Série 6 - Corrigés

• Exercice 1

L'équation de Fokker - Planck decrit l'évolution temporelle de la densité de probabilité $P(x, v, t)$.

La quantité $P(x,v,t)\,dx\,dv$ represente la probabilité de trouver la particule dans un volume $dx\,dv$ dans l'espace des phases.

Si la particule est bien decrite par l'équation de Langevin dans un certain champ de force $F(x)$,

$$\begin{cases} \dfrac{dv}{dt} = -\left(\dfrac{\gamma}{m}\right)v + \dfrac{F(x)}{m} + \dfrac{\xi(t)}{m} \\ \dfrac{dx}{dt} = v \end{cases} \qquad (1)$$

l'équation de Fokker-Planck a la forme suivante

$$\frac{\partial P}{\partial t} = -v\left(\frac{\partial P}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial v}\left\{\left[\left(\frac{\gamma}{m}\right)v - \frac{F(x)}{m}\right]P\right\} + \left(\frac{D\gamma^2}{m^2}\right)\frac{\partial^2 P}{\partial v^2}$$

(2)

dans la limite over-damped (tres grand ammortissement) l'équation de Langevin devient

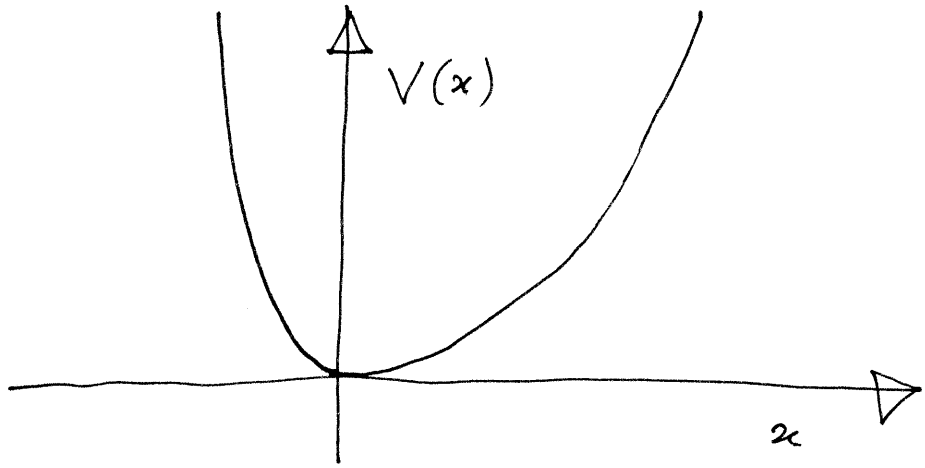
$$v = \frac{1}{\gamma}\left[F(x) + \xi(t)\right] \qquad (3)$$

et l'équation de Fokker-Planck correspondente devient l'équation de Smoluchowski, qu'on a deja vue :

$$\frac{\partial P}{\partial t} = -\frac{1}{\gamma}\frac{\partial}{\partial x}\left[F(x)\,P\right] + D\frac{\partial^2 P}{\partial x^2} \qquad (4)$$

où $P = P(x,t)$ ne depende plus de la vitesse v.

On doit résoudre l'équation (4) dans le potentiel montré ci-dessous



$$V(x) = \begin{cases} \frac{1}{2} k_1 x^2 & x < 0 \\ \frac{1}{2} k_2 x^2 & x \geq 0 \end{cases} \qquad \text{(4-bis)}$$

Nous savons que la solution de (4) dans un potentiel harmonique symétrique est à l'équilibre ($t \to \infty$) la distribution de Boltzmann

$$p^s(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\,\sigma_k} e^{-\frac{x^2}{2\sigma_k^2}} \qquad (5)$$

où $\sigma_k = \sqrt{\frac{k_B T}{k}}$, ($k$ = constante de force du pot. harmonique)

On peut imaginer que la solution stationnaire de (4) dans le potentiel (4-bis) ait la forme :

$$\overset{S}{P}(x) = A e^{-\frac{x^2}{2\sigma_1^2}} \Theta(-x) + B e^{-\frac{x^2}{2\sigma_2^2}} \Theta(x) \quad (6)$$

où $\Theta(x) = \begin{cases} 1 & x \geq 0 \\ 0 & x < 0 \end{cases}$ est la fonctionne "step" de Heaviside.

La fonctionne (6) est évidemment la bonne solution stationnaire partout sur l'axe x. Pourtant, sa dérivé deuxième n'est pas continue en $x=0$. Donc, il faut prouver que (6) est une bonne solution dans l'origine.

Ecrivons l'équations de Smoluchowski de façon plus concise :

$$\frac{\partial P}{\partial t} = -\frac{1}{\gamma}\frac{\partial}{\partial x}(FP) + D\frac{\partial^2 P}{\partial x^2} = \hat{L}\, P(x)$$

où nous avons introduit l'operateur lineaire

$$\hat{L} = -\frac{1}{\gamma}\frac{\partial}{\partial x} F(x) + D\frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

Examinons la solution (6) a droite et a gauche de l'origine.

pour $0 < \epsilon \ll 1 \Rightarrow \quad (F_1 = k_1 x$

$$\hat{L}\, P^s(\epsilon) = -\frac{1}{\gamma}(\partial_x F_1)\, P^s - \frac{F_1}{\gamma}(\partial_x P^s) + D\partial_x^2 P$$

$$= \left(\frac{k_1}{\gamma}\right) P^s(\epsilon) + \left(\frac{\epsilon^2 k_1}{\gamma \sigma_1^2}\right) P^s(\epsilon) +$$

$$-\left(\frac{D}{\sigma_1^2}\right) P^s(\epsilon) + \left(\frac{D\epsilon^2}{\sigma_1^4}\right) P^s(\epsilon)$$

donc, en prenant la limte pour $\epsilon \to 0^+$

$$\lim_{\epsilon \to 0^+} \hat{L}\, P^s(\epsilon) = \left[\frac{k_1}{\gamma} - \frac{D}{\sigma_1^2}\right] = 0$$

si nous nous rappellons de la relation d'Einstein

$$D = \frac{k_B T}{\gamma}$$

et de la forme explicite de l'écart-type à l'équilibre $\sigma_1^2 = k_B T / k_1$.

De façon similaire, on peut démontrer que $p^s(x)$ est une bonne solution dans l'origine dans le limite $x \to 0^-$.

Cela nous reste seulement de déterminer les constantes A et B.
D'abord, on observe que on doit avoir :

$$\lim_{x \to 0^+} p^s(x) = \lim_{x \to 0^-} p^s(x)$$

cela qui donne $A = B$.
La normalisation fait le reste

$$\int_{-\infty}^{+\infty} P^s(x) = 1$$

$$= A \int_{-\infty}^{0} e^{-\frac{x^2}{2\sigma_1^2}} dx + B \int_{0}^{+\infty} e^{-\frac{x^2}{2\sigma_2^2}} dx = \underbrace{\{A = B\}}$$

$$= A \left[\sqrt{\frac{\pi}{2}}\, \sigma_1 + \sqrt{\frac{\pi}{2}}\, \sigma_2 \right] = 1$$

de où $\qquad A = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{(\sigma_1 + \sigma_2)}$

et donc

$$\boxed{P^s(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{(\sigma_1+\sigma_2)} \left[\Theta(-x)\, e^{-\frac{x^2}{2\sigma_1^2}} + \Theta(x)\, e^{-\frac{x^2}{2\sigma_2^2}} \right]}$$

Maintenant on peut calculer le moments (observez que, du moment que le potentiel n'est pas symetrique, $\langle x \rangle \neq 0$)

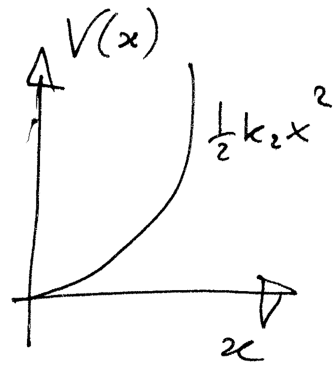
Apres de l'algebre ennuyante
on obtient

$$
\begin{cases}
\langle x \rangle = \sqrt{\dfrac{2}{\pi\beta}}\,\dfrac{1}{\sqrt{k_1}+\sqrt{k_2}}\left(\dfrac{k_1-k_2}{k_1k_2}\right) \\[2ex]
\langle x^2 \rangle = \dfrac{1}{2\beta}\,\dfrac{1}{k_1k_2\left(\sqrt{k_1}+\sqrt{k_2}\right)}\left[k_1^{3/2}+k_2^{3/2}\right]
\end{cases}
$$

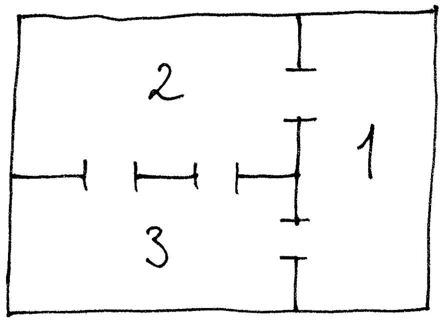
donc on retrouve $\lim\limits_{k_1 \to k_2} \langle x \rangle = 0$

et dans la limite $k_1 \gg k_2$
on a

$$\langle x \rangle \longrightarrow \approx 1/\sqrt{k_1} \implies$$



• Exercice 2



Si la souris est dans la chambre 1, elle peut choisir avec prob. $1/2$ entre le deux portes, $1 \to 2$ et $1 \to 3$.
Donc $Q_{21} = Q_{31} = 1/2$. De façon similaire on calcule le reste des elements de la matrice de transition.

$$Q = \begin{pmatrix} 0 & 1/3 & 1/3 \\ 1/2 & 0 & 2/3 \\ 1/2 & 2/3 & 0 \end{pmatrix}$$

La pauvre souris ne reste jamais, donc les elements diagonaux de Q sont égales a zéro.

Les valeurs propres de Q sont

$$\begin{cases} \lambda_1 = 1 \\ \lambda_2 = -1/3 \\ \lambda_3 = -2/3 \end{cases}$$

Le vecteur propre correspondent à $\lambda_1 = 1$ est

$$\psi^R_{(1)} = \left(1, \frac{3}{2}, \frac{3}{2}\right) \frac{1}{\left(1 + \frac{3}{2} + \frac{3}{2}\right)} =$$

$$= \left(\frac{1}{4}, \frac{3}{8}, \frac{3}{8}\right)$$

donc les probabilités d'occupation asymptotiques sont

$$\begin{cases} p^\infty(\text{chambre } 1) = 1/4 \\ p^\infty(\text{chamb. } 2) = p^\infty(\text{chamb. } 3) = 3/8 \end{cases}$$