

TD5 : Modèles statistiques d'évolution temporelle

Fabio Pietrucci, Alice Sinatra, Sorbonne Université

June 21, 2024

Nous appliquons la théorie des probabilités à certains problèmes importants de physique statistique, en nous concentrant sur les modèles mathématiques d'évolution du temps. En générale, dans beaucoup de domaines de recherche on modélise les trajectoires des équations de Hamilton, après *coarse graining*, de façon à reproduire les propriétés statistiques qui nous intéressent. La notion même de probabilité est liée à la fréquence d'observation dans une expérience très longue, ou lors de nombreuses répétitions indépendantes d'une même expérience avec conditions initiales différentes.

1 La loi de Poisson et les événements rares

1.1

Pour développer une intuition des probabilités de Poisson, appliquez-les au cas suivant : un grand nombre N d'événements sont distribués au hasard, de manière uniforme, dans l'intervalle compris entre 0 et t_{tot} . Nous considérons maintenant un petit sous-intervalle de largeur t . Comment pouvons-nous appliquer la loi de Poisson à ce problème ? Donnez quelques exemples physiques de situations analogues.

1.2

Appliquons maintenant la loi de Poisson à un problème physique important, l'étude des événements rares. Ces derniers incluent la désintégration radioactive, le repliements de protéine, les transitions de phase ou encore les réactions chimiques. Considérons un événement rare se produisant, en moyenne, avec une fréquence de $1/\tau$. Calculez $\rho(t)$ appelée "distribution des temps de premier passage", telle que $\rho(t)dt$ donne la probabilité d'observer la première occurrence de l'événement entre t et $t+dt$. Utilisez $\rho(t)$ pour calculer la moyenne et la variance des temps de premier passage. Comparez les résultats avec la moyenne et la variance d'une loi de Poisson.

2 L'équation de diffusion et l'équation maîtresse

2.1

Familiarisons-nous avec l'équation de diffusion à une dimension :

$$\frac{\partial \rho(x, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 \rho(x, t)}{\partial x^2}$$

Tout d'abord, nous montrons qu'elle "inclue" la loi d'étalement diffusif d'Einstein $\langle x^2 \rangle = 2Dt$ (vérifiée pour des temps t au-delà d'un temps transitoire initial, dans des systèmes réels). Pour

cela, multiplier par x^2 les deux membres de l'équation, les intégrer sur x et montrer que

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

2.2

Vérifier par substitution directe qu'une solution de l'équation de diffusion est

$$\rho(x, t) = (4\pi Dt)^{-1/2} e^{-x^2/4Dt} \quad (2)$$

Est-ce compatible avec la loi d'Einstein ? Est-elle liée au théorème de la limite centrale ? Ecrire la généralisation de (2) à trois dimensions correctement normalisée. Quelle est la distribution initiale correspondante $\rho(x, 0)$?

2.3

Quelle est la distribution à temps long $\rho(x, t \rightarrow \infty)$ si les particules diffusent dans une boîte ?

2.4

Regardons maintenant la diffusion d'un point de vue plus microscopique, même si toujours *coarse grained*. Considérons l'équation maîtresse suivante :

$$\frac{dp_i}{dt} = K(p_{i-1} - 2p_i + p_{i+1}) \quad (3)$$

Montrez qu'elle peut être écrite en utilisant une notation matricielle. Donnez des arguments pour soutenir qu'elle constitue un modèle approprié pour la marche aléatoire le long de l'axe x , avec des positions discrétisées $x_i \equiv i\Delta x$, $p_i \equiv p(x_i)$. Comment pouvons-nous interpréter p_i et K ? En supposant que $\Delta x \rightarrow 0$, comment peut-on interpréter le second membre de l'équation ? Montrer que, dans cette limite, l'équation maîtresse devient l'équation de diffusion.

3 (à la maison) Modèle des chiens et des puces d'Ehrenfest

L'article d'Ambegaokar & Clerck, Am J Phys 1999 <https://doi.org/10.1119/1.19084> constitue une introduction légère au problème de la compréhension de la flèche du temps. Lisez les sections I, II et III.

On considère deux chiens A et B, ainsi que N puces, numérotées de 1 à N. Initialement (à $t = 0$), toutes les puces se trouvent sur le chien A. Le processus stochastique associé consiste à répéter l'opération suivante : Tirer au hasard un numéro i compris entre 1 et N, prendre la puce $n^\circ i$, la transférer sur le chien où elle n'était pas. On suit ensuite au cours du temps t (discret) le nombre total de puces $n(t)$ présentes sur le chien A. On obtient une courbe qui part initialement de $n(0) = N$ et commence par décroître vers la valeur moyenne $N/2$, comme on pourrait s'y attendre pour un "bon" système thermodynamique initialement hors d'équilibre et relaxant spontanément vers l'équilibre. Mais cette décroissance est irrégulière : il existe des fluctuations autour de la valeur moyenne $N/2$, qui peuvent devenir parfois très importantes (ceci est particulièrement visible lorsque N est petit). En particulier, quel que soit le nombre de puces N fini, il existe toujours des récurrences à l'état initial. Le théorème de Kac (1947) donne la durée moyenne entre deux récurrences à l'état initial consécutives $\langle \tau \rangle = 2^N$.

Quel est le lien entre la marche aléatoire discutée dans le cours et le modèle des chiens et des puces ?

Quel est le raisonnement qui sous-tend la figure 4, reproduite ci-dessous, où l'entropie est représentée en fonction du temps ? Rappelez-vous que l'entropie est définie dans les manuels scolaires comme une fonction d'état, généralement estimée pour un système à l'équilibre, sans saveur dépendant du temps (en cohérence avec la notion d'équilibre).

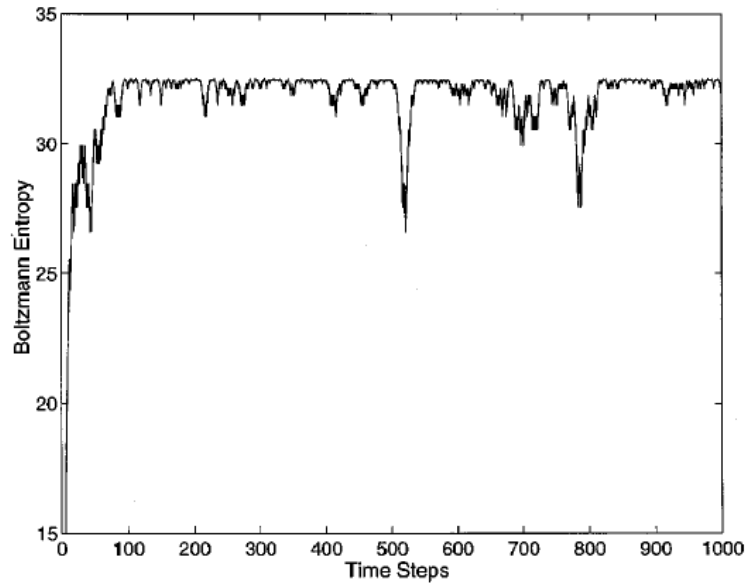


Figure 1: Augmentation de l'entropie dans le modèle chien-puce.

Vous pouvez également essayer de relier la figure 4 à la discussion de Lev Landau dans son livre “Statistical Physics”, volume 1, section 1.8 (voir figure 1 dans ce document, fourni sur moodle). Remarquez la difficulté de relier la flèche du temps, qui est apparemment évidente dans la vie quotidienne, avec la physique théorique !