
École Nationale des Ponts et Chaussées : Stage Physique statistique

Introduction mathématique, méthodes numériques, applications physiques

Organisateur : Gabriel Stoltz

CERMICS, Ecole Nationale des Ponts et Chaussées (Paris-Tech), 6&8 Av. Pascal, 77455 Champs-sur-Marne, France.

INRIA, Domaine de Voluceau, B.P. 105, 78153 Le Chesnay Cedex, France.

Email : stoltz@cermics.enpc.fr

Lieu : Ecole Nationale des Ponts et Chaussées, 5-6 mai 2008

Intérêt de la formation

La physique statistique, un des domaines essentiels de la physique moderne, est à la base de nombreux développements actuels à la frontière de la science des matériaux, pour lesquels une approche classique macroscopique est inadaptée. De nombreuses entreprises (telles que le CEA, EDF, Lafarge, pour ne citer que quelques partenaires privilégiés de l'Ecole des Ponts) ont compris

que les nouveaux matériaux se développent aujourd'hui à l'échelle microscopique, et qu'il est important d'avoir des chercheurs et des ingénieurs formés aux concepts et aux techniques de la simulation numérique à l'échelle moléculaire, pour laquelle les mathématiques appliquées apportent des contributions décisives -- tant par le biais de l'analyse numérique que des probabilités appliquées.

La présentation des techniques de simulation dans une approche multidisciplinaire constitue également une voie pédagogique privilégiée pour appréhender concrètement et durablement les notions délicates qui sous-tendent la physique statistique, et, par un changement d'échelle, la thermodynamique.

Emploi du temps indicatif

Les cours auront lieu à l'Ecole Nationale des Ponts et Chaussées (Marne la Vallée), les lundi 5 et mardi 6 2008.

Premier jour

09h00 - 09h30 Accueil

09h30 - 10h30 Introduction à la physique statistique

10h45 - 11h00 Pause

11h00 - 12h00 Notion d'ensemble thermodynamique

13h30 - 15h00 Ensemble microcanonique et dynamique hamiltonienne

15h30 - 17h00 Travaux pratiques

17h00 - 18h00 Conférence

Second jour

09h00 - 10h30 Ensemble canonique et méthodes d'échantillonnage

10h30 - 11h00 Pause

11h00 - 12h30 Energie libre, définition microscopique de l'entropie

14h00 - 15h30 Travaux pratiques

15h30 - 16h30 Conférence

16h30 - 17h30 Conclusion apéritive

Contenu de la formation

L'objectif de ce cours est de montrer comment une approche purement microscopique permet de calculer les grandeurs macroscopiques usuelles de la mécanique et de la thermodynamique : équations d'états, capacités calorifiques, compressibilités, énergies libres, potentiels chimiques... C'est également l'occasion de donner une définition microscopique de concepts thermodynamiques peu intuitifs tels que l'entropie, ainsi que son rôle primordial dans les propriétés macroscopiques familières des matériaux. Tout au long du cours, des exemples analytiques simples (gaz parfait, oscillateur harmonique) illustreront les concepts fondamentaux. Plus précisément,

- Introduction à la physique statistique : description microscopique des systèmes physiques, Hamiltonien, ordres de grandeur, quelques jalons historiques ;
- Ensembles thermodynamiques, observables~: on présente divers ensembles thermodynamiques, qui sont mathématiquement décrits par des mesures de probabilité différentes;
- Ensemble microcanonique : dynamique hamiltonienne et ses propriétés (conservation d'invariants, symplecticité), discrétisation numérique ;
 - Ensemble canonique~: dérivation heuristique, échantillonnage et calcul de grandeurs macroscopiques/moyennes (en particulier, on présentera les méthodes probabilistes les plus utilisées en pratique) ;
- Energie libre : entropie, méthodes de calcul de différences d'énergie libre, irréversibilité et second principe de la thermodynamique énoncé au niveau microscopique.

Des travaux pratiques sur ordinateur (les codes correspondants, qui ne nécessitent pas de licence, étant fournis) donneront à cette introduction un ancrage pragmatique. On pourra envisager les deux sessions suivantes :

- Comparaison d'intégrateurs numériques pour la dynamique hamiltonienne, et propriétés physiques de la dynamique hamiltonienne ;
- Efficacité numérique des méthodes d'échantillonnage de l'ensemble canonique, et calcul d'équations d'états (pression en fonction de la densité) pour un gaz d'argon.

Enfin, des conférences données par des chercheurs plus appliquées permettront d'ancrer les notions précédentes dans un contexte scientifique réaliste. Ces conférences ne sont pas encore définies, mais pourraient tourner autour de :

- La simulation moléculaire des matériaux du génie civil ;
- La détermination du Hamiltonien du système à partir de l'équation de Schrödinger ;
- Systèmes hors d'équilibre~: cinétiques chimiques, transitions de phases, ondes de choc ;
- Calcul de propriétés de transport (conductivité thermique, viscosité, etc) pour des systèmes à l'équilibre ou hors d'équilibre en régime permanent.

Public visé

Ces cours intéresseront bien sûr les professeurs de physique, mais également les professeurs de mathématiques de par l'approche mathématique, numérique et algorithmique de cette introduction.

Plus généralement, les autres enseignants intéressés par une définition microscopique des quantités thermodynamiques peuvent être intéressés, ainsi que les professeurs d'informatique (car la simulation numérique joue une part importante dans ce domaine de recherche).