TD 1 **Probabilités partie 2**

Références : [3], [1], [2].

Table des matières

1 Loi de Boltzmann dans un modèle simple

video de cette correction, (32')

Introduction : La loi de Boltzmann est à la base de la physique statistique (c'est aussi relié à l'hypothèse ergodique). Elle affirme qu'un système qui échange de l'énergie avec un plus gros système, est dans un état aléatoire distribué selon la mesure de probabilité $\frac{1}{z}e^{-E/(kT)}d\mu$ où E est l'énergie de l'état μ et T la température du gros système. Il n'y a pas de démonstration de la loi de Boltzmann à l'heure actuelle. L'exercice suivant donne une idée du mécanisme.

Remarque 1.1. Pour $N \in \mathbb{N}$, la **sphère** S_R^{N-1} de rayon R est l'ensemble des points $x = (x_1, x_2, \ldots x_N) \in \mathbb{R}^N$ à distance R de l'origine :

$$S_R^{N-1} := \left\{ x \text{ t.q. } x_1^2 + x_2^2 + \ldots + x_N^2 = R^2 \right\} \subset \mathbb{R}^N.$$

Par exemple $S_R^1 \subset \mathbb{R}^2$ est le cercle de rayon R et $S_R^2 \subset \mathbb{R}^3$ est la sphère (surface).

Dans ce problème on considère un point $x = (x_1, x_2, \ldots x_N)$ **aléatoire sur** S_R^{N-1} **pour la mesure de probabilité uniforme**. On souhaite montrer que si $N \gg 1$ et le rayon est $R^2 = \sigma^2 N$ avec $\sigma > 0$ fixé, alors la mesure de probabilité de la composante x_1 converge vers la loi normale $\mathcal{N}(0, \sigma^2)$

$$P(x_1)\, dx_1 = \frac{1}{Z} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x_1}{\sigma}\right)^2} dx_1 \tag{1.1}$$

1. Si $N = 2$, donner et tracer la mesure de probabilité de x_1. ([3] p.60). Même question pour $N = 3$.
2. Considérons la variable aléatoire $y = (y_1, \ldots y_N) \in \mathbb{R}^N$ avec la densité de probabilité

$$P(y) = \frac{1}{Z} e^{-\frac{1}{2\Delta^2}\|y\|^2} = \prod_{j=1}^{N} \frac{1}{z} e^{-\frac{1}{2\Delta^2} y_j^2}$$

avec $\Delta > 0$ arbitraire. Montrer que la variable aléatoire $x = R\frac{y}{\|y\|} \in S^{N-1}$ est distribuée uniformément sur la sphère S_R^{N-1} comme on le souhaite. D'après la loi des grands nombres [1], quelle [2] est la mesure de probabilité de la variable aléatoire $\frac{1}{N}\|y\|^2$ dans la limite $N \gg 1$? Déduire (1.1).
3. Application : considérons N particules libres de masse m en dimension 1. On note v_j la vitesse de la particule $j = 1 \ldots N$. Les particules échangent de l'énergie de façon aléatoire, mais on suppose que l'énergie totale $E_{\text{tot}} = \sum_{j=1}^{N} \frac{1}{2} m v_j^2$ est conservée. Montrer que pour $N \gg 1$, la vitesse v_j se distribue selon la loi de Boltzmann

$$P(v_j)\, dv_j = \frac{1}{z} e^{-E_j/(kT)} dv_j$$

avec $E_j = \frac{1}{2} m v_j^2$, et $E = \frac{E_{\text{tot}}}{N} = \frac{1}{2} kT$ énergie moyenne par particule (formule d'équipartition de l'énergie).
4. On définit l'entropie par $\mathcal{S} = \frac{k}{N} \log\left(\text{Vol}\left(S_R^{N-1}\right)\right)$ où $\text{Vol}\left(S_R^{N-1}\right)$ est le volume de la sphère de rayon $R^2 = E_{\text{tot}}$. Montrer que

$$\frac{1}{T} = \frac{\partial \mathcal{S}}{\partial E}$$

qui sert plus généralement de définition de la température.

1. La loi des grands nombres montre que si $(X_j)_{j\in\mathbb{N}}$ sont des variables aléatoires indépendantes d'espérance μ alors la mesure de probabilité de $Y_N = \frac{1}{N}(X_1 + X_2 + \ldots + X_N)$ converge vers la mesure de Dirac δ_μ pour $N \to \infty$.

2. Il faut aussi utiliser le Théorème de Slutsky qui montre que si $\|y\| \to c$ converge vers une constante c en probabilité alors $\frac{y}{\|y\|} \to \frac{y}{c}$ converge en loi.

2 Théorème Central Limite (TCL). Dynamique stochastique de “pile ou face”.

Références : [3, p.72].
Le théorème central limite que l'on démontre dans cet exercice est illustré sur la figure 2.1.

Préliminaires sur les mesures de probabilité : On notera le produit scalaire L^2 de deux fonctions par $\langle\psi|\varphi\rangle := \int \overline{\psi(x)}\varphi(x)\,dx \in \mathbb{C}$ où $\overline{\psi}(x)$ est le complexe conjugué.

— Une variable aléatoire réelle x est caractérisée par sa **mesure de Probabilité** $P = P(x)\,dx$. Si $1_{[x_1,x_2]}$ est la fonction caractéristique[3] de l'intervalle $[x_1, x_2]$, on a que $\langle 1_{[x_1,x_2]}|P\rangle = \int_{x_1}^{x_2} P(x)\,dx$ est la probabilité pour que $x \in [x_1, x_2]$. En particulier, $\langle 1|P\rangle = \int_{\mathbb{R}} P(x)\,dx = 1$.

— Plus généralement, les mesures P sont des distributions et sont utilisées avec des fonctions C^∞ à support compact ψ fixées (appelées fonctions test ou observable) pour donner un nombre $\langle\psi|P\rangle \in \mathbb{C}$. Si $(P_T)_{T>0}$ est une suite de mesures (ou de distributions), la convergence $P_T \underset{T\to\infty}{\rightarrow} P$ vers une mesure P donnée, signifie que pour toute fonction test ψ fixée on a $\langle\psi|P_T\rangle \underset{T\to\infty}{\rightarrow} \langle\psi|P\rangle$. Cette notion de convergence s'appelle “**convergence au sens des distributions**”, ou “**convergence faible**”, ou “convergence en loi”.

Introduction :

Théorème 2.1. *« théorème central limite ». Si $x_1, x_2, \ldots x_T$ sont des variables aléatoires indépendantes de même mesure de probabilité $P(x)\,dx$, d'espérance (i.e. moyenne) finie $\mu = \mathbb{E}(x) < \infty$ et de variance finie $\sigma = \sqrt{\mathbb{E}(x-\mu)^2} < \infty$ alors la somme renormalisée*

$$S_T := \frac{1}{\sqrt{T}}\left((x_1 + x_2 + \ldots x_T) - T\mu\right)$$

*a une mesure de probabilité P_T qui **converge** pour $T \to \infty$ vers la loi normale $\mathcal{N}\left(0, \sigma^2\right)$:*

$$P_T(S)\,dS \underset{T\to\infty}{\longrightarrow} \frac{1}{Z} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{S}{\sigma}\right)^2} dS \tag{2.1}$$

indépendamment de la mesure initiale P.

Théorème 2.2. *« loi des grands nombres ». Avec les même hypothèses, pour $T \to \infty$, la mesure de probabilité de la moyenne $\frac{1}{T}(x_1 + x_2 + \ldots x_T)$ converge vers la mesure de Dirac δ_μ.*

Remarque 2.3. Le théorème central limite montre que la loi normale est une loi stable (comme un “point fixe stable” en dynamique). C'est un phénomène essentiel en physique qui explique l'émergence de la loi de Boltzmann (Exercice 1).

Pile ou face : Pour simplifier, on considère le cas particulier du jeu de pile ou face : à chaque instant $t \in \mathbb{N}$, l'état du système est $x_t \in \{-1, 1\}$ et choisit au hasard avec probabilités $p(-1) = 1/2$, $p(1) = 1/2$. Voir figure 2.1.

1. On considère une suite de T réalisations aléatoires $x = (x_1, x_2, \ldots x_T) \in \{-1, 1\}^T$. Quelle est la probabilité $p(x)$ d'une telle suite x ? On souhaite montrer que la somme

$$S_x(T) := \frac{1}{\sqrt{T}} \sum_{t=1}^{T} x_t$$

se distribue pour $T \gg 1$ selon une loi normale $\mathcal{N}\left(0, \sigma^2\right)$ avec un écart type $\sigma > 0$ que l'on va calculer. Pour cela on considère la distribution sur $S \in \mathbb{R}$ des valeurs de $S_x(T)$. Sa mesure de probabilité est

$$P_T := \sum_{x \in \{-1,1\}^T} p(x)\, \delta_{S_x(T)}$$

où $\delta_{S_x(T)}$ est la distribution de Dirac en $S_x(T)$.

(a) Montrer que pour toute fonction test (ou “observable”) $\psi \in C^\infty(\mathbb{R})$, on a

$$\langle\psi|P_T\rangle = \sum_{x \in \{-1,1\}^T} \overline{\psi(S_x(T))} p(x)$$

.

3. $1_{[x_1,x_2]}(x) = 1$ si $x \in [x_1, x_2]$, sinon $1_{[x_1,x_2]}(x) = 0$.

(b) Dans un premier temps, on choisit la fonction test $\psi_k(S) = \exp(ikS)$ avec $k \in \mathbb{R}$ (mode de Fourier). Montrer que $\langle \psi_k | P_T \rangle = \cos\left(\frac{k}{\sqrt{T}}\right)^T$.

(c) Montrer[4] que $\cos\left(\frac{k}{\sqrt{T}}\right)^T = \exp\left(-\frac{1}{2}k^2\right)\left(1 + O\left(\frac{k^4}{T}\right)\right)$.

2. Déduire[5] le "**théorème central limite**"

$$P_T \underset{T\to\infty}{\rightarrow} \frac{1}{Z} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{S}{\sigma}\right)^2} dS$$

et donner la valeur de la variance ou **coefficient de diffusion** σ^2.

3. (Optionnel) En suivant la même stratégie, démontrer le théorème central limite et la loi des grands nombres dans le cas général (2.1).

4. (Optionnel) Enoncer et démontrer le TCL pour un graphe de Markov.

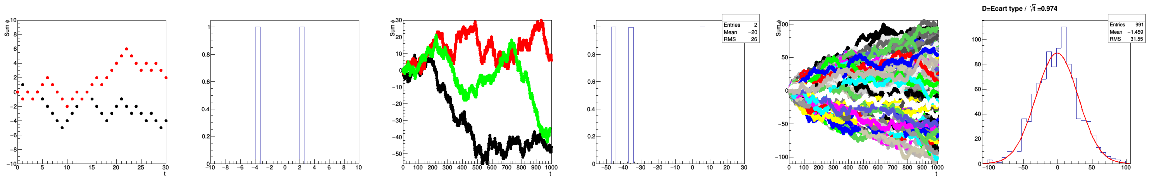

FIGURE 2.1 – Histogrammes pour **Pile ou Face**. A gauche représentation de $S_t := \sum_{t'=1}^{t} x_t$ où $x_{t'} = \pm 1$ sont aléatoires équidistribués. A droite, c'est l'histogramme de S_t à $t = 30$ avec $N = 2$ tirages, puis $t = 1000$ avec $N = 3$ puis $N = 991$ tirages. Dans ce dernier cas on observe que la distribution est bien ajustée par une Gaussienne avec un coefficient de diffusion $\sigma = \sqrt{\frac{\mathrm{Var}(S_t)}{t}} = 1$. Voir vidéo section 2.6.

3 Les états statistique quantiques. Opérateur densité et entropie

Rappels de cours : voir ce chapitre.

1. Un **état statistique quantique** est une distribution aléatoire d'états quantique $\psi_i \in \mathcal{H}$, $i = 1 \dots N$ de probabilités respectives p_i, avec $\sum_{i=1}^{N} p_i = 1$. On considère une observable $\hat{A} : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$, c'est à dire un opérateur auto-adjoint dont les valeurs propres sont notées $(a_j)_j$, les vecteurs propres associés sont notés $\varphi_j \in \mathcal{H}$, c'est à dire $\hat{A}\varphi_j = a_j \varphi_j$ et les projecteurs spectraux sont donc $\mathcal{P}_{\varphi_j} = \frac{|\varphi_j\rangle\langle\varphi_j|}{\langle\varphi_j|\varphi_j\rangle}$. On rappelle que, d'après le postulat de la mesure, les résultats possibles d'une mesure de l'observable $\hat{A}$ sont les valeurs $(a_j)_j$ et la probabilité conditionnelle d'observer une certaine valeur a_j dans un état ψ_i donné est

$$p(a_j|\psi_i) = \frac{\langle \psi_i | \mathcal{P}_{\varphi_j} \psi_i \rangle}{\langle \psi_i | \psi_i \rangle}.$$

Montrer que pour l'état statistique quantique, la probabilité d'observer a_j est donnée par

$$p(a_j) = \mathrm{Tr}\left(\hat{\rho}\mathcal{P}_{\varphi_j}\right)$$

avec l'**opérateur densité** $\hat{\rho} := \sum_i p_i \mathcal{P}_{\psi_i}$, et $\mathcal{P}_{\psi_i} := \frac{|\psi_i\rangle\langle\psi_i|}{\langle\psi_i|\psi_i\rangle}$. Déduire que la moyenne statistique des $(a_j)_j$ est donnée par

$$\langle A \rangle = \mathrm{Tr}\left(\hat{\rho}\hat{A}\right).$$

2. Quelle est l'entropie de la distribution de probabilité $(p(a_j))_j$ notée $S\left(\hat{\rho}, \hat{A}\right)$? On définit l'**entropie de l'état statistique quantique** par $S(\hat{\rho}) := \min_{\hat{A}} S\left(\hat{\rho}, \hat{A}\right)$. On peut montrer que $S\left(\hat{\rho}, \hat{A}\right)$ est minimale pour $\hat{A} = \hat{\rho}$. Montrer que

$$S(\hat{\rho}) = -\sum_k \rho_k \ln \rho_k =: -\mathrm{Tr}(\hat{\rho}\ln\hat{\rho})$$

où $(\rho_k)_k$ sont les valeurs propres de $\hat{\rho}$. Que vaut $S(\hat{\rho})$ pour un état pur $\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi|$?

4. Aide : écrire $\cos\left(\frac{k}{\sqrt{T}}\right)^T = \exp\left(\ln\left(\cos\left(\frac{k}{\sqrt{T}}\right)^T\right)\right)$. Utiliser $\cos(X) = 1 - \frac{X^2}{2} + O(X^4)$ et $\ln(1+X) = X + O(X^2)$.

5. Aide : utiliser la transformée de Fourier unitaire $\tilde{\psi}(k) = (\mathcal{F}\psi)(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int e^{-ikS}\psi(S)\, dS \Leftrightarrow \psi(S) = \left(\mathcal{F}^{-1}\tilde{\psi}\right)(S) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int e^{ikS}\tilde{\psi}(k)\, dk$, et l'intégrale Gaussienne $\int_{\mathbb{R}} \exp\left(-\left(AX^2 + BX\right)\right) dX = \sqrt{\frac{\pi}{A}} \exp\left(\frac{B^2}{4A}\right)$.

4 (optionnel) Modèle simple de décohérence quantique

(modèle proposé par Zureck (90'). Réf : cours d'Haroche sur le site du collège de France).

Introduction : C'est un modèle dynamique qui traite l'état d'un spin 1/2 (vecteur de l'espace $\mathbb{C}^2$), couplé à l'environnement (vecteur d'un espace de Hilbert $\mathcal{H}_{env}$) et qui montre comment l'équation de Schrödinger (qui est unitaire) peut expliquer que la matrice densité réduite $\tilde{\rho}(t) = \mathrm{Tr}_{env}(\rho(t))$ du spin peut évoluer de façon irréversible vers l'état d'entropie maximale qui est non polarisé :

$$\tilde{\rho}_{apres} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}.$$

Cette évolution d'un état initial pur vers un état non pur, s'appelle la **décohérence.** Elle est due au couplage du spin avec son environnement. En résolvant ce modèle on obtiendra de plus une expression du temps caractéristique de convergence vers cet état d'équilibre appelé **temps de décohérence** $\tau_{decoh.}$.

L'espace total du système étudié est $\mathcal{H}_{tot} = \mathbb{C}^2 \otimes \mathcal{H}_{env}$. L'état initial est $|\psi(0)\rangle = |S(0)\rangle \otimes |E(0)\rangle$ avec

$$|S(0)\rangle = |+_z\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+_x\rangle + |-_x\rangle) \in \mathbb{C}^2, \quad |E(0)\rangle \in \mathcal{H}_{env}.$$

Le Hamiltonien total est

$$\hat{H} = \hat{S}_z \otimes \hat{H}_e, \qquad \hat{S}_z = \begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & -1/2 \end{pmatrix} \text{ dans la base } |\pm_x\rangle$$

où $\hat{H}_e$ agit dans $\mathcal{H}_{env}$. Noter que l'on ne précise ni $|E(0)\rangle$, ni $\hat{H}_e$.

1. Écrire l'état total $|\psi(t)\rangle = e^{-it\hat{H}}|\psi(0)\rangle$ à l'instant t puis l'opérateur densité total $\rho(t) = |\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|$. Déduire l'expression de la matrice densité réduite de $\tilde{\rho} = \mathrm{Tr}_{env}(\rho(t))$ dans la base $|\pm_x\rangle$ en fonction de la fonction de "corrélation temporelle" de l'environnement $\langle E(0)|E(t)\rangle = \langle E(0)|e^{-it\hat{H}_e}|E(0)\rangle$.
2. On suppose maintenant que l'environnement est composé de N degrés de libertés indépendants mais identiques (penser N particules d'un gaz), chacun décrit par un espace quantique $\mathcal{H}$ et un opérateur Hamiltonien $\hat{H} : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$, c'est à dire que :

$$\mathcal{H}_{env} = \underbrace{\mathcal{H} \otimes \mathcal{H} \otimes \ldots \otimes \mathcal{H}}_{N}, \qquad \hat{H}_{env} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i=1}^{N} \hat{H}_i$$

où $\hat{H}_i = \mathrm{Id} \otimes \ldots \mathrm{Id} \otimes \underbrace{\hat{H}}_{position\, i} \otimes \mathrm{Id} \ldots \otimes \mathrm{Id}$ agit dans l'espace de la particule i de l'environnement. L'état initial de l'environnement est un produit

$$|E(0)\rangle = |e(0)\rangle \otimes \ldots \otimes |e(0)\rangle, \qquad \|e(0)\| = 1.$$

Pour simplifier les calculs, on suppose que l'énergie moyenne de chaque particule est nulle : $\langle e(0)|\hat{H}|e(0)\rangle = 0$ et on note $\sigma^2 := \langle e(0)|\hat{H}^2|e(0)\rangle$ la variance (carré de l'incertitude en énergie). Montrer que à t fixé (quelconque) et pour $N \to \infty$, on a $\langle E(0)|E(t)\rangle = e^{-t^2\sigma^2/2}$ et déduire que la matrice densité réduite est donnée par

$$\tilde{\rho}(t) = \mathrm{Tr}_{env}(\rho(t)) \underset{N\to\infty}{\longrightarrow} \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & e^{-t^2\sigma^2/2} \\ e^{-t^2\sigma^2/2} & 1 \end{pmatrix}$$

3. Donner l'expression de la matrice densité réduite $\tilde{\rho}(t)$ dans la base $|+_z\rangle = \frac{1}{2}(|+_x\rangle + |-_x\rangle)$, $|-_z\rangle = \frac{1}{2}(|+_x\rangle - |-_x\rangle)$.
4. Déduire l'expression de l'entropie $S(\tilde{\rho}(t))$ (en particulier simplifier pour les limites $t \to 0$, $t \to \infty$) et tracer son allure en fonction de t. De même donner et tracer le vecteur polarisation $\vec{P}(t)$ du spin, défini par $\tilde{\rho}(t) = \frac{1}{2}\left(\mathrm{Id} + \vec{P}(t).\hat{\vec{\sigma}}\right)$. Déduire que le **temps caractéristique de décohérence** est donné par $\tau_{decoh.} = \frac{1}{\sigma}$.
5. Montrer plus généralement que les calculs précédents sont identiques (mais préciser les nouvelles expressions) si l'état initial total est donné par un opérateur densité $\rho(0) = (|S(0)\rangle\langle S(0)|) \otimes \rho_{env}$ avec $\rho_{env} = \rho_e \otimes \ldots \otimes \rho_e$ tel que $\mathrm{Tr}\left(\hat{H}\rho_e\right) = 0$.

Références

[1] Roger Balian. *From microphysics to macrophysics : methods and applications of statistical physics*, volume 1,2. Springer Science & Business Media, 2007.

[2] L. Couture and R. Zitoun. *Physique statistique.* 1992.

[3] B. Diu, C. Guthmann, D. Lederer, and B. Roulet. *Physique statistique.* 1989.