

# 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'alcanes 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, vibrateurs 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



- TP de simulations de Monte-Carlo, 2019
- 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 Démery, 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 N<sub>2</sub>(g) and F<sub>2</sub>(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 Hg<sub>2</sub> (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
- Cours de David Tong
- 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](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
  - Monte Carlo Simulation An In-depth Tutorial with Python An in-depth tutorial on the Monte Carlo Simulation methods and applications with Python, Towards AI Team, Medium, 07/08/2020
- Statistical and Thermal Physics Using Python Anders Malthe-Sørensen, Dag Kristian Dysthe (2017)
- algorithmes inefficaces, mais intéressants :
  - <https://twitter.com/matthen2/status/1440443280827699206>

## À exploiter

- How to visualize the Central Limit Theorem in Python
- Feynman's Restaurant Problem :
  - Feynman's Restaurant Problem Revealed
  - Feynmans\_Restaurant\_Problem\_Original\_Notes.pdf

- [feynmanlectures.caltech.edu/info/solutions/restaurant\\_problem\\_sol\\_1.html](https://feynmanlectures.caltech.edu/info/solutions/restaurant_problem_sol_1.html)
- Feynman's Restaurant Problem. Introduction and solution of Feynman's... | by Alex Molas | May, 2022 | Towards Data Science

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=1653208466](https://dvillers.umons.ac.be/wiki/teaching:exos:thermodynamique_statistique-exercices?rev=1653208466)

Last update: **2022/05/22 10:34**

