Master en Sciences Physiques

Nanophysique PHYS-F-475

CHAPITRE 7. Stochastic Descriptions

Exercices

1. **Mouvement Brownien : Processus de Langevin** Prouvez le résultat donné sur la diapositive 6 pour $\langle(\mathbf{r}(t) - \mathbf{r}(0))\rangle$.

2. **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 $\tilde{p}(\mathbf{z}; t)$. 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?

3. **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
$$dX_i/dt = A_{ij}\partial_{X_j}H \tag{3}$$
$$dY_i/dt = B_{ij}\partial_{Y_j}H \tag{4}$$
avec $A_{ij} = -A_{ji}$ et $B_{ij} = -B_{ji}$, et
$$H_B(X, Y) = \frac{1}{2}(Y_i - a_i(X))K_{ij}(Y_j - a_j(X)) \tag{5}$$
   (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

$$\begin{aligned} < Y_i(0) > &= a_i(X(0)) \\ < (Y_i(0) - a(X_i(0)))(Y_i(0) - a(X_i(0))) > &= k_BTK^{-1} \end{aligned} \tag{6}$$

et

$$\begin{aligned} < F_i(t) > &= 0 \\ < F_i(t)F_j(t') > &= k_BTL_{ij}(t-t'), L(t) = K \cdot e^{tB \cdot K} \end{aligned} \tag{7}$$

4. **MLP** L'action pour la modèle stochastique

$$\frac{d}{dt}x_i = b_i(x) + Q_{ij}^{-1}(x)\eta_j(t)$$

avec $< \eta_i(t)\eta_j(t') >= \delta_{ij}\delta(t-t')$, dans l'approximation *"weak noise"* est simplement

$$S_{eff} = \frac{1}{2}\int_0^T \left(\frac{dx_i}{dt} - b_i\right) D_{ij} \left(\frac{dx_j}{dt} - b_j\right) dt$$

ou $D_{ij} \equiv Q_{il}Q_{jl}$. Prouvez le suivant: si la force déterministe a la form conservatif (dans l'approximation "over-damped"), $b_i = L_{ij}(x)\frac{\partial V(x)}{\partial x_j}$, et s'il y a une relation *fluctuation-dissipation*, $L_{ij} = \epsilon D_{ij}^{-1}$, la "most likely path" est simplement la solution du

$$\frac{d}{dt}x_i = \pm L_{ij}(x)\frac{\partial V(x)}{\partial x_j}$$

Qu'est-ce qui détermine la signe?