1^a Lista de Dinâmica Estocástica e Irreversibilidade-2/2023

Distribuições de probabilidade, cadeias de Markov e equações mestra

1) Em média 5% dos produtos vendidos por uma loja são devolvidos. Qual é a probabilidade de que, nas próximas quatro unidades vendidas deste produto, duas sejam devolvidas?

2) Qual é a probabilidade de fazer pelo menos 6 pontos numa jogada de 3 dados?

3) Considere uma distribuição binomial com $N = 60, p = 2/3$ e $q = 1 - p = 1/3$.
a) Trace um gráfico de $P(k)$ contra k/N.
b) Obtenha a distribuição gaussiana correspondente, $p_G(k)$, isto é com os mesmos valores de $\langle k \rangle$ e $\langle k^2 \rangle$ da binomial. Faça o gráfico de $p_G(k)$ contra k/N e compare os resultados do item anterior.
c) Repita os itens (a) e (b) para $N = 15$ e $N = 30$. Há modificações sensíveis?

4) Considere um íon paramagnético na presença de um campo magnético H. O íon é permitido estar apenas na direção paralela ou antiparalela ao campo magnético, onde em cada caso (estado microscópico), podemos associar uma energia $E_i = -H\sigma_i$, onde $\sigma_i = 1$ (paralelo) ou -1 (antiparalelo). A distribuição de probabilidade associada a cada estado é dada por $P(\sigma_i) = e^{-\beta E_i}/\zeta$, com $\beta = 1/(k_B T)$ sendo k_B a constante de Boltzmann.
a) Ache a expressão para $\zeta(\beta, H)$.
b) Calcule a energia média $\langle E_i \rangle$ do íon e faça um gráfico de $\langle E_i \rangle$ versus T.
c) Mostre que a magnetização do íon $m = \langle \sigma_i \rangle$ pode ser calculada a partir da expressão $m = k_B T \frac{\partial}{\partial H} \ln \zeta$. Encontre uma expressão para $m(T, H)$ e mostre que $m(T, 0) = 0$, resultado esperado para um material paramagnético.
d) Obtenha uma expressão para a variância $\chi = \langle \sigma_i^2 \rangle - \langle \sigma_i \rangle^2$.

5) Num caminho aleatório em uma dimensão, depois de N passos a partir da origem, a posição é dada por $x = \sum_{j=1}^{N} s_j$, onde $\{s_j\}$ é o conjunto de variáveis aleatórias independentes, identicamente distribuídas de acordo com a distribuição de probabilidades

$$P(s) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp[-\frac{(s-l)^2}{2\sigma^2}],$$

onde σ e l são constantes positivas.
a) Ache o deslocamento médio a partir da origem depois de N passos.
b) Qual é o valor do desvio quadrático médio da variável aleatória x?

6) Considere agora uma coleção de N íons paramagnéticos na presença de um campo magnético H. Da mesma forma que no exercício 6 cada íon é permitido estar apenas na direção paralela ou antiparalela ao campo magnético. Como ficariam as expressões para a magnetização M e variância "totais"? No limite de N muito grande, como seria a forma da distribuição de probabilidades $P_N(M)$ da variável aleatória M?

7) Uma cadeia de Markov é definida pela matriz estocástica T e pelo vetor probabilidade inicial P_0, dados por

$$T = \begin{pmatrix} 0 & 1/3 & 1 \\ 1/3 & 0 & 0 \\ 2/3 & 2/3 & 0 \end{pmatrix},$$

e

$$P_0 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Determine os autovalores e autovetores de T e, a partir deles, ache o vetor probabilidade P_ℓ em qualquer instante ℓ.

8) A matriz estocástica T_1 correspondentes a uma cadeia de Markov entre dois estados é tal que

$$T_1 = \begin{pmatrix} 1-b_1 & q_1 \\ b_1 & 1-q_1 \end{pmatrix},$$

para $0 \leq \ell \leq \tau/2$ e

$$T_2 = \begin{pmatrix} 1-b_2 & q_1 \\ b_2 & 1-q_1 \end{pmatrix},$$

para $\tau/2 \leq \ell \leq \tau$

Determine os autovalores e autovetores de T_1 e T_2 e, a partir deles, ache o vetor probabilidade P_ℓ em qualquer instante ℓ.

9) Considere a seguinte matriz de evolução W correspondente a um sistema de dois estados 1 e 2:

$$W = \begin{pmatrix} -b & q \\ b & -q \end{pmatrix}.$$

Determine as potências W^ℓ e a partir dela, obtenha as matrizes e^{tW} e $(zI-W)^{-1}$. Determine então o vetor probabilidade $P(t)$ e sua transformada de Laplace $\widetilde{P}(z)$, usando a condição inicial

$$P_0 = \begin{pmatrix} p_1 \\ p_2 \end{pmatrix}.$$

Determine $P(\infty) = \lim_{z\to 0} z\tilde{P}(z)$.

10) Considere um sistema com dois estados descrito pela matriz de transição do exercício anterior. Escolhendo

$$W_0 = \begin{pmatrix} -b & b \\ b & -b \end{pmatrix}.$$

e

$$V = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},$$

onde $\lambda = q-b$, determine os autovalores de W_0 e a partir deles, obtenha R. Obtenha então a expansão do vetor probabilidade estacionária P de W em potências de λ. Em seguida efetue o somatório.

11) Considere um sistema de dois estados 1 e 2, descrito pela matriz de evolução:

$$W_1 = \begin{pmatrix} -b_1 & q_1 \\ b_1 & -q_1 \end{pmatrix}$$

para $0 \leq t \leq \tau/2$ e

$$W_2 = \begin{pmatrix} -b_2 & q_2 \\ b_2 & -q_2 \end{pmatrix}$$

para $\tau/2 \leq t \leq \tau$.

Determine os autovalores e autovetores de W_1 e W_2 e, a partir deles, ache o vetor probabilidade $P(t)$ em qualquer instante t.

12) Considere um sistema de 3 estados em contato com um reservarório térmico com temperatura T ($\beta = 1/k_B T$) sob a presença de uma força não conservativa de magnitude f. Neste caso, as taxas de transição são definidas de acordo com a condição do balanço detalhado local $W_{ij} = \Gamma e^{-(\epsilon_i - \epsilon_j - \beta f)/2}$ quando $\{ij\} = \{21\}, \{32\}$ and $\{13\}$ e $W_{ij} = e^{-(\epsilon_i - \epsilon_j + \beta f)/2}$, caso contrário (para $i \neq j$). Encontre a distribuição de probabilidades estacionária para $\epsilon_1 = \epsilon_2 = \epsilon_3$ bem como a produção de entropia, obtida por meio da fórmula $\sigma = \sum_{ij} \{W_{ij} p_j - W_{ji} p_i\} \log \frac{W_{ij} p_j}{W_{ji} p_i} (i \neq j)$, is given by $\sigma = 2 k_B \Gamma \beta f \sinh(\beta f)/2$. Próximo ao equilíbrio termodinâmico, isto é ($\beta f << 1$), mostre que a produção de entropia pode ser escrita sob a forma $\sigma = L(\beta f)^2$, onde $L \geq 0$ corresponde ao coeficiente de Onsager e é estritamente não negativo.

13) Considere o segundo modelo de Schlögl, descrevendo reação química entre 3 espécies A, B and X, de acordo com as reações

$$2X + A[k_{-1}]k_1 3X, \qquad B[k_{-2}]k_2 X, \tag{1}$$

onde $k_{\pm 1}, k_{\pm 2}$ são constantes descrevendo a criação catalítica, criação e aniquilação espontâneas de X, respectivamente.

a) Mostre que a dinâmica de $p_n(t) = P(X(t) = n)$, para $n = 0, 1, 2, \ldots$ é dada pela equação mestra abaixo

$$\dot{p}_n = f_{n-1} p_{n-1} + g_{n+1} p_{n+1} - (f_n + g_n) p_n, \tag{2}$$

onde

$$f_n \frac{a k_1 n(n-1)}{V} + b k_2 V, \qquad g_n \frac{k_{-1} n(n-1)(n-2)}{V^2} + k_{-2} n. \tag{3}$$

b) Para V grande, mostre que a variável $x = X(t)/V$, onde $X(t) = n$ é governada pela equação abaixo

$$\frac{dx}{dt} = ak_1x^2 + bk_2 - k_{-1}x^3 - k_{-2}x = 0. \tag{4}$$

c) Fixando $ak_1 = k_{-2} = 1$, $bk_2 = 0.2$, e tomando o potencial químico de acordo com a expressão $\Delta\mu = \ln\left[(k_2ak_1)/(k_{-1}bk_{-2})\right]$, mostrar que a equação acima apresenta uma transição de fase descontínua. Encontre o ponto de transição.
d) Mostre que a produção de entropia σ é dada por $\sigma = (ak_1x^2 - k_{-1}x^3)\Delta\mu$.