

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 è disponibile in biblioteca.

- *Se (non) si è in grado di affrontare, senza troppa difficoltà, questi esercizi, allora (non) si hanno le conoscenze e le capacità di calcolo per un buon esame.*

Es. 0 Discutere:

- le motivazioni dell'uso di modelli stocastici markoviani per i fenomeni naturali;
- l'ipotesi di validità della medicina omeopatica (ricordarsi del valore del numero di Avogadro e del punto precedente).

Es. 1 Data l'equazione differenziale stocastica

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

ove η 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:

$$\begin{aligned} \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\langle \Delta x(\Delta t) | x \rangle}{\Delta t} &= a(x) , \\ \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\langle (\Delta x(\Delta t))^2 | x \rangle}{\Delta t} &= 2c , \\ \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\langle (\Delta x(\Delta t))^n | x \rangle}{\Delta t} &= 0 , \text{ se } n \geq 3 , \end{aligned}$$

- scrivere l'equazione di Fokker-Planck;
- per quale classe di funzioni $a(x)$ esiste una soluzione stazionaria dell'equazione di Fokker-Planck? Nel caso la soluzione stazionaria esista, scriverla in termini di $a(x)$.

Es. 2 Si consideri l'equazione di Langevin

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

ove η 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 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 la seguente legge stocastica:

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

$f(t)$ è un processo stocastico descritto dall'equazione di Langevin

$$\frac{df}{dt} + \frac{1}{\tau_c}f = \sqrt{2C}\eta,$$

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

- scrivere l'equazione che regola l'evoluzione temporale della densità di probabilità $p(x, f, t)$;
- trovate la densità di probabilità invariante di x .

Es. 4 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. 5 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 diffusione

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

- 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. 6 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

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

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

Dimostrare che

$$D = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\langle x(t)^2 \rangle}{2t} = \frac{v^2 \langle \tau^2 \rangle}{2 \langle \tau \rangle} .$$

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

$$D = \frac{\langle v^2 \rangle \langle \tau^2 \rangle}{2 \langle \tau \rangle} .$$

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

Es. 7 Considerare la mappa standard:

$$I(t+1) = I(t) + K \sin \theta(t)$$

$$\theta(t+1) = \theta(t) + I(t+1) \pmod{2\pi} ,$$

- verificare che è una mappa simplettica;
- * calcolare numericamente il coefficiente di diffusione

$$D = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\langle (I(t) - I(0))^2 \rangle}{2t}$$

al variare di K , la media è su un set di condizioni iniziali $I(0)$.

Confrontare il risultato ottenuto con la *Random Phase Approximation* in cui, assumendo che gli angoli $\theta(t)$ siano variabili indipendenti, si ha $D_{RPA} = K^2/4$. Notare che per particolari valori di K la diffusione è anomala, cioè $\langle (I(t) - I(0))^2 \rangle \sim t^{2\nu}$ con $\nu > 1/2$, ad esempio per $K = 6.9115$ si ha $2\nu \simeq 1.33$. Notare che se si ha diffusione anomala allora $D = \infty$.

Es. 8 Una particella di massa m non soggetta a forze esterne si muove sul segmento $-L/2 \leq q < L/2$, con condizioni al bordo periodiche in $\pm L/2$, la densità di probabilità al tempo $t = 0$ è

$$\rho(q, p, 0) = \delta(q)g(p)$$

ove $g(p) = 1/\Delta$ per $|p| \leq \Delta/2$ e $g(p) = 0$ per $|p| > \Delta/2$.

- Mostrare che la densità di probabilità marginale per q , $\rho_q(q, t) = \int \rho(q, p, t) dp$,

converge per $t \rightarrow \infty$ alla densità costante e dare una stima del tempo di rilassamento verso la densità stazionaria.

- Calcolare

$$F(t) = \langle \cos \frac{2\pi q(t)}{L} \rangle = \int \int \cos \frac{2\pi q}{L} \rho(q, p, t) dq dp.$$

Es. 9 Data la mappa deterministica $x_{t+1} = x_t + \omega \text{ mod } 1$,

- si trovi la densità di probabilità invariante;
- discutere l'ergodicità per ω razionale o irrazionale;
- mostrare che tale sistema non è mai mixing.

Es. 10 Si consideri la mappa deterministica:

$$x(t+1) = f(x(t))$$

ove

$$\begin{aligned} f(x) &= x + \frac{3}{4} \quad \text{se } 0 \leq x < \frac{1}{4} \\ f(x) &= x + \frac{1}{4} \quad \text{se } \frac{1}{4} \leq x < \frac{1}{2} \\ f(x) &= x - \frac{1}{4} \quad \text{se } \frac{1}{2} \leq x < \frac{3}{4} \\ f(x) &= x - \frac{3}{4} \quad \text{se } \frac{3}{4} \leq x < 1, \end{aligned}$$

- mostrare che $\rho = 1$ è una densità invariante;
- mostrare che il sistema non è ergodico rispetto alla densità $\rho = 1$;
- discutere se il sistema è ergodico rispetto ad altre densità invarianti;
- discutere se vale o meno il teorema di ricorrenza di Poincaré.

Es. 11 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 Δ 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. 12 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 $t \rightarrow \infty$, $p(x, t)$ 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. 13 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. 14 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. 15 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. 16 In ogni catena di Markov con N stati si ha

$$\sum_{j=1}^N p_{i \rightarrow j} = 1,$$

se vale anche la relazione

$$\sum_{i=1}^N p_{i \rightarrow j} = 1$$

la matrice di transizione è detta *doppiamente stocastica*,

- mostrare che in questo caso si ha sempre $p_i^{inv} = 1/N$.

Es. 17 Una moneta è lanciata ripetutamente con risultati y_0, y_1, \dots ove y_n prende valori 1 (testa) oppure 0 (croce) con probabilità $1/2$. Per $n \geq 1$ si consideri la variabile $x_n = y_n + y_{n-1}$;

- discutere se x_n è un processo markoviano.

Es. 18 Quattro palle bianche e quattro nere sono distribuite in due urne in modo che ogni urna contenga quattro palle. Ad ogni passo $n = 1, 2, \dots$ si prende, con probabilità $1/4$, una delle palle in ciascuna urna e le si scambiano. Sia X_n il numero di palle bianche nella prima urna,

- mostrare che il processo è una catena di Markov e trovare la matrice di transizione;
- discutere se vale o meno il bilancio dettagliato;
- trovare la matrice di transizione nel caso di N palle bianche e N nere con due urne che contengono N palle.

Es 19 Due camminatori si muovono indipendentemente su un anello discreto con N stati (N dispari) e con condizioni periodiche al bordo, con le stesse probabilità di transizione:

$$p_{n \rightarrow n \pm 1} = \frac{1}{2}$$

- mostrare che in un tempo arbitrariamente lungo i due camminatori si incrociano con probabilità 1;

- al tempo $t = 0$ i due camminatori sono nello stesso sito (ad esempio $n = 1$), calcolare il tempo medio in cui si incontrano ancora nello stesso sito;
- generalizzare al caso in cui i due camminatori sono indipendenti ma con probabilità di transizione diverse, tali che le due catene di Markov sono irriducibili e aperiodiche e le probabilità invarianti sono costanti $p_i^{inv(1)} = p_i^{inv(2)} = 1/N$;
- considerare il caso con $K \geq 3$ camminatori indipendenti.

Es. 20 Data la catena di Markov con 3 stati con la matrice di transizione

$$\begin{aligned}
 p_{1 \rightarrow 1} &= 1 - q, & p_{1 \rightarrow 2} &= \frac{q}{2}, & p_{1 \rightarrow 3} &= \frac{q}{2}, \\
 p_{2 \rightarrow 1} &= 0, & p_{2 \rightarrow 2} &= 1 - q, & p_{2 \rightarrow 3} &= q, \\
 p_{3 \rightarrow 1} &= 1, & p_{3 \rightarrow 2} &= 0, & p_{3 \rightarrow 3} &= 0,
 \end{aligned}$$

con $0 < q < 1$.

- trovare le probabilità stazionarie;
- calcolare l'entropia di Shannon h_S ;
- calcolare l'entropia topologica h_T e mostrare che $h_T \geq h_S$.

Es. 21 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. 22 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. 23 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 (maggiore di 2) esistono delle condizioni iniziali $(p_1(0), \dots, p_N(0))$

tali che le $p_i(t)$ per $t \rightarrow \infty$ non hanno un limite;

- la catena è ergodica per ogni valore di N , nel senso che la media temporale su un tempo infinito coincide con la media calcolata sulla probabilità invariante.

Es. 24 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. 25 Si consideri la seguente versione del modello di Ehrenfest: una particella si muove su una griglia costituita dai punti $x = ma$ ove m è un numero intero nel range $-L \leq m \leq L$. Ad ogni passo temporale τ la probabilità della transizione $m \rightarrow m + 1$ vale $(1 - m/L)/2$, mentre la probabilità della transizione $m \rightarrow m - 1$ vale $(1 + m/L)/2$.

- Mostrare che nel limite continuo in cui

$$a \rightarrow 0, \tau \rightarrow 0, L \rightarrow \infty$$

in modo tale che

$$\frac{a^2}{\tau} \rightarrow 2D, La^2 \rightarrow \sigma^2$$

vale l'equazione di Fokker-Planck

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \frac{D}{2\sigma^2} \frac{\partial(xp)}{\partial x} + D \frac{\partial^2 p}{\partial x^2}.$$

Es. 26 Si consideri la generica master equation con due stati

$$\frac{dp_1}{dt} = -ap_1 + bp_2, \quad \frac{dp_2}{dt} = ap_1 - bp_2,$$

con $a > 0$ e $b > 0$:

- data $p_1(0)$, calcolare $p_1(t)$;
- verificare che si ha il bilancio dettagliato ad ogni tempo, cioè:

$$p_1^{inv} p_{1 \rightarrow 2}(t) = p_2^{inv} p_{2 \rightarrow 1}(t),$$

- calcolare la funzione di correlazione $\langle f(t)f(0) \rangle$ ove $f = 1$ quando il sistema è nello stato 1 mentre $f = -1$ se il sistema è nello stato 2.

In analogia con le catene di Markov, la funzione di correlazione è definita come segue:

$$\langle f(t)f(0) \rangle = \sum_i f_i f_j p_i^{inv} p_{i \rightarrow j}(t).$$

Es. 27 Si consideri la master equation con tre stati

$$\frac{dp_1}{dt} = -2ap_1 + (a - \epsilon)p_2 + (a + \epsilon)p_3 ,$$

$$\frac{dp_2}{dt} = (a + \epsilon)p_1 - 2ap_2 + (a - \epsilon)p_3 ,$$

$$\frac{dp_3}{dt} = (a - \epsilon)p_1 + (a + \epsilon)p_2 - 2ap_3 ,$$

con $a > \epsilon > 0$

- verificare che non si ha mai il bilancio dettagliato cioè, per ogni t :

$$p_i^{inv} p_{i \rightarrow j}(t) \neq p_j^{inv} p_{j \rightarrow i}(t) ;$$

- dare un'interpretazione fisica del risultato.

Es. 28 Mostrare che per la catena di Markov dell' esercizio (14) la funzione

$$H(t) = \sum_i p_i(t) \ln \left(\frac{p_i(t)}{p_i^{inv}} \right)$$

è sempre non crescente.

Suggerimento: si ricordi il teorema H per le master equation, si veda ad esempio N.G. van Kampen *Stochastic processes in physics and chemistry* (North-Holland, 1992), capitolo 5.

Es. 29 Si generalizzi il risultato precedente al caso di catene di Markov aperiodiche e irriducibili con N stati in cui $p_{i \rightarrow j} = p_{j \rightarrow i}$.

Es. 30 Le variabili $\{x_n\}$ sono indipendenti e distribuite con una gaussiana a

media nulla e varianza unitaria. Trovare il numero medio di tentativi necessari affinché si abbia per la prima volta $x_n > \Delta$, discutere il caso $\Delta \gg 1$.
Suggerimento Usare il lemma di Kac e, per il caso $\Delta \gg 1$, il metodo di Laplace.

Es. 31 Si consideri un sistema deterministico

$$\frac{dx_n}{dt} = F_n(\mathbf{x}) \quad n = 1, 2, \dots, N$$

si assuma che sia ergodico e mixing rispetto ad una $\rho_{inv}(\mathbf{x})$ in una regione limitata di R^N , cioè per ogni x_n si ha $-\infty < x_n^{min} < x_n < x_n^{Max} < \infty$.

• Mostrare che, per t piccolo e positivo, si ha

$$\langle x_n(t)x_n(0) \rangle = \langle x_n^2 \rangle - Ct^2 + O(t^3)$$

con $C > 0$.

• Mostrare che nel caso con rumore:

$$\frac{dx_n}{dt} = F_n(\mathbf{x}) + \sqrt{2\epsilon}\eta_n \quad n = 1, 2, \dots, N$$

ove $\{\eta_n\}$ sono rumori bianchi scorrelati $\langle \eta_n(t_1)\eta_j(t_2) \rangle = \delta_{jn}\delta(t_1 - t_2)$, se $\epsilon > 0$ si ha

$$\langle x_n(t)x_n(0) \rangle = \langle x_n^2 \rangle - C(\epsilon)t + O(t^2)$$

con $C(\epsilon) > 0$.

• Come conciliare i due risultati nel limite $\epsilon \ll 1$? Considerare il risultato dell'esercizio (30) e discutere il limite di validità della descrizione markoviana di un sistema deterministico.

Es. 32 Si consideri il circuito RLC a temperatura T con rumore:

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

ove η_1 e η_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. 33 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. 34 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 1) ed $1/L$ sia un intero, si calcoli la corrente media J nel caso $EL \ll c$ 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. 35 Data le equazioni differenziali stocastiche:

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

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

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

Es. 36 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. 37 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;
- 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 $\delta x_n(0) = \delta_{nj} \delta x_j(0)$:

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

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

Es. 38 Si consideri un sistema con Hamiltoniana $H_0(\mathbf{Q}, \mathbf{P})$, in cui $\langle v \rangle = 0$ ove v è la velocità di una particella (diciamo quella con indice 1) nella direzione x ; si introduca una piccola perturbazione

$$H_0(\mathbf{Q}, \mathbf{P}) \rightarrow H_0(\mathbf{Q}, \mathbf{P}) - E(t) \sum_n x_n$$

ove x_n è la coordinata nella direzione x dell' n -ma particella e $E(t) = 0$ se $t < 0$ e $E(t) = E$ per $t > 0$, calcolare in termini di opportune quantità statistiche del sistema imperturbato $\langle v(t) \rangle$, discutere in particolare il limite $t \rightarrow \infty$ e la connessione di questo risultato con la legge di Ohm.

Es. 39 Si consideri l'equazione differenziale stocastica

$$\frac{dx}{dt} = -\gamma x + \sqrt{2c}\eta$$

con condizioni iniziali e finali $x(0) = x_I, x(T) = x_F$. Trovare la traiettoria più probabile, si discuta il caso $T \gg 1/\gamma$.

Es. 40 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. 41 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. 42 Si consideri un sistema con $N \gg 1$ particelle ed energia E , in cui

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

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

Es. 43 Si consideri il random walk su un anello di lunghezza N , con le probabilità di transizione

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

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)

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

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:

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

* calcolare la quantità

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

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

Es. 44 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).