

Taxa de Kramers para Sistemas Estocásticos com Ruído Multiplicativo

Sara C. Q. Valente,¹ Rodrigo C. L. Bruni²

PPG-CompMat/UERJ, Rio de Janeiro, RJ

Daniel G. Barci³

IF/UERJ, Rio de Janeiro, RJ

Zochil G. Arenas⁴

IME/UERJ, Rio de Janeiro, RJ

Resumo. Neste trabalho apresentam-se resultados teóricos e numéricos referentes ao cálculo da taxa de Kramers para sistemas estocásticos com ruído multiplicativo. Trabalha-se no âmbito de uma prescrição geral do cálculo estocástico, que inclui as interpretações mais usadas na integração estocástica. A expressão encontrada para a taxa de Kramers vai permitir o estudo de fenômenos particulares de sistemas com ruído, como a ressonância estocástica.

Palavras-chave. Taxa de Kramers, Equações diferenciais estocásticas com ruído multiplicativo, Ressonância Estocástica

1 Introdução

Processos de difusão definidos através de equações diferenciais estocásticas (SDEs) têm-se tornado uma ferramenta matemática importante para descrever a dinâmica de vários fenômenos [2, 3]. A equação básica para definir estes sistemas em uma dimensão, também conhecida como equação de Langevin, é dada por

$$\frac{dx}{dt} = f(x) + g(x)\eta(t), \quad (1)$$

onde a função $f(x)$ é conhecida como *drift*, $g(x)$ refere-se à difusão e $\eta(t)$ é uma força estocástica, definida por um certo processo estocástico. Vamos considerar que $\eta(t)$ obedece uma distribuição gaussiana com média zero e delta-correlacionada, ou seja, $\mathbb{E}[\eta(t)] = 0$ e $\mathbb{E}[\eta(t)\eta(t')] = \sigma^2\delta(t-t')$, sendo chamada de ruído branco. Nesta expressão, σ^2 representa a intensidade do ruído e $\delta(t)$ é a Delta de Dirac. No caso em que a difusão depende do estado do sistema, como modelado pela equação (1), entende-se que o ruído é multiplicativo. A equação tal que $f(x) = 0$ e $g(x)$ é constante, descreve o conhecido Movimento Browniano de uma partícula livre no regime superamortecido, ou seja, desconsiderando o termo de inércia.

Do ponto de vista da física, a dinâmica estocástica multiplicativa é uma das abordagens possíveis para aumentar nossa compreensão da mecânica estatística fora do equilíbrio. A probabilidade condicional ou de transição entre estados é um objeto central nesta linha de pesquisa, pois contém informações detalhadas sobre a dinâmica do sistema. Por outro lado, em sistemas descritos por SDEs com ruído multiplicativo, emergem fenômenos próprios, que precisam ser melhor estudados. Alguns destes fenômenos são a ressonância estocástica (*Stochastic Resonance* (SR)), pelas siglas

¹saravalenteq@gmail.com

²bruni.r.c.l@gmail.com

³daniel.barci@gmail.com

⁴zochil@ime.uerj.br

em inglês) e as transições de fase induzidas por ruído (*Noise-induced phase transitions* (NIPT), pelas siglas em inglês).

O exemplo paradigmático da ressonância estocástica é mais fácil de entender desde a abordagem do famoso problema de Kramers, onde partículas brownianas, inicialmente em um mínimo dado de energia potencial, podem ser levadas ao topo de uma barreira potencial devido ao ruído térmico. Evidentemente, se houver outro poço após essa barreira, a partícula também pode ir para este novo poço, efetivamente pulando através da barreira, ou pode simplesmente voltar ao poço inicial. Este problema é conhecido também como ativação térmica sobre uma barreira de potencial e encontra aplicações em muitas áreas científicas, incluindo física, química, biologia e engenharia, tornando-o um problema interdisciplinar.

Neste contexto, estudamos recentemente como a taxa de escape de Kramers é modificada quando a dinâmica do sistema é controlada por ruído multiplicativo [4]. Considerou-se um modelo simples de um sistema biestável com potencial simétrico. Usando a representação de integral de caminho [1] da dinâmica de Langevin superamortecida, foram calculadas as probabilidades de transição e a taxa de escape na aproximação de ruído fraco. No presente trabalho, são resumidos esses resultados e generalizados para um sistema biestável com potencial assimétrico, avançando na direção do cálculo da ressonância estocástica para estes sistemas. A seguir é feita uma fundamentação teórica dos temas envolvidos nesta pesquisa. Na Seção 3 discute-se o caso do potencial assimétrico e apresentam-se os resultados de simulações numéricas. Por fim, são indicadas as conclusões e referências bibliográficas.

2 Fundamentação Teórica

A ativação térmica é um fenômeno fundamental em sistemas físicos nos quais partículas enfrentam uma barreira de energia potencial, representada em geral por uma função com dois ou mais mínimos. Essa barreira pode surgir em uma variedade de contextos, desde a difusão de partículas em sólidos até processos bioquímicos em sistemas biológicos. Para temperaturas baixas, a partícula passará mais tempo perto do mínimo de potencial e raramente será levada ao topo da barreira. Entretanto, aumentando a temperatura, as partículas podem adquirir energia térmica suficiente para superar a barreira de potencial e realizar a transição para o outro lado. No caso de sistemas com ruído, a energia para superar a barreira é providenciada pelo efeito do movimento browniano.

Este fenômeno é essencialmente governado pelas leis da mecânica estatística e da termodinâmica. Um modelo básico utilizado para estudá-lo é o de uma partícula clássica movendo-se em um potencial com dois mínimos $U(x)$, tendo sua dinâmica descrita pela equação (1), com ruído branco aditivo, ou seja, para $g(x)$ constante, com $f(x) = -U'(x)$. Para esse sistema, a taxa de Kramers ou taxa de escape é dada por

$$r_{add} = \frac{\sqrt{\omega_{min}|\omega_{max}|}}{2\pi} e^{-\frac{\Delta U}{\sigma^2}}, \quad (2)$$

na qual $\Delta U = U(x_{max}) - U(x_{min})$, é a altura da barreira de potencial, σ^2 é a intensidade do ruído, e $\omega_{min} = U''(x_{min})$ e $\omega_{max} = U''(x_{max})$ são as curvaturas locais do potencial nos seus pontos mínimo (x_{min}) e máximo (x_{max}), respectivamente ($'$ indica a derivada em relação a x). A notação r_{add} é usada para enfatizar que essa expressão para a taxa de escape foi calculada assumindo uma equação diferencial estocástica com ruído aditivo. A expressão da taxa de Kramers é válida na aproximação de ruído fraco ou de barreira alta, $\sigma^2 \ll \Delta U$.

2.1 Alguns Conceitos do Cálculo Estocástico

A integração da equação (1) não pode ser feita usando as regras do cálculo diferencial e integral usual. O problema é dado pelo processo estocástico representado por $\eta(t)$, que converte a variável

de estado num processo estocástico também. Dessa forma, o sistema precisa ser trabalhado no contexto do Cálculo Estocástico. Nesse contexto, $\eta(t)$ é definido a partir da versão integral da equação (1), relacionando-o informalmente com um processo de Wiener $W(t)$ através de $\eta(t)dt = dW(t)$. De forma geral, considerando uma partição do intervalo $a = t_1 < t_2 < \dots < t_k < t_{k+1} = b$, define-se a integração estocástica na forma

$$\int_a^b g(x(t)) dW(t) = \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{j=1}^n g(x(\tau_j))(W(t_{j+1}) - W(t_j)) \tag{3}$$

para um dado $\tau_j \in [t_j, t_{j+1}]$, onde este limite denota convergência em média quadrática. Considerando que $W(t)$ é não-diferenciável em nenhum ponto, o limite indicado em (3) converge para valores diferentes segundo seja o valor de τ_j . Assim, diferentes prescrições de cálculo são definidas a depender da escolha deste valor. No caso em que $\tau_j = t_j$, fica definida a integral estocástica de Itô, ao passo que a integral de Stratonovich é definida ao assumir o ponto médio do subintervalo, $\tau_j = (t_{j+1} + t_j)/2$. De forma geral, pode-se considerar a interpretação dada por

$$g(x(\tau_j)) = g((1 - \alpha)x(t_j) + \alpha x(t_{j+1})), \tag{4}$$

com $0 \leq \alpha \leq 1$, conhecida como prescrição generalizada de Stratonovich ou prescrição- α . Neste caso, $\alpha = 0$ corresponde à prescrição de Itô e $\alpha = 1/2$, à de Stratonovich. Faz-se importante notar que qualquer valor de τ_j no subintervalo considerado, resulta em uma forma específica de integração, que possui regras de cálculo particulares e gera uma evolução dinâmica diferente das outras. A propriedade mais significativa neste sentido é a regra da cadeia. Para uma função arbitrária da variável estocástica, $Y[x(t)]$, a regra da cadeia, generalizada para uma prescrição dada por um valor qualquer $0 \leq \alpha \leq 1$, assume a forma

$$\frac{dY(x(t))}{dt} = \frac{\partial Y}{\partial x} \frac{dx}{dt} + \frac{(1 - 2\alpha)}{2} \frac{\partial^2 Y}{\partial x^2} \sigma^2 g^2(x). \tag{5}$$

Pode-se notar que para a prescrição de Stratonovich, $\alpha = 1/2$, a expressão (5) corresponde com a regra da cadeia do cálculo diferencial usual. Uma outra propriedade importante é a possibilidade de estabelecer uma equivalência entre duas equações diferenciais estocásticas, interpretadas em prescrições diferentes. Ou seja, dada uma equação definida em uma prescrição estocástica $\alpha = \alpha_1$, uma outra equação, interpretada na prescrição $\alpha = \alpha_2$ seria equivalente à primeira, gerando a mesma evolução, se a sua função de *drift* $f_2(x) = f_1(x) + (\alpha_1 - \alpha_2)\sigma^2 g(x)g'(x)$, onde $f_1(x)$ é a função de *drift* da primeira destas equações.

2.2 Problema de Kramers para um Potencial Simétrico

Para encontrar a taxa de escape para um sistema com ruído multiplicativo, consideramos um sistema unidimensional conservativo dado por um potencial biestável simétrico, descrito pela equação

$$\frac{dx}{dt} = -\frac{1}{2}g^2(x)\frac{dU(x)}{dx} + g(x)\eta(t), \tag{6}$$

com $\eta(t)$ um ruído branco gaussiano. A expressão dada para a força de *drift* $f(x)$ é uma relação generalizada de Einstein que garante que o sistema possa atingir o equilíbrio termodinâmico para tempos muito longos [1]. Para fins da integração estocástica, a equação (6) é interpretada na prescrição generalizada de Stratonovich ou prescrição- α . A distribuição de probabilidade de equilíbrio é dada por $P_{eq}(x) = \mathcal{N} e^{-\frac{1}{\sigma^2}U_{eq}(x)}$, onde \mathcal{N} é um fator de normalização e $U_{eq}(x) = U(x) + (1 - \alpha)\sigma^2 \ln g^2(x)$ é o potencial de equilíbrio.

Neste caso em que a função do potencial é simétrica, a partícula tem a mesma probabilidade de cair para qualquer lado da barreira. Portanto, se houver outro mínimo do outro lado da barreira, a partícula pode cair rapidamente nele, permanecer lá por um tempo e então talvez voltar ao mínimo original, através do mesmo processo. Para uma realização suficientemente longa deste processo, obtém-se o padrão da Figura 1.

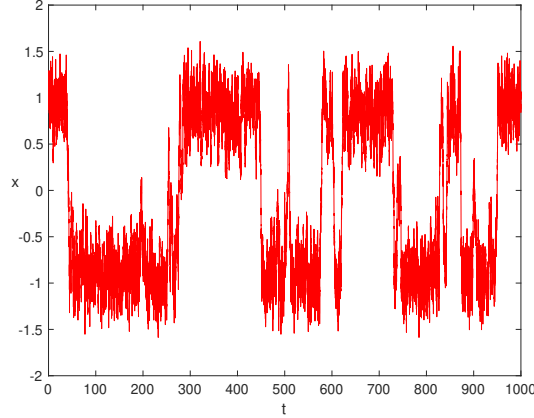


Figura 1: Flutuações de $x(t)$ ao redor do mínimo $x_{\min} \sim \pm 1$, para uma realização particular do ruído usando o método de Euler-Maruyama. O intervalo $0 < t < 1000$ foi discretizado em 2×10^4 passos. Para $t \gg 1$, a partícula fica, em média, o mesmo tempo em cada mínimo do potencial. Fonte: Elaborado pelos autores.

Para chegar na taxa de Kramers, foi usada a abordagem do formalismo da integral funcional [1], através da probabilidade de transição definida por $P(x_f, t_f | x_i, t_i) = \int \mathcal{D}x \det^{-1}(g) e^{-\frac{1}{\sigma^2} S[x]}$ com

$$S[x] = \int_{t_i}^{t_f} dt \left\{ \frac{1}{2g^2(x)} \left[\frac{dx}{dt} - f(x) \right]^2 + \alpha \sigma^2 \left[\frac{g'(x)}{g(x)} \left(\frac{dx}{dt} - f(x) \right) + f'(x) \right] \right\}.$$

Após extensos cálculos, que podem ser encontrados com detalhe na referência [4], obtivemos a expressão para a taxa de Kramers para um sistema estocástico com ruído multiplicativo:

$$r_{\text{mult}} = g^2(x_{\max}) \frac{\sqrt{\tilde{\omega}_{\min} |\tilde{\omega}_{\max}|}}{2\pi} e^{-\frac{\Delta U_{\text{eq}}}{\sigma^2}}. \quad (7)$$

A expressão (7) conserva a mesma estrutura encontrada na taxa de Kramers para ruído aditivo, dada pela equação (2). Entretanto, o lugar que correspondia ao potencial $U(x)$, agora é referido ao potencial de equilíbrio, $U_{\text{eq}}(x)$, que depende explicitamente da prescrição usada na integração estocástica. Dessa forma, $\Delta U_{\text{eq}} = U_{\text{eq}}(x_{\max}) - U_{\text{eq}}(x_{\min})$ é a altura da barreira do potencial de equilíbrio e $\tilde{\omega}_{\min} = U''_{\text{eq}}(x_{\min})$ e $\tilde{\omega}_{\max} = U''_{\text{eq}}(x_{\max})$ são as curvaturas locais do potencial de equilíbrio nos seus pontos mínimo (x_{\min}) e máximo (x_{\max}), respectivamente. Como é lógico de se esperar, aparece uma contribuição do ruído multiplicativo, $g^2(x_{\max})$, porém constante. A validade desta expressão é igualmente restrita a uma aproximação de ruído fraco ou barreira alta.

Usando as expressões explícitas para o potencial $U(x) = x^4/4 - x^2/2$ e a função de difusão $g(x) = 1 + \lambda x$, com λ constante, foram realizadas simulações numéricas usando o método de Euler-Maruyama. Esse algoritmo implica uma discretização de Itô da SDE. Assim, dado que a equação (7) foi definida na prescrição- α , ela deve ser transformada a Itô mudando adequadamente a função de drift $f(x)$, resultando em $dx = x(1 + \lambda x^2)/2 \{ (1 - x^2)(1 + \lambda x^2) + 4\lambda \sigma^2 \alpha \} dt + (1 + \lambda x^2) dW$.

Na Figura 2, encontra-se o resultado de simulações da dinâmica de Langevin, para 8×10^4 realizações diferentes do ruído. As curvas em cores correspondem à média de todas as simulações numéricas realizadas para as interpretações mais conhecidas do ruído, $\alpha = 0$, $\alpha = 1/2$ e $\alpha = 1$. Foram usados os valores $\lambda = 0.5$ e $\sigma^2 = 0.085$. Com linhas descontínuas foi representado o valor esperado para $x(t)$, calculado a partir da distribuição de probabilidade condicional assintótica [4]. Este valor, fortemente influenciado pela taxa de Kramers, é dado por $\mathbb{E}[x(t)] = Ae^{-tr_{mult}}$, onde A é uma constante que foi calculada por ajuste. Como pode-se observar na Figura 2, os resultados numéricos mostraram uma excelente concordância com o resultado teórico.

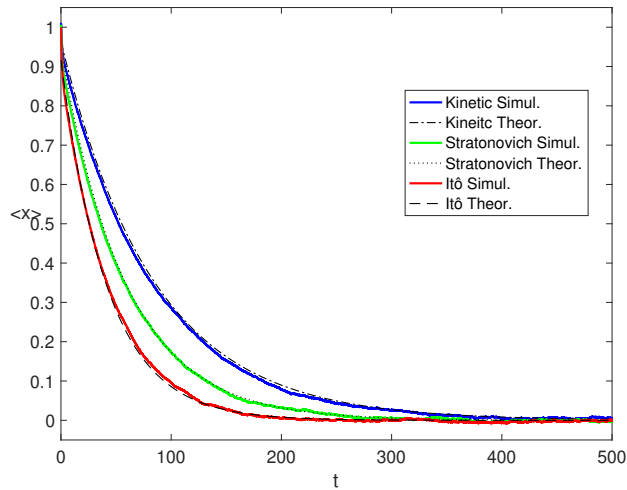


Figura 2: $\mathbb{E}[x(t)]$ calculado sobre 8×10^4 realizações do ruído, para três prescrições diferentes, $\alpha = 0; 1/2; 1$. Foi usada a condição inicial $x(0) = 1$ e os parâmetros $\lambda = 0.5$ e $\sigma^2 = 0.085$. As curvas contínuas foram obtidas a partir de simulações numéricas com o método de Euler-Maruyama, enquanto as curvas descontínuas correspondem a um ajuste usando-se os resultados analíticos. Fonte: Elaborado pelos autores.

3 Problema de Kramers para um Potencial Assimétrico

Como visto antes, para sistemas estocásticos, a taxa de Kramers corresponde ao tempo médio que uma partícula permanece em um poço de potencial antes de escapar para outro poço de potencial por efeito do ruído. Para um potencial assimétrico, a partícula ficará mais tempo naquele poço de potencial que corresponda ao mínimo global da função. Considerando agora o mesmo problema da Seção 3, porém, para um potencial assimétrico, com seus mínimos dados por $x_1 = a$ e $x_2 = b$, $a \neq b$, fizemos uma generalização da taxa de Kramers dada pela expressão (7) e novamente comparamos com simulações numéricas.

O potencial, neste caso, é dado pela expressão $U(x) = x^4/4 - x^2/2 + px$, onde $p \neq 0$ é um parâmetro para controlar o grau de assimetria da função, garantindo uma estrutura de dois mínimos. Foram realizadas simulações numéricas usando o método de Euler-Maruyama. Os resultados apresentados correspondem com $p = 0.08$.

Na Figura 3, encontra-se o resultado de simulações da dinâmica de Langevin, para 8×10^4 realizações diferentes do ruído. Novamente, as curvas em cores correspondem à média de todas as simulações numéricas realizadas para as interpretações mais conhecidas do ruído, $\alpha = 0$, $\alpha = 1/2$

e $\alpha = 1$. Foram usados os mesmos valores dos parâmetros considerados na seção anterior. Agora, usando-se a distribuição de probabilidade condicional, é possível mostrar que para tempos longos, $t \gg \tau_k$, o valor esperado de $x(t)$, representado por linhas descontínuas, é dado por $\mathbb{E}[x(t)] = Ae^{-tr_{mult}} + B$, com A e B constantes que satisfazem $A + B = x(0)$, sendo $x(0)$ a condição inicial. Novamente, como pode-se observar na Figura 3, os resultados numéricos mostraram uma excelente concordância com o resultado teórico.

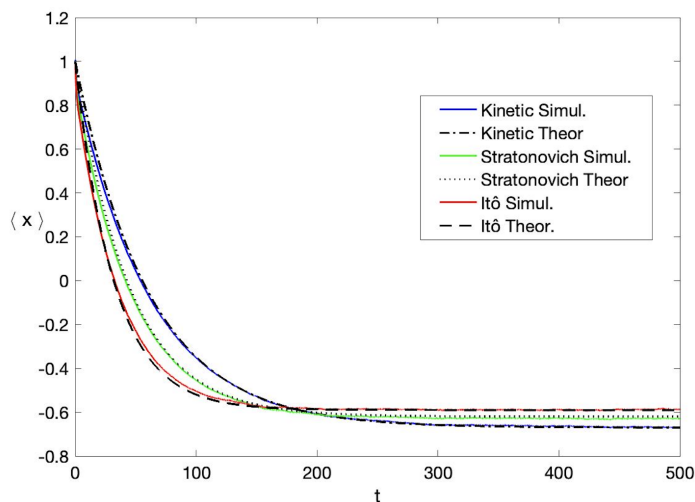


Figura 3: $\mathbb{E}[x(t)]$ calculado sobre 8×10^4 realizações do ruído, para três prescrições diferentes, $\alpha = 0; 1/2; 1$. Foi usada a condição inicial $x(0) = 1$ e os parâmetros $p = 0.08$, $\lambda = 0.5$ e $\sigma^2 = 0.085$. As curvas contínuas foram obtidas a partir de simulações numéricas com o método de Euler-Maruyama, enquanto as curvas descontínuas correspondem a um ajuste usando-se os resultados analíticos. Fonte: Elaborado pelos autores.

Pode-se observar que $\mathbb{E}[x(t)]$ tende exponencialmente a um valor não nulo, dado pela assimetria dos mínimos do potencial. A taxa de decaimento para as diferentes prescrições estocásticas é diferente. Isto justifica-se a partir do potencial de equilíbrio, que possui uma altura da barreira diferente para cada prescrição.

3.1 Ressonância estocástica

A ressonância estocástica é um fenômeno fascinante no qual a adição de ruído a um sistema dinâmico pode, surpreendentemente, melhorar sua capacidade de resposta a um estímulo externo. O conceito desafia a intuição e tem se tornado uma área de intensa pesquisa. A motivação para estudar a ressonância estocástica reside em sua capacidade de melhorar a detecção de sinais fracos em ambientes ruidosos e na compreensão dos mecanismos subjacentes a essa melhoria. Procurando contribuir de forma analítica no estudo destes mecanismos, planejamos usar a abordagem de SDEs com ruído multiplicativo. O fenômeno da ativação térmica acima descrito é peça chave para essa compreensão.

Para considerar o fenômeno da ressonância estocástica para um sistema com ruído multiplicativo, vamos considerar o modelo discutido neste trabalho, adicionando ao potencial de poço duplo

da Seção 2.2 uma modulação harmônica, de modo a ter

$$U(x) = \frac{1}{4}x^4 - \frac{1}{2}x^2 - U_0 x \cos(\omega t + \varphi). \quad (8)$$

Vamos assumir que esta modulação é *pequena*, no sentido que $\Delta U \gg U_0$, de modo que não gere transições entre os mínimos independentemente do ruído. O efeito do termo periódico é elevar um mínimo dado do potencial como função do tempo. Entretanto, uma vez que a modulação é linear em x , ela afeta a altura da barreira, mas conserva as segundas derivadas na expressão da taxa de Kramers. Esperamos reportar em breve sobre o andamento da pesquisa nesta direção.

4 Considerações Finais

Neste trabalho foram apresentados resultados teóricos e numéricos referentes à taxa de escape de um mínimo de potencial para sistemas estocásticos com ruído multiplicativo. Estes resultados foram obtidos para qualquer interpretação do cálculo estocástico, necessária para definir completamente uma equação diferencial estocástica. Diferentemente da expressão conhecida para a taxa de Kramers, referente a sistemas com ruído aditivo, a expressão para ruído multiplicativo é baseada no potencial de equilíbrio, encontrado a partir da distribuição de probabilidade estacionária do sistema estocástico.

Embora temos resultados conclusivos em relação à taxa de Kramers para um sistema com ruído multiplicativo e um potencial assimétrico, este é um trabalho em andamento. O conhecimento da taxa de Kramers para um potencial assimétrico, considerado na Seção 3, vai nos permitir dar continuidade ao estudo do fenômeno de ressonância estocástica para um sistema com ruído multiplicativo.

Agradecimentos

O presente trabalho foi realizado com apoio da Fundação Carlos Chagas Filho de Amparo à Pesquisa do Estado do Rio de Janeiro (FAPERJ), do Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) e da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior – Brasil (CAPES) – Código de Financiamento 001. S.C.Q.V. e R.C.L.B. são bolsistas de Doutorado e de Pós-Doutorado da CAPES, respectivamente.

Referências

- [1] Z. G. Arenas e D. G. Barci. “Hidden symmetries and equilibrium properties of multiplicative white-noise stochastic processes”. Em: **Journal of Statistical Mechanics** 2012 (2012), P12005. DOI: 10.1088/1742-5468/2012/12/P12005.
- [2] Z. G. Arenas, J. C. Jimenez, L. V. Lozada-Chang e R. Santana. “Estimation of distribution algorithms for the computation of innovation estimators of diffusion processes”. Em: **Mathematics and Computers in Simulation** 187 (2021), pp. 449–467. DOI: 10.1016/j.matcom.2021.03.017.
- [3] D. G. Barci, Z. G. Arenas e M. V. Moreno. “Path integral approach to nonequilibrium potentials in multiplicative Langevin dynamics”. Em: **Europhysics Letters** 113 (2016), p. 10009. DOI: 10.1209/0295-5075/113/10009.
- [4] M. V. Moreno, D. G. Barci e Z. G. Arenas. “State-dependent diffusion in a bistable potential: Conditional probabilities and escape rates”. Em: **Physical Review E** 101 (2020), p. 062110. DOI: 10.1103/PhysRevE.101.062110.