PGF5219/4300427
2a Avaliação de Dinâmica Estocástica (2023)

Instruções gerais

1. As respostas deverão ser entregues até o dia 15/12/2023.
2. Todas as respostas deverão ser acompanhadas por justificativas e detalhamentos matemáticos cabíveis. A falta de justificativas implicará na não integralidade da questão.
3. A prova pode ser feita com consulta a livros, artigos, notas de aula e materiais adicionais, porém as respostas são **individuais**.

---

1) Abordagem linear para potência, eficiência e dissipação. (2,5)

Conforme vimos em sala de aula, sistemas descritos por equação de Fokker-Planck ou equação mestra (nas proximidades do equilíbrio) apresentam uma forma biquadrática para a potência, eficiência e dissipação, quando expressas em termos das forças termodinâmica. Mais especificamente dadas as expressões $\sigma = -(\overline{\dot{W}}_2 + \overline{\dot{W}}_1)/T$, onde $\overline{\dot{W}}_2 = -T(L_{21}X_1X_2 + L_{22}X_2^2)$ e $\overline{\dot{W}}_1 = -T(L_{12}X_1X_2 + L_{11}X_1^2)$, obtém-se $\sigma = L_{11}X_1^2 + (L_{12} + L_{21})X_1X_2 + L_{22}X_2^2$. Supondo X_2 fixo nos itens a seguir,

(a) Encontre a expressão X_{1mS} em que a dissipação é mínima, somente em função de L_{ij}'s e X_2.

(b) Considerando $\mathcal{P} = \overline{\dot{W}}_1$, encontre X_{1MP} em que $\mathcal{P}$ é máxima. Encontre $\mathcal{P}_{MP}$, somente em função de L_{ij}'s e X_2.

(c) Sendo $\eta = -\mathcal{P}/\overline{\dot{W}}_2$, encontre η_{MP} e σ_{MP}, somente em função de L_{ij}'s e X_2.

(d) Encontre X_{1ME} em que η é máxima, somente em função de L_{ij}'s e X_2, bem como $\eta_{ME}, \mathcal{P}_{ME}$ e σ_{ME}.

(e) Mostre que

$$\eta_{MP} = \frac{P_{MP}}{2P_{MP} - P_{ME}} \eta_{ME}. \tag{1}$$

Em seguida, obtenha as quantidades acima no regime ideal de operação.

(f) Mostre que quando $L_{12} = L_{21}$, obtém-se mais duas relações entre as quantidades optimizadas:

$$\eta_{MP} = \frac{\eta_{ME}}{1 + \eta_{ME}^2} \qquad \text{and} \qquad \frac{\mathcal{P}_{ME}}{\mathcal{P}_{MP}} = 1 - \eta_{ME}^2. \tag{2}$$

2) Potência e eficiência para um sistema de duas partículas brownianas interagentes (2,5)

Considere um sistema formado por duas partículas brownianas interagentes de massas iguais m, cada sujeita a uma força externa e estando em contato com um reservatório de temperatura T_i, $i = \{1, 2\}$. Suas posições e velocidades, x_i and v_i, evoluem de acordo com as equações abaixo

$$\begin{cases} \frac{\mathrm{d}v_1}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{m} F_1^*(x_1, x_2) + \frac{1}{m}\tilde{F}_1(t) - \gamma v_1 + \xi_1(t) \\ \frac{\mathrm{d}v_2}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{m} F_2^*(x_1, x_2) + \frac{1}{m}\tilde{F}_2(t) - \gamma v_2 + \xi_2(t) \\ \frac{\mathrm{d}x_1}{\mathrm{d}t} = v_1 \\ \frac{\mathrm{d}x_2}{\mathrm{d}t} = v_2 \end{cases} \tag{3}$$

onde $F_i^*(x_1, x_2) = -\partial V_i(x_1, x_2)/\partial x_i$, $\tilde{F}_1(t) = X_1 \cos(\omega t)$ e $\tilde{F}_2(t) = X_2 \cos(\omega t)$ e

$$\langle \xi_i(t) \rangle = 0 \qquad \left\langle \xi_i(t)\xi_j(t') \right\rangle = \frac{2\gamma k_B T_i}{m} \delta_{i.j} \delta(t - t')$$

(a) Considere $m = 1$. Em sua P1, a potência instantânea associada à partícula i, dada por $\dot{W}_i = -\tilde{F}_i(t) \langle v_i \rangle (t)$ e média (temporal) dada por

$$\overline{\dot{W}}_i = -\frac{\omega}{2\pi} \int_0^{2\pi/\omega} \tilde{F}_i(t) \langle v_i \rangle (t) dt. \tag{4}$$

fora calculada. Em seguida, você encontrou $\overline{\dot{W}}_1$ e $\overline{\dot{W}}_2$ e mostrou que podem ser escritas da seguinte forma $\overline{\dot{W}}_1 = -J_1 f_1$ e $\overline{\dot{W}}_2 = -J_2 f_2$, onde $f_i = X_i/T$. Considerando $T_1 = T_2 = T$, encontre os coeficientes de Onsager L_{11}, L_{12}, L_{21} e L_{22} e mostrem que eles satisfazem as relações de reciprocidade.

(b) Considere a eficiência $\eta = -\mathcal{P}/\overline{\dot{W}_2}$, onde $\mathcal{P} = \overline{\dot{W}_1}$. Faça gráficos de $\mathcal{P}$ e η versus X_1 para diferentes valores de interação κ. Compare seus valores de $\mathcal{P}_{MP}$ e η_{ME} com os mesmos obtidos a partir da Q1, expressos em termos dos coeficientes de Onsager.

(c) Obtenha a produção de entropia calculada sob um ciclo $\overline{\sigma}$ e mostre que $\overline{\sigma} \geq 0$.

(d) Obtenha a expressão para X_{1mS} em que $\overline{\sigma}$ é mínima e compare com o valor X_{1mP} em que $\mathcal{P} = 0$.

3) Abordagem sequencial para máquinas Brownianas (caso overdamped)(3,0)

Conforme discutimos em sala de aula, um protótipo simplficado de máquina térmica nanoscópica, consiste numa partícula browniana em contato com dois estágios, ambos de duração τ_1 e $\tau - \tau_1$, respectivamente, onde a cada estágio, ela é colocada em contato com um reservatório térmico e sujeita a uma força externa $f_i(t)$ diferente. Em cada estágio, o sistema, descrito pela equação de Langevin

$$\frac{dv_i}{dt} = -\gamma_i v_i + f_i(t) + \zeta_i(t), \tag{5}$$

com

$$\langle \zeta_i(t) \rangle = 0, \tag{6}$$

e

$$\langle \zeta_i(t)\zeta_{i'}(t') \rangle = 2\gamma_i T_i \delta_{ii'} \delta(t - t'). \tag{7}$$

tem equação equação de Fokker-Planck associada (discutida em sala de aula)

$$\frac{\partial P_i}{\partial t} = -\frac{\partial J_i}{\partial v} - f_i(t)\frac{\partial P_i}{\partial v}, \tag{8}$$

where J_i is the probability current

$$J_i = -\gamma_i v P_i - \frac{\gamma_i k_B T_i}{m}\frac{\partial P_i}{\partial v}. \tag{9}$$

(a) Mostre que, em cada estágio, a velocidade média $\langle v_i \rangle(t)$ e variância $b_i(t) = \langle v_i^2 \rangle(t) - \langle v_i \rangle^2(t)$ têm equações dadas por

$$\frac{d}{dt}\langle v_i \rangle(t) = -\gamma_i \langle v_i \rangle(t) + f_i(t), \tag{10}$$

e

$$\frac{d}{dt}b_i(t) = -2\gamma_i b_i(t) + \Gamma_i, \tag{11}$$

respectivamente, onde $\Gamma_i = 2\gamma_i k_{\scriptscriptstyle B} T_i/m$.

(b) Utilizando as condições de contorno apropriadas, o obtenha as expressões para $\langle v_1\rangle(t)$ e $\langle v_2\rangle(t)$ para uma força constante, isto é, $f_1(t) = X_1$ e $f_2(t) = X_2$ para $0 < t \leq \tau_1$ e $\tau_1 < t \leq \tau$, respectivamente.

(c) Considerando o caso anterior (força constante), obtenha o trabalho (potência) em cada estágio

$$\overline{\dot{W}}_1 = -\frac{1}{\tau}\int_0^{\tau_1} \langle v_1\rangle(t) f_1(t) dt, \tag{12}$$

$$\overline{\dot{W}}_2 = -\frac{1}{\tau}\int_{\tau_1}^{\tau} \langle v_2\rangle(t) f_2(t) dt. \tag{13}$$

(d) Compare suas expressões com aquelas obtidas por meio das expressões abaixo para $g_1(t) = g_2(t) = 1$

$$\begin{aligned}\overline{\dot{W}}_1 &= -\frac{m}{\tau\,(e^{\gamma\tau}-1)}\Bigg[X_1^2\Bigg((e^{\gamma\tau}-1)\int_0^{\tau_1} g_1(t)e^{-\gamma t}\,dt\int_0^{t} g_1(t')e^{\gamma t'}\,dt' + \int_0^{\tau_1} g_1(t)e^{-\gamma t}\,dt\int_0^{\tau_1} g_1(t')e^{\gamma t'}\,dt'\Bigg)\\ &+ X_1X_2\int_0^{\tau_1} g_1(t)e^{-\gamma t}\,dt\int_{\tau_1}^{\tau} g_2(t')e^{\gamma t'}\,dt'\Bigg], \end{aligned} \tag{14}$$

$$\begin{aligned}\overline{\dot{W}}_2 &= -\frac{m}{\tau\,(e^{\gamma\tau}-1)}\Bigg[X_2^2\Bigg(\int_{\tau_1}^{\tau} g_2(t)e^{-\gamma t}\,dt\int_{\tau_1}^{\tau} g_2(t')e^{\gamma t'}\,dt' + (e^{\gamma\tau}-1)\int_{\tau_1}^{\tau} g_2(t)e^{-\gamma t}dt\int_{\tau_1}^{t} g_2(t')e^{\gamma t'}\,dt'\Bigg)\\ &+ X_1X_2e^{\gamma\tau}\int_{\tau_1}^{\tau} g_2(t)e^{-\gamma t}\,dt\int_0^{\tau_1} g_1(t')e^{\gamma t'}\,dt'\Bigg]. \end{aligned} \tag{15}$$

(e) Faça gráficos de $\mathcal{P} = \overline{\dot{W}}_2$ e $\eta = -\mathcal{P}/\overline{\dot{W}}_1$ versus X_2, para diferentes assimetrias $\kappa = \tau_1/(\tau - \tau_2)$ supondo $\tau = 1, X_1 = 1$ e $\gamma = m = 1$.

4) Linear thermodynamics of a quantum dot under periodic drivings (4,0)

Um “quantum-dot” corresponde a um sistema simplificado no qual um nível de energia pode estar vazio ou ocupado por uma única partícula. Neste caso, a energia vale $\epsilon(t)$. Ele está em contato com um reservatório térmico a uma temperatura $T(t)$ e de partículas com potencial químico $\mu(t)$. As taxas de transição associadas à ocupação e desocupação, W_{10} e W_{01}, reproduzem a estatística de Fermi-Dirac e são dadas por $W_{10} = \Gamma y(t)$ e $W_{01} = \Gamma(1 - y(t))$, respectivamente, sendo $y(t)$ a distribuição de Fermi-Dirac $y(t) = [1+\exp((\epsilon(t) - \mu(t))/T(t))]^{-1}$ e Γ descreve a interação entre o “quantum-dot” e o reservatório. A matriz de transição $W(t)$ pode então ser escrita como

$$W(t) = \begin{pmatrix} -\Gamma y(t) & \Gamma(1-y(t)) \\ \Gamma y(t) & -\Gamma(1-y(t)) \end{pmatrix}.$$

Suporemos de agora em diante que

$$\frac{1}{T(t)} = \frac{1}{T_0} + F_T g_T(t), \tag{16}$$

$$\mu(t) = \mu_0 + T_0 F_\mu g_\mu(t), \tag{17}$$

e

$$\epsilon(t) = \epsilon_0 + T_0 F_\epsilon \gamma_\epsilon g_\epsilon(t), \tag{18}$$

onde $F_T << 1$ e $F_\epsilon << 1$, de forma que podemos utilizar a aproximação linear discutida em sala de aula. As funções $g_\epsilon(t)$ e $g_T(t)$ correspondem aos "drivings" na energia, temperatura e potencial químico dados por $g_\epsilon(t) = \sqrt{2}\sin(\omega t + \phi)$ e $g_T(t) = \sqrt{2}\sin(\omega t)$, respectivamente e ϕ corresponde a uma defasagem entre os "drivings" na energia e temperatura. Adote, por simplicidade, $F_\mu = 0$.

(a) Considere primeiramente o caso "sem driving", isto é, quando o sistema está em equilíbrio termodinâmico, com temperatura, potencial químico e energia dados por T_0, μ_0 e ϵ_0. Encontre os autovalores e autovetores da matriz de transição. Obtenha as probabilidades associadas ao caso de equilíbrio p_0^{eq} e $p_1^{eq} = 1 - p_0^{eq}$.

(b) Encontre a contribuição linear para a distribuição de probabilidades $p_0(t)$ e $p_1(t) = 1 - p_0(t)$.

(c) Encontre as expressões para os fluxos J_ϵ e J_T.

(d) Encontre a expressão para a potência média $\overline{\dot{W}}_d$ sobre um período $\mathcal{T}$ dado por $\omega = 2\pi/\mathcal{T}$.

(e) Encontre a expressão para a produção de entropia $\overline{\dot{\sigma}}$ sobre um período $\mathcal{T}$ e mostre que $\overline{\dot{\sigma}} \geq 0$.

(f) Obtenha os coeficientes de Onsager $L_{\epsilon,\epsilon}$, $L_{\epsilon,T}$, $L_{T,\epsilon}$ e $L_{T,T}$ e mostre que $4L_{\epsilon,\epsilon}L_{T,T} - (L_{\epsilon,T} + L_{T,\epsilon})^2 \geq 0$.