



REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET
DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE



FACULTE DES SCIENCES ET SCIENCES APPLIQUEES
DEPARTEMENT DE PHYSIQUE

MEMOIRE PREPARE POUR L'OBTENTION DU DIPLOME
DE MASTER EN PHYSIQUE
OPTION

Physique Théorique des Hautes Energies

THEME

Processus Stochastiques et Equation de Fokker-Planck

Présenté par : SEKKOUM Sihem

Soutenu le...../...../.....

Devant le jury :

Président : BENAMARA Salem MAA Univ-BOUIRA

Rapporteur : SADOON Mohamed Améziane MCB Univ-BOUIRA

Examineurs : BOUCHEMLA Nedjma MAA Univ-BOUIRA

BOUGHANI Hadi MAA Univ-BOUIRA

BOUDREF Mohamed Ahmed Docteur Univ-BOUIRA

DEDICASES

Je dédie ce Mémoire

A ma Chère Mère Houria

A mon Père said

*Dont le mérite, les sacrifices et les qualités humaines m'ont permis de
vivre ce jour.*

A mes frères et mes sœurs

Mohamed, fares, oussama ,Nawal ,Nasima

A mon très cher mari Salah

*Tes sacrifices, ton soutien moral et matériel m'ont permis de
réussir mes études. Ce travail soit témoignage de ma reconnaissance
et de mon amour sincère et fidèle*

A mes chères copines

Amina kettaf , Amina chachoua , khadra , faiza , Meriem ,khawla ,

Remerciements

J'adresse mes profonds remerciements à Mr SADOUN Mohamed Améziane pour sa disponibilité et la prise en charge de la réalisation de ce travail et pour son aide, sa gentillesse et ses précieux conseils.

Je remercie Mr BENAMARA Salem d'avoir accepté de présider le jury de ma soutenance.

Je remercie aussi Mr Boughani Hadi, Mme Bouchemla Nedjma d'avoir accepté de faire partie.

Je tiens à remercier toutes les personnes qui nous ont aidés, orientés par le fruit de leur connaissance pendant toute la durée de notre travail.

J'exprime toute ma reconnaissance et gratitude à l'administration et à l'ensemble du corps enseignant de la filière physique à la Faculté des sciences et sciences Appliquées de l'Université AKLI MOHAND OULAHDJ (BOUIRA)

Table des matières

Introduction Générale	4
1 Processus stochastiques	6
1.1 Introduction	6
1.2 Définition	6
1.3 Variable aléatoire et lois de probabilité	7
1.3.1 Variable aléatoire	7
1.3.2 Moments d'une variable aléatoire	8
1.4 Variables aléatoires discrètes	9
1.4.1 Définition	9
1.4.2 Loi de Probabilité	9
1.4.3 Fonction de Répartition	10
1.5 Fonction caractéristique d'une variable aléatoire discrète	11
1.6 Variables aléatoires continues	12
1.6.1 Définition	12
1.6.2 Fonction de densité de probabilités	12
1.6.3 Fonction de répartition	13
1.7 Fonction caractéristique d'une variable aléatoire discrète	14
1.8 Processus continus et processus discrets	15
1.9 Processus stochastique stationnaire	16

1.10	Processus de Markov	17
1.10.1	Probabilité conditionnelle	18
1.10.2	Equation de Chapman-Kolmogorov	19
1.10.3	Etablissement d'une équation d'évolution à partir de l'équation de Chapman-Kolmogorov	20
2	Le Mouvement Brownien Et Modèle de Langevin	22
2.1	Origine physique du mouvement Brownien	22
2.2	Définition	23
2.3	Modèle de Langevin	24
2.4	Equation de Langevin	24
2.5	La vitesse de la particule brownienne comme processus de Markov	25
2.6	Développement de Kramers-Moyal	26
2.6.1	Moments de la variation de vitesse	27
2.6.2	Le développement	28
3	Equation maitresse et équation de Fokker Planck	30
3.1	Equation de maitresse	30
3.2	Equation de Fokker Planck	35
3.3	Application 01 : Goutte de colorant sur la surface de l'eau	38
3.4	Application 02 : Diffusion d'une particule dans un champ homogène	42
3.5	Application 03 : Mouvement d'une particule dans un fluide	44
3.5.1	Introduction	44
3.5.2	Observation du mouvement brownien	45
3.5.3	Interprétation : Force de Langevin	45
3.5.4	Valeurs moyennes et fonction de corrélation	46
3.5.5	Temps de corrélation	46
3.5.6	Coefficient de diffusion	47
3.5.7	Valeurs moyenne de \vec{v}	47

3.5.8	Relation d'Einstein	47
3.5.9	Probabilités markoviennes	48
3.5.10	Moments de la variation de vitesse	49
3.5.11	Équation de Fokker-Planck et solution stationnaire	50
	conclusion Générale	51
	Bibliographie	52

Introduction générale

Nous avons tous une idée plus ou moins précise de ce qu'implique le titre de ce mémoire. Stochastique est un mot un peu chic pour dire aléatoire, ce qui évoque bien sûr l'idée des probabilités; processus évoque l'idée d'un changement dans le temps. Selon le Larousse, Processus : Enchaînement ordonné de faits ou de phénomènes, répondant à un certain schéma et aboutissant à quelque chose. Le lecteur est sûrement déjà familier avec le concept de probabilité : la probabilité d'obtenir 2 avec un dès non truqué est $1/6$; la probabilité d'obtenir 7 en jetant deux dès est encore $1/6$. Un processus stochastique est plutôt comme un jeu de l'oie : si j'obtiens 2 j'avance de deux cases, si je tombe dans la case serpent, je descend 7 cases et je rejette les dès 2 fois ... Quelle est alors la probabilité d'arriver au bout ou celle de revenir à la case de départ ? Les processus stochastiques sont souvent rencontrés dans différentes branches de la science, en physique, en chimie, en biologie,...etc.

Physique Statistique : L'hypothèse fondamentale de la physique statistique est que dans un système micro-canonique qui ne peut rien échanger avec l'extérieur (ni énergie, ni volume, ni matière, ...) tous les micro-états dont l'énergie est E ont la même probabilité. Ce théorème était profondément choquant pour les mathématiciens et mécaniciens de l'époque. Boltzman s'en est sorti, D'une part en introduisant l'hypothèse du chaos moléculaire. Lors d'un choc entre deux particules, une particule peut transférer une partie de son énergie. D'autre part Boltzman a émis l'hypothèse que cette redistribution est aléatoire (d'où le nom chaos moléculaire).

Mécanique Quantique : La mécanique quantique est bien sûr formulée comme un processus stochastique. Connaissant l'amplitude initiale $\Psi(x, 0)$, et connaissant l'hamiltonien H du système (un opérateur que l'on suppose pour l'instant indépendant du temps), que vaut l'amplitude à un temps ultérieur $\Psi(x, t)$? La réponse à cette question est la base de notre compréhension du monde microscopique et nous apprenons pendant nos études les mille et une manières de calculer efficacement la fonction $\Psi(x, t) = e^{\frac{i}{\hbar}tH}\Psi(x, 0)$. Une interprétation alternative a été donnée par Feynman dans les années 1950, mettant encore

plus l'accent sur le processus, en calculant l'amplitude des trajectoires de la particule.

La Chimie : à petite échelle, quand le nombre de molécule n'est pas abondant, la chimie appartient pleinement au domaine des processus stochastiques : une réaction $A + B \rightarrow C + D$ se traite comme la probabilité que deux molécules A et B donnent lieu à une réaction chimique ; si la molécule D participe elle-même à une autre réaction chimique, nous pouvons avoir des cascades probabilistes. A l'échelle des cellules, ceci provoque la différence entre les bactéries isogénique, comme celle qui digèrent le sucre lactose et celle qui ne le font pas. Depuis les années 2000, c'est cette vision probabiliste des cellules qui émerge, en remplaçant la vision cellule, machine déterministe.

Evolution : Nous avons N individus dans un écosystème (numérotons les de 1 à N). A chaque génération, chaque individu produit un nombre aléatoire de descendant ; la plupart des descendants meurent pour que le nombre d'habitant de l'écosystème reste autour de N . En supposant que tous les individus soient équivalents, quelle est la probabilité de voir des descendants de l'individu i au bout de m générations ? Et si l'individu i était légèrement meilleur que les autres à se reproduire, comment cette probabilité doit être évalué ?

Le but de ce travail est d'essayer de décrire et modéliser les processus stochastiques afin de les comprendre. Pour cela nous avons choisi le plan suivant : Nous donnons d'abord, dans le premier chapitre, un rappel succinct de quelques notions mathématiques relatives à la variable aléatoire et aux probabilités. Ensuite, dans le deuxième et troisième chapitres, nous donnons une description précise des processus stochastiques, en particulier le mouvement brownien, avec des modèles mathématiques en considérant le cas simple du processus de Markov. Nous établissons aussi les équations décrivant ce type de processus, il s'agit de l'équation de Chapman-Kolmogorov et l'équation de Fokker-Plank. Et pour comprendre ces modèles mathématiques, nous considérons trois applications : Goutte de colorant sur la surface de l'eau, Diffusion d'une particule dans un champ homogène, Mouvement d'une particule dans un fluide. Enfin, nous terminons par une conclusion générale.

Chapitre 1

Processus stochastiques

1.1 Introduction

Les processus aléatoires [1] décrivent l'évolution d'une grandeur aléatoire en fonction du temps ou de l'espace. Il existe de nombreuses applications des processus aléatoires notamment en physique statistique (les transitions de Phases, etc.), en biologie (évolution génétique et génétique des populations), médecine (croissance de tumeurs, épidémie). L'étude des processus aléatoires s'insère dans la théorie des probabilités. Elle soulève des problèmes mathématiques intéressants et souvent très difficiles. Ce chapitre présente quelques aspects des processus aléatoires utiles aux physiciens et aux ingénieurs mathématiciens du fait de leur fréquence d'occurrence dans les applications : processus renouvellement, processus de Markov, mouvement Brownien.

1.2 Définition

Un processus stochastique est défini par la mise en correspondance des résultats d'une expérience avec une fonction du temps (ou de plusieurs autres variables aléatoires). Cette fonction est appelée fonction aléatoire par opposition à une fonction certaine. En d'autres termes, un processus aléatoire est un mode de génération d'une fonction aléatoire. Si la

variable indépendante dont dépend la fonction est continue, on parle d'un processus en temps continu. Si cette variable est un ensemble d'entiers, on parlera d'un processus en temps discret ou d'une séquence aléatoire. Avant d'aborder le sujet avec un plus de détails, nous allons d'abord donner un rappel succinct des notions de variable aléatoire et de probabilité.

1.3 Variable aléatoire et lois de probabilité

Dans la plupart des phénomènes aléatoires, le résultat d'une épreuve peut se traduire par une grandeur mathématique, très souvent représentée par un nombre entier ou un nombre réel. La notion mathématique qui représente efficacement ce genre de situation concrète est celle de variable aléatoire. Le temps de désintégration d'un atome radioactif, le pourcentage de réponses « oui » à une question posée dans un sondage, le nombre d'enfants d'un couple sont des exemples de variables aléatoires.

1.3.1 Variable aléatoire

Définition

Etant donné un espace probabilisé Ω et de mesure de probabilité \mathbb{P} . On appelle variable aléatoire [2] sur cet espace, tout application X de Ω dans \mathbb{R} telle que :

$$X : \varepsilon(\Omega) \rightarrow \mathbb{R} \quad (1.1)$$

$$\omega \rightarrow X(\omega) \quad (1.2)$$

A chaque événement élémentaire ω de Ω correspond un nombre réel x associé à la variable aléatoire X

Exemple Si l'on considère la constitution d'une fratrie de deux enfants, l'espace fon-

damental est constitué des évènements élémentaires suivant :

$$\Omega = \{GG, GF, FG, FF\} \quad (1.3)$$

Les valeurs possibles prises par la variable aléatoire X , $\langle\langle$ nombre de fille dans la famille $\rangle\rangle$ sont : $X(\omega) = \{0, 1, 2\}$.

Loi de probabilité et fonction de répartition

La loi de probabilité d'une variable aléatoire permet de connaître les chances d'apparition des différentes valeurs de cette variable. On se place dans l'espace de probabilité (Ω, \mathbb{P}) .

Définition Soit X une variable aléatoire. La loi de probabilité de X est définie par la fonction F_x appelée fonction de répartition de la variable X , définie par ;

$$\begin{aligned} F_x & : \quad R \rightarrow [0, 1] \\ x & \longmapsto \mathbb{P}(X \leq x) \end{aligned} \quad (1.4)$$

On dit que deux variables aléatoires X et Y ont la même loi si elles ont la même fonction de répartition $F_x = F_y$

1.3.2 Moments d'une variable aléatoire

Pour caractériser complètement une variable aléatoire, nous devons connaître sa fonction de densité de probabilité. Cette densité peut être caractérisée par quelques nombres appelés moments statistiques. Généralement, les moments d'une variable aléatoire peuvent être calculés par la relation suivante où le moment d'ordre n correspond à

$$\begin{aligned}
E[X^n] &= \int_{-\infty}^{+\infty} x^n P_X(x) dx && \text{pour le cas continu,} \\
E[X^n] &= \sum_i x_i^n P_X(x) && \text{pour le cas discret.}
\end{aligned}
\tag{1.5}$$

1.4 Variables aléatoires discrètes

1.4.1 Définition

Une variable aléatoire est dite discrète si elle ne prend que des valeurs discontinues dans un intervalle donné (borné ou non borné). L'ensemble des nombres entiers est discret. En règle générale, toutes les variables qui résultent d'un dénombrement ou d'une numération sont de types discrètes

Exemples :

Les variables aléatoires,

- oLe nombre de bactéries dans 100 ml de préparation

- oLe nombre de mutations dans une séquence d'ADN de 10 kb

sont des variables aléatoires discrètes

1.4.2 Loi de Probabilité

Une variable aléatoire est caractérisée par l'ensemble des valeurs qu'elle peut prendre et par l'expression mathématique de la probabilité de ces valeurs. Cette expression s'appelle la loi de probabilité (ou distribution de probabilité) de la variable aléatoire .

La loi de probabilité d'une variable aléatoire discrète est entièrement déterminée par les probabilités p_i des événements $\{X = x_i\}$. La loi de probabilité est donnée par les $(x_i, p_i)_i$

1.4.3 Fonction de Répartition

On appelle fonction de répartition d'une variable aléatoire X , la fonction F_x telle que :

$$\begin{aligned} F_X & : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R} \\ t & \rightarrow F_X(t) = P(X < t) \end{aligned} \tag{1.6}$$

Concrètement, la fonction de répartition correspond à la distribution des probabilités cumulées. Le plateau atteint par la fonction de répartition correspond à la valeur de probabilité 1 car $\sum_i P_i = 1$.

L'importance pratique de la fonction de répartition est qu'elle permet de calculer la probabilité de tout intervalle dans \mathbb{R} . Les propriétés associées à la fonction de répartition sont les suivantes : Soit F_X la fonction de répartition d'une variable aléatoire discrète X alors :

- a) $\forall t \in \mathbb{R} \quad 0 \leq F_X(t) \leq 1$
- b) F_X est croissante sur \mathbb{R}
- c) $\lim_{t \rightarrow -\infty} F_X(t) = 0$ et $\lim_{t \rightarrow +\infty} F_X(t) = 1$
- d) Si $a \leq b$ alors $P(a \leq X \leq b) = F_X(b) - F_X(a)$

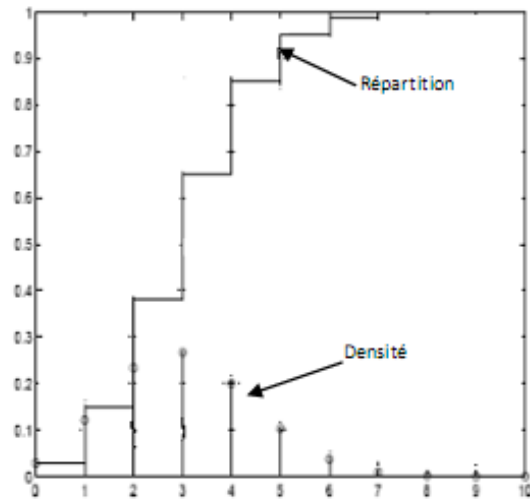


Figure 1: Variable aléatoire discrète : densité de probabilité et fonction de répartition [3]

1.5 Fonction caractéristique d'une variable aléatoire discrète

Si la variable aléatoire X est discrète, on peut écrire

$$\varphi_X(u) = \sum_{K \in \mathbb{N}} e^{iuX_K} \mathbb{P}(X = X_K) \quad (1.7)$$

Où $\{X_K, K \in \mathbb{N}\}$ est l'ensemble des réalisations possible de X

Il s'agit de la transformée de Fourier inverse de la distribution

$$\sum_{K \in \mathbb{N}} P(X = X_K) \delta_{X_K} \quad (1.8)$$

1.6 Variable aléatoires continues

1.6.1 Définition

Une variable aléatoire est dite continue si elle peut prendre toutes les valeurs dans un intervalle donné (borné ou non borné). Règle générale, toutes les variables qui résultent d'une mesure sont de type continue

Exemple

Les variables aléatoires : La masse corporelle des individus pour une espèce animale donnée, Taux de glucose dans le sang, sont des variables aléatoires continues .

1.6.2 Fonction de densité de probabilités

Dans le cas d'une variable aléatoire continue, la loi de probabilité associe une probabilité à chaque ensemble des valeurs définies dans un intervalle donné. En effet, pour une variable aléatoire continue, la probabilité associée à l'événement $[X = a]$ est nulle, car il est impossible d'observer exactement cette valeur.

On considère alors la probabilité que la variable aléatoire x prenne des valeurs comprises dans un intervalle $[a, b]$ tel que $P(a \leq X \leq b)$.

Lorsque cet intervalle tend vers 0, la valeur prise par x tend alors vers une fonction que l'on appelle fonction densité de probabilité ou densité de probabilité.

On appelle densité de probabilité toute application continue par morceaux :

$$\begin{aligned} f &: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R} \\ X &\rightarrow f(X) \end{aligned} \tag{1.9}$$

telle que :

$$\forall X \in \mathbb{R} \quad f(x) \geq 0, \tag{1.10}$$

et

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x) dx = 1 \quad (1.11)$$

1.6.3 Fonction de répartition

Si comme pour les variables aléatoires discrètes, on définit la fonction de répartition de X par :

$$\begin{aligned} F_X &: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R} \\ t &\rightarrow F_X(t) = P(X \prec t) \end{aligned} \quad (1.12)$$

Alors la relation entre la fonction de répartition F_x et la densité de probabilité $f(x)$ est la suivante :

$$\forall t \in \mathbb{R} \quad F_X(t) = P(X < t) = \int_{-\infty}^t f(x) dx \quad (1.13)$$

Soit x une variable aléatoire absolument continue de densité f et de fonction de répartition F_X , alors :

$$P(a \leq x \leq b) = \int_a^b f(x) \text{ avec } a < b, \quad (1.14)$$

et

$$\forall a \in \mathbb{R} \quad P(X = a) = 0 \text{ si } f \text{ est continue à droite du point} \quad (1.15)$$

Soit F_X la fonction de répartition d'une variable aléatoire absolument continue X alors :

- a) F_X est continue sur \mathbb{R} , dérivable en tout point où f est continue et alors $F'_x = f$
- b) F_X est croissante sur \mathbb{R}
- c) F_X est à valeurs dans $[0, 1]$

$$d) \lim_{t \rightarrow -\infty} F_X(t) = 0 \text{ et } \lim_{t \rightarrow +\infty} F_X(t) = 1$$

Le calcul classique des probabilités concerne des épreuves où chaque résultat possible (ou réalisation) est mesuré par un nombre, ce qui conduit à la notion de variable aléatoire. Un processus stochastique ou processus aléatoire ou fonction aléatoire représente une évolution, discrète ou à temps continu d'une variable aléatoire.

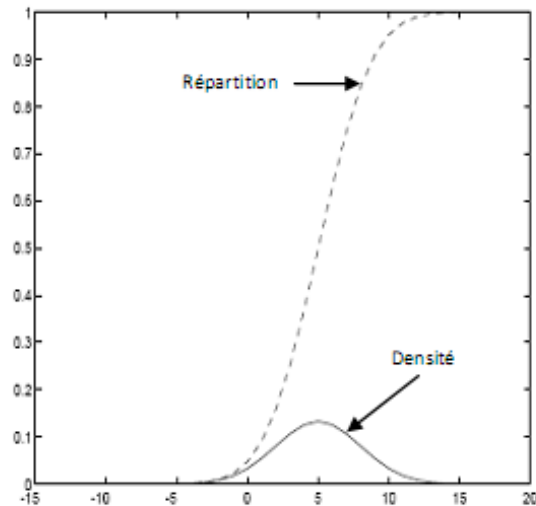


Figure 2: Variable aléatoire continue : densité de probabilité et fonction de répartition [3]

1.7 Fonction caractéristique d'une variable aléatoire discrète

Supposons que la variable aléatoire X admet une densité f_x . On a alors

$$\varphi_X(u) = \int_{\mathbb{R}} e^{iux} f_x dx \quad (1.16)$$

Il s'agit de la transformée de Fourier inverse de la distribution régulière associée à la fonction f_x

1.8 Processus continus et processus discrets

Tout processus dont l'évolution temporelle peut être analysé en termes de probabilité est dit processus stochastique. La notion de processus stochastique est donc très générale. Le processus peut être à valeurs discrètes ou continus [5]. Il se manifeste par l'observation d'une grandeur $x(t)$ variable au cours du temps.

Considérons un processus stochastique à valeurs continus notées $x(t)$ à un instant t et égales à x_0 à l'instant $t = 0$. On procède à $N \geq 1$ réalisations de ce processus avec la même condition initial. Soit $(t_n)_{n \in N}$ une suite d'instants, strictement croissante et $(I_n)_{n \in N}$, une suite d'intervalles de réalisations telle que $I_n = [x_n, x_n + dx_n]$. La densité de probabilité notée $P_n(x_1, t_1; \dots; x_n, t_n)$ de trouver $\{x(t_1) \in I_1 \dots x(t_n) \in I_n\}$ est telle que :

$$P_n(x_1, t_1; \dots; x_n, t_n) dx_1 \dots dx_n = \frac{\text{Nombre de réalisation passant par } I_1 \dots I_n}{\text{Nombre total de réalisation}} \quad (1.17)$$

$$P_n(x_1, t_1; \dots; x_n, t_n) \geq 0 \quad (1.18)$$

$$\forall (t_1 \dots t_n) \in \mathbb{R}^n \int_{\mathbb{R}^n} P_n(x_1, t_1; \dots; x_n, t_n) dx_1 \dots dx_n = 1 \quad (1.19)$$

$$\text{est une fonction symétrique par permutation des couples } (x_i, t_i)_{i \in [1, n]} \quad (1.20)$$

$$\int_{\mathbb{R}} P_n(x_1, t_1; \dots; x_n, t_n) dx_n = W(x_1, t_1; \dots; x_{n-1}, t_{n-1}) \quad (1.21)$$

Le processus stochastique est donc défini par l'ensemble $\{P_n(x_1, t_1; \dots; x_n, t_n)\}_{n \in N}$ des densités de probabilités. Ces notions se généralisent au cas où le processus stochastique à valeur discrète :

$$P_n(x_1, t_1; \dots; x_n, t_n) > 0 \quad (1.22)$$

$$\sum_{x_1 \in X} \sum_{x_2 \in X} \dots \sum_{x_n \in X} P_n(x_1, t_1; \dots; x_n, t_n) = 1 \quad (1.23)$$

La sommation sur toutes les possibilités de résultat à l'instant t_n donne la probabilité

de la suite (x_1, x_2, \dots, x_n) aux instants antérieures d'où la relation :

$$\sum_{x_n \in X} P_n(x_1, t_1; \dots; x_n, t_n) = P_{n-1}(x_1, t_1; \dots; x_{n-1}, t_{n-1}) \quad (1.24)$$

Plus généralement, si on somme sur toutes les valeurs possibles possibles x_k à l'instant intermédiaire quelconque t_k on obtient :

$$\sum_{x_n \in X} P_n(x_1 t_1, x_2 t_2; \dots; x_n t_n) = P_{n-1}(x_1 t_1 \dots x_{k-1} t_{k-1}, x_{k+1} t_{k+1} \dots x_n t_n) \quad (1.25)$$

1.9 Processus stochastique stationnaire

Un processus stochastique dit stationnaire si, $\forall \tau \in \mathbb{R}, \forall n \in \mathbb{N}^*$; on a :

$$X(x_1, t_1 + \tau) = X(x_1, t) \quad (1.26)$$

On dit alors qu'il est indépendant du temps.

La densité de probabilité conditionnelle $P(x_1, t_1; x_k, t_k \mid x_{k+1}, t_{k+1}; \dots; x_n, t_n)$ est telle que : $P(x_1, t_1; \dots; x_k, t_k \mid x_{k+1}, t_{k+1}; \dots; x_n, t_n) dx_{k+1} \dots dx_n$ est égale à la probabilité de trouver $\{x(t_{k+1}) \in I_{k+1}, \dots, x(t_n) \in I_n\}$ sachant que $\{x(t_1) \in I_1 \dots x(t_k) \in I_k\}$. On peut la définir par :

$$P(x_1, t_1; \dots; x_k, t_k \mid x_{k+1}, t_{k+1}; \dots; x_n, t_n) = \frac{P_n(x_1, t_1; \dots; x_n, t_n)}{P_k(x_1, t_1; \dots; x_k, t_k)} \quad (1.27)$$

avec les mêmes propriétés que $P_n(x_1, t_1; \dots; x_n, t_n)$

$$P(x_1, t_1; \dots; x_k, t_k \mid x_{k+1}, t_{k+1}; \dots; x_n, t_n) \geq 0 \quad (1.28)$$

où P est une fonction symétrique par permutation des couples $(x_i, t_i)_{i \in [1, k]}$ et $(x_i, t_i)_{i \in [k+1, n]}$

$$\int_{\mathbb{R}} P(x_1, t_1; \dots; x_k, t_k \mid x_{k+1}, t_{k+1}; \dots; x_n, t_n) dx_n = P(x_1, t_1; \dots; x_k, t_k \mid x_{k+1}, t_{k+1}; \dots; x_{n-1}, t_{n-1}). \quad (1.29)$$

Le moment d'ordre n de la densité de probabilité définit la fonction de corrélation d'ordre n du processus, notée par :

$$\lim_{t_2 \rightarrow t_1} P(x_1, t_1; \dots; x_2, t_2) P(x_1, t_1) \delta(x_1, x_2). \quad (1.30)$$

On obtient donc

$$\lim_{t_2 \rightarrow t_1} C(t_1, t_2) = \int_{\mathbb{R}} x_1^2 P(x_1, t_1) dx_1 = \langle x^2(t) \rangle. \quad (1.31)$$

Quant à la fonction d'auto corrélation K , elle est telle que

$$K(t_1, t_2) \langle x(t_1) - \langle x(t_1) \mid x(t_2) \rangle \rangle = C(t_1, t_2) - C(t_1) C(t_2). \quad (1.32)$$

1.10 Processus de Markov

Il est clair que la détermination complète d'un processus aléatoire quelconque nécessite une information énorme puisqu'il faut connaître toutes les probabilités conjointes P_n [6]. En pratique, on ne sait quasiment rien faire sans hypothèse supplémentaire, d'où la nécessité d'introduire des classes de processus caractérisées par des propriétés simplificatrices permettant effectivement de travailler .. Pour caractériser complètement un processus stochastique $X(t)$, il est en principe nécessaire de connaître toutes les densités de probabilités conjointes $P_n(x_1, t_1; x_2, t_2; \dots; x_n, t_n)$. Toutefois, certains processus stochastiques peuvent être décrits de manière plus simple. C'est notamment le cas des processus de Markov, qui interviennent dans l'étude du mouvement brownien.

1.10.1 Probabilité conditionnelle

De manière générale, chaque probabilité conjointe $P_n(x_1, t_1; x_2, t_2; \dots; x_n, t_n)$ peut exprimer en fonction de $P_1(x_1, t_1)$ et des probabilités conditionnelles

$$P_{1|1}(x_2, t_2|x_1, t_1), \dots, P_{1|n-1}(x_n, t_n | x_1, t_1; x_2, t_2; \dots; x_{n-1}, t_{n-1}) :$$

$$P_n(x_1, t_1; x_2, t_2; \dots; x_n, t_n) = P_1(x_1, t_1)P_{1|1}(x_2, t_2|x_1, t_1)\dots p_{1|n-1}(x_n, t_n|x_1, t_1; x_2, t_2; \dots; x_{n-1}, t_{n-1}). \quad (1.33)$$

Par définition, un processus stochastique est un processus de Markov si, pour des instants quelconques $t_1 < t_2 < \dots < t_n$, et pour tout n,

$$P_{1|n-1}(x_n, t_n | x_1, t_1; x_2, t_2; \dots; x_{n-1}, t_{n-1}) = p_{1|1}(x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1}). \quad (1.34)$$

Une fois arrivé en x_{n-1} à l'instant t_{n-1} , après être passé par x_1 à t_1 , x_2 à t_2 , ..., x_{n-1} à t_{n-1} , un processus de Markov évolue ensuite d'une manière qui ne dépend que de x_{n-1} . Autrement dit, l'évolution d'un processus markovien à partir d'un instant donné ne dépend que de l'état du processus à cet instant et non de son histoire antérieure. La quantité centrale pour la description d'un processus de Markov est donc la probabilité conditionnelle $P_{1|1}(x', t'|x, t)$, c'est à dire la probabilité pour que le processus prenne la valeur x' à l'instant t' , compte tenu de ce que sa valeur à l'instant t était x . Pour un processus de Markov, l'équation 1.27 s'écrit en effet :

$$P_n(x_1, t_1; x_2, t_2; \dots; x_n, t_n) = P_1(x_1, t_1)P_{1|1}(x_2, t_2|x_1, t_1)\dots P_{1|1}(x_n, t_n|x_{n-1}, t_{n-1}) \quad (1.35)$$

Toutes les probabilités conjointes sont donc déterminées si l'on connaît la probabilité P_1 et la probabilité conditionnelle $P_{1|1}$, dite probabilité conditionnelle élémentaire ou probabilité de transition. Si le processus de Markov considéré est stationnaire, la probabilité P_1 ne dépend pas du temps. On peut alors considérer qu'elle représente la distribution d'équilibre que l'on atteint au bout d'un temps τ suffisamment long, quel que

soit l'état x_0 d'o u l'on parte. Dans ce cas, on a

$$p_1(x) = \lim_{\tau \rightarrow \infty} P_{1|1}(x, \tau | x_0) \quad (1.36)$$

Le processus de Markov est alors entièrement défini par la donnée de la probabilité de transition.

1.10.2 Equation de Chapman-Kolmogorov

On à, de manière générale, l'identité

$$P_{1|1}(x_3, t_3 | x_1, t_1) = \int P_{1|1}(x_2, t_2 | x_1, t_1) P_{1|2}(x_3, t_3 | x_1, t_1; x_2, t_2) dx_2 \quad (1.37)$$

Dans le cas d'un processus de Markov, compte tenu de la relation 1.28 , cette identité écrit sous la forme d'une équation fonctionnelle pour la probabilité $P_{1|1}$

$$P_{1|1}(x_3, t_3 | x_1, t_1) = P_{1|1}(x_2, t_2 | x_1, t_1) P_{1|1}(x_3, t_3 | x_2, t_2) dx_2. \quad (1.38)$$

Cette équation, établie par M.V Smoluchowski en 1906, puis par S.Chapman en 1916 et A. Kolmogorov en 1931, est connue, dans le contexte du mouvement brownien, sous le nom d'équation de Smoluchowski, et, plus généralement, sous le nom d'équation de Chapman-Kolmogorov. Cette équation fonctionnelle non linéaire, relativement complexe, exprime une contrainte à laquelle doit satisfaire la probabilité de transition d'un processus de Markov ; elle possède beaucoup de solutions.

1.10.3 Etablissement d'une équation d'évolution à partir de l'équation de Chapman-Kolmogorov

Supposons qu'à l'instant initial t_0 on possède sur le système une certaine information, caractérisée par la fonction de distribution $f(x_0, t_0)$. On a, à l'instant t

$$f(x, t) = \int p_{1|1}(x, t|x_0, t_0) f(x_0, t_0) dx_0 \quad (1.39)$$

Et, de même à l'instant $t + \Delta t$,

$$f(x, t + \Delta t) = \int P_{1|1}(x, t + \Delta t|x_0, t_0) f(x_0, t_0) dx_0. \quad (1.40)$$

On cherche à relier directement $f(x, t + \Delta t)$ et $f(x, t)$, sans passer par l'intermédiaire de la distribution initiale. Comme le processus est un processus de Markov, la probabilité de transition $p_{1|1}$ vérifie l'équation de Chapman-Kolmogorov 1.38, que l'on peut écrire sous la forme

$$P_{1|1}(x, t + \Delta t|x_0, t_0) = \int P_{1|1}(x, t|x_0, t_0) P_{1|1}(x, t + \Delta t|x, t) dx. \quad (1.41)$$

En reportant cette relation dans l'expression (2.8) de $f(x, t + \Delta t)$, on obtient

$$f(x, t + \Delta t) = \int P_{1|1}(x', t'|x_0, t_0) P_{1|1}(x, t + \Delta t|x', t') f(x_0, t_0) dx' dx_0 \quad (1.42)$$

Soit, en utilisant l'équation 1.32,

$$f(x, t + \Delta t) = \int f(x', t') P_{1|1}(x, t + \Delta t|x', t') dx' \quad (1.43)$$

Il est ainsi possible, dans le cas d'un processus de Markov, de relier directement $f(x, t + \Delta t)$ et $f(x, t)$, sans faire intervenir la distribution initiale. Si le processus aléatoire $X(t)$ est stationnaire, la probabilité de transition $P_{1|1}(x, t + \Delta t|x', t')$ ne dépend pas

séparément de $t + \Delta t$ et de t , mais seulement de la différence de ces deux temps, et l'on peut réécrire l'équation d'évolution 1.40 sous la forme

$$f(x, t + \Delta t) = \int f(x', t) P_{1|1}(x, \Delta t | x') dx' \quad (1.44)$$

Chapitre 2

Le Mouvement Brownien Et Modèle de Langevin

2.1 Origine physique du mouvement Brownien

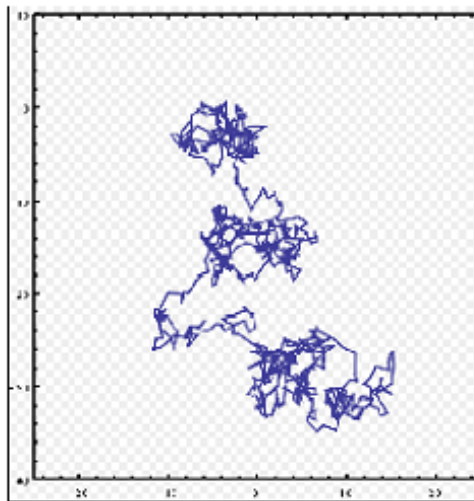
En 1827[8], le botaniste R. Brown a découvert au microscope le mouvement incessant et irrégulier de petites particules de pollen en suspension dans l'eau. Il a aussi remarqué que de petites particules minérales se comportent de la même manière (cette observation est importante, car elle exclut d'attribuer ce phénomène à une quelconque « force vitale » spécifique aux objets biologiques). De façon générale, une particule en suspension dans un fluide se trouve en mouvement brownien lorsque le rapport entre sa masse et la masse de l'une des molécules du fluide est grand devant l'unité. L'idée selon laquelle le mouvement d'une particule brownienne est une conséquence du mouvement des molécules du fluide environnant s'est répandue au cours de la seconde moitié du 19^e siècle. C'est en 1905 qu'Einstein a donné la première explication théorique de ce phénomène. La vérification expérimentale directe de la théorie d'Einstein a permis d'établir les fondements de la théorie atomique de la matière (on peut citer en particulier la mesure du nombre d'Avogadro par J. Perrin en 1908). Une théorie plus complète du mouvement brownien

à été proposé par P. Langevin en 1908. Cependant, un peu avant A. Einstein et dans un tout autre contexte, L. Bachelier avait déjà obtenu la loi du mouvement brownien dans sa thèse intitulée « La théorie de spéculation » (1900).

Des modèles faisant appel au mouvement brownien sont d'ailleurs couramment utilisés aujourd'hui en mathématiques : Historiquement, c'est en effet pour représenter le déplacement d'une particule brownienne qu'un processus stochastique à été construit pour la première fois (N. Wiener, 1923).

2.2 Définition

Le mouvement brownien [9] est une description du mouvement aléatoire de particules qui ne sont soumises à aucune autre interaction que les chocs. Le mouvement brownien est tout d'abord un processus aléatoire continu, c'est à dire une famille $(B_t, t \geq 0)$ de variables aléatoires sur un espace de probabilité (Ω, F, P) telles que l'application $t \rightarrow B_t(\omega)$ soit continue pour presque tout $\omega \in \Omega$. Dans ce formalisme, B_t représente la position (aléatoire) de la particule brownienne à l'instant $t \geq 0$.



Mouvement brownien d'une particule

2.3 Modèle de Langevin

Le mouvement brownien [8] est le mouvement compliqué, de type erratique, effectué par une particule « lourde » immergée dans un fluide et subissant des collisions avec les molécules De celui-ci (on entend par \lourde" une particule de masse beaucoup plus grande que celle de l'une des molécules du fluide).

Les premières explications théoriques du mouvement brownien furent données, indépendamment, par A. Einstein en 1905 et M. Smoluchowski en 1906. Dans ces premiers modèles, L'inertie de la particule brownienne n'était pas prise en compte. Une description plus élaborée du mouvement brownien, tenant compte des effets de l'inertie, à été mise au point par P. Langevin en 1908. C'est cette théorie que nous présenterons tout d'abord.

2.4 Equation de Langevin

Le modèle de Langevin est un modèle phénoménologique classique dans lequel on analyse l'effet du fluide sur la particule brownienne de la façon suivante : Raisonnant pour simplifier à une dimension, on repère la position de la particule brownienne par une abscisse x . Deux forces, caractérisant toutes les deux l'effet du fluide, agissent sur la particule de masse m : une force de frottement visqueux $-m\gamma(dx/dt)$, caractérisé par le coefficient de frottement γ , et une force fluctuante $F(t)$, représentant les impacts incessants des molécules du fluide sur la particule brownienne . La force $F(t)$ est supposée indépendante de la vitesse de la particule : c'est pour cette dernière une force extérieure, appelée force de Langevin.

S'il n'y a pas de force extérieure appliquée dépendant de la position, la particule brownienne est dite "libre". C'est ce que nous supposons ici. L'équation du mouvement pour la position de la particule brownienne libre est donnée par la loi de Newton,

$$m \frac{d^2x}{dt^2} = -m\gamma \frac{dx}{dt} + F(t), \quad (2.1)$$

ou encore :

$$m \frac{dv}{dt} = -m\gamma v + F(t), \quad v = \frac{dx}{dt}. \quad (2.2)$$

L'équation de Langevin sous l'une ou l'autre des formes 2.1 et 2.2, est historiquement le premier exemple d'une équation différentielle stochastique, c'est à dire contenant un terme aléatoire $F(t)$. Comme $F(t)$, la solution d'une telle équation est une fonction aléatoire du temps, c'est à dire un processus stochastique.

Dans le problème étudié ici, la force de frottement et la force fluctuante représentent deux conséquences du même phénomène physique, les collisions de la particule brownienne avec les molécules du fluide.

2.5 La vitesse de la particule brownienne comme processus de Markov

Revenant au modèle de Langevin du mouvement brownien [11], on cherche à déterminer l'évolution au cours du temps de la fonction de distribution des vitesses de la particule brownienne.

Par définition, cette quantité, notée $f(v, t)$, est la densité de probabilité pour qu'à l'instant t la vitesse de la particule soit comprise entre v et $v + dv$. Cette fonction de distribution donne accès, à chaque instant, à des quantités telles que la moyenne ou la variance de la vitesse de la particule, ainsi qu'à des moments de la vitesse d'ordre plus élevé.

La vitesse de la particule brownienne obéit à l'équation de Langevin 2.2. Dans le cas où la fonction d'auto corrélation de la force aléatoire est une fonction de Dirac, la force aléatoire $F(t)$ n'a aucune "mémoire" des instants antérieurs à t ($\langle F(t)v(t') \rangle = 0$ si $t > t'$). Alors, comme l'équation différentielle 2.2 est du premier ordre, l'évolution de la vitesse à partir de l'instant t ne dépend que de la valeur de la vitesse à cet instant, et non de sa valeur aux instants antérieurs. La vitesse $v(t)$ de la particule brownienne est donc,

dans ce cas, un processus de Markov. Cette propriété reste encore approximativement vraie lorsque l'on prend en compte le temps de corrélation fini τ_c de la force aléatoire, pourvu toutefois que celui-ci soit beaucoup plus petit que le temps caractéristique γ^{-1} des fluctuations moyennes de vitesse, autrement dit pourvu que l'on ait séparation stricte des échelles de temps τ_c et $T_R = \gamma^{-1}$. La fonction de distribution des vitesses $f(v, t)$ obéit alors, pour un intervalle de temps $\Delta t \gg \tau_c$, à l'équation d'évolution 1.40, réécrite ci-dessous avec les notations appropriées

$$f(v, t + \Delta t) = \int f(v', t) P_{1|1}(v, \Delta t | v') dv'. \quad (2.3)$$

Il est possible, sous certaines conditions, de déduire de l'équation 2.3 pour $f(v, t)$ une équation aux dérivées partielles, l'équation de Fokker-Planck. C'est l'objet du développement de Kramers-Moyal.

2.6 Développement de Kramers-Moyal

Le mouvement aléatoire de la particule brownienne est le résultat de l'agitation continue des molécules du bain. Les chocs de ces molécules modifient un peu la vitesse de la particule brownienne, mais, celle-ci ayant une masse beaucoup plus grande que celle de ces dernières, les transferts de quantité de mouvement restent faibles par rapport à la quantité de mouvement de la particule. Il est intéressant de tenir compte, dans la probabilité de transition $P_{1|1}(v, \Delta t | v')$, du fait que les variations de vitesse $w = v - v'$ sont beaucoup plus petites que la vitesse v . Dans ce but, considérant la probabilité de transition $P_{1|1}(v, \Delta t | v')$ comme une fonction $P_{1|1}(w, v - w, \Delta t)$ de la variation de vitesse w et de la vitesse initiale $v' = v - w$, on réécrit l'équation d'évolution 2.3 sous la forme

$$f(v, t + \Delta t) = \int f(v - w, t) P_{1|1}(w, v - w, \Delta t) dw \quad (2.4)$$

où $P_{1|1}(w, v - w, \Delta t)$ représente la distribution conditionnelle de la variation de vitesse w , la vitesse initiale $v' = v - w$ étant fixée.

2.6.1 Moments de la variation de vitesse

Pour simplifier l'écriture, nous notons dans ce paragraphe v (et non v') le second argument, supposé fixé, de la probabilité conditionnelle $P_{1|1}$. Pour $\Delta t \ll \gamma^{-1}$, les moments de la variation de vitesse w se déduisent de l'équation de Langevin intégrée sur un intervalle de temps Δt , c'est à dire

$$w = -\gamma v \Delta t + \frac{1}{m} \int_t^{t+\Delta t} F(t') dt' \quad (2.5)$$

- Le premier moment de w ,

$$\langle w \rangle = \int w P_{1|1}(w, v, \Delta t) dw \quad (2.6)$$

est la variation moyenne de la vitesse pendant le temps Δt . La force de Langevin étant nulle en moyenne, il vient, d'après l'équation de Langevin intégrée 2.5

$$\langle w \rangle \sim -\gamma v \Delta t \quad (2.7)$$

Le premier moment de w est proportionnel à Δt

- Le second moment de w ,

$$\langle w^2 \rangle = \int w^2 P_{1|1}(w, v, \Delta t) dw \quad (2.8)$$

Se calcule en prenant la moyenne de l'équation obtenue en élevant au carré les deux membres de l'équation de Langevin intégrée 2.5 Il vient :

$$w^2 = \gamma^2 v^2 (\Delta t^2) - \frac{2}{m} \gamma v \Delta t \int_t^{t+\Delta t} F(t') dt' + \frac{1}{m^2} \int_t^{t+\Delta t} dt' \int_t^{t+\Delta t} dt'' F(t') F(t'') \quad (2.9)$$

La fonction d'autocréation de la force aléatoire, $\langle F(t') F(t'') \rangle = g(t' - t'')$, décroît sur un temps de l'ordre de τ_c . Pour $\Delta t \gg \tau_c$ On peut Prendre l'expression approchée $g = 2Dm^2\delta(\tau)$. On obtient alors ,au premier ordre en Δt ,

$$\langle w^2 \rangle \sim 2D\Delta t. \quad (2.10)$$

De même, tous les moments $\langle w^n \rangle = \int w^n P_{1|1}(w, v, \Delta t) dw$.Contiennent une contribution du premier ordre en Δt , que l'on peut noter $M_n \Delta t$. De manière général, les quantités M_n peuvent dépendre de v .

2.6.2 Le développement

Le produit $f(v - w, t) P_{1|1}(w, v - w, \Delta t)$ Peut être développée en série de Taylor de w :

$$f(v, t + \Delta t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} w^n \frac{\partial^n}{\partial v^n} (f(v, t) P_{1|1}(w, v, \Delta t)) \quad (2.11)$$

En reportant cette expression dans l'équation d'évolution 2.4 on obtient :

$$f(v, t + \Delta t) = \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \int w^n \frac{\partial^n}{\partial v^n} (f(v, t) P_{1|1}(w, v, \Delta t)) dw \quad (2.12)$$

Soit

$$f(v, t + \Delta t) = \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \frac{\partial^n}{\partial v^n} (\langle w^n \rangle f(v, t)) \quad \tau \ll \Delta t \ll \gamma^{-1} \quad (2.13)$$

Cette formule, connue sous le nom de développement de Kramers-Moyal, a été établie par H.A. Kramers en 1940 et J.E. Moyal en 1949. Comme tous les moments $\langle w^n \rangle$ possèdent une contribution $M_n \Delta t$ du premier ordre en Δt , l'équation 2.13 donne, en ne

conservant que les termes d'ordre Δt ,

$$f(v, t + \Delta t) - f(v, t) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \frac{\partial^n}{\partial v^n} (M_n f) \quad (2.14)$$

En faisant formellement tendre Δt vers zéro, on obtient l'équation aux dérivées partielles vérifiée par la fonction de distribution des vitesses $f(v, t)$:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \frac{\partial^n}{\partial v^n} (M_n f) \quad (2.15)$$

Chapitre 3

Equation maitresse et équation de Fokker Planck

Ce chapitre est consacré à la présentation de deux équations fondamentales permettant de décrire l'évolution des lois de probabilités relatives à un processus aléatoire Markovien. Le chapitre précédent mettait l'accent sur la description précise de la valeur moyenne de certaines grandeurs (position, écart quadratique, . . .). Il s'agit maintenant d'obtenir l'information maximale possible dans un cadre probabiliste, c'est-à-dire de déterminer les lois de probabilités elles-mêmes, pour décrire l'évolution temporelle d'un système hors d'équilibre obéissant à une dynamique markovienne. On dérive ici les deux équations fondamentales, en précisant à la fois la portée et la généralité.

3.1 Equation de maitresse

Soit un système dont on sait que, à l'instant t_0 , une propriété donnée prend la valeur γ avec la (densité de) probabilité $\phi_0(x)$; dans un contexte probabiliste, cette fonction contient l'information complète initiale sur, le système [13]. En d'autres termes, raisonnant sur un ensemble de systèmes identiques, la fraction d'entre eux où le paramètre

physique Υ a précisément la valeur x à δx . près est égale $\phi_0(x) \delta x$. La question qui vient alors à l'esprit est : que vont devenir ces systèmes, c'est-à-dire que vaut la fonction de répartition donnant les probabilités de trouver une valeur x à l'instant t , fonction que l'on note naturellement $p(x, t)$? Comment évolue Dans le temps la répartition initiale ? Compte tenu de l'information de départ supposé donnée, on devra, tôt ou tard, écrire que la fonction $p(x, t)$ se confond, à l'instant t_0 , avec la fonction prescrite $\phi_0(x)$, ce qui fixera la Condition initiale :

$$p(x, t = t_0) = \phi_0(x) \quad (3.1)$$

La réponse ces questions passe d'abord par l'établissement d'une équation d'évolution dans le temps pour $p(x, t)$ suivie de sa résolution compte tenu de la condition initiale 3.1 Il est clair que cette équation

doit être du premier ordre par rapport au temps ; dans le cas contraire, la question ainsi posé ne pourrait recevoir de réponse. Sous l'hypothèse markovienne, l'équation(SCK) 1.38 permet d'écrire cette équation d'évolution, dont la simplicité (au moins formelle) repose crucialement sur cette hypothèse ; c'est bien cette dernière qui permet de d'composer l'évolution entre t_0 et t en une succession d'étapes dont chacune est, en quelque sorte, un nouveau point de départ.

La répartition $p(x, t)$ s'obtient en sommant, à partir de l'état initial, sur toutes les valeurs possibles au départ ; en vertu de :

$$p_1(x_2, t_2) = \sum_{y_1 \in Y} P(x_2, t_2 | x_1, t_1), \quad (3.2)$$

on a

$$p(x, t) = \sum_{y_0 \in Y} W(x, t | x_0, t_0) p(x_0, t_0). \quad (3.3)$$

De la même façon, on peut écrire :

$$p(x, t + \Delta t) = \sum_{y_0 \in Y} W(x, t + \Delta t | x_0, t_0) p(x_0, t_0) \quad (3.4)$$

L'hypothèse Markovienne va permettre de relier directement $p(x, t + \Delta t)$ à $p(x, t)$ en utilisant l'équation (SCK), 1.37 ; en choisissant comme instant intermédiaire où la valeur x' est réalisé, c'est-à-dire en prenant $t' = t$ dans :

$$W(x_2, t_2 | x_1, t_1) = \sum_{y' \in Y} W(x_2, t_2 | x', t') W(x', t' | x_1, t_1), \quad (t_1 < t' < t_2) \quad (3.5)$$

On obtient :

$$W(x, t + \Delta t | x_0, t_0) = \sum_{y' \in Y} W(x, t + \Delta t | x', t) W(x', t | x_0, t_0), \quad (t_0 < t < t + \Delta t) \quad (3.6)$$

Il vient, d'après 2.4

$$p(x, t + \Delta t) = \sum_{x_0 \in X} \sum_{x' \in X} W(x, t + \Delta t | x', t) W(x', t | x_0, t_0) p(x_0, t_0) \quad (3.7)$$

La sommation sur x_0 des deux facteurs de droite reconstruit précisément $p(x', t)$, de sorte que :

$$p(x, t + \Delta t) = \sum_{x' \in X} W(x, t + \Delta t | x', t) p(x', t), \quad p(x, t = t_0) = \phi_0(x) \quad (3.8)$$

Cette équation établit un lien direct simple entre $p(x', t)$ et $p(x, t + \Delta t)$ pour un processus parti de $\phi(x)$ à l'instant t_0 , mais sans mention explicite de l'état initial ; clairement, l'évolution à instant t ne dépend explicitement que du présent, pas du passé. En définitive, la quantité W , probabilité de transition, engendre de proche en proche l'état à l'instant $t + \Delta t$ à partir de l'instant t - bien évidemment, une information sur l'état de départ sera tôt ou tard requise pour achever la résolution du problème posé.

Au cas markovien et à l'équation 3.8 qui résulte de cette hypothèse .afin de rendre les notations plus claires, introduisons explicitement les valeurs (discrètes) x_n que peut

prendre x e posons :

$$p(x_n, t) \equiv p_n(t), \quad W(x_n, t + \Delta t | x_m, t) \equiv W_{nm}(t, \Delta t) \quad (3.9)$$

La relation de normalisation 1.32 pour la probabilité conditionnelle s'écrit ici :

$$\sum_n W_{nm}(t, \Delta t) = 1 \Leftrightarrow \sum_m W_{mn}(t, \Delta t) = 1 \quad (3.10)$$

tandis que 3.8 devient :

$$p_n(t + \Delta t) = \sum_m W_{nm}(t, \Delta t) p_m(t) \quad (3.11)$$

En retranchant $p_n(t)$, puis en divisant par Δt :

$$\frac{1}{\Delta t} [p_n(t + \Delta t) - p_n(t)] = \frac{1}{\Delta t} \left[\sum_m W_{nm}(t, \Delta t) p_m(t) - p_n(t) \right] \quad (3.12)$$

Utilisons maintenant l'équation de normalisation 3.10 pour écrire le facteur implicite du deuxième terme de la sommation ; il vient ainsi :

$$\frac{[p_n(t + \Delta t) - p_n(t)]}{\Delta t} = \left[\sum_m W_{nm}(t, \Delta t) p_m(t) - \sum_m W_{mn}(t, \Delta t) p_n(t) \right] \quad (3.13)$$

Supposons maintenant que, quand Δt tend vers zéro, le rapport $W_{nn'}(t, \Delta t) / \Delta t$ a une limite finie notée $W_{nn'}$; ces quantités sont donc des probabilités de transition par unité de temps. A la limite, on obtient :

$$\frac{dp_n}{dt} = \sum_m W_{nm} p(t) - \sum_m W_{mn}(t) p_n(t) \quad (n = 1, 2, \dots). \quad (3.14)$$

Ceci constitue l'équation maitresse, dont l'interprétation est évidente dès que l'on a accepté l'hypothèse markovienne : la variation du nombre de systèmes dans l'état n (où

l'aléatoire y prend la valeur x_n) est due à l'arrivée de systèmes initialement dans l'état m (premier terme) et au départ de systèmes initialement dans l'état n (deuxième terme). Il s'agit donc clairement d'une équation de bilan, ou de conservation : le second membre est l'opposé du courant issu de l'état n . On vérifie sans peine la normalisation des probabilités à tout instant, en calculant la dérivée de la somme des $p_n(t)$ à partir de 3.14. Il est parfois commode d'écrire l'équation maîtresse sous forme vectorielle :

$$\frac{d}{dt} |p(t)\rangle = -W |p(t)\rangle \quad (3.15)$$

où W est la matrice :

$$(W)_{nm} = -w_{nm} \quad (n \neq m), \quad (W)_{nm} = \sum_{m \neq n} w_{nm} \quad (3.16)$$

La version continue de l'équation maîtresse est évidemment :

$$\frac{\partial p(x,t)}{\partial t} = \int dx' [w(x,x')p(x',t) - w(x',x)p(x,t)] \quad (3.17)$$

L'équation maîtresse est une équation différentielle locale en temps ; cette propriété est la conséquence directe de l'hypothèse markovienne. Sa généralisation intuitive est :

$$\frac{dp_n}{dt} = \sum_m \int dt' K_{nm}(t,t') p_m(t') \quad (3.18)$$

où $K_{nm}(t,t')$ est un noyau de mémoire qui peut remonter arbitrairement loin dans le passé. On trouve ce type d'équation quand, partant d'un système markovien à plusieurs degrés de liberté (une coordonnée et une impulsion, par exemple), on prend des traces partielles pour ne faire apparaître, in fine, qu'une équation dynamique pour un nombre réduit de ces degrés de liberté, un seul par exemple. La contraction sur des degrés de liberté fait en général perdre le caractère markovien éventuellement présent pour une variable unique.

L'équation maîtresse est clairement une équation décrivant un mouvement irréversible (elle est du premier ordre par rapport au temps), la matrice W ayant toutes ses valeurs propres positives ou nulles. Il est d'ailleurs facile, dans le cas symétrique où $\omega_{nm} = \omega_{mn}$, de démontrer le théorème H de Boltzmann, signe caractéristique d'une évolution non invariante dans le renversement du temps. En effet, soit la fonction H définie comme :

$$H_B = \sum_n p_n(t) \ln p_n(t) \quad (3.19)$$

La dérivée de H par rapport au temps est :

$$\frac{dH_B}{dt} = \sum_n \frac{dp_n}{dt} (1 + \ln p_n) \quad (3.20)$$

D'un autre côté, lorsque les ω_{nm} sont symétriques, l'équation maîtresse 3.14 s'écrit :

$$\frac{dp_n}{dt} = \sum_m \omega_{nm} [p_m(t) - p_n(t)] \quad (3.21)$$

3.2 Equation de Fokker Planck

L'équation maîtresse [12] décrivant le mouvement d'une particule de Brown est difficile à résoudre sous cette forme. Nous allons maintenant montrer que, moyennant quelques hypothèses simplificatrices, on peut obtenir une équation aux dérivées partielles pour la distribution de probabilité $P(x, t)$. Partons pour cela de l'identité suivante :

$$P(x, t + \tau) = \int_{-\infty}^{+\infty} W(x, t + \tau | x', t) P(x', t) dx' \quad (3.22)$$

qui relie la distribution de probabilité $P(x, t)$ au temps t , à $P(x, t + \tau)$ au temps $t + \tau$. Nous supposons que t_0 et que cette quantité est macroscopiquement petite tout en restant

microscopiquement grande. Cette équation exprime le fait que l'on peut atteindre le point x au temps $t + \tau$ à partir de n'importe quel point x' au temps t' ; c'est la raison pour laquelle on intègre sur la variable x' . La quantité $W(x, t + \tau | x', t)$ représente la probabilité de transition de l'état (x', t) à l'état $(x, t + \tau)$. En utilisant les propriétés de la distribution de Dirac, on peut écrire l'identité suivante :

$$W(x, t + \tau | x', t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x - y) W(y, t + \tau | x', t) dy \quad (3.23)$$

Pour obtenir l'équation cherchée, l'idée est de développer la distribution de Dirac autour de $x - x'$. On trouve :

$$\begin{aligned} \delta(y - x) &= \delta(x' - x + y - x') = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(y - x')}{n!} \left(\frac{\partial}{\partial x'} \right)^n \delta(x' - x) \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(y - x')}{n!} \left(-\frac{\partial}{\partial x} \right)^n \delta(x' - x) \end{aligned} \quad (3.24)$$

Ceci nous permet d'écrire 3.23 sous la forme :

$$\begin{aligned} W(x, t + \tau | x', t) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(y - x')}{n!} \left(-\frac{\partial}{\partial x} \right)^n \delta(x' - x) W(y, t + \tau | x', t) dy \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-\frac{\partial}{\partial x} \right)^n \int_{-\infty}^{+\infty} (y - x')^n \delta(x' - x) W(y, t + \tau | x', t) dy \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-\frac{\partial}{\partial x} \right)^n \left[\int_{-\infty}^{+\infty} (y - x')^n W(y, t + \tau | x', t) dy \right] \delta(x' - x) \end{aligned} \quad (3.25)$$

Nous allons définir les moments d'ordre n de la quantité $(y - x')$ par :

$$M_n(x', t, \tau) = \int_{-\infty}^{+\infty} (y - x')^n W(y, t + \tau | x', t) dy \quad (3.26)$$

On a : $M_n(x', t, \tau) \delta(x' - x) = M_n(x, t, \tau) \delta(x' - x)$. Ceci permet d'écrire 3.25 sous la forme :

$$W(x, t + \tau | x', t) = \left[1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-\frac{\partial}{\partial x} \right)^n M_n(x, t, \tau) \right] \delta(x' - x) \quad (3.27)$$

Insérons maintenant cette expression dans 3.22 et intégrons par rapport à x' . On obtient,

en utilisant les propriétés de la distribution de Dirac et en se souvenant que τ est infiniment petit au sens macroscopique :

$$\begin{aligned} P(x, t + \tau) &= P(x, t) + \frac{\partial P(x, t)}{\partial t} \tau + O(\tau^2) \quad (3.28) \\ &= P(x, t) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-\frac{\partial}{\partial x} \right)^n M_n(x, t, \tau) \int_{-\infty}^{+\infty} P(x', t) \delta(x - x') dx' \\ &= P(x, t) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-\frac{\partial}{\partial x} \right)^n M_n(x, t, \tau) P(x, t) \end{aligned}$$

La première ligne est le développement de $P(x, t + \tau)$, les deux suivantes proviennent de 3.27. Jusqu'ici, nous ne savons rien sur les moments $M_n(x, t, \tau)$. La quantité t étant infiniment petite, on peut développer ceux-ci jusqu'au premier ordre :

$$\frac{M_n(x, t, \tau)}{n!} = D^{(n)}(x, t) \tau + O(\tau^2) \quad (3.29)$$

Il n'y a pas de terme constant car, pour $\tau = 0$, la probabilité de transition vaut $W(x, t | x', t) = \delta(x - x')$ (rappelons qu'elle est normalisée). Ces considérations permettent d'écrire l'équation 3.28 sous la forme :

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = \sum_{n=1}^{\infty} \left(-\frac{\partial}{\partial x} \right)^n D^{(n)}(x, t) P(x, t) \quad (3.30)$$

L'expression ci-dessus s'appelle le développement de Kramers–Moyal. Pour les processus markoviens qui nous intéressent, les coefficients $D^{(n)}$ ne dépendent pas de l'histoire

du système. La question est maintenant de savoir à quel ordre on doit stopper la série du second membre de l'équation 3.30. La réponse est donnée par le théorème de Pawula qui dit que lorsque la probabilité de transition est toujours positive, ce qui est le cas ici, les moments d'ordre supérieurs à deux sont soit tous nuls soit tous différents de zéro. Pour les cas qui nous intéressent ici (processus Markoviens stationnaires), les moments d'ordre un et deux sont une approximation suffisante. On obtient alors l'équation Fokker–Planck

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} [D^{(1)}P(x, t)] + \frac{\partial^2}{\partial x^2} [D^{(2)}P(x, t)]$$

Le coefficient $D^{(1)}$ s'appelle le coefficient de dérive et $D^{(2)}$ le coefficient de diffusion. Ce type d'équation décrit un processus stochastique dans lequel la valeur moyenne de x se déplace au cours du temps et dont la distribution de probabilité s'élargit.

3.3 Application 01 : Goutte de colorant sur la surface de l'eau

Un bon exemple pour illustrer le type de phénomène physique que décrit l'équation de Fokker-Planck est celui d'une goutte de colorant que l'on dépose à la surface d'une rivière. On observe que la tache colorée s'élargit au cours du temps et que son centre se déplace sous l'effet du courant de la rivière qui joue le rôle de champ extérieur. Le phénomène de diffusion est décrit par le terme $\frac{\partial^2}{\partial x^2} [D^{(2)}P(x, t)]$ alors que la dérive de la goutte de colorant est décrite par le terme $\frac{\partial}{\partial x} [D^{(1)}P(x, t)]$.

Lorsque la force de dérive est nulle, on a seulement un phénomène de diffusion décrit par l'équation classique :

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = \frac{\partial^2}{\partial x^2} [D^{(2)}P(x, t)] \tag{3.31}$$

appelée équation de diffusion.

Le raisonnement que nous avons tenu pour la distribution de probabilité de la particule de Brown aurait pu être fait pour la distribution de vitesse de cette particule. Dans ce cas, on aurait obtenu une équation de Fokker–Planck pour la distribution de probabilité $P(v, t)$:

$$\frac{\partial P(v, t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial v} [D_v^{(1)} P(v, t)] + \frac{\partial^2}{\partial v^2} [D_v^{(2)} P(v, t)] \quad (3.32)$$

Où les coefficients de dérives et de diffusion, $D_v^{(1)}$ et $D_v^{(2)}$, sont maintenant associés à l'espace des vitesses. Les coefficients de dérive et de diffusion sont des quantités mathématiques mais rien ne permet d'en fixer la valeur. Pour le faire, il faut prendre en compte la physique du problème; c'est ce que nous allons faire maintenant dans le cas du mouvement brownien unidimensionnel. Nous allons étudier le problème lié à la vitesse d'une particule de Brown en utilisant les résultats obtenus avec l'équation de Langevin. Pour cela, nous allons d'abord montrer que la valeur moyenne, prise sur un ensemble, d'une quantité physique $g(v)$ s'exprime en fonction de la probabilité de transition d'un état de vitesse v_0 au temps $t = 0$ vers un état de vitesse v au temps t . Rappelons la définition de la valeur moyenne de $g(v)$:

$$\langle g(v) \rangle = \int g(v) P_2(v, t | v_0, 0) dv \quad (3.33)$$

Considérons maintenant le cas où, au temps $t = 0$, la particule a la vitesse $v = v_0$. Cela signifie que $P(v', 0) = \delta(v' - v_0)$ puisque $P(v', t)$ est normalisée à l'unité. Compte tenu de

$$dE = -\sum_{\{M\}} P_i P_i dV = \langle P \rangle dV = -P dV \quad (3.34)$$

on peut écrire 3.31 sous la forme :

$$\begin{aligned} \langle g(v) \rangle &= \int g(v) W(v, t | v', 0) P(v', 0) dv \\ &= \int g(v) W(v, t | v', 0) \delta(v' - v_0) dv \\ &= \int g(v) W(v, t | v_0, 0) dv \end{aligned} \quad (3.35)$$

Pour passer de la deuxième à la troisième ligne de l'expression ci-dessus, nous avons utilisé la relation 1.37. La valeur moyenne $\langle g(v) \rangle$ s'exprime en fonction de la probabilité de transition $W(v, t|v_0, 0)$ mais ceci n'est vrai que parce qu'au temps $t = 0$, $v = v_0$. La recherche des solutions de l'équation de Fokker Planck est complexe. Si l'on a $x = 0$ pour $t = 0$ ($P(x, 0) = \delta(x)$), la solution est une gaussienne qui s'élargit au cours du temps. Une gaussienne est complètement déterminée par sa valeur moyenne $\langle x \rangle$ et par sa variance $\sigma^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$. Son expression normalisée est :

$$P(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{(x - \langle x \rangle)^2}{2\sigma^2}\right) \quad (3.36)$$

Calculons, à l'aide de l'équation de Fokker Planck, les quantités $\langle x \rangle$ et $\langle x^2 \rangle$. Pour cela, multiplions les deux membres de l'équation de Fokker Planck par x et intégrons sur tout l'espace. Comme nous l'avons signalé plus haut, nous supposerons, pour alléger les notations, que $\int \dots dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \dots dx$. Pour évaluer les intégrales définies, nous tiendrons compte du fait que $P(x, t)$, ainsi que toutes ses dérivées, tendent vers zéro lorsque $x \rightarrow \pm\infty$ plus vite que tout polynôme en x . Cette condition assure que tous les moments de x sont finis. Nous supposerons de plus que les coefficients $D^{(1)}$ et $D^{(2)}$ sont des constantes. On obtient alors :

$$\int x \frac{\partial p}{\partial t} dx = -D^{(1)} \int x \frac{\partial p}{\partial x} dx + D^{(2)} \int x \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} dx \quad (3.37)$$

Le membre de gauche s'écrit :

$$\int x \frac{\partial p}{\partial t} dx = \frac{\partial}{\partial t} \int x P dx = \frac{\partial}{\partial t} \langle x \rangle = \frac{d}{dt} \langle x \rangle \quad (3.38)$$

L'intégrale du premier terme du membre de droite s'écrit, après intégration par parties

$$\int x \frac{\partial p}{\partial x} dx = \int \frac{\partial}{\partial x} (xP) dx - \int P dx = [xP]_{-\infty}^{+\infty} - 1 = -1 \quad (3.39)$$

l'intégrale du deuxième membre vaut :

$$\int x \frac{\partial^2 P}{\partial x^2} dx = \int \frac{\partial}{\partial x} \left(x \frac{\partial P}{\partial x} \right) dx - \int \frac{\partial P}{\partial x} = \left[x \frac{\partial P}{\partial x} \right]_{-\infty}^{+\infty} - [P]_{-\infty}^{+\infty} = 0 \quad (3.40)$$

En regroupant les termes, on trouve :

$$\frac{d}{dt} \langle x \rangle = D^{(1)} \quad \Rightarrow \quad \langle x \rangle = D_t^{(1)} \quad (3.41)$$

L'intégration a été faite en tenant compte de la condition initiale ($t = 0, x = 0$). La valeur moyenne s'éloigne de la valeur initiale proportionnellement au temps. La quantité $D^{(1)}$ a la dimension d'une vitesse. C'est la vitesse de dérive. Procédons de la même manière pour $\langle x^2 \rangle$. On a :

$$\int x^2 \frac{\partial P}{\partial t} dx = -D^{(1)} \int x^2 \frac{\partial P}{\partial x} dx + D^{(2)} \int x^2 \frac{\partial^2 P}{\partial x^2} dx = \frac{d}{dt} \langle x^2 \rangle \quad (3.42)$$

En suivant les mêmes étapes que précédemment, on a :

$$\int x^2 \frac{\partial P}{\partial t} dx = \int \frac{\partial}{\partial x} (x^2 P) dx - \int 2x P dx = [x^2 P]_{-\infty}^{+\infty} - 2 \langle x \rangle = -2 \langle x \rangle \quad (3.43)$$

Et :

$$\begin{aligned} \int x^2 \frac{\partial^2 P}{\partial t} dx &= \int \frac{\partial}{\partial x} \left(x^2 \frac{\partial P}{\partial x} \right) dx - \int 2x \frac{\partial P}{\partial x} dx \\ &= \left[x^2 \frac{\partial P}{\partial x} \right]_{-\infty}^{+\infty} - \int 2 \frac{\partial}{\partial x} (Px) dx + \int 2P dx \\ &= 2 \end{aligned} \quad (3.44)$$

En regroupant les termes on obtient :

$$\frac{d}{dt} \langle x^2 \rangle = 2D^{(1)} \langle x \rangle + 2D^{(2)} \quad (3.45)$$

Comme $\langle x \rangle = D^{(1)}t$, cela conduit à :

$$\frac{d}{dt} \langle x^2 \rangle = 2 (D^{(1)})^2 t + 2D^{(2)} \quad (3.46)$$

Soit, après intégration et en tenant compte des conditions initiales :

$$\langle x^2 \rangle = (D^{(1)})^2 t^2 + 2D^{(2)}t = \langle x \rangle^2 + 2D^{(2)}t \quad (3.47)$$

D'où, pour la variance $\sigma^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$:

$$\sigma^2 = 2D^{(2)}t \quad (3.48)$$

La solution de l'équation de Fokker Planck, avec les conditions initiales citées plus haut

s'écrit :

$$P(x, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi D^{(2)}t}} \exp \left[-\frac{(x - D^{(1)}t)^2}{4D^{(2)}t} \right] \quad (3.49)$$

On vérifie que lorsque $t \rightarrow 0$, $P(x, t) \rightarrow \delta(x)$.

3.4 Application 02 : Diffusion d'une particule dans un champ homogène

Considérons l'équation de diffusion dans un champ homogène donnant la densité de probabilité $P(x, t)$ qu'une particule soit en x à l'instant t :

$$\frac{\partial}{\partial x} P(x, t) = -C \frac{\partial}{\partial x} P(x, t) + D \frac{\partial^2}{\partial x^2} P(x, t) \quad (3.50)$$

où c est la vitesse de dérive constante et D le coefficient de diffusion. La condition initiale $P(x, 0)$ est supposée connue .

En définissant la fonction caractéristique $\phi(x, t)$ de $P(x, t)$ telle que :

$$\phi(x, t) = \int e^{iux} P(x, t) dx \quad (3.51)$$

Et en remplaçant dans (3.50), nous obtenons l'équation

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = icx\phi(x, t) - Du^2\phi(x, t) \quad (3.52)$$

Qui s'intègre immédiatement en

$$\phi(x, t) = \phi(x, 0) e^{(icx - Du^2)t} \quad (3.53)$$

En prenant maintenant la transformée de Fourier inverse, on a

$$P(x, t) = \frac{1}{2\pi} \int dx \phi(x, 0) e^{(icu - Du^2)t} e^{-iux} \quad (3.54)$$

Et en supposant $P(x, 0) = \delta(x)$, alors $\phi(x, 0) = 1$ nous obtenons :

$$\begin{aligned} P(x, t) &= \frac{1}{2\pi} \int du e^{(icu - Du^2)t} e^{-iux} \\ &= \frac{1}{2\pi} \int du e^{[i(ct-x)u - Du^2]t} \\ &= \frac{1}{2\pi} \int du e^{i(ct-x)tu - Dt u^2} . \end{aligned} \quad (3.55)$$

Pour l'évaluation de cette intégrale on pose

$$\alpha = -Dt, \beta = i(ct - x)t \quad (3.56)$$

Ceci conduit l'intégrale (3.55) à prendre la forme

$$\begin{aligned}
P(x, t) &= \int du e^{\alpha u^2 + \beta u} \\
&= \frac{e^{-\frac{\beta^2}{4\alpha^2}}}{2\pi} \int du e^{\alpha(u + \frac{\beta}{2\alpha})^2}
\end{aligned} \tag{3.57}$$

Ainsi nous obtenons le résultat suivant pour la densité de probabilité

$$P(x, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-\frac{(ct-x)^2}{4Dt}}. \tag{3.58}$$

3.5 Application 03 : Mouvement d'une particule dans un fluide

3.5.1 Introduction

Le terme mouvement brownien, comme nous l'avons mentionné précédemment [12], vient du botaniste Robert Brown qui, en observant des grains de pollen au microscope, a constaté que ces grains sont en mouvement perpétuel. On sait maintenant que ce phénomène est général : des petites particules plongées dans un fluide sont tout le temps en mouvement. Ceci est dû au bombardement incessant de ces particules par les particules constituant le fluide qui, elles mêmes, sont en mouvement perpétuel.

La première théorie du mouvement brownien est due à Einstein Nous allons la présenter dans ce qui suit. Une particule plongée dans un fluide est soumise à une force de friction. Si m désigne la masse de la particule, grande devant la masse m des molécules, on peut écrire cette force

$$\vec{F} = -\gamma M \vec{v} \tag{3.59}$$

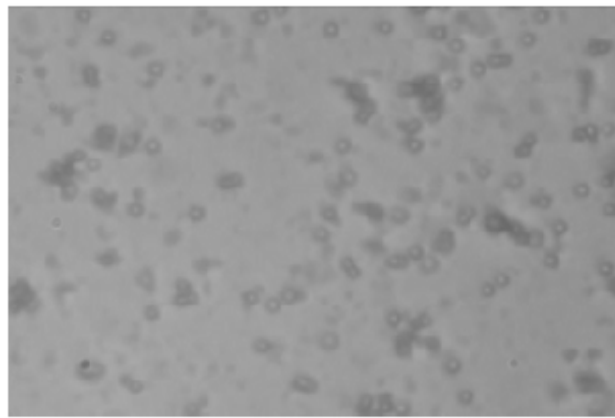
qui a pour effet de faire décroître sa vitesse avec un temps caractéristique $T_a = \gamma^{-1}$:

$$\vec{v}(t) = \vec{v}(0) e^{-\gamma t} \quad (3.60)$$

et donc d'immobiliser la particule en quelques T_a .

Toutefois, l'observation de petites particules montre une agitation constante qui n'est pas décrite par un amortissement fluide de sa vitesse.

3.5.2 Observation du mouvement brownien



(film : Billes de latex dans l'eau ,palais de la découverte)

3.5.3 Interprétation : Force de Langevin

L'interprétation (Einstein, Perrin, Langevin) de ce phénomène repose sur les chocs désordonnés et incessants des molécules sur les particules qui induisent un transfert de quantité de mouvement dont la moyenne est la force de friction, mais qui fluctue en raison du caractère discret du fluide. On en rend compte en introduisant de façon phénoménologique une force supplémentaire qui est nulle en moyenne mais de variance non nulle et

qui est responsable des fluctuations, d'où :

$$\frac{d \vec{v}}{dt} = -\gamma \vec{v} + \frac{\vec{F}}{M} \quad (3.61)$$

La description théorique de cette force, requérant une connaissance détaillée du potentiel d'interaction entre la particule et les molécules, la forme de la particule, ... etc, est hors du champ de ce mémoire.

3.5.4 Valeurs moyennes et fonction de corrélation

On a donc par hypothèse $\langle F(t) \rangle = 0$, et $\langle F(t)^2 \rangle = F_0^2 > 0$ où F_0 caractérise l'intensité de la force. La force de Langevin est caractérisée par sa fonction de corrélation « à deux temps » $\langle F(t_1) . F(t_2) \rangle$. Le phénomène étudié étant stationnaire, cette fonction de corrélation ne doit donc dépendre que de l'intervalle de temps $\tau = |t_1 - t_2|$ et s'écrit donc $C(\tau) = \langle F(t) . F(t + \tau) \rangle$

3.5.5 Temps de corrélation

Si les instants t_1 et t_2 sont « assez éloignés », on s'attend à ce que cette moyenne s'annule : il n'y a pas d'effet mémoire dans les interactions des molécules avec la particule. La fonction $C(\tau)$ décroît donc de F_0^2 à zéro en un temps caractéristique τ_c appelé « temps de corrélation ».

Si les molécules sont indépendantes, l'ordre de grandeur de τ_c ne peut pas excéder le temps d'interaction avec une particule, typiquement inférieur à $10^{-10}s$. Le point important est que ce temps soit très faible devant le temps d'amortissement T_a soit :

$$\gamma \tau_c \ll 1 \quad (3.62)$$

Cette hypothèse est raisonnable si la masse M est assez grande devant celle des molécules m , car il faut alors un nombre de chocs très important pour amortir la vitesse.

3.5.6 Coefficient de diffusion

On va simplifier le problème en constatant que la seule grandeur utile est :

$$I = \frac{1}{M^2} \int_0^{+\infty} C(\tau) d\tau = \frac{1}{2M^2} \int_{-\infty}^{+\infty} C(\tau) d\tau \quad (3.63)$$

Si τ_c est plus que toutes les autres échelles de temps (y compris le temps d'observation), on peut remplacer la fonction $C(\tau)$ par une distribution de Dirac, dont le poids doit conserver la valeur de I , soit :

$$C(\tau) = 2 \times d D_v M^2 \delta(\tau) \quad (3.64)$$

où d représente la dimension de l'espace (ici $d = 3$), et D_v est le coefficient de diffusion en vitesse.

On notera que $D_v \sim \frac{1}{\tau_c} \left(\frac{F_0 \tau_c^2}{M} \right)^2$ qui caractérise une marche au hasard de pas $\Delta v = F_0 \tau_c / M$ et $\Delta t = \tau_c$.

3.5.7 Valeurs moyenne de \vec{v}

On intègre formellement l'équation du mouvement 3.61 :

$$\vec{v}(t) = \vec{v}(t_0) e^{-\gamma(t-t_0)} + \int_{t_0}^t \frac{\langle F(t') \rangle}{M} e^{-\gamma(t-t')} dt' \quad (3.65)$$

qui vérifie bien sûr $\langle \vec{v}(t) \rangle \propto \langle F(t) \rangle$. Notons que le premier terme de (3) est l'amortissement fluide en l'absence de force de Langevin.

3.5.8 Relation d'Einstein

La solution stationnaire de cette équation donne $\langle \vec{v}(t)^2 \rangle = 3 \frac{D_v}{\gamma}$ qu'il convient d'identifier à la valeur que donne la thermodynamique pour l'équilibre à la température T

soit

$$\frac{1}{2M \langle \vec{v}(t)^2 \rangle} = \frac{3}{2K_B T} \quad (3.66)$$

Cela conduit à la relation d'Einstein :

$$\langle \vec{v}(t)^2 \rangle = 3 \frac{D_v}{\gamma} = 3 \frac{K_B T}{M} \quad \Rightarrow D_v = \gamma \frac{K_B T}{M} \quad (3.67)$$

qui explique le facteur $d = 3$ que nous avons introduit arbitrairement au début. Cette relation qui traduit le lien entre les deux forces de friction et de Langevin. La relation que nous obtenons par un argument heuristique peut être établie de façon plus générale comme le lien nécessaire entre les termes de dissipation et de fluctuation

3.5.9 Probabilités markoviennes

Pour mieux caractériser le mouvement brownien, il est utile de caractériser toute la densité de probabilité des vitesses $f(\vec{v}, t)$, et son évolution sous les effets de la friction et de la force de Langevin. Pour cela on utilise l'absence de mémoire du phénomène, qui est la définition d'un processus de Markov.

En se plaçant à une dimension pour simplifier : $f(\vec{v}, t + \Delta t)$ ne dépend que de $f(\vec{v}, t)$, et pas des instants antérieurs, en prenant bien sûr la limite $\tau_c \ll \Delta t \ll T_a$. On écrit alors :

$$f(\vec{v}, t + \Delta t) = \int dv' f(v', t) P(v, t + \delta t | v', t) = \int dw f(v - w) \Pi(w, v - w, \Delta t) \quad (3.68)$$

en introduisant la variation de vitesse $w = v - v'$.

Pour aller plus loin, on peut prendre en compte le fait que, dans Π les variations de vitesse $w = v - v'$ sont notablement plus petites que la vitesse v elle-même, mais que Π varie beaucoup plus vite avec w (1er argument) qu'avec $v' = v - w$ (2è argument). On fait

alors le développement limité par rapport au second argument, autour de $w = 0$:

$$f(v-w) \Pi(w, v-w, \Delta t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-w)^n}{n!} \frac{\partial^n}{\partial v^n} (f(v) \Pi(w, v, \Delta t)) \quad (3.69)$$

En reportant dans l'équation d'évolution précédente, on a :

$$f(v, t + \Delta t) - f(v, t) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \frac{\partial^n}{\partial v^n} (\langle w^n \rangle f(v, t)) \quad (3.70)$$

où les $\langle w^n \rangle$ sont les moments de la distribution Π et non f , et où l'on ne gardera que les termes d'ordre Δt .

3.5.10 Moments de la variation de vitesse

Comme Π décrit la distribution du changement de vitesse, on calcule w_n à l'aide de l'équation de Langevin (1, intégrée sur Δt) :

$$w = -\gamma v \Delta t + \int_t^{t+\Delta t} \frac{F(t')}{M} dt' \quad (3.71)$$

Le moment d'ordre 1 s'écrit $\langle w^1 \rangle = \int w \Pi(w, v, \Delta t) dw$ et comme la force de Langevin est nulle en moyenne, il résulte seulement de la friction, et à l'ordre le plus bas en Δt : $\langle w \rangle = -\gamma v \Delta t$. Le moment d'ordre 2 s'obtient en prenant le carré de l'équation donnant w , et ne contribue à l'ordre Δt que le carré du terme de Langevin qui s'écrit :

$$\left(\int_t^{t+\Delta t} \frac{F(t')}{M} dt' \right)^2 = \iint dt' dt'' \frac{F(t') F(t'')}{M^2} \quad (3.72)$$

d'où $\langle w^2 \rangle = 2D\Delta t$

3.5.11 Équation de Fokker-Planck et solution stationnaire

A l'ordre le plus bas, on en déduit l'équation de Fokker-Planck :

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{f(v, t + \Delta t) - f(v, t)}{\Delta t} = \gamma \frac{\partial}{\partial v} (v f(v, t)) + D_v \frac{\partial^2}{\partial v^2} (f(v, t)) \quad (3.73)$$

Nous nous contenterons ici d'en obtenir la solution stationnaire, qui vérifie :

$$v f(v) + D_v \frac{\partial f}{\partial v} = 0 \text{ car bien sûr } \lim_{v \rightarrow +\infty} f = \lim_{v \rightarrow +\infty} f' = 0 \quad (3.74)$$

ce qui correspond à la solution gaussienne (maxwellienne) : traduisant l'équilibre thermique entre le fluide et la particule brownienne

$$f(v) \propto \exp\left(-\frac{\gamma v^2}{2D_v}\right) = \exp\left(-\frac{\gamma v^2}{2v_0^2}\right) \text{ où } v_0^2 = \frac{D_v}{\gamma} = \frac{K_B T}{M} \quad (3.75)$$

Conclusion générale

Ce travail concerne l'étude d'une classe de phénomènes physiques qui mettent en jeu des équations aux dérivées partielles. Ils s'agit de phénomènes aléatoires ou aussi de processus stochastiques.

Dans le premier chapitre, nous avons jugé utile de rappeler les notions de probabilité ainsi que la variable aléatoire qui sont indispensables à la compréhension d'un processus aléatoire. Nous avons considéré un cas simplifié des processus stochastiques ; processus de Markov, où nous avons discuté brièvement ses caractéristiques. Ensuite, nous avons établi les équations décrivant ce type de processus, à savoir l'équation de Chapman–Kolmogorov.

Le deuxième chapitre est consacré à la description d'un phénomène aléatoire qui est le mouvement brownien. Nous avons considéré une particule en suspension dans un fluide. Son mouvement est considéré brownien dans la mesure où le rapport entre sa masse et la masse de l'une des molécules du fluide est grand devant l'unité. Les molécules du fluide sont en très grand nombre. Leur vitesse est isotrope, régulièrement répartie dans l'espace. Le phénomène se retrouve dans tous les fluides.

Dans le dernier chapitre nous avons établi une des équations maîtresses qui régissent les processus stochastiques ; l'équation de Fokker-Planck. Dans ce contexte et pour savoir résoudre cette équation, nous avons étudié trois systèmes. Le premier est celui d'une goutte de colorant sur la surface de l'eau. Le deuxième concerne la diffusion d'une particule dans un champ homogène. Nous avons terminé par l'étude du mouvement brownien d'une particule dans un fluide. Ce travail nous a permis de comprendre une classe importante de phénomènes physiques dans la mesure où nous avons appris à les décrire et à les modéliser.

Bibliographie

- [1] Résolution de l'équation de Fokker-Planck à coefficients dépendants de l'espace-temps. Thèse de magister par Saidi Seif Nadia. Constantine 2006.
- [2] Mathématiques : Outils pour la biologie Deug SIV-UCBL D. Mouchiroud (10/10/2002)
- [3] Notes de cours (Variables et Processus aléatoires), Hassiba Nemmour, USTHB 2015/2016.
- [4] Notes de cours Processus Aléatoires Olivier François 2004-2005
- [5] Equations de Fokker-Planck, D. Denis Gialis, Université J Fourier, Grenoble 2001-2010
- [6] Physique statistique hors d'équilibre : équation de Boltzmann, réponse linéaire. Noëlle Pottier 2000 Chap (26) 328-330
- [7] Physique statistique hors d'équilibre : équation de Boltzmann, réponse linéaire. Noëlle Pottier 2000 Chap (25) 310-311
- [8] Équations différentielles stochastiques : Résolution numérique et applications Cours SG 245 Madalina Deaconu 2014-2015
- [9] Physique statistique hors d'équilibre : équation de Boltzmann, réponse linéaire. Noëlle Pottier 2000 Chapitre(25) 312-314
- [10] Physique statistique hors d'équilibre : équation de Boltzmann, réponse linéaire. Noëlle Pottier 2000 Chapitre(26) 330-331

- [11] Physique statistique de la matière molle (DEA de physique de Liquides) 2003-2004
Claude ASLANGUL (chapitre 8) 119-121
- [12] Introduction à la physique statistique, Christian Ngo, Hélène Ngo 3^{ème} édition chapitre (13), Phénomènes de transport 296-299
- [13] Le mouvement brownien et la formule d'Einstein par M. J.Duclaux.. J. Phys. Radium, 1940

Abstract

In this memory we tried to solve the differential equations which make it possible to describe the evolution of the laws of probability relative to a random process and among these equations the equation of Fokker Planck that the density of probability of transition from a process of Markov must satisfy. At the origin a simplified form of this equation made it possible to study the Brownian movement like the majority of the partial derivative equations, it gives explicit solutions only in quite particular cases relating at the same time to the form of the equation. In our work we deal with three problems. It is about a drop of dye on surface of water, diffusion of a particle in a homogeneous field and movement of a particle in a fluid. The solutions of the equations are obtained by using various methods .

ملخص

يتعلق هذا العمل بالمعدلات التفاضلية التي تصف القوانين الاحتمالات لأنظمة عشوائية من أهمها معادلة فوكر بلانك التي تخضع إلى قوانين كثافة الاحتمالات لأنظمة تحولات ماركوف .

في بادئ الأمر الشكل المبسط لهذه المعادلة يسمح بدراسة الحركة البراونية بما أن المعدلات التفاضلية المشتقة لا تتوصل إلى حلول مفصلة إلا في حالات خاصة لذلك فسرنا ذلك في 3 مسائل و المسألة الأولى تتمثل في قطرة ملونة على مساحة من الماء أما المسألة الثانية تتمثل في انتشار جسيم في حقل متجانس

و الأخيرة هي التي تدرس حركة جسيم داخا مائع .

ملخص

يتعلق هذا العمل بالمعادلات التفاضلية التي تصف قوانين الاحتمالات لأنظمة عشوائية من أهمها معادلة فوكر بلانك التي تخضع إلى قوانين كثافة الاحتمالات لأنظمة تحولات ماركوف. في بادئ الأمر، الشكل المبسط لهذه المعادلة يسمح بدراسة الحركة البراونية. بما أن المعادلات التفاضلية المشتقة، لا تتوصل إلى حلول مفصلة إلا في حالات خاصة، قمنا في هذا العمل باستعمال مسألتين. الأولى تتمثل في دراسة حركة جسيم داخل مائع بواسطة علاقة اينشتاين. أما في الثانية فاستعملنا دالة قرين لحل معادلة فوكر بلانك هذه الأخيرة تتضمن طريقة حل معممة للمعادلات التفاضلية أو تحويل المعادلات التفاضلية إلى معادلات تكامل

Résumé

Dans ce mémoire nous avons tenté de résoudre les équations différentielles qui permettent de décrire l'évolution des lois de probabilité relatives à un processus aléatoire et parmi ces équations l'équation de Fokker Planck que doit satisfaire la densité de probabilité de transition d'un processus de Markov. À l'origine une forme simplifiée de cette équation a permis d'étudier le mouvement brownien. Comme la plupart des équations aux dérivées partielles, elle ne donne des solutions explicites que dans des cas bien particuliers portant à la fois sur la forme de l'équation. Dans notre travail nous traitons trois problèmes. Il s'agit d'une goutte de colorant sur la surface de l'eau, diffusion d'une particule dans un champ homogène et mouvement d'une particule dans un fluide. Les solutions des équations sont obtenues en utilisant différentes méthodes.

Mot clés : Processus stochastique, Mouvement Brownien, Equations maitresses