Licence 3 et Magistère de Physique — année universitaire 2009/2010

TD de Physique Statistique n^o 1

Rappels de Maths pour la Mécanique Statistique

1 Formulaire utile

1/ Intégrale de Gauss $(\alpha \in \mathbb{R}^{+*})$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{-\alpha x^2} \mathrm{d}x = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \ , \ \int_{-\infty}^{+\infty} x^2\, \mathrm{e}^{-\alpha x^2} \mathrm{d}x = \frac{1}{2\,\alpha}\sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \ , \ \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{ikx}\, \mathrm{e}^{-\alpha x^2} \mathrm{d}x = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}\, \mathrm{e}^{-k^2/(4\,\alpha)} \ .$$

2/ Fonction gamma (ou intégrale eulérienne de seconde espèce)

$$\text{pour } x \in \mathbb{R}^{+*} \ , \quad \text{on définit} \quad \Gamma(x) = \int_0^{+\infty} \mathrm{t}^{x-1} \mathrm{e}^{-t} \mathrm{d}t \ , \quad \text{elle vérifie} \quad \Gamma(x+1) = x\,\Gamma(x) \ .$$

Valeurs particulières : $\Gamma(n) = (n-1)!$ et $\Gamma(n+1/2) = \frac{\sqrt{\pi}}{2^n}(2n-1)!!$
NB : $(2n-1)!! = 1 \times 3 \times 5 \times \cdots \times (2n-1) = (2n)!/(2n)!!$ où $(2n)!! = 1 \times 2 \times 4 \times \cdots \times (2n) = 2^n n!$

3/ Intégrales de Wallis

$$\int_0^{\pi/2} \sin^{2m} x \, \mathrm{d}x = \int_0^{\pi/2} \cos^{2m} x \, \mathrm{d}x = \frac{\Gamma(m+\frac{1}{2})}{\Gamma(m+1)} \frac{\sqrt{\pi}}{2}$$

$$\int_0^{\pi/2} \sin^{2m+1} x \, \mathrm{d}x = \int_0^{\pi/2} \cos^{2m+1} x \, \mathrm{d}x = \frac{\Gamma(m+1)}{\Gamma(m+\frac{3}{2})} \frac{\sqrt{\pi}}{2}$$

4/ Formule de Stirling

$$\log N! = N \log N - N + \frac{1}{2} \log 2\pi N + O(\frac{1}{N})$$

5/ Formule du binôme

$$(p+q)^N = \sum_{n=0}^{N} C_N^n \, p^n q^{N-n}$$

6/ Distribution gaussienne normalisée

$$g(x) = \frac{\mathrm{e}^{-\frac{(x-<x>)^2}{2\sigma^2}}}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \ , \ \int_{\mathbb{R}} g(x)\mathrm{d}x = 1 \ , \ \int_{\mathbb{R}} x\, g(x)\mathrm{d}x = <x> \ , \ \int_{\mathbb{R}} (x - <x>)^2 g(x)\mathrm{d}x = \sigma^2 \ .$$

2 Volume d'une hypersphère

Montrer que le volume d'une hypersphère de rayon R dans $\mathbb{R}^n$ est

$$V_n(R) = \frac{\sqrt{\pi^n}}{\Gamma(\frac{n}{2}+1)} R^n.$$

3 Distribution de Maxwell

La distribution des vitesses de Maxwell est donnée par :

$$f(\vec{v}) = \left(\frac{m}{2\pi k_B T}\right)^{\frac{3}{2}} \exp\left\{-\frac{mv^2}{2k_B T}\right\} ,$$

où m est la masse de la particule considérée, k_B la constante de Boltzmann, T la température et $v^2 = v_x^2 + v_y^2 + v_z^2$.

1/ Interpréter $f(\vec{v})$ en termes probabilistes. Montrer que $f(\vec{v})$ est bien normalisée.

2/ Calculer les valeurs moyennes $<v_x>$, $<v_y>$, $<v_z>$, $<v_x^2>$, $<v_y^2>$, $<v_z^2>$, $<E_c>$ et $<v_x v_y>$.

3/ Déduire de $f(\vec{v})$ la probabilité de trouver v_x entre v_x et $v_x + dv_x$, et ce $\forall(v_y, v_z)$ (loi marginale pour v_x).

4/ Déduire de $f(\vec{v})$ la probabilité de trouver le module de la vitesse entre v et $v + dv$ (on tirera partie de l'isotropie de f et on passera en "coordonnées sphériques"). Vérifier que la distribution de probabilités ainsi obtenue est bien normalisée. Comparer la valeur la plus probable de v et la valeur moyenne $<v>$. Evaluer enfin l'écart quadratique moyen de v, $\sigma_v = \sqrt{<v^2> - <v>^2}$.

4 Marche au hasard

1/ Problème à une dimension

On considère une particule astreinte à se déplacer sur un axe Ox. Son déplacement est aléatoire et se fait par pas discrets identiques de longueur ℓ. La probabilité d'un saut à droite (vers les $x > 0$) est p et la probabilité d'un saut à gauche (vers les $x < 0$) est q. On a évidemment $p + q = 1$. Chaque saut, à droite ou à gauche, est supposé indépendant du précédent (processus de Markov).

On note $P_N(m)$ la probabilité qu'après N sauts la particule soit localisée en $x = m \times \ell$, m entier compris entre $-N$ et N.

(a) Soient n_+ le nombre de sauts à droite et n_- le nombre de sauts à gauche. Exprimer m en fonction de n_+ et N ou de n_- et N.

(b) On note $\Pi_N(n_+)$ la probabilité que la particule ait effectué n_+ sauts à droite parmi les N sauts. Déterminer $\Pi_N(n_+)$ en fonction de p, q, N et n_+, puis vérifier que $\Pi_N(n_+)$ est bien normalisée. En déduire $P_N(m)$ en fonction de p, q, N et m.

(c) Calculer les valeurs moyennes $<n_\pm>$ et en déduire la valeur moyenne de la "position" $<m>$. Calculer les écarts quadratiques moyens de $n_\pm$ et en déduire σ_m celui de m. Discuter le cas particulier $p = q = \frac{1}{2}$. En général, comment se comporte $\frac{\sigma_m}{<m>}$ en fonction de N ?

2/ Limite thermodynamique

On se place dans cette partie dans le cas où N et $n_\pm$ sont "grands". On va montrer qu'alors $P_N(m)$ prend l'allure d'une loi normale, très piquée autour de sa valeur moyenne.

(a) Déterminer $\tilde{n}_+$ la valeur de n_+ pour laquelle $\Pi_N(n_+)$ (ou plutôt son log) est maximale. Développer au second ordre inclus $\log\big(\Pi_N(n_+)\big)$ au voisinage de $\tilde{n}_+$. En déduire une approximation de $\Pi_N(n_+)$ puis la valeur de $\Pi_N(\tilde{n}_+)$. Calculer $<n_+>$ et l'écart quadratique moyen de n_+, et comparer aux résultats du **1.c)**.

(b) A partir de ce qui précède, déterminer $P_N(m)$ et donner $<m>$ et σ_m. Comparer aux résultats du **1.c)**.

3/ Passage au continu

Toujours sous les hypothèses du **2)**, en admettant de plus que $P_N(m)$ varie lentement en fonction de m, déterminer $P(x)dx$ la probabilité que la particule soit située entre x et $x+dx$. Vérifier que $P(x)$ est bien normalisée. Donner $<x>$ et σ_x dans le cas général et dans le cas particulier $p = q = \frac{1}{2}$.

Nota bene : ce passage du cas discret au cas continu suppose que dx est "petit" devant les dimensions physiques du système (domaine macroscopique)et "grand" devant le pas discret ℓ ("lissage" des détails microscopiques).

4/ Équation maîtresse

On peut obtenir les résulats précédents d'une manière très différente. Soit $P(x,t)$ la probabilité d'être en x au temps t ($t = \tau N$, τ étant la "durée" d'un saut). Montrer que

$$P(x, t+\tau) = p\, P(x-\ell, t) + q\, P(x+\ell, t)\ .$$

En passant au continu, en déduire une équation aux dérivées partielles reliant $\partial P/\partial t$, $\partial P/\partial x$ et $\partial^2 P/\partial x^2$. Dans le cas $p = q = 1/2$ montrer que l'on trouve l'équation de diffusion usuelle :

$$\frac{\partial P}{\partial t} = D\, \frac{\partial^2 P}{\partial x^2}\ . \tag{1}$$

Exprimer D en fonction des paramètres du problème. Lorsque $p \neq q$ monter qu'un changement de référentiel permet également de se ramener à l'équation (1).

Pour résoudre (1) on travaille avec la transformée de Fourier $\hat{P}(k,t) = \int_{\mathbb{R}} \frac{\mathrm{d}x}{\sqrt{2\pi}} P(x,t) \exp\{-ikx\}$. Écrire l'équation vérifiée par $\hat{P}(k,t)$ et donner sa solution. On se place dans le cas simple où $P(x,0) = \delta(x)$. Donner l'expression de $P(x,t)$.