rodriguez, Phys. Rev. **A40**, 7212 (1989).
- [44] J. F. Luciani e A. D. Verga, J. Stat. Phys. **50**, 567 (1988).
- [45] R. Graham, Z. Phys. **B26**, 281 (1977).

- [46] P. Hänggi, Z. Phys. **B75**, 275 (1989); in *Path Integrals from meV to MeV: Tutzing*, 1992; edited by H. Grabert, A. Inomata, L. S. Schulman, e U. Weiss (World Scientific, Singapore, 1993), pp. 289-301.
- [47] R. F. Fox, Phys. Rev. **A37**, 450 (1988); Th. Leiber, F. Marchesoni, e H. Risken, *ibid.* **38**, 983 (1988); L. Schimansky-Geier e Ch. Zülicke, Z. Phys. **B79**, 451 (1990); Li Cao, D. Wu, e X. Luo, Phys. Rev. **A47**, 571 (1993); T. G. Venkatesh e L. M. Patniak, Phys. Rev. **E48**, 2402 (1993).
- [48] Ver o recente "review": P. Hänggi e P. Jung, "Colored Noise in Dynamical Systems", Adv. Chem. Phys. **89**, 239 (1995); ver as referências lá citadas.
- [49] P. Jung, *Tese de Doutorado*, Universität Ulm, Institut für Physik, (1985).
- [50] S. Short, L. Mandel, and R. Roy, Phys. Rev. Lett. **49**, 647 (1982), veja também R. Roy, A. W. Yu and S. Zhu, in *Noise in Nonlinear Dynamical Systems*, edited by F. Moss and P. V. E. McClintock (Cambridge University Press, Cambridge, England, 1989), pp. 90 - 118