Université Grenoble Alpes, Master 1 Physique.
TD de physique statistique. Frédéric Faure.

TD 1. **Probabilités**

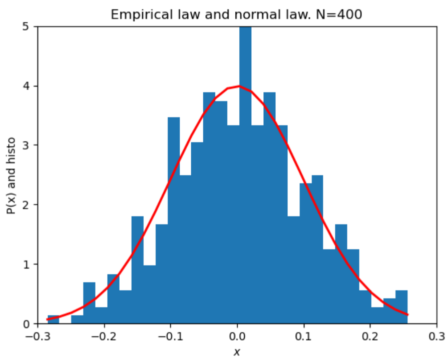
Introduction : La physique statistique est basée sur une étude probabiliste des phénomènes collectifs. Dans ce TD (et le suivant) on étudie quelques notions fondamentales en théorie des probabilités qui sont à la base de la physique statistique : la **loi normale** qui est un exemple particulier de mesure de probabilité mais importante car elle émerge dans les phénomènes collectifs, donnant la loi de Boltzman [1]. Elle émerge aussi avec le théorème central limite lorsque l'on étudie des fluctuations autour d'une moyenne. On étudie aussi des lois d'évolution probabiliste (modèle de Markov) convergeant vers une mesure de probabilité appelé état d'équilibre. On étudie le concept d'entropie qui mesure l'imprévisibilité d'une suite d'évènements soumis à une loi d'évolution probabiliste.

Références : [4], chap.I-2. p.8, [1] chap 2,3, [2], [3].

Table des matières

1 (rappel de cours) Loi Normale

Vidéos de la correction de cet exercice : video partie 1, (30'), video partie 2, (10'), video partie 3 (15').



Par définition, pour une variable réelle aléatoire $x \in \mathbb{R}$, la loi normale $\mathcal{N}\left(\mu, \sigma^2\right)$ de paramètres $\mu \in \mathbb{R}$, $\sigma^2 > 0$, est la mesure de probabilité

$$P = P(x)\,dx = \frac{1}{Z} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x-\mu}{\sigma}\right)^2} dx$$

avec $Z > 0$ calculé ci-dessous, tel que $\int_{\mathbb{R}} P(x)\,dx = 1$.

On rappelle la signification expérimentale d'une mesure de probabilité : si on fait une série de N expériences identiques, et que l'on mesure le nombre de fois $N_{[a,b]}$ où le résultat x appartient à un intervalle donné $[a,b]$, la proportion $\frac{1}{N} N_{[a,b]}$ s'appelle la **mesure empririque** et on a la convergence

$$\frac{1}{N} N_{[a,b]} \underset{N\to\infty}{\rightarrow} \int_{x\in[a,b]} P(x)\,dx.$$

Voici une animation normal_law.gif pour $N = 1 \rightarrow 200$ réalisée par ce programme en python normal_law.py.

1. On pourrait dire mesure de probabilité de Boltzmann. Les termes suivants sont équivalents : « mesure de probabilité », « distribution de probabilité », « fonction de distribution », « loi de probabilité ».

1. Tracer l'allure de la densité de probabilité $P(x)$. Calculer [2] la constante de normalisation Z. Calculer l'espérance $\mathbb{E}(x) := \int xP(x)\,dx$ (aussi appelée moyenne $\langle x\rangle$) et la variance [3] $\mathrm{Var}(x) = \mathbb{E}\left((x - \mathbb{E}(x))^2\right)$.
2. Si $\vec{x} = (x_1, x_2) \in \mathbb{R}^2$ avec x_1, x_2 aléatoires indépendantes [4] de loi $\mathcal{N}(0, \sigma^2)$, donner la mesure de probabilité de $r = \|\vec{x}\| = \left(x_1^2 + x_2^2\right)^{1/2}$, appelée distribution de Maxwell (aide : utiliser les coordonnées polaires $x_1 = r\cos\theta, x_2 = r\sin\theta$ et $dx_1dx_2 = rdrd\theta$). Même question pour $r = \|\vec{x}\|$ avec $\vec{x} = (x_1, x_2, x_3) \in \mathbb{R}^3$? Donner la valeur r la plus probable ? La moyenne [5] $\mathbb{E}(r)$?
3. Application : dans un gaz à l'équilibre thermique de température T, le vecteur vitesse $\vec{v} = (v_1, v_2, v_3)$ de chaque molécule suit une loi normale $P(\vec{v}) = \frac{1}{z}e^{-E/(kT)}$ avec $E = \frac{1}{2}m\|\vec{v}\|^2$ appelée la loi de Boltzmann (pour une justification, voir TD1'). Par conséquent le module $v = \|\vec{v}\|$ suit la distribution de Maxwell. *(Référence : [4] p.350.* Vérification expérimentale : voir [2] p169-170.)
   (a) à température ambiante $T = 300K$, quelle est l'ordre de grandeur du module de la vitesse $\|\vec{v}\|$ le plus probable des molécules d'oxygène O_2 ?
   (b) Observation expérimentale de la distribution des vitesses : si chaque molécule émet par fluorescence, des photons d'une certaine longueur d'onde λ précise dans son référentiel, on observera dans le référentiel du laboratoire, d'après l'effet Doppler, une longueur d'onde $\lambda' = \lambda\left(\frac{1+\beta}{1-\beta}\right)^{1/2}$ avec $\beta = \frac{\|\vec{v}\|}{c}$. Utilisant la distribution de Maxwell, calculer la largeur observée $\Delta\lambda = |\lambda' - \lambda|$ de la raie spectrale en fonction de T. Voir Largeur Doppler Raie spectrale.
4. **(Optionnel)** Supposons que x_1, x_2 sont deux variables réelles aléatoires indépendantes de loi normale respectives $\mathcal{N}(\mu_1, \sigma_1^2)$, $\mathcal{N}(\mu_2, \sigma_2^2)$. Montrer que $x = x_1 + x_2$ est une variable aléatoire de loi normale $\mathcal{N}(\mu, \sigma^2)$ de moyenne $\mu = \mu_1 + \mu_2$ et variance $\sigma^2 = \sigma_1^2 + \sigma_2^2$ (et donc $\sigma \neq \sigma_1 + \sigma_2$). [6].

   Remarque 1.1. Cette propriété d'invariance par additivité est essentielle en physique. Le théorème central limite montre que la loi normale est une loi stable (comme un "point fixe stable" en dynamique). Voir exercice TD1, partie2. Le résultat de cette question permet de comprendre déjà que la variance de la somme de t variables aléatoires indépendantes identiques $S(t) = x_1 + x_2 + \ldots x_t$ est $t\sigma^2$, par conséquent la variance de $\frac{1}{\sqrt{t}}S(t)$ est σ^2 indépendante de t. Autrement dit, cela justifie la normalisation par $\sqrt{t}$.

2 Dynamique stochastique de Markov. Convergence vers un état d'équilibre.

video de la correction, (27')

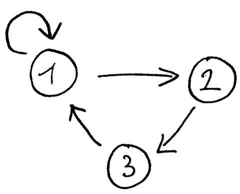
Référence : cours de systèmes dynamique, chap4,.

On considère un système dynamique aléatoire avec $n \geq 1$ états possibles, où à chaque instant $t \in \mathbb{Z}$ l'état du système est $x(t) \in \{1, 2, \ldots n\}$. A l'instant $t+1$ il prend la valeur $x(t+1) \in \{1, 2 \ldots n\}$ au hasard avec une probabilité de transition $p_{x(t)\to x(t+1)} = P_{x(t+1),x(t)}$ où $P = (P_{x',x})_{x,x'}$ est une matrice $n \times n$ donnée appelée matrice stochastique ou matrice de Markov indépendante de t. Ce processus s'appelle dynamique de Markov ou chaine de Markov.

Par exemple, on a $n = 3$ états et les probabilités de transition $P_{x',x} = p_{x\to x'}$ sont

$$p_{1\to 1} = \frac{1}{2}, \quad p_{1\to 2} = \frac{1}{2}, \quad p_{2\to 3} = 1, \quad p_{3\to 1} = 1, \tag{2.1}$$

les autres sont $p_{x\to x'} = 0$. Cet exemple se représente par le "graphe de Markov" suivant :



2. Aide : il faut que $\int_{\mathbb{R}} P(x)\,dx = 1$. On peut utiliser l'intégrale de Gauss $\int_{\mathbb{R}} e^{-X^2}dX = \sqrt{\pi}$. Avec le logiciel de calcul formel **xcas** en ligne : https://www-fourier.ujf-grenoble.fr/~parisse/xcasfr.html, on peut calculer cette intégrale en écrivant `int(exp(-x^2),x=-infinity..+infinity)`

3. Aide : $\int_0^\infty X^2e^{-X^2}dX = \frac{\sqrt{\pi}}{4}, \int_0^\infty X^3e^{-X^2}dX = \frac{1}{2}$.

4. Par définition si x_1, x_2 sont **aléatoires indépendantes** alors la loi du couple est le produit des lois : $P(x_1, x_2)\,dx_1dx_2 = (P(x_1)\,dx_1)(P(x_2)\,dx_2)$

5. Aide : $\int_0^\infty X^2e^{-X^2}dX = \frac{\sqrt{\pi}}{4}, \int_0^\infty X^3e^{-X^2}dX = \frac{1}{2}$.

6. Utiliser (et éventuellement montrer) que :

(a) généralement, si x_1, x_2 sont deux variables aléatoires indépendantes de mesures de probabilité respectives P_1, P_2 alors $x = x_1 + x_2$ est de mesure de probabilité $P = P_1 \star P_2$ (le produit de convolution).

(b) Si $\mathcal{F}$ est la transformée de Fourier définie par$(\mathcal{F}\psi)(\xi) := \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int e^{-i\xi x}\psi(x)\,dx$ alors $\mathcal{F}(P_1 \star P_2) = \sqrt{2\pi}(\mathcal{F}P_1)(\mathcal{F}P_2)$.

(c) La transformée de Fourier d'un paquet d'onde Gaussien $\psi(x) = e^{i\xi_0 x}e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x-\mu}{\sigma}\right)^2}$ est $(\mathcal{F}\psi)(\xi) = \sigma e^{i(\xi_0-\xi)\mu}e^{-2\sigma^2(\xi-\xi_0)^2}$

Voici une simulation illustrant l'évolution des lois de probabilité u_t étudiée dans cet exercice et montrant la convergence vers l'équilibre. Autres exemples.

1. Écrire la matrice $P = (P_{x',x})_{x,x'}$ dans l'exemple (2.1) ?
2. On décrit la connaissance du système à l'instant t par une distribution de probabilité $u_t(x) \geq 0$ telle que $\sum_{x=1}^{n} u_t(x) = 1$. Dans le cas général, exprimer le vecteur $u_{t+1} = (u_{t+1}(x))_{x\in\{1,\dots n\}} \in \mathbb{R}^n$ à partir du vecteur $u_t \in \mathbb{R}^n$ et de la matrice P. Que vaut $\sum_{x'} P_{x',x}$ à x fixé (somme sur les colonnes) ?
3. Par exemple dans le jeu de pile ou face, il y a $n = 2$ états possibles. Écrire l'expression de la matrice P et dessiner le graphe de Markov. Supposer que à l'instant $t = 0$ l'état u_0 est connu. Que vaut $u(t)$ pour $t \geq 1$?
4. Pour l'exemple (2.1), on suppose l'état $u_0 \in \mathbb{R}^3$ connu. Montrer [7] que pour $t \to \infty$, $u_t \to u_\infty$ converge exponentiellement vite vers un **"état d'équilibre"** u_∞ que l'on calculera. C'est la propriété de **"mélange"**.
5. Quelle matrice de Markov permet de générer une suite d'évènements aléatoires indépendants et de même loi ?

3 Entropie et suites typique.

video de la correction, (25')

Dans cet exercice on défini et étudie la notion d'entropie selon Shannon [8] (1949). Références : (Shannon, MacMillan 1949)([6] p.22, [5] p.17, [3]).

Considérons un ensemble de n évènements possibles $\{1, 2 \dots n\}$ ayant chacun la probabilité $p_i \geq 0$, $i = 1, \dots n$ vérifiant $\sum_{i=1}^{n} p_i = 1$, c'est à dire une **"loi de probabilité finie"**. Soit $N \geq 1$. Considérons une suite de N réalisations aléatoires **indépendantes** de ces évènements, notée

$$\vec{i} := (i_1, i_2, \dots, i_N) \tag{3.1}$$

Comme exemple simple, on pourra considérer un jeu de pile/face, c'est à dire $n = 2$ évènements possibles, mais de probabilités non égale (appelé loi de Bernouilli) :

$$p_1 = 2/3 \simeq 0.7 \quad > \quad p_2 = 1/3 \simeq 0.3.$$

1. Quel est le nombre total $\mathcal{N}_{\text{tot}}(N)$ de suites $\vec{i}$? Quelle est la probabilité $p\left(\vec{i}\right)$ pour que la suite $\vec{i} := (i_1, i_2, \dots, i_N)$ apparaisse ? Dans l'exemple pile/face, quelle est la suite la plus probable ? la moins probable ?
2. Par définition, on appelle "**suite typique**" une suite $\vec{i} := (i_1, i_2, \dots, i_N)$ très longue, i.e. $N \gg 1$ et où le nombre d'apparition N_i de chaque chiffre i est $N_i \approx p_i N$ (précisément $N_i = p_i N + o(N)$). Dans l'exemple de pile/face, une suite typique ressemblerait à

$$\vec{i} = (1, 2, 1, 1, 2, 1, 2, 1, 1, 1, 2, 1 \dots, 1) \tag{3.2}$$

avec le nombre de 1 qui est $N_1 \approx p_1 N = \frac{2}{3}N$ et le nombre de 2 qui est $N_2 \approx \frac{1}{3}N$. Est-ce que la suite la plus probable (respect. moins probable) de la question (1) est typique ? Montrer que la probabilité d'apparition d'une suite typique $\vec{i}_s$ donnée est

$$p\left(\vec{i}_s\right) = e^{-NS}$$

avec

$$S := -\sum_{i=1}^{n} p_i \log p_i$$

appelée **entropie**. Aide : utiliser que $p\left(\vec{i}\right) = p_{i_1} . p_{i_2} . \dots . p_{i_N} = p_1^{N_1} p_2^{N_2} \dots p_n^{N_n}$. Calculer l'entropie de l'exemple ?

---

7. Aide : diagonaliser la matrice $P = ADA^{-1}$ avec D diagonale. Pour cela, sur **xcas** en ligne : `https://www-fourier.ujf-grenoble.fr/~parisse/xcasfr.html`, on écrit `P:=[[1/2,0,1],[1/2,0,0],[0,1,0]]; D:=egvl(P); A:=egv(P); inv(A);` On vérifiera que `simplify(A*D*inv(A));` redonne bien la matrice `P` . On note $A = (U_1, U_2, U_3)$ vecteurs propres en colonnes, $A^{-1} = \begin{pmatrix} V_1 \\ V_2 \\ V_3 \end{pmatrix}$ vecteurs propres en ligne. Déduire que $P^t \underset{t\to\infty}{\to} |U_1\rangle\langle V_1|$.

8. (ref : wikipedia "history of entropy") L'histoire raconte que en 1949 Claude Shannon qui travaillait en télécommunication au BELL labs a développé la théorie qui suit, en définissant une fonction H qu'il voulait appeler "incertitude". Il rencontre le physicien-mathématicien Von Neumann. Ce dernier lui fait remarquer qu'il devrait appeler sa fonction "entropie" pour deux raisons : 1) car cela correspond au concept de l'entropie développée depuis Boltzmann et Gibbs 1872 qui mesure le "désordre", et 2) car il deviendrait célèbre en donnant enfin une explication claire de ce qu'est l'entropie.

3. Pour $N \gg 1$, on note $\mathcal{N}_N$ le **nombre de suites typique** de longueur N. Montrer que

$$\mathcal{N}_N \approx e^{NS} \Leftrightarrow S \approx \frac{1}{N} \log \mathcal{N}_N$$

c'est à dire que l'entropie est le taux exponentiel du nombre de suites typique. Aide : montrer que $\mathcal{N}_N = \frac{N!}{N_1!N_2!\dots N_n!}$ et utiliser la formule de Stirling $\ln N! \simeq N \ln N - N + o(N)$ pour $N \gg 1$.

4. D'après les résultats précédents les suites typique sont équiprobables et de probabilité $p\left(\vec{i}_s\right) = e^{-N(S+o(1))}$. Il y en a $\mathcal{N}_N = e^{N(S+o(1))}$. Cela semblent indiquer [9] que leur probabilité cumulée est $\mathcal{N}_N p\left(\vec{i}_s\right) \approx 1$ pour $N \gg 1$ (la preuve sera dans la question 5). Quelle signification des suites typique et de l'entropie S cela suggère t-il ? Pour quelle(s) lois de probabilité $(p_i)_{i=1\to n}$ a t-on $S = \log n$? $S = 0$? Quelle est la valeur maximale de S ? Comparer $\mathcal{N}_N$ et $\mathcal{N}_{\text{tot}}(N)$? Dans quel cas a t-on $\mathcal{N}_N = \mathcal{N}_{\text{tot}}(N)$?

5. (Optionnel) Pour montrer que $\mathcal{N}_N p\left(\vec{i}_s\right) \approx 1$ pour $N \gg 1$, écrire $p\left(\vec{i}\right) = \exp\left(-\sum_{j=1}^{N} X_j\right)$ avec $X_j = -\log p_j$ et appliquer la loi des grands nombres.

4 (optionnel) Entropie d'un oscillateur harmonique quantique à l'équilibre thermique

video de la correction, (15')

Cet exercice n'explique pas de phénomène général, c'est un exemple d'application.

L'oscillateur harmonique quantique est un système dont les niveaux d'énergie sont $E_i = \hbar\omega\left(i + \frac{1}{2}\right)$ avec $i \in \mathbb{N}$ et $\omega > 0$ fixé. On suppose que ce système est en contact avec un environnement qui est à l'équilibre thermique avec une température T. Alors, d'après la **loi de Boltzmann**, la probabilité pour que le système soit dans le niveau i d'énergie E_i est donnée par

$$p_i = \frac{1}{Z'} e^{-\frac{E_i}{kT}}$$

avec Z' un facteur de normalisation de sorte que $\sum_{i\in\mathbb{N}} p_i = 1$.

1. Montrer que $p_i = \frac{1}{Z} e^{-\beta i}$ avec $\beta = \frac{\hbar\omega}{kT}$ et Z un facteur de normalisation de sorte que $\sum_{i\in\mathbb{N}} p_i = 1$. Tracer p_i en fonction de i. Calculer Z en fonction de β (aussi appelé **fonction de partition**).
2. Calculer l'entropie $S = -\sum_i p_i \log p_i$ en fonction de β.
3. Donner l'expression de S (les premiers termes du développement limité) pour $\beta \to 0$ (haute température $kT \gg \hbar\omega$) et pour $\beta \to \infty$ (basse température $kT \ll \hbar\omega$).

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] Thomas M Cover. *Elements of information theory*. John Wiley & Sons, 1999.

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

[5] A Ya Khinchin. *Mathematical foundations of information theory*. Courier Corporation, 2013.

[6] Michel Zinsmeister and C Greg Anderson. *Thermodynamic formalism and holomorphic dynamical systems*, volume 4. American Mathematical Soc., 2000.

9. En fait, on ne peut pas déduire $\mathcal{N}_N p\left(\vec{i}_s\right) \approx 1$ car on a négligé des corrections $e^{No(1)} = e^{o(N)}$ qui peuvent être non négligeables, par exemple $\ln N = o(N)$ mais $e^{\ln N} = N \gg 1$.