Master en Sciences Physiques

Nanophysique PHYS-F-475

CHAPITRE 8. 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
$$\frac{dx_i}{dt} = b_i(\mathbf{x}) + q_{ij}(\mathbf{x})\psi_j(t), < \psi_i(t)\psi_j(t') >= \delta_{ij}\delta(t - t') \quad (1)$$
(avec sommation sur les indices répétés) est equivalent, dans l'interprétation de Ito, à l'équation Fokker-Planck:
$$\frac{\partial}{\partial t}p(\mathbf{y}, t) = -\frac{\partial}{\partial y_i}\left(b_i(\mathbf{y})p(\mathbf{y}; t) - \frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial y_j}q_{ik}(\mathbf{y})q_{jk}(\mathbf{y})p(\mathbf{y}; t)\right)\right) \quad (2)$$
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
$$dX_i/dt = A_{ij}\partial_{X_j}H \quad (3)$$
$$dY_i/dt = B_{ij}\partial_{Y_j}H \quad (4)$$
avec $A_{ij} = -A_{ji}$ et $B_{ij} = -B_{ji}$, et
$$H_B(X, Y) = \frac{1}{2}(Y_i - a_i(X))K_{ij}(Y_j - a_j(X)) \quad (5)$$
   (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

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

et

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

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?

CHAPITRE 9. Protéines

Exercices

1. **DVLO Model** En utilisant la relation entre champ et densité pour un gaz parfait et l'équation de Poisson, derivez le champ électrostatique dehors un protéine avec surface charge σ dans un solution des species ayant densité n_j et charge z_j, $j = 1, ..., N$. Vous devez linéariser léquation de Poisson.

2. **van der Waals force** Supposez qu'une protéine est modelé comme un sphére de rayon R composé de N petite particules (e.g. des atoms) ditribué uniformémant dans la volume de la protéines. Si chaque paire de petit particule interact avec la force vdW, $V(r_{12}) = -\epsilon(\frac{\sigma}{r_{12}})^6$:

   (a) Quelle est la force totale sur une petite particule une distance $r > R$ du centre d'une proteine?

   (b) En utilisant ce résultat, quelle est la force vdW entre deux protéines?

3. **Depletion Force** Soit deux grandes particules, sphérique avec rayon R, dans un gaz des petites particles avec rayon a. Si la pression partiale des petites particules est P, calculez la force "depletion" quand les grand particules sont séparées par un distance r. Supposez que les petites particules simplement exert une pression uniforme sur chaque grande particule. (Hint: Calculate the partition function and free energy.)