

## Esercizi (e proposte di facili simulazioni) per il corso di Meccanica Statistica del Non Equilibrio

• *Se si è in grado di affrontare, senza troppa difficoltà, questi esercizi, allora si hanno le conoscenze e le capacità di calcolo per un buon esame; l'incapacità di svolgere questi esercizi comporterà un voto non eccelso.*

**Es. -1** Discutere:

- le motivazioni dell'uso di modelli stocastici markoviani per i fenomeni naturali;
- l'ipotesi di validità della medicina omeopatica.

**Es. 0** Data l'equazione differenziale stocastica

$$\frac{dx}{dt} = a(x) + \sqrt{2c}\eta$$

ove  $\eta$  è un rumore bianco normalizzato  $\langle \eta(t)\eta(t') \rangle = \delta(t-t')$ , mostrare che valgono le ipotesi fatte nella derivazione dell'equazione di Fokker-Planck:

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\langle (\Delta x(\Delta t))^n | x \rangle}{\Delta t} = 0, \text{ se } n \geq 3.$$

**Es. 1** Si consideri l'equazione di Langevin

$$\frac{dv}{dt} = -\frac{v}{\tau} + \sqrt{2c}\eta$$

ove  $\eta$  è un rumore bianco normalizzato  $\langle \eta(t)\eta(t') \rangle = \delta(t-t')$ :

- scrivere l'equazione di Fokker-Planck;
- determinare la costante  $c$  in modo tale che  $\langle v^2 \rangle = k_B T/m$ ;
- calcolare  $\langle v(t)|v(0) \rangle$  e  $\langle v(t)^2|v(0) \rangle$ ;
- calcolare  $\langle v(t)v(0) \rangle$ ;
- data la densità di probabilità iniziale  $p(v, 0)$  determinare  $p(v, t)$ , discutere il comportamento per  $t \gg \tau$ ;
- calcolare  $\langle x(t)|x(0) \rangle$  e  $\langle x(t)^2|x(0) \rangle$ , ove  $x(t) = x(0) + \int_0^t v(t')dt'$ ;
- usando per  $\tau$  la legge di Stokes per una sfera di massa  $m$  e raggio  $a$  in un fluido a temperatura  $T$  e con viscosità  $\tilde{\eta}$ , derivare la relazione di Einstein.

**Es. 2** Si consideri il processo stocastico a tempi discreti

$$v_{n+1} = av_n + w_n$$

ove  $|a| < 1$  e le variabili  $\{w_n\}$  sono indipendenti, a media nulla con densità di probabilità  $p(w)$ :

- data una generica  $p(v, 0)$  si mostri che, se  $p(w)$  è gaussiana, per  $n \rightarrow \infty$   $p(v, n)$  tende ad una gaussiana.
- data una generica  $p(v, 0)$  si mostri che per  $n \rightarrow \infty$   $p(v, n)$  tende ad una distribuzione  $p_*(v)$  che, se  $p(w)$  non è una gaussiana, è necessariamente diversa da una gaussiana;
- calcolare  $\langle v_n v_0 \rangle$ .

**Es. 3** Si consideri il processo stocastico a tempi discreti

$$x_{n+1} = x_n + v_n$$

ove le variabili  $\{v_n\}$  sono a media nulla e non indipendenti, si conosce la funzione di correlazione  $c_n = \langle v_n v_0 \rangle$

- nel caso  $\sum_0^\infty c_n < \infty$  trovare il coefficiente di diffusioni

$$D = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\langle (x_n - x_0)^2 \rangle}{2n}$$

- nel caso  $c_n \sim n^{-b}$  con  $b < 1$ , mostrare che per  $n \gg 1$

$$\langle (x_n - x_0)^2 \rangle \sim n^{2-b}$$

**Es. 4** Data la mappa deterministica  $x_{t+1} = x_t + \omega \text{ mod } 1$ ,

- si trovi la densità di probabilità invariante;
- discutere l'ergodicità per  $\omega$  razionale o irrazionale.

**Es. 5** Data la mappa deterministica  $x_{t+1} = 2x_t \text{ mod } 1$ ,

- si trovi la densità di probabilità invariante;
- \* al tempo  $t = 0$  la densità di probabilità è costante nell'intervallo  $[x^*, x^* + \Delta]$  e zero fuori, si studi numericamente per diversi valori di  $x^*$  e  $\Delta$  l'andamento temporale della densità di probabilità  $p(x, t)$ , verificare che per  $t \rightarrow \infty$   $p(x, t)$  tende alla  $p_{inv}(x)$ ;

\* si verifichi numericamente l'ergodicità studiando la media temporale di  $A(x) = x, x^2$  e  $\sin^2(2\pi x)$ .

**Es. 6** Data la mappa deterministica sull'intervallo  $[0, 1]$ :  $x_{t+1} = 4x_t(1 - x_t)$ ,  
 • verificare che la densità di probabilità invariante è

$$p_{inv}(x) = \frac{1}{\pi \sqrt{x(1-x)}}$$

\* al tempo  $t = 0$  la densità di probabilità è costante nell'intervallo  $[x^*, x^* + \Delta]$  e zero fuori, si studi numericamente per diversi valori di  $x^*$  e  $\Delta$  l'andamento temporale della densità di probabilità  $p(x, t)$ , verificare che per  $t \rightarrow \infty$ ,  $p(x, t)$  tende alla  $p_{inv}(x)$ ;

\* si verifichi numericamente l'ergodicità studiando la media temporale di  $A(x) = x^3, 1/(1 + x^2)$  e  $\sin^4(2\pi x)$ .

**Es. 7** Data una catena di Markov con bilancio dettagliato, mostrare che valgono le seguenti relazioni:

- $P_{i \rightarrow j} P_{j \rightarrow k} P_{k \rightarrow i} = P_{i \rightarrow k} P_{k \rightarrow j} P_{j \rightarrow i}$
- $P_{i \rightarrow j} P_{j \rightarrow k} P_{k \rightarrow m} P_{m \rightarrow i} = P_{i \rightarrow m} P_{m \rightarrow k} P_{k \rightarrow j} P_{j \rightarrow i}$
- $\langle g(t) f(0) \rangle = \langle g(0) f(t) \rangle$

ove  $g$  prende il valore  $g_i$  quando il sistema è nello stato  $i$ , analogamente  $f$  prende il valore  $f_i$  quando il sistema è nello stato  $i$ , e

$$\langle g(t) f(0) \rangle = \sum_{i,j} f_i g_j P_i P_{i \rightarrow j}(t)$$

ove  $\{P_i\}$  sono le probabilità invarianti e  $P_{i \rightarrow j}(t)$  è la probabilità di transizione da  $i$  a  $j$  in  $t$  passi.

**Es. 8** Data la catena di Markov con 2 stati

$$P_{1 \rightarrow 1} = 1 - p, P_{1 \rightarrow 2} = p, P_{2 \rightarrow 1} = q, P_{2 \rightarrow 2} = 1 - q,$$

con  $0 < q < 1$  e  $0 < p < 1$ ,

- trovare le probabilità invarianti;
- mostrare che vale sempre il bilancio dettagliato;
- calcolare  $\langle g(t) g(0) \rangle$ , ove  $g$  vale 1 se  $i = 1$  e 0 se  $i = 2$ .

**Es. 9** Si lanci  $t$  volte un dado non truccato, indichiamo con  $x_t$  il massimo risultato ottenuto:

- si mostri che la variabile  $x_t$  è descritta da una catena di Markov;
- si calcoli la matrice di transizione  $P_{j \rightarrow i} = P(x_{t+1} = i | x_t = j)$ .

**Es. 10** Si consideri un random walk su gli interi non negativi con le seguenti probabilità di transizione:  $P_{0 \rightarrow 1} = 1$ , e  $P_{n \rightarrow n+1} = r/(1+r)$ ,  $P_{n \rightarrow n-1} = 1/(1+r)$  se  $n \geq 1$ , Mostrare che se  $0 < r < 1$  esiste sempre una probabilità invariante, trovare questa probabilità.

**Es. 11** Si consideri un random walk su gli interi non negativi con le seguenti probabilità di transizione:  $P_{0 \rightarrow n} = f_n$ ,  $P_{n \rightarrow n-1} = 1$ , e le altre nulle, ovviamente si ha

$$\sum_{n=0}^{\infty} f_n = 1.$$

Calcolare le probabilità invariante nel caso  $f_n$  decada a zero abbastanza velocemente, cioè più rapidamente di  $n^{-b}$  con  $b > 2$ .

**Es. 12** Si consideri il random walk su un anello con  $N$  siti, con probabilità di transizione  $P_{n \rightarrow n \pm 1} = 1/2$  e condizioni periodiche, cioè  $P_{N \rightarrow 1} = P_{1 \rightarrow N} = 1/2$ , mostrare che:

- la probabilità invariante è uniforme:  $P_i^{(inv)} = 1/N$ ;
- se  $N$  è pari le  $p_i(t)$  per  $t \rightarrow \infty$  non hanno un limite;
- la catena è ergodica per ogni valore di  $N$ , nel senso che le media temporale su un tempo infinito coincide con la media calcolata sulla probabilità invariante.

**Es. 13** Dato il modello di Ehrenfest con  $N$  particelle:

- calcolare  $\langle n_t | n_0 \rangle$  e  $\langle n_t^2 | n_0 \rangle$ ;
- al tempo  $t = 0$  il sistema è in  $n_0$ , calcolare il tempo medio di ritorno in  $n_0$ ;
- si usino i risultati precedenti, nel caso  $N \gg 1$  e  $|n_0 - N/2| \gg \sqrt{N}$ , per discutere i paradossi della reversibilità e della ricorrenza.

**Es. 14** Si consideri il circuito RLC a temperatura  $T$  con rumore:

$$\frac{dq}{dt} = -\gamma q + i + b_1 \eta_1, \quad \frac{di}{dt} = -\frac{1}{LC}q - \frac{R}{C}i + b_2 \eta_2,$$

ove  $\eta_1$  e  $\eta_2$  sono rumori bianchi scorrelati:  $\langle \eta_i(t) \eta_j(t') \rangle = \delta_{ij} \delta(t - t')$ , il

termine di rumore nell'equazione per la corrente  $i$  ha il seguente significato:

$$b_2 \eta_2(t) = \frac{1}{L} \Delta V(t)$$

ove  $\Delta V(t)$  è la fluttuazione della differenza di potenziale. Sapendo che la densità di probabilità stazionaria è

$$p_s(q, i) = \mathcal{N} \exp - \left( \frac{Li^2}{2k_B T} + \frac{q^2}{2Ck_B T} \right),$$

- discutere le relazioni di Onsager;
- trovare i valori di  $b_1$  e  $b_2$  e mostrare (teorema di Nyquist) che:

$$\langle \Delta V(t) \Delta V(t') \rangle = 2k_B T R \delta(t - t').$$

**Es. 15** Si consideri l'equazione differenziale stocastica

$$\frac{dx}{dt} = -\frac{dV(x)}{dx} + \sqrt{2c} \eta, \quad V(x) = \frac{x^4}{4} - \frac{x^2}{2}$$

utilizzando un algoritmo numerico (ad esempio quello in R. Mannella, V. Palleschi *Fast and precise algorithm for computer simulation of stochastic differential equations* Phys. Rev. A **40**, 3381 (1989))

- \* verificare la validità dell'approssimazione di Kramers per il tempo medio di prima uscita per piccoli valori di  $c$ ;
- \* calcolare numericamente la densità di probabilità del tempo di prima uscita.

**Es. 16** Si consideri l'equazione differenziale stocastica

$$\frac{dx}{dt} = -\frac{dV(x)}{dx} + \sqrt{2c} \eta, \quad V(x) = \frac{\Delta V_0}{2} \sin \frac{2\pi x}{L} + Ex$$

assumendo la validità dell'approssimazione di Kramers:

- nel caso  $-\infty < x < \infty$  e  $E = 0$  si calcoli il coefficiente di diffusione, nel limite  $\Delta V_0/c \gg 1$ ;
- nel caso  $x$  sia una variabile angolare (tra 0 ed  $L$ ) ed  $L$  sia un intero, si calcoli la corrente media  $J$  nel caso  $EL \ll \Delta V_0$  e  $\Delta V_0/c \gg 1$ ;
- identificando  $c$  con  $k_B T$  mostrare la validità della relazione di Einstein tra mobilità e coefficiente di diffusione;

\* verificare la validità delle approssimazioni utilizzando un algoritmo numerico (ad esempio quello di Mannella e Palleschi).

**Es. 17** Data le equazione differenziali stocastiche:

$$\frac{dq}{dt} = \frac{p}{m}, \quad \frac{dp}{dt} = -\frac{dV(q)}{dq} - \gamma \frac{p}{m} + \sqrt{2c}\eta$$

si trovi la densità di probabilità stazionaria  $p_s(q, p)$  e determinare il valore di  $c$  in modo che si abbia la distribuzione di Gibbs

$$p_s(q, p) = \mathcal{N} \exp - \frac{1}{k_B T} \left( V(q) + \frac{p^2}{2m} \right)$$

**Es. 18** Date le equazioni differenziali stocastiche lineari:

$$\frac{dx_n}{dt} = - \sum_{j=1}^N A_{n,j} x_j + \sqrt{2c} \eta_n$$

ove  $\{\eta_n\}$  sono rumori bianchi indipendenti  $\langle \eta_j(t) \eta_i(t') \rangle = \delta_{ij} \delta(t - t')$  e la matrice  $\mathbf{A}$  è simmetrica e con autovalori positivi:

- trovare la densità di probabilità stazionaria;
- discutere le relazioni di Onsager;
- calcolare  $\langle x_i(t) x_j(0) \rangle$ ;
- calcolare la matrice di risposta lineare ad una perturbazione impulsiva  $\delta \mathbf{x}(0)$  tale che  $\delta x_n(0) = \delta_{nj} \delta x_j(0)$ :

$$R_{ij}(t) = \frac{\langle \delta x_i(t) \rangle}{\delta x_j(0)}$$

in termini di un' opportuna funzione di correlazione del sistema imperturbato.

**Es. 19** Si considerino le equazioni differenziali stocastiche

$$\frac{dx_n}{dt} = -\frac{\partial V(\mathbf{x})}{\partial x_n} + \sqrt{2c} \eta_n, \quad n = 1, 2, \dots, N$$

- trovare la densità di probabilità stazionaria;

- calcolare la matrice di risposta lineare ad una perturbazione impulsiva  $\delta \mathbf{x}(0)$  tale che  $\delta x_n(0) = \delta_{nj} \delta x_j(0)$ :

$$R_{ij}(t) = \frac{\langle \delta x_i(t) \rangle}{\delta x_j(0)}$$

in termini di un' opportuna funzione di correlazione del sistema imperturbato.

**Es. 20** Mostrare che in una catena di Markov ergodica si ha

$$H(x_n|x_0) = H(x_0|x_n)$$

ove

$$H(x_0|x_n) = - \sum_{i,j} P(x_n = i) P(x_0 = j|x_n = i) \ln P(x_0 = j|x_n = i).$$

In altre parole il presente ha un' entropia condizionata dalla conoscenza del passato pari a quella condizionata dalla conoscenza del futuro. Discutere il limite  $n \gg 1$ .

**Es. 21** Mostrare che in una catena di Markov ergodica in cui vale il bilancio dettagliato si ha

$$H(x_n|x_0 = i) = H(x_0|x_n = i)$$

ove

$$H(x_n|x_0 = i) = - \sum_j P(x_0 = j|x_n = i) \ln P(x_0 = j|x_n = i).$$

Notare che questa proprietà è più forte di quella dell' esercizio precedente.

**Es. 22** Si consideri il random walk su un anello di lunghezza  $N$ , con le probabilità di transizione

$$P_{n \rightarrow n+1} = \frac{1}{2} + \epsilon, \quad P_{n \rightarrow n-1} = \frac{1}{2} - \epsilon$$

con condizioni periodiche e  $0 < \epsilon < 1/2$ ,

- la corrente mediata su un tempo  $t$  è definita da

$$J_t = \frac{1}{t} \sum_{i=1}^t \Delta_i$$

ove  $\Delta_i = 1$  se al tempo  $i$  si ha una transizione in senso orario,  $\Delta_i = -1$  se la transizione è in senso antiorario, trovare la densità di probabilità di  $J_t$  per  $t \gg 1$  e trovare la funzione di Cramer;

- Si consideri la variabile (produzione di entropia per unità di tempo)

$$w_t = \frac{1}{t} \sum_{n=1}^t \ln \left( \frac{P_{i_n \rightarrow i_{n+1}}}{P_{i_{n+1} \rightarrow i_n}} \right)$$

calcolare  $p(w_t)$  (la densità di probabilità di  $w_t$ ) per  $t \gg 1$  e trovare la funzione di Cramer;

\* verificare numericamente la validità per  $t \gg 1$  della relazione di Gallavotti-Cohen:

$$\frac{p(w_t)}{p(-w_t)} = e^{tw_t} ,$$

\* calcolare la quantità

$$Q(t) = Prob(w_t < 0) = \int_{-\infty}^0 p(w_t) dw_t$$

discutere l' andamento per  $t \gg 1$  e la rilevanza di questo risultato in termodinamica statistica.

**Es. 23** Una particella si muove con velocità costante sul segmento  $[0, L]$  quando tocca il bordo  $x = L$  la velocità cambia segno, invece quando tocca  $x = 0$  viene estratta una nuova velocità con densità di probabilità:

$$g(v) = \theta(v) v e^{-\frac{v^2}{2}}$$

ove  $\theta(v)$  è la funzione gradino, ogni estrazione è indipendente dalle altre.

Mostrare che, osservando la particella per un tempo molto lungo, per le densità di probabilità si osserverà una gaussiana per la velocità ed una distribuzione uniforme per la posizione:

$$p_v(v) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-\frac{v^2}{2}} , \quad p_x(x) = \frac{1}{L} .$$

Questo risultato è utile nelle simulazioni di meccanica statistica in cui intervengono bagni termici, vedi ad esempio R. Tehver, F. Toigo, J. Koplik and J.R. Banavar, *Thermal walls in computer simulations* Phys. Rev. E **57**, R17 (1998); M. Falcioni, D. Villamaina, A. Vulpiani, A. Puglisi and A Sarracino *Estimate of temperature and its uncertainty in small systems* American Journal of Physics **79**, 777 (2011).