TD n° 7: Langevin, Fokker-Planck et Kramers

Mai 2013

Équation de Fokker-Planck

On considère en une dimension une particule brownienne : elle est soumise à une force aléatoire $\xi(t)$ et à une force dérivant de l'énergie potentielle $U(x)$. L'équation du mouvement est alors l'équation de Langevin

$$m\ddot{x}(t) = -\gamma\dot{x}(t) - U'\big(x(t)\big) + \xi(t), \tag{1}$$

où m est la masse et γ le coefficient de friction. La force aléatoire est supposée gaussienne, de moyenne nulle, et delta-corrélée, c'est-à-dire que

$$\big\langle \xi(t)\xi(t')\big\rangle = \Gamma\delta(t-t'). \tag{2}$$

1) Pour $\tau > 0$ donné, on considère la variable aléatoire

$$\int_0^\tau \xi(t)\mathrm{d}t. \tag{3}$$

Calculer la moyenne et la variance de cette variable. Quelle est sa distribution ? Quelle est sa valeur typique ?

Cas suramorti

On suppose dans cette section la friction suffisamment grande pour négliger le terme d'inertie.

2) Soit τ un temps petit. Que vaut $x(t+\tau)$ en fonction de $x(t)$ jusqu'à l'ordre τ ?
3) En déduire une équation sur $\langle Q\big(x(t)\big)\rangle$ où Q est une fonction quelconque puis établir l'équation de Fokker-Planck sur la densité de probabilité $P(x,t)$ de position de la particule.
4) Quelle est la solution stationnaire de Fokker-Planck ? Comment doit-on choisir Γ ?
5) Mettre l'équation de Fokker-Planck sous la forme d'une équation de conservation (comme la conservation de la masse, de la charge, etc.) Quel est le *flux de probabilité* $J(x,t)$ correspondant ? Interpréter les termes de ce flux.

Application : on suppose que le potentiel est harmonique : $U(x) = \frac{\alpha}{2}x^2$ avec $\alpha \geq 0$ et que à $t = 0$ la particule se trouve en x_0.

6) Calculer $x(t)$ en supposant que ξ soit une fonction donnée, puis en déduire la moyenne et la variance de $x(t)$. Tracer l'allure d'une réalisation typique de $x(t)$.
7) Quelle est dans cet exemple la distribution de $x(t)$? Vérifier votre réponse avec l'équation de Fokker-Planck.
8) Vers quoi tend la distribution de x aux temps longs ? Quelle est l'échelle de temps caractéristique ? Représenter schématiquement l'allure de $P(x,t)$ pour différents temps.

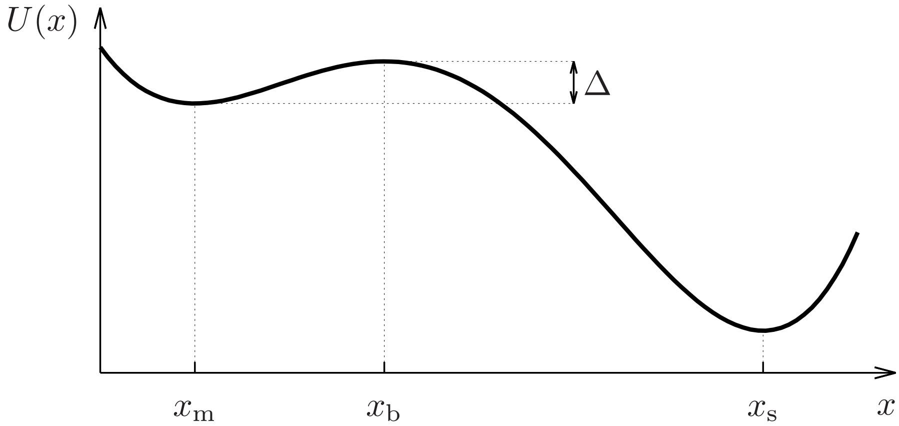
Cas général

On ne suppose plus que le terme d'accélération est négligeable.

9) Établir la nouvelle équation de Fokker-Planck.
10) Vérifier que cette équation vérifie l'équilibre de Boltzmann.

Calcul de Kramers

On revient au cas suramorti, avec accélération négligeable, et on cherche à déterminer le temps nécessaire pour quitter une configuration métastable. On considère donc un potentiel ayant la forme suivante



On dit que la particule est dans l'état stable lorsqu'elle est près de x_{s}. On dit qu'elle est dans l'état métastable lorsqu'elle est près de x_{m}.

11) À l'équilibre thermodynamique, quelles sont en gros les probabilités d'être dans l'état stable et dans l'état instable ?

À l'instant initial, la particule est placée dans l'état métastable. On cherche à déterminer le temps nécessaire pour qu'elle se retrouve dans l'état stable.

12) À basse température, quel va être le comportement typique de $x(t)$? Introduire deux échelles de temps τ_0 et τ_1. Donner l'allure de $P(x,t)$ pour différents temps.

On souhaite montrer qu'à basse température l'échelle de temps la plus longue τ_1 obéit à la loi d'Arrhénius $\tau_1 \sim e^{\beta\Delta}$. On supposera la température suffisamment basse pour avoir $\tau_1 \gg \tau_0$.

Pour calculer τ_1 on fixe une abscisse arbitraire X juste à droite de x_b, telle que si la particule arrive en X, on est sûr qu'elle tombe dans l'état stable. On simplifie alors le problème en supposant que lorsque la particule arrive en X on la retire du système.

13) Dans ce modèle simplifié, quelle sont les équations régissant $P(x,t)$? Que peut-on dire de $\int \mathrm{d}x\, P(x,t)$ et de $\partial_t \int \mathrm{d}x\, P(x,t)$?

14) Justifier qu'aux temps $t \gg \tau_0$ le courant $J(x,t)$ est pratiquement indépendant de x. Calculer alors $P(x,t)$ en supposant le courant $J(t)$ connu. (Indice : variation de la constante.)

15) Déduire de ce qui précède une équation pour $J(t)$, et donner l'expression de τ_1.

16) À basse température, dans quelle région $P(x,t)$ est-il non négligeable ? Faites les bonnes approximations et calculez τ_1.