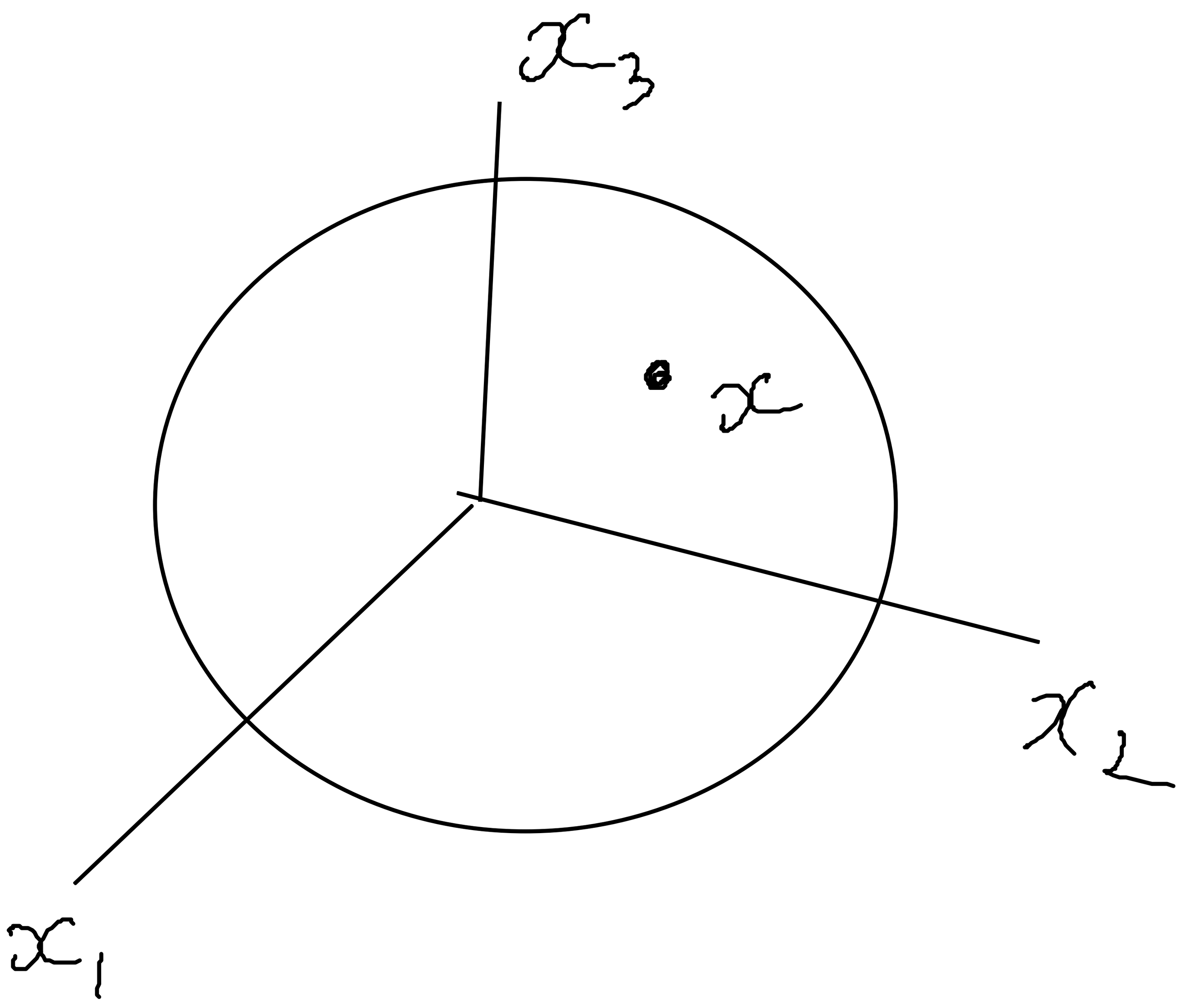
Loi de Boltzmann dans un modèle simple

$x = (x_1, \dots, x_N) \in \mathbb{R}^N$

distribué aléatoirement sur la sphère

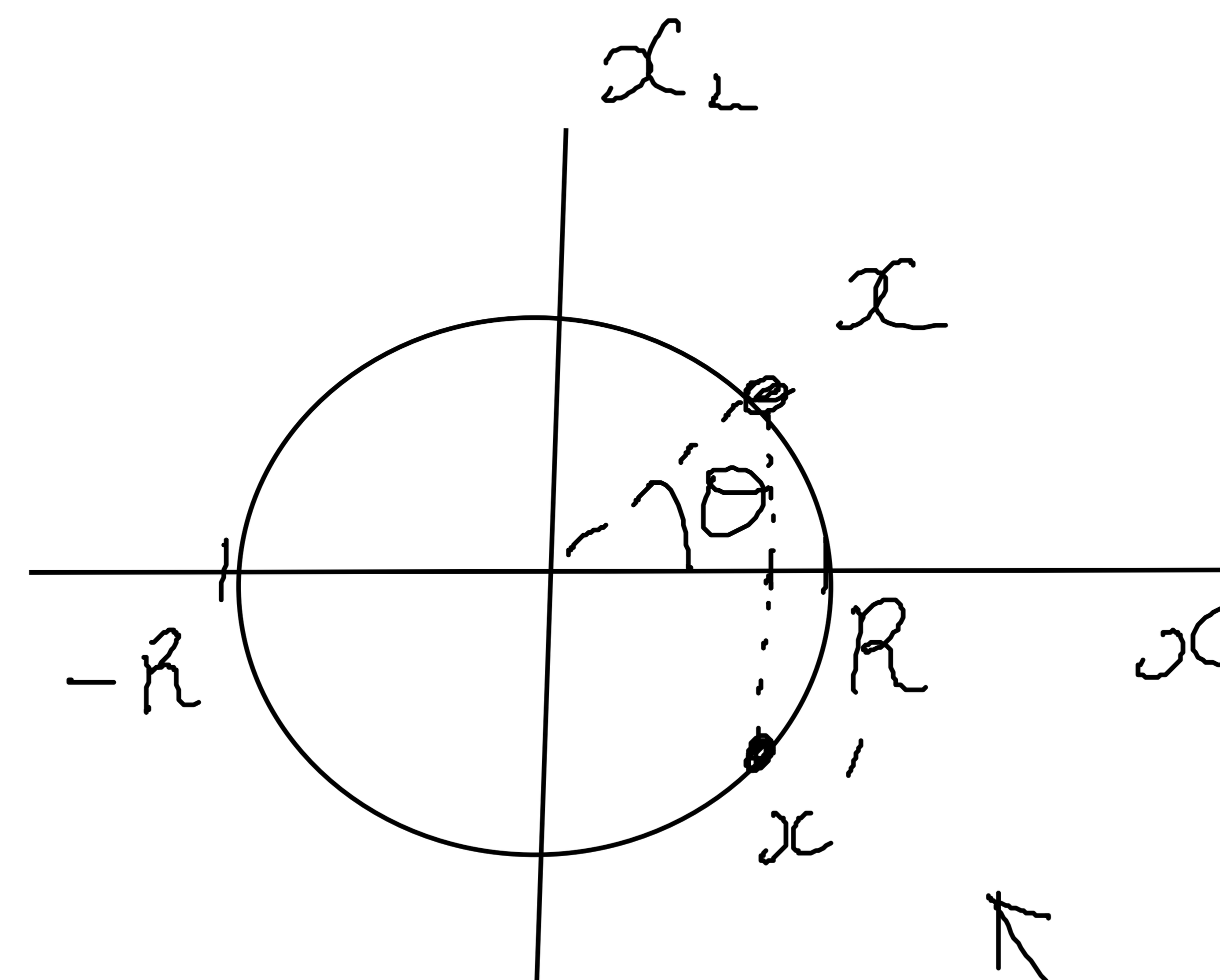
S_R^{N-1} : $\boxed{x_1^2 + x_2^2 + \dots + x_N^2 = R^2}$



① si $N = 2$,

on écrit $x_1 = R\cos\theta$

$x_2 = R\sin\theta$



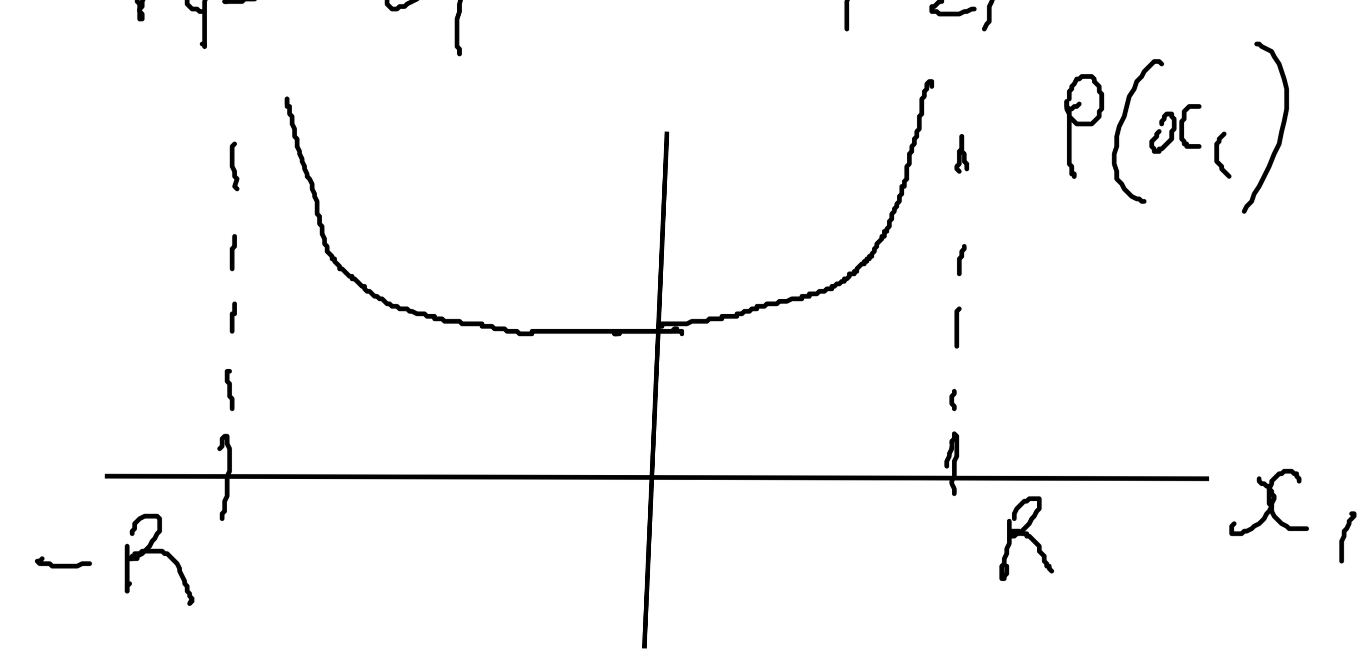
$\theta \in [0, 2\pi]$ uniforme

rem : facteur 2 car x_1 a deux images x, x'

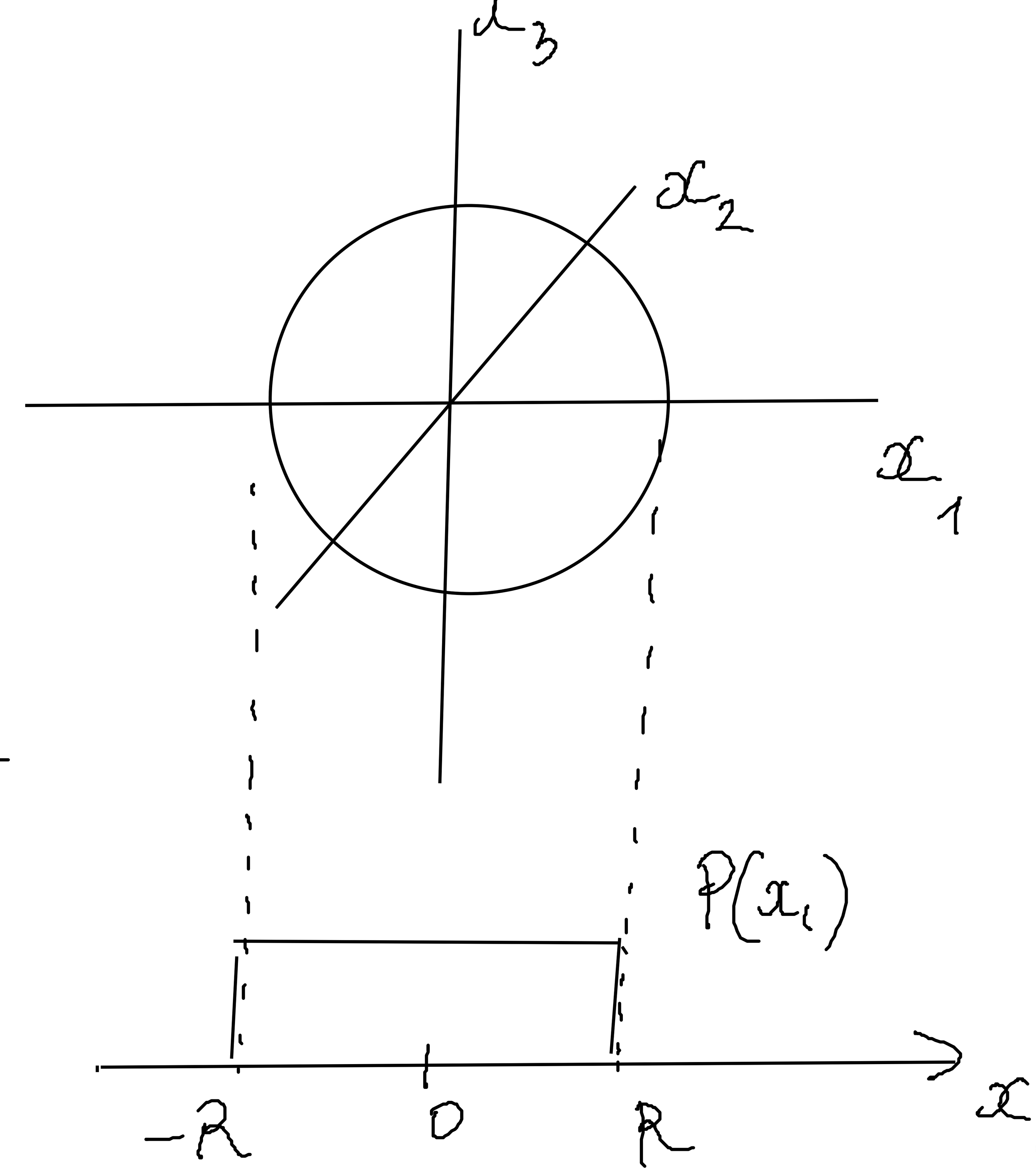
$$P(x_1)\,dx_1 = 2 \cdot P(\theta)\,d\theta = \frac{2}{2\pi}\,d\theta$$

$$\Leftrightarrow \quad P(x_1) = \frac{1}{\pi}\left|\left(\frac{dx_1}{d\theta}\right)^{-1}\right| = \frac{1}{\pi}\,\frac{1}{R|\sin\theta|} = \frac{1}{\pi|x_2|}$$

$$\boxed{P(x_1) = \frac{1}{\pi\sqrt{R^2 - x_1^2}}}$$



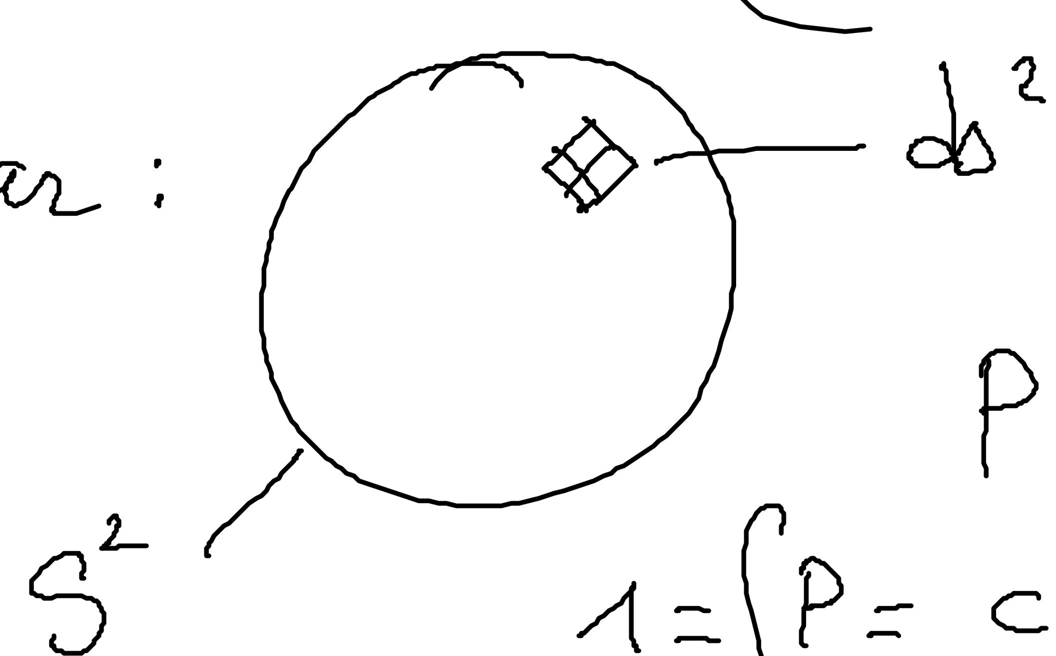
• si $N=3$, on écrit en coordonnées sphériques,



$$\begin{cases} x_1 = R\cos\theta \\ x_2 = R\sin\theta\cos\varphi \\ x_3 = R\sin\theta\sin\varphi \end{cases}$$

La mesure uniforme sur la sphère S^2 est $P = \left(\frac{1}{4\pi}\sin\theta\, d\theta\, d\varphi\right)$

car :



$$P = \underbrace{c}_{\text{constante}}\, ds^2$$

$$1 = \int P = c\int R^2 \sin\theta\, d\theta\, d\varphi = c\, R^2 4\pi \implies P = \frac{1}{R^2 4\pi}\, ds^2$$

$$= \frac{1}{4\pi}\sin\theta\, d\theta\, d\varphi$$

donc $$P(x_1)\, dx_1 = \frac{1}{4\pi}\int_{\varphi=0}^{2\pi} \sin\theta\, d\varphi\, d\theta$$

$$= \frac{1}{2}\sin\theta\, d\theta$$

$$\iff P(x_1) = \frac{\sin\theta}{2\left|\frac{dx_1}{d\theta}\right|} = \frac{\sin\theta}{2R\sin\theta} = \frac{1}{2R}$$

$$\boxed{P(x_1) = \frac{1}{2R} \; : \text{loi uniforme}}$$

(2) Soit $y = (y_1, \dots, y_N) \in \mathbb{R}^N$.

mesure de probabilité :

$$P(y)\,dy = \frac{1}{Z} e^{-\frac{1}{2\Delta^2}\|y\|^2}$$

avec $\Delta > 0$, $dy = dy_1 dy_2 \cdots dy_N$

$$\|y\|^2 = y_1^2 + y_2^2 + \cdots + y_N^2$$

On pose $\boxed{x = R\dfrac{y}{\|y\|}}$

alors $\|x\| = R\dfrac{\|y\|}{\|y\|} = R$ donc $x \in S_R^{N-1}$

Par ailleurs, la mesure $P(y)dy$ est invariante par rotations (car ne dépend que du module $\|y\|$) et de même pour x donc la mesure de probabilité de x est la loi uniforme sur la sphère S_R^{N-1}.

rem : invariante par rotation signifie invariante par le groupe $O(N)$.

Soit $y = (y_1, \dots, y_N) \in \mathbb{R}^N$,

$$P(y) = \prod_{j=1}^{N} \left(\frac{1}{2} e^{-\frac{1}{2\Delta^2} y_j^2} \right) \quad , \Delta > 0 \text{ arbitraire}$$

est un produit donc les $(y_j)_j$ sont des variables aléatoires indépendantes, chacune de loi $\mathcal{N}(0, \Delta^2)$.

$\|y\|^2 = y_1^2 + y_2^2 + \dots + y_N^2$.

D'après la <u>loi des grands nombres</u>, dans la limite $N \to \infty$, la loi de la variable aléatoire $\frac{1}{N} \|y\|^2$ converge vers $\delta_{\mathbb{E}(y_j^2)} = \delta_{\Delta^2}$

car $\mathbb{E}(y_j^2) = \mathrm{Var}(y_j) = \Delta^2$

Donc pour $N \gg 1$, $\frac{1}{\sqrt{N}} \|y\| \xrightarrow[N \to \infty]{} \Delta$

$$\boxed{x_1 = R \frac{y_1}{\|y\|} \underset{N \gg 1}{\approx} \frac{R}{\sqrt{N}\Delta} y_1}$$

thm de Slutsky (cf rem ci-dessous)

$$P(x_1) \underset{N \gg 1}{\approx} \frac{1}{2} e^{-\frac{1}{2\Delta^2} y_1^2} = \frac{1}{2} e^{-\frac{N}{2R^2} x_1^2}$$
$$= \frac{1}{2} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x_1}{\sigma}\right)^2} \text{ si } R^2 = N\sigma^2$$

rem : pour justifier précisément (*) ci-dessus
il faut utiliser (ou redémontrer) le théorème de Slutsky
(voir Wikipedia).

③ Application :

énergie $\boxed{E_{tot} = \sum_{j=1}^{N} \left(\frac{1}{2} m v_j^2\right) \quad \text{fixée.}}$

on pose $\boxed{\begin{array}{l} x_j^2 = \frac{1}{2} m v_j^2 = E_j \\ R^2 = E_{tot} \end{array}}$: énergie de la particule j

ce qui nous ramène au problème précédent.

Donc $$P(v_j) = \frac{1}{Z} \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{x_j^2}{\sigma^2}\right)$$

avec $\sigma^2 = \frac{R^2}{N} = \frac{E_{tot}}{N} = E$: énergie moyenne par particule

donc $$P(v_j) = \frac{1}{Z} \exp\left(-\frac{E_j}{kT}\right)$$

avec $kT = 2\sigma^2 = 2E$.

④ entropie $$\mathcal{S} := \frac{k}{N} \log\left(Vol\left(S_R^{N-1}\right)\right)$$

or $Vol\left(S_R^{N-1}\right) = C_N R^{N-1}$, donc

$$\mathcal{S} = \frac{k}{N}\left(\log C_N + (N-1)\log R\right) \underset{N \gg 1}{\simeq} k \log R + \frac{k}{N}\log C_N = \frac{k}{2}\log E_{tot} + \frac{k}{N}\log C_N$$

$$= \frac{k}{2}\log(NE) + \frac{k}{N}\log C_N = \frac{k}{2}\left(\log N + \log E\right) + \frac{k}{N}\log C_N,$$

Donc $\partial \mathcal{S} / \partial E = \frac{k}{2E} = 1/T$