

Thermodynamique statistique I et II (exercices)

Bachelier en sciences chimiques, troisième année, 15 H (partie I) et 15h (partie II) d'exercices des cours I et II. Titulaire du cours : P. Damman)

Rappels de probabilités et statistique + quelques applications

Cf. [cette page](#)

Exercices « Thermodynamique statistique I »

- accès limité : [lien intranet sur la méthodologie](#)

Exercices de base

- [Lancer d'un dé](#)
- [Lancer d'un dé polyédrique](#)
- [Tirage d'une carte](#)
- [Lancers consécutifs d'un dé](#)
- [Lancers de plusieurs dés](#)
- [Lancers de pièces \("pile ou face"\)](#)
- [Cube de Rubik et couleurs](#)
- [Moyennes concernant des déplacements de véhicules](#)
- [Dénombrement d'interactions entre atomes](#)
- [Séquences de brins d'ADN](#)
- [Séquences de protéines](#)
- [Mises du bulletin multi du Lotto](#)

Exercices classiques (et similaires)

- [Paradoxe des anniversaires](#)
- [Poker menteur](#)
- [Marche aléatoire symétrique à 1D \(nombre réduit de pas\)](#)
- [Marche aléatoire asymétrique à 1D \(grand nombre de pas\)](#)
- [Production de flacons : statistiques sur les défauts](#)

Exercices inédits

- [Synthèse de molécules en étoile : statistiques](#)

- Conformères d'alcane linéaires : statistiques et entropie configurationnelle
- Marche aléatoire bidimensionnelle de cellules dans des canaux microfluidiques
- Plus ça rate, plus on a de chances que ça marche (un peu d'humour)

Thermodynamique statistique classique

- Élasticité du caoutchouc et modèle conformationnel élémentaire
- Exercices simples sur l'entropie configurationnelle
- Entropie gazeuse d'alcalins et de gaz rares

Exercices « Thermodynamique statistique II »

- Comparaison microcanonique-canonique, vibreurs et cristal d'Einstein
- Rotation de molécules biatomiques
- Spectres de rotation-vibration de molécules biatomiques
- Gaz de photons
- Gaz d'électrons
- Gaz imparfait

Exercices de simulation



- Simulations numériques de marches aléatoires (en Python)
- <https://www.complexity-explorables.org/> (codes Javascript)
- TP (simulation) de thermodynamique "équation d'état d'un systèmes de sphères dures" (Vincent Démercy, ESPCI)

TODO

- exercice "simple" sur des marches aléatoires avec persistance (anisotropic persistent random walk). Refs :
 - [Statistical analysis of cell migration in 3D using the anisotropic persistent random walk model](#)
 - [Persistent-random-walk approach to anomalous transport of self-propelled particles](#)
 - [Persistent random walk on a one-dimensional lattice with random asymmetric transmittances](#)
 - [Anomalous diffusion of self-propelled particles in directed random environments](#) (we also carried out simulations of motion on...) - ref 22 unpublished
- Divers exercices à proposer à partir de ces simulations :
 - [Introduction to Stochastic Simulations for Chemical and Physical Processes: Principles and Applications](#) Charles J. Weiss, Journal of Chemical Education 2017 94 (12), 1904-1910 DOI: 10.1021/acs.jchemed.7b00395 **physical-chemistry undergraduate; programming**
 - [A Tale of Two Molecules: How the Heat Capacities of N2\(g\) and F2\(g\) Differ At High](#)

Temperature and Why Naïve Expectations Fail to Explain These Differences: A Spreadsheet Exercise for Physical Chemistry Students Arthur M. Halpern and Robert J. Noll, J. Chem. Educ., 2019, 96 (5), pp 926–935 DOI: 10.1021/acs.jchemed.9b00029

- Spectre de vibration,... de Hg₂ (dimercure gazeux) : [Does a neutral dimercury molecule exist?](#)

Références diverses

- [Théorie des probabilités](#)
- [Algèbre de Boole](#)
- [Approfondissements de lycée en mathématiques, probabilités discrètes](#) (wikibooks)
- [La physique de l'eau dans les arbres](#) (yc vidéo)
- [Cours de B. Cowan](#)
- [Statistical and Thermal Physics](#), par Harvey Gould and Jan Tobochnik (pdf et ressources)
- [Relations entre les distributions](#)
- Concepts statistiques :
 - [Biais du survivant](#)
- Marches aléatoires appliquées :
 - pedestrians
 - [Physics-based modeling and data representation of pedestrian pairwise interactions](#) Alessandro Corbetta, Jasper Meeusen, Chung-min Lee, Roberto Benzi, Federico Toschi, Phys. Rev. E 98, 062310 (2018) DOI: 10.1103/PhysRevE.98.062310
 - [Pedestrian stepping dynamics in single-file movement](#) Yi Ma, Ying Ying Sun, Eric Wai Ming Lee, and Richard Kowk Kit Yuen, Phys. Rev. E 98, 062311 DOI: 10.1103/PhysRevE.98.062311
- Datasets (exemples) :
 - [Exploring Relationships in Body Dimensions](#), utilisé dans [fr:Bootstrap_\(statistiques\)](#)
 - Autres données : http://jse.amstat.org/jse_data_archive.htm
 - <https://towardsdatascience.com/understanding-logistic-regression-step-by-step-704a78be7e0a>
- [Tabulated absorption spectra of greenhouse gases?](#)
- méthodes de Monte-Carlo
 - intégration
 - [Probability and Monte Carlo methods](#), 2013

À exploiter

- [How to visualize the Central Limit Theorem in Python](#)

From:
<https://dvillers.umons.ac.be/wiki/> - **Didier Villers, UMONS - wiki**

Permanent link:
https://dvillers.umons.ac.be/wiki/teaching:exos:thermodynamique_statistique-exercices?rev=1571732276

Last update: **2019/10/22 10:17**

