



Universidade Estadual de Maringá  
Centro de Ciências Exatas  
Departamento de Física

Trabalho de Conclusão de Curso

## **Estudos Sobre Equação de Langevin**

Acadêmico: Leonardo Ribeiro da Cunha

Orientador: Prof. Dr. Renio dos Santos Mendes

Maringá, 14 de dezembro de 2017



Universidade Estadual de Maringá  
Centro de Ciências Exatas  
Departamento de Física

Trabalho de Conclusão de Curso

## **Estudos Sobre Equação de Langevin**

Trabalho de conclusão de curso apresentado ao Departamento de Física, da Universidade Estadual de Maringá, como parte dos requisitos para obtenção do título de bacharel em Física

Acadêmico: Leonardo Ribeiro da Cunha

Orientador: Prof. Dr. Renio dos Santos Mendes

Maringá, 14 de dezembro de 2017

# Sumário

Agradecimentos	ii
Resumo	iii
Introdução	1
<b>1 Revisão de Probabilidade</b>	<b>3</b>
1.1 Probabilidade	3
1.2 Medidas de Centralidade e Momentos da Distribuição	4
1.3 Função Característica	6
1.4 Mudança de Variável	7
1.5 Distribuição Conjunta	8
1.6 Variáveis Independentes	9
1.7 Lei dos Grandes Números	10
1.8 Teorema Central do Limite	10
<b>2 Equação de Langevin</b>	<b>12</b>
2.1 Movimento Browniano	12
2.1.1 Velocidade	14
2.1.2 Posição	15
2.1.3 Energia	16
2.1.4 Solução de Langevin	16
2.2 Distribuição de Probabilidade	17
2.2.1 Velocidade	17
2.2.2 Posição	19
2.2.3 Evolução Temporal dos Momentos	19
2.3 Simulação do Movimento Aleatório	21
2.4 Conjunto de Equações de Langevin	22
2.5 Exemplo: Oscilador Harmônico	24
2.6 Exemplo: Circuito Elétrico	25
<b>Considerações Finais</b>	<b>28</b>
<b>Referências Bibliográficas</b>	<b>29</b>

# Agradecimentos

Agradeço, primeiramente, à minha família: minha mãe, meu pai, meu irmão e minha cunhada, por terem dado todo suporte para superar as dificuldades.

À Universidade Estadual de Maringá, por ter me dado a chance de ingressar no ensino superior.

A todo o corpo docente do Departamento de Física pelos ensinamentos ao longo desses quatro anos e, em especial, ao professor Breno Ferraz de Oliveira e ao meu orientador Renio dos Santos Mendes, por todo o ensinamento científico e por sempre proporcionarem boas conversas.

Um sincero agradecimento a todos os meus companheiros de turma, a todos os amigos e colegas que o curso de Física me ofereceu e, finalmente, a todos que participaram diretamente e indiretamente da minha formação. Agradeço a todos.

# Resumo

Este trabalho busca fazer uma breve revisão bibliográfica dos estudos de mecânica estatística fora do equilíbrio, focando em estudar a equação de Langevin. Para tanto, realizou-se uma revisão dos principais conceitos probabilísticos: variáveis aleatórias, função de probabilidade, medidas de centralidade, função característica, distribuição de variáveis independentes, lei dos grandes números e teorema central do limite. A segunda e última parte do trabalho faz uma apresentação detalhada da equação de Langevin. Nessa parte, é discutido o movimento aleatório das partículas, em especial, o movimento browniano. Nesse contexto, o trabalho expõe a distribuição de probabilidade das variáveis do problema, a evolução temporal dos momentos da distribuição e a generalização para um conjunto de equações de Langevin. O trabalho é finalizado com dois exemplos: oscilador harmônico e circuito elétrico.

**Palavras chave:** probabilidade, movimento aleatório, equação de Langevin.

# Introdução

Na Mecânica Estatística/Termodinâmica – um dos pilares da Física – há um aparato probabilístico que foca inicialmente nos estados microscópicos do sistema e, posteriormente, estende-se para a explicação dos estados macroscópicos.

Historicamente, o estudo da Termodinâmica foi desenvolvido baseando-se em observações de grandezas macroscópicas, como volume, pressão e energia. Além disso, na termodinâmica clássica, não há qualquer menção às partículas componentes (teoria atômica). Por sua vez, a Mecânica Estatística não ignora as partículas que constituem os sistemas. Em vez disso, ela conecta os dois níveis de descrição: microscópico (mecânico) e macroscópico (termodinâmico) [1].

De modo geral, uma abordagem estatística proporciona, assim, um amplo conjunto de ferramentas e métodos. É possível, por exemplo, evidenciar aspectos gerais empregáveis nos mais diferentes contextos, tal como em mecânica estatística e em sistemas complexos. De uma forma bastante global, a estatística está relacionada a estimativas, medidas de incertezas e previsões de eventos. Seu foco está na elaboração de modelos matemáticos, embutindo nesses modelos medidas de incerteza.

Conseqüentemente, no caso termodinâmico, a abordagem estatística analisa os microestados. Os microestados estão conectados com os graus de liberdade do sistema: as coordenadas de posição e momento no caso clássico; os números quânticos da função de onda no caso quântico. O conjunto dos microestados compatíveis com os valores das variáveis macroscópicas, constitui um macroestado. Neste contexto, há inúmeras possibilidades para o macroestado do sistema, esse conjunto de possibilidades do sistema pode ser referido como *ensemble* [1].

Deve-se, entretanto, admitir a grande dificuldade em prever quando ocorre cada microestado. Em geral, a Mecânica Estatística busca associar uma probabilidade de ocorrência dos diferentes microestados, predizendo resultados para os macroestados.

A Mecânica Estatística foi elaborada em torno do equilíbrio térmico. No equilíbrio térmico, o sistema é macroscopicamente estático (equilíbrio). Por outro lado, em grande proporção, os sistemas não se encontram em configurações estáticas, mas sim com aspectos dinâmicos, isto é, fora do equilíbrio. Dessa forma, pode-se considerar a mecânica estatística do equilíbrio e a mecânica estatística do não equilíbrio. Para a primeira, como já citado, a formalização dos *ensembles* é muito prática e descreve o sistema de forma

bem completa. Diferentemente do caso do equilíbrio, não existe uma formalização matemática simples, compacta e completa para o não equilíbrio. Os métodos de descrição do equilíbrio não são suficientes e novas técnicas são necessárias para lidar com variações temporais [1].

Em geral, as equações que regem o movimento microscópico das partículas apresentam reversibilidade temporal, fato que comumente não é verificado em formulações da mecânica estatística. Frequentemente, essa irreversibilidade macroscópica está ligada ao aumento de entropia, que por sua vez está conectada com processos dissipativos mecânicos. Uma maneira de implementar aspectos irreversíveis é via incorporação de comportamentos estocásticos no sistema, destruindo a informação e forçando a irreversibilidade [2].

A equação de Langevin, foco desse trabalho, é um exemplo de equação estocástica, ou seja, uma equação que depende de uma variável (termo) aleatória. É uma equação que foi inicialmente proposta para resolver o problema do movimento aleatório, em especial o movimento browniano. Vale mencionar que o modelo de Langevin foi construído tendo por base a mecânica clássica. De forma simples, a força resultante é a soma de uma força dissipativa e uma força dependente da variável aleatória tempo (termo estocástico). Langevin obteve resultados importantes para a época, além de trazer ferramentas matemáticas essenciais para as análises de sistemas fora do equilíbrio.

É importante salientar o grande sucesso da mecânica estatística, a qual, embora inicialmente proposta para estudar a termodinâmica, vê suas aplicações transbordarem atualmente para outras áreas da física e mesmo para outras áreas da ciência, sendo utilizada para estudar o comportamento dos supercondutores; crescimento, propagação e competição de seres vivos [3]; crescimento e decréscimo econômico de empresas e países [4]; análise de índices sociais (censo) de pequenas, médias e grandes cidades [5]; entre outros assuntos [6].

Neste trabalho, serão apresentados aspectos gerais da equação de Langevin. Para tanto, o trabalho foi dividido em duas partes: a primeira revisa conceitos básicos de probabilidade; a segunda discorre sobre as principais propriedades da equação de Langevin e exemplos de aplicação.

# Capítulo 1

## Revisão de Probabilidade

Os fenômenos do mundo real apresentam certo grau de aleatoriedade, às vezes alto, às vezes baixo. Sempre existe uma incerteza experimental na medição de grandezas físicas, assim, modelos teóricos devem levar em consideração o caráter aleatório intrínseco à natureza. Modelar matematicamente e determinar um intervalo de confiança para os resultados faz parte dos estudos estatísticos/probabilísticos [7].

À primeira vista, os fenômenos aleatórios não parecem ter padrões e, portanto, não haveria uma forma sistemática de analisar tais fenômenos. Porém, após um olhar mais cuidadoso, é possível evidenciar regularidades nos fenômenos aleatórios [2]. No lançamento de uma moeda, por exemplo, é sabido que existe a metade de chance de ela cair com a face “coroa” para cima. Esse resultado pode ser verificado após vários lançamentos de conjuntos de moedas, anotando a frequência com que ocorrem as coroas. Então, o que é possível é prever, dentro de um intervalo de confiança, os resultados mais prováveis para determinado fenômeno [7].

Este capítulo visa revisar certos conceitos familiares ao estudo de probabilidade.

### 1.1 Probabilidade

Os modelos nos quais se mensuram as chances de cada resultado são chamados de modelos probabilísticos ou modelos de probabilidade. O conceito de probabilidade é construído pelo quociente da frequência de um resultado específico e todas as tentativas. Outra forma de visualizar o conceito de probabilidade é associar um número não negativo às diferentes possibilidades, em que a soma de todos esses números resulte em um. Esse processo chama-se normalização. Logo, seja  $l$  um possível resultado de um fenômeno aleatório associado a probabilidade  $p_l$ ,

$$p_l \geq 0,$$



cuja normalização é dada por:

$$\sum_l p_l = 1.$$

Utilizando a linguagem técnica,  $l$  é chamado de variável aleatória e  $p_l$  é a massa de probabilidade da variável  $l$ .

Porém, nem sempre os problemas têm um conjunto discreto de resultados, ou seja, as possibilidades preenchem um intervalo contínuo de valores. Naturalmente, surge o conceito de variável aleatória contínua e de densidade de probabilidade. A densidade de probabilidade é uma função da variável aleatória, assume valores não negativos e sua integração sob todos os valores resulta em 1 (normalização no caso contínuo). Sendo  $x$  uma variável aleatória e  $\rho(x)$  a densidade de probabilidade de  $x$ , então:

$$\rho(x) \geq 0$$

e a normalização é

$$\int_{-\infty}^{\infty} \rho(x) dx = 1.$$

Existe uma diferença sutil na construção do conceito de probabilidade no caso discreto e no caso contínuo. Para variável discreta, para cada evento  $l$  existe uma probabilidade associada  $p_l$ , então, caso surja o interesse em mais de um resultado, basta somar as probabilidades associadas. Desse modo, é possível considerar  $l = 1, l = 2, \dots, l = n$  resultados de interesse, sabendo que  $l$  tem  $N$  possíveis resultados ( $N > n$ ). Então, a probabilidade de obter o resultado de interesse é:

$$P(l = 1, 2, 3, \dots, n) = \sum_{l=1}^n p_l.$$

No caso da variável aleatória contínua, em vez de perguntar a probabilidade de um valor ocorrer, é mais adequado questionar a probabilidade de certa vizinhança em torno de um valor ocorrer [7]. Isso decorre da troca da soma para a integral. Sendo  $x$  uma variável aleatória contínua  $x \in \mathbb{R}$ , a probabilidade de  $x$  ter seu resultado dentro de um intervalo  $[a, b)$  de possibilidades é:

$$P(a \leq x < b) = \int_a^b \rho(x) dx.$$

## 1.2 Medidas de Centralidade e Momentos da Distribuição

A função de probabilidade é o objeto matemático com a maior informação sobre o sistema, sendo que vários outros podem ser obtidos a partir dela [7]. As medidas de

centralidade muitas vezes oferecem informações valiosas sobre a natureza do problema, sendo que as mais conhecidas são a média, a mediana e a moda. Por sua vez, variância, assimetria e curtose estão relacionados a outros aspectos da função de probabilidade. Os próximos parágrafos resumirão as principais informações sobre as medidas de centralidade para variáveis contínuas e discretas.

A média, ou esperança matemática, é definida como:

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x \rho(x) dx \qquad \langle l \rangle = \sum_l l p_l.$$

A média é conhecida por ser o primeiro momento da distribuição de probabilidade. O  $n$ -ésimo momento da distribuição de probabilidade é definido como:

$$\langle x^n \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x^n \rho(x) dx \qquad \langle l^n \rangle = \sum_l l^n p_l.$$

Generalizando a operação de média para qualquer função matemática de uma variável aleatória, temos:

$$\langle f(x) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \rho(x) dx \qquad \langle f(l) \rangle = \sum_l f(l) p_l.$$

Nessas três últimas equações, a primeira expressão refere-se ao caso contínuo e a segunda à vertente discreta.

Uma medida da dispersão em relação à média é chamada de variância. A variância é a distância quadrática do conjunto dos dados em relação à média. Matematicamente:

$$\sigma^2 = \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2.$$

Algumas vezes, não se usa a variância e sim o desvio padrão ( $\sigma$ ). Entretanto, o desvio padrão é relacionado com a variância, o que acontece da seguinte forma:

$$\sigma = \sqrt{\langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle}.$$

A mediana ( $x_{1/2}$ ) divide os dados em duas partes iguais, de modo que existe metade da probabilidade de obter um valor menor que a mediana:

$$\int_{-\infty}^{x_{1/2}} \rho(x) dx = \frac{1}{2}.$$

A moda é o dado com maior frequência, facilmente evidenciado no pico da função de probabilidade. A quantidade de moda é usada para nomear a distribuição de probabilidade, usa-se *unimodal* para funções com um pico e *bimodal* para dois picos de mesma altura. Como a moda ocorre nos pontos de máximo, pode ser obtida por meio da seguinte

equação:

$$\left(\frac{d\rho}{dx}\right)_{x=x_{\text{moda}}} = 0.$$

O coeficiente de assimetria ( $\gamma_1$ ), como o próprio nome diz, mede a assimetria da distribuição de probabilidade e ele é definido como:

$$\gamma_1 = \frac{\langle(x - \langle x \rangle)^3\rangle}{\sigma^3}.$$

Um valor negativo sugere que a cauda esquerda da distribuição é "maior" que a direita, um valor positivo diz que a cauda direita é "maior" do que a esquerda, quando o coeficiente é zero a distribuição é aproximadamente simétrica.

A curtose ( $\gamma_2$ ) é a medida de achatamento da distribuição de probabilidade e indica o quão agudo é o pico da função, sendo definida como:

$$\gamma_2 = \frac{\langle(x - \langle x \rangle)^4\rangle}{\sigma^4}.$$

Existem três formas de classificar uma distribuição usando curtose, são elas: platicúrtica ( $\gamma_2 < 0$ ), mesocúrtica ( $\gamma_2 = 0$ ) e leptocúrtica ( $\gamma_2 > 0$ ). A platicúrtica tem o pico mais achatado que a gaussiana, a mesocúrtica tem pico semelhante ao da gaussiana e a leptocúrtica tem o pico mais alto.

### 1.3 Função Característica

Fazer algumas operações com a função de probabilidade pode ser bem trabalhoso. Dessa forma, a função característica pode ser usada como uma solução alternativa para os cálculos. A função característica é definida como a transformada de Fourier da função de probabilidade:

$$g(k) = \langle e^{ikx} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} \rho(x) dx.$$

Sua propriedade mais interessante é a fórmula de conexão com os momentos da distribuição, obtida por meio de uma expansão em série de Taylor:

$$g(k) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(ik)^n}{n!} \langle x^n \rangle, \quad (1.1)$$

em que pressupõe-se que todos os momentos  $\langle x^n \rangle$  existam.

A função característica também é usada na definição dos cumulantes estatísticos ( $\kappa_n$ ). Esta relação matemática é dada por:

$$g(k) = \exp\left(\sum_{n=1}^{\infty} \frac{(ik)^n}{n!} \kappa_n\right). \quad (1.2)$$

Tomando o logaritmo da equação (1.1), expandindo a mesma em série de Taylor e igualando ao logaritmo da equação (1.2), surge a relação entre os cumulantes estatísticos e os momentos da distribuição. Por exemplo, até a quarta ordem, temos:

$$\begin{aligned}\kappa_1 &= \langle x \rangle, \\ \kappa_2 &= \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2, \\ \kappa_3 &= \langle x^3 \rangle - 3\langle x \rangle \langle x^2 \rangle + 2\langle x \rangle^3, \\ \kappa_4 &= \langle x^4 \rangle - 4\langle x^3 \rangle \langle x \rangle - 3\langle x^2 \rangle^2 + 12\langle x^2 \rangle \langle x \rangle^3 - 6\langle x \rangle^4.\end{aligned}$$

Curiosamente, o primeiro cumulante coincide com a média e o segundo com a variância. Utilizando os cumulantes, é possível definir uma forma alternativa para o coeficiente de assimetria e curtose:

$$\begin{aligned}\gamma_1 &= \frac{\kappa_3}{\kappa_2^{3/2}}, \\ \gamma_2 &= \frac{\kappa_4}{\kappa_2^2}.\end{aligned}$$

## 1.4 Mudança de Variável

Certos problemas permitem coletar um tipo específico de dado, porém, a grandeza de interesse pode ser uma função matemática da variável obtida. Por exemplo, fisicamente, é muito mais fácil obter os dados de velocidade, enquanto que construir um detector de energia cinética é uma tarefa bem complicada. Assim, utilizando os dados de velocidade é possível obter a função de probabilidade da energia cinética, apenas recorrendo a uma troca de variável.

Deve ser dito que a probabilidade é definida a partir de uma integral, então a mudança de variável deve satisfazer todas as regras de cálculo da integral. Sem mais delongas, considerando  $x$  e  $y$  variáveis aleatórias, em que  $y = f(x)$ , dado  $\rho_1(x)$  como a densidade de probabilidade de  $x$ . A densidade de probabilidade  $\rho_2(y)$  é dada por:

$$\rho_2(y) = \int \delta(y - f(x)) \rho_1(x) dx.$$

Em particular, quando a função  $f(x)$  é unívoca, obtém-se:

$$\rho_2(y) = \rho_1(x) \left. \frac{dx}{dy} \right|_{x=f^{-1}(y)}.$$

## 1.5 Distribuição Conjunta

Distribuição conjunta é uma extensão do conceito de probabilidade para várias variáveis. Sendo  $x$  e  $y$  variáveis aleatórias definidas no intervalo  $[a, b]$  e  $[c, d]$ , respectivamente, então a função densidade de probabilidade é uma superfície e a probabilidade é o volume decorrente da integração:

$$P(a \leq x < b, c \leq y < d) = \int_a^b \int_c^d \rho(x, y) dx dy.$$

A função  $\rho(x, y)$  é chamada densidade de probabilidade conjunta, ela deve ser não negativa e normalizável, ou seja,

$$\begin{aligned} \rho(x, y) &\geq 0, \\ \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \rho(x, y) dx dy &= 1. \end{aligned}$$

A função de probabilidade conjunta é o objeto de maior informação do problema, pois ela acumula todas as informações estatísticas de  $x$  e  $y$ . Note que para calcular a probabilidade, a integração requer uma vizinhança em torno do par ordenado  $(x, y)$ . Porém, existe uma forma de analisar separadamente o comportamento de cada variável. Assim,  $\rho_X(x)$  corresponde à probabilidade da variável  $x$  independente do resultado de  $y$ , e  $\rho_Y(y)$  à probabilidade da variável  $y$  independente do resultado de  $x$ :

$$\begin{aligned} \rho_X(x) &= \int_{-\infty}^{\infty} \rho(x, y) dy, \\ \rho_Y(y) &= \int_{-\infty}^{\infty} \rho(x, y) dx. \end{aligned}$$

As funções  $\rho_X(x)$  e  $\rho_Y(y)$  são denominadas densidade de probabilidade reduzida.

A medida de dependência entre as variáveis  $x$  e  $y$  é dada pela correlação – também chamada covariância –  $C$ , definida por:

$$C = \langle (x - \langle x \rangle)(y - \langle y \rangle) \rangle = \langle xy \rangle - \langle x \rangle \langle y \rangle.$$

Sendo  $u$  e  $v$  funções dependentes de  $x$  e  $y$ , dada as transformações  $u = f_1(x, y)$  e  $v = f_2(x, y)$ , a distribuição de probabilidade conjunta de  $u$  e  $v$  é dada por:

$$\rho_{U,V}(u, v) = \iint \delta(u - f_1(x, y)) \delta(v - f_2(x, y)) \rho_{X,Y}(x, y) dx dy.$$

Assim como no caso de uma variável, se a mudança das variáveis  $x$  e  $y$  para as variáveis for unívoca, tem-se:

$$\rho_{U,V}(u, v) = \rho_{X,Y}(x, y) |J|,$$

em que  $|J|$  é o determinante da matriz jacobiana da transformação  $(x, y) \rightarrow (u, v)$ . Vale

dizer que, para mais de duas variáveis, basta usar a extensão natural das regras de cálculo. A densidade de probabilidade conjunta terá que continuar sendo não negativa e satisfazer a normalização.

## 1.6 Variáveis Independentes

Alguns sistemas são formados por uma infinidade de componentes independentes. Porém, a partir do resultado de cada uma das componentes, surge um padrão global. Saber analisar cada componente separadamente para obter o comportamento do sistema todo é de extrema importância para a ciência [6]. Variáveis aleatórias são ditas independentes quando o resultado de uma não altera diretamente o resultado das demais, por exemplo, jogar um dado e girar uma moeda são eventos completamente independentes o valor que sair no dado não alterará o giro da moeda e vice-versa.

Seja  $x_1, x_2, x_3, \dots, x_n$  variáveis aleatórias independentes com distribuições  $\rho_1(x_1), \rho_2(x_2), \rho_3(x_3), \dots, \rho_n(x_n)$ , respectivamente. A independência das variáveis implica em:

$$\rho(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n) = \rho_1(x_1)\rho_2(x_2)\rho_3(x_3)\dots\rho_n(x_n),$$

em que  $\rho(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n)$  é a distribuição conjunta das variáveis  $x_1, x_2, x_3, \dots, x_n$ . Isso conduz a que o  $n$ -ésimo momento do produto das variáveis seja igual ao produto do  $n$ -ésimo momento das variáveis:

$$\langle x_1 x_2 x_3 \dots x_n \rangle = \langle x_1 \rangle \langle x_2 \rangle \langle x_3 \rangle \dots \langle x_n \rangle.$$

Esse resultado leva à conclusão de que a covariância é nula para variáveis independentes, uma vez que a definição de covariância é o grau de dependência entre as variáveis.

A partir de agora, a preocupação será com a soma das  $n$  variáveis independentes. Nessa direção, considere  $y = \sum_i x_i$ ,  $G(k)$  a função característica de  $y$  e  $g_i(k)$  a função característica da variável  $x_i$ . Utilizando a definição de função de característica, a relação de  $G(k)$  com as funções  $g_i(k)$  é dada por:

$$G(k) = \prod_{i=1}^n g_i(k).$$

A seguir, suponha que as  $n$  variáveis são idênticas, ou seja, todas têm a mesma densidade de probabilidade. Consequentemente, conclui-se que a função característica  $G(k)$  será:

$$G(k) = [g(k)]^n.$$

Além disso, para o caso de variáveis independentes, o cumulante estatístico da soma das

variáveis é a soma dos cumulantes de cada variável:

$$\kappa_m = \sum_{j=1}^n \kappa_m^{(j)}.$$

E no caso de  $n$  variáveis idênticas, verifica-se que:

$$\kappa_m = n\kappa_m^{(j)}.$$

## 1.7 Lei dos Grandes Números

A lei dos grandes números formaliza matematicamente todo o conceito de probabilidade apresentado até aqui. No início desta parte do trabalho, o exemplo das moedas serviu para começar a discussão de probabilidade e a interpretação de probabilidade baseada em um grande número de observações. Portanto, a lei dos grandes números sustenta a interpretação frequentista de probabilidade [7].

Sejam  $x_1, x_2, x_3, \dots, x_n$  variáveis aleatórias independentes e identicamente distribuídas. A partir disso, a lei dos grandes números afirma que:

$$\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i \rightarrow a, \quad n \rightarrow \infty$$

sendo  $a = \langle x \rangle$  a média da distribuição.

A única condição para a validade do teorema é que a integral  $\int_{-\infty}^{\infty} |x|\rho(x) dx$  exista.

## 1.8 Teorema Central do Limite

O teorema central do limite é um dos mais importantes resultados estatísticos, sendo fundamental para a teoria de inferência estatística. Segundo esse teorema, à medida que aumenta o tamanho de uma amostra, a distribuição amostral da média tende a uma distribuição normal. Isso permite inferir a média e o desvio padrão amostral sem precisar realizar a difícil tarefa de amostrar a população toda [8].

Sem mais delongas, o teorema central do limite afirma que dada a variável aleatória  $z$ , definida por:

$$z = \frac{1}{\sqrt{nb}} \left( \sum_{i=1}^n x_i - na \right)$$

onde  $x_i$  é uma variável aleatória identicamente distribuída com média  $a$  e variância  $b$ . A distribuição de probabilidade de  $z$  será uma gaussiana, dada por:

$$\rho(z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-z^2/2}.$$

Para a validade desse teorema, é necessário garantir a existência da média  $a$ , da variância  $b$  e basicamente ausência de correlações entre as diversas variáveis  $x_i$ . Quando há violação de alguma dessas hipóteses, generalizações desse teorema devem ser consideradas [2].



# Capítulo 2

## Equação de Langevin

A equação de Langevin [9], proposta em 1908 pelo físico parisiense Paul Langevin (1872 – 1946), foi uma forma de resolver o problema do movimento browniano. Outra solução já tinha sido apresentada em 1905 por Einstein; porém, Langevin propôs sua teoria baseada em uma equação diferencial estocástica e no teorema da equipartição. Seu resultado concordou com o coeficiente de difusão obtido por Einstein. Finalmente, em 1913, o físico francês Jean Baptiste Perrin verificou experimentalmente os resultados obtidos por Einstein e Langevin.

### 2.1 Movimento Browniano

Movimento browniano é o tipo de movimento aleatório de uma pequena partícula sujeita às colisões com os átomos ou moléculas de um fluido. O primeiro a observar e relatar este tipo de movimento foi o botânico escocês Robert Brown que, por volta dos anos de 1827, fez observações acerca do movimento dos grãos de pólen imersos em água.

Porém, Robert descreveu apenas qualitativamente e nenhum modelo matemático foi proposto para resolver o problema do movimento aleatório. Anos mais tarde, Einstein se interessou pelo problema e, em 1905 (o ano do milagre), propôs uma explicação detalhada sobre o movimento do pólen, justificando que a trajetória era produto das várias colisões com as moléculas do líquido. Posteriormente, Langevin propôs o seu modelo na forma de uma equação diferencial estocástica.

Para entendermos qualitativamente a proposta de Langevin, vamos fazer algumas considerações. Segundo a mecânica newtoniana, quando uma partícula de massa  $m$  está em movimento em um meio composto por muitas outras (por exemplo, em um líquido ou em um gás), sua equação de movimento pode ser escrita como:

$$m \frac{dv}{dt} = F, \quad v = \frac{dx}{dt},$$

em que a força  $F$  é devido a interação com as partículas do meio. Deve estar claro

que, para obter a posição da partícula em função do tempo, devemos resolver o sistema de equações acopladas da partícula e das partículas do meio. Como é conhecido, não sabemos resolver esse sistema de equações e, portanto, algum esquema aproximado deve ser usado para obtermos alguma informação sobre o movimento da partícula. Note que aqui, por simplicidade de notação, estamos considerando o caso unidimensional.

Na direção de descrever o movimento da partícula no meio, Langevin empregou a equação de movimento:

$$m \frac{dv}{dt} = -\alpha v + F_a(t), \quad v = \frac{dx}{dt}. \quad (2.1)$$

O primeiro termo é uma força de atrito,  $\alpha$  é o coeficiente de fricção e  $F_a(t)$  é um força aleatória com as seguintes propriedades:

$$\langle F_a(t) \rangle = 0, \quad (2.2)$$

$$\langle F_a(t) F_a(t') \rangle = B \delta(t - t'), \quad (2.3)$$

em que  $\langle \dots \rangle$  representa a média sobre réplicas e  $B$  é uma constante positiva relacionada com a intensidade de  $F_a(t)$ . A equação (2.1), seguida pelas propriedades (2.2) e (2.3), é chamada de equação de Langevin.

Como percebemos, Langevin empregou  $-\alpha v + F_a(t)$  em substituição a  $F$ . A seguir, apresentamos uma uma visão qualitativa e abreviada justificando essa substituição. O termo  $-\alpha v$  representa uma força de atrito, pois qualitativamente (aproximadamente) esperamos que o número médio de partículas do meio colidindo com a partícula  $m$ , em um dado intervalo de tempo, é proporcional a sua velocidade em relação ao meio. Em particular, quando a partícula  $m$  está parada no meio ela sofre sucessivas colisões das partículas que compõem o meio. Em uma primeira aproximação, essas últimas colisões podem ser vistas como aleatórias, sendo representadas por  $F_a(t)$ . Em média, espera-se, devido a essa aleatoriedade, que  $F_a(t)$  seja nula, isto é,  $\langle F_a(t) \rangle = 0$  (equação (2.2)). Por outro lado, também em uma primeira aproximação, pode-se considerar que  $F_a(t)$  e  $F_a(t')$  com  $t \neq t'$  são independentes (não correlacionadas) e, nesse caso,  $\langle F_a(t) F_a(t') \rangle = \langle F_a(t) \rangle \langle F_a(t') \rangle = 0$ , justificando empregar (2.3).

Apenas rearranjando devidamente as constantes é possível escrever a equação (2.1) na forma:

$$\frac{dv}{dt} = -\gamma v + \zeta(t), \quad (2.4)$$

com  $\gamma = \alpha/m$ . O ruído  $\zeta(t) = F_a(t)/m$  é a variável estocástica dependente do tempo, cujas propriedades são:

$$\langle \zeta(t) \rangle = 0, \quad (2.5)$$

$$\langle \zeta(t) \zeta(t') \rangle = \Gamma \delta(t - t'), \quad (2.6)$$

em que  $\Gamma = B/m^2$ .

A equação do tipo Langevin é também chamada de equação diferencial estocástica, pois tem dependência em relação à variável estocástica. Portanto, a solução da equação de Langevin contém um certo grau de aleatoriedade, que pode ser relacionada a uma distribuição de probabilidade. Assim, resolver a equação de Langevin significa, pelo menos implicitamente, determinar uma distribuição de probabilidade da posição  $x$  para cada instante de tempo  $t$ .

### 2.1.1 Velocidade

Com o problema devidamente modelado, basta resolver a equação diferencial. Para isso, a equação diferencial será resolvida da forma padrão. Suponha uma solução da forma  $v(t) = u(t)e^{-\gamma t}$ , em que  $u(t)$  é uma função do tempo a ser determinada. Substituindo na equação (2.4), temos a equação diferencial mais simples de resolver:

$$\frac{du}{dt} = e^{\gamma t} \zeta(t).$$

A solução dessa equação é:

$$u(t) = u_0 + \int_0^t e^{\gamma t'} \zeta(t') dt'.$$

Retornando a variável velocidade, obtemos:

$$v(t) = v_0 e^{-\gamma t} + e^{-\gamma t} \int_0^t e^{\gamma t'} \zeta(t') dt',$$

em que  $v_0$  é a velocidade da partícula no tempo  $t = 0$ . A solução obtida é válida para qualquer função  $\zeta$ .

Tomando a média e utilizando as propriedades (2.5) e (2.6) do ruído, verificamos que:

$$\langle v \rangle = v_0 e^{-\gamma t}.$$

Utilizando esse resultado, a variação médio-quadrática da velocidade é:

$$\langle v^2 \rangle - \langle v \rangle^2 = \frac{\Gamma}{2\gamma} (1 - e^{-2\gamma t}).$$

No caso estacionário, quando houve a passagem de muito tempo, a média da velocidade é nula e, portanto, o segundo momento da distribuição de velocidade é dado por:

$$\langle v^2 \rangle = \frac{\Gamma}{2\gamma}.$$

Fazendo a conexão com a teoria cinética dos gases, a partir do teorema da equipartição,

determina-se a relação de  $\Gamma$  com os parâmetros físicos do sistema:

$$\Gamma = \frac{2\gamma k_B T}{m},$$

em que  $k_B$  é a constante de Boltzmann e  $T$  a temperatura absoluta do sistema. Portanto, a relação entre  $B$  e a temperatura é:

$$B = 2\alpha k_B T.$$

### 2.1.2 Posição

O próximo passo é resolver a equação para a posição  $x$  e obter todas as grandezas de interesse relacionados à posição. Determinar  $x$  é apenas um exercício de integração da velocidade  $v(t)$ , isto é,

$$x = x_0 + \int_0^t v(t') dt',$$

em que  $x_0$  é a posição da partícula no tempo  $t = 0$ . Substituindo a velocidade, deparamos com:

$$x = x_0 + v_0 \int_0^t e^{-\gamma t'} dt + \int_0^t e^{-\gamma t'} \int_0^{t'} \zeta(t'') e^{\gamma t''} dt'' dt'.$$

Por sua vez, trocando convenientemente a ordem de integração do último termo, chegamos a:

$$x = x_0 + v_0 \frac{1}{\gamma} (1 - e^{-\gamma t}) + \int_0^t \zeta(t'') e^{\gamma t''} \int_{t''}^t e^{-\gamma t'} dt' dt''.$$

Realizando a integração, a posição pode ser reescrita como:

$$x = x_0 + v_0 \frac{1}{\gamma} (1 - e^{-\gamma t}) + \frac{1}{\gamma} \int_0^t \zeta(t'') (1 - e^{\gamma(t''-t)}) dt''.$$

A partir desse resultado podemos obter algumas médias. A média da posição, utilizando a propriedade (2.5), do ruído é:

$$\langle x \rangle = x_0 + v_0 \frac{1}{\gamma} (1 - e^{-\gamma t}).$$

A seguir, utilizando esta média e a propriedade (2.6), é possível determinar o desvio médio quadrático, o qual é dado por:

$$\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = \frac{\Gamma}{\gamma^2} [t - \frac{2}{\gamma} (1 - e^{-\gamma t}) + \frac{1}{2\gamma} (1 - e^{-2\gamma t})].$$

Para tempos longos (regime estacionário), a equação anterior se reduz à:

$$\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = 2Dt,$$

em que  $D = \Gamma/(2\gamma^2)$ .  $D$  é chamado de coeficiente de difusão e foi obtido primeiramente por Einstein. Medidas experimentais do coeficiente de difusão foram utilizadas para determinação da constante de Boltzmann. A proposta de Einstein foi testada e verificada por Jean Baptiste Perrin, fato que fortaleceu a teoria atômica e molecular da matéria.

### 2.1.3 Energia

Devido às colisões da partícula suspensa com as moléculas do meio, há uma troca intensa de energia cinética da partícula e o meio. A partícula dissipa a energia devido à fricção com o meio, ao mesmo tempo em que troca energia cinética devido às colisões aleatórias. A taxa de energia transferida à partícula é a soma entre a taxa da energia dissipada e a variação da energia cinética devido à dinâmica estocástica.

Uma forma de estudar esse balanço é multiplicar a equação de Langevin pela velocidade  $v$  e, então, rearranjar a equação de forma que a taxa de variação de energia cinética apareça. Esse balanço energético será dado por:

$$\frac{d}{dt} \left( \frac{m}{2} v^2 \right) + v F_{dis} = v F_a,$$

em que  $F_{dis} = \alpha v$  é a força dissipativa.

Tomando a média de todos os termos, temos:

$$\frac{dE_c}{dt} + P_{dis} = P$$

dado que  $E_c = m\langle v^2 \rangle/2$  é a energia cinética,  $P_{dis} = \langle \alpha v^2 \rangle$  é a taxa de energia dissipada e  $P = \langle v F_a \rangle$  é a taxa que a energia é transferida para a partícula.

### 2.1.4 Solução de Langevin

O próprio Paul Langevin sugeriu uma forma alternativa para resolver sua equação [9], considerando a variável  $z = 2xv$ . Para essa variável, empregando a equação de Langevin (2.4), verifica-se que:

$$\frac{dz}{dt} = 2v^2 + 2x \frac{dv}{dt}.$$

Substituiu-se, a seguir, a própria equação de Langevin (2.4) na equação acima, para obter:

$$m \frac{dz}{dt} = 2mv^2 - \alpha z + 2x F_a(t).$$

Em seguida, ele considerou a média dessa equação e assumiu que  $\langle x F_a(t) \rangle = 0$  para encontrar:

$$m \frac{d}{dt} \langle z \rangle = 2m \langle v^2 \rangle - \alpha \langle z \rangle.$$

Pensando apenas no caso estacionário  $\frac{d}{dt}\langle z \rangle = 0$  e usando o teorema da equipartição,  $m\langle v^2 \rangle = k_B T$ , a média da variável  $z$  é dada por:

$$\langle z \rangle = \frac{2k_B T}{\alpha} = 2D.$$

A partir desse resultado e retornando à variável de interesse, a posição, é possível obter a variação do segundo momento da distribuição:

$$\frac{d}{dt}\langle x^2 \rangle = 2D.$$

Por fim, integrando esse último resultado, Langevin obteve em 1908 que

$$\langle x^2 \rangle - \langle x_0^2 \rangle = 2Dt,$$

resultado esse verificado no final da última sessão.

## 2.2 Distribuição de Probabilidade

Na primeira parte do trabalho, foi discutida a relevância da distribuição de probabilidade das variáveis. Nesse caso, é de suma importância determinar a distribuição da posição e da velocidade. A partir das distribuições de probabilidade do sistema dinâmico, é necessário verificar, sob regimes estacionários, se o sistema satisfaz a estatística de Maxwell-Boltzman. Após a verificação da teoria de Langevin para regimes estacionários, o próximo passo é determinar a evolução temporal de todos os momentos centrais da posição e velocidade.

### 2.2.1 Velocidade

Para obter a distribuição de probabilidade da velocidade, primeiro é necessário discretizar a equação de Langevin em intervalos de tempo  $\tau$ , dado  $t = n\tau$ . A equação de Langevin discretizada é dada por:

$$v_{n+1} = av_n + \sqrt{\tau\Gamma}\xi_n, \tag{2.7}$$

em que  $a = 1 - \tau\gamma$  e a variável aleatória tem as seguintes propriedades:

$$\langle \xi_j \rangle = 0, \quad \langle \xi_j \xi_k \rangle = \delta_{jk}.$$

Com um olhar mais atento, nota-se a possibilidade de escrever a equação (2.7) da seguinte forma:

$$v_n = \sum_{l=0}^{n-1} w_l,$$

em que  $w_l = a^l \sqrt{\tau\Gamma} \xi_{n-1-l}$  e  $v_0 = v(0) = 0$ .

A expressão acima para  $v_n$  é exatamente uma soma de variáveis independentes  $w_l$ . Assim, a função característica pode ser obtida por meio de:

$$g_n(k) = \langle e^{ikv_n} \rangle = \prod_{l=0}^{n-1} \langle e^{ikw_l} \rangle.$$

Assumindo que a distribuição de probabilidade para a variável aleatória  $\xi$  é gaussiana de média zero e desvio padrão 1, a função característica da variável  $w_l$  é uma gaussiana de média zero e variância  $a^{2l}\tau\Gamma$ , ou seja,

$$\langle e^{ikw_l} \rangle = e^{-a^{2l}\tau\Gamma k^2/2}.$$

Portanto, substituindo esse resultado no anterior, a função característica da velocidade será:

$$g_n(k) = e^{-b_n k^2/2},$$

com

$$b_n = \tau\Gamma \sum_{l=0}^{n-1} a^{2l} = \frac{1 - a^{2n}}{1 - a^2} \tau\Gamma.$$

Fazendo o uso da transformada de Fourier inversa dessa função característica, obtêm-se a distribuição de probabilidade da variável  $v_n$ :

$$\rho_n(v_n) = \frac{1}{\sqrt{2\pi b_n}} e^{-v_n^2/2b_n}.$$

Tomando os limites  $\tau \rightarrow 0$  e  $n \rightarrow \infty$  e empregando a relação  $n\tau = t$ , podemos verificar que a densidade de probabilidade da variável velocidade  $v$  é:

$$\rho(v, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi b(t)}} e^{-v^2/2b(t)}.$$

Por sua vez, o coeficiente  $b(t)$  é o  $b_n$  no limite do contínuo, dado por:

$$b(t) = \frac{\Gamma}{2\gamma} (1 - e^{-2\gamma t}) = \frac{k_B T}{m} (1 - e^{-2\gamma t}).$$

No caso estacionário, observa-se que a distribuição de velocidade acima tende à distribuição de velocidade de Maxwell-Boltzmann.

## 2.2.2 Posição

Usando o mesmo procedimento de discretização para a equação diferencial da posição, temos:

$$x_{n+1} = x_n + \tau v_n.$$

Utilizando a mesma técnica usada anteriormente e supondo  $x_0 = x(0) = 0$  e  $v_0 = v(0) = 0$ , a posição pode ser escrita como uma soma de variáveis aleatórias independentes:

$$x_n = \sum_{l=1}^{n-1} u_l,$$

em que

$$u_l = \frac{1}{\gamma}(1 - a^l)\sqrt{\tau\Gamma}\xi_{n-1-l}.$$

Visto que os  $u_l$ 's são variáveis estocásticas independentes, a função característica da posição  $x_n$  é:

$$G_n(k) = \langle e^{ikx_n} \rangle = \prod_{l=1}^{n-1} \langle e^{iku_l} \rangle.$$

Supondo novamente que a variável aleatória  $\xi$  siga distribuição gaussiana com média zero e desvio 1, então a variável  $u_l$  tem distribuição gaussiana de média zero e variância  $(1 - a^l)^2\tau\Gamma/\gamma^2$ . Logo, a função característica de  $u_l$  será:

$$G_n(k) = e^{d_n k^2/2},$$

em que

$$d_n = \frac{\tau\Gamma}{\gamma^2} \sum_{l=1}^{n-1} (1 - a^l)^2 = \frac{\tau\Gamma}{\gamma^2} \left( n - 2\frac{1 - a^n}{1 - a} + \frac{1 - a^{2n}}{1 - a^2} \right).$$

Empregando a transformada inversa de Fourier e o limite do contínuo, obtém-se a densidade de probabilidade da posição  $x$ , ou seja,

$$\rho(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi d(t)}} e^{-x^2/2d(t)},$$

em que

$$d(t) = \frac{\Gamma}{\gamma^2} \left[ t - \frac{2}{\gamma}(1 - e^{-\gamma t}) + \frac{1}{2\gamma}(1 - e^{-2\gamma t}) \right].$$

## 2.2.3 Evolução Temporal dos Momentos

Nessa sessão, o foco ficará na determinação da evolução temporal do primeiro e segundo momento da distribuição. A fim de demonstrar a generalidade dos resultados, em vez de



usar equação de Langevin (2.4), será usada uma espécie de generalização dela, dada por:

$$\frac{dx}{dt} = f(x) + \zeta(t), \quad (2.8)$$

em que  $f(x)$  é uma função genérica. Se  $f(x) = -\gamma x$  e  $x$  substituído por  $v$ , a equação de Langevin (2.4) seria recuperada. Além disso, observamos que a equação

$$m \frac{dv}{dt} = -\alpha v + F + F_a(t), \quad v = \frac{dx}{dt}, \quad (2.9)$$

no limite super amortecido (aquele que desconsidera o termo de massa vezes aceleração) se reduz a:

$$\frac{dx}{dt} = +\frac{F}{\alpha} + \frac{F_a(t)}{\alpha}.$$

Percebemos que se identificamos  $F/\alpha$  com  $f(x)$  e  $F_a(t)/\alpha$  com  $\zeta(t)$ , reobtemos a equação (2.8). Deve ser notado, ainda, que a equação (2.9) é uma generalização da equação (2.1) devido à incorporação da força externa  $F$ .

Por sua vez, propriedades de  $\zeta(t)$  são mantidas:

$$\langle \zeta(t) \rangle = 0,$$

$$\langle \zeta(t)\zeta(t') \rangle = \Gamma \delta(t - t').$$

A variável aleatória  $\zeta(t)$  é comumente chamada de ruído branco, pois a transformada de Fourier de  $\langle \zeta(0)\zeta(t) \rangle$  é independente da frequência  $w$ , ou seja,

$$\int e^{iwt} \langle \zeta(0)\zeta(t) \rangle dt = \Gamma.$$

Para obter a relação da evolução temporal dos momentos de  $x$ , a equação de Langevin precisará ser discretizada novamente, isto é,

$$x_{n+1} = x_n + \tau f_n + \sqrt{\tau \Gamma} \xi_n, \quad (2.10)$$

em que  $f_n = f(x_n)$  e  $\xi_n$  tem as propriedades:

$$\langle \xi_n \rangle = 0, \quad \langle \xi_n \xi_{n'} \rangle = \delta_{nn'}. \quad (2.11)$$

Visivelmente, a equação discreta de Langevin é uma equação de recorrência. Em particular, nota-se que  $x_{n+1}$  é independente de  $\xi_{n+1}$ , mas ele é dependente de  $\xi_n, \xi_{n-1}, \dots, \xi_0$ .

A equação de evolução para os momentos envolve, em algum sentido, tomar a média

da equação (2.10). Por exemplo, a média da equação (2.10) conduz a:

$$\langle x_{n+1} \rangle = \langle x_n \rangle + \tau \langle f_n \rangle.$$

A seguir, empregando  $\frac{\langle x_{n+1} \rangle - \langle x_n \rangle}{\tau} \rightarrow \frac{d}{dt} \langle x \rangle$  (o limite de  $\tau \rightarrow 0$ ), encontramos:

$$\frac{d}{dt} \langle x \rangle = \langle f(x) \rangle$$

que é a equação da evolução temporal da média de  $x$ .

Retornando à equação (2.10) e elevando ambos os lados ao quadrado, temos:

$$x_{n+1}^2 = x_n^2 + 2\sqrt{\tau}\Gamma\xi_n x_n + \tau\Gamma\xi_n^2 + 2\tau x_n f_n + \tau\sqrt{\tau}\Gamma\xi_n f_n + \tau^2 f_n^2.$$

Tomando a média dessa equação, desconsiderando termos da ordem de  $\tau^2$ , usando o fato de que  $x_n$  e  $\xi_n$  são independentes, e empregando que  $\langle \xi_n \rangle = 0$  e  $\langle \xi_n^2 \rangle = 1$ , obtemos a relação de recorrência para o segundo momento de  $x$ :

$$\langle x_{n+1}^2 \rangle = \langle x_n^2 \rangle + \tau\Gamma + 2\tau \langle x_n f_n \rangle + \tau^2 \langle f_n^2 \rangle.$$

Novamente, utilizando o limite do contínuo para aparecer a derivada temporal, verificamos:

$$\frac{d}{dt} \langle x^2 \rangle = \Gamma + 2 \langle x f(x) \rangle,$$

que é a equação de evolução temporal do segundo momento da distribuição de  $x$ .

Para determinar o momento de ordem  $l$  da distribuição de  $x$ , basta elevarmos a equação (2.10) à potência  $l$ -ésima e desprezarmos os termos de ordem superior em  $\tau$ . Esse processo nos conduz a:

$$x_{n+1}^l = x_n^l + l\sqrt{\tau}\Gamma\xi_n x_n^{l-1} + l\tau x_n^{l-1} f_n + \frac{1}{2}l(l-1)\tau\Gamma\xi_n^2 x_n^{l-2}.$$

Efetuando a média dessa igualdade e empregando a derivada do  $l$ -ésimo momento,  $\frac{\langle x_{n+1}^l \rangle - \langle x_n^l \rangle}{\tau} \rightarrow \frac{d}{dt} \langle x^l \rangle$ , recaímos em:

$$\frac{d}{dt} \langle x^l \rangle = l \langle x^{l-1} f(x) \rangle + \frac{1}{2}l(l-1)\Gamma \langle x^{l-2} \rangle,$$

que é a equação de evolução temporal do  $l$ -ésimo momento da distribuição de  $x$ .

## 2.3 Simulação do Movimento Aleatório

A equação de Langevin depende de uma variável estocástica e sua solução, em geral, não é conhecida quando  $f(x)$  é genérica. Nesse sentido, uma possibilidade para resolver

uma equação de Langevin é empregar a sua versão discreta (2.10) (conjuntamente com as equações (2.11)) e evolui-la numericamente com o uso de computadores. De fato, utilizando a equação (2.10), supondo que a variável aleatória  $\xi(t)$  siga qualquer distribuição de média zero e desvio um, sempre considerando a condição inicial  $x(0)$  e gerando os números aleatórios  $\xi_1, \xi_2, \xi_3, \dots$ , pode-se obter os valores de  $x_1, x_2, x_3, \dots$ .

Uma estimativa para a posição média da partícula ao longo do tempo pode ser obtida fazendo uma série de simulações, partindo inicialmente da mesma posição  $x(0)$  até a posição em um tempo  $t = n\tau$ . Com isso, temos a média:

$$\overline{x_n} = \frac{1}{L} \sum_{j=1}^L x_n^{(j)},$$

em que  $L$  é número de simulações realizadas,  $x_n^{(j)}$  é a posição da partícula no tempo  $t = n\tau$  da  $j$ -ésima simulação. De forma análoga, é fácil estimar o segundo momento da distribuição:

$$\overline{x_n^2} = \frac{1}{L} \sum_{j=1}^L (x_n^{(j)})^2.$$

A partir dos dois primeiros momentos da distribuição, estima-se a variância  $\overline{x_n^2} - (\overline{x_n})^2$ . Procedendo de maneira análoga, encontraremos qualquer momento de  $x_n$  que desejarmos. Além disso, empregando as  $L$  simulações, podemos construir um histograma dos  $x_n$ 's e, portanto, obter a distribuição de probabilidade  $P(x, t)$ . O número  $L$  de réplicas a ser considerado nesses cálculos deve ser tal que as médias se estabilizem com o grau de precisão desejado.

## 2.4 Conjunto de Equações de Langevin

Sistemas com mais de uma partícula são descritos por mais de uma equação, ou seja, cada equação de Langevin representará uma partícula. Assim, para obter o comportamento global do sistema, é necessário resolver um conjunto de equações diferenciais estocásticas. Para tais sistemas, pode haver interações entre as partículas. Logo, o conjunto de equações pode ou não ser acoplado. A equação de Langevin mais geral para um conjunto de  $N$  partículas é dada por:

$$\frac{dx_i}{dt} = f_i(x_1, x_2, \dots, x_N) + \zeta_i(t),$$

em que  $x_i$  é a posição da  $i$ -ésima partícula e  $\zeta_i(t)$  é a variável estocástica vinculada à  $i$ -ésima partícula com propriedades:

$$\langle \zeta_i(t) \rangle = 0,$$

$$\langle \zeta_i(t)\zeta_j(t') \rangle = \Gamma_i \delta_{ij} \delta(t - t').$$

Um caso dos mais simples é aquele em que a função  $f_i(x_1, x_2, \dots, x_N)$  é linear. Nesse caso, o conjunto de equações de Langevin pode ser escrito como:

$$\frac{dx_i}{dt} = \sum_{j=1}^N A_{ij}x_j + \zeta_i(t),$$

cuja forma matricial é:

$$\frac{d}{dt}X = AX + Z, \quad (2.12)$$

na qual  $X$  e  $Z$  são matrizes colunas com elementos  $x_i$  e  $\zeta_i$ , respectivamente, e  $A$  é a matriz quadrada com os elementos  $A_{ij}$ .

Na direção de resolver esta equação, considere inicialmente que  $M$  é a matriz formada pelos autovetores de  $A$ ,  $\Lambda$  a matriz quadrada formada pelos autovalores  $\lambda_k$  de  $A$  na diagonal principal e zero nas demais posições. Nesse caso, temos a relação:

$$M^{-1}AM = \Lambda.$$

A seguir, definimos a matriz:

$$R(t) = MD(t)M^{-1}, \quad (2.13)$$

em que  $D(t)$  é uma matriz diagonal e  $D_k(t) = e^{\lambda_k t}$  é o  $k$ -ésimo elemento da diagonal. Para essa matriz, empregando que  $dD(t)/dt = \Lambda D(t)$ , temos:

$$\frac{d}{dt}R(t) = M\Lambda D(t)M^{-1}. \quad (2.14)$$

Usando que  $M\Lambda = AM$ , essa última equação pode ser reescrita como:

$$\frac{d}{dt}R(t) = AR(t).$$

A solução da equação (2.12) pode ser agora obtida com ajuda de  $R(t)$ . De fato, ao calcularmos a derivada de

$$X(t) = R(t)X_0 + \int_0^t R(t-t')Z(t')dt' \quad (2.15)$$

e empregarmos as equações (2.13) e (2.14), verificamos que  $X(t)$  é a solução da equação (2.12) com a condição inicial  $X(0) = X_0$ . Com esse resultado em mãos vários outros podem ser obtidos. Por exemplo, a média de  $X(t)$  nos conduz à  $\langle X \rangle = R(t)X_0$  ao usarmos  $\langle Z(t) \rangle = 0$ . Outro exemplo é o da covariância das variáveis  $x_i$  e  $x_j$ , que leva à:

$$C = (X - \langle X \rangle)(X^\dagger - \langle X^\dagger \rangle) = \int_0^t R(t')\Gamma R^\dagger(t') dt',$$

empregando que  $\langle Z(t')Z^\dagger(t'') \rangle = \Gamma\delta(t' - t'')$  e que  $\Gamma$  é a matriz de elementos  $\Gamma_i\delta_{ij}$ .

Como última observação, os resultados para a evolução temporal dos momentos, obtidos na subseção (2.2.3), podem ser estendidos no caso de  $N$  variáveis. Por exemplo:

$$\frac{d}{dt}\langle x_i \rangle = \langle f_i \rangle, \quad (2.16)$$

$$\frac{d}{dt}\langle x_i x_j \rangle = \langle x_i f_j \rangle + \langle x_j f_i \rangle + \Gamma_i\delta_{ij}, \quad (2.17)$$

com  $i = 1, 2, \dots, N$  e  $j = 1, 2, \dots, N$ .

## 2.5 Exemplo: Oscilador Harmônico

O oscilador harmônico é um bom exemplo para começar, pois serve como uma primeira aproximação para sistemas em banho térmico. Sabe-se que uma boa forma de abordar a agitação térmica de um corpo é comparando ao movimento periódico de vários osciladores harmônicos [10]. Além disso, o hamiltoniano com dependência quadrática na posição e na velocidade, garante boa conectividade com o teorema da equipartição.

Pensando em um oscilador amortecido sujeito à ação de uma força aleatória, a equação diferencial do movimento é:

$$\frac{dv}{dt} = -kx - \gamma v + \zeta(t), \quad v = \frac{dx}{dt}, \quad (2.18)$$

em que  $k = K/m$  e  $\gamma = \alpha/m$ . Por sua vez, esse sistema de equações pode ser escrito na forma matricial:

$$\begin{bmatrix} dx/dt \\ dv/dt \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -k & -\gamma \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ v \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ \zeta \end{bmatrix},$$

ou de forma mais compacta:

$$\frac{d}{dt}X = AX + Z,$$

em que

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -k & -\gamma \end{bmatrix}, \quad X = \begin{bmatrix} x \\ v \end{bmatrix}, \quad Z = \begin{bmatrix} 0 \\ \zeta \end{bmatrix}.$$

Para empregarmos o procedimento do parágrafo anterior, começamos com os autovalores e autovetores da matriz dos coeficientes. Isso feito, nos leva a:

$$\lambda_1 = \frac{1}{2} \left( -\gamma + \sqrt{\gamma^2 - 4k} \right), \quad \lambda_2 = \frac{1}{2} \left( -\gamma - \sqrt{\gamma^2 - 4k} \right),$$

$$M = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ \lambda_1 & \lambda_2 \end{bmatrix}, \quad M^{-1} = \frac{1}{\lambda_1 - \lambda_2} \begin{bmatrix} -\lambda_2 & 1 \\ \lambda_1 & -1 \end{bmatrix}.$$

Assim, empregando  $R(t) = MD(t)M^{-1}$  (com  $D_k(t) = e^{\lambda_k t}$ ), temos:

$$R(t) = \frac{1}{\lambda_1 - \lambda_2} \begin{bmatrix} \lambda_1 e^{\lambda_2 t} - \lambda_2 e^{\lambda_1 t} & e^{\lambda_1 t} - e^{\lambda_2 t} \\ \lambda_1 \lambda_2 (e^{\lambda_2 t} - e^{\lambda_1 t}) & \lambda_1 e^{\lambda_1 t} - \lambda_2 e^{\lambda_2 t} \end{bmatrix},$$

que substituída na equação (2.15) rende as soluções da posição e velocidade:

$$x(t) = \frac{1}{\lambda_1 - \lambda_2} \int_0^t (e^{\lambda_1(t-t')} - e^{\lambda_2(t-t')}) \zeta(t') dt',$$

$$v(t) = \frac{1}{\lambda_1 - \lambda_2} \int_0^t (\lambda_1 e^{\lambda_1(t-t')} - \lambda_2 e^{\lambda_2(t-t')}) \zeta(t') dt'.$$

Elevando ao quadrado e tomando a operação de média dessas duas últimas expressões, obtemos os segundos momentos:

$$\langle x^2 \rangle = \frac{\Gamma}{2(\lambda_1 - \lambda_2)^2} \left( \frac{e^{2\lambda_1 t} - 1}{\lambda_1} + 4 \frac{e^{-\gamma t} - 1}{\gamma} + \frac{e^{2\lambda_2 t} - 1}{\lambda_2} \right),$$

$$\langle v^2 \rangle = \frac{\Gamma}{2(\lambda_1 - \lambda_2)^2} \left( \lambda_1 (e^{2\lambda_1 t} - 1) + 4k \frac{e^{-\gamma t} - 1}{\gamma} + \lambda_2 (e^{2\lambda_2 t} - 1) \right).$$

O regime estacionário desses segundos momentos (limite de tempos longos), nos fornece:

$$\langle x^2 \rangle = \frac{\Gamma}{2k\gamma} = \frac{k_B T}{K},$$

$$\langle v^2 \rangle = \frac{\Gamma}{2\gamma} = \frac{k_B T}{m},$$

resultados diretamente relacionados ao teorema da equipartição:

$$\frac{m}{2} \langle v^2 \rangle = \frac{K}{2} \langle x^2 \rangle = \frac{1}{2} k_B T.$$

## 2.6 Exemplo: Circuito Elétrico

Segundo os físicos Johnson e Nyquist, foi verificado experimentalmente que todos condutores apresentam flutuações estatísticas na carga e no potencial [11]. A origem dessa flutuação deve-se ao movimento espontâneo dos portadores de carga, visto que eles estão suscetíveis à agitação térmica dos átomos do condutor [12]. Portanto, a equação de Langevin pode ser usada para descrever tais sistemas. Na sequência, apresentamos detalhes de como os estudos de Johnson e Nyquist se desenvolveram.

Considere um circuito constituído por uma resistência  $R$ , uma indutância  $L$ , uma

capacitância  $C$  e flutuações aleatórias na tensão e na corrente, regido pelas equações:

$$\frac{dQ}{dt} = -\gamma Q + I + I_r(t), \quad (2.19)$$

$$L \frac{dI}{dt} = -\frac{1}{C} Q - RI + V_r(t). \quad (2.20)$$

A primeira equação descreve a variação temporal da carga como sendo resultado da dissipação de carga  $-\gamma Q$ , da corrente que passa pelo sistema  $I$  e da sua flutuação  $I_r(t)$ . A segunda equação mostra que o potencial armazenado no indutor, somado ao potencial entre as placas do capacitor e o potencial entre as extremidades da resistência é igual ao termo de flutuação do potencial. As variáveis aleatórias  $I_r(t)$  e  $V_r(t)$  são independentes temporalmente, ou seja,

$$\langle I_r(t) I_r(t') \rangle = A \delta(t - t'),$$

$$\langle V_r(t) V_r(t') \rangle = B \delta(t - t').$$

As equações (2.19) e (2.20) podem ser escritas em uma forma semelhante a equação (2.18):

$$\frac{dQ}{dt} = -\gamma Q + I + \zeta_1(t), \quad (2.21)$$

$$\frac{dI}{dt} = -\frac{1}{LC} Q - \frac{R}{L} I + \zeta_2(t). \quad (2.22)$$

Aqui,  $\zeta_1(t) = I_r(t)$  e  $\zeta_2(t) = V_r(t)/L$  são os ruídos, que têm as propriedades:

$$\langle \zeta_i(t) \rangle = 0,$$

$$\langle \zeta_i(t) \zeta_j(t') \rangle = \Gamma_i \delta_{ij} \delta(t - t'),$$

com  $i, j = 1, 2$ . As relações entre os coeficientes  $\Gamma_i$  e as constantes  $A$  e  $B$  são  $\Gamma_1 = A$  e  $\Gamma_2 = B/L^2$ .

Para calcular a equação de evolução temporal dos segundos momentos de  $Q$  e  $V$ , deveremos empregar um procedimento similar ao que foi feito na subseção (2.2.3). Mais precisamente, devemos empregar a equação (2.17) adaptada ao nosso caso. Isso feito, verificamos que:

$$\frac{d}{dt} \langle Q^2 \rangle = -2\gamma \langle Q^2 \rangle + 2 \langle QI \rangle + \Gamma_1,$$

$$\frac{d}{dt} \langle I^2 \rangle = -2 \frac{1}{LC} \langle QI \rangle - 2 \frac{R}{L} \langle I^2 \rangle + \Gamma_2.$$

$$\frac{d}{dt} \langle QI \rangle = -\frac{1}{LC} \langle Q^2 \rangle - \left( \frac{R}{L} + \gamma \right) \langle QI \rangle + \langle I^2 \rangle.$$

No caso estacionário, essas três últimas equações têm os seus lados esquerdos iguais a zero

e suas soluções são:

$$\langle QI \rangle = 0, \quad \langle Q^2 \rangle = \frac{\Gamma_1}{2\gamma}, \quad \langle I^2 \rangle = \frac{L\Gamma_2}{2R}.$$

Esses resultados podem ser relacionados com a temperatura do sistema via o teorema da equipartição. De fato, igualando a energia média armazenada no capacitor e a energia média armazenada no indutor à  $(1/2)k_B T$ , surgem os valores de  $\Gamma_1$  e  $\Gamma_2$ , isto é,

$$\Gamma_1 = 2C\gamma k_B T,$$

$$\Gamma_2 = \frac{2Rk_B T}{L^2}.$$

Lembrando que  $\Gamma_1 = A$  e  $\Gamma_2 = B/L^2$ , temos:

$$A = 2C\gamma k_B T,$$

$$B = 2Rk_B T,$$

que são as relações dos coeficientes de intensidade média dos ruídos  $I_r(t)$  e  $V_r(t)$  com a temperatura.



# Considerações Finais

Esse trabalho teve o objetivo de realizar uma breve revisão bibliográfica dos estudos de mecânica estatística fora do equilíbrio, focando em estudar a equação de Langevin. Para tanto, utilizou-se especialmente o livro: *Stochastic Dynamics and Irreversibility*, dos autores Tânia Tomé e Mário J. de Oliveira, além de outros materiais complementares ao estudo que podem ser encontrados na bibliografia deste trabalho.

Dentre os assuntos escolhidos para enfoque, temos os principais conceitos probabilísticos, como, variáveis aleatórias, função de probabilidade, medidas centrais, função característica, teorema central do limite, entre outros. Consideramos revisá-los visto que têm uma importância capital nos estudos explorados na sequência.

A segunda parte do trabalho faz uma apresentação da equação de Langevin. Consequentemente, discute-se nesse momento o movimento aleatório das partículas, em especial o movimento browniano. O trabalho expõe ainda a distribuição de probabilidade das variáveis do problema, a evolução temporal dos momentos da distribuição e a generalização para um conjunto de equações de Langevin. As duas seções finais apresentam exemplos da aplicabilidade: oscilador harmônico e circuito elétrico.

Espera-se que o trabalho seja útil especialmente para quem se interessa pelo assunto, de modo a auxiliar no aprofundamento dos estudos de mecânica estatística do não equilíbrio.

# Referências Bibliográficas

- [1] S. Salinas, *Introdução a física estatística*. EdUSP: São Paulo, 2013.
- [2] T. Tomé, M. J. de Oliveira, *Stochastic dynamics and irreversibility*. Cham: Springer, Nova York, 2015.
- [3] N. Boccara, *Modeling complex systems*. Springer Science and Business Media, Nova York, 2010.
- [4] P. K. Janert, *Data Analysis with Open Source Tools: A Hands-on Guide for Programmers and Data Scientists*. O'Reilly Media, Inc., 2010.
- [5] L. G. A. Alves, H. V. Ribeiro, E. K. Lenzi, R. S. Mendes, “Distance to the scaling law: a useful approach for unveiling relationships between crime and urban metrics,” *PLoS ONE*, vol. 8, p. e69580, 2013.
- [6] J. Kwapien, and S. Drożdż, “Physical approach to complex systems,” *Physics Reports*, vol. 515, p. 115-226, 2012.
- [7] S. M. Ross, *Introduction to probability models*. Academic Press, Amsterdã, 2014.
- [8] G. Casella, and R. L. Berger, *Statistical inference*. Pacific Grove, CA: Duxbury, 2002.
- [9] D. S. Lemons, A. Gythiel, “Paul Langevin’s 1908 paper “on the theory of Brownian motion”[“Sur la théorie du mouvement brownien,” *C. R. Acad. Sci. (Paris)* 146, 530–533 (1908)], ” *American Journal of Physics*, vol. 65, p. 1079-1081, 1997.
- [10] G. G. Gomes, *Sistemas de osciladores acoplados em thermofield dynamics*. Tese de Doutorado, Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, Brasil, 2013.
- [11] J. B. Johnson, “Thermal agitation of electricity in conductors,” *Physical Review*, vol. 32, p. 97-109, 1928.
- [12] H. Nyquist, “Thermal agitation of electric charge in conductors,” *Physical Review*, vol. 32, p. 110-113, 1928.