Master en Sciences Physiques

Nanophysique PHYS-F-475

CHAPITRE 7. Stochastic Processes

Exercices

1. **Changement de variable dans des équations stochastique** L'équation de Langevin
$$\frac{dx_i}{dt} = b_i(\mathbf{x}) + q_{ij}(\mathbf{x})\psi_j(t), < \psi_i(t)\psi_j(t') >= \delta_{ij}\delta(t-t') \tag{1}$$
(avec sommation sur les indices répétés) est equivalent, dans l'interprétation de Ito, à l'équation Fokker-Planck:
$$\frac{\partial}{\partial t}p(\mathbf{y},t) = -\frac{\partial}{\partial y_i}\left(b_i(\mathbf{y})p(\mathbf{y};t) - \frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial y_j}q_{ik}(\mathbf{y})q_{jk}(\mathbf{y})p(\mathbf{y};t))\right) \tag{2}$$
Faites un changement de variables $y_i \to y_i(\mathbf{z})$ dans l'équation Fokker-Planck et derivez l'équation Fokker-Planck pour la fonction $\tilde{p}(\mathbf{z};t) = p(\mathbf{y}(\mathbf{z}),t)$. Quel est le nouveau "drift" b_i et la nouvelle matrice de correlation $q_{ik}q_{jk}$? Quel est l'équation de Langevin pour les variables z?

2. **Multiscale Exansion** Soit un système des coordonnées $\mathbf{z}$ et l'Hamiltonien $H(\mathbf{z})$. Pour deux fonctions arbitraires, une fonction de l'Hamiltonien $g(H(\mathbf{z}))$ et une fonction des coordonnées $\rho_1(\mathbf{z})$, prouvez que:
$$0 = \int g(H(\mathbf{z}))\{\rho_1, H\}d\mathbf{z} \tag{3}$$

3. **Multiscale Expansion** Le terme d'ordre zéro satisfait l'équation
$$0 = \frac{\partial}{\partial R}f_0(E,R) + < \frac{\partial H(\mathbf{z},R)}{\partial R} > \frac{\partial}{\partial E}f_0(E,R) \tag{4}$$
où $< .... >$ est la moyenne microcanonique. Pour la condition initiale $f_0(E,R(0)) = \delta(E-E_0)/\Sigma(E,R(0))$ (où Σ et la normalization), prouvez que la fonction $f_0(E,R(t)) = \delta(E-E')/\Sigma(E,R(t))$ avec
$$\int d\mathbf{z}\Theta(E' - H(\mathbf{z},R(t))) = \int d\mathbf{z}\Theta(E_0 - H(\mathbf{z},R(0))) \tag{5}$$
est une solution.

4. **Generalized Langevin Equation** Soit la Hamiltonienne $H(X,Y) = H_S(X) + H_B(X,Y)$, avec $X = X_1, ..., X_N, Y = Y_1, ..., Y_M$, et léquations des mouvement

$$dX_i/dt = A_{ij}\partial_{X_j} H \tag{6}$$

$$dY_i/dt = B_{ij}\partial_{Y_j} H \tag{7}$$

avec $A_{ij} = -A_{ji}$ et $B_{ij} = -B_{ji}$, et

$$H_B(X,Y) = \frac{1}{2}(Y_i - a_i(X))K_{ij}(Y_j - a_j(X)) \tag{8}$$

(a) Vérifier que H est conserveé

(b) Développer l'équation pour dY/dt

(c) Développer la solution formelle de $Y(t)$

(d) Faire un integration par partie de sorte que on trouve da/dt dans l'integral

(e) Remplacer da/dt par dX/dt.

(f) En utilsant ces résultats, écrire l'équation de mouvement de X.

(g) Identifier le force fluctuant, $F_i(T)$.

(h) Si $P(Y(0)|X(0)) \sim e^{-H_B(X(0),Y(0))/k_BT}$, montrer que

$$< Y_i(0) >= a_i(X(0)) \tag{9}$$

$$< (Y_i(0) - a(X_i(0)))(Y_i(0) - a(X_i(0))) >= k_BTK^{-1} \tag{10}$$

et

$$< F_i(t) >= 0 \tag{11}$$

$$< F_i(t)F_j(t') >= k_BTL_{ij}(t-t'), L(t) = K \cdot e^{tB\cdot K} \tag{12}$$