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

• La maggior parte degli esercizi sono stati svolti (o almeno accennati) a lezione, gli altri sono (quasi tutti) discussi nel libro G. Boffetta e A. Vulpiani *Probabilità in Fisica: un'introduzione* (Springer-Verlag Italia, 2012), che é disponibile in biblioteca.

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

Es. 0 Discutere:
• le motivazione dell' uso di modelli stocastici markoviani per i fenomeni naturali;
• l'ipotesi di validità della medicina omeopatica.

Es. 1 Data l' equazione differenziale stocastica

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

ove η è un rumore bianco normalizzato $< \eta(t)\eta(t') >= \delta(t-t')$,
• mostrare che valgone le ipotesi fatte nella derivazione dell' equazione di Fokker- Planck:

$$\lim_{\Delta t \to 0} \frac{< \Delta x(\Delta t)|x >}{\Delta t} = a(x) \ ,$$

$$\lim_{\Delta t \to 0} \frac{< (\Delta x(\Delta t))^2|x >}{\Delta t} = 2c \ ,$$

$$\lim_{\Delta t \to 0} \frac{< (\Delta x(\Delta t))^n|x >}{\Delta t} = 0 \ , \ se \ n \geq 3 \,,$$

• scrivere l' equazione di Fokker- Planck e trovare la sua soluzione stazionaria.

Es. 2 Si consideri l'equazione di Langevin

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

ove η è un rumore bianco normalizzato $< \eta(t)\eta(t') >= \delta(t-t')$:

- scrivere l'equazione di Fokker-Planck;
- determinare la costante c in modo tale che $< v^2 >= k_B T/m$;
- calcolare $< v(t)|v(0) >$ e $< v(t)^2|v(0) >$;
- calcolare $< v(t)v(0) >$;
- data la densità di probabilità iniziale $p(v,0)$ determinare $p(v,t)$, discutere il comportamento per $t \gg \tau$;
- calcolare $< x(t)|x(0) >$ e $< x(t)^2|x(0) >$, ove $x(t) = x(0) + \int_0^t v(t')dt'$;
- usando per τ 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. 3 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 $n \to \infty$ $p(v,n)$ tende ad una gaussiana.
- data una generica $p(v,0)$ si mostri che per $n \to \infty$ $p(v,n)$ tende ad un distribuzione $p_*(v)$ che, se $p(w)$ non è una gaussiana, è necessariamente diversa da una gaussiana;
- calcolare $< v_n v_0 >$.

Es. 4 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 $c_n =< v_n v_0 >$

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

$$D = \lim_{n\to\infty} \frac{< (x_n - x_0)^2 >}{2n}$$

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

$$< (x_n - x_0)^2 > \sim n^{2-b}$$

Es. 5 Una particella si muove sulla retta con la seguente regola:
• al tempo 0, $x(0) = 0$, viene estratto un tempo τ_1 con una distribuzione $P(\tau)$ che decade a zero più velocemente di τ^{-3}, fino a tempo τ_1 la particella si muove secondo la legge

$$x(t) = v_1 t$$

ove v_1 vale $\pm v$ con probabilità 1/2
• al tempo τ_1, viene estratto un nuovo tempo τ_2 con la stessa distribuzione $P(\tau)$, nell'intervallo $\tau_1 < t < \tau_1 + \tau_2$ la particella si muove secondo la legge

$$x(t) = x(\tau_1) + v_2(t - \tau_1)$$

ove v_2 vale $\pm v$ con probabilità 1/2.
E così via: nell'intervallo $T_n < t < T_n + \tau_{n+1}$ si ha

$$x(t) = x(T_n) + v_{n+1}(t - T_n) \quad ove\ T_n = \sum_{j=1}^{n} \tau_j$$

v_n vale $\pm v$ con probabilità 1/2.
Dimostare che

$$D = \lim_{t\to\infty} \frac{< x(t)^2 >}{2t} = \frac{v^2}{2} \frac{< \tau^2 >}{< \tau >} \ .$$

Generalizzare al caso in cui le v_n sono variabili indipendenti con $< v^2 >< \infty$:

$$D = \frac{< v^2 >}{2} \frac{< \tau^2 >}{< \tau >} \ .$$

Suggerimento:considerare il tempo T_n con $n \gg 1$ e si ricordi la legge dei grandi numeri.

Es. 6 Data la mappa deterministica $x_{t+1} = x_t + \omega \ mod\, 1$,
• si trovi la densità di probabilità invariante;
• discutere l'ergodicità per ω razionale o irrazionale;
• mostrare che tale sistema non è mai mixing.

Es. 7 Data la mappa deterministica $x_{t+1} = 2x_t \ mod\, 1$,
• 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 Δ l'andamento temporale della densità di probabilità $p(x,t)$, verificare che per $t \to \infty$ $p(x,t)$ 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. 8 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 Δ l'andamento temporale della densità di probabilità $p(x,t)$, verificare che per $t \to \infty$, $p(x,t)$ 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. 9 Data una catena di Markov con bilancio dettagliato, mostrare che valgono le seguenti relazioni:
- $P_{i\to j}P_{j\to k}P_{k\to i} = P_{i\to k}P_{k\to j}P_{j\to i}$
- $P_{i\to j}P_{j\to k}P_{k\to m}P_{m\to i} = P_{i\to m}P_{m\to k}P_{k\to j}P_{j\to i}$
- $< g(t)f(0) >=< g(0)f(t) >$

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

$$< g(t)f(0) >= \sum_{i,j} f_i g_j P_i P_{i\to j}(t)$$

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

Es. 10 Data la catena di Markov con 2 stati

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

con $0 < q < 1$ e $0 < p < 1$,
• trovare le probabilità invarianti;

• mostrare che vale sempre il bilancio dettagliato;
• calcolare $< g(t)g(0) >$, ove g vale 1 se $i = 1$ e 0 se $i = 2$.

Es. 11 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 $P_{j\to i} = P(x_{t+1} = i|x_t = j)$.

Es. 12 Si consideri un random walk su gli interi non negativi con le seguenti probabilità di transizione: $P_{0\to 1} = 1$, e $P_{n\to n+1} = r/(1 + r)$, $P_{n\to n-1} = 1/(1 + r)$ se $n \geq 1$, Mostrare che se $0 < r < 1$ esiste sempre una probabilità invariante, trovare questa probabilità.

Es. 13 Si consideri un random walk su gli interi non negativi con le seguenti probabilità di transizione: $P_{0\to n} = f_n$, $P_{n\to n-1} = 1$, 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 $P_{n\to n\pm 1} = 1/2$ e condizioni periodiche, cioè $P_{N\to 1} = P_{1\to N} = 1/2$, mostrare che:
• la probabilità invariante è uniforme: $P_i^{(inv)} = 1/N$;
• se N è pari le $p_i(t)$ per $t \to \infty$ 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. 14 Dato il modello di Ehrenfest con N particelle:
• calcolare $< n_t|n_o >$ e $< n_t^2|n_0 >$;
• 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. 15 Si consideri il circuito RLC a temperatura T con rumore:

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

ove η_1 e η_2 sono rumori bianchi scorrelati: $< \eta_i(t)\eta_j(t') >= \delta_{ij}\delta(t-t')$, 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 probablità stazionaria è

$$p_s(q,i) = \mathcal{N}\,exp - \Big(\frac{Li^2}{2k_BT} + \frac{q^2}{2Ck_BT}\Big)\,,$$

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

$$< \Delta V(t)\Delta V(t') >= 2k_BTR\,\delta(t-t')\,.$$

Es. 17 Si consideri l'equazione differenziate stocastica

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

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. 18 Si consideri l'equazione differenziate stocastica

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

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 1) ed $1/L$ sia un intero, si calcoli la corrente media J nel caso $EL \ll \Delta V_0$ e $\Delta V_0/c \gg 1$;
• indentificando c con k_BT 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. 19 Data le equazione differenziali stocastiche:

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

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

$$p_s(q,p) = \mathcal{N}\, exp - \frac{1}{k_BT}\Big(V(q) + \frac{p^2}{2m}\Big)$$

Es. 20 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 $< \eta_j(t)\eta_i(t') >= \delta_{ij}\delta(t-t')$ e la matrice $\mathbf{A}$ è simmetrica e con autovalori positivi:
• trovare la densità di probabilità stazionaria;
• discutere le relazioni di Onsager;
• calcolare $< x_i(t)x_j(0) >$;
• calcolare la matrice di risposta lineare ad una perturbazione impulsiva $\delta\mathbf{x}(0)$ tale che $\delta x_n(0) = \delta_{nj}\delta x_j(0)$:

$$R_{ij}(t) = \frac{< \delta x_i(t) >}{\delta x_j(0)}$$

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

Es. 21 Si considerino le equazioni differenziali stocastiche

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

• trovare la densità di probabilità stazionaria;
• discutere le relazioni di Onsager per piccoli spostamenti rispetto al minimo di V
• calcolare la matrice di risposta lineare ad una perturbazione impulsiva $\delta \mathbf{x}(0)$ tale che $\delta x_n(0) = \delta_{nj} \delta x_j(0)$:

$$R_{ij}(t) = \frac{< \delta x_i(t) >}{\delta x_j(0)}$$

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

Es. 22 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. 23 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. 24 Si consideri un sistema con $N \gg 1$ particelle ed energia E, in cui

$$S(E) = N s(e) \ , \ \ e = \frac{E}{N} \ ,$$

discutere la connessione tra la convessità di s: $d^2 s(e)/de^2 < 0$, e il secondo principio della termodinamica.

Es. 25 Si consideri il random walk su un anello di lunghezza N, con le probabilità di transizione

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

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 (da n ad $n+1$) $\Delta_i = -1$ 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;
• usando il metodo di Laplace, stimare la quantità $Prob(J_t < 0)$ per $t \gg 1$
• Si consideri la variabile (produzione di entropia per unità di tempo)

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

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. 26 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:

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

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).