Probabilités

et Physique Statistique

Nils Berglund

MAPMO, Université d'Orléans

CNRS, UMR 6628 et Fédération Denis Poisson

`www.univ-orleans.fr/mapmo/membres/berglund`

Orléans, 28 juin 2013

La physique

Etude de la matière

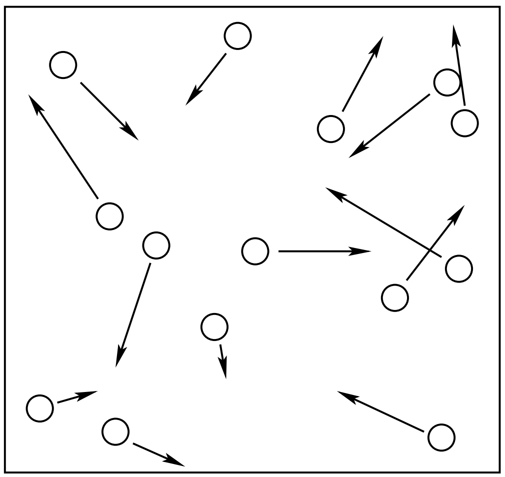
La physique statistique

Etude de la matière composée d'un grand nombre d'unités (atomes, molécules) identiques

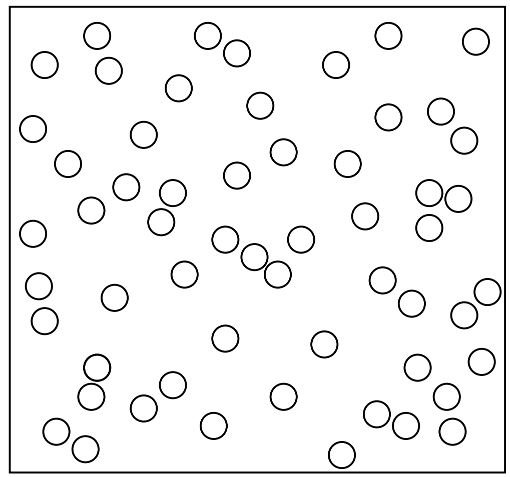
La physique statistique

Etude de la matière composée d'un grand nombre d'unités (atomes, molécules) identiques

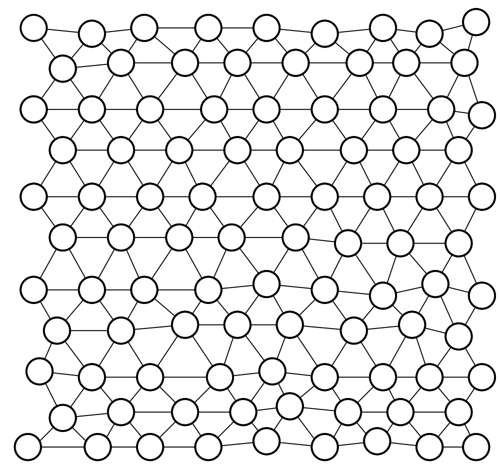
Principaux états de la matière :



Gaz



Liquide

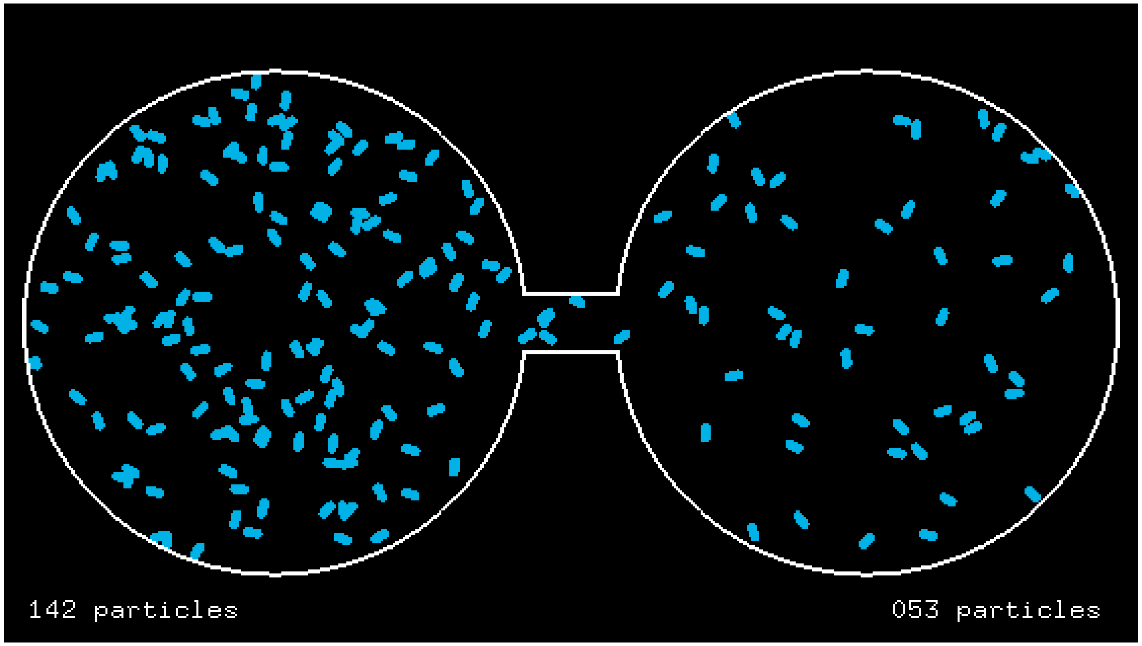


Solide

La physique statistique

Etude de la matière composée d'un grand nombre d'unités (atomes, molécules) identiques

Principaux états de la matière :



http://www.youtube.com/watch?v=U_XOy9GtfGw

Combien d'atomes?

1 mole :
échantillon contenant autant d'atomes que 12g de carbone 12
(les noyaux de carbone 12 contiennent 12 nucléons : 6 protons et 6 neutrons)

Combien d'atomes?

1 mole :
échantillon contenant autant d'atomes que 12g de carbone 12 (les noyaux de carbone 12 contiennent 12 nucléons : 6 protons et 6 neutrons)

1 mole d'hydrogène H_2 pèse environ 2g
1 mole d'uranium 238 pèse environ 238g, etc...

Combien d'atomes?

1 mole :
échantillon contenant autant d'atomes que 12g de carbone 12
(les noyaux de carbone 12 contiennent 12 nucléons : 6 protons et 6 neutrons)

1 mole d'hydrogène H_2 pèse environ 2g
1 mole d'uranium 238 pèse environ 238g, etc. . .

Ce nombre est le *nombre d'Avogadro*
$N_{\mathsf{A}} = 6.022 \cdot 10^{23}$

Combien d'atomes?

1 mole :
échantillon contenant autant d'atomes que 12g de carbone 12
(les noyaux de carbone 12 contiennent 12 nucléons : 6 protons et 6 neutrons)

1 mole d'hydrogène H_2 pèse environ 2g
1 mole d'uranium 238 pèse environ 238g, etc...

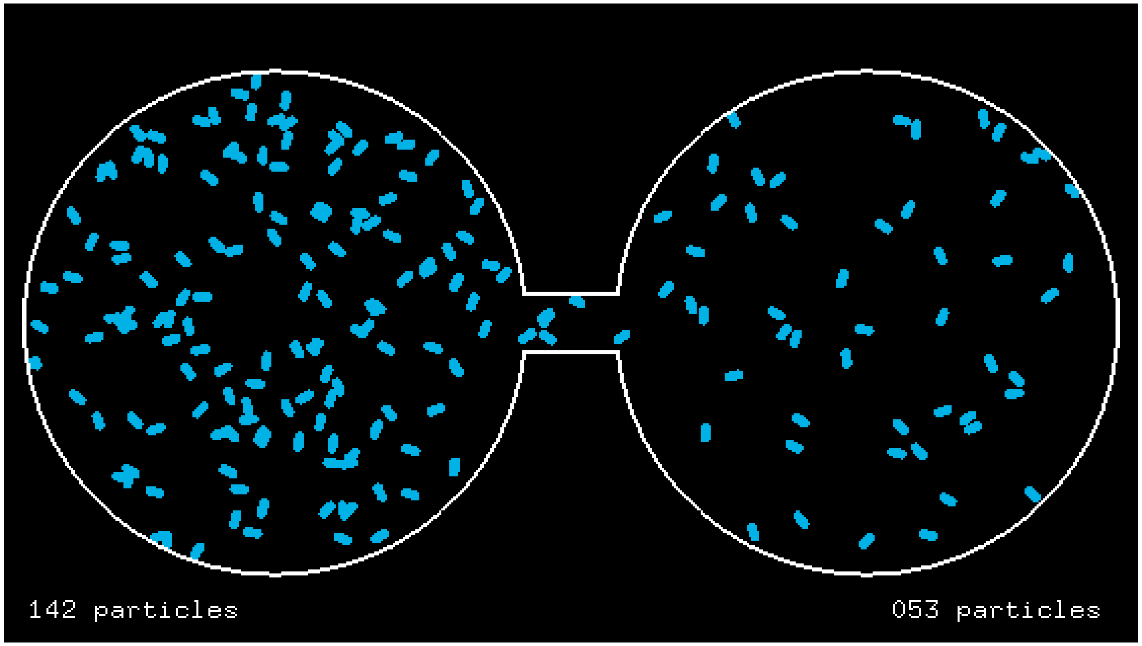
Ce nombre est le *nombre d'Avogadro*
$N_{\mathsf{A}} = 6.022 \cdot 10^{23}$

Avec N_{A} cubes de 1cm de côté on peut...
...fabriquer un cube de 800km de côté
...ou recouvrir la terre sur une hauteur de 1000m
...ou faire une chaîne longue de 600 000 années-lumière
(2 fois la circonférence de la voie lactée)

Quelques modèles probabilistes intéressants

1. Le modèle d'Ehrenfest : deux récipients de gaz connectés
2. La percolation : passage de l'eau dans un milieu poreux
3. Le modèle d'Ising : aimant
4. L'équation d'Allen–Cahn : séparation de phases

1. Modèle d'Ehrenfest et loi des grands nombres



Deux descriptions d'un gaz

1. Description microscopique
   Loi de Newton $F = ma$ pour chacun des $N = 6 \cdot 10^{23}$ atomes
   $\Rightarrow$ système de N equations couplées
   Pas de solution connue pour $N > 2$ (comportement chaotique)

Deux descriptions d'un gaz

1. Description microscopique

   Loi de Newton $F = ma$ pour chacun des $N = 6 \cdot 10^{23}$ atomes

   $\Rightarrow$ système de N equations couplées

   Pas de solution connue pour $N > 2$ (comportement chaotique)

2. Description macroscopique

   Loi des gaz parfaits : $pV = Nk_\mathrm{B}T$

   - p : pression
   - V : volume
   - T : température
   - N : nombre d'atomes ou molécules
   - k_B : constante de Boltzmann

Deux descriptions d'un gaz

1. Description microscopique

   Loi de Newton $F = ma$ pour chacun des $N = 6 \cdot 10^{23}$ atomes

   $\Rightarrow$ système de N equations couplées

   Pas de solution connue pour $N > 2$ (comportement chaotique)

2. Description macroscopique

   Loi des gaz parfaits : $pV = Nk_\mathrm{B}T$

   - p : pression – effet des collisions des atomes
   - V : volume
   - T : température – mesure de l'agitation des atomes
   - N : nombre d'atomes ou molécules
   - k_B : constante de Boltzmann $k_\mathrm{B} = 1.380 \cdot 10^{23}$ J/K

Deux descriptions d'un gaz

1. Description microscopique

   Loi de Newton $F = ma$ pour chacun des $N = 6 \cdot 10^{23}$ atomes

   $\Rightarrow$ système de N equations couplées

   Pas de solution connue pour $N > 2$ (comportement chaotique)

2. Description macroscopique

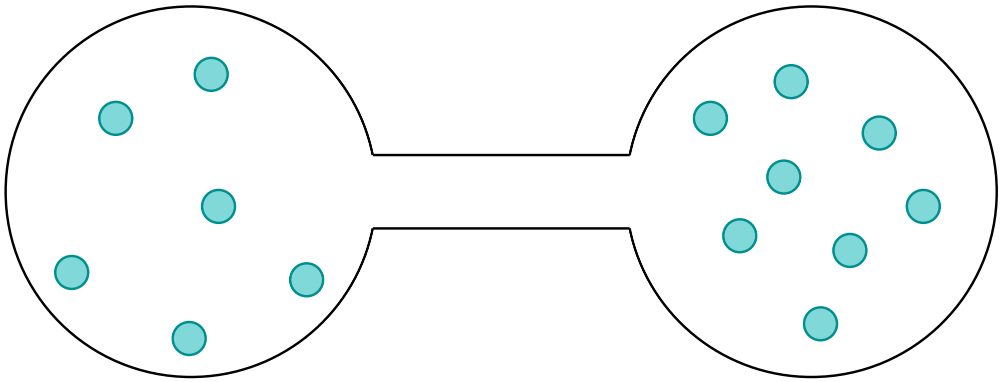
   Loi des gaz parfaits : $pV = Nk_{\mathrm{B}}T$

   - p : pression – effet des collisions des atomes
   - V : volume
   - T : température – mesure de l'agitation des atomes
   - N : nombre d'atomes ou molécules
   - k_{B} : constante de Boltzmann $k_{\mathrm{B}} = 1.380 \cdot 10^{23}$ J/K

La physique statistique a pour but de dériver
les équations macroscopiques des équations microscopiques.

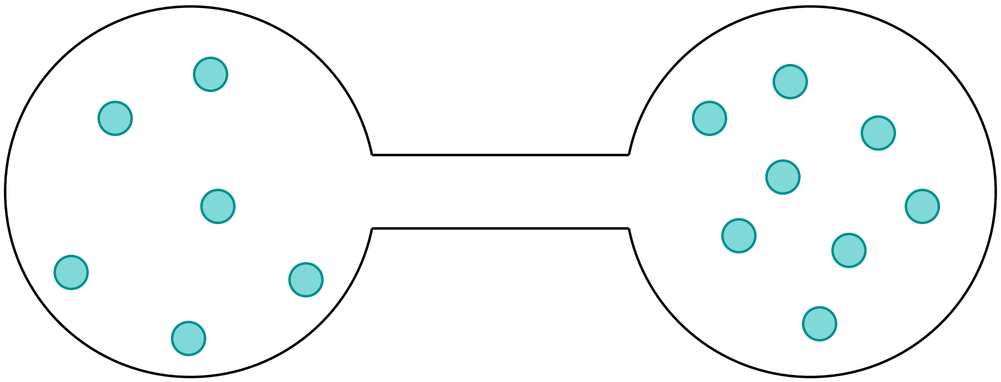
Modèle simplifié

Nous considérons la situation idéalisée suivante :
N atomes sont répartis entre deux parties d'un récipient.



Modèle simplifié

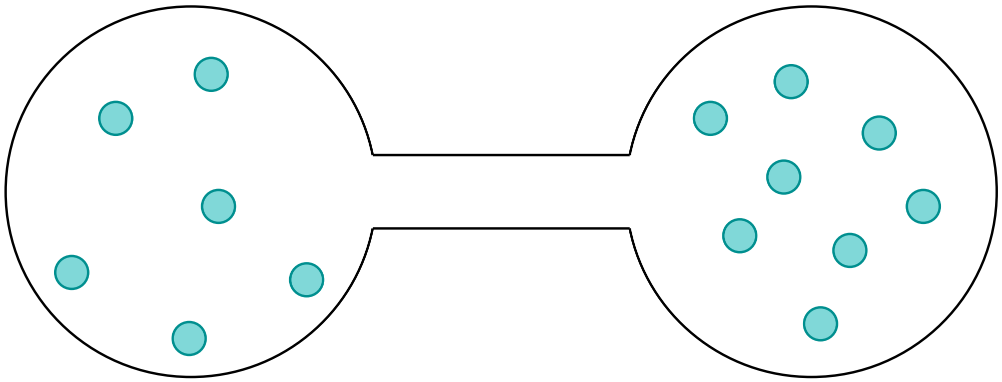
Nous considérons la situation idéalisée suivante :
N atomes sont répartis entre deux parties d'un récipient.



- Description microscopique : pour chaque atome, on dit dans quelle partie il se trouve.
- Description macroscopique : on spécifie combien d'atomes se trouvent dans chaque partie.

Modèle simplifié

Nous considérons la situation idéalisée suivante :
N atomes sont répartis entre deux parties d'un récipient.



- Description microscopique : pour chaque atome, on dit dans quelle partie il se trouve. Il y a 2^N configurations possibles
- Description macroscopique : on spécifie combien d'atomes se trouvent dans chaque partie. Il y a $N+1$ config. possibles

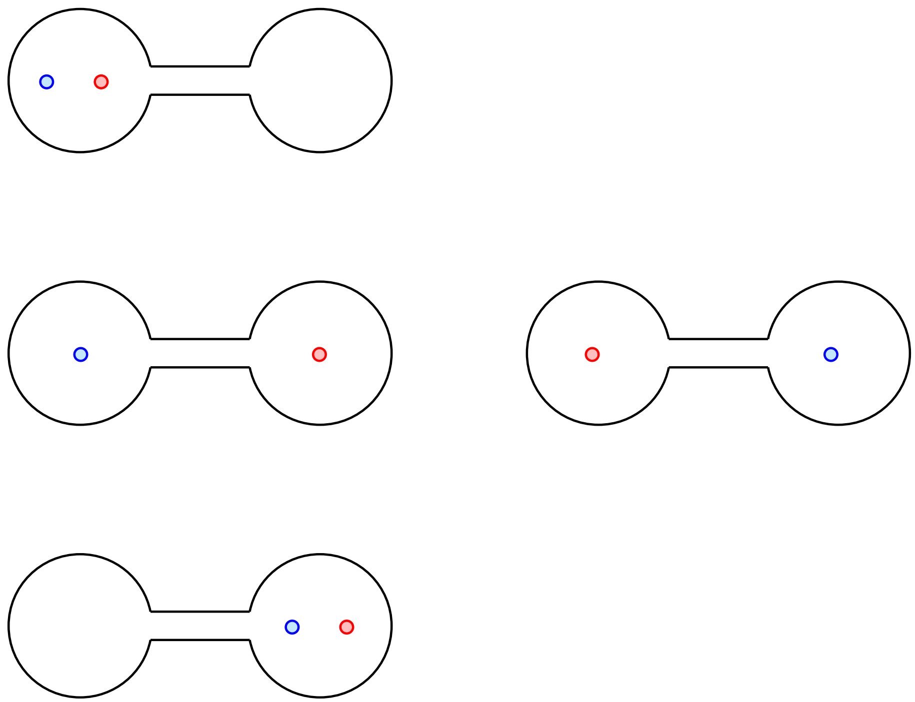
Modèle probabiliste : les 2^N configurations microscopiques ont chacune la probabilité $1/2^N$

Modèle simplifié : cas $N = 2$

$2^2 = 4$ configurations microscopiques

$2 + 1 = 3$ configurations macroscopiques

$X \in \{0, 1, 2\}$: nombre d'atomes dans la moitié de droite

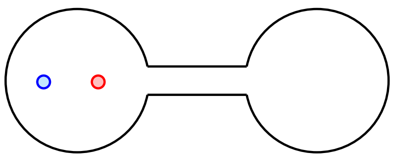


Modèle simplifié : cas $N = 2$

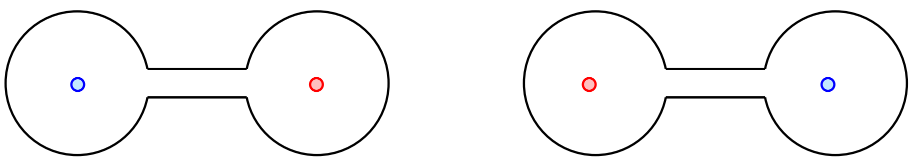
$2^2 = 4$ configurations microscopiques

$2 + 1 = 3$ configurations macroscopiques

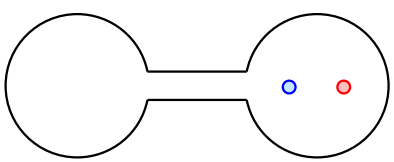
$X \in \{0, 1, 2\}$: nombre d'atomes dans la moitié de droite



$X = 0$ $\qquad$ $\mathbb{P}\{X = 0\} = 1/4$



$X = 1$ $\qquad$ $\mathbb{P}\{X = 1\} = 2/4$

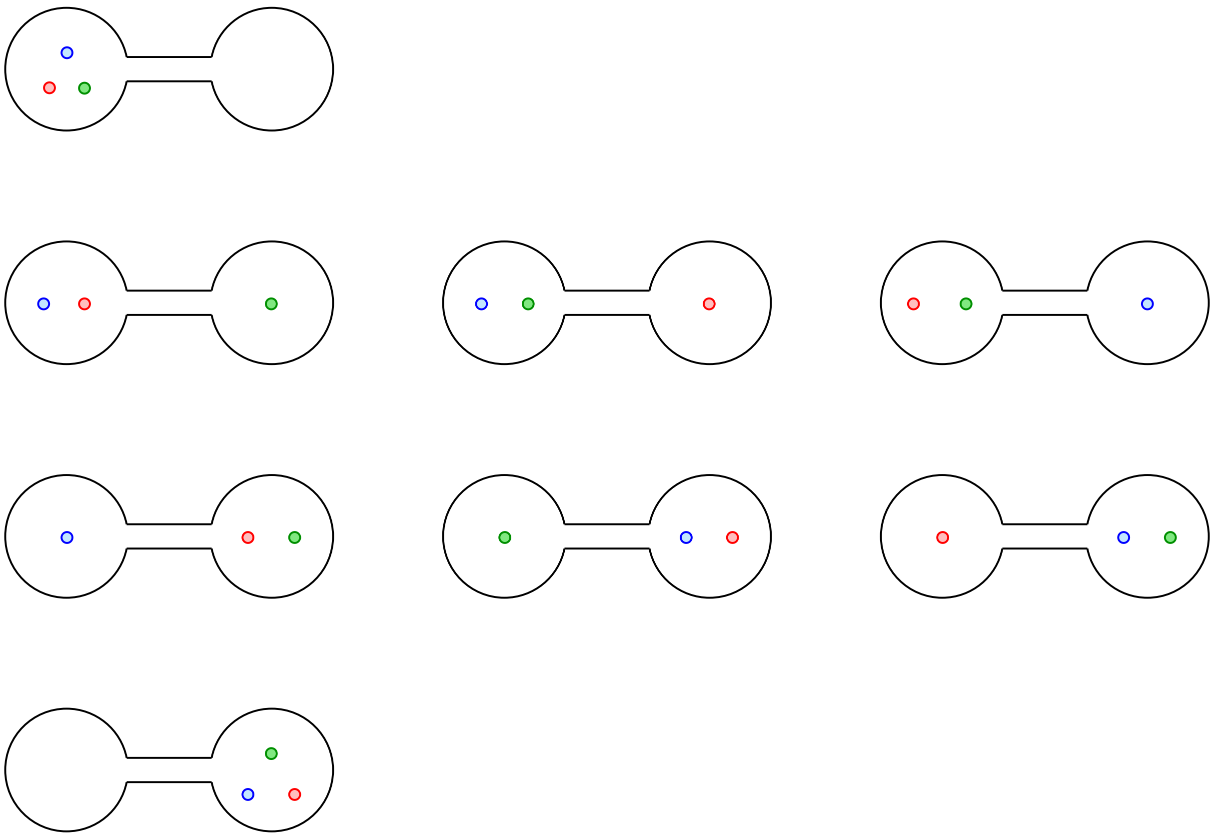


$X = 2$ $\qquad$ $\mathbb{P}\{X = 2\} = 1/4$

Modèle simplifié : cas $N = 3$

$2^3 = 8$ configurations microscopiques

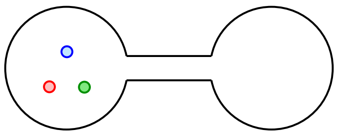
$3 + 1 = 4$ configurations macroscopiques



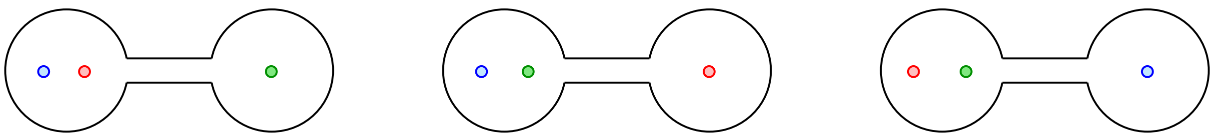
Modèle simplifié : cas $N = 3$

$2^3 = 8$ configurations microscopiques

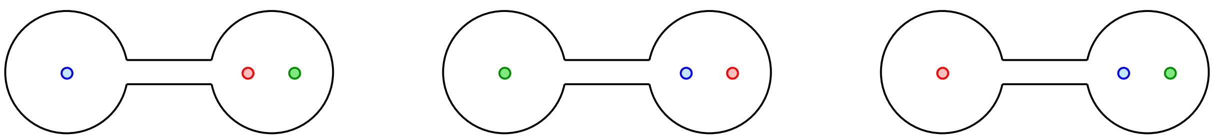
$3 + 1 = 4$ configurations macroscopiques



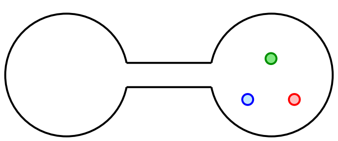
$\mathbb{P}\{X = 0\} = 1/8$



$\mathbb{P}\{X = 1\} = 3/8$



$\mathbb{P}\{X = 2\} = 3/8$

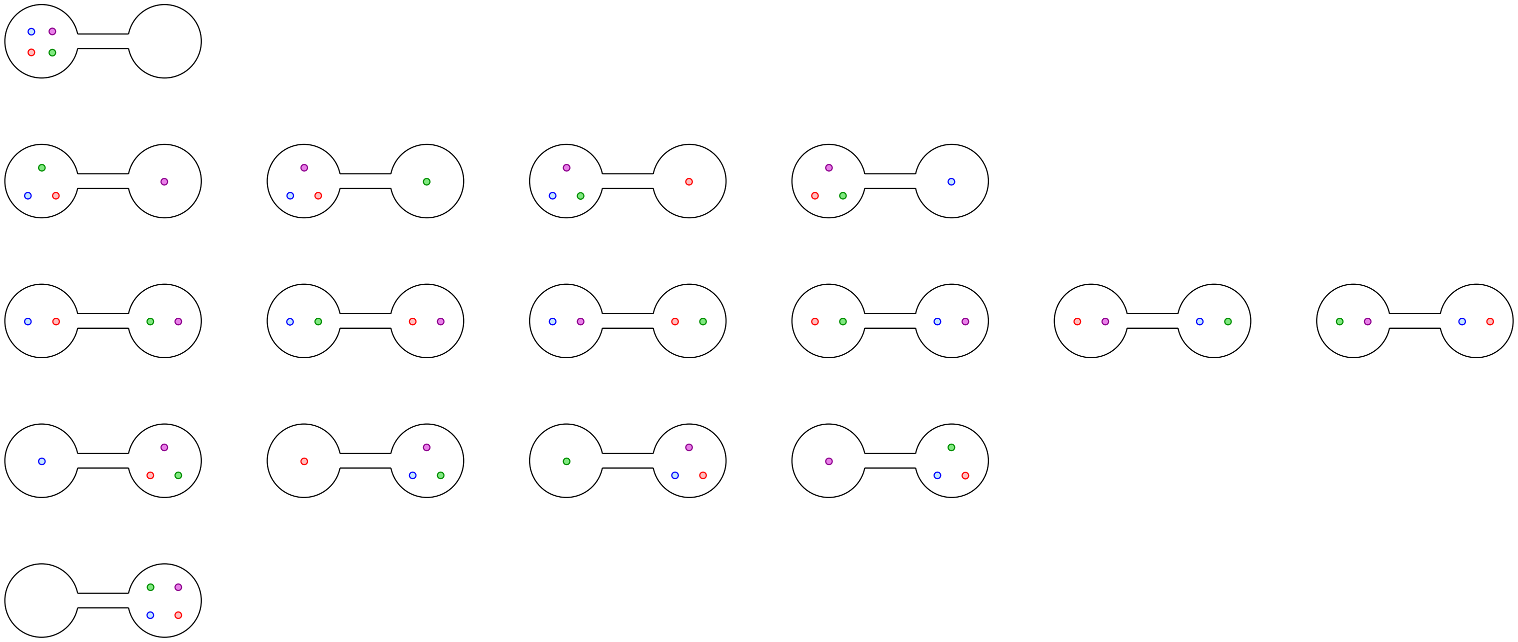


$\mathbb{P}\{X = 3\} = 1/8$

Modèle simplifié : cas $N = 4$

$2^4 = 16$ configurations microscopiques

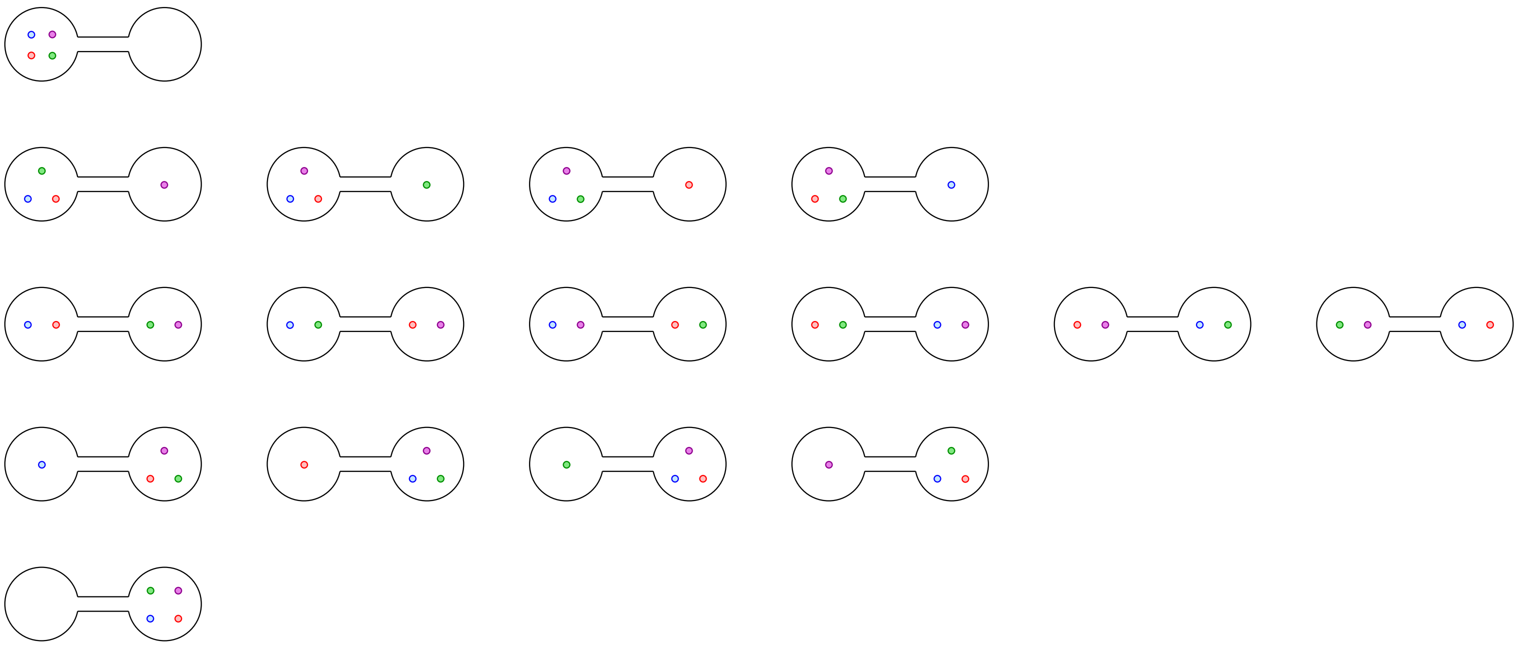
$4 + 1 = 5$ configurations macroscopiques



Modèle simplifié : cas $N = 4$

$2^4 = 16$ configurations microscopiques

$4 + 1 = 5$ configurations macroscopiques



$1/16$

$4/16$

$6/16$

$4/16$

$1/16$

Probabilités des configurations macroscopiques

	$X = 0$	$X = 1$	$X = 2$	$X = 3$	$X = 4$
$N = 1$	1/2	1/2			
$N = 2$	1/4	2/4	1/4		
$N = 3$	1/8	3/8	3/8	1/8	
$N = 4$	1/16	4/16	6/16	4/16	1/16

Probabilités des configurations macroscopiques

	$X=0$	$X=1$	$X=2$	$X=3$	$X=4$	$X=5$
$N=1$	$1/2$	$1/2$				
$N=2$	$1/4$	$2/4$	$1/4$			
$N=3$	$1/8$	$3/8$	$3/8$	$1/8$		
$N=4$	$1/16$	$4/16$	$6/16$	$4/16$	$1/16$	
$N=5$	$1/32$	$5/32$	$10/32$	$10/32$	$5/32$	$1/32$

Probabilités des configurations macroscopiques

	$X = 0$	$X = 1$	$X = 2$	$X = 3$	$X = 4$	$X = 5$
$N = 1$	$1/2$	$1/2$				
$N = 2$	$1/4$	$2/4$	$1/4$			
$N = 3$	$1/8$	$3/8$	$3/8$	$1/8$		
$N = 4$	$1/16$	$4/16$	$6/16$	$4/16$	$1/16$	
$N = 5$	$1/32$	$5/32$	$10/32$	$10/32$	$5/32$	$1/32$

Probabilités des configurations macroscopiques

	$X=0$	$X=1$	$X=2$	$X=3$	$X=4$	$X=5$
$N=1$	$1/2$	$1/2$				
$N=2$	$1/4$	$2/4$	$1/4$			
$N=3$	$1/8$	$3/8$	$3/8$	$1/8$		
$N=4$	$1/16$	$4/16$	$6/16$	$4/16$	$1/16$	
$N=5$	$1/32$	$5/32$	$10/32$	$10/32$	$5/32$	$1/32$

Triangle de Pascal

La loi binomiale

Cas général : pour N atomes,

$$\mathbb{P}\{X = k\} = \frac{1}{2^N} C_N^k$$

C_N^k (aussi noté $\binom{N}{k}$) : nombre de choix de k objets parmi N

La loi binomiale

Cas général : pour N atomes,

$$\mathbb{P}\{X = k\} = \frac{1}{2^N} C_N^k$$

C_N^k (aussi noté $\binom{N}{k}$) : nombre de choix de k objets parmi N

$$C_N^k = \frac{N(N-1)\dots(N-k+1)}{k(k-1)\dots 2 \cdot 1} = \frac{N!}{(N-k)!k!}$$

où $N! = N(N-1)(N-2)\dots 2 \cdot 1$ est la factorielle de N.

La loi binomiale

Cas général : pour N atomes,

$$\mathbb{P}\{X = k\} = \frac{1}{2^N} C_N^k$$

C_N^k (aussi noté $\binom{N}{k}$) : nombre de choix de k objets parmi N

$$C_N^k = \frac{N(N-1)\dots(N-k+1)}{k(k-1)\dots 2 \cdot 1} = \frac{N!}{(N-k)!k!}$$

où $N! = N(N-1)(N-2)\dots 2 \cdot 1$ est la factorielle de N.

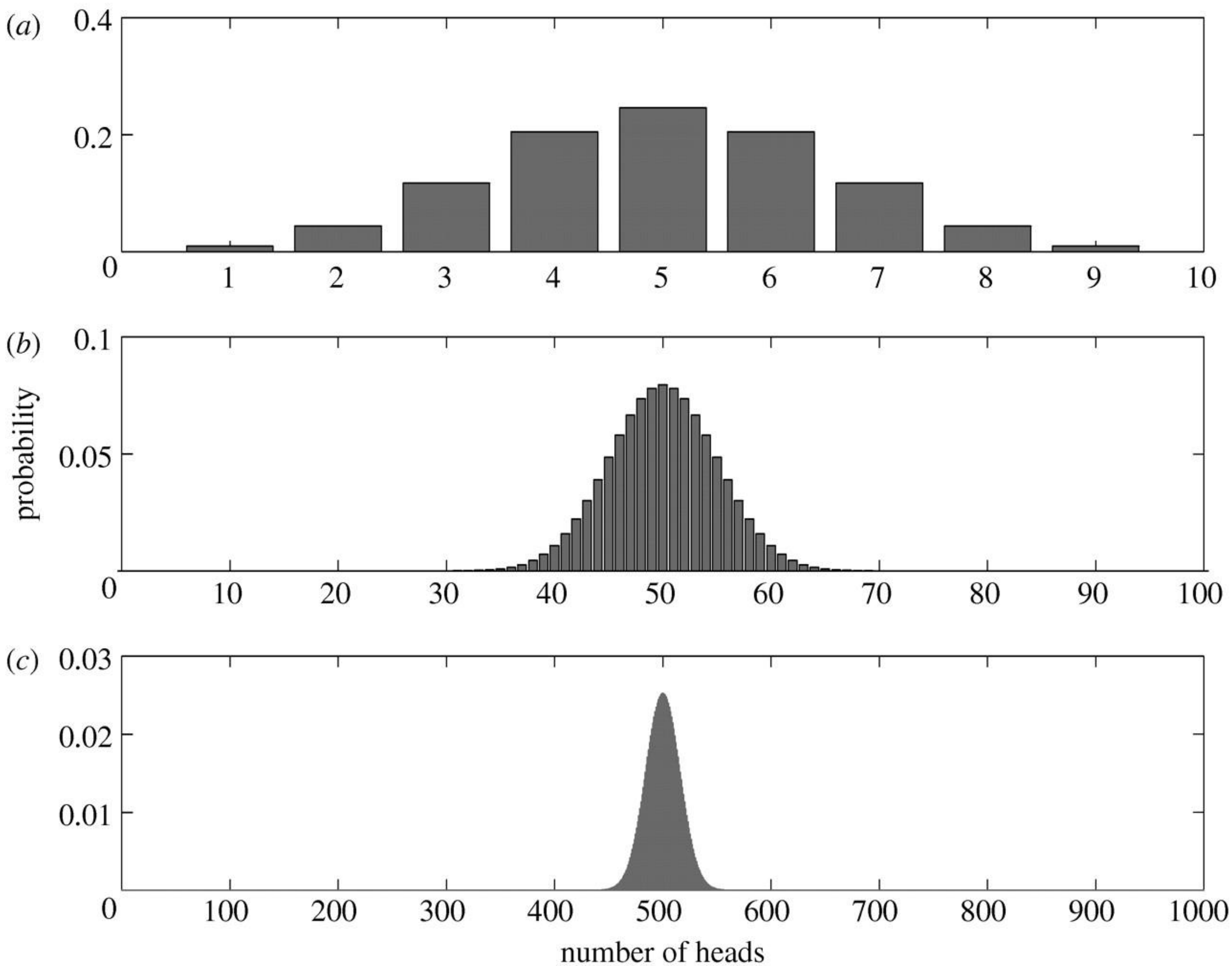
$1! = 1$ $\qquad$ $5! = 120$

$2! = 2 \cdot 1 = 2$ $\qquad$ $10! = 3628800$

$3! = 3 \cdot 2 \cdot 1 = 6$ $\qquad$ $15! = 1307674368000$

$4! = 4 \cdot 3 \cdot 2 \cdot 1 = 24$ $\qquad$ $20! = 2432902008176640000$

La loi des grands nombres



Lorsque N augmente, la probabilité que $X/N \simeq 1/2$ tend vers 1.

La formule de Moivre–Laplace

Plus précisément, on sait montrer que

$$\frac{1}{2^N} C_N^k \sim \frac{1}{\sqrt{\pi N/2}} \mathrm{e}^{-(k-N/2)^2/(N/2)} \qquad \text{pour } N \gg 1$$

(loi de Gauss) où $\mathrm{e} = 2.71828\dots$ est la constante de Néper. Cette probabilité est très petite dès que $|k/N - 1/2| \gg 1/\sqrt{N}$.

La formule de Moivre–Laplace

Plus précisément, on sait montrer que

$$\frac{1}{2^N} C_N^k \sim \frac{1}{\sqrt{\pi N/2}} \mathrm{e}^{-(k-N/2)^2/(N/2)} \qquad \text{pour } N \gg 1$$

(loi de Gauss) où $\mathrm{e} = 2.71828\ldots$ est la constante de Néper. Cette probabilité est très petite dès que $|k/N - 1/2| \gg 1/\sqrt{N}$.

La preuve utilise la formule de Stirling :

$$N! \simeq \sqrt{2\pi N} N^N \mathrm{e}^{-N}$$

pour $N \gg 1$

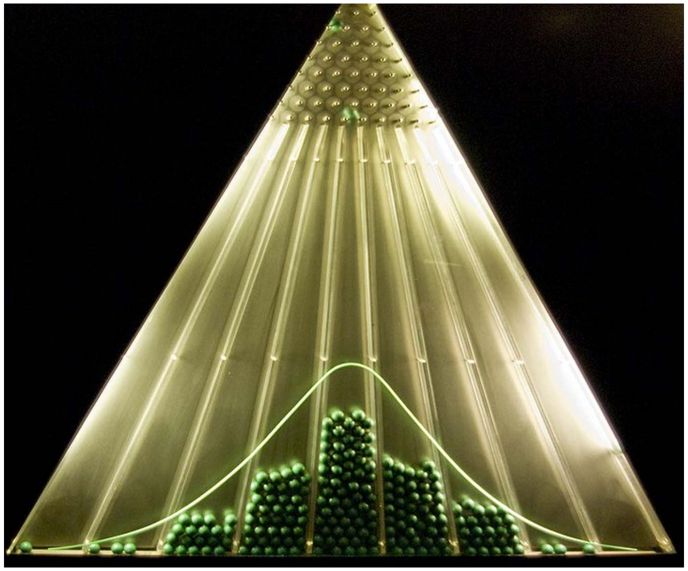


Planche de Galton

Conséquences de la loi des grands nombres en physique statistique

- Dans notre modèle simplifié, avec très grande probabilité, la moitié des atomes se trouvera de chaque côté du récipient (en fait, la moitié à $1/\sqrt{N} \simeq 10^{-12}$ près)

Conséquences de la loi des grands nombres en physique statistique

- Dans notre modèle simplifié, avec très grande probabilité, la moitié des atomes se trouvera de chaque côté du récipient (en fait, la moitié à $1/\sqrt{N} \simeq 10^{-12}$ près)

- Le même raisonnement s'applique si l'on divise le récipient en plus de deux parties.
  Cela montre qu'il y aura à peu près le même nombre d'atomes dans différentes parties de même volume (tant que ce nombre est grand)

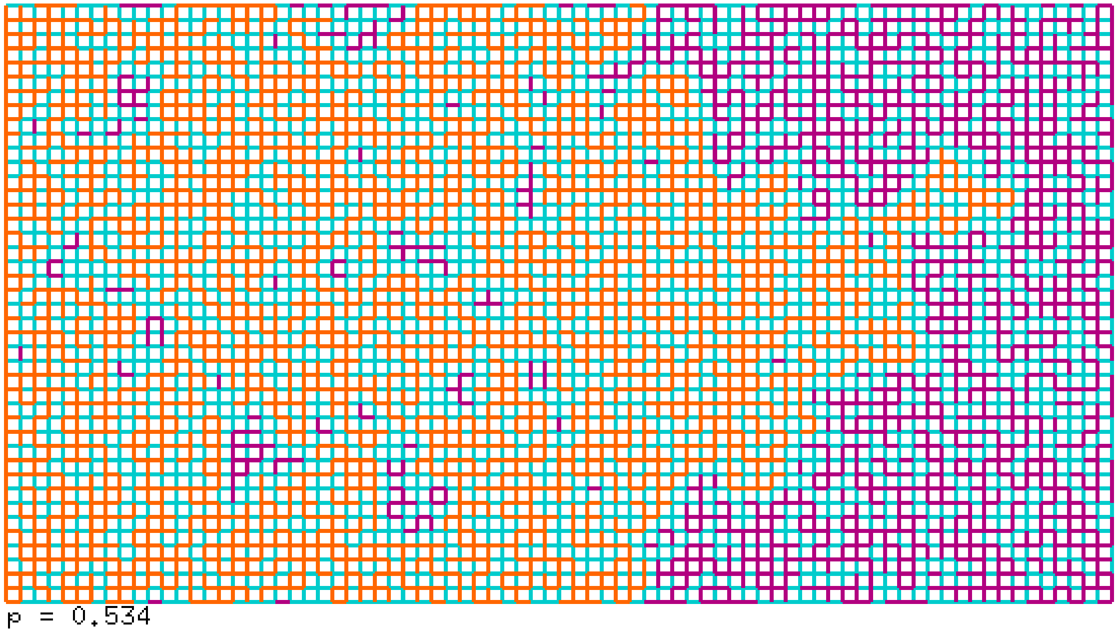
Conséquences de la loi des grands nombres en physique statistique

- Dans notre modèle simplifié, avec très grande probabilité, la moitié des atomes se trouvera de chaque côté du récipient (en fait, la moitié à $1/\sqrt{N} \simeq 10^{-12}$ près)

- Le même raisonnement s'applique si l'on divise le récipient en plus de deux parties.
  Cela montre qu'il y aura à peu près le même nombre d'atomes dans différentes parties de même volume (tant que ce nombre est grand)

- La loi des gaz parfaits s'obtient de manière similaire, en considérant aussi les vitesses des atomes
  La seule différence est que l'énergie totale est constante (énergie cinétique: somme des $\frac{1}{2}mv^2$)

2. Percolation



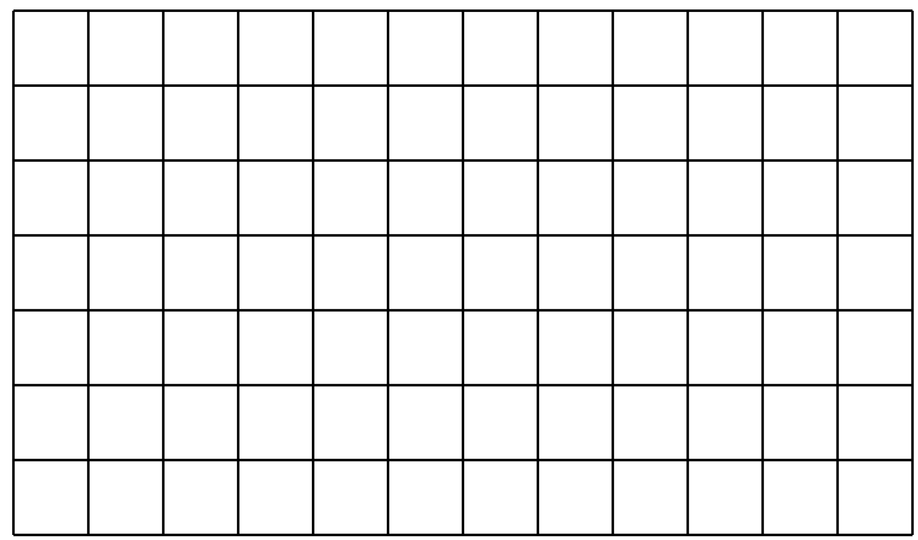
La percolation

Question : Est-ce que l'eau passe à travers un matériau poreux?

La percolation

Question : Est-ce que l'eau passe à travers un matériau poreux?

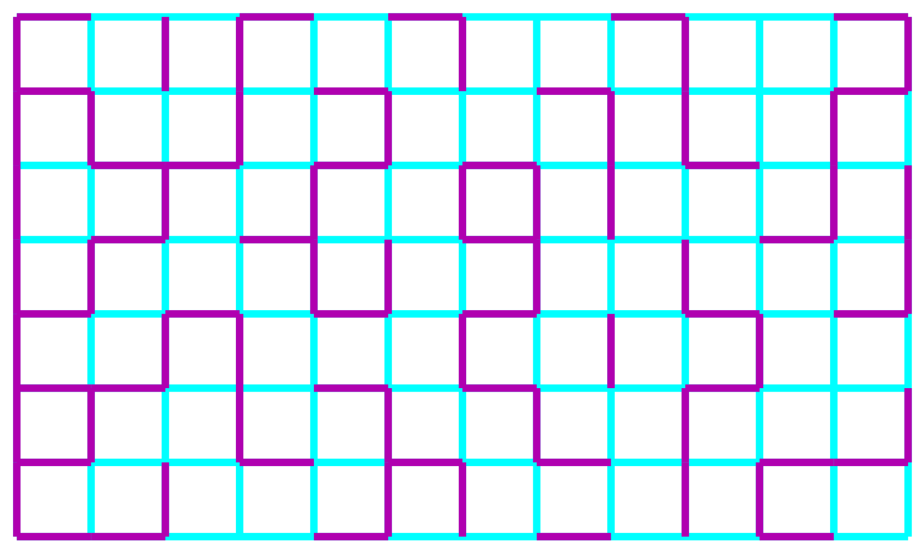
Modèle : Réseau carré



La percolation

Question : Est-ce que l'eau passe à travers un matériau poreux?

Modèle : Réseau carré
Liens ouverts avec proba p
et fermés avec proba $1 - p$



La percolation

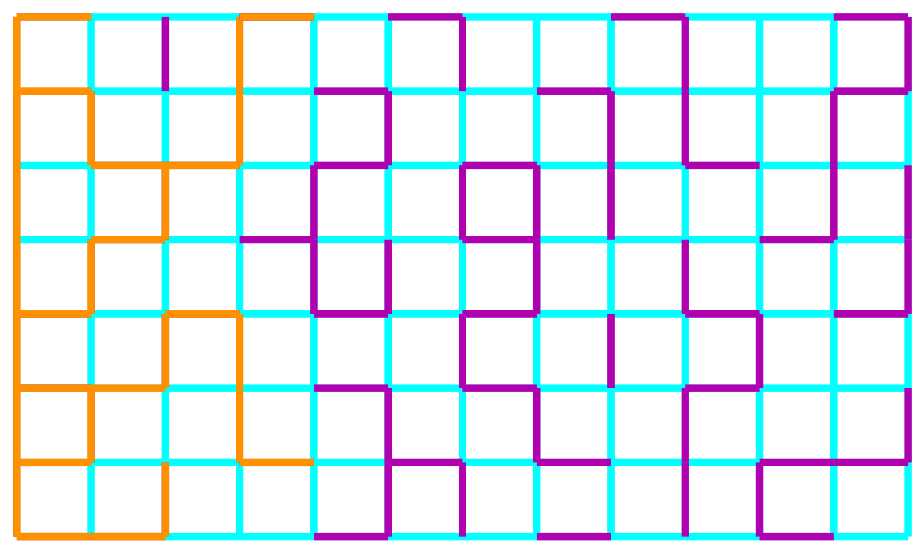
Question : Est-ce que l'eau passe à travers un matériau poreux?

Modèle : Réseau carré

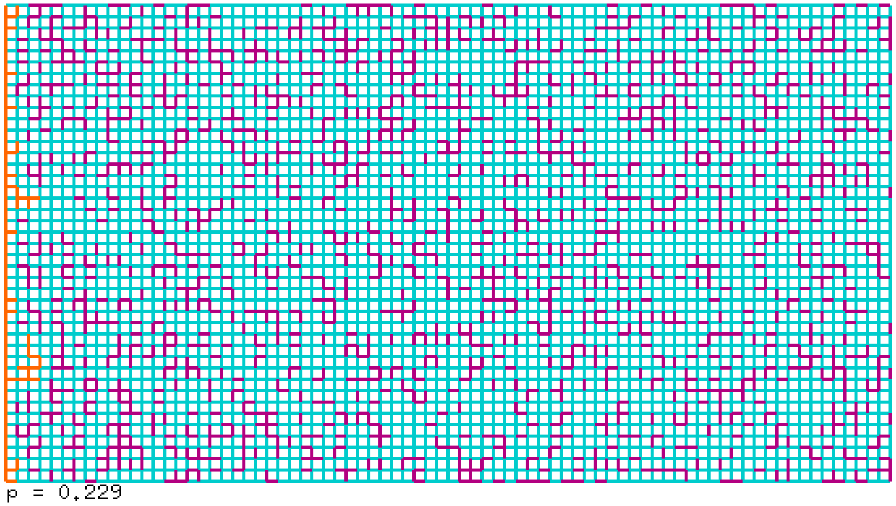
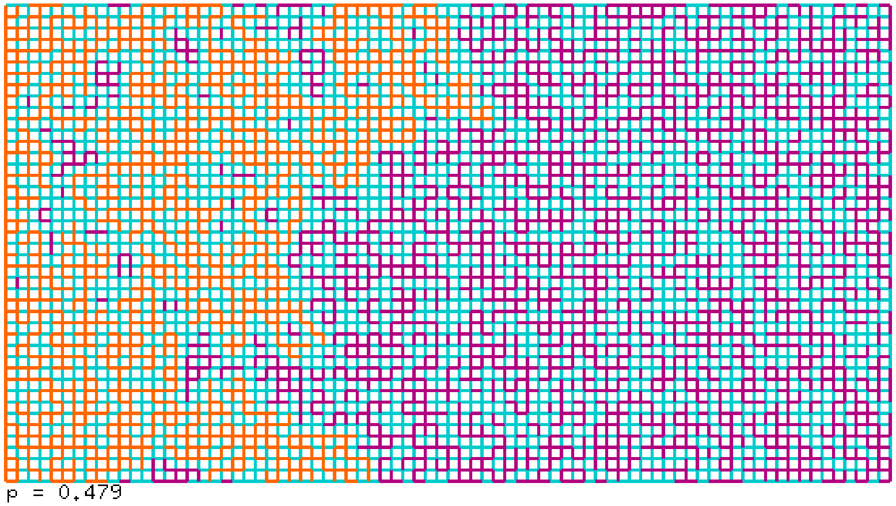
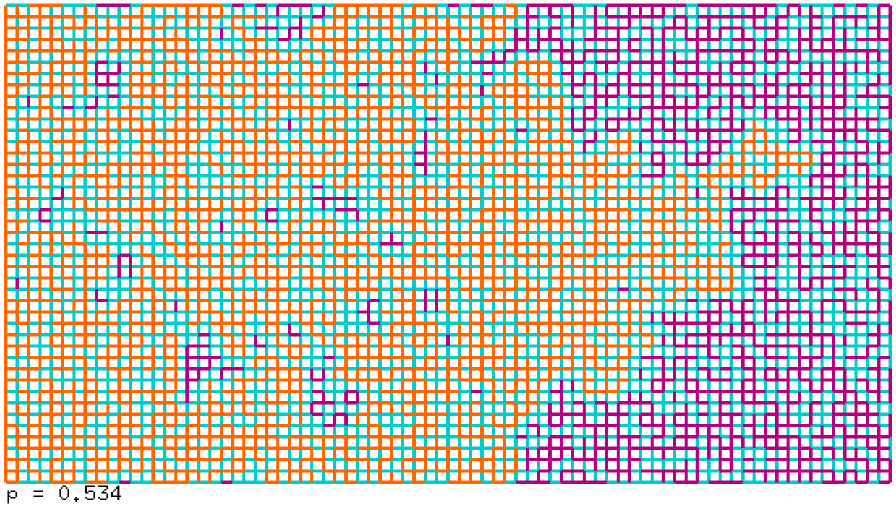
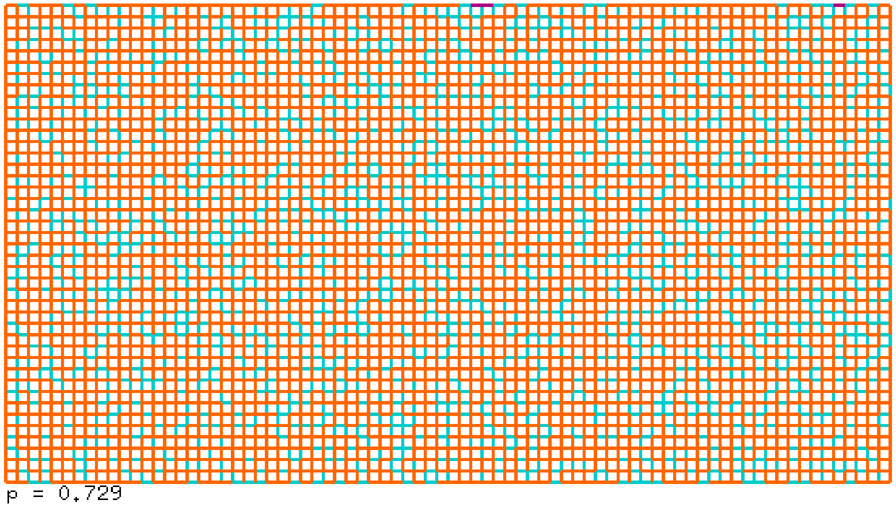
Liens ouverts avec proba p

et fermés avec proba $1 - p$

Quelle est la probabilité que la composante connexe ouverte issue du bord gauche aille jusqu'au bord droit?



La percolation

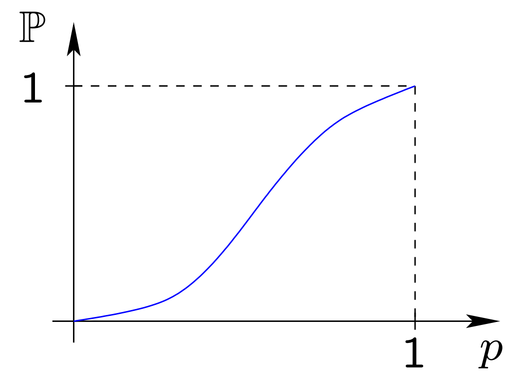





http://www.youtube.com/watch?v=cI_B9iqsB9E

Analyse mathématique

$\mathbb{P}(p) =$ proba qu'une composante ouverte aille de gauche à droite si la proba qu'un lien soit ouvert vaut p

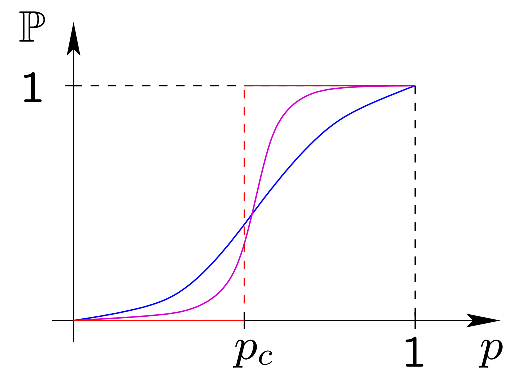
$p = 0 \Rightarrow \mathbb{P}(0) = 0$
$p = 1 \Rightarrow \mathbb{P}(1) = 1$
$p_2 > p_1 \Rightarrow \mathbb{P}(p_2) > \mathbb{P}(p_1)$



Analyse mathématique

$\mathbb{P}(p) =$ proba qu'une composante ouverte aille de gauche à droite si la proba qu'un lien soit ouvert vaut p

$p = 0 \Rightarrow \mathbb{P}(0) = 0$
$p = 1 \Rightarrow \mathbb{P}(1) = 1$
$p_2 > p_1 \Rightarrow \mathbb{P}(p_2) > \mathbb{P}(p_1)$



Loi 0-1 :
Lorsque la taille du réseau tend vers l'infini, $\mathbb{P}(p)$ tend vers 0 ou 1

Conséquence: dans la limite d'un système infini, il existe un p critique p_c tel que

$$\mathbb{P}(p) = \begin{cases} 0 & \text{si } p < p_c \\ 1 & \text{si } p > p_c \end{cases}$$

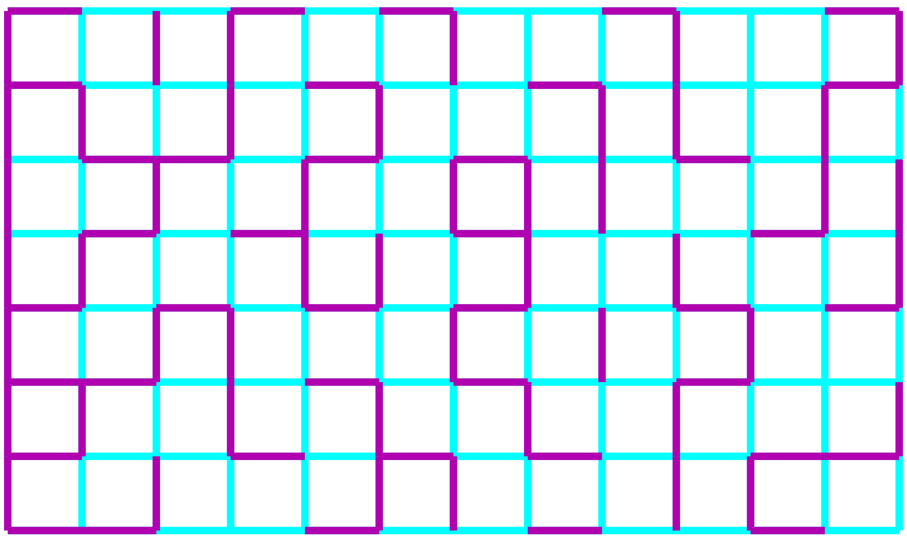
Analyse mathématique

Théorème (Harris 1960, Kesten 1980) :
Pour un réseau carré en dimension 2, on a $p_c = 1/2$

Analyse mathématique

Théorème (Harris 1960, Kesten 1980) :
Pour un réseau carré en dimension 2, on a $p_c = 1/2$

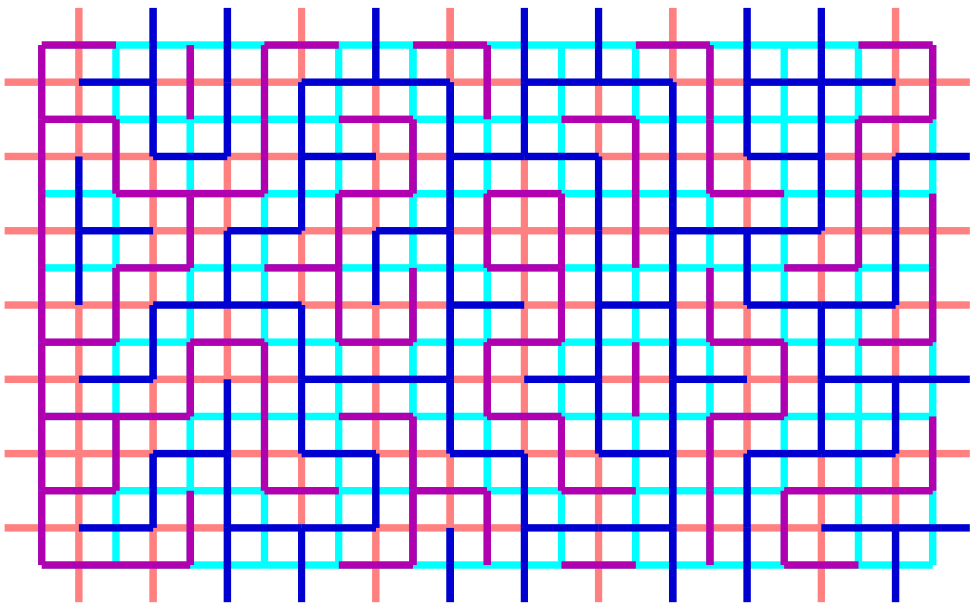
Idée intuitive : argument de symétrie



Analyse mathématique

Théorème (Harris 1960, Kesten 1980) :
Pour un réseau carré en dimension 2, on a $p_c = 1/2$

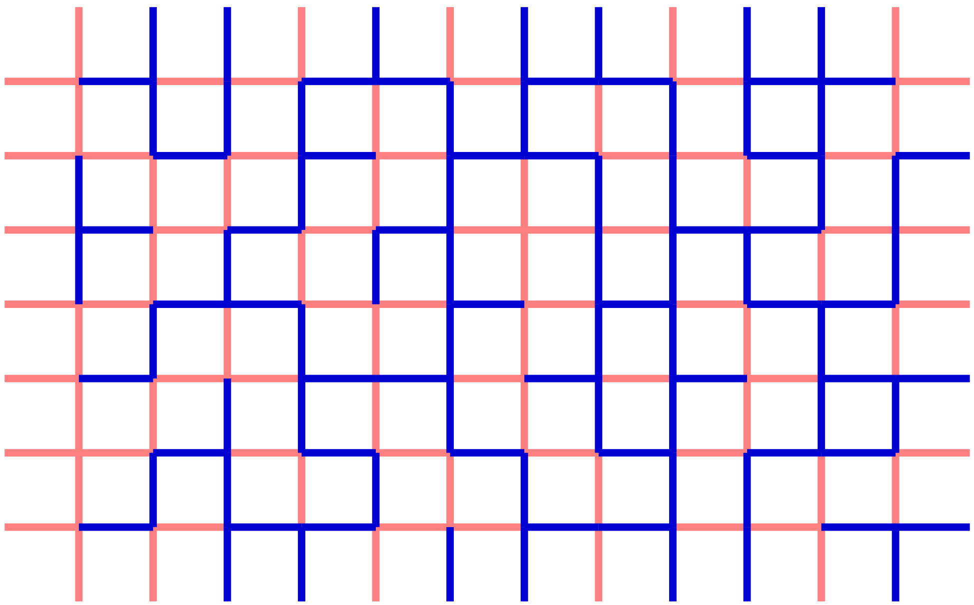
Idée intuitive : argument de symétrie via le réseau dual



Analyse mathématique

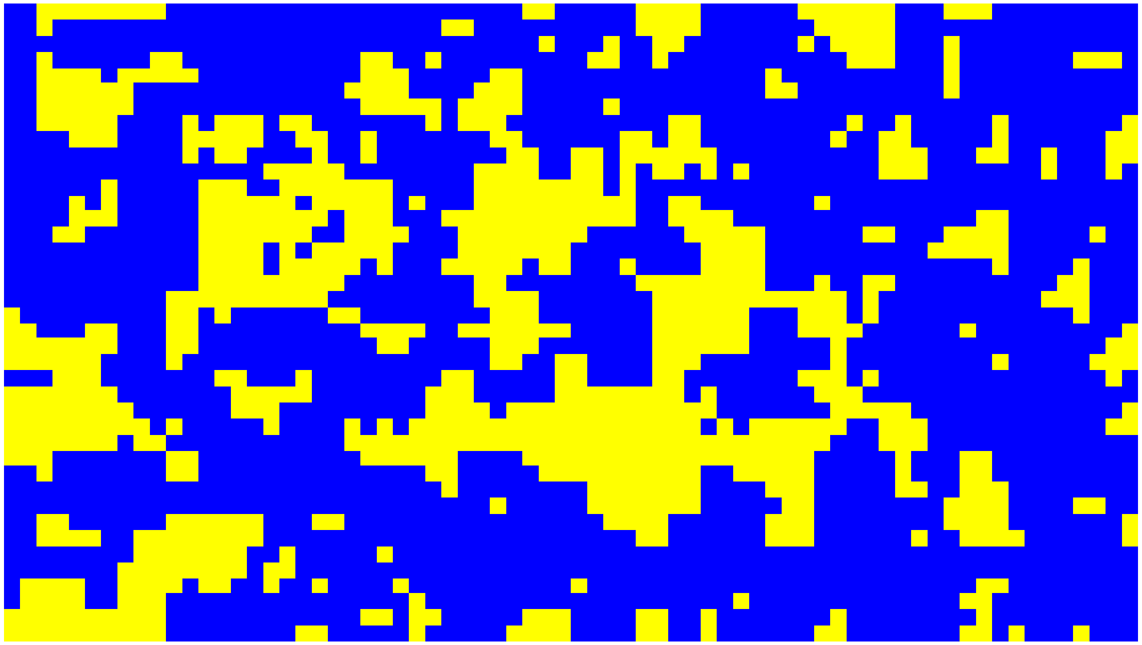
Théorème (Harris 1960, Kesten 1980) :
Pour un réseau carré en dimension 2, on a $p_c = 1/2$

Idée intuitive : argument de symétrie via le réseau dual



$$1 - \mathbb{P}(p) = \mathbb{P}(1-p) \qquad \Rightarrow \qquad p_c = 1 - p_c \qquad \Rightarrow \qquad p_c = 1/2$$

3. Le modèle d'Ising



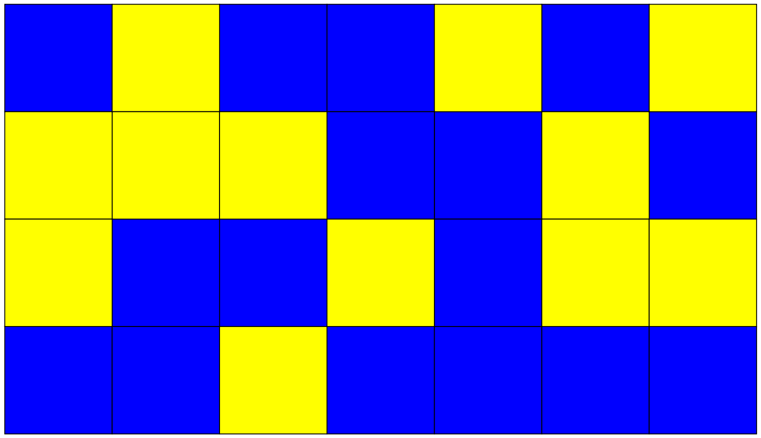
Le modèle d'Ising

Un aimant est constitué d'un grand nombre d'aimants élémentaires, appelés spins.
Dans le modèle d'Ising, ces spins ne prennent que deux valeurs: "up" (vers le haut) et "down" (vers le bas).

Le modèle d'Ising

Un aimant est constitué d'un grand nombre d'aimants élémentaires, appelés spins.
Dans le modèle d'Ising, ces spins ne prennent que deux valeurs: "up" (vers le haut) et "down" (vers le bas).

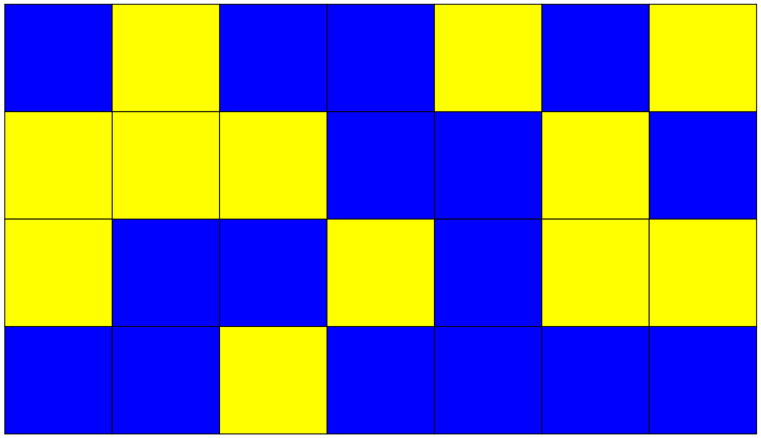
Une configuration est définie par la valeur du spin en chaque point du réseau.



Le modèle d'Ising

Un aimant est constitué d'un grand nombre d'aimants élémentaires, appelés spins.
Dans le modèle d'Ising, ces spins ne prennent que deux valeurs: "up" (vers le haut) et "down" (vers le bas).

Une configuration est définie par la valeur du spin en chaque point du réseau.



Règles de base :

- ▷ chaque spin a envie d'imiter ses voisins
- ▷ chaque spin a envie de s'aligner sur le champ magnétique h

Le modèle d'Ising

L'énergie d'une configuration mesure son degré d'insatisfaction:

$$\begin{aligned} E = {} & \text{nombre de voisins de couleur différente} \\ & - h \cdot (\text{nombre de spins up} - \text{nombre de spins down}) \end{aligned}$$

Le modèle d'Ising

L'énergie d'une configuration mesure son degré d'insatisfaction:

$$E = \text{nombre de voisins de couleur différente} \\ - h \cdot (\text{nombre de spins up} - \text{nombre de spins down})$$

▷ Si $h > 0$, l'énergie est minimale si tous les spins sont up
▷ Si $h < 0$, l'énergie est minimale si tous les spins sont down

Le modèle d'Ising

L'énergie d'une configuration mesure son degré d'insatisfaction:

$$E = \text{nombre de voisins de couleur différente}$$
$$- h \cdot (\text{nombre de spins up} - \text{nombre de spins down})$$

- ▷ Si $h > 0$, l'énergie est minimale si tous les spins sont up
- ▷ Si $h < 0$, l'énergie est minimale si tous les spins sont down

Rôle de la température T :

- ▷ Si $T = 0$ l'aimant est dans une configuration d'énergie minimale
- ▷ Si $T = \infty$ toutes les configurations ont même probabilité
- ▷ Si $0 < T < \infty$, la probabilité d'une configuration est proportionnelle à

$$e^{-E/T}$$

Dynamique de Glauber

Contrairement au cas de la percolation, les spins ne sont pas indépendants

La distribution de probabilité est donc difficile à simuler

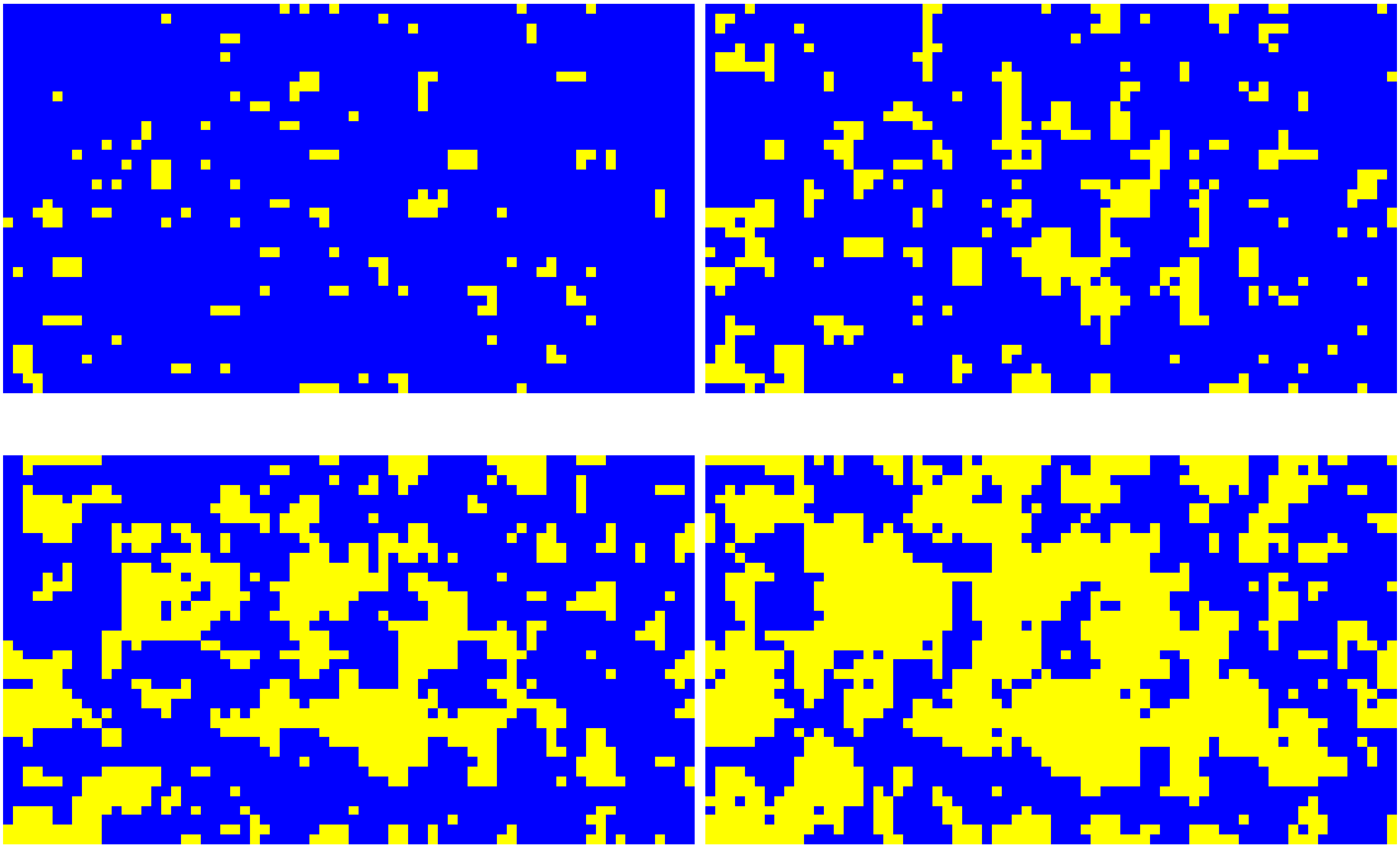
Dynamique de Glauber

Contrairement au cas de la percolation, les spins ne sont pas indépendants
La distribution de probabilité est donc difficile à simuler

L'algorithme de Metropolis avec dynamique de Glauber permet de simuler cette distribution :

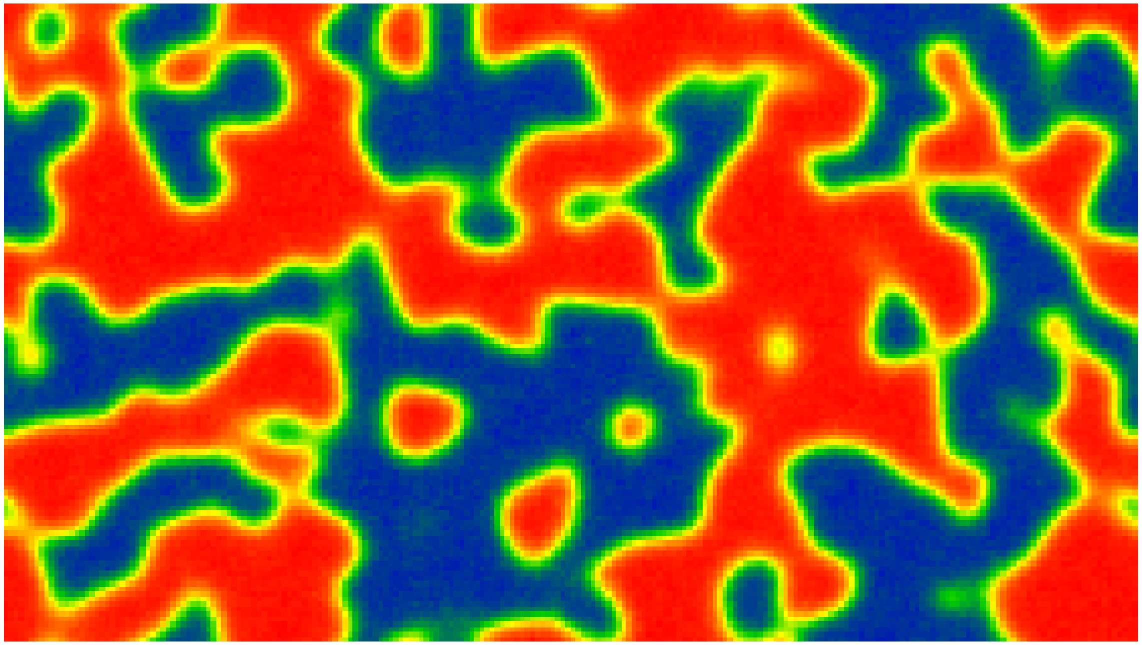
- ▷ Choisir in spin au hasard
- ▷ Calculer le changement d'énergie si on retourne ce spin
- ▷ Si l'énergie diminue, retourner le spin
- ▷ Si l'énergie augmente de ΔE, retourner le spin avec probabilité $\mathrm{e}^{-\Delta E/T}$
- ▷ Recommencer

Dynamique de Glauber $h = 1$, $T = 5/3$



http://www.youtube.com/watch?v=UFQe50ViXGU

4. L'équation d'Allen–Cahn



L'équation d'Allen–Cahn

Cette équation décrit la séparation de phases dans un alliage.
Elle ressemble au modèle d'Ising, avec quelques différences

- ▷ Les spins prennent des valeurs dans $\mathbb{R}$ au lieu de $\{-1, 1\}$
- ▷ Les spins ont envie d'être proches de -1 ou $+1$
- ▷ Les spins ont envie d'imiter leurs voisins
- ▷ Les spins ont envie de s'aligner avec le champ magnétique

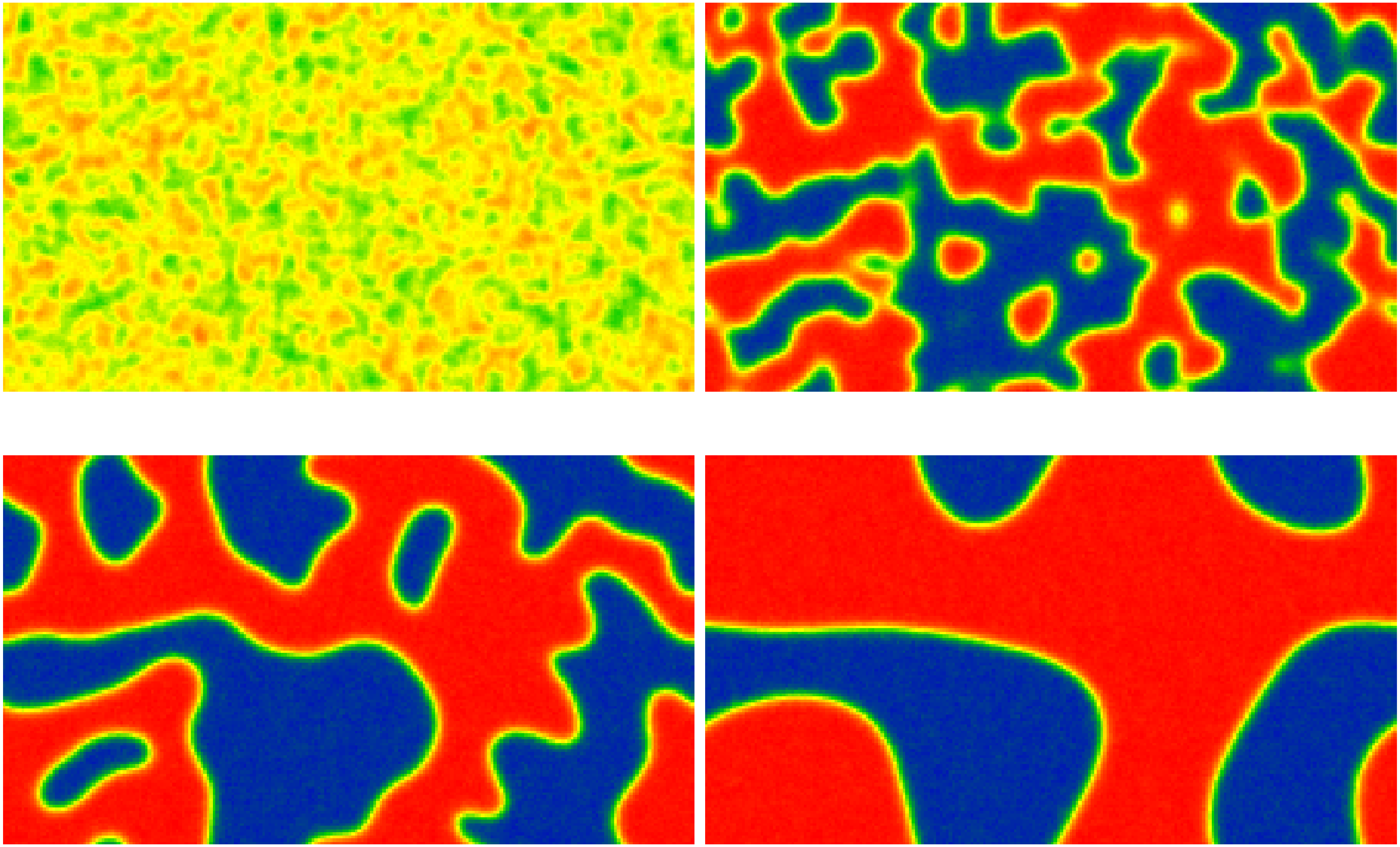
L'équation d'Allen–Cahn

Cette équation décrit la séparation de phases dans un alliage. Elle ressemble au modèle d'Ising, avec quelques différences

- ▷ Les spins prennent des valeurs dans $\mathbb{R}$ au lieu de $\{-1, 1\}$
- ▷ Les spins ont envie d'être proches de -1 ou $+1$
- ▷ Les spins ont envie d'imiter leurs voisins
- ▷ Les spins ont envie de s'aligner avec le champ magnétique

Dans les simulations qui suivent, le champ magnétique est nul, mais on a ajouté une force qui assure que la somme des spins vaut toujours 0 (l'aimantation totale est nulle)

L'équation d'Allen–Cahn



http://www.youtube.com/watch?v=mu4QeOMIv74

Pour en savoir plus

- Rangez-moi ces bouquins !
  Images des Maths, CNRS, 2012
  http://images.math.cnrs.fr/Rangez-moi-ces-bouquins.html
- La probabilité d'extinction d'une espèce menacée
  Images des Maths, CNRS, 2013
  http://images.math.cnrs.fr/La-probabilite-d-extinction-d-une.html
- Quelques simulations sur YouTube :
  http://www.youtube.com/channel/UCq09j1kihaQzlTpxJriVWMQ/videos
- Cette présentation :
  http://www.univ-orleans.fr/mapmo/membres/berglund/galois13.pdf