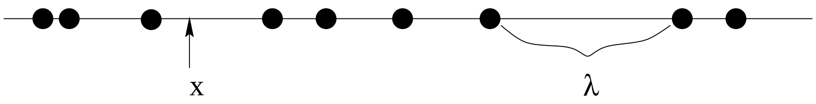
Processus stochastiques

1998-2001



Introduction aux probabilités

1 Loi de Poisson

1. M particules ponctuelles sont distribuées aléatoirement dans le *volume* unidimensionnel $[0, L]$.

   Trouver la loi $P_l(m)$ pour le nombre de particules m dans un sous-intervalle de longueur l.

   Calculer $\langle m \rangle$, $\langle m^2 \rangle$ et l'écart quadratique moyen $\langle \Delta m^2 \rangle$.

2. On s'intéresse maintenant à la limite $M, L \to \infty$ avec $M/L = \rho$ fixe. Montrer que la loi limite est la loi de Poisson :

$$P(m) = \frac{\mu^m}{m!} e^{-\mu} \quad m = 0, 1, 2, \ldots \tag{1}$$

   Trouver μ.

   Calculer $\langle m \rangle$, $\langle m^2 \rangle$ et l'écart quadratique moyen $\langle \Delta m^2 \rangle$. Discuter la dépendence de ces quantités en fonction de L.

3. On considère deux variables aléatoires distribuées suivant une loi de Poisson:

$$P_i(n_i) = \frac{\nu_i^{n_i}}{n_i!} e^{-\nu_i} \quad i = 1, 2 \tag{2}$$

   Trouver la loi de $n = n_1 + n_2$.

4. Pour ce même problème, trouver la (densité de) probabilité $p(\lambda)$ pour que l'intervalle vide se trouvant à droite d'une particule donnée soit de longueur λ. Vérifier la normalisation de $p(\lambda)$.

   Trouvez la (densité de) probabilité $q(\lambda)$ pour que l'intervalle vide se trouvant à droite d'un point $x \in [0, L]$ choisi au hasard, soit de longueur λ.

5. M particules sont aléatoirement distribuées dans un volume $V = [0, L]^3$.

   Trouvez la loi $P_\Omega(m)$ pour le nombre de particules m dans un sous-volume Ω.

2 Loi de Gauss

$$p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}} \tag{3}$$

1. Calculer $\langle x \rangle$, $\langle x^2 \rangle$ et le quatrième moment $\langle x^4 \rangle$.

2. On considère deux variables aléatoires distribuées suivant une loi de Gauss:

$$P_i(x_i) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_i^2}} e^{-\frac{x_i^2}{2\sigma_i^2}} \quad i = 1, 2 \tag{4}$$

   Trouver la loi de $x = x_1 + x_2$.

3. Une particule brownienne unidimensionelle se trouve à un instant initial $t = 0$ à l'origine $x = 0$. La (densité de) probabilité $P(x, t)$ pour qu'à l'instant t elle se trouve en x obéit à l'équation de diffusion:

$$\frac{\partial P}{\partial t} = D \frac{\partial^2 P}{\partial x^2} \tag{5}$$

   (a) Sans résoudre, calculer $\langle x^2 \rangle$ à l'instant t.

   (b) Trouver $P(x, t)$, qui est un exemple d'une loi de probabilité dépendant d'une variable supplémentaire, t.

   (c) Soit $G(x_2, t_2 | x_1, t_1)$ la probabilité pour que la particule brownienne se trouve en x_2 à l'instant t_2, étant donné qu'elle se trouvait en x_1 à un instant antérieur t_1.

   Trouver l'expression de G.

   Ecrire sa normalisation.

3 Marche au hasard

Pour la marche aléatoire en temps continu discutée en cours, remarquer que les temps des pas sont distribués aléatoirement sur l'axe des temps exactement comme les particules de l'exercice 1.1, 1.4 l'étaient dans l'espace. La marche se trouve en $x = 0$ à l'instant $t = 0$.

1. Quelle est la probabilité $q(\tau)$ pour qu'à un instant $\tau > 0$ donné, encore aucun pas n'ait eu lieu?

2. Quelle est la probabilité $p(\tau)d\tau$ pour que le premier pas ait lieu dans l'intervalle $[\tau, \tau + d\tau]$?

3. Quelle est la probabilité $p_2(\tau)d\tau$ pour que le deuxième pas ait lieu dans l'intervalle $[\tau, \tau + d\tau]$?

4 Equation de diffusion

Considérer la marche aléatoire en temps discret (cas A du cours). Ici l'intervalle de temps entre deux pas est fixe. Appelons cet intervalle b. Soit $t \equiv sb$ l'échelle de temps qui nous intéresse, et $x = na$ (comme avant) l'échelle spatiale. Définir une probabilité $P(x, t)$ et montrer qu'elle satisfait à l'équation de la diffusion. Ce qu'il faut retenir, c'est que l'équation de la diffusion peut apparaître de nombreuses manières comme un cas limite à partir de phénomènes en temps et/ou espace discret.

Introduction aux probabili ẽs – suite

1 Loi de Gauss – suite

1. Soit x une variable aléatoire gaussienne de moyenne a et de variance σ^2. Montrer que les cumulants de x au-delà du second s'annulent. Montrer que par conséquent tous les moments au-delà du second peuvent être exprimés en termes des premier et second.

2. On considère la généralisation de cette propriété à une loi gaussienne pour une variable à N composantes $\vec{x} = (x_1, x_2, \ldots, x_N)$,

$$\begin{aligned} P(x) &= C \exp[-\frac{1}{2}\sum_i \sum_j A_{ij} x_i x_j - \sum_i B_i x_i] \\ &= C \exp[-\frac{1}{2}\vec{x} \cdot A \cdot \vec{x} - B \cdot \vec{x}] \end{aligned} \tag{1}$$

   (a) Trouver la constante de normalisation C.

   (b) Trouver la fonction caractéristique $G(\vec{k})$, où $\vec{k} = (k_1, k_2, \ldots, k_N)$.

   (c) Trouver les moyennes $\langle x_i x_j \rangle$.

   (d) Prendre $B = 0$ et considérer la moyenne $\langle x_i x_j x_k \ldots \rangle$ du produit d'un nombre pair des x_n, avec $i, j, k, \ldots$ tous différents. Montrer que

$$\langle x_i x_j x_k \ldots \rangle = \sum \langle x_p x_q \rangle \langle x_r x_s \rangle \ldots \tag{2}$$

   où les indices $p, q, r, s, \ldots$ et les indices $i, j, k, \ldots$ constituent le même ensemble, et où la somme porte sur toutes les façons d'apparier ces indices. La relation (2) s'appelle le *théorème de Wick*.

2 Loi de Cauchy

Soit x_i une variable de Cauchy de loi

$$P_i(x_i) = \frac{\gamma_i}{\pi} \frac{1}{x_i^2 + \gamma_i^2} \qquad i = 1, 2$$

1. Montrer que la somme $x = x_1 + x_2$ est une variable de Cauchy et exprimer le paramètre γ de sa loi.

2. Calculer les moments $\langle x^\ell \rangle$.

3 Transformation de variables

1. Soit $P(E)$ la loi de l'énergie cinétique d'une particule de masse m. Exprimer la loi $p(v)$ de sa vitesse v.

2. Une droite fait un angle α avec l'axe des abscisses. Cet angle étant aléatoire de loi $p(\alpha)$, exprimer la loi de la pente de la droite.

Dans les simulations Monte Carlo un générateur de nombres (pseudo-)aléatoires produit une variable aléatoire r de loi uniforme sur l'intervalle $(0, 1)$. On rencontre les applications suivantes de transformation de variables.

1. Supposons que dans une simulation on ait besoin d'une variable aléatoire s de loi $P(s)$ sur un intervalle (a, b). On détermine alors une fonction f définie sur $(0, 1)$ telle que $s = f(r)$. Exprimer f pour l'exemple où s est une variable aléatoire sur $(0, \infty)$ de loi $P(s) = \gamma e^{-\gamma s}$.

2. A partir de deux variables aléatoires r_1 et r_2 fournies par l'ordinateur, construire deux variables gaussiennes indépendantes, x et y, de moyenne nulle et de variance σ^2.
   Indication. Poser $x = \rho \cos \phi$ et $y = \rho \sin \phi$. Quelles sont les lois de ρ^2 et de ϕ ?

4 Points aléatoires sur un axe

Des points bleus et rouges sont distribués aléatoirement sur l'axe du temps t avec respectivement les densités ω_B et ω_R. Au cours du temps, à quel taux ω est-ce que l'on rencontre de nouveaux points ? Etant donné qu'un nouveaux point est rencontré, quelle est la probabilité qu'il soit bleu (rouge) ?

5 Points aléatoires dans un plan

1. Des points sont distribués aléatoirement dans un plan avec une densité σ. Soit $p(r)dr$ la probabilité pour que le point le plus proche de l'origine en soit éloigné d'une distance entre r et dr. Exprimer $p(r)$.

2. Des gouttes de pluie sont tombées sur une surface avec une densité σ. Chaque goutte mouille une région circulaire de rayon a. Calculer la probabilité $P(\sigma, a)$ pour que l'origine ne soit pas mouillée.

Somme de variables aléatoires

1 Le théorème de la limite centrale

1. Soit X la somme de N variables aléatoires indépendantes : $X = \sum_{i=1}^{N} x_i$. Chaque x_i est distribuée avec une loi $P_i(x_i)$. Exprimer le n-ième cumulant de la distribution de X, $P(X)$, qu'on appellera $c_X^{(n)}$ en fonction des cumulants des distributions $P_i(x_i)$.

2. On s'intéresse au cas plus simple où toutes les variables x_i sont distribuées avec la même loi $P(x_i)$. Trouver la dépendance en N des cumulants normalisés $\lambda_n \equiv c_X^{(n)}/\sigma_X^n$. σ_X est l'ecart quadratique moyen de X, $\sigma_X^2 \equiv \langle (X - \langle X \rangle)^2 \rangle$.

3. Que peut-on conclure pour $P(X)$?

4. Quelles sont les hypothèses utilisées ?

2 La distribution uniforme

Soit $P(x)$ une distribution uniforme, $P(x) = 1/a$, si $|x| \leq a$ et $P(x) = 0$ en dehors de l'intervalle. Calculer $P(x_1 + x_2)$, $P(x_1 + x_2 + x_3)$, comparer à la Gaussienne.

3 La distribution exponentielle

Prenons une distribution exponentielle :

$$P(x) = \theta(x)\alpha e^{-\alpha x} \tag{1}$$

1. Trouver la distribution de $X \equiv \sum_{i=1}^{N} x_i$, avec toutes les x_i distribuées selon $P(x)$.

2. Étudier son comportement asymptotique $X \to \pm\infty$.

3. Étudier le comportement de $P(X)$ au voisinage de la valeur la plus probable X^*.

4. Déterminer pour quelles valeurs de $X - X^*$ l'approximation Gaussienne est bonne.

4 Loi avec des queues en puissance*

Prenons

$$P(x) = \frac{2a^3}{\pi(a^2 + x^2)^2} \tag{2}$$

où a est une constante positive.

1. Calculer la fonction caractéristique et étudier son développement autour de $|k|$ petit.

2. Trouver la fonction caractéristique de la loi convoluée N fois.

3. Étudier le comportement autour de la valeur la plus probable et sur les queues. Trouver où on a le changement de comportement.

Applications

1 Vibration d'une molécule diatomique

Une molécule diatomique (N_2, O_2, ...) a les niveaux vibrationnels $E_n = (n + 1/2)h\nu$, où $n = 0, 1, 2, \ldots$. On notera $P_n(t)$ la probabilité pour que la molécule se trouve dans l'état vibrationnel n à l'instant t, et on admettra que cette probabilité obéit à une équation maî tresse.

a. Dans l'hypothèse où seules sont permises les transitions $\Delta n = \pm 1$, écrire l'équation maîtresse la plus générale possible.

b. Quelle est la distribution P_n^{eq} quand la vibration est à l'équilibre à une température T ?

c. Dans l'hypothèse supplémentaire où les taux de transition obéissent aux RDB (relations de bilan détaillé) compatibles avec cet équilibre, quelle liberté vous reste-t-il pour l'expression de l'équation maîtresse ?

d. L'hypothèse du **a** n'est, en fait, pas réaliste. La mécanique quantique conduit plutôt à la "règle de sélection" $\Delta n = \pm 2$. Avec cette nouvelle hypothèse, reconsidérer vos réponses aux questions **a** et **c**.

Ci-dessous on considérera le cas dans lequel $\Delta n = \pm 1$ ou ± 2.

e. Soit W_{nm} le taux de transition de l'état m vers l'état n (où $m \neq n$). Pour $n = 0, 1, 2, \ldots$ on prendra

$$
\begin{aligned}
W_{n,n+2} &= \gamma \mathrm{e}^{+\beta h\nu} && (1)\\
W_{n+2,n} &= \gamma \mathrm{e}^{-\beta h\nu} && (2)\\
W_{n,n+1} &= \epsilon\gamma \mathrm{e}^{+1/2\beta h\nu} && (3)\\
W_{n+1,n} &= \epsilon\gamma \mathrm{e}^{-1/2\beta h\nu} && (4)
\end{aligned}
$$

où γ^{-1} est le temps caractéristique de la relaxation vibrationnelle et ϵ un petit paramètre sans dimension.

e1. Exhiber explicitement la matrice $\mathcal{W}$ de l'équation maîtresse en abrégeant $a_\pm = \gamma \mathrm{e}^{\pm 1/2\beta h\nu}$.

e2. Quelle est la solution d'équilibre de ce problème ?

e3. Trouver la transformation linéaire qui symétrise la matrice $\mathcal{W}$. Que pouvez-vous dire de ses valeurs propres ?

2 Marche aléatoire sur une droite de N sites

a. Écrire l'équation maîtresse pour la loi de probabilité $P(n, t)$. Écrire la matrice $\mathcal{W}$ associée. Que pouvez-vous dire de sa symétrie ?

b. Trouver les valeurs propres et les vecteurs propres. Normalisez-les correctement.

3 Processus dichotome

On considère un processus aléatoire $x(t)$ qui effectue des transitions entre deux états $+1$ et -1 à un taux γ.

a. Écrire l'équation maîtresse pour la loi de probabilité $P_\sigma(t)$ (où $\sigma = \pm 1$). Exprimer la probabilité de transition $T(\sigma', t'|\sigma, t)$. Vérifier que l'équation de Chapman–Kolmogorov est satisfaite.

b. La probabilité T calculée au **a** inclut-elle oui ou non la possibilité que x ait changé de signe plus qu'une fois dans l'intervalle (t, t') ?

c. Exprimer la probabilité p que x vaille -1 et $+1$, à deux instants respectivement t_1 et t_2, étant donné qu'il valait $+1$ à $t = 0$ et que $0 < t_1 < t_2$.

4 Processus markovien et non markovien

Si un certain événement se produit à un instant t_0, il se reproduira nécessairement dans l'intervalle de temps $(t_0, t_0 + \tau)$, avec une probabilité uniformément répartie sur cet intervalle. Sachant que l'événement s'est produit à $t = 0$, soit $n(t)$ le nombre de fois qu'il s'est reproduit depuis jusqu'à l'instant t (où $t > 0$). Pourquoi $n(t)$ n'est-il pas markovien ? Définir un processus markovien qui décrit le phénomène en question. Ecrire l'équation maîtresse associée.

[*Réalisation pratique :* t est la *distance* parcourue en voiture, τ est la distance qu'on peut parcourir avec un réservoir initialement plein, et l'événement est "faire le plein."]

5 Somme de variables corrélées

Soit $x_1, x_2, \ldots$ une suite de variables aléatoires de moyennes et variances égales, $\langle x_n \rangle = 0$ et $\langle x_n^2 \rangle = \sigma^2$, et corrélées telles que $\langle x_m x_n \rangle = g(n - m)$, où $g(\ell)$ est une fonction donnée qui tend vers zéro pour $\ell \to \pm\infty$. Soit $X \equiv N^{-1/2} \sum_{n=1}^{N} x_n$.

Formuler des conditions qui font que pour $N \to \infty$ la loi de X_N tende vers une gaussienne, dont vous exprimerez la variance.

Indication. Utiliser les fonctions caractéristiques.

Introduction aux transitions de phases

1 Un analogue mécanique des transitions de phase

Nous étudions le mouvement de la particule de masse m de la figure. La particule se déplace sans friction sur l'anneau de rayon R. L'anneau est attaché à une barre horizontale. La barre tourne avec une vitesse angulaire ω autour d'un axe verticale. Cet axe de rotation est à une distance A du centre de l'anneau. La position de la masse sur l'anneau est donné par l'angle θ. g est l'accelération de la gravité.

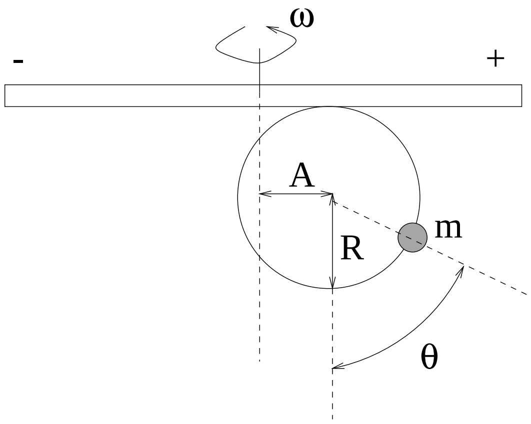


Figure 1: Schema de système mécanique.

1. Écrire les équations de mouvement de la particule.

2. On défini $h \equiv A/R$, $\beta = \omega^2 R/g$. Écrire une équation pour l'angle θ ne faisant intervenir que les parametres h et β.

3. Chercher les solutions θ_{sol} de cette équation, qu'on appelera les "angles d'équilibre", pour différents valeurs des paramètres h et β.

   (a) Étudier le cas $h = 0$ en fonction de β. Tracer $\theta(\beta)$ et comparer au comportement de l'aimantation d'un ferromagnétique. Donner une interprétation au paramètre β. Trouver une "valeur critique" β_c et calculer "l'exposant critique".

   (b) Étudier le cas $h \neq 0$ en fonction de β. Tracer $\theta(\beta)$ pour $h > 0$ et $h < 0$ (aide : calculer $d\theta/d\beta$). Donner une interprétation au paramètre h dans le cas magnétique.

   (c) Étudier le cas $\beta \neq 0$ en fonction de h. Tracer $\theta(h)$ pour $\beta > \beta_c$ et $\beta < \beta_c$.

4. Écrire le Langrangian $L = T - V$, avec T l'énergie cinétique et V l'energie potentiel, de la particule. Modifier cette expression de façon à l'écrire comme $L = T_\theta - U_{eff}(\theta, h, \beta)$ avec $T_\theta = mR^2\dot{\theta}^2/2$. Trouver $U_{eff}(\theta, h, \beta)$.

5. Développer $U_{eff}(\theta, h, \beta)$ en série de puissances de θ pour $\theta \sim 0$ et $h \sim 0$. Comparer le résultat à l'approximation de Landau pour l'énergie libre en fonction d'un paramètre d'ordre. Qui est le "paramètre d'ordre" du problème mécanique ?

6. Étudier les points de col de U_{eff} dans tous les cas précedents. Conclure.

2 L'équation de Van der Waals

On va étudier la transition liquide-gaz avec l'équation de Van der Waals :

$$(V-b)\left(P+\frac{a}{V^2}\right)=RT \tag{1}$$

1. Représenter graphiquement les isothermes $P(V)$ de Van der Waals.

2. Quelle critique peut-on faire de l'équation de Van der Waals ?

3. Trouver les équations pour le point critique (V_c, T_c, P_c) au-delà duquel les isothermes n'ont plus de point d'inflexion.

   Montrer que $P_c = a/(27b^2)$, $V_c = 3b$, $RT_c = 8a/(27b)$.

   Proposer une façon de determiner a et b expérimentalement.

4. Écrire l'équation de Van der Waals en fonction des "variables reduites" $\tilde{P} \equiv P/P_c$, $\tilde{T} \equiv T/T_c$, $\tilde{V} \equiv V/V_c$. Cette équation s'appele "loi des état correspondants". Notez qu'elle est valable pour tous les fluides.

5. Calculer l'énergie libre d'un fluide de Van der Waals.

6. Calculer C_V et son exponsant critique α, C_p et son exposant γ, Développer la lois des états correspondants près de $\tilde{P} = \tilde{T} = \tilde{V} = 1$ et trouver $\tilde{P} = 1 + 4t - 6t\phi - 3/2\phi^3 + O(t\phi^2, \phi^4)$ avec $t = T - T_c)/T_c$ et $\phi = (V - V_c)/V_c$. Calculer δ défini selon $\pi - 1 \sim -\phi^\delta$.

Le modèle d'Ising avec interactions de portée infinie

On considère le modèle d'Ising avec des interactions de portée infinie : la constante de couplage J_{ij} vaut $J_{ij} = J_0$ pour *toutes* les paires de spins :

$$H = -J_0 \sum_{i \neq j} S_i S_j - h \sum_i S_i. \tag{1}$$

1. Comment doivent se comporter J_0 et h en fonction de N pour que le modèle soit bien défini dans la limite thermodynamique ?
2. Calculer l'énergie et l'entropie moyennes pour le cas cas $h = 0$ dans les limites $T = 0$ et $T \to \infty$. Que peut-on remarquer ?
3. Montrer que l'énergie est une fonction de l'aimantation par spin m (et des paramètres N, J_0 et h) seulement.
4. Écrire la fonction de partition du système comme une somme sur les différentes valeurs de l'aimantation par spin m. Définir une énergie libre à m fixée.
5. Trouver une équation pour l'aimantation par spin.
6. Comparer avec l'équation obtenue par l'approximation de Weiss pour le modèle d'Ising avec interaction entre plus proche voisins sur un réseau carré de dimension d. Que peut-on alors dire de l'approximation de champ moyen pour le modèle d'Ising avec des interactions de portée infinie ?
7. Étudier graphiquement l'équation pour m avec ou sans champ magnétique.
8. Idem pour l'énergie libre $f(m)$.
9. Étudier l'aimantation près de la transition et déterminer les exposants critiques β et δ. Calculer les exposants critiques γ et γ' associés à la susceptibilité magnétique à température fixée.

Transitions de phase : le modèle d'Ising

1 Le modèle d'Ising en dimensions d

Le modèle d'Ising est defini par

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j - H \sum_i S_i \tag{1}$$

Les spins sont tels que $S_i = \pm 1$ et il y a N dans le système. H est un champ magnétique. La somme $\sum_{\langle ij \rangle}$ porte sur les premiers voisins d'un réseau carré de dimension d.

1. Discuter le rapport entre ce modèle et et celui du *gaz de particules sur le même réseau.*
2. Ientifier les paramètres d'ordre dans les deux cas.
3. Comparer le modèle d'Ising avec un modèle simple pour une alliage binaire.

2 Le modèle d'Ising avec des interactions à portée inifinie

On considère le modèle d'Ising avec des interactions à portée infinie, où les constantes de couplage sont $J_{ij} = J$ pour tous les paires de spins

$$H = -J_o \sum_{i \neq j} S_i S_j - H \sum_i S_i \tag{2}$$

1. Comment doit se comporter J_o en fonction de N pour que le modèle soit bien défini dans la limite thermodynamique ?
2. Montrer que l'énergie est une fonction de l'aimantation m (et des parametres N, $J_o = J/N$ et H) seulement.
3. Écrire la fonction de partition du système.

2.1 La méthode du col

1. En utilisant une identité très utile (aussi appelée transformation de Hubbard-Stratonovich) :

   $$\exp\left(\frac{x^2}{2}\right) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} d\lambda \exp\left(-\frac{\lambda^2}{2} + x\lambda\right) \tag{3}$$

   montrer que la fonction de partition s'écrit

   $$Z = \sum_{\{s\}} \exp(-\beta H) = \sqrt{\frac{N\beta}{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} d\lambda \exp\left(-N\beta A(\lambda)\right) \tag{4}$$

   avec $A(\lambda) = \lambda^2/2 - \beta^{-1} \log\left(2\cosh(\beta\lambda + \beta h)\right)$.

2. La méthode du col permet de calculer dans la limite $N \to \infty$ les intégrales du type

   $$\int dx \exp(-Nf(x)) \sum_\alpha \exp(-Nf(x_\alpha)) \tag{5}$$

   où x_α est le minimum globale de $f(x)$ supposé être unique et comprit dans l'interval d'intégration.

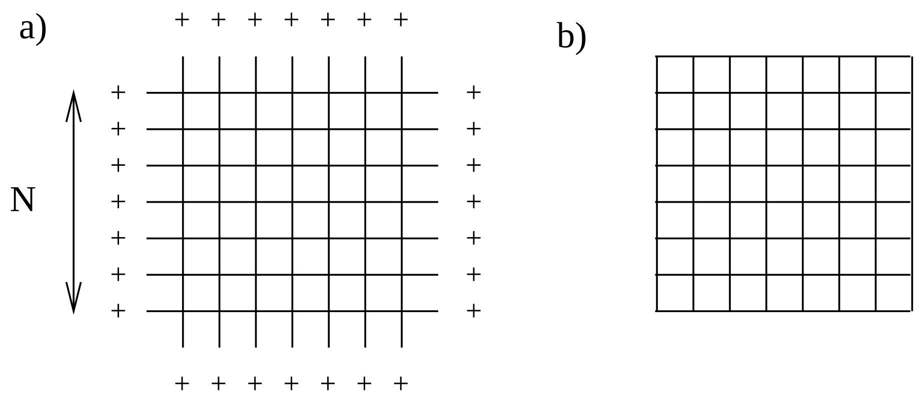
3. Trouver l'équation pour l'aimantation m. Comparer avec l'équation trouvée avec, par exemple, l'approximation moléculaire pour le modèle en dimension d.

4. Que peut-on conclure sur l'application de l'approximation de champ moyen pour le modèle avec des intéractions à portée infinie ?

5. Étudier graphiquement cette équation et montrer qu'il y a une transition de phase à une température $T_c \neq 0$.

6. Étudier les exposants critiques β, δ, α, α', γ, γ'.

Développement haute et basse température



1 La limite basse température.

On considère le modèle d'Ising de taille $N \times N$ représenté en a). Le spin de chaque site peut valoir $S_i = \pm 1$. La valeur des spins sur les sites externes est fixée à $+1$. L'énergie associé à chaque configuration vaut :

$$E = -J \sum_{<i,j>} S_i S_j$$

Où $< i, j >$ signifie “i et j voisins”.

1. Quelle est l'énergie $E_0(N)$ de l'état fondamental ?
2. Exprimer l'énergie d'un état où seul un spin est retourné. Celle où deux spins sont retournés. Associer à une configuration des spins générique un diagramme fermé dans un réseau réciproque (que l'on définira). Exprimer l'énergie de cette configuration générique en fonction du diagramme associé.
3. Exprimer alors la fonction de partition du système $Z_1(N)$ en fonction de la température β.
4. Expliquer comment cette expression permet d'obtenir un développement ¡¡ basse température ¿¿ des propriétés du système.

2 Limite haute température.

On considère dans cette partie le modèle d'Ising, avec la même expression de l'énergie, sur un réseau représenté en b).

1. Exprimer la fonction de partition du système $Z_2(N)$, pour une température β' à l'aide des fonctions de trigonométrie hyperbolique (ch, th). Pour cela, on pourra mettre $\exp(J\beta' S_i S_j)$ sous la forme $a\,(S_i S_j) + b$ avec a et b idoines.
2. Développer cette expression. Interpréter le résultat en termes de diagrammes. Remarquer que seuls des diagrammes très particuliers donnent une contribution non nulle : les caractériser.
3. Comment obtenir alors un développement haute température ?

3 Dualité et température critique

1. Montrer que les deux développements (haute et basse température) sont en fait formellement les mêmes. Que faut-il poser pour passer de l'un à l'autre ? Les deux développements correspondent-ils au même système physique ?

2. Montrer alors, que si il existe une et *une seule* transition de phase, la température critique, β_c, correspond au point fixe de l'application déterminée ci-dessus. Calculer β_c.

3. Peut-on généraliser les développements haute et basse température en dimension $d = 1$ et 3 ? Expliquer précisément de quelle manière.

Matrice de transfert

On considère un modèle d'interface $h(i)$ contraint à rester entre deux parois situées en $h = \pm N$. L'abscisse $i \in [0, L]$ et la hauteur $h \in [-N, N]$ sont discrètes. À chaque incrément de l'indice i, la hauteur peut soir rester constante ($h(i+1) = h(i)$) soit varier d'une unité ($h(i+1) = h(i) \pm 1$).

On associe une énergie $-a$ au contact de l'interface et des parois, par unité de longueur de contact, et b à chaque saut de h. On étudie la statistique des configurations de l'interface.

1. Donner l'expression du hamiltonien pour une configuration de l'interface.

2. Expliciter la matrice de transfert permettant de passer de $L-1$ à L.

3. Écrire l'équation aux valeurs propres et les conditions au bord pour la valeur propre de plus grande valeur absolue λ.

4. Justifier le fait que le vecteur propre associé à λ, $Y(h)$ est réel positif. Montrer ensuite qu'il peut s'écrire $Y(h) = \mu^h + \mu^{-h}$ avec $\mu \in [0, 1]$ ou $\mu = \exp(i\theta)$, $\theta \in [0, \pi]$. Donner deux relations entre λ et μ.

5. On se place dans la limite $N \to \infty$. Montrer que μ vérifie
$$\mu + \frac{1}{\mu} = \alpha\mu + \gamma \tag{1}$$
avec $\alpha > 0$.

6. En déduire les valeurs des paramètres a, b, et T pour lesquels il existe une solution μ réelle. En donnant une représentation graphique de $Y(h)$, interpréter la phase correspondante.

7. Dans le cas où μ est complexe, représenter $Y(h)$ et conclure.

8. Que se passe-t-il pour N fini ?

Le modèle d'Ising unidimensionel

1 La transition

Le modèle d'Ising en $d = 1$ est defini par

$$H = -J \sum_i S_i S_{i+1} \tag{1}$$

Les spins sont tels que $S_i = \pm 1$ et il y en a N dans le système. On prend des conditions aux bords libres.

1. Quels sont les deux états du modèle à température nulle ? Calculer leur énergie libre.

On veut discuter si la transition de phase à température nulle subsiste à $T > 0$.

1. Prenons une configuration avec une *parois de domaine.* Quelle est l'énergie libre de cette configuration ?
2. Étudier la différence entre l'énergie libre de la configuration avec une *parois de domaine* et de la configuration ordonnée dans la limite thermodynamique. Conclure.
3. Discuter le cas $d = 2$. Pour quelle températures eput-il hy avoir une phase ordonnée ?
4. La dimension au-dessus de laquelle une transition se produit à $T_c > 0$ s'appele la *dimention critique inférieure.* Quelle est d_{ci} pour le modèle d'Ising sur le réseau carré ?

2 Application de la matrice de tranfert

Retrouver le resultat de la section precedente pour le modèle à $d = 1$ en utilisant la matrice de transfert.

Le modèle de Potts

1 Le modèle de Potts

On considère un réseau en dimension 1 ou 2, où chaque site est un spin σ_i qui peut prendre q valeurs (ou couleurs) : $\sigma_i = 0, 1, \ldots, q-1$. On associe un hamiltonien à chaque configuration du réseau :

$$\mathcal{H} = -\sum_{\langle i,j \rangle} J\,\delta_{\sigma_i,\sigma_j}\,.$$

1. Montrer que le cas $q = 2$ se ramène au modèle d'Ising.

2. Exprimer la fonction de partition Z. En réutilisant l'astuce du développement haute température dans le modèle d'Ising, développer Z comme une somme de diagrammes sur le réseau.

2 Percolation et cas $q = 1$

On considère un réseau dont certains liens choisis au hasard sont occupés, avec une probabilité p pour chaque lien. On s'intéresse à la probabilité $P_{0,i}$ de pouvoir atteindre le site i en partant du site 0, en n'empruntant que des liens occupés.

1. Quelle est la probabilité pour que les liens occupés soient exactement ceux d'un diagramme D choisi arbitrairement ? Relier cette probabilité au coefficient du développement de Z de la première partie quand $q = 1$.

2. La question précédente montre que l'on peut espérer appliquer les résultats du modèle de Potts pour $q = 1$ à la percolation. Calculer Z quand $q = 1$. Proposer finalement une méthode permettant d'établir un lien entre modèle de Potts et percolation (indice : et si q n'était pas entier...).

3. On indroduit, pour q quelconque, la fonction de corrélation $\langle \delta_{\sigma_0,\sigma_i} \rangle$ du modèle de Potts. En décomposant la fonction de partition, Z, en un terme, Z_1, portant sur les diagrammes reliant l'origine au site i, et un second terme, Z_2, portant sur les autres diagrammes, écrire $\langle \delta_{\sigma_0,\sigma_i} \rangle$ en fonction de Z_1, Z_2 et q.

4. Relier $P_{0,i}$ à Z_1, Z_2. Montrer que la connaissance de $\langle \delta_{\sigma_0,\sigma_i} \rangle$ en fonction de q (modèle de Potts) permet de calculer $P_{0,i}$ (percolation).

5. Vérifier la relation précédente en dimension $d = 1$.

3 Champ moyen

On cherche une théorie du champ moyen pour le modèle de Potts. On prend pour paramètre d'ordre la fraction des spins valant k, x_k, avec bien sûr $\sum_{k=0}^{q-1} x_k = 1$.

1. Écrire l'énergie moyenne par site du réseau.

2. Utiliser la définition probabiliste de l'entropie pour déterminer l'énergie libre par site.

3. Le minimum de cette énergie libre représente la solution de champ moyen du problème. On cherchera les x_k sous la forme :

$$x_0 = \frac{1}{q}[1 + (q-1)s] \tag{1}$$

$$x_k = \frac{1}{q}(1-s), \quad k = 1, \ldots, q-1 \tag{2}$$

On cherchera donc à minimiser $A(s) = F(s) - F(0)$. $s = 0$ est toujours solution mais pour des basses températures, une solution $s \neq 0$ peut apparaître.

   (a) Retrouver pour $q = 2$ la solution de champ moyen du modèle d'Ising.

   (b) Pour $q > 2$, la solution passe spontanément de $s = 0$ à $s = s_c$ non nul. Expliquer par un dessin cette situation. Donner les équations qui déterminent s_c. Les résoudre (graphiquement ou analytiquement, au choix).

Méthode variationnelle

Soit un système défini par un Hamiltonien $H(\sigma)$ en équilibre thermodynamique à une température T.

1. Montrer que la fonction de partition Z vérifie

$$Z = Z_0 \left\langle \exp\left(-\beta(H(\sigma) - H_0(\sigma)\right)\right\rangle_{H_0} \tag{1}$$

   avec

$$Z_0 = \sum_\sigma \exp\left(-\beta H_0(\sigma)\right) \tag{2}$$

   la fonction de partition d'un système défini par le Hamiltonien générique H_0.

2. Écrire Z_0 en fonction de l'énergie moyenne $E_0 = \langle H_0 \rangle_{H_0} = Z_0^{-1} \sum_\sigma H_0 e^(- \beta H_0)$ et de l'entropie S_0.

3. Trouver une borne F_B pour l'énergie libre $F = -\beta^{-1} \ln Z$ en utilisant la concavité de la fonction exponentielle :

$$\langle \exp f(x) \rangle \geq \exp \langle f(x) \rangle \tag{3}$$

   valable pour toute fonction réelle $f(x)$ et pour toute distribution de probabilité.

4. Calculer F_B pour le modèle de Ising sur un réseau carré de dimension d, $H(\sigma) = -J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j - h \sum_i \sigma_i$, avec le Hamiltonien test $H_0 = \lambda \sum \sigma_i$.

5. Trouver la meilleure borne à F.

6. Comparer le résultat aux prédictions de l'approximation de champ moyen. Discuter comment améliorer l'approximation.

Renormalisation

1 Le modèle gaussien unidimensionnel

On considère un système unidimensionnel de N spins décrit par le hamiltonien

$$\mathcal{H} = -J \sum_{i=0}^{N-1} S_i S_{i+1} \tag{1}$$

où

– on impose la condition aux bords périodique $S_N = S_0$;

– on posera comme par le passé $K = \beta J = J/k_B T$;

– les S_i sont des spins *continus* pouvant prendre toutes les valeurs entre $\pm\infty$ avec un poids $\exp(-S_i^2)$; on les appelle aussi des spins *gaussiens*. Par rapport aux spins d'Ising s_i des exercices précédents, il faudra ainsi remplacer

$$\sum_{\{s_i\}} \qquad \mapsto \qquad \int_{-\infty}^{\infty} \exp\Big(-\sum_{i=0}^{N-1} S_i^2\Big) \tag{2}$$

a. Écrire l'expression de départ pour la fonction de partition canonique $Z_N(K)$ associée au hamiltonien (1).

On posera ici $F_N(K) = \log Z_N(K)$ et $f(K) = F_N(K)/N$, si bien que $f(K)$ est l'énergie libre par spin à un facteur $-\beta$ près. La notation anticipe sur le fait que pour $N \to \infty$ la fonction $f(K)$ tend vers une limite finie.

Il existe plusieurs façons de calculer $Z_N(K)$, par exemple en appliquant une transformation de Fourier aux S_i. [Ce serait un exercice à part de le faire.] On trouve alors qu'il existe une température critique T_c en-dessous de laquelle l'ensemble des intégrations sur les S_i diverge : la phase basse température "n'existe pas" dans ce modèle. Cela ne nous empêche pas d'étudier la phase haute température et les divergences qui interviennent lorsque T descend vers T_c.

Dans cet exercice on montrera comment on peut trouver, en principe, $Z_N(K)$ par renormalisation.

b. Effectuer les intégrations sur les spins à indice impair.

c. Effectuer le changement de variable $S_{2i} = bS_i'$ avec un b choisi de telle manière que les termes en $(S_i')^2$ dans l'exponentielle ont à nouveau le coefficient -1.

d. Exprimer $Z_N(K)$ en termes de $Z_{N/2}(K')$, où vous donnerez la relation reliant le couplage renormalisé K' au couplage original K. Trouver, comme dans le cours, une récurrence

$$f(K) = g(K) + \ell^{-d} f(K') \tag{3}$$

où vous exprimerez ℓ, d et $g(K)$.

e. Trouver le point fixe de la transformation de renormalisation $K'(K)$. Trouver la valeur propre λ_T ainsi que l'indice y_T défini dans le cours. Sachant que $\nu = d/y_T$, trouver la valeur de l'exposant critique ν. Rappeler la grandeur physique dont cet exposant décrit la divergence au point critique.

Renormalisation

Le modèle gaussien unidimensionnel

On considére un système unidimensionnel de N spins décrit par le hamiltonien

$$\mathcal{H} = -J \sum_{i=0}^{N-1} S_i S_{i+1} \tag{1}$$

où

– on impose la condition aux bords périodique $S_N = S_0$;

– on posera comme par le passé $K = \beta J = J/k_B T$;

– les S_i sont des spins *continus* pouvant prendre toutes les valeurs entre $\pm\infty$ avec un poids $\exp(-S_i^2)$; on les appelle aussi des spins *gaussiens.* Par rapport aux spins d'Ising s_i des exercices précédents, il faudra ainsi remplacer

$$\sum_{\{s_i\}} \quad \mapsto \quad \int_{-\infty}^{\infty} \exp\Big(- \sum_{i=0}^{N-1} S_i^2 \Big) \tag{2}$$

a. Écrire l'expression de départ pour la fonction de partition canonique $Z_N(K)$ associée au hamiltonien (1).

On posera ici $F_N(K) = \log Z_N(K)$ et $f(K) = F_N(K)/N$, si bien que $f(K)$ est l'énergie libre par spin à un facteur $-\beta$ près. La notation anticipe sur le fait que pour $N \to \infty$ la fonction $f(K)$ tend vers une limite finie.

Il existe plusieurs façons de calculer $Z_N(K)$, par exemple en appliquant une transformation de Fourier aux S_i. [Ce serait un exercice à part de le faire.] On trouve alors qu'il existe une température critique T_c en-dessous de laquelle l'ensemble des intégrations sur les S_i diverge : la phase basse température "n'existe pas" dans ce modèle. Cela ne nous empêche pas d'étudier la phase haute température et les dvergences qui interviennent lorsque T descend vers T_c.

Dans cet exercice on montrera comment on peut trouver, en principe, $Z_N(K)$ par renormalisation.

b. Effectuer les intégrations sur les spins à indice impair.

c. Effectuer le changement de variable $S_{2i} = bS'_i$ avec un b choisi de telle manière que les termes en $(S'_i)^2$ dans l'exponentielle ont à nouveau le coefficient -1.

d. Exprimer $Z_N(K)$ en termes de $Z_{N/2}(K')$, où vous donnerez la relation reliant le couplage renormalisé K' au couplage original K. Trouver, comme dans le cours, une récurrence

$$f(K) = g(K) + \ell^{-d} f(K') \tag{3}$$

où vous exprimerez ℓ, d et $g(K)$.

e. Trouver le point fixe de la transformation de renormalisation $K'(K)$. Trouver la valeur propre λ_T ainsi que l'indice y_T défini dans le cours. Sachant que $\nu = d/y_T$, trouver la valeur de l'exposant critique ν. Rappeler la grandeur physique dont cet exposant décrit la divergence au point critique.

Dynamique forcée et hysteresis

Prenons un ensemble de N spins d'Ising, $s_i = \pm 1$, avec une énergie

$$H = -\frac{1}{2}\sum_{i,j} J_{ij} s_i s_j - \sum_i h_i s_i \; . \tag{1}$$

Les intéractions J_{ij} sont completement générales. Le système est en contacte avec un bain thermique à température T.

1. Quelle propriété de symétrie ont les constantes de couplage J_{ij} ?

2. Écrire l'équation maîtresse pour la densité de probabilité $P(\vec{s}, t)$ d'avoir la configuration $\vec{s} = (s_1, \ldots, s_N)$ au temps t. Introduire $W(s_j)$, la probabilité de renverser le spin j.

3. Nous allons choisir

$$W(s_j) = \frac{1}{2\lambda}\left\{1 - s_j \tanh\left[\beta\left(\sum_{i(j)} J_{ij} s_i + h_j\right)\right]\right\} \tag{2}$$

   Le symbole $i(j)$ represent les plus proches voisins du site j. λ est une constante qui dépend de la température. Vérifier que la condition de bilan détaillé est satisfaite par ce choix.

4. Définir l'aimantation moyenne d'un site, $m_i = \langle s_i \rangle$ et trouver l'équation d'evolution temporelle de m_i.

5. On prend des intéractions invariantes par rapport aux traslations sur le réseau, c'est-à-dire qui vérifient $J_{ij} = J(\vec{r}_i - \vec{r}_j)$ et on défini $\tilde{J}(q)$ la transformée de Fourier de J_{ij}.

   Écrire l'équation d'évolution de $\tilde{m}_q(t)$.

   La composante $q = 0$ de $\tilde{m}_q(t)$ répresente l'aimantation moyenné sur le réseau $m(t) = 1/N \sum_{i=1}^{N} m_i(t)$. En étudiant l'équation d'évolution de $\tilde{m}_0(t)$, calculer la température de transition T_c en abscence de champ externe.

6. On prend maintenant un champ magnétique dependent du temps tel que

$$\tilde{h}_0(t) = \begin{cases} 0 & \text{si} \quad 0 \le t \le t_0 \\ h & \text{si} \quad t_0 \le t \le t_0 + \Delta t \\ 0 & \text{si} \quad t_0 \le t \end{cases} \tag{3}$$

   En supposant h petit, étudier la solution de l'équation linearisée en discutant les conditions de validité de la linéarisation.

7. Si le système a une aimantation $\tilde{m}_0(0) = m_0 > 0$ à l'instant initial, discuter la valuer de l'aimantation après couper le champ en $t_0 + \Delta t$. Peut-il y avoir un renversement de l'aimantation ? Dans quelles conditiones ?

8. Trouver le champ critique $h_c(\Delta t, T)$ qui determine la transition dynamique de renversement de l'aimantation. Tracer les courbes $h_c(\Delta t)$ pour différents valeurs de T/T_c.

9. On défini le temps de relaxation τ comme le temps pour que l'aimantation arrive à sa valeur d'équilibre $\pm m_0$ après couper le champ h.

10. Si on considère maintenant un champ oscillatoire

$$h(t) = h_f \sin(\omega t) \tag{4}$$

Décrire le comportement de l'aimantation $m(t) = 1/N \sum_{i=1}^{N} \langle s_i(t) \rangle$ encore dans l'approximation de champ moyen.

Pour en savoir plus, voir *Dynamic transitions and hysteresis*, B. Chakrabarti et M. Acharyya, cond-mat/9811086, Rev. Mod. Phys. **71**, 847 (1999).

Percolation sur un arbre

On considère un arbre comme celui de la figure 2 : chaque branche se divise en $k = 2$ branches à chaque niveau. Chaque site de l'arbre est occupé avec une probabilité p, et vide avec une probabilité $(1 - p)$.

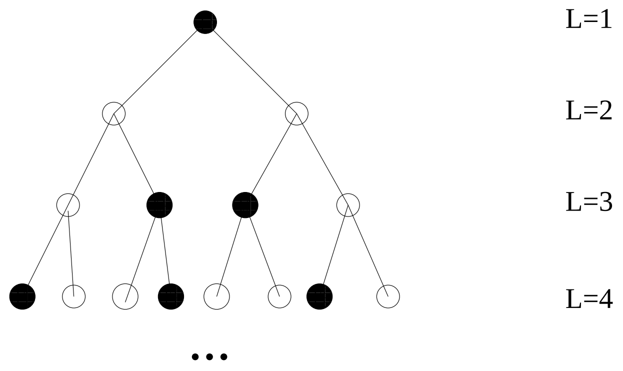


Figure 1:

1. On appelle $P_\infty(p)$ la probabilité qu'il existe un chemin infiniment long n'empruntant que des sites occupés, et partant du sommet de l'arbre. Calculer $P_\infty(p)$ en fonction de p. *Représenter le résultat avec une figure.*

2. Existe-t-il une valeur critique p_c pour p ? Quel est son *nom* et sa valeur ? Peut-on caractériser le comportement de $P_\infty(p)$ au voisinage de cette valeur critique par un exposant critique ? Dans ce cas, quel est son *nom* et sa valeur ?

3. On appele $Q(s)$ la probabilité que le sommet de l'arbre se trouve dans un amas de s sites *exactement/au moins*, autrement dit, la probabilité que le sommet soit occupé et relié à $(s - 1)$ sites. Si le site du sommet est vide on dira qu'il fait partie d'un amas de zéro site: que vaut $Q_0(p)$? Montrer que :

$$Q_s(p) = p \sum_{t=0}^{s-1} Q_t(p) Q_{s-1-t}(p) \tag{1}$$

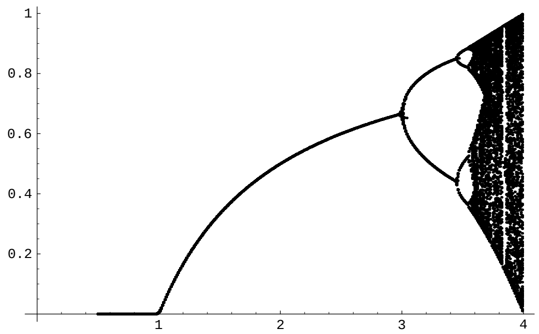
   En déduire $Q_s(p)$.

4. Calculer $Q_{\text{tot}}(p) = \sum_{s=0}^{\infty} Q_s(p)$. Relier son expression à celle de $P_\infty(p)$.

5. Calculer la taille moyenne des amas. Montrer que cette taille moyenne, $\langle s \rangle$, diverge quand $p \to p_c$.

6. Calculer le *seuil de percolation* et retrouver la relation entre $Q_{\text{tot}}(p)$ et $P_\infty(p)$ pour $k > 2$. *NB : si c'est la seule question ou le ne prend pas $k = 2$, mieux vaut le préciser clairement.*

7. Donner un exemple physique de percolation.



Doublement de Période et Renormalisation

On tudie un modle d'volution de population dans un milieu offrant des ressources (alimentaires, par exemple) limites. On appelle a la fcondit intrinsque moyenne par individu : tant que la population reste peu importante, les ressources ne manquent pas, et la population est multiplie par a chaque gnration. Pour simplifier, on suppose que les individus se reproduisent de faon synchrone, puis meurent : la population vaut x_n la n-ime gnration (temps discret). On choisit les units de x de telle sorte que $x = 1$ corresponde la densit maximale permettant aux individus de se reproduire. On propose la loi d'volution :

$$x_{n+1} = f_a(x_n) \qquad \text{o} \quad f_a(x) = ax(1-x), \quad 0 < x < 1, \quad 0 < a < 4. \tag{1}$$

L'application f_a est appele application logistique.

Lorsque l'on calcule numriquement la population x_n pour de grands temps n et pour diffrentes valeurs de la population initiale x_0, et du paramtre a, on obtient les points (a, x_n) du diagramme ci-dessous. Pour $n \to \infty$ et $a < a_0 \approx 1$ la population x_n s'teint ; pour $a_0 < a < a_1 \approx 3$ elle converge vers un limite non nulle $r(a)$; pour $a_1 < a < a_2 \approx 3.4$ la population x_n oscille asymptotiquement entre deux valeurs $p(a)$ et $q(a)$ (on parle de cycle limite de priode 2). On observe ensuite une srie de doublement de priode du cycle limite : il existe une suite croissante de valeurs a_n, telles que pour $a_n < a < a_{n+1}$, la population atteint asymptotiquement un cycle limite de priode 2^n. Les premiers doublements de priode sont visibles sur la figure. La suite a_n converge vers une valeur limite $a_\infty = 3,5699456\ldots$, et au-del ($a > a_\infty$), le comportement de x_n devient apériodique et chaotique, sauf sur certains intervalles où il apparat de nouveau des comportements périodiques (bandes claires verticales).

Ces caractristiques (doublements de priode successifs, puis comportement apriodique) se retrouvent dans de nombreux systmes physiques en transition vers le chaos, par exemple en turbulence hydrodynamique (quel est alors l'analogue du paramtre a ?) Dans ce TD, on tudie analytiquement le modle de population. Dans la premire partie, on s'intresse aux premiers doublements de priodes ; dans la seconde, on se place au voisinage (gauche) du point a_∞.

1 Première cascade sous-harmonique

1. tudier les points fixes de l'application logistique, ainsi que leur stabilit. En dduire a_0 et a_1, et $r(a)$. Retrouver le comportement observ numriquement pour $a < a_1$.

2. Pour $a > a_1$, tudier les points fixes de l'application $f_a \circ f_a$ (pensez aux racines videntes pour factoriser des polynmes). En dduire $p(a)$ et $q(a)$. tudier la stabilit de ces points fixes (il y a une mthode — presque — sans calculs) ; en dduire a_2, et comparer la valeur numrique.

2 Renormalisation approchée

Numriquement, la convergence des a_n semble géométrique :

$$\delta_n = \frac{a_n - a_{n-1}}{a_{n+1} - a_n} \quad \longrightarrow_{n\to\infty} \quad \delta = 4,6692016\ldots \tag{2}$$

L'auto-similarité du diagramme des bifurcations, ainsi que la forme de la fonction $f_a \circ f_a$, incitent à tudier la suite a_n par renormalisation. L'ide est la suivante : on recherche une transformation d'chelle $\tilde{x} = \lambda(x - r(a))$ et un a^* fonction de a, tels que l'itration de $f_a \circ f_a$ sur x quivale l'itration de f_{a^*} sur $\tilde{x}$.

1. Reprsenter la fonction $f_a \circ f_a$ quand $a_1 < a < a_2$.
2. Montrer que λ et a^* doivent satisfaire : $\lambda(f_a \circ f_a(x) - r(a)) = f_{a^*}(\lambda(x - r(a)))$.
3. En ralit, on ne peut pas satisfaire exactement l'quation prcdente, c'est pourquoi on parle de renormalisation approche.
   (a) Montrer que l'quation est cependant toujours vrifie en $x = r(a)$.
   (b) On impose d'autre part que l'quation soit vrifie en $x = q(a)$. Pourquoi ? En dduire λ en fonction de a et a^*.
4. Il manque une quation pour dterminer a^*, et et il y a plusieurs manires de s'y prendre (d'o diffrentes approximations de renormalisation). Une mthode simple, mais pas forcment trs prcise, consiste imposer que la renormalisation soit exacte l'ordre linaire au voisinage de $x = r(a)$.
   (a) Calculer alors a^*. Noter que le calcul de $(f_a \circ f_a)'(r(a))$ peut se faire en une ligne.
   (b) En dduire une relation de rcurrence approche pour a_n. Que valent les premiers termes, a_1, a_2, la limite a_∞, et l'exposant δ ?
5. Proposer le principe d'une meilleure approximation de renormalisation.

L'équation de Langevin et l'équation de Fokker-Planck

1 Le modèle de Langevin du mouvement brownien

Le mouvement brownien est le mouvement complexe, de type erratique, effectué par une particule lourde immergée dans un fluide, subissant des collisions avec les molécules de ce fluide. Toute quantité physique observée expérimentalement est accompagnée de fluctuations dues à l'agitation thermique microscopique dans le fluide. Nous allons travailler, par souci de simplicité, en dimension $d = 1$. La généralisation au cas d dimensionnel est immédiate.

1. On considère une particule sphérique de rayon a, de masse m, se déplaçant à la vitesse v dans un fluide à température T. Si la viscosité du fluide est η, quelles sont les forces exercées par le fluide sur la particule ? Écrire l'équation d'évolution de la particule (équation de Langevin).

2. Sachant que la vitesse de la particule parvient à l'équilibre pour des temps longs, donner la distribution de probabilité de la vitesse et l'énergie cinétique moyenne de la particule.

3. On va déduire, d'une façon simple, la relation d'Einstein qui relie la constante de diffusion et les paramètres $k_B T, \eta, a$. Pour ce faire, on va résoudre l'équation de Langevin puis calculer le déplacement quadratique moyen de la particule par rapport à la position initiale $\langle (x(t) - x(0))^2 \rangle$ en s'aidant des indications suivantes :

   (a) Multiplier l'équation de Langevin par $x(t)$ et moyenner sur la force aléatoire. Quels sont les termes non nuls ? Pourquoi ?

   (b) Donner une expression pour $d\langle x^2 \rangle / dt$. La constante temporelle $\tau = \gamma^{-1}$ valant typiquement $\tau \sim 10^{-8} s$, quelle est la valeur asymptotique de $d\langle x^2 \rangle / dt$?

   (c) Finalement, trouver la constante de diffusion D définie par

   $$\langle (x(t) - x(0))^2 \rangle = 2Dt \tag{1}$$

   La relation entre D et les paramètres $k_B T, \eta, a$ s'appelle la relation d'Einstein.

   (d) Quelle a été l'hypothèse qui a permis de déduire la relation d'Einstein ?

4. On ajoute une force externe dérivant d'un potentiel, qui ne dépend que de la position de la particule : $F(x(t))$. On se place dans la limite où le terme d'inertie est négligeable. L'équation de Langevin devient:

   $$\begin{aligned} m\gamma \dot{x}(t) &= F(x(t)) + \xi(t) \\ \langle \xi(t) \xi(t') \rangle &= 2 k_B T m \gamma \delta(t - t') \end{aligned} \tag{2}$$

   où nous avons supposé que le bruit $\xi(t)$ est blanc.

   (a) Pourquoi choisit-on un bruit blanc ?

   (b) Expliquer la normalisation du bruit.

   (c) Trouver le changement de variables qui permet de réécrire l'équation (2) sous la forme

   $$\begin{aligned} \dot{u}(\tau) &= \beta F(u(\tau)) + \chi(\tau) \\ \langle \chi(\tau) \chi(\tau') \rangle &= 2\delta(\tau - \tau') \, . \end{aligned} \tag{3}$$

2 Les processus de Markov

On appelle processus stochastique un processus décrit par une équation d'évolution comprenant des termes « aléatoires ». Un processus stochastique est dit de Markov si le système étudié ne possède pas de mémoire. Pour des instants $t_0 < t_1 < \ldots < t_n$ on note $w(x_n, t_n|x_0, t_0, \ldots, x_{n-1}, t_{n-1})$ la probabilité conditionnelle d'avoir x_n au temps t_n sachant qu'on a eu x_0 au temps t_0, …, x_{n-1} au temps t_{n-1}.

1. Donner une relation entre $w(x_n, t_n|x_0, t_0, \ldots, x_{n-1}, t_{n-1})$ et $w(x_n, t_n|x_{n-1}, t_{n-1})$.

2. Supposez maintenant qu'à l'instant initial le système soit caractérisé par une fonction de distribution $p(x_0, t_0)$. On cherche à connaître la fonction de distribution $p(x_n, t_n)$ à un instant ultérieur t_n. Exprimer $p(x_n, t_n)$ en fonction de la distribution initiale $p(x_0, t_0)$ et de w. En exprimant de la même façon $p(x_{n-1}, t_{n-1})$, traduisez l'absence de mémoire du système par une équation sur les w.

3. Relier les distributions $p(x_n, t_n)$ et $p(x_{n-1}, t_{n-1})$ et comparer cette équation à l'équation maîtresse de la marche au hasard de biais (à chaque pas de temps, probabilité p d'aller à droite et $1 - p$ à gauche).

4. On va illustrer le lien entre l'équation de Langevin et les processus stochastiques. Reprenons l'équation de Langevin pour une particule en présence d'une force externe $F(x)$. Considérons, par souci de simplicité, la limite où l'inertie est négligeable.

   On s'intéresse à l'évolution au cours du temps de la distribution spatiale moyenne de la particule : $P(x, t)$. Cette quantité est définie comme la densité de probabilité pour que, à l'instant t, la particule se trouve en x.

   (a) Si la fonction d'auto-corrélation du bruit est une fonction de Dirac, que peut-on dire sur le caractère de la variable stochastique x ?

   (b) En déduire l'équation maîtresse pour $P(x, t)$, et expliciter la probabilité de transition $w(x, t|x', t')$.

3 L'équation de Fokker-Planck

Nous allons déduire des résultats obtenus en 2 une équation différentielle pour $P(x, t)$ appelée équation de Fokker-Planck.

1. Écrire l'équation de Langevin (2) à temps discret, pour un pas temporel ϵ. On pourra exprimer la fonction delta de Dirac à l'aide de fonctions en marche (fonctions de Heaviside).

2. Estimer l'ordre de grandeur du bruit $\xi(t)$ en fonction de ϵ.

3. Effectuer un développement en ϵ de $w(x, t + \epsilon|x', t)$ pour un intervalle de temps infinitésimal.

4. En introduisant ce développement dans l'équation déduite en 4b, obtenir une équation différentielle pour $P(x, t)$. Quel est le rapport entre cette équation et la limite continue de l'équation maîtresse pour le marcheur au hasard ?

Equation de Kramers et états metastables

1 Équation de Fokker-Planck et de Schrödinger

On considère un processus markovien continu et homogène décrit par l'équation de Fokker-Planck

$$\partial_t P = -\partial_x \left(A(x)P\right) + D\partial^2_{xx}P \tag{1}$$

(par souci de simplicité on prend $D = C^{\text{te}}$).

1. Justifier les mots "continu" et "homogène". On supposera qu'un état d'équilibre existe pour ce processus. Exprimer la distribution d'équilibre.

2. Quel est l'analogue dans ce cas de la transformation qui symétrise la matrice W dans une équation maî tresse ?

3. En déduire l'équivalence entre l'équation de Fokker-Planck (1) et l'équation de Schrödinger pour un degré de liberté. Exprimer le potentiel de Schrödinger en fonction de $A(x)$ et de D. Que peut-on dire des éléments propres associés à (1) ?

2 Processus d'Ornstein-Uhlenbeck

1. On considère la solution de (1) : $P(x_0 + \Delta x, t_0 + \Delta t | x_0, t_0)$ sur un intervalle de temps très petit Δt. Exprimer A et D en fonction des moments de Δx.

2. On considère l'évolution d'une particule brownienne de masse m sur des échelles de temps grandes devant les temps de collision, pour pouvoir supposer que sa vitesse est un processus markovien continu (le fluide perd sa mémoire sur un temps caractéristique de l'ordre du temps de collision, en première approximation).

   En supposant que la particule subit une force systématique de freinage égale à $-m\gamma v$, calculer le coefficient $A(v)$ de l'équation de Fokker-Planck pour $P(v,t)$.

3. Que peut-on dire de $D(v)$ quand $v \to 0$? Comment est le terme suivant du développement ? On considérera dans la suite que v est toujours suffisamment faible pour que $D(v) \approx D(0) \equiv D$. Exprimer D en fonction de m, γ et $k_B T$. Pourquoi cette relation est-elle différente de la relation d'Einstein $D = k_B T / m\gamma$?

4. L'équation de Fokker-Planck à laquelle on parvient correspond au *processus d'Ornstein-Uhlenbeck*.

   On cherche à calculer $P(v,t|v_0,0)$. Calculer sa TF (en v) sous la forme $\exp(-a(t)k^2 + b(t)k)$ où k est la variable conjuguée de v (pourquoi n'y a-t-il pas de coefficient devant l'exponentielle ?). En déduire $\langle v(t)v(0)\rangle$ à l'équilibre.

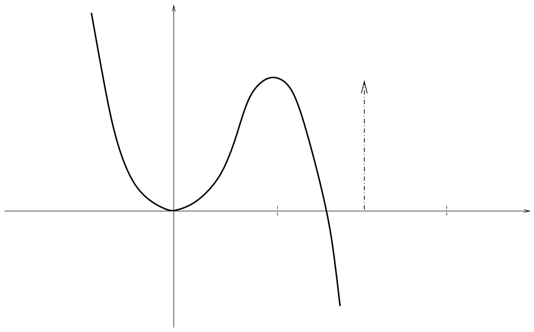
   Rq : on pourrait aussi résoudre $P(v,t|v_0,0)$ par la méthode de l'exercice 1. On peut aussi faire appel à la méthode de la caractéristique pour les EDP du premier ordre (cf. par exemple Whitham, *Linear and Nonlinear waves*, Wiley).

5. Montrer que le processus d'Ornstein-Uhlenbeck peut décrire aussi la position d'une particule brownienne confinée dans un potentiel harmonique. Quelle approximation fait-on dans ce cas ?

3 Temps moyen de résidence dans un potentiel métastable

On considère une particule brownienne de masse m dans un potentiel métastable $V(x)$ de hauteur V_{max} (cf. figure **??**), i.e. dont la dynamique est décrite par l'équation de Fokker-Planck

$$\partial_t P(x,t) = \frac{1}{m\gamma}\left(\partial_x (V'(x)P) + k_B T \partial^2_{xx} P\right) \tag{2}$$



On injecte en permanence des particules en $x = 0$ et on retire toutes celles qui parviennent en un point x_1 loin de la barrière, ce qui permet l'établissement d'un régime permanent dans le système, caractérisé par un courant de particules de la gauche vers la droite.

1. Calculer la distribution stationnaire $P_{st}(x)$ atteinte dans le système.

2. On définit
$$\frac{1}{\tau} = \frac{\text{nombre de particules s'échappant par u. de temps}}{\text{nombre de particules présentes dans } [0, x_1]}$$
Calculer τ.

3. Que vaut τ dans la limite $k_B T \ll V_{max}$? Montrer que τ est dans ce cas le temps moyen de résidence dans le puits métastable.

Marche au hasard

1 Marche au hasard de biais

On considère un marcheur sur un réseau unidimensionnel qui, à chaque pas de temps, passe sur le site de droite avec la probabilité p ou sur celui de gauche avec la probabilité q. ($p + q = 1$, il ne peut pas rester sur place).

1. Calculer (directement) la probabilité $P_n(i)$ qu'il se trouve sur le site numéro i après n pas de temps, étant parti du site 0.

2. Nous allons retrouver ce résultat à l'aide des fonctions génératrices :

   (a) Donner une relations de récurrence entre $P_{n+1}(i)$ et $P_n(j)$.

   (b) Soit $G_n(\lambda) = \sum \lambda^i P_n(i)$ la fonction génératrice ; calculer $G_n(\lambda)$, et en deduire simplement $P_n(i)$.

3. À l'aide de la formule de Stirling : $N! \sim N^N \exp(-N)\sqrt{2\pi N}$, donner la limite $\rho(x,t)$ de la loi $P_n(i)$ pour une description continue et donner l'expression du coefficient de diffusion. Interpréter la loi d'échelle entre $\mathbf{x}$ et t à partir de la version continue de l'èquation maîtresse.

2 Présence d'un bord absorbant

On suppose désormais que le marcheur disparaît dès qu'il franchit le site -1. On se place dans le cas $p = q = 1/2$. Montrer alors que: $P_n(i) = P_n^0(i) - P_n^0(i+2)$ pour $i \geq 0$, où P_n^0 correspond à une marche sans bord absorbant.

3 Particules annihilatrices

Nous considérons un modèle discret puis continu de particules ayant la faculté de s'annihiler mutuellement. On va montrer que l'on peut relier l'évolution de ce modèle au problème des marches au hasard en présence d'un bord absorbant.

1. Toujours sur un réseau unidimensionnel régulier, on place à l'instant $t = 0$ des particules ayant la vitesse $+v$ ou bien $-v$ sur chaque site (tous les sites sont occupés). À l'étape suivante ($t = 1$), les particules de vitesse $+v$ sautent sur le site de droite, celles de vitesse $-v$ sur celui de gauche. Si deux particules se trouvent sur le même site, elle s'annihilent.

   (a) Choisissez un site i occupé par une particule $+v$ dans la configuration initiale. On va s'attacher à déterminer le destin de cette particule : énumerez les sites qui déterminent ce destin.

   (b) Associer à l'ensemble des occupants de ces sites une marche au hasard et relier l'annihilation de cette particule au passage de la marche au hasard en -1. Donner la relation entre les instants d'annihilation et de passage en -1.

(c) Écrire la probabilité de désintégration de cette particule au temps t.

(d) Qu'en est-t-il pour une particule avec une vitesse $-v$?

2. Ces mêmes particules sont maintenant disposées sur un axe unidimensionnel (continu) avec une densité ρ_0. On essaie de déterminer l'évolution de la densité $\rho(t)$ au cours du temps.

   (a) Écrire directement une équation d'évolution pour $\rho(t)$. Quelle hypothèse a-t-on faite implicitement ? Donner le comportement de $\rho(t)$ aux temps longs.

   (b) On appelle $Q_n(L)$ la probabilité qu'il y ait n particules dans un intervalle de longueur L. Calculer $Q_n(L)$.

   (c) On va maintenant essayer de retrouver rigoureusement l'équation écrite en 2a. Exprimer la probabilité de survie au temps t pour une particule donnée, en utilisant la question précédente et les résultats du modèle continu.

   (d) Donner le comportement aux temps longs de cette probabilité de survie. Comparer avec 1 et 2a et commenter.

Marche au hasard et théorie des champs gaussienne

1 Fonction génératrice de la marche au hasard

On considère un marcheur sur un réseau à deux dimensions. Ceci est un cas particulier du marcheur sur un réseau à d dimensions et on gardera toujours en tête ce probleme plus general à d dimensions. On prendra la maille du réseau et l'intervalle de temps égaux à l'unité.

Il démarre à l'instant $t = 0$ de l'origine.

1. Soit $P(\mathbf{x}, t)$ la probabilite qu'il se trouve en $\mathbf{x}$ à l'instant t. Donner une formule récurrente pour P.
2. Dans la limite continue, établir le type d'équation différentielle que vérifie P.
3. Résoudre l'équation discrète dans l'espace de Fourier spatial et en déduire $P(\mathbf{x}, t)$.
4. Calculer le temps moyen total passé en un point au cours d'une marche. Commenter le résultat en dimension deux.
5. Définir et calculer $G(\mathbf{x}, \lambda)$, la fonction génératrice de P.

2 Théorie des champs gaussienne

Dans le but d'étudier la transition ferromagnétique-paramagnétique dans certains matériaux, on peut introduire le modèle simple suivant pour le champ d'aimantation : les valeurs du champ sont spécifiées sur les sites $\mathbf{x}_i$ d'un réseau cubique de dimension d et la configuration $\{\phi(\mathbf{x}_1), \ldots\}$ du champ possède une énergie :

$$H(\phi) = \frac{\mu}{2} \sum_i \phi(\mathbf{x}_i)^2 - \frac{g}{2} \sum_{[\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j]} \phi(\mathbf{x}_i)\phi(\mathbf{x}_j) \quad (1)$$

où $[\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j]$ désigne une sommation sur des sites voisins uniquement.

On se place en fait dans le cadre un peu plus général où l'on peut écrire l'énergie sous la forme :

$$H(\phi) = \frac{1}{2} \sum_{i,j} \phi(\mathbf{x}_i) M_{ij} \phi(\mathbf{x}_j) \quad (2)$$

M_{ij} étant une matrice symétrique définie positive, dont les éléments non nuls ne sont pas tous forcément entre plus proches voisins.

1. Expliquer la forme proposée pour le premier hamiltonien.
2. On introduit la fonction de corrélation du champ entre deux sites $\mathbf{x}_i$ et $\mathbf{x}_j$:

$$G_{ij} \equiv \langle \phi(\mathbf{x}_i)\phi(\mathbf{x}_j) \rangle \quad (3)$$

   (a) Pourquoi introduit-on cet objet ?

   (b) Calculer, pour un site i_0 donné :

$$\frac{\partial}{\partial \phi(\mathbf{x}_{i_0})} \exp\left(-\beta H(\phi)\right) \quad (4)$$

(c) Calculer

$$\sum_j G_{ij} M_{jk} \tag{5}$$

et en déduire une expression de la fonction de corrélation.

3. On revient maintenant à l'hamiltonien particulier donné par l'équation (1).

   (a) Que vaut la matrice M — définie par l'équation (2) — pour ce modèle ? On sera amené à introduire un opérateur de diffusion vers les voisins D.

   (b) Relier l'opérateur D à l'opérateur laplacien sur le réseau discret.

   (c) En déduire l'expression de la fonction de corrélation du champ ϕ entre deux sites $\langle \phi(\mathbf{x}_i)\phi(\mathbf{x}_j)\rangle$ pour notre modèle de ferromagnétique.

   (d) Comparer aux résultats obtenus dans la première partie, et identifier les paramètres du modèle à ceux de la marche aléatoire.

3 Développement perturbatif en le couplage g

On se place dans la limite de couplage faible entre voisins pour le modèle de ferromagnétique. Notre but est d'expliquer la similitude des résultats des deux premières parties.

1. Écrire un développement perturbatif en puissances de g (à μ constant) de la fonction de corrélation du modèle (1).

2. Expliquer alors l'identité des résultats obtenus dans les parties 1 et 2.

4 Intégrale de chemin pour une marche libre

On rappelle la loi $\rho(\mathbf{x}, t)$ pour une marche aléatoire continue issue de l'origine au temps initial en dimension d :

$$\rho(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{(2\pi D t)^{d/2}} \exp\left(-\frac{x^2}{2Dt}\right) \tag{6}$$

1. Donner l'expression de la probabilité conditionnelle $\rho(\mathbf{x}_2, t_2|\mathbf{x}_1, t_1)$ de se trouver en $\mathbf{x}_2$ au temps t_2 sachant que l'on était en $\mathbf{x}_1$ au temps t_1, $t_2 \geq t_1$.

2. En choisissant un temps intermédiaire $t' \in [t_1, t_2]$ exprimer le caractère markovien de la marche aléatoire.

3. En itérant cette relation pour des temps intermédiaires $t_0 = 0 \leq t_1 \leq t_2 \leq \ldots \leq t_n \leq t_{n+1} = t$ donner une nouvelle expression pour $\rho(\mathbf{x}, t)$.

4. Dans la limite $n \to \infty$ interpréter cette expression comme une intégrale sur tous les chemins partant de l'origine au temps initial et arrivant en $\mathbf{x}$ au temps t :

$$\rho(\mathbf{x}, t) = \int_{\mathbf{x}(0)=\mathbf{0}}^{\mathbf{x}(t)=\mathbf{x}} d\left[\mathbf{x}(\tau)\right] \, \ldots \tag{7}$$

5 Généralisation à une marche dans un potentiel

Pour tenter de généraliser l'expression précédente on introduit :

$$\rho(\mathbf{x},t) = \int_{\mathbf{x}(0)=\mathbf{0}}^{\mathbf{x}(t)=\mathbf{x}} d\left[\mathbf{x}(\tau)\right] \ \exp\left(-\frac{1}{2}\int_0^t d\tau \left(\frac{\partial \mathbf{x}(\tau)}{\partial \tau}\right)^2 - \int_0^t d\tau\, V(\mathbf{x}(\tau))\right) \tag{8}$$

1. Quelle équation différentielle satisfait $\rho(\mathbf{x},t)$ lorsque $V=0$?
2. En revenant à la définition discrète de l'intégrale de chemin, déterminer l'équation différentielle satisfaite par $\rho(\mathbf{x},t)$ dans le cas général, et l'identifier à une équation bien connue.
3. Caractériser la forme asymptotique de $\rho(\mathbf{x},t)$ aux temps longs.

On aura besoin dans la suite de :

$$\int d^n X \exp\left(-\frac{1}{2}\,{}^t X A X\right) = \left(\det\left(\frac{A}{2\pi}\right)\right)^{-1/2} \tag{9}$$

$$\int d^n X \exp\left(-\frac{1}{2}\,{}^t X A X + {}^t\alpha X\right) = \left(\det\left(\frac{A}{2\pi}\right)\right)^{-1/2} \exp\left(\frac{1}{2}\,{}^t\alpha A^{-1}\alpha\right) \tag{10}$$

où A est une matrice réelle définie positive et α un vecteur quelconque.

$$H(\phi) = \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{x},\mathbf{x}'} \phi(\mathbf{x})\left(\mu\delta_{\mathbf{x},\mathbf{x}'} - J_{\mathbf{x},\mathbf{x}'}\right)\phi(\mathbf{x}') \tag{11}$$

avec $J_{\mathbf{x},\mathbf{x}'} = g/4$ si $\mathbf{x}$ et $\mathbf{x}'$ sont voisins, nul sinon.

1. Donner l'expression de la fonction de partition $Z(\beta)$.
2. Ramener son calcul à celui d'un déterminant grâce à l'éq. (9).
3. Dans quelle base le déterminant se calcule-t-il simplement ?

On définit une fonction génératrice :

$$Z(\alpha,\beta) = \int \left(\prod_{\text{site } \mathbf{x}} d\left[\phi(\mathbf{x})\right]\right) \ \exp\left(-\beta H(\phi) + \sum_{\text{site } \mathbf{x}} \alpha(\mathbf{x})\phi(\mathbf{x})\right) \tag{12}$$

Exprimer $C(\mathbf{x},\mathbf{x}')$ en fonction de $Z(\alpha,\beta)$.

1. Calculer $Z(\alpha,\beta)$ à l'aide de l'éq. (10).
2. En déduire la fonction de corrélation dans l'espace de Fourier puis dans l'espace réel et l'indentifier à la fonction génératrice $G(\mathbf{x},\lambda)$ de la marche au hasard.

Coagulation

On étudie la cinétique d'une réaction chimique de coagulation $A + A \to A$. Pour simplifier le problème, on se place sur un réseau spatial unidimensionnel de pas Δx, chaque site pouvant être soit occupé par une particule, soit vide. Le temps est pris continu ; il y a deux échelles de temps : le temps caractéristique de diffusion τ_d et le temps de réaction τ_r.

1. À quelle théorie connue se ramène-t-on quand $\tau_d \ll \tau_r$?

2. On se place dèsormais dans l'autre limite $\tau_d \gg \tau_r$. À quelle théorie connue se ramène-t-on quand on effectue l'approximation du champ moyen ? En déduire la forme asymptotique de la concentration aux temps longs.

3. On se place dorénavant dans la situation non triviale $\tau_d \gg \tau_r$. On définit $E_n(t)$ la probabilité qu'un segment de n sites choisi au hasard de la configuration au temps t soit vide.

   (a) Relier la concentration $c(t)$ à $E_1(t)$.

   (b) Donner, en fonction des E_n, la probabilité que, pour un segment de $n+1$ sites choisi au hasard, seul le plus à droite soit occupé.

4. Soit $p_n(t)$ la probabilité que le plus proche voisin droit d'une particule choisie au hasard soit n sites plus loin :

   (a) Quelle est la normalisation de p ?

   (b) Relier, dans une configuration donnée, $p_n(t)$ et $c(t)$.

   (c) Relier enfin p_n aux E_j, en prêtant attention au cas $n = 1$.

5. Donner la limite continue de ce modèle, en considérant $E(x,t)$ comme une fonction et $p(x,t)$ comme une densité de probabilité.

6. Nous allons prendre en compte la diffusion des particules : elles peuvent sauter d'un site vers le site voisin de droite avec un taux $D/(\Delta x)^2$ ou vers le site voisin de gauche avec le même taux.

   Écrire alors l'équation d'évolution des E_n. A-t-on pris en compte la possibilité de coagulation ?

7. Nous allons chercher l'évolution asymptotique (aux temps longs) de notre modèle continu. À l'instant t, on considère une unité de longueur de l'échantillon, et on relève toutes les distances x entre particules voisines. On appelle $\rho(x,t)$ la densité de ces distances x.

   (a) Relier $c(t)$ puis $p(x,t)$ à $\rho(x,t)$.

   (b) Montrer que $\rho(x,t)$ vérifie une équation de Fokker-Planck pour $x > 0$ et que la coagulation se traduit par une condition de bord absorbant.

   (c) On admet que la fonction de Green pour $\rho(x,t)$ est donnée par :

   $$G(x,x',t) = \frac{1}{\sqrt{8\pi D t}} \left(\exp\left(-\frac{(x-x')^2}{8Dt}\right) - \exp\left(-\frac{(x+x')^2}{8Dt}\right)\right) \tag{1}$$

   Donner alors la forme asymptotique aux temps longs de $\rho(x,t)$.

(d) En déduire alors la forme asymptotique de $c(t)$ aux temps longs, et comparer avec les résultats du champ moyen.

(e) Calculer la distribution de l'espacement $p(x,t)$ et commenter.

8. On considère maintenant que de nouvelles particules peuvent apparaître par génération spontanée avec un taux $R\,dx$ par unité de temps.

   (a) Comment est modifiée l'équation d'évolution de $E(x,t)$?

   (b) Donner la loi d'échelle entre la concentration asymptotique aux temps longs et le taux R.

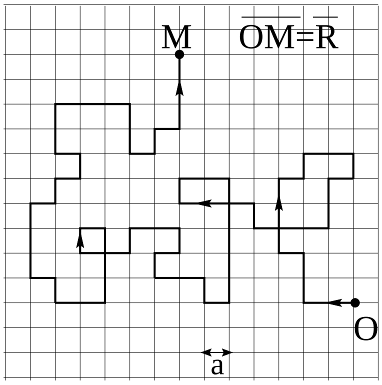


Figure 1: Marche aléatoire sur réseau.

Les polymères

1 Conformation statique d'un polymère flexible

1.1 Chaîne neutre sans interaction de volume exclu: le polymère Gaussien.

La modélisation la plus simple d'un polymère flexible consiste à le remplacer par une marche aléatoire sur un réseau (cf. figure 1). Un polymère de N monomères, séparés par une distance a, devient une marche aléatoire de N pas, sur un réseau de maille a. On considère qu'une des extrémités du polymère est fixée à l'origine O. Pour un réseau carré en dimension d, le nombre de directions possibles à chaque pas est $z = 2d$. Cette modélisation très simple décrit quantitativement le comportement d'un polymère neutre comme le caoutchouc.

1. L'extrémité libre du polymère forme, avec l'origine O, un vecteur $\vec{R} = \sum_i^N \vec{a}_i$. Calculer $\langle \vec{R} \rangle$ et $R_0 = \sqrt{\langle \vec{R}^2 \rangle}$.
2. On appelle $p_N(\vec{R})$ la loi de $\vec{R}$ et $\Omega_N(\vec{R})$ le nombre de marches aléatoires distinctes allant de O à $\vec{R}$ en N pas.
   (a) Exprimer $p_N(\vec{R})$ en fonction de $\Omega_N(\vec{R})$? Préciser sa normalisation.
   (b) Que devient p_N lorsque $N \gg 1$? NB: En chimie $N \sim 10^5$ et en biologie $N \sim 10^9$.
   (c) Quelle est la probabilité d'avoir un polymère cyclique?
3. Le polymère est un ressort entropique.
   (a) Calculer l'entropie $S(\vec{R}) = k_B \ln \Omega_N(\vec{R})$ et l'énergie libre $F(\vec{R}) = U(\vec{R}) - TS(\vec{R})$ du polymère Gaussien.
   (b) On applique une force $\vec{f}$ aux deux extrémités du polymère. Quelle est l'élongation moyenne du polymère $|\langle \vec{R} \rangle|$?
   (c) Quelle est la limite de validité de cette formule?
   (d) Que se passe-t-il lorsqu'on chauffe du caoutchouc?
   (e) *Retrouver $|\langle \vec{R} \rangle|$ par des arguments d'échelle.*

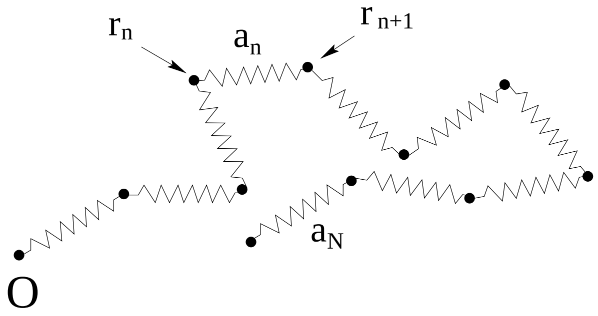


Figure 2: Modèle de Rouse. Le polymère est une chaîne de ressorts entropiques.

1.2 Chaîne neutre avec interactions de volume exclu: le modèle de Flory.

Un premier pas pour obtenir une description plus réaliste des polymères est de prendre en compte la répulsion stérique: deux monomères ne peuvent se trouver au même endroit. Cela change les propriétés statistiques de la chaîne: $\langle R^2 \rangle \sim N^{2\nu}$. En suivant le modèle de Flory nous allons calculer ν. On considère une chaîne de rayon R et de "concentration interne" en monomères $c_{int} \approx \frac{N}{R^d}$. On approxime l'énergie d'interaction répulsive entre le n^{eme} et le m^{eme} monomère du polymère, situés en $\vec{r}_n$ et $\vec{r}_m$ par: $v(\vec{r}_n - \vec{r}_m) = v_0 k_B T \delta(\vec{r}_n - \vec{r}_m)$, où v_0 est le volume exclu.

1. Que vaut l'énergie d'interaction totale: F_{rep}
2. Donner F_{rep} en fonction de la densité locale en monomères $c(r) = \sum_n \delta(\vec{r} - \vec{r}_n)$
3. Trouver le rayon d'équilibre du polymère R_F en minimisant son énergie libre.

1.3 Chaîne chargée sans interaction de volume exclu.

On considère un polymère gaussien dont chaque monomère porte une charge e.

1. Montrer que le terme d'interaction coulombienne est: $F_{Coul} \sim \frac{(Ne)^2}{4\pi\epsilon_0 R}$.
2. Calculer le rayon d'équilibre R_{eq}. Le comparer à R_0.
3. Que se passe-t-il lorsque les charges d'un polymère initialement neutre se dissocient (lors de l'arrivée d'eau par exemple)
4. Expliquer le principe de fonctionnement des couches culottes.

2 Dynamique d'un polymère flexible en solution.

2.1 Le modèle de Rouse

Comme on l'a vu en 1.1, un polymère flexible peut être représenté comme une chaîne de billes reliées entre elles par des ressorts. Physiquement il faut imaginer que chaque ressort est une sous-chaîne comportant un nombre de monomères suffisamment grand pour obéir à la statistique gaussienne. Il est naturel de modéliser la dynamique d'un polymère par le mouvement brownien d'une telle chaîne. Les positions des billes sont repérées par les vecteurs: $\vec{r}_0(t), \vec{r}_1(t), \ldots, \vec{r}_N(t)$ et on appelle $a_1, a_2, \ldots, a_N$ les longueurs des sous-chaînes (voir figure 2).

1. Ecrire l'énergie élastique $F_{n,n+1}$ de la sous-chaîne a_n par analogie avec le résultat du 1.1.3 . Quelle est la constante de raideur du ressort? On appellera a la taille moyenne d'une sous-chaîne.
2. En déduire la force φ_n exercée sur une bille par ses deux voisines.
3. Ecrire φ_n pour la bille en $\vec{r}_0$ et celle en $\vec{r}_N$.
4. Ecrire l'équation de Langevin discrète pour la bille en $\vec{r}_n$, en précisant la moyenne et la variance du bruit gaussien $\vec{f}_n$
5. Réecrire l'équation de Langevin en passant à la limite continue pour la variable n.
6. Quelles sont les conditions aux limites?
7. Trouver les modes propres de l'équation de Langevin. En déduire les temps de relaxations du polymère. Comment varie le temps le plus lent en fonction de L?

Polymère auto-évitant sur réseauet modèle $O(n)$, $n \to 0$

On considère un modèle de spins vectoriels sur un réseau à d dimensions décrit par l'hamiltonien :

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{s}_i \cdot \vec{s}_j \tag{1}$$

La somme $\sum_{\langle i,j \rangle}$ porte sur les sites i et j voisins. Chaque spin $\vec{s}_i$ a n composantes s_i^a ($a = 1, 2, \ldots, n$) et vérifie la contrainte sphérique :

$$s_i^2 = \sum_{a=1}^{n} (s_i^a)^2 = n \tag{2}$$

Ce modèle général s'appelle « le modèle $O(n)$ ».

- Si $n = 1$, on a $s_i = \pm 1$ et on retrouve le modèle d'Ising.
- Si $n = 2$, les spins peuvent être associés à des variables angulaires $(s_i^x, s_i^y) \to (\cos\theta_i, \sin\theta_i)$ et on a le modèle XY.
- Si $n = 3$ le modèle s'appele modèle de Heisenberg.

Nous allons montrer que dans la limite $n \to 0$, le modèle $O(n)$ est relié aux chaînes auto-évitantes.

1. Quelle invariance possède le Hamiltonien (1) ? Justifier le nom du modèle.
2. Écrire la fonction de partition. Sur quelles configurations des spins faut-il sommer ?
3. Développer la fonction de partition en puissances du couplage J. Si on définit les moyennes angulaires dans l'espace des spins $\overline{\bullet}$ selon :
$$\overline{\bullet} = \frac{\int \prod_i \left(d\,\vec{s}_i\ \delta(s_i^2 - n)\right)\ \bullet}{\int \prod_i \left(d\,\vec{s}_i\ \delta(s_i^2 - n)\right)}\ , \tag{3}$$
quelle est la forme du terme générique de ce développement ?
4. (a) Calculer les moments de premier et deuxième ordre $\overline{s_i^a}$ et $\overline{s_i^a s_j^b}$ pour n entier positif.
   (b) Caractériser les termes non nuls du développement de la fonction de partition.
   (c) Montrer ce développement se ramène en fait au calcul de moyennes sur un seul site, telles que $\overline{(s_1^x)^2 (s_1^y)^4}$, ...
5. Exprimer les moments d'ordre k, $\overline{s_i^{a_1} \ldots s_i^{a_k}}$, grâce à la fonction génératrice
$$f(\vec{h}) = \overline{\exp\left(i\vec{h} \cdot \vec{s}_i\right)} \tag{4}$$
6. Nous allons maintenant étudier la limite $n \to 0$.
   (a) Trouver l'équation différentielle satisfaite par $f(\vec{h})$ pour n entier positif.
   (b) Donner les conditions au bord $\vec{h} = \vec{0}$ de $f(\vec{h})$.
   (c) Simplifier cette équation en utilisant l'invariance par rotation du problème.

(d) Écrire et résoudre cette équation quand $n \to 0$.

7. Nous allons maintenant déduire de ce qui précède les moments puis la fonction de partition pour $n \to 0$.

   (a) Expliciter le moment $\overline{s_i^{a_1} \dots s_i^{a_k}}$.

   (b) Interpréter alors graphiquement les termes (non nuls) du développement de la fonction de partition.

   (c) Montrer que la fonction de partition vaut en fait 1 quand $n \to 0$ (!)

8. Le résultat précédent est certes trivial, mais nous sommes en fait tout près du but : trouver la relation entre la fonction de corrélation à deux points $\langle s_i^a s_j^a \rangle$ dans la limite $n \to 0$ et une somme sur des chaînes auto-évitantes.

Localisation unidimensionnelle

Nous allons étudier dans ce T. D. la diffusion de particules par un milieu désordonné unidimensionnel. Pour des électrons dans un métal impur par exemple, la présence d'atomes d'impureté peut être modélisée par un potentiel formé d'un enchainement aléatoire de potentiels atomiques sur un axe.

Lorsque le potentiel est régulier (cas d'un cristal pur par exemple), la théorie des fonctions de Bloch indique que chacun des états électroniques s'étend sur la totalité du cristal. Nous allons montrer que pour les systèmes désordonnés, la situation est tout à fait différente : à haute énergie, les états d'énergie propre présentent la propriété remarquable d'être localisés.

Dans la première partie, nous montrerons que l'on peut se ramener au cas où le potentiel atomique est modélisé par une fonction de Dirac. Dans une deuxième partie, nous allons montrer que notre milieu aléatoire présente une loi de résistance inattendue, ce qui est un des aspect de la localisation. Nous nous attacherons, dans la troisieme partie, à montrer que les fonctions d'ondes propres sont effectivement localisées.

Dans toute la suite, nous considérons un potentiel aléatoire $V(x)$ nul partout sauf sur $[x_1, x_1']$, $[x_2, x_2']$... Sur ces intervalles, V se réduit à un potentiel atomique V_{atom} de longueur l_{atom} donné. On a bien sûr $x_1' = x_1 + l_{atom}$, $x_2' = x_2 + l_{atom}$... et $x_1' \leq x_2$, $x_2' \leq x_3$... de sorte que

$$V(x) = \sum_i V_{atom}(x - x_i) \tag{1}$$

Ce sont les espacements entre potentiels atomiques $x_{i+1} - x_i'$ qui sont aléatoires. On considère que les espacements adjacents sont décorrélés et on se donne une loi $p(x)$ pour l'espacement.

1 Potentiel de Dirac équivalent

Dans cette partie nous allons montrer que si l'on s'intéresse à la diffusion à une énergie donnée, le potentiel atomique peut être simplement remplacé par un potentiel en δ d'intensité μ entouré par deux zones de potentiel nul de longueur g à gauche et h à droite. On s'interessera donc ici à un potentiel atomique pris isolément.

1. Avec un choix d'unités particulier, et pour une énergie $E = k^2$, la fonction d'onde diffusée par le potentiel atomique pourra s'écrire, à gauche et à droite du potentiel :

$$\begin{aligned} \psi_g &= A_g e^{ik(x-x_1)} + B_g e^{-ik(x-x_1)} \quad \text{à gauche} \\ \psi_d &= A_d e^{ik(x-x_1')} + B_d e^{-ik(x-x_1')} \quad \text{à droite} \end{aligned} \tag{2}$$

   Introduire alors les matrices de transmission T et de diffusion S.

2. Montrer que l'invariance par renversement du temps — en l'absence de champ magnétique — et la conservation des probabilités réduit le nombre de paramètres caractérisant T.

3. Écrire alors une matrice de transmission générique et conclure.

2 Résistance équivalente au potentiel diffusant

On définit R_n la probabilité de réflexion d'une particule sur les n premiers atomes pris isolément.

1. En envisageant un régime permanent de diffusion, définir une constante de diffusion D pour ces n premiers atomes. On pourra introduire L_n la longueur occupée par ces n atomes, et v la vitesse des particules à l'énergie considérée.

2. Nous allons montrer sur un modèle simple que la constante de diffusion D est reliée à la conductivité de l'échantillon.

   (a) Introduire un modèle de marcheur sur un réseau unidimensionnel ayant la probabilité $\tau(j-i)$ de sauter du site i au site j à chaque pas de temps. Que vaut la constante de diffusion de ce modèle ?

   (b) Nous modéliserons l'action d'un champ électrique E sur notre particule (de charge $-e$) comme suit :
   $$\tilde{\tau}(j-i,E) = \tau(j-i)e^{-\beta a e E(j-i)} \tag{3}$$
   où βa est un paramètre. Expliquer cette forme pour $\tilde{\tau}$.

   (c) Calculer la conductivité de ce modèle et la relier à sa constante de diffusion.

3. Quelle grandeur doit-on savoir moyenner (sur le désordre) pour en déduire la résistance de notre échantillon en fonction du nombre d'atomes d'impureté n.

4. Donner une formule de récurrence sur $1/(1-R_n)$ et $R_n/(1-R_n)$, puis sur les valeurs moyennes $\overline{1/(1-R_n)}$ et $\overline{R_n/(1-R_n)}$.

5. Comment varie la résistance de notre échantillon avec n ? Quelle aurait été cette loi classiquement ?

6. Dans quelles conditions expérimentales doit-on se placer pour observer la résistance prédite par la théorie quantique ?

3 Localisation des fonctions d'onde

1. Nous allons commencer par montrer que l'étude de la localisation des fonctions d'ondes se ramène en fait à celle de la distribution statistique des phases aux points x_i.

   (a) Montrer que l'on peut rechercher les fonctions d'ondes réelles.

   (b) Pour toute fonction d'onde $\psi(k,x)$ on définit alors une phase
   $$\Phi(k,x) = \arctan\left(-\frac{\psi(k,x)}{k\psi'(k,x)}\right) \tag{4}$$
   avec $\Phi(k,0) \in [-\pi/2, \pi/2[$ et $\Phi(k,.)$ continue. On appelle phase réduite $\epsilon(k,x)$ la phase Φ ramenée à l'intervalle $[-\pi/2, \pi/2[$. Donner alors deux expressions équivalentes de ψ sur l'intervalle $[x'_{i-1}, x_i]$, en utilisant ϵ'_{i-1} puis ϵ_i. On sera amené à introduire une amplitude A_i indéterminée.

   (c) Expliciter la relation $\epsilon'_i = D(\epsilon_i)$ en fonction des paramètres du potentiel atomique équivalent, et en déduire une expression pour A^2_{i+1}/A^2_i.

   (d) Montrer alors que le rapport d'enveloppe $\ln(A^2_{i+N}/A^2_i)$ s'obtient comme le résultat d'une marche aléatoire que l'on pourrait caractériser si l'on connaissait la distribution statistique des phases ϵ_j : $\rho_j(\epsilon_j)$.

2. Nous allons calculer la distribution statistique $\rho_i(\epsilon_i)$ des phases pour des fonctions d'onde vérifiant une condition aux limites homogène à gauche de la chaîne : $\rho_0(\epsilon_0) = \delta(\epsilon_0 - \epsilon_g)$.

   (a) Montrer que les $\rho_i(\epsilon_i)$ s'obtiennent par itération d'un noyau $K(\epsilon_i, \epsilon_{i+1})$.

   (b) On admettra que pour des particules de haute énergie les distributions ρ_i convergent uniformément vers une distribution de type point fixe ρ. Écrire une équation intégrale vérifiée par ρ (on pourra considérer ρ comme une fonction périodique de période π).

3. Nous allons montrer que, dans le cas particulier de potentiels atomiques de Dirac d'intensité $\mu < 0$ disposés au hasard sur un axe, l'équation satisfaite par ρ prend une forme simple. On notera $1/\bar{x}$ la densité moyenne en atomes d'impureté, et on pose $q = 1/(k\bar{x})$.

   (a) Quelle est la loi d'espacement $p(x)$?

   (b) Montrer que ρ est solution de :

$$q\rho(\Phi) + \frac{d\rho(\Phi)}{d\Phi} = q\frac{dD^{-1}(\Phi)}{d\Phi}\rho(D^{-1}(\Phi)) \tag{5}$$

   (c) Intégrer cette équation pour montrer que ρ vérifie :

$$\rho(\Phi) = A - q\int_{D^{-1}(\Phi)}^{\Phi} \rho(\theta)\, d\theta \tag{6}$$

   où A est une constante.

4. Nous nous plaçons finalement dans la limite de haute énergie ($k \to \infty$).

   (a) Montrer que la densité $\rho(\epsilon)$ est uniforme au premier ordre en $1/k$ inclus (on posera $q' = -\mu/k$).

   (b) Montrer alors que la marche aléatoire introduite à la question 1d est une marche *de biais*.

   (c) Conclure sur le caractère localisé des fonctions propres.

MAGISTÈRE INTERUNIVERSITAIRE DE PHYSIQUE

ÉPREUVE DU COURS “Processus aléatoires et transitions de phase”

Mardi 26 juin 2001 de 9à 12 heures

Données générales.

L'équation $\mathrm{d}u/\mathrm{d}t = -au + b(t)$ a pour solution

$$u(t) = u(0)\exp(-at) + \int_0^t \mathrm{d}t' \, \exp(-a(t-t'))b(t') \tag{1}$$

I. Équation maî tresse

On considére un réseau unidimensionnel de N sites $1, 2, \ldots, N$ avec des conditions aux bords périodiques, si bien que le site $N+1$ est identique au site 1. Un marcheur aléatoire peut sauter à un taux γ du site n au site $n+1$, pour $n = 1, 2, \ldots, N$. On notera $P_n(t)$ la probabilité pour que à l'instant t le marcheur se trouve au site n.

a. Écrire l'équation maî tresse pour $P_n(t)$, où $n = 1, 2, \ldots, N$.

b. Exprimer la loi stationnaire P_n^{st}.

c. Les taux de transition obéissent-ils aux relations du bilan détaillé ? Motiver brièvement votre réponse.

d. Exprimer les valeurs propres et, à une constante de normalisation près, les vecteurs propres (de droite), de l'équation maî tresse trouvée en **a.**

e. Exhiber, à titre d'exemple, une solution $P_n(t)$ qui soit physique (c'est-à-dire telle que $0 \leq P_n(t) \leq 1$ pour tout n et tout $t > 0$) autre que la solution stationnaire déjà trouvée.

II. Équation de Langevin

Une particule brownienne de masse M et de charge e est immergée dans un fluide de particules neutres. Le système est à une température T fixe. La particule chargée est astreinte à se déplacer dans un plan, dans lequel elle a la vitesse $\mathbf{V}(t) = (V_x(t), V_y(t))$. Le système est soumis à un champ magnétique constant et homogène

H perpendiculaire à ce plan. La vitesse $\mathbf{V}$ obéit à l'équation de Langevin

$$\frac{\mathrm{d}\mathbf{V}(t)}{\mathrm{d}t} = -\gamma\mathbf{V}(t) + \frac{e}{Mc}\mathbf{V}(t) \times \mathbf{H} + \mathbf{L}(t) \tag{2}$$

où $\mathbf{V} \times \mathbf{H} \equiv H(V_y, -V_x)$. Pour la force de Langevin L, on postule les propriétés

$$\begin{aligned} \langle L_\alpha(T) \rangle &= 0 \\ \langle L_\alpha(t) L_\beta(t') \rangle &= \Gamma\delta(t-t') \qquad \alpha, \beta = x \text{ ou } y \end{aligned} \tag{3}$$

a. Quel est l'origine physique de chacun des trois termes dans le membre de droite de l'équation (2) ? *(Vos réponses peuvent tenir en trois lignes.)*

b. Prendre une vitesse initiale $\mathbf{V}(0) \neq 0$. Tracer qualitativement la trajectoire $\mathbf{V}(t)$ dans le plan $\mathbf{V}$ pour les trois cas suivants :

(i) $\gamma = 0,\ L(t) = 0$
(ii) $\gamma \neq 0,\ L(t) = 0$
(iii) $\gamma \neq 0,\ L(t) \neq 0,$ et $\mathbf{V}(0)$ suffisamment grande

c. Trouver la solution de l'équation (2) pour une vitesse initiale $\mathbf{V}(0)$. [*Indication* : Poser $Z(t) \equiv V_x(t) + \mathrm{i}V_y(t)$. Résoudre $Z(t)$ et prendre les parties réelle et imaginaire.]

d. À partir du résultat précédent, exprimer la variance de la distribution de la vitesse, $\langle \mathbf{V}^2 \rangle$, à l'équilibre.

III. Le point critique en champ moyen

On considère l'aimantation $\mathcal{M}(T, H)$ d'un ferromagnétique en fonction de la température T et du champ magnétique H ; pour simplifier l'écriture de diverses formules, l'on prendra $H \geq 0$. On posera encore $\epsilon = (T - T_c)/T_c$. Au voisinage de la température critique T_c on peut écrire $\mathcal{M}$ sous la forme d'une *loi d'échelle*

$$\mathcal{M}(T, H) = H^{\frac{1}{3}} \mathcal{G}\left(\frac{\epsilon}{H^{\frac{2}{3}}}\right) \tag{4}$$

valable dans la limite de ϵ et H petits, mais pour toute valeur du rapport $\epsilon / H^{\frac{2}{3}}$.

a. Exprimer la susceptiblité magnétique $\chi(T, H) \equiv \partial\mathcal{M}/\partial H$ également sous la forme d'une loi d'échelle.

b. Sachant que pour $T > T_c$ la susceptibilité en champ nul, $\chi(T, 0)$, est finie, déterminer le comportement de la fonction $\mathcal{G}(y)$ dans la limite $y \to +\infty$.

c. Pour $T \to T_c^+$ (limite par valeurs supérieures), la susceptibilité $\chi(T,0)$ diverge selon $\chi(T,0) \simeq \text{cst} \times (T - T_c)^{-\gamma}$. À partir des relations précedentes, trouver la valeur numérique de γ.

d. Pour $T < T_c$, l'aimantation spontanée $\mathcal{M}_\text{s}(T)$ est définie par $\mathcal{M}_\text{s}(T) = \lim_{H\to 0^+} \mathcal{M}(T,H)$. Sachant que pour $T \to T_c^-$ l'aimantation spontanée s'annule selon $\mathcal{M}_\text{s}(T) \simeq \text{cst} \times (T - T_c)^\beta$, montrer comment on peut trouver

- le comportement de $\mathcal{G}(y)$ dans la limite $y \to -\infty$;
- la valeur numérique de l'exposant β.

IV. Renormalisation

Une marche aléatoire qui commence à l'origine, effectue successivement les déplacements $a_1, a_2, \ldots, a_N$. Les a_i sont des variables aléatoires indépendantes et identiquement distribuées, de moyenne $\langle a_i \rangle = 0$ et de variance $\langle a_i^2 \rangle = \sigma^2$. On notera $\mathcal{R}_N(\sigma)$ la racine du carré moyen du déplacement total effectué après les N pas, mais on s'abstiendra de calculer cette quantité directement.

On peut regrouper les déplacements par paires successives, $b_1 = a_1 + a_2$, $b_2 = a_3 + a_4, \ldots$ (en supposant que N est pair). Les b_j sont indépendants et on notera leur variance $\langle b_j^2 \rangle = \sigma'^2$.

a. Donner l'argument simple qui justifie la relation

$$\mathcal{R}_N(\sigma) = \mathcal{R}_{\frac{N}{2}}(\sigma') \tag{5}$$

b. Trouver pour σ' une expression en termes de σ. Cette expression est une *équation de renormalisation.* En l'insérant dans l'équation (5), vous obtenez une récurrence pour $\mathcal{R}_N(\sigma)$.

c. En supposant que $N = 2^n$, itérer la récurrence n fois et obtenir l'expression explicite de $\mathcal{R}_N(\sigma)$.

d.

Examen du 20 Juin 2000

1 Marche au hasard

On considère une marche aléatoire biaisée à une dimension: si le marcheur se trouve en x au temps t, il a une probabilité $p > 1/2$ d'aller en $x + 1$ au temps $t + 1$ et $q = 1 - p < 1/2$ d'aller en $x - 1$ au temps $t + 1$. Initiallement ($t = 0$), le marcheur se trouve en $x = 0$.

1. Calculer les deux premiers moments $\langle x \rangle$ et $\langle x^2 \rangle$ de la position à l'instant t. En déduire la vitesse moyenne v et la constante de diffusion ($D = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2)/t$).

2. Ecrire l'équation maitresse de la probabilité $P(x, t)$ de trouver la particule au point x à l'instant t. Donner l'expression de $P(x, t)$.

3. Calculer le temps moyen $\langle \tau(x) \rangle$ passé par le marcheur au point x dans la limite $t \to \infty$. Il faudra distinguer $x > 0$ et $x \leq 0$. Peut-on relier une de ces expressions à la vitesse?

4. Calculer la probabilité $R(x)$ de passer au moins une fois au point x.

2 Rupture de liens

On considère deux plaques reliées par N liens. On applique une force F pour séparer les plaques (voir figure 1).

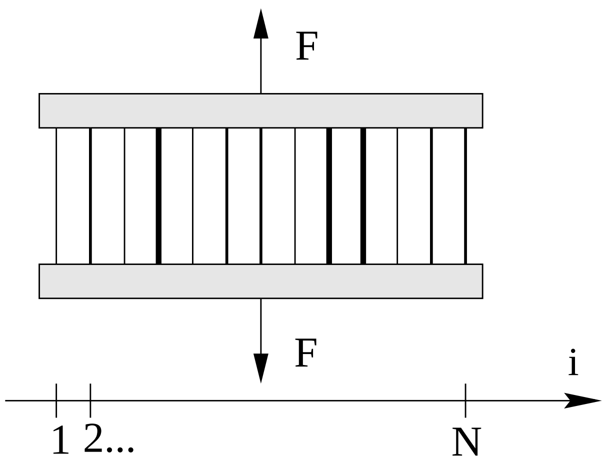


Figure 1: Rupture de liens entre deux plaques (aucun lien n'est encore brisé sur cette figure).

Chaque lien i ($1 \leq i \leq N$) possède une tension de rupture t_i : il se brise dès que la tension à laquelle il est soumise excède t_i. Les valeurs de t_i sont choisies *au* *hasard*, de façon indépendante sur chaque lien, et selon une distribution $\rho(t)$. On considère deux types de distribution des t_i :

(a) une distribution *discrète* : chaque t_i vaut τ avec une probabilité p, ou τ' avec une probabilité $p' = 1 - p$. On prend $0 < \tau < \tau'$ et $0 \leq p \leq 1$.

(b) une distribution *continue* : les t_i sont uniformément distribués dans l'intervalle $[\sigma, \sigma']$, avec $0 \leq \sigma < \sigma'$.

Au fur et à mesure que l'on augmente la force F, les liens faibles se brisent et la force F se répartit *également* sur les liens intacts. On s'intéresse à l'évolution du nombre de liens brisés en fonction de F.

1. Supposant connus le nombre B de liens brisés et les valeurs des différents t_i, dites en une phrase *quels* sont les liens qui sont brisés. Donnez également la tension supportée par les liens restants en fonction de F et B.

2. **Distribution discrète, $N \to \infty$.** On considère d'abord le cas où N est très grand. On introduit $f = F/N$. Étudier l'évolution de la fraction $b = B/N$ de liens brisés lorsque l'on fait croître f. Montrer en particulier que, selon la valeur des paramètres p, τ et τ', on peut avoir deux types de comportement : ou bien une valeur de rupture $f = f_{\mathrm{R}}$ unique, ou bien une rupture partielle pour $f = f_{\mathrm{p}}$ suivie d'une rupture complète en f_{R}. Donner les valeurs des paramètres p, τ et τ' correspondant à ces deux régimes, ainsi que les expressions des forces de rupture en fonction de ces mêmes paramètres.

3. On définit $n(t)$ comme la fraction de liens ayant une tension de rupture supérieure ou égale à t : c'est le nombre de liens i tels que $t_i \geq t$, divisé par N.

   (a) Calculez la fonction $\langle n(t) \rangle$ dans le cas de la distribution discrète.

   (b) Calculez les fluctuations $\langle n(t)^2 \rangle - \langle n(t) \rangle^2$, toujours pour la distribution discrète. Montrer que ces fluctuations deviennent négligeables pour $N \to \infty$.

4. **Expression exacte de la force de rupture.** On propose de montrer que la force de rupture est donnée par :

$$f_{\mathrm{R}} = \max_{t>0} \{t\, n(t)\}\,. \tag{1}$$

   (a) Montrer que cette formule redonne bien les résultats de la question 2 dans le cas de la distribution discrète.

   (b) En une phrase, justifier cette formule dans le cas général, c'est-à-dire pour une distribution ρ quelconque.

5. **Distribution continue, $N \to \infty$.**

   (a) Calculer la fonction $\langle n(t) \rangle$ dans le cas de la distribution continue.

   (b) Calculer les fluctuations de $n(t)$ et commenter la limite $N \to \infty$.

   (c) Dans la limite $N \to \infty$ (fluctutations négligées), calculer la force de rupture en fonction des paramètres σ, σ'. On sera amené à envisager deux cas.

6. **Fluctuations de la force de rupture.** En utilisant les questions 4 et 5, dites comment la force de rupture fluctue en fonction de N dans le cas continu.

3 Milieu Granulaire

On étudie un modèle de milieu granulaire constitué d'un empilement de billes soumises à une force de surface. Les billes occupent les sites d'un réseau régulier semi infini ($-\infty \leq i \leq \infty, 0 \leq t \leq \infty$) comme sur la figure 2. Une force externe $F = 1$ est appliquée sur chaque bille du niveau $t = 0$. La force $f_t(i)$ supportée par une bille i du niveau t est transmise à l'une de ses deux voisines du niveau $t + 1$ choisie au hasard avec probabilité $1/2$. On ne considère que la composante verticale des forces. (On néglige le poids des billes.)

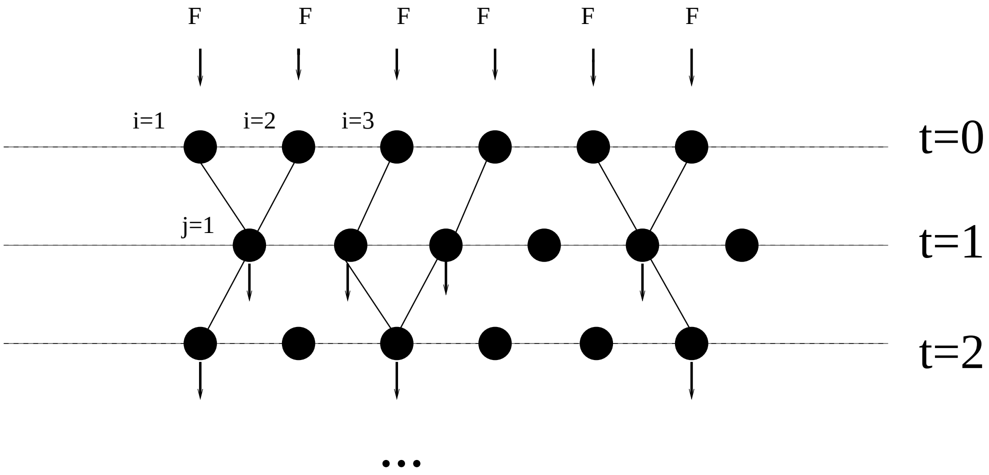


Figure 2: Réseau occupé par les billes. Les lignes représentent les transmissions de force entre les billes. Par exemple, les billes $i = 1$ et $i = 2$ du niveau $t = 0$ transmettent leur force à la bille $j = 1$ du niveau $t = 1$.

1. Si on prend une bille j du niveau $t+1$, exprimer les valeurs possibles de $f_{t+1}(j)$ en termes de $f_t(i_1)$ et $f_t(i_2)$ et leurs probabilités correspondantes, où i_1 et i_2 sont les deux voisines de j eu niveau t.

2. Vérifier que la force moyenne $\langle f_t(i)\rangle$ pour t et i donné est indépendante de t et i, et qu'elle est conservée. Interpréter.

3. On étudiera d'abord le problème dans une approximation de champ moyen qui revient à supposer que les deux forces $f_t(i_1)$ et $f_t(i_2)$ au niveau t sont indépendantes.

   (a) Calculer $\langle f_t^2(i)\rangle$ et $\langle f_t^3(i)\rangle$ en fonction de t. Donner leur comportement quand t est grand. Comment, selon vous, croit $\langle f_t^n\rangle$ avec t pour t grand ?

   (b) Écrire une équation de récurrence pour la fonction génératrice $G_t(\lambda) =\langle e^{\lambda f_t(i)}\rangle$.

   (c) Montrer que $G_t(\lambda) \to 1$ quand $t \to \infty$, $\lambda < 0$. Interpréter ce résultat.

   (d) Dans la limite $t \to \infty$ la fonction génératrice peut se mettre sur la forme d'échelle : $G_t(\lambda) = 1 + g(\lambda t)/t$. Écrire l'équation différentielle satisfaite par $g(z)$ et la résoudre.

   (e) En deduire les premiers trois moments $\langle f^n\rangle$ en utilisant la fonction génératrice. Comparer aux résultats trouvés en 3a.

4. La probabilité qu'une bille du niveau t supporte une force f peut être calculée de manière exacte, le résultat est :

$$P_t(f) = \begin{cases} \frac{2t!}{2^{2t}} \frac{4ft+2f}{(t-f+1)!\,(t+f+1)!} & \text{si } 1 \leq f \leq t+1 \\ 0 & \text{si } t+1 < f \end{cases} \tag{2}$$

   Le but des question 4a et 4b et d'etablir cette expression.

   (a) Trouver la relation de récurrence exacte pour les $P_t(f)$. (Le cas $f = 1$ est particulier pour la récurrence.) On pourra commencer par faire le calcul pour $t = 1$ et $t = 2$.

   (b) Vérifier que la forme (2) est bien une solution de cette récurrence.

   (c) Montrer que pour t grand et $f \sim \sqrt{t}$, (2) prend une forme d'echelle. On rappelle la formule de Stirling $n! \sim \sqrt{2\pi n}\; n^n\; e^{-n}$.

   (d) En déduire, pour t grand, les premiers moments $\langle f^n\rangle$. Comparer avec le résultat de champ moyen trouvé en 3a et 3e.

Examen du 21 Juin 1999

1 Aimantation de surface d'un ferromagnetique

On considère un modèle d'Ising sur un réseau cubique semi-infini en dimension $d = 3$: les spins sont placés sur les sites (x, y, z), de coordonnées entières avec $x \geq 0$. Les spins sont à deux états, $s(x, y, z) = \pm 1$. On appelle "couche c" l'ensemble des sites dont la coordonnée x vaut c. Le couplage entre spins se fait entre plus proches voisins : les spins couplés sont donc soit les plus proches voisins d'une même couche, soit les spins en regard sur deux couches voisines. La constante de couplage vaut :

J pour les liens entre couches voisines ;

J pour les liens entre spins voisins d'une même couche $c \geq 1$;

αJ pour les liens entre spins voisins de la couche $c = 0$.

On prend α et J positifs.

1. Écrire le hamiltonien H du système. Un lien a une énergie négative $(-J)$ ou $(-\alpha J)$ si ses deux spins sont parallèles, et une énergie positive J ou (αJ) s'ils sont anti-parallèles.
2. Écrire les équations de champ moyen pour l'aimantation moyenne de chaque couche : $m_0, m_1, \ldots, m_c, \ldots$ On pourra partir d'une formule exacte $m_c = \langle \text{th} \ldots \rangle$, et intervertir la tangente hyperbolique et la moyenne. La couche du bord, $c = 0$, réclame un peu d'attention.
3. À partir de ces équations de champ moyen, retrouver la température critique, T_1, du modèle d'Ising sur un réseau cubique *infini* $(-\infty < x < \infty)$. Pour le réseau semi-infini, cette température est appelée température critique de volume.
4. On se place à $T > T_1$, et on étudie l'existence d'une phase où la surface est aimantée et l'aimantation m_c décroît avec la distance c à la surface. Soit T_2 la température critique correspondante, si elle existe $(T_2 > T_1)$.
   (a) Montrer qu'à la température T_2, il doit exister une solution des équations de champ moyen linéarisées pour $m_0, m_1, \ldots$
   (b) En résolvant ces équations linéarisées, calculer T_2 en fonction de α.
   (c) Donner la valeur critique α_c du paramètre α pour laquelle il peut exister une aimantation de surface.
5. Tracer alors le diagramme des phases du système dans le plan (α, T) : représenter les régions de aimantation spontanée en volume, en surface, et celles où il n'existe pas d'aimantation spontanée.
6. Caractériser l'épaisseur de surface à la température de transition T_2, au voisinage de α_c.

2 Equilibration de la densité d'un gaz dans une enceinte

On considère deux enceintes, A et B, de volumes respectifs v et V reliées par un conduit fin, comme sur la figure 1. Il y a en tout N particules de gaz réparties entre A et B. On suppose que

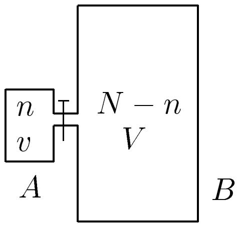


Figure 1:

chaque particule de A a une probabilité dt/v par intervalle de temps dt (avec $dt \ll 1$) de passer dans l'enceinte B ; de même, chaque particule de B a une probabilité dt/V de passer en A. Soit $P_n(t)$ la probabilité que le nombre de particules dans A soit n à l'instant t, sachant qu'il y en avait n_0 à l'instant initial.

1. Écrire les équations d'évolution des $P_n(t)$ (on conseille de vérifier que la normalisation est conservée au cours du temps).

2. Calculer le nombre moyen de particules dans A, $\langle n(t) \rangle$.

3. On considère maintenant la probabilité $Q_A(t)$ qu'une particule initialement en A se trouve en A à l'instant t, et la probabilité $Q_B(t)$ qu'une particule initialement en B se trouve en A à l'instant t. Écrire les équations d'évolution de $Q_A(t)$ et $Q_B(t)$, et calculer ces deux grandeurs.

4. Retrouver à partir de là la valeur de $\langle n(t) \rangle$ obtenue à la question 2.

5. Montrer que

$$\langle n^2(t) \rangle - \langle n(t) \rangle^2 = n_0\, Q_A(t)\, (1 - Q_A(t)) + (N - n_0)\, Q_B(t)\, (1 - Q_B(t)).$$

3 Percolation sur un arbre

On considère un arbre comme celui de la figure 2 : chaque branche se divise en deux à chaque niveau. Chaque site de l'arbre est occupé avec une probabilité p, et vide avec une probabilité $(1 - p)$.

1. On appele $P_L(p)$ la probabilité que le sommet de l'arbre soit relié par un chemin n'empruntant que des sites occupés à au moins un des sites du niveau L . $P_1(p) = p$. Écrire une recurrence pour $P_L(p)$.

2. Calculer $P_\infty(p)$ et représenter le résultat graphiquement en fonction de p.

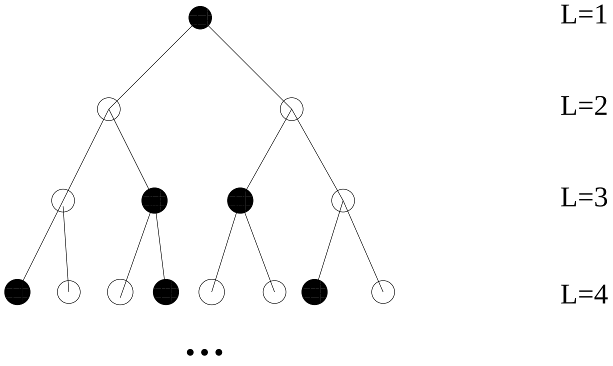


Figure 2:

3. Existe-t-il une valeur critique p_c pour p ? Quel est son nom et sa valeur ? Peut-on caractériser le comportement de $P_\infty(p)$ au voisinage de cette valeur critique par un exposant critique ?

4. On appele $Q_s(p)$ la probabilité que le sommet de l'arbre se trouve dans un amas de exactement s sites, autrement dit, la probabilité que le sommet soit occupé et relié à $(s-1)$ sites occupés. Si le site du sommet est vide on dira qu'il fait partie d'un amas de zéro sites : que vaut $Q_0(p)$? Calculer $Q_s(p)$ pour $s = 1, 2, 3$. Montrer que :
$$Q_s(p) = p \sum_{t=0}^{s-1} Q_t(p) Q_{s-1-t}(p) \ . \tag{1}$$

5. En utilisant la fonction génératrice des $Q_s(p)$ calculer $Q_{\rm tot}(p) = \sum_{s=0}^{\infty} Q_s(p)$. Relier son expression à celle de $P_\infty(p)$.

6. Calculer la taille moyenne des amas. Montrer que cette taille moyenne, $\langle s \rangle$, diverge quand $p \to p_c$.

7. Donner un exemple physique de percolation.

Examen du 23 Juin 1998

1 Cellules vivantes

On considère un modèle de cellules vivantes. Pendant tout intervalle de temps dt infinitésimal, chaque cellule vivante a une probabilité λdt de se dédoubler et dt de mourir.

1. Soit $P(n,t)$ la probabilité d'avoir n cellules vivantes à l'instant t, écrire l'équation d'évolution de $P(n,t)$ et vérifier qu'elle conserve la normalisation.

2. Si initialement il y a $n_0 = 1$ cellule vivante, calculer $\langle n(t)\rangle$ et $\frac{\langle n^2(t)\rangle - \langle n(t)\rangle^2}{\langle n(t)\rangle^2}$.

   Quelle est la valeur critique λ_c de λ ?

   À quoi correspondent les deux phases $\lambda < \lambda_c$ et $\lambda > \lambda_c$?

3. On introduit la fonction génératrice

$$G(\alpha,t) = \sum_{n=0}^{\infty} \alpha^n P(n,t) \tag{1}$$

   À partir du résultat de la question 1, écrire l'équation d'évolution de $G(\alpha,t)$.

4. Rappeler la méthode des caractéristiques et montrer, en utilisant cette méthode, que la solution est :

$$G(\alpha,t) = G\left(\frac{(1-\alpha)e^{(\lambda-1)t} - (1-\lambda\alpha)}{\lambda(1-\alpha)e^{(\lambda-1)t} - (1-\lambda\alpha)}, 0\right) \tag{2}$$

5. En déduire Q_k, la probabilité d'extinction au bout d'un temps infini, si à $t = 0$ il y a k cellules.

6. Calculer, à partir de la question 4, $P(0,t)$ s'il y a k cellules à $t = 0$.

   Quel est le résultat pour $\lambda = \lambda_c$?

2 Particules diffusant en présence de pièges

On considère des particules diffusant sur un axe unidimensionnel avec une concentration initiale uniforme c_0 et un coefficient de diffusion D. Les particules s'ignorent mutuellement et leur concentration $c(x,t)$ en l'absence de pièges évolue selon

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{D}{2}\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \tag{3}$$

Des pièges immobiles sont répartis au hasard sur l'axe avec une concentration ρ, et ils deviennent actifs à partir de l'instant $t = 0$: pour $t > 0$, les particules diffusantes qui rencontrent un piège disparaissent. On cherche à déterminer l'évolution de la concentration de ces particules au cours du temps.

1. On va d'abord calculer la statistique des longueurs des intervalles séparant des pièges consécutifs. Montrer que le nombre d'intervalles de longueur comprise entre a et $a + da$ dans une portion de l'axe de longueur L très grande est

$$L\rho^2 \exp(-\rho a)da \tag{4}$$

2. On étudie maintenant l'évolution temporelle du nombre de particules à l'intérieur d'un intervalle donné de longueur a délimité par deux pièges consécutifs. On pourra considérer qu'il s'agit de l'intervalle $[-a/2, a/2]$. La concentration $c(x,t)$ évolue selon (3). Quelles sont les conditions initiales et les conditions aux limites sur les bords de l'intervalle?

3. On résout cette équation par transformation de Fourier en écrivant:

$$c(x,t) = \sum_{n=0}^{\infty} A_n(t)\cos\left(\frac{(2n+1)\pi x}{a}\right) \tag{5}$$

Calculer les $A_n(0)$ (à partir de la condition initiale). En déduire les $A_n(t)$. On rappelle que

$$\int_{-a/2}^{a/2} \cos\left(\frac{(2n+1)\pi x}{a}\right)\cos\left(\frac{(2m+1)\pi x}{a}\right) dx = \frac{a}{2}\delta_{m,n} \tag{6}$$

4. En déduire le nombre de particules subsistant dans l'intervalle au temps t.

5. Donner la loi asymptotique pour t grand de la densité de particules survivant sur l'ensemble de l'axe.

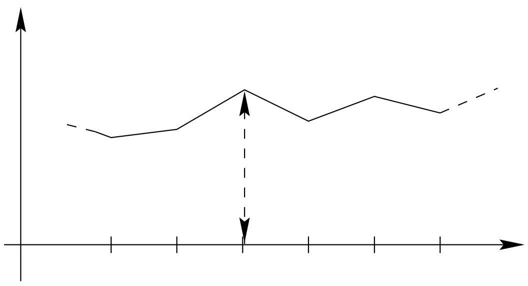
6. On considère la généralisation en dimension supérieure d du problème: des particules diffusent en dimension d et sont absorbées par des obstacles placés au harsard. Que devient le comportement asymptotique de la question 5 en dimension d?

7. Comparer les résultats des deux questions précédentes aux prédictions d'une théorie de champ moyen.

3 Dynamique d'une interface

On modélise l'évolution temporelle d'une interface liquide-gaz en prenant en compte deux phénomènes : la tension superficielle d'une part, qui tend à rendre l'interface rectiligne, et l'agitation thermique d'autre part, que l'on modélise par du bruit agissant sur l'interface.

On se place en temps continu et sur un réseau discret infini unidimensionnel de maille 1. On note $h_i(t)$ la hauteur de l'interface au-dessus du site i à l'instant t. L'équation d'évolution sur les



$h_i(t)$ est :

$$\frac{dh_i(t)}{dt} = \left(\frac{h_{i+1}(t) + h_{i-1}(t)}{2} - h_i(t)\right) + \eta_i(t) \tag{7}$$

Le bruit $\eta_i(t)$ représentant l'agitation thermique est un bruit blanc :

$$\langle \eta_i(t) \rangle = 0 \qquad \langle \eta_i(t)\eta_j(t') \rangle = 2\lambda\delta_{i,j}\delta(t-t') \tag{8}$$

On donne la condition initiale $h_i(0) = 0$.

1. Calculer la hauteur moyenne $\langle h_i(t) \rangle$ à l'instant t (la moyenne est sur le bruit η).

2. Montrer que la solution de (7) peut s'écrire

$$h_i(t) = \int_0^t dt' \sum_j P_{i,j}(t-t')\eta_j(t')$$

   Écrire l'équation vérifiée par $P_{i,j}(t)$. Que vaut $P_{i,j}(0)$?

3. Écrire la variance $V(t) = \langle h_i(t)^2 \rangle - \langle h_i(t) \rangle^2$ (les moyennes sont toujours sur le bruit η) en termes des $P_{i,j}(t')$.

4. Donner une expression de $P_{i,j}(t)$ et en déduire une expression de la variance.

5. Donner le comportements aux temps longs des fluctuations $\sqrt{\langle h_i(t)^2 \rangle - \langle h_i(t) \rangle^2}$ de la hauteur $h_i(t)$.

6. Généraliser ce qui précède pour une interface de dimension d, c'est à dire au cas où $h_i(t)$ évolue selon

$$\frac{dh_i}{dt} = -h_i + \eta_i(t) + \frac{1}{2d}\sum_j h_j$$

   où la somme porte sur les $2d$ voisins du site i. En particulier caractériser les fluctuations aux temps longs de hauteur de l'interface en fonction de sa dimension d.