Physique statistique

Boris Alexandre Baudel

Decembre 2023

1 Mathématiques pour la physique statistique

On considère une particule sur un réseau discret unidimensionnel de pas a. La particule peut sauter de site en site. Appelons alpha la probabilité de saut par unité de temps autant vers la gauche que vers la droite. On veut déterminer P(n, t), la probabilit´e pour qu'au temps t, la particule se trouve sur le site n, sachant qu'‘a t = 0, la particule se trouvait ‘a n = 0. L'équation donnée dans l'énoncé est :

1. Transitions vers le site n : La particule peut sauter sur le site n depuis les sites voisins $n-1$ et $n+1$. La probabilité de saut depuis chacun de ces sites vers n est α. Donc, la contribution totale à $P(n,t)$ des sauts vers n est $\alpha[P(n-1,t)+P(n+1,t)]$.
2. Transitions à partir du site n : La particule peut également quitter le site n pour aller vers $n-1$ ou $n+1$. La probabilité de chacun de ces sauts est également α, contribuant à une diminution de $P(n,t)$ de $2\alpha P(n,t)$ (car il y a deux possibilités de saut).
3. Combinaison des contributions : En combinant ces deux effets, on obtient l'équation maîtresse pour l'évolution de $P(n,t)$:

$$\frac{dP(n,t)}{dt} = \alpha\left[P(n-1,t) + P(n+1,t) - 2P(n,t)\right]$$

En divisant les deux côtés par α, on obtient l'équation donnée dans l'énoncé.

Cette équation est un exemple d'une marche aléatoire simple sur un réseau, un concept fondamental en physique statistique et en théorie des probabilités. Elle reflète l'équilibre entre les gains et les pertes de probabilité dûs aux mouvements de la particule.

La fonction génératrice des probabilités $\Phi(s,t)$ est définie en termes des coefficients de Fourier $P(n,t)$. Cette fonction est très utile pour analyser des processus stochastiques comme celui décrit dans votre énoncé. Elle est définie par :

$$\Phi(s,t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} P(n,t)\exp(ins)$$

Où s est une variable complexe.

Puisque $\exp(ins)$ est une fonction périodique de s avec une période de 2π (en raison de la propriété $\exp(i(s+2\pi)) = \exp(is)$), $\Phi(s,t)$ est également périodique en s avec la même période. Ainsi, $\Phi(s+2\pi,t) = \Phi(s,t)$ pour tout s et t.

Moyenne $\langle n\rangle$: La moyenne peut être obtenue en prenant la dérivée première de $\Phi(s,t)$ par rapport à s et en évaluant cette dérivée à $s=0$:

$$\langle n\rangle = \left.\frac{\partial\Phi(s,t)}{\partial(is)}\right|_{s=0}$$

En développant cette expression, on utilise la définition de $\Phi(s,t)$ et la propriété de la dérivée de l'exponentielle.

Variance σ^2 : La variance est obtenue en prenant la dérivée seconde de $\Phi(s,t)$ par rapport à s, puis en évaluant cette dérivée à $s=0$:

$$\sigma^2 = \left.\frac{\partial^2\Phi(s,t)}{\partial(is)^2}\right|_{s=0} - \langle n\rangle^2$$

Cette expression est dérivée en utilisant la définition de la variance comme $\sigma^2 = \langle n^2\rangle - \langle n\rangle^2$, où $\langle n^2\rangle$ peut être trouvé en prenant la dérivée seconde de $\Phi(s,t)$ comme indiqué.

Ces calculs montrent comment la fonction génératrice des probabilités $\Phi(s,t)$ peut être utilisée pour obtenir des informations statistiques importantes sur le processus stochastique, telles que la moyenne et la variance de la position de la particule.

Pour dériver l'équation pour la fonction génératrice des probabilités $\Phi(s,t)$ en utilisant l'équation différentielle de $P(n,t)$, nous utiliserons la définition de $\Phi(s,t)$ et l'équation différentielle donnée pour $P(n,t)$. Rappelons que $\Phi(s,t)$ est définie comme :

$$\Phi(s,t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} P(n,t)\exp(ins)$$

Et l'équation différentielle pour $P(n,t)$ est :

$$\frac{dP(n,t)}{dt} = \alpha\left[P(n-1,t) + P(n+1,t) - 2P(n,t)\right]$$

En prenant la dérivée temporelle de $\Phi(s,t)$, nous avons :

$$\frac{\partial\Phi(s,t)}{\partial t} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{\partial P(n,t)}{\partial t}\exp(ins)$$

En substituant l'équation différentielle pour $\frac{\partial P(n,t)}{\partial t}$, on obtient :

$$\frac{\partial\Phi(s,t)}{\partial t} = \alpha\sum_{n=-\infty}^{\infty}\left[P(n-1,t) + P(n+1,t) - 2P(n,t)\right]\exp(ins)$$

Nous pouvons séparer cette somme en trois termes et réarranger :

$$\frac{\partial\Phi(s,t)}{\partial t} = \alpha\left[\sum_{n=-\infty}^{\infty} P(n-1,t)\exp(ins) + \sum_{n=-\infty}^{\infty} P(n+1,t)\exp(ins) - 2\sum_{n=-\infty}^{\infty} P(n,t)\exp(ins)\right]$$

En utilisant le décalage d'indice, les deux premiers termes peuvent être réécrits :

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} P(n-1,t)\exp(ins) = \exp(-is)\sum_{n=-\infty}^{\infty} P(n,t)\exp(ins)$$

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} P(n+1,t)\exp(ins) = \exp(is)\sum_{n=-\infty}^{\infty} P(n,t)\exp(ins)$$

En substituant ces expressions dans l'équation pour $\frac{\partial\Phi(s,t)}{\partial t}$ et en utilisant la définition de $\Phi(s,t)$, on obtient :

$$\frac{\partial\Phi(s,t)}{\partial t} = \alpha\left[\exp(-is) + \exp(is) - 2\right]\Phi(s,t)$$

En utilisant l'identité $\exp(is) + \exp(-is) = 2\cos(s)$, l'équation devient :

$$\frac{\partial\Phi(s,t)}{\partial t} = -2\alpha\left[1 - \cos(s)\right]\Phi(s,t)$$

Ceci est l'équation demandée pour $\Phi(s,t)$.

Pour calculer explicitement les probabilités $P(n,t)$ en termes des fonctions de Bessel modifiées $I_n(z)$, nous devons d'abord rappeler l'équation différentielle pour $\Phi(s,t)$ que nous avons trouvée :

$$\frac{\partial\Phi(s,t)}{\partial t} = -2\alpha[1 - \cos(s)]\Phi(s,t)$$

Cette équation différentielle peut être résolue pour obtenir une expression pour $\Phi(s,t)$. Ensuite, nous utiliserons la transformation de Fourier inverse pour obtenir $P(n,t)$ à partir de $\Phi(s,t)$.

L'équation différentielle est de la forme :

$$\frac{\partial\Phi(s,t)}{\partial t} = -2\alpha[1 - \cos(s)]\Phi(s,t)$$

La solution générale à cette équation est :

$$\Phi(s,t) = \Phi(s,0)e^{-2\alpha t[1-\cos(s)]}$$

À $t = 0$, nous savons que la particule est à $n = 0$, donc $P(n,0) = \delta_{n,0}$ (où δ est le delta de Kronecker). Cela signifie que :

$$\Phi(s,0)=\sum_{n=-\infty}^{\infty}P(n,0)e^{ins}=1$$

Par conséquent, la solution devient :

$$\Phi(s,t)=e^{-2\alpha t[1-\cos(s)]}$$

En utilisant cette solution de $\Phi(s,t)$, nous pouvons appliquer la transformation de Fourier inverse pour retrouver les probabilités $P(n,t)$ en fonction du temps.

Dans la transformation de Fourier inverse pour une fonction périodique, le signe devant le terme ins dans l'exponentielle doit être positif. Donc, la transformation de Fourier inverse pour obtenir $P(n,t)$ à partir de $\Phi(s,t)$ est :

$$P(n,t)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi}\Phi(s,t)e^{ins}\,ds$$

Dans notre cas, en insérant la forme de $\Phi(s,t)=e^{-2\alpha t[1-\cos(s)]}$, nous obtenons :

$$P(n,t)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi}e^{-2\alpha t[1-\cos(s)]}e^{ins}\,ds$$

Cette expression est une forme de la fonction de Bessel modifiée de première espèce $I_n(z)$, où $z=2\alpha t$. La fonction de Bessel modifiée est définie comme :

$$I_n(z)=\frac{1}{\pi}\int_{0}^{\pi}e^{z\cos(\theta)}\cos(n\theta)\,d\theta$$

Pour obtenir $P(n,t)$ en termes de $I_n(z)$, nous devons ajuster notre intégrale pour qu'elle corresponde à la définition de $I_n(z)$. Compte tenu de la symétrie de la fonction cosinus, on peut réécrire l'intégrale sur la moitié de l'intervalle et multiplier par 2 :

$$P(n,t)=\frac{1}{\pi}\int_{0}^{\pi}e^{-2\alpha t[1-\cos(s)]}\cos(ns)\,ds$$

En prenant $z=2\alpha t$, l'équation devient :

$$P(n,t)=e^{-2\alpha t}I_n(2\alpha t)$$

Cette équation montre comment les probabilités $P(n,t)$ peuvent être exprimées explicitement en fonction des fonctions de Bessel modifiées $I_n(z)$, qui sont des fonctions spéciales apparaissant fréquemment dans les problèmes de physique impliquant des phénomènes ondulatoires ou des symétries cylindriques.

Pour exprimer les fonctions de Bessel modifiées $I_n(z)$ en fonction des fonctions de Bessel de première espèce $J_n(z)$, il faut se rappeler la relation entre ces deux types de fonctions de Bessel.

La fonction de Bessel modifiée $I_n(z)$ est définie pour des arguments réels ou complexes z comme :

$$I_n(z)=\frac{1}{\pi}\int_{0}^{\pi}e^{z\cos(\theta)}\cos(n\theta)\,d\theta$$

D'autre part, les fonctions de Bessel de première espèce $J_n(z)$ sont définies par une série ou par une intégrale de contour pour des valeurs complexes de z. La relation entre $I_n(z)$ et $J_n(z)$ est donnée par :

$$I_n(z)=i^{-n}J_n(iz)$$

Où i est l'unité imaginaire. Cette relation permet de passer d'une fonction de Bessel "ordinaire" à une fonction de Bessel modifiée, et vice versa. La raison de cette relation vient de la manière dont les deux fonctions sont définies et de leurs propriétés dans le plan complexe.