Théorème H et unitarité de S

Autor(en): **Inagaki, M. / Wanders, G. / Piron, C.**

Objekttyp: **Article**

Zeitschrift: **Helvetica Physica Acta**

Band (Jahr): **27 (1954)**

Heft I

PDF erstellt am: **22.07.2024**

Persistenter Link: https://doi.org/10.5169/seals-112504

Théorème H et Unitarité de S

par M. Inagaki, G. Wanders*), Genève, et C. Piron, Lausanne.

(23. I. 1954.)

Summary. It is shown that BOLZMANN's H-theorem holds for finite, definite and doubly normalised transition probabilities A_{ik}.

M. STUECKELBERG a attiré notre attention sur le fait que sa déduction du théorème H de l'unitarité de $\boldsymbol{S}$[1]) n'est pas satisfaisante. D'une part, les matrices $\boldsymbol{A}$ ne forment pas un groupe continu, une variation finie de l'entropie ne peut donc se déduire de la variation infinitésimale. D'autre part, il reste à établir que $(\boldsymbol{A} - \mathbf{1})$ peut toujours être décomposée en une somme de matrices cycliques à coefficients positifs.

Nous proposons ici une démonstration générale du théorème H, basée sur l'unitarité de $\boldsymbol{S}$, indépendante de celle présentée en I. L'*état thermodynamique* d'un *système* à l'instant t est décrit par une *distribution de probabilité* $w = w_i$ sur les n *états* qu'un micro-observateur peut distinguer ($i = 1, \ldots, n$). L'état w'' à l'instant t'' est relié à l'état w' à l'instant antérieur t' ($t'' \geqslant t'$) par les *probabilités de transition* A_{ik}:

$$w_i'' = \sum_k A_{ik}\, w_k' \quad (w'' = \boldsymbol{A}\, w'). \tag{1}$$

La probabilité de transition A_{ik} se déduit de l'élément S_{ik} de la *matrice de transition* $\boldsymbol{S}$:

$$A_{ik} = |S_{ik}|^2 \geqslant 0 . \tag{2}$$

L'unitarité de $\boldsymbol{S}$ ($\boldsymbol{S}\boldsymbol{S}^\dagger = \boldsymbol{S}^\dagger \boldsymbol{S} = \mathbf{1}$) implique une *double normalisation* de $\boldsymbol{A}$:

$$\sum_i A_{ik} = \sum_k A_{ik} = 1 . \tag{3}$$

D'autre part, l'*entropie* S du système à un instant donné est fonctionnelle de la distribution de probabilité w à cet instant: $S = S[w]$.

---

*) Bénéficiaire de l'aide financière de la Commission Suisse de l'énergie Atomique (C.S.A.).

[1]) STUECKELBERG, Théorème H et unitarité de $\boldsymbol{S}$, Helv. Phys. Acta **25**, 577 (1952). (Cet article est désigné dans la suite par I.)

L'idée de M. Stueckelberg est que *le théorème H de* Boltzmann *résulte de l'unitarité de* $\boldsymbol{S}$ (de la double normalisation de $\boldsymbol{A}$) si $S[w]$ est une *fonctionnelle symétrique* en les w_i et si la *dérivée fonctionnelle* $-g_i = \delta S[w]/\delta w_i$ est «*monotone*» *décroissante*. On doit donc avoir, compte tenu de (1) et (3):

$$\Delta S = S[w''] - S[w'] \geqslant 0 \tag{4}$$

si:

$$S[w^*] = S[w] \quad (\textit{symétrie}), \tag{5}$$

où w^* se déduit de w par permutation des w_i, et:

$$(g_i - g_k)\,(w_i - w_k) \geqslant 0 \quad (\text{«}\textit{monotonie}\text{»}). \tag{6}$$

Ce théorème a été démontré par l'un de nous (M. I.) dans le cas d'une fonctionnelle symétrique quelconque. La démonstration étant assez longue, nous nous limitons ici au cas:

$$S = \sum_i f(w_i)\,; \quad g_i = g(w_i) = -\frac{df}{dw}(w_i)\,. \tag{7}$$

Soient W et w les suites obtenues à partir des suites w'' et w' en réordonnant leurs termes en ordre décroissant:

$$W_i \geqslant W_{i+1}\,; \quad w_i \geqslant w_{i+1}\,. \tag{8}$$

W et w sont liées par une matrice $\boldsymbol{B}$:

$$W_i = \sum_k B_{ik}\, w_k \quad (W = \boldsymbol{B}\, w) \tag{9}$$

qui satisfait les mêmes conditions (2) et (3) que A. En effet, $\boldsymbol{B}$ se déduit de $\boldsymbol{A}$ par permutations de lignes et colonnes qui laissent inchangées les sommes apparaissant dans (3). D'autre part $\Delta S = S[W] - S[w]$, en vertu de la symétrie (5). Ainsi, compte tenu de (7) et (9), avec $G_i = g(W_i)$ et $b_{ik} = (B_{ik} - \delta_{ik})$, on a:

$$\Delta S = \sum_i [f(W_i) - f(w_i)] = -\sum_i \int_{w_i}^{W_i} g(x)dx \geqslant -\sum_i \sum_k G_i\, b_{ik}\, w_k \tag{10}$$

car, par la monotonie (6):

$$-\int_{w_i}^{W_i} g(x)\,dx \geqslant -G_i(W_i - w_i)\,.$$

La double normalisation de $\boldsymbol{B}$ donne:

$$\sum_i b_{ik} = \sum_k b_{ik} = 0\,. \tag{11}$$

Ces relations permettent d'éliminer dans (10) les $(2n-1)$ éléments b_{1k} et b_{i1}, et l'on obtient:

$$\Delta S \geqslant -\sum_{i\geqslant 2}\sum_{k\geqslant 2}(G_1-G_i)(w_1-w_k)\,b_{ik} =$$

$$= -\sum_{i\geqslant 2}\sum_{k\geqslant 2} b_{ik}\sum_{l=2}^{i}(G_{l-1}-G_l)\sum_{m=2}^{k}(w_{m-1}-w_m)\,.$$

En inversant l'ordre des sommations:

$$\Delta S \geqslant -\sum_{l\geqslant 2}\sum_{m\geqslant 2}(G_{l-1}-G_l)(w_{m-1}-w_m)\,\beta_{lm} \tag{12}$$

avec

$$\beta_{lm} = \sum_{i\geqslant l}\sum_{k\geqslant m} b_{ik}\,. \tag{13}$$

En vertu de la monotonie de g et de la définition (8) des suites W et w, le produit de deux différences dans (12) est toujours positif. Il reste donc à démontrer que $\beta_{lm} \leqslant 0$. Si $l \geqslant m$, on élimine les termes diagonaux (négatifs) de $\boldsymbol{b}$ à l'aide de la seconde égalité (11): $b_{ii} = -\Sigma_k b'_{ik}$; $b'_{ik} = b_{ik}(1-\delta_{ik})$. On obtient:

$$\beta_{lm} = \sum_{i\geqslant l}\sum_{k\geqslant m} b'_{ik} - \sum_{i\geqslant l}\sum_{k} b'_{ik} = -\sum_{i\geqslant l}\sum_{k\leqslant m-1} b_{ik} \leqslant 0 \tag{14}$$

car, dans la dernière somme, $i \neq k$, et $b_{ik} = B_{ik} \geqslant 0$. Si $l \leqslant m$, on utilise $b_{kk} = -\Sigma_i b'_{ik}$:

$$\beta_{lm} = -\sum_{i\leqslant l-1}\sum_{k\geqslant m} b_{ik} \leqslant 0\,. \tag{14'}$$

On ne rencontre aucune difficulté lorsque le nombre des états devient infiniment grand ($n \to \infty$)*).

Genève, Institut de Physique de l'Université.

---

*) Si $S = -\Sigma_i w_i \log w_i$, la démonstration signalée en I, due à M. Pauli, et valable pour des transitions infinitésimales, peut être étendue au cas des transitions finies envisagé ici. En effet:

$$w_i'' \int_1^{w_k'/w_i''} dt \log t = w_k'(\log w_k' - \log w_i'') + w_i'' - w_k' \geqslant 0\,.$$

C'est-à-dire:

$$-w_k' \log w_i'' \geqslant -w_k' \log w_k' - w_k' + w_i''.$$

Donc:

$$\begin{aligned} \Delta S &= \Sigma_k w_k' \log w_k' - \Sigma_i w_i'' \log w_i'' \\ &= \Sigma_k w_k' \log w_k' - \Sigma_i \Sigma_k A_{ik} w_k' \log w_i'' \\ &\geqslant \Sigma_k w_k' \log w_k' - \Sigma_i \Sigma_k A_{ik} w_k' \log w_k' - \Sigma_i \Sigma_k A_{ik}(w_k' - w_i'') = 0\,. \end{aligned}$$

Le deuxième membre s'annulle en vertu de la double normalisation de A et de la relation (1) entre w_i'' et w_k'.