1. CORRIGÉ, PHQ 340, PHY. STAT. 15-10-9

Professeur : André-Marie Tremblay.
Durée de l'examen, de 10h30 à 12h30.
L'examen sera normalisé pour représenter 35% de votre note finale totale.
Il y a 5 questions totalisant 22.5 points en tout dans l'examen.

Remarque Il n'est pas nécessaire de redériver les résultats obtenus en classe ou donnés dans le formulaire ci-dessous à moins qu'on ne vou en fasse la demande explicite. Cet examen vérifie votre compréhension des concepts d'entropie, de travail, de chaleur, vos notions de théorie des probabilités et ses applications. Il vérifie aussi vos connaissances sur la binomiale, la gaussienne, le gaz parfait, votre compréhension du postulat de base de la mécanique statistique, de la connexion entre thermodynamique et physique statistique ainsi que des deux premières lois de la thermodynamique.

Formules utiles

Statistiques :

Binomiale : $W_N(n) = \frac{N!}{n!(N-n)!}p^n q^{N-n}.$
$\langle n\rangle = Np \quad ; \quad \langle n^2\rangle - \langle n\rangle^2 = Npq.$
Formule de Stirling : $\ln N! \approx N\ln N - N$
Gaussienne : $P(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}}\exp\left(-\frac{1}{2}\frac{(x-\mu)^2}{\sigma^2}\right)$
$\langle x\rangle = \int dx xP(x) = \mu \quad ; \quad \langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2 = \int dx\,(x-\mu)^2 P(x) = \sigma^2$

Théorème de la limite centrale : Si $X = \sum_{i=1}^N x_i$ où les x_i sont des variables statistiquement indépendantes dont la distribution est identique, alors dans la limite $N \to \infty$ la distribution de probabilité pour X est une gaussienne caractérisée par la valeur moyenne $\mu = N\langle x\rangle$ et la variance $\sigma^2 = N\left(\langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2\right)$. Les résultats $\mu = N\langle x\rangle$ et $\sigma^2 = N\left(\langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2\right)$ sont valables pour tout processus aléatoire qui est la somme de N variables statistiquement indépendantes distribuées de façon identique.

Ensemble microcanonique :

Postulat de base : Chaque état microscopique est équiprobable.

Soit $\Omega(E,V)$ le nombre d'états microscopiques accessibles pour un état macroscopique de volume V et d'énergie comprise entre E et $E+\delta E$.

L'état d'équilibre correspond à l'état macroscopique le plus probable.

Pour deux systèmes A et A' en contact thermique mais globalement isolés du reste du monde, la probabilité que le système A ait une énergie E est donnée par : $P(E) = \Omega(E)\,\Omega'\left(E^{(o)} - E\right)/\Omega_{tot}$.

À l'équilibre, $\frac{1}{k_BT} = \frac{\partial \ln\Omega}{\partial E} = \frac{\partial \ln\Omega'}{\partial E'} = \frac{1}{k_BT'}$. De même pressions p, p' et potentiels chimiques μ, μ' sont égaux. On a que $\frac{p}{k_BT} = \frac{\partial \ln\Omega}{\partial V}$ et $\frac{\mu}{k_BT} = -\frac{\partial\ln\Omega}{\partial N}$.

Thermodynamique :

Première loi : $\Delta E = Q - W$ où Q est la chaleur absorbée par le système et W le travail fait par le système. Pour un processus quasistatique sur une substance homogène où le nombre de particules est constant, $dE = TdS - pdV$.

Deuxième loi : $\Delta S \geq 0$ pour un système isolé. Pour un processus quasistatique $dS = đQ/T$.

Troisième loi : l'entropie tend vers une constante indépendante des paramètres extérieurs lorsque $T \to 0$.

Dans un processus à y constant (où $y = V$ ou $y = p$ par exemple) on peut obtenir $/dQ$ de $đQ = C_y dT$.

Liens entre ensembles et thermodynamique :

Ensemble microcanonique : $S(E,V,N) = k_B \ln \Omega(E,V,N)$

Gaz parfaits

Équation d'état : $pV = Nk_BT$
Énergie interne : $E = \frac{3}{2}Nk_BT$
Entropie : $S(E,V,N) = k_B \ln\left(V^N E^{3N/2}\right) + cte$
Dans un processus adiabatique : $pV^{\gamma} = cte$ ($\gamma = 5/3$ pour un gaz monoatomique)

1.1 Pièce de monnaie truquée *(4 points)*

Remarque Ce problème vérifie si vous pouvez faire des calculs élémentaires pour combiner les probabilités, si vous connaissez la binomiale, la gaussienne.

Supposons qu'une pièce de monnaie truquée ait une probabilité p de donner pile et une probabilité q de donner face.

a) *(1.5 point)* Quelle est la probabilité que les deux premiers lancers donnent pile alors que les deux suivants donnent face ? Et quelle est la probabilité que sur quatre lancers, deux donnent pile et deux donnent face ?

Solution : *(0.5 point)* La probabilité que les deux premiers lancers donnent pile et les deux suivants face est $ppqq$. *(0.5 point)* Par contre, si on ne se soucit pas de l'ordre dans lequel pile ou face ont été obtenus, alors il faut multiplier p^2q^2 par le nombre de façons d'arriver à ce résultat, soit *(0.5 point)* $4!/(2!2!)$, donc la probabilité est de $4!p^2q^2/(2!2!)$.

---

b) *(0.5 point)* Si on fait quatre lancers, quelle est la probabilité qu'au moins un d'entre eux soit face.

Solution : *(0.5 point)* Le raisonnement est analogue à celui du chevalier de Méré. La probabilité qu'aucun lancer ne donne face est p^4. Donc la probabilité qu'au moins l'un d'entre eux soit face est $1 - p^4$.

---

c) *(1 point)* Supposons maintenant qu'on fasse $1,000$ lancers. Si $p = 0.6$ on s'attend à ce que 600 lancers en moyenne donnent pile. À quel écart-type s'attend-on ? À quel pourcentage de la moyenne cet écart-type correspond-il ?

Solution : *(0.5 point)* L'écart-type pour la binomiale est $\sqrt{Npq}$. Donc, ici $\sqrt{1000 * 0.6 * 0.4} = 15.5$. *(0.5 point)* Cela correspond à $\sqrt{Npq}/(Np) = 15.5/600 * 100 = 2.58\%$.

---

d) *(1 point)* Dans les conditions du numéro précédent, comment se comparent en gros (c'est-à-dire à une bonne précision) les chances d'obtenir un nombre de pile plus grand que 600 et les chances d'en obtenir moins que 600 ? Et si on ne fait que cinq lancers, les chances d'obtenir un résultat plus grand que la valeur moyenne attendue est-elle la même que celle pour obtenir un résultat plus petit ?

Solution : *(0.5 point)* Dans la limite où N est grand on tend vers une gaussienne, une distribution qui est symmétrique autour de la moyenne. On aura donc aurant de chance de trouver un nombre plus grand que 600 qu'un nombre plus petit que 600. *(0.5 point)* Par contre, la binomiale pour N petit est asymétrique, ce qui veut dire que la probabilité de trouver un nombre plus petit que la moyenne n'est pas la même que celle de trouver un nombre plus grand que la moyenne.

1.2 Estimé de la moyenne et de l'écart type à partir d'échantillons d'une distribution cubique *(6 points)*

Remarque Vous aurez ici l'occasion de montrer vos connaissances des concepts de moyenne, variance, écart-type, de processus statistiquement indépendants et du théorème de la limite centrale ainsi que vos connaissances sur les probabilités pour les variables continues.

Soit une variable aléatoire réelle positive x dont la *densité* de probabilité est donnée par

$$P\left(x\right)=\frac{4}{a^4}x^3\ \theta\left(x\right)\theta\left(a-x\right) \tag{1.1}$$

où $a>0$ et où la fonction de Heaviside est définie par $\theta\left(x\right)=1$ pour $x>0$ et $\theta\left(x\right)=0$ pour $x<0$.

a) *(1 point)* Montrez que cette densité de probabilité est normalisée.

b) *(2 points)* Calculez la valeur moyenne $\langle x\rangle$ et la variance $\left\langle x^2\right\rangle-\langle x\rangle^2$ de cette densité de probabilité.

Soit la variable aléatoire $\mu=X/N$ où X est obtenue de la somme de N valeurs de x tirées de $P\left(x\right)$. En d'autres mots, μ est la moyenne de N échantillons de $P\left(x\right)$.

c) *(1 point)* Trouvez $\langle\mu\rangle$ et $\left\langle\mu^2\right\rangle-\langle\mu\rangle^2$ en fonction de N et de $\langle x\rangle$ et $\left\langle x^2\right\rangle-\langle x\rangle^2$. Comme d'habitude vous pouvez utiliser sans démonstration les résultats trouvés en classe mais *en justifiant pourquoi ils sont applicables.*

d) *(1 point)* Quelle est la distribution de probabilité de la variable μ pour N très grand ? Justifiez brièvement votre réponse.

e) *(1 point)* Montrez à partir des résultats précédents que la grandeur de l'écart type de la distribution pour μ relativement à la moyenne, décroît comme $1/\sqrt{N}$

Solution

a) Normalisation *(1 point)*

$$\int_{-\infty}^{\infty}P\left(x\right)dx=\frac{4}{a^4}\int_0^a x^3dx=\frac{4}{a^4}\left.\frac{x^4}{4}\right|_0^a=1 \tag{1.2}$$

b) Valeur moyenne *(0.5 point)*

$$\langle x\rangle=\int_{-\infty}^{\infty}xP\left(x\right)dx=\frac{4}{a^4}\int_0^a x^4dx=\frac{4}{a^4}\frac{a^5}{5}=\frac{4}{5}a \tag{1.3}$$

La variance s'obtient en calculant d'abord *(1.5 points).*

$$\left\langle x^2\right\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}x^2P\left(x\right)dx=\frac{4}{a^4}\int_0^a x^5dx \tag{1.4}$$

$$= \frac{4}{a^4}\left.\frac{x^6}{6}\right|_0^a=\frac{2a^2}{3} \tag{1.5}$$

donc,

$$\left\langle x^2\right\rangle-\langle x\rangle^2=\frac{2a^2}{3}-\frac{16a^2}{25}=\frac{2}{75}a^2=0.02666a^2 \tag{1.6}$$

c) *(0.5 point)* Comme X est la somme de N variables indépendantes distribuées identiquement, *(0.5 point)* $\langle \mu \rangle = \left\langle \frac{X}{N} \right\rangle = \frac{N}{N} \langle x \rangle = \frac{4}{5} a$ et $\langle \mu^2 \rangle - \langle \mu \rangle^2 = \frac{1}{N^2} \left(\langle X^2 \rangle - \langle X \rangle^2 \right) = \frac{1}{N} \left(\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 \right) = \frac{1}{N} \frac{2}{75} a^2$

d) *(0.5 point)* Comme X est la somme de N variables indépendantes distribuées identiquement, dans la limite où N est grand, la *(0.5 point)* distribution de probabilité pour X est une gaussienne et celle de μ aussi.

e) À l'aide des résultats obtenus en c), on a que l'écart-type *(0.5 point)* $\sqrt{\langle \mu^2 \rangle - \langle \mu \rangle^2}$ divisé par la moyenne $\langle \mu \rangle$ est donnée par *(0.5 point)*

$$\frac{\sqrt{\langle \mu^2 \rangle - \langle \mu \rangle^2}}{\langle \mu \rangle} = \frac{1}{\sqrt{N}} \frac{\sqrt{\frac{2}{75}}}{\frac{4}{5}} = \frac{0.204\,12}{\sqrt{N}} \tag{1.7}$$

1.3 Ensemble microcanonique, modèle avec terme à trois sites^{08i} *(3 points)*

Remarque Ce problème vérifie si vous avez bien saisi la notion d'ensemble microcanonique et le postulat de base.

Soit un système formé de trois spins dont l'énergie est donnée par l'expression

$$E = J\left(S_1 S_2 + S_1 S_2 S_3\right). \tag{1.8}$$

Les spins dans cette expression peuvent prendre les valeurs $S_i = +1$ ou $S_i = -1$ seulement (les constantes nécessaires pour avoir les bonnes unités sont dans le définition de J). Sachant que l'énergie totale du système est égale à 0, trouvez dans l'ensemble microcanonique la probabilité que $S_1 S_2$ prenne la valeur $+1$. Répondez à la même question lorsque l'énergie totale est $+2J$.

Solution *(1 point)* Il faut énumérer toutes les configurations ayant la même valeur de l'énergie totale. La seule façon d'avoir zéro est que les deux termes aient un signe opposé. On trouve donc

Configuration	Énergie totale
$++-$	0
$+--$	0
$-+-$	0
$---$	0

(0.5 point) La probabilité que $S_1 S_2$ vaille $+1$ est donnée par $2/4 = 1/2$. En effet, $S_1 S_2 = +1$ dans la première et la dernière configuration seulement.

(1 point) Dans le cas où l'énergie totale est $2J$, il faut que $S_1 S_2$ et $S_1 S_2 S_3$ aient le même signe $+$

Configuration	Énergie totale
$+++$	$2J$
$--+$	$2J$

(0.5 point) La probabilité d'avoir $S_1 S_2 = +1$ est donc l'unité.

1.4 Changement d'entropie du gaz parfait dans un processus irréversible *(4.5 points)*

Un récipient divisé par une paroi contient N molécules d'un gaz parfait enfermé dans un volume V d'un seul côté de la paroi. Le système est isolé thermiquement et mécaniquement.

Un trou est maintenant percé dans la paroi et on laisse le gaz se redistribuer entre les deux côtés du récipient. Le côté du récipient qui était vide au départ a un volume V' (le volume total est donc $V + V'$).

a) *(0.5 point)* À l'aide de considérations probabilistes simples, trouvez la probabilité que, après avoir atteint l'équilibre, le gaz reste du côté où il était initialement ?

Solution *(0.5 point)* On sait qu'à l'équilibre la densité sera uniforme. Donc, la probabilité qu'une molécule particulière soit du côté initial est $V/(V+V')$. La probabilité que toutes les molécules soient du même côté se trouve par la règle du ET. On obtient donc $[V/(V+V')]^N$.

---

b) *(2 points)* Montrez que le résultat précédent est bien celui qu'on peut trouver à partir du nombre d'états microscopiques accessibles et du postulat sur les probabilités à priori dans l'ensemble microcanonique.

Solution *(0.5 point)* Sachant que $S(E,V,N) = k_B \ln \Omega(E,V,N)$ et que $S = k_B \ln\left(V^N E^{3N/2}\right) + cte$ pour un gaz parfait, on a que $\ln \Omega(E,V,N) = \ln\left(V^N E^{3N/2}\right) + cte$ pour le gaz parfait. *(0.5 point)* Puisque chaque état microscopique est équiprobable, la probabilité recherchée dans l'ensemble microcanonique est donnée par

$$P(E,V,N) = \frac{\Omega(E,V,N)}{\Omega_{tot}}. \tag{1.9}$$

(0.5 point) où Ω_{tot} est le nombre total d'états accessibles à l'équilibre, soit $\Omega_{tot} = cte\ \ (V+V')^N E^{3N/2}$. Par contre, $\Omega(E,V,N) = cte\ \ (V)^N E^{3N/2}$. *(0.5 point)* Substituant ci-dessus et se rappelant que l'énergie ne peut pas avoir changée puisqu'aucun travail ou échange de chaleur a eu lieu, on trouve

$$P(E,V,N) = \frac{V^N}{(V+V')^N} \tag{1.10}$$

tel que trouvé ci-dessus.

---

c) *(0.5 point)* Une fois l'équilibre atteint, la température du gaz parfait a-t-elle changée ?

Solution *(0.5 point)* Tel que donné dans les formules, $E = \frac{3}{2} N k_B T$. Or, se rappelant que l'énergie interne ne peut pas avoir changée puisqu'aucun travail ou échange de chaleur a eu lieu, on en conclut que la température n'a pas changé.

---

d) *(0.5 point)* Calculez le changement d'entropie entre l'état initial où tout le gaz était du même côté et l'état final où l'équilibre est atteint. Le résultat ne devrait contenir aucune autre constante que N, k_B, V et V'.

Solution *(0.5 point)* Utilisant $S = k_B \ln\left(V^N E^{3N/2}\right)$ on trouve que $\Delta S = k_B \left\{ \ln\left[(V+V')^N E^{3N/2}\right] - \ln\left(V^N E^{3N/2}\right)\right\} = N k_B \ln\left[(V+V')/V\right]$.

e) *(0.5 point)* Le processus est-il réversible ou irréversible ?

Solution *(0.5 point)* Selon le résultat précédent, l'entropie a augmentée donc le processus est irréversible.

f) *(0.5 point)* Exprimez la probabilité calculée en b) en fonction de la différence d'entropie entre l'état macroscopique initial où tout est du même côté et l'état macroscopique final où le gaz s'est réparti entre les deux côtés.

Solution *(0.5 point)* Partant de $P(E,V,N) = \frac{\Omega(E,V,N)}{\Omega_{tot}}$, de Ω_{tot} comme le nombre d'états accessibles à l'équilibre et de la définition de l'entropie, on a

$$P(E,V,N) = \exp\left(S(E,V,N)/k_B - S(E,V+V')/k_B\right)$$

1.5 Relation $p{-}V$ dans une compression adiabatique^{99i} *(5 points)*

Remarque Ce numéro vérifie vos connaissances sur les gaz parfaits, le calcul du travail, la notion de processus quasistatique adiabatique.

Nous avons prouvé en classe que l'énergie interne d'un gaz parfait monoatomique est donnée par $E = \frac{3}{2}Nk_BT$ et que la pression obéit à $pV = Nk_BT$ où N est le nombre de molécules. Dans un changement adiabatique il n'y a pas d'échange de chaleur entre le gaz et l'extérieur.

a) *(1 point)* Montrez que dans une compression adiabatique quasistatique,

$$-pdV = \frac{3}{2}Nk_BdT. \tag{1.11}$$

Partez de $dE = TdS - pdV$.

Solution : On sait de façon générale par la première loi que $dE = TdS - pdV$. Or, si le processus est adiabatique, cela veut dire que *(0.5 point)* $dS = 0$. Donc, dans une compression adiabatique, $dE = -pdV$. On sait aussi que $E = \frac{3}{2}Nk_BT$, donc *(0.5 point)* $dE = \frac{3}{2}Nk_BdT$. Ces deux expressions pour dE donnent donc, $-pdV = \frac{3}{2}Nk_BdT$.

b) *(1.5 points)* Utilisez le résultat en (a) et la loi des gaz parfaits pour prouver que si un gaz parfait à une température T_0 est comprimé adiabatiquement de façon quasistatique à partir d'un volume initial V_0 pour atteindre un volume V et une température T, alors

$$\left(\frac{V_0}{V}\right)^{2/3} = \left(\frac{T}{T_0}\right) \tag{1.12}$$

Solution : Il suffit d'intégrer le résultat obtenu en (a), *(0.5 point)* après y avoir exprimé p en fonction de V et T à l'aide de l'équation d'état

$$-pdV = -\frac{Nk_BT}{V}dV = \frac{3}{2}Nk_BdT \tag{1.13}$$

d'où *(0.5 point)*

$$-\int_{V_0}^{V}\frac{Nk_B}{V}dV = \int_{T_0}^{T}\frac{3}{2}Nk_B\frac{dT}{T} \tag{1.14}$$

(0.5 point)

$$-\ln\left(\frac{V}{V_0}\right) = \frac{3}{2}\ln\left(\frac{T}{T_0}\right) \tag{1.15}$$

$$-\frac{2}{3}\ln\left(\frac{V}{V_0}\right) = \ln\left(\frac{T}{T_0}\right) \tag{1.16}$$

En prenant l'exponentielle des deux côtés, on obtient le résultat recherché.

---

c) *(1 point)* Déduisez de (b) que dans une compression adiabatique, un gaz parfait monoatomique obéit à la loi

$$pV^{5/3} = \text{constante} \tag{1.17}$$

Vous pouvez prendre V_0 et T_0 fixes comme points de référence.

Solution : *(0.5 point)* L'équation d'état des gaz parfaits s'applique mais la température change à mesure que le gaz se comprime. *(0.5 point)* Substituons donc dans $pV = Nk_BT$ l'expression obtenue en (b) pour la température en fonction du volume dans la compression adiabatique. On obtient

$$pV = Nk_B\left(\frac{V_0}{V}\right)^{2/3} T_0 \tag{1.18}$$

ce qui se ramène facilement au résultat recherché.

---

d) *(1.5 point)* Calculez le travail fait par un gaz qui passe d'un volume V_i à un volume V_f par un processus quasi-statique adiabatique. Exprimez le résultat en fonction de p_i, V_i et V_f.

Solution : *(0.5 point)*

$$\int dW = \int pdV. \tag{1.19}$$

(0.5 point) Utilisant l'expression obtenue en c) pour exprimer p en fonction de V, on obtient *(0.5 point)*

$$\int_{V_i}^{V_f} \frac{p_iV_i^{5/3}}{V^{5/3}}dV = p_iV_i^{5/3}\left(-\frac{3}{2}\right)\left(\frac{1}{V_f^{2/3}} - \frac{1}{V_i^{2/3}}\right). \tag{1.20}$$

Fin de l'examen