



TRAVAUX ENCADRES DE RECHERCHE, MAI 2015  
Master 1 Mathématique : Optimisation et Physique Mathématique

**Géométrie Riemannienne, Mécanique Statistique et Thermodynamique**

Réalisés par : **M'MADI ISSIMAIL MOHAMED MOUNEIME**  
Encadrés par : **CLAUDE-ALAIN PILLET**

# 1 Introduction

Statistical mechanics is to explain the behavior and evolution of physical systems with a large number of particles (known macroscopic system) from the characteristics of their microscopic constituents (particles). These constituents may be atoms, molecules, ions, electrons, photons, neutrons or elementary particles. Such a system at equilibrium is characterised by a small number of parameters (pressure, temperature, magnetisation, ...). It is interesting to introduce a metric on the space of these parameters and to study the induced geometry and its possible relation with the physical properties of the systems in question.

Originally, Weinhold [2] defined a metric using the second derivatives of the internal energy  $U(S,V,N)$  with respect to the extensive variables, and by Ruppeiner [3] using the corresponding derivatives of the relative entropy  $S_t(U, V, N)$ . Schlogl [4] also defined a metric using the second derivatives of the entropy. For macroscopic thermodynamic systems these different definitions of the metric are essentially equivalent. However, in small systems these metrics are in general different and may not exist, since the second derivatives of the entropy and the internal energy are not guaranteed to be always positive. Thus Gavin E. Crooks [1] defined a new metric using the second derivative of the free entropy. Unlike the first metrics, it is applicable to microscopic systems. We calculate this metric and two special situations to explore some geometric properties.

Our work includes among others a calculation of the Gaussian curvature of a perfect gas and a system with interaction.

## 2 Géométrie de l'espace des états

### 2.1 Postulat de Gibbs

On considère un système physique, possiblement microscopique, en équilibre avec un grand réservoir thermique. La distribution de probabilité des configurations du système est :

$$P(x|\lambda) = \frac{1}{Z} e^{-\beta H(x,\lambda)}$$

- $x$  dénote la configuration du système ;
- $\beta = \frac{1}{k_B T}$  où  $k_B$  est la constante de Boltzmann et  $T$  la température ;
- $H$  est l'Hamiltonien du système exprimé en terme de variables collectives  $X_i$  et des forces généralisées conjuguées  $\lambda^i$ ,

$$\beta H(x, \lambda) = \sum_i \lambda^i X_i(x),$$

- $Z$  est la fonction de partition qui normalise  $P$ ,

$$Z = \sum_x e^{-\beta H(x,\lambda)}$$

où la somme porte sur les configurations  $x$  accessibles au système.

La fonction de partition est liée à l'énergie libre  $F$ , l'entropie libre  $\psi$  et l'entropie  $S$  par :

$$\log Z = -\beta F = \psi = S - \lambda^i \langle X_i \rangle$$

les crochets indiquent la moyenne sur l'ensemble  $P$ .

On note que

$$\frac{\partial \psi}{\partial \lambda^i} = -\langle X_i \rangle$$

et

$$g_{ij} = \frac{\partial^2 \psi}{\partial \lambda^i \partial \lambda^j} = \langle (X_i - \langle X_i \rangle)(X_j - \langle X_j \rangle) \rangle$$

La matrice de covariance  $g_{ij}$  est semi-définie positive. En effet,

$$\begin{aligned} \sum_{i,j} g_{ij} U_i U_j &= \sum_{i,j} \langle (X_i - \langle X_i \rangle)(X_j - \langle X_j \rangle) \rangle U_i U_j \\ &= \langle (\varphi - \langle \varphi \rangle)^2 \rangle \geq 0, \end{aligned}$$

où  $\varphi = \sum_i X_i U_i$

Ceci nous permet d'utiliser la matrice  $g_{ij}$  comme une métrique et munir ainsi l'espace des états thermodynamique d'une métrique Riemannienne. Avec cette métrique nous pouvons calculer des grandeurs géométrique, notamment la longueur d'une courbe paramétrée  $[a, b] \ni t \mapsto \lambda(t)$ ,

$$L = \int_a^b \sqrt{\frac{d\lambda^i}{dt} g_{ij} \frac{d\lambda^j}{dt}} dt$$

et l'aire d'une surface  $\Omega$

$$\text{Aire}(\lambda(\Omega)) = \int_{\Omega} \sqrt{|\det(g(\lambda))|} d\lambda.$$

Le but de ce travail est le calcul de la courbure de Gauss de cette métrique dans le cas d'un gaz parfait et d'un système avec interaction.

## 2.2 Le gaz parfait ( $PV = nRT$ )

Un gaz est dit parfait lorsque les molécules qui le constituent n'interagissent pas entre elles.

**Énergie interne** On définit en général l'énergie interne d'un gaz quelconque par

$$U = \sum_{i=1}^N \langle E_c(i) \rangle + \sum_{1 \leq i < j \leq N} \langle E_p(i, j) \rangle$$

où  $E_c(i)$  désigne l'énergie cinétique de la particule  $i$  et  $E_p(i, j)$  l'énergie potentielle d'interaction entre les particules  $i$  et  $j$ . Dans le cas d'un gaz parfait monoatomique les particules sont assimilées à des points matériels et seules les énergies cinétiques sont à prendre en compte. L'énergie interne d'un gaz parfait de  $N$  particules à l'équilibre à température  $T$  est donnée par

$$U_{GPM} = \sum_{i=1}^N \langle E_c(i) \rangle = \frac{3}{2} N k_B T = \frac{3}{2} N \beta^{-1}$$

**Entropie** L'entropie d'un gaz parfait monoatomique est donnée par

$$S = -N k_B \log \rho - \frac{3}{2} N k_B \log \beta + N k_B K$$

où  $\rho$  est la densité et  $K$  est une constante arbitraire.

**Énergie libre** L'énergie libre de Helmholtz correspondante est donc

$$\begin{aligned} F &= U - TS \\ &= \frac{3}{2} N \beta^{-1} + N \beta^{-1} \log \rho + \frac{3}{2} N \beta^{-1} \log \beta - N K \beta^{-1} \end{aligned}$$

Soit  $f = \frac{\psi}{N} = -\frac{\beta F}{N} = -\frac{3}{2} - \log \rho - \frac{3}{2} \log \beta + K$ , l'entropie libre d'une particule.

$$\frac{\partial f}{\partial \beta} = -\frac{3}{2} \beta^{-1}$$

$$\frac{\partial f}{\partial \rho} = -\rho^{-1}$$

$$\frac{\partial^2 f}{\partial \beta^2} = \frac{3}{2} \beta^{-2}$$

$$\frac{\partial^2 f}{\partial \beta \partial \rho} = 0$$

$$\frac{\partial^2 f}{\partial \rho^2} = \rho^{-2}$$

Nous en déduisons la métrique

$$g(\beta, \rho) = \begin{pmatrix} \frac{3}{2}\beta^{-2} & 0 \\ 0 & \rho^{-2} \end{pmatrix}$$

Pour calculer cette courbure de Gauss, on utilise le *theorema egregium* :

$$K = \frac{R_{1122}}{\det(g)}$$

où  $K$  est la courbure de Gauss ;

$R$  est le tenseur de Riemann défini en coordonnées locale par

$$R_{ljk}^i = \Gamma_{jk,l}^i - \Gamma_{lk,j}^i + \Gamma_{lm}^i \Gamma_{jk}^m - \Gamma_{jm}^i \Gamma_{lk}^m$$

Avec  $\Gamma_{ij}^k = \frac{1}{2}g^{kl}(g_{il,j} + g_{jl,i} - g_{ij,l})$ , symbole de Christoffel

et

$$g^{kl} = (g_{ij})^{-1}$$

$$\Gamma_{jk,l}^i = \frac{\partial \Gamma_{jk}^i}{\partial \lambda^l}$$

Comme la métrique est diagonale,

$$R_{ijij} = -\frac{g_{ii,jj} + g_{jj,ii}}{2} + \frac{g_{ii,j}^2}{4g_{ii}} + \frac{g_{jj,i}^2}{4g_{jj}} + \frac{g_{ii,i}g_{jj,i}}{4g_{ii}} + \frac{g_{jj,j}g_{ii,j}}{4g_{jj}}$$

et

$$R_{iiij} = -R_{ijij} \implies K = 0$$

Il résulte de cette étude que la géométrie de l'espace des états du gaz parfait est plate.

### 3 Géométrie du Modèle d'Ising en dimension 1

Nous étudions dans cette partie un problème de mécanique statistique de la matière condensée où l'effet des interactions est important. La motivation étant de déterminer si la présence de ces interactions peut courber l'espace des états. Le modèle que nous avons choisi de discuter ici est connu sous le nom de Modèle d'Ising. Ce système très simple est défini de la façon suivante : on considère un réseau unidimensionnel régulier dont les sites sont numérotés de 1 à  $N$ . Sur chaque site  $i$ , on définit une variable scalaire  $\sigma_i$  qui peut prendre deux valeurs  $-1$  et  $+1$ . Ces variables sont couplées à un *champ extérieur*  $h$ , et entre elles par une *interaction*  $j$ .

$$\sigma_1 \text{ --- } * \sigma_2 \text{ --- } * \sigma_3 \text{ --- } \dots \text{ --- } * \sigma_N$$

L'hamiltonien s'écrit :

$$H = -j \sum_{i=1}^{N-1} \sigma_i \sigma_{i+1} + h \sum_{i=1}^N \sigma_i$$

Notre premier résultat concerne le calcul de la fonction de partition de ce système :

**Lemma 3.1** Soit  $Z_N(\beta, h) = \sum_{\sigma \in \{\pm 1\}^N} e^{-\beta H(\sigma)}$  la fonction de partition du modèle d'Ising. Alors

$$Z_N(\beta, h) = \langle V, T^{N-1}U \rangle$$

où

$$T = \begin{bmatrix} e^{\beta(j-h)} & e^{-\beta(j+h)} \\ e^{-\beta(j-h)} & e^{\beta(j+h)} \end{bmatrix}, \quad V = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad U = \begin{bmatrix} e^{-\beta h} \\ e^{\beta h} \end{bmatrix}. \quad (1)$$

**Preuve.** On a

$$\begin{aligned} e^{-\beta H(\sigma)} &= e^{-\beta \sum_{i=1}^{N-1} (-j\sigma_i\sigma_{i+1} + h\sigma_i) - \beta h\sigma_N} \\ &= (e^{\beta j\sigma_1\sigma_2 - \beta h\sigma_1})(e^{\beta j\sigma_2\sigma_3 - \beta h\sigma_2}) \dots (e^{\beta j\sigma_{N-1}\sigma_N - \beta h\sigma_{N-1}}) e^{-\beta h\sigma_N} \\ &= (T_{\sigma_1\sigma_2})(T_{\sigma_2\sigma_3}) \dots (T_{\sigma_{N-1}\sigma_N}) e^{-\beta h\sigma_N}. \end{aligned}$$

Les coefficients à deux indices  $T_{\sigma_i\sigma_j}$ , où chaque  $\sigma_i$  peut prendre deux valeurs  $\pm 1$ , peuvent être considérés comme les éléments d'une matrice  $T$  définie par (1). Comme  $\sum_{\sigma_2} T_{\sigma_1\sigma_2} T_{\sigma_2\sigma_3} = (T^2)_{\sigma_1\sigma_3}$  où  $T^2$  désigne le carré de la matrice  $T$ , la fonction de partition s'écrit comme

$$\begin{aligned} Z_N(\beta, h) &= \sum_{\sigma_1 = \pm 1, \dots, \sigma_N = \pm 1} (T_{\sigma_1\sigma_2})(T_{\sigma_2\sigma_3}) \dots (T_{\sigma_{N-1}\sigma_N}) e^{-\beta h\sigma_N} \\ &= \langle V, T^{N-1}U \rangle. \end{aligned}$$

□

La limite thermodynamique  $N \rightarrow \infty$  de la fonction de partition du modèle d'Ising est le sujet du résultat suivant

**Theorem 3.2**

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \log Z_N(\beta, h) = \beta j + \log \left[ \cosh(\beta h) + \sqrt{\sinh^2(\beta h) + e^{-4\beta j}} \right]$$

**Preuve.** Les valeurs propres de  $T$  sont les racines de l'équation quadratique

$$\lambda^2 - 2\lambda e^{\beta j} \cosh(\beta h) + 2 \sinh(2\beta j) = 0,$$

c'est-à-dire,

$$\lambda_{\pm} = e^{\beta j} \left[ \cosh(\beta h) \pm \sqrt{\sinh^2(\beta h) + e^{-4\beta j}} \right].$$

Par conséquent

$$\begin{aligned} Z_N &= \sum_{\sigma} \lambda_{\sigma}^{N-1} \langle V, U_{\sigma} \rangle \langle V_{\sigma}, U \rangle \\ &= \lambda_{+}^{N-1} \langle V, U_{+} \rangle \langle V_{+}, U \rangle + \lambda_{-}^{N-1} \langle V, U_{-} \rangle \langle V_{-}, U \rangle \end{aligned}$$

où  $U_{\pm}$  et  $V_{\pm}$  sont les vecteurs propres de  $T$  et  $T^t$  associés aux valeurs propres  $\lambda_{\pm}$ . On a donc

$$\begin{aligned}
\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \log Z_N(\beta, h) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \log(\lambda_+^{N-1} \langle V, U_+ \rangle \langle V_+, U \rangle + \lambda_-^{N-1} \langle V, U_- \rangle \langle V_-, U \rangle) \\
&= \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \log(\lambda_+^{N-1} \langle V, U_+ \rangle \langle V_+, U \rangle (1 + \frac{\lambda_-^{N-1} \langle V, U_- \rangle \langle V_-, U \rangle}{\lambda_+^{N-1} \langle V, U_+ \rangle \langle V_+, U \rangle})) \\
&= \lim_{N \rightarrow \infty} (\frac{N-1}{N} \log(\lambda_+) + \frac{1}{N} \log(\langle V, U_+ \rangle \langle V_+, U \rangle) \\
&\quad + \frac{1}{N} \log(1 + (\frac{\lambda_-}{\lambda_+})^{N-1} \frac{\langle V, U_- \rangle \langle V_-, U \rangle}{\langle V, U_+ \rangle \langle V_+, U \rangle})) \\
&= \log(\lambda_+)
\end{aligned}$$

□

On déduit du résultat précédent que l'entropie libre par particule du modèle d'Ising est donnée par

$$\psi = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \log Z_N(\beta, h) = \beta j + \log \left( \cosh(\beta h) + \sqrt{\sinh^2(\beta h) + e^{-4\beta j}} \right)$$

En terme des forces généralisées du modèle qui sont  $u = \beta j$  et  $v = \beta h$ ,

$$\psi(u, v) = u + \log \left( \cosh(v) + \sqrt{\sinh^2(v) + e^{-4u}} \right),$$

et la métrique est

$$g(u, v) = \begin{bmatrix} \partial_u^2 \psi & \partial_u \partial_v \psi \\ \partial_v \partial_u \psi & \partial_v^2 \psi \end{bmatrix}.$$

Il est plus commode d'exprimer cette métrique dans les coordonnées locales

$$x = e^{-2u}, \quad y = \sinh(v).$$

Un calcul explicite nous permet de montrer le résultat suivant

**Theorem 3.3** *La métrique du modèle d'Ising est donnée par*

$$dl^2 = E(x, y)dx^2 + 2F(x, y)dxdy + G(x, y)dy^2,$$

où

$$\begin{aligned}
E &= \frac{1}{(x^2 + y^2)^{3/2}} \frac{4x^2(x^2 \sqrt{1 + y^2} + 2y^2(\sqrt{1 + y^2} + \sqrt{x^2 + y^2}))}{(\sqrt{1 + y^2} + \sqrt{x^2 + y^2})^2}, \\
F &= \frac{4x^2 y}{(x^2 + y^2)^{3/2}}, \quad G = \frac{x^2 \sqrt{1 + y^2}}{(x^2 + y^2)^{3/2}}
\end{aligned}$$

Pour calculer la courbure de Gauss de cette métrique, nous utilisons la formule de Brioschi

$$K \det(g)^2 = \det \begin{bmatrix} -\frac{1}{2}E_{yy} + F_{xy} - \frac{1}{2}G_{xx} & \frac{1}{2}E_x & F_x - \frac{1}{2}E_y \\ F_y - \frac{1}{2}G_x & E & F \\ \frac{1}{2}G_y & F & G \end{bmatrix} - \det \begin{bmatrix} 0 & \frac{1}{2}E_y & \frac{1}{2}G_x \\ \frac{1}{2}E_y & E & F \\ \frac{1}{2}G_x & F & G \end{bmatrix}$$

On peut montrer le théorème suivant :

**Theorem 3.4**

$$\begin{aligned} K = & \frac{(\sqrt{1+y^2} + \sqrt{x^2+y^2})(-2y^4(1+y^2)(1+y^2 + \sqrt{1+y^2}\sqrt{x^2+y^2}))}{2x^2(1+y^2)(x^2+y^2)^{\frac{3}{2}}} \\ & + \frac{(\sqrt{1+y^2} + \sqrt{x^2+y^2})(x^4(-1+2y^2-2\sqrt{1+y^2}\sqrt{x^2+y^2}) + y^2(1+2\sqrt{1+y^2}\sqrt{x^2+y^2}))}{2x^2(1+y^2)(x^2+y^2)^{\frac{3}{2}}} \\ & + \frac{x^2y^2(\sqrt{1+y^2} + \sqrt{x^2+y^2})(12+13y^2+11\sqrt{1+y^2}\sqrt{x^2+y^2} + y^2(25+13\sqrt{1+y^2}\sqrt{x^2+y^2}))}{2x^2(1+y^2)(x^2+y^2)^{\frac{3}{2}}} \end{aligned}$$

Par un calcul numérique, on réussit à visualiser la géométrie de ce modèle et observer la courbure. Nous le faisons ici sur deux systèmes : ferromagnétique et anti-ferromagnétique.



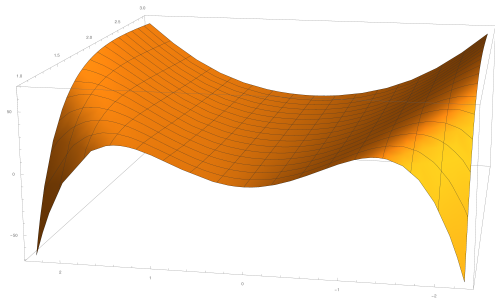


FIGURE 1 – La courbure de Gauss pour un système ferromagnétique

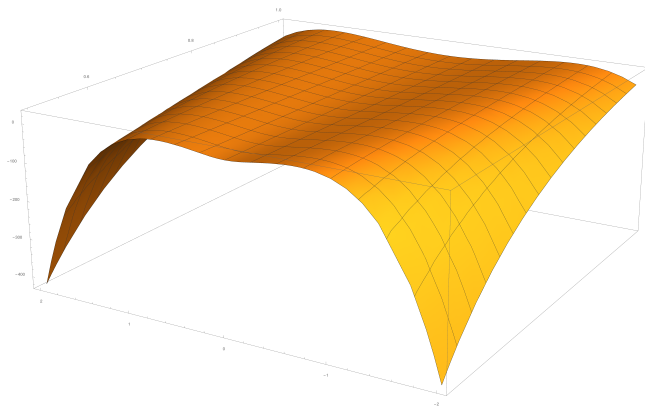


FIGURE 2 – La courbure de Gauss pour un système anti-ferromagnétique

Dans un system ferromagnétique [*fig1*], les sites sont parallèle. Ces sites tendent à s'aligner dans la direction d'un champs magnétique extérieur, ce qui confère à l'espace une courbure plus grande que celle d'un system anti-ferromagnétique [*fig2*]. Car ce dernier, les sites sont antiparallèle ; certaines des variables scalaires  $\sigma$  associée à chaque sites prennent la valeur +1 et d'autre la valeur -1.

Un remarque intéressant et surprenant soumis a notre étude est que la courbure n'est pas monotone. Toutefois le temps ne nous permet pas d'explorer ce beau paysage pour tirer d'avantage ses propriétés géométrique.

## Résumé

Nous avons étudié la géométrie métrique de l'espace des états thermodynamique introduite par Crooks dans [1]. Plus précisément, nous avons calculé la courbure de Gauss de cette géométrie dans le cas d'un gaz parfait ainsi que pour un système en interaction. Nous avons trouvé que la courbure de Gauss d'un gaz parfait est nulle. Par contre celle d'un système avec interaction présente une structure non-triviale. Nous avons choisi d'étudier le modèle d'Ising en dimension 1 puisque c'est un modèle assez simple pour permettre le calcul explicite de la fonction de partition dans la limite thermodynamique. En particulier, il résulte de notre travail que les interactions peuvent courber l'espace des états thermodynamique.

### Référence

- [1] **Gavin E. Crooks** : Measuring Thermodynamic Length
- [2] **F. Weinhold** : Metric geometry of equilibrium thermodynamics
- [3] **F. Schlogl** : Thermodynamic Metric and Stochastic Measures
- [4] **George Ruppeiner** : Thermodynamics : A Riemannian geometric model
- [5] **Kerson Huang** : Statistical mechanics, second edition
- [6] **Ruelle** : Statistical mechanics Rigorous Results