Tutorat N.1

Exercice 1: Mouvement Brownien, théorie de Langevin

Sous l'effet de l'agitation thermique, des particules en suspension dans un fluide sont animées d'un mouvement incessant et aléatoire appelé mouvement Brownien (Brown, 1827), décrit successivement par A.Einstein (1905), M. von Smoluchowski (1906), P.Langevin (1908), et étudié expérimentalement par J.Perrin.

On note $\vec{r}(t) = \{x(t), y(t), z(t)\}$ la position au temps t du centre de gravité d'une particule de masse m, $\vec{F}_s(t)$ la force totale que le solvant exerce sur cette particule, et $\vec{F}_e(t)$ la somme des forces externes qui agissent sur la particule. On observe qu'à chaque réalisation de l'expérience la trajectoire de la particule est différente. On en déduit donc que la force $\vec{F}_s(t)$ est une variable aléatoire, et que chaque expérience correspond à une réalisation différente de toute l'histoire $\vec{F}_s(t)$. Dans la suite on suppose donc qu'à chaque temps t la force $\vec{F}_s(t)$ est une variable aléatoire, et on dénote $\langle \bullet \rangle$ la moyenne sur la distribution de probabilité jointe des forces $\vec{F}_s(t)$ dans un intervalle de temps correspondant à la durée des expériences considérées.

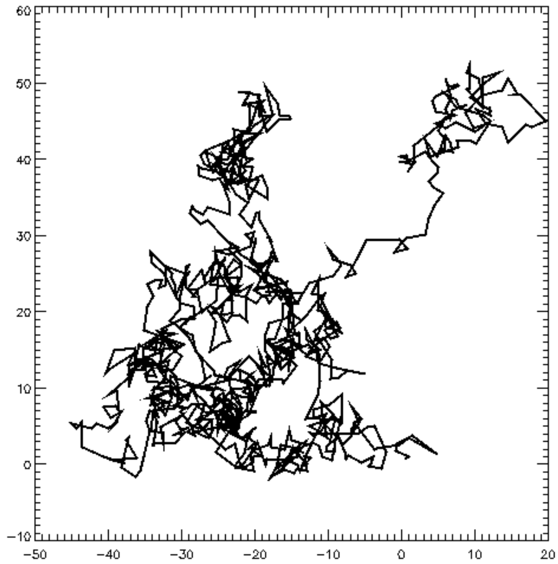

FIG. 1: Exemple d'un mouvement Brownien en deux dimensions

Par simplicité on considérera un mouvement unidimensionnel, la coordonnée étant notée $x(t)$. Langevin a proposé de décomposer $F_s(t)$ en une composante moyenne $-\zeta \frac{dx(t)}{dt}$ décrivant le frottement du fluide (ζ est le coefficient de frottement), et une composante aléatoire $\eta(t)$ indépendante de la vitesse et de la position, soit:

$$F_s(t) = -\zeta \frac{dx(t)}{dt} + \eta(t) \tag{1}$$

On suppose la force aléatoire $\eta(t)$ de moyenne nulle, et décorrélée dans le temps:

$$\begin{aligned} &\langle \eta(t) \rangle = 0 \ , \\ &\langle \eta(t)\eta(t') \rangle = \sigma^2 \delta(t - t') \ . \end{aligned} \tag{2}$$

1. Discuter la signification de l'équation (2). Expliquer pourquoi la moyenne de η est nulle. Considérer la moyenne temporelle de la force sur un intervalle de temps Δt:

$$\overline{\eta}(t) = \frac{1}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} \eta(t') dt' \ . \tag{3}$$

Montrer que la corrélation entre $\overline{\eta}(t)$ et $\overline{\eta}(t')$ est donnée par

$$\langle\overline{\eta}(t)\overline{\eta}(t')\rangle = \frac{1}{\Delta t^2}\int_t^{t+\Delta t} ds \int_{t'}^{t'+\Delta t} ds' \langle\eta(s)\eta(s')\rangle \ , \tag{4}$$

et qu'elle est nulle si $|t-t'| > \Delta t$. Calculer la variance de $\overline{\eta}(t)$, $\langle\overline{\eta}(t)^2\rangle$. Montrer qu'elle diverge quand $\Delta t \to 0$.

2. Ecrire l'équation qui régit la position de la particule pour une expérience donnée (donc pour une réalisation donnée $F_s(t)$ de la force aléatoire), et la résoudre en absence de force externe, $F_e(t) = 0$. Montrer que la solution générale est

$$x(t) = x_0 + v_0\tau(1 - e^{-t/\tau}) + \int_0^t dt' \frac{\tau\eta(t')}{m}[1 - e^{-(t-t')/\tau}] \ . \tag{5}$$

Quelle est la valeur de l'échelle de temps τ qui apparaît naturellement?

3. Déduire de l'expression de $x(t)$ le déplacement quadratique moyen $\Delta(t) = \left\langle [x(t) - x_0]^2 \right\rangle$. Développer son expression pour les temps courts et longs devant τ. Pour le temps longs, montrer que $\Delta(t) \sim 2Dt$ et calculer D.

4. Calculer la valeur de τ pour une particule de rayon $b = 10$ nm, de masse volumique $\rho = 1$ g cm^{-3}, dont le coefficient de frottement est donné par la loi de Stokes $\zeta = 6\pi\eta b$ dans un solvant de viscosité $\eta = 10^{-3}$ Pa s.

5. On considère maintenant une situation où le terme de frottement est dominant par rapport à l'inertie, $|M\ddot{x}| \ll |\zeta\dot{x}|$; au même temps la particule est soumise à l'action d'une force linéaire, $F_e = -kx$ (ces forces peuvent être produite par des pièges optiques). Ecrire l'equation du mouvement dans ce cas et la resoudre. Calculer l'energie potentielle $V(t) = k\left\langle x(t)^2 \right\rangle/2$. Montrer qu'une nouvelle échelle de temps τ' apparaît et donner son expression. Montrer que pour $t \gg \tau'$, $V(t)$ tend vers une valeur d'équilibre. En déduire que, pour que le principe d'équipartition de l'énergie soit valable, la condition $\sigma^2 = 2\zeta k_B T$ est nécessaire.

6. En utilisant la condition sur σ^2 déduite au point précedent, montrer que $D = k_BT/\zeta$. On considère maintenant une particule soumise à l'action d'une force externe constante dans le temps F_e. Comment le résultat (5) est modifié en présence de cette force externe? Calculer la valeur moyenne $\langle x(t)\rangle$ en présence de la force externe; montrer que, pour les temps longs dévant τ, on obtient $\langle x(t)\rangle = \mu F_e t$, et calculer la constante μ (μ est dite *mobilité*). Déduire de ce résultat la *rélation de Einstein*, $D = \mu\, k_BT$.

Exercice 2: somme de variables aléatoires et théorème de la limite centrale

Le but de cet exercice est d'étudier le comportement limite de la somme d'un grand nombre de variables aléatoires. La densité de probabilité d'une variable aléatoire X à valuers réelles sera notée $P_X(x)$. Par simplicité, nous supposerons la loi de X symétrique, $P_X(x) = P_X(-x)$, de sorte que le $n$ème moment $M_n(X) = \langle X^n\rangle$ soit nul pour n impair.

2A: Fonction génératrice et théorème de la limite centrale (TLC)

La fonction génératrice est définie de la facon suivante:

$$G_X(t) = \left\langle e^{itX} \right\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx P_X(x) e^{itx} \ . \tag{6}$$

On définit le $n$ème cumulant de X, $M_n^c(X)$, par

$$\log G_X(t) = \sum_{n=1}^{\infty} M_n^c(X)\frac{(it)^n}{n!} \tag{7}$$

1. Montrer que si l'intégrale existe, alors $|G_X(t)| \le 1$.

2. Comment obtient-on $P_X(x)$ à partir de $G_X(t)$?

3. Les cumulants ne sont pas toujours bien définis. Donner la condition sur $P_X(x)$ pour que les prémiers n cumulants soient bien définis.

4. Comment s'expriment les deux prémiers cumulants non nuls en fonction des moments de X?
5. Montrer que les cumulants d'une variable gaussiene ($P_X(x) = \mathcal{G}_\sigma(x) = \exp(-x^2/(2\sigma^2))/\sqrt{2\pi\sigma^2}$) sont nuls pour $n > 2$.
6. On considère $S_n = X_1 + \cdots + X_N$, où les X_i sont N variables aléatoires indépendantes distribuées avec la même loi que X. Que vaut la fonction génératrice de S_N en fonction de celle de X ? Que valent les cumulants de S_N en fonction de ceux de X ?
7. *Théorème de la limite centrale (TLC)* - On définit $s_N = S_N/\sqrt{N}$. Calculer la fonction génératrice de s_N quand N est très grand. En déduire que la distribution de s_N converge vers une distribution gaussienne de variance $\sigma^2 = M_2^c(X) = \langle X^2 \rangle$, qu'on denotera $\mathcal{G}_\sigma(x)$.
8. A travers d'une expansion de la fonction génératrice de s_N à l'ordre 4 en t, monter que
$$P_{s_N}(x) = \mathcal{G}_\sigma(x)\left[1 + \frac{M_4^c(X)}{24NM_2^c(X)^2}\left(3 - \frac{6x^2}{M_2^c(X)} + \frac{x^4}{M_2^c(X)^2}\right) + o(1/N)\right] \tag{8}$$
En déduire que $P_{S_N}(x)$ peut être approximée par une loi gaussienne de largeur $\sigma\sqrt{N}$ dans un intervalle de largeur d'ordre N^α et donner la valeur de α.
9. Est-il nécessaire que tous les X_i aient la même distribution? Si possible, généraliser le TLC au cas où chaque X_i a une distribution differente.

2B: Grandes déviations

Nous venons de voir qu'il existe un intervalle de taille N^α (avec $1/2 < \alpha < 1$) dans laquelle le TLC s'applique pour N très grand. La taille de cet intervalle est donc petite devant N, et on peut se poser la question de quelle est la distribution limite de S_N quand ses valeurs sont d'ordre N. On s'interesse donc à la variable $u_N = S_N/N$ et on cherche la distribution de u_N quand ses valeurs sont finis par rapport à N qui est supposé très grand. On définit par commodité $g_X(t) = \log G_X(t)$.

1. En utilisant la méthode du col, montrer que $P_{u_N}(u) \sim C_N \exp[-Nf_X(u)]$, où la "fonction des grandes déviations" $f_X(u)$ est definie par
$$f_X(u) = iz^*u - g_X(z^*)\ , \tag{9}$$
z^* étant la solution de $g'_X(z) = iu$.
2. On suppose que la distribution de X soit une gaussienne de largeur 1, $P_X(x) = \mathcal{G}_1(x)$. Calculer $g_X(t)$ et, en utilisant l'equation (9), calculer $f_X(u)$. Est-ce que dans ce cas on peut calculer $f_X(u)$ d'une facon plus simple?
3. Montrer, sous l'hypothèse que $P_X(x) = P_X(-x)$ et que tous les cumulants de X existent, que la solution z^* est un nombre imaginaire pur, $z^* = i\zeta^*$ avec ζ^* réel. Il apparaît donc clairement que $f_X(u)$ et $g_X(i\zeta)$ sont reliées par transformation de Legendre. En déduire que $f_X(u)$ est une fonction convexe.

Exercice 3: Rélation entre le théorème de la limite central et les marches aléatoires

La trajectoire d'une particule soumise à l'agitation thermique est décrite par une marche au hasard sur un réseau cubique : l'objet effectue N pas successifs de longueur a, le pas du réseau. L'orientation de chaque pas est choisie au hasard, indépendamment de celle des pas déjà effectués. On note $\vec{R}$ le vecteur qui lie le début et la fin de la marche:
$$\vec{R} = \sum_{i=1}^{N} \vec{a}_i \tag{10}$$
où $\vec{a}_i$ est le vecteur qui décrit le saut i. Que valent $\left\langle \vec{R} \right\rangle$ et $\left\langle |\vec{R}|^2 \right\rangle$ (les moyennes étant sur le choix aléatoire de la direction de chaque pas) ?

On se place maintenant à une dimension et on suppose que la particule se trouve à l'origine au début de la marche. Calculer le nombre de trajectoires qui, après N pas, se trouvent à une position $x = na$ sur l'axe x de la marche. En déduire la probabilité $p_N(x)$ corrispondante.

1. On suppose que $n = \nu N$, et que N est très grand pendant que ν est fini. En utilisant l'approximation $N! \sim N^N e^{-N}\sqrt{2\pi N}$, montrer que

$$\frac{1}{N}\log p_N(x) \sim -\frac{1}{2}[(1+\nu)\log(1+\nu) + (1-\nu)\log(1-\nu)] \tag{11}$$

2. On suppose que $n \ll N$. En utilisant l'approximation $N! \sim N^N e^{-N}\sqrt{2\pi N}$, montrer que $p_N(x)$ est une loi Gaussienne, et que sa variance est $\langle x^2 \rangle = Na^2$.

Toujours à une dimension, on appelle X_n la variable aléatoire qui décrit la distance parcourue au $n$ème pas.

1. On note que toutes les X_n ont la même distribution $P_X(x)$. Quelle est la distribution de probabilité $P_X(x)$ de X, *vue comme une variable aléatoire continue* ? Quelle est sa fonction génératrice $G_X(t)$?

2. Quelle est la distribution de probabilité de s_N ?

3. Quelle est la fonction de grande déviations $f_X(u)$?