Université Lyon I / ENS Lyon
Magistère de Sciences de la Matière
2001–2002 [1]

Travaux Dirigés
Physique Statistique

QUELQUES OUTILS ET MÉTHODES UTILES
ELEMENTS DE SOLUTION

1 Probabilités.

1. $x = R\cos\theta$ et θ est une variable aléatoire distribuée uniformément entre 0 et 2π.

$$dp = (q(\theta) + q(\theta))d\theta = \frac{1}{\pi}\frac{dx}{\sqrt{R^2 - x^2}}$$

ceci pour $-R < x < R$.

$$g_x(x) = \frac{1}{\pi\sqrt{R^2 - x^2}}$$

Pour avoir x équiprobable il faut $q(\theta) = |\sin\theta|/4$

2. Distribution isotrope veut dire que la probabilité dP de trouver un vecteur (défini par ses variables angulaires θ et ϕ) dans l'élément d'angle solide $d\Omega$ est proportionnelle à $d\Omega$. On a donc

$$dP = q(\theta, \phi)d\theta d\phi = \frac{1}{4\pi}\sin\theta d\theta d\phi$$

En prenant l'axe x comme axe polaire on a $x = R\cos\theta$. On a donc

$$dp = (2\pi)\frac{1}{4\pi}\sin\theta d\theta$$

et

$$g(x) = \frac{1}{2R}$$

x est distribué uniformément entre $-R$ et R.

3.

$$< J_z^2 >= \frac{1}{2j+1}(\sum_{-j}^{+j} m^2)$$

On utilise que $\sum_0^j m^2 = j(j+1)(j+1/2)/3$ (calculer $\sum_j (m+1)^3$ de deux manières différentes) pour finalement avoir

$$< J_z^2 >= j(j+1)/3$$

et par isotropie $< J^2 >= j(j+1)$

4.

$$< \overrightarrow{R}_N >= 0$$

$$< \overrightarrow{R}_N^2 >= N\ell^2 = (\ell^2/\tau)t$$

coefficient de diffusion $D = \ell^2/6\tau$.

2 Variables gaussiennes

Voir le livre "Numerical Recipes" certainement le meilleur livre pour apprendre les divers 'trucs' du calcul numérique, avec des explications mathématiques très accessibles.

[1] Jean-Louis Barrat; 04 72 44 85 65; barrat@dpm.univ-lyon1.fr ; http://dpm.univ-lyon1.fr/˜barrat

3 Multiplicateurs de Lagrange.

1. En minimisant ζ par rapport à toutes les variables (x_i et λ_k on obtient un point x_i^0, λ_k^0 tel que

$$g_k(x_1..x_N) = 0$$

$$\frac{\partial f}{\partial x_i} - \sum_k \lambda_k \frac{\partial g_k}{\partial x_i} = 0$$

   x_i^0, λ_k^0 est un minimum local de ζ.

   Ce point satisfait les contraintes, et il est une solution du problème posé. En effet supposons qu'un point voisin
   -satisfait les contraintes ($g_k = 0$)
   -a une valeur de f plus basse
   Alors ce point correspondra à une valeur plus basse de ζ (puisque pour ces points particuliers qui satisfont les contraintes ζ se réduit à f. Ceci constituerait une contradiction avec le fait que le point trouvé est un minimum local de ζ.

2. Application directe: il s'agit de trouver le point le plus proche de l'origine dans le plan $x+y+z=1$. On obtient

$$2x + \lambda = 0$$

$$2y + \lambda = 0$$

$$2z + \lambda = 0$$

   Soit $x = y = z = -\lambda/2$ et en utilisant la contrainte $x = y + z = 1$ on a $x = y = z = 1/3$.

3. Application en thermodynamique: Stratification atmosphérique.

   Pour définir T, P, il faut que les gradients de densités soient faibles (distance de variation très grande par rapport à la distance entre atomes).

   Si A est la surface horizontale, on a la contrainte

$$\int_0^\infty \rho(z)dz = N/A$$

   Par ailleurs $\mathcal{F}$ s'écrit

$$\mathcal{F} = Ak_BT \int_0^\infty dz(\rho(z)\ln(\rho\Lambda^3) + mgz\rho(z))$$

   La méthode des multiplicateurs de Lagrange correspond à minimiser

$$\mathcal{F} - \lambda \int_0^\infty \rho(z)dz$$

   On discrétise sur une grille pour introduire les variables discrètes $\rho_i = \rho(z_i)$ et on obtient

$$k_BT(\ln \rho_i\Lambda^3 + 1) - \lambda + mgz = 0$$

   ce qui donne $\rho(z) = cte \exp(-mgz/k_BT)$, la constante étant déterminée par la contrainte.