Dynamique et équilibre

A. Relaxation vers la distribution de probabilité à l'équilibre

On introduit l'entropie d'information (qui sera vue plus en détail en amphi 07) comme mesure de "la quantité d'information" sur un système pouvant être dans plusieurs (micro)états C de probabilité $P(C)$. Elle s'écrit; $S(\{P(C)\}) = -k_B \sum_C P(C) ln(P(C))$,

1) Vérifier qu'à l'équilibre thermodynamique, cette entropie s'identifie bien à l'entropie statistique. On considerera les ensembles microcanoniques et canoniques.

2) Ecrire l'équation maîtresse pour l'évolution temporelle des probabilité $P(C,t)$ en fonction des taux de transition $T(C \to C')$.

3) On considère un ensemble isolé (microcanonique) et on suppose (microréversibilité) que: $T(C' \to C) = T(C \to C')$. Montrer que:

$$\frac{dS}{dt} = \frac{k_B}{2} \sum_{C,C'} W(C \to C') \left[P(C,t) - P(C',t)\right] ln \left[\frac{P(C,t)}{P(C',t)}\right].$$

Quel est le signe de dS/dt ? Quelle distribution de probabilité $P(C)$ retrouve-t'on à l'équilibre ?

Complément. L'hypothèse $T(C' \to C) = T(C \to C')$ pour le microcanonique conduit à la relation dite de bilan détaillé: $T(C \to C')/T(C' \to C) = exp\left[\beta(E_C - E_{C'})\right]$ pour l'ensemble canonique. Montrer de façon analogue que dans l'ensemble canonique: $dF/dt \leq 0$ et qu'à l'équilibre $P_{eq}(C)/P_{eq}(C') = exp\left[\beta(E_{C'} - E_C)\right]$.

B - Dynamique d'aimentation. On étudie ici l'aimentation instantanée macroscopique $M(t) = \sum_i \sigma_i(t)$ d'un ensemble de N spins indépendants peuvant prendre les valeurs $\sigma_i = \pm 1$, $i = 1 \ldots N$. On introduit la règle d'évolution suivante: on effectue des changements de configuration à un taux $1/\tau_0$, un changement consistant à choisir un des N spins au hasard et à le retourner, faisant ainsi varier l'aimentation de ± 2.

1) Soit une configuration C' d'aimentation (M+2). Quel est le taux de transfert, ou probabilité de transition par unité de temps, vers un état d'aimentation M ? Même question pour une configuration C' d'aimentation (M-2). En déduire l'équation maîtresse pour $P(M,t)$, la probabilité que le système présente une aimantation M à l'instant t.

2) On sait que la valeur de l'aimantation présente des fluctuations de l'ordre de $\sqrt{N}$. On introduit la variable $X = M/\sqrt{N}$. Montrer que la distribution de probabilité $P(X,t)$ vérifie:

$$\left(\frac{N\tau_0}{2}\right)\frac{\partial P}{\partial t} = \frac{\partial^2 P}{\partial X^2} + X\frac{\partial P}{\partial X} + P = \frac{\partial}{\partial X}\left[\frac{\partial P}{\partial X} + XP\right]$$

3) Montrer que la distribution normalisée $P_{eq}(X,t) = exp(-X^2/2)/\sqrt{2\pi}$ est solution à l'équilibre. Si on applique un champ $\vec{B}_0$ extérieur, quelle sera la forme de P à l'équilibre ? On suppose qu'on coupe le champ $\vec{B}_0$ à l'instant $t = 0$ et que le retour à l'équilibre se fait sous la forme : $P(X,t) = Cexp\left[-(X - X_0(t))^2/2\right]$. En déduire le temps caractéristique de retour à l'équilibre. Le comparer au temps typique d'exploration de l'espace des phases. Discuter.

4) Quelle est le pourcentage de l'espace des phases tel que par exemple $|M - <M>_{eq}| > 10\sqrt{N}$? On utilisera le résultat suivant concernant la fonction erreur: $erf(x) > \sqrt{1 - e^{-x^2}}$, avec $erf(x) = (2/\sqrt{\pi}) \int_0^x exp(-\xi^2) d\xi$. Commenter.

5) Prenons le modèle d'un gaz dans une boite que l'on divise par la pensée en deux. Construire l'analogie avec le cas des spins. Discuter. La figure en page 2 montre une simulation numérique associée à ce problème (cours de physique statistique de Berkeley par Reif).

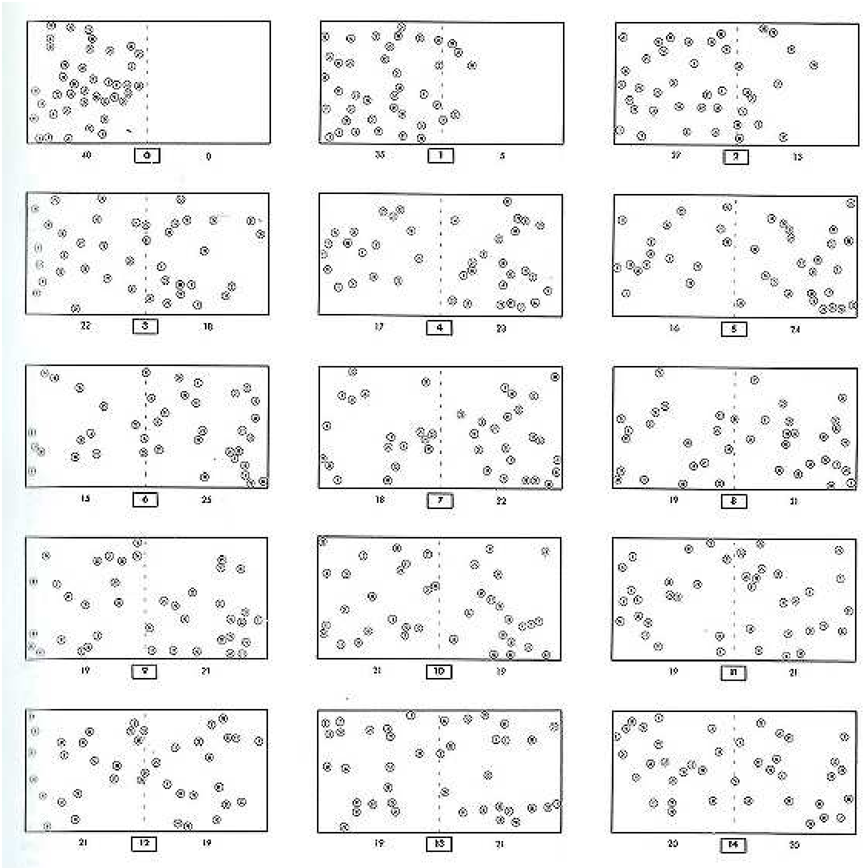

Fig. 1.18 Images fabriquées par un ordinateur montrant 40 particules dans une boîte. Les conditions initiales du calcul correspondent à une situation particulière où toutes les particules se trouvent dans la moitié gauche de la boîte dans les positions indiquées sur la vue $j = 0$ et auxquelles on donne des vitesses arbitrairement choisies. La séquence de vue $j = 0, 1, 2, ..., 14$, représente alors l'évolution du système en fonction du temps. Le nombre de particules situées dans chaque moitié de la boîte est indiqué juste en dessous de chaque moitié. Les vitesses ne sont pas indiquées.