

Attendus du bloc 2 micro-macro

Partie physique (avec un peu de math...)

Outils et concepts mathématiques:

- L'intégralité du cours sur les rappels de probabilités: notion de variables aléatoires, loi des grand nombres, théorème de la limite centrale, notion de densité de probabilité (variables continues), calcul d'une valeur moyenne ou d'une variance à partir d'une densité de probabilité (calcul des intégrales à partir de formulaires fournis).
- Notion de différences finies: savoir passer d'une équation aux dérivées partielles d'ordre 2 (dérivées première et seconde) à son expression en différences finies, et *vice versa*:

$$\boxed{f'(x) = \frac{df}{dx} = \frac{f(x + dx) - f(x)}{dx}} \quad \text{et} \quad \boxed{f''(x) = \frac{d^2f(x)}{dx^2} = \frac{f(x + dx) + f(x - dx) - 2f(x)}{dx^2}}$$

Exemple à 1 D (équation de diffusion de la chaleur), température T fonction du temps (t) et de l'espace (x):

$$\frac{\partial T}{\partial t} - D\Delta T = 0 \quad \longleftrightarrow \quad T(x, t + dt) = T(x, t) + dt \frac{D}{dx^2} (T(t, x + dx) + T(t, x - dx) - 2T(t, x))$$

- Définition en coordonnées cartésiennes des opérateurs laplacien (pour un scalaire), gradient et divergence.

Opérateur laplacien $\Delta \cdot$ (A est une fonction de x,y,z): $\Delta A = \frac{\partial^2 A}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 A}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 A}{\partial z^2}$

Opérateur divergence $div(\vec{\cdot})$ (\vec{E} est un vecteur dont chaque composante est une fonction de x, y, z): $div(\vec{E}) = \frac{dE_x}{dx} + \frac{dE_y}{dy} + \frac{dE_z}{dz}$

Opérateur gradient $\overrightarrow{grad}(\cdot)$ (A est une fonction de x,y,z): $\overrightarrow{grad}(A) = \frac{dA}{dx} \vec{u}_x + \frac{dA}{dy} \vec{u}_y + \frac{dA}{dz} \vec{u}_z$

Outils et concepts mathématiques (suite):

- Savoir trouver la solution d'une équations différentielles linéaires du premier et deuxième ordres, sans second membre, par exemple:

$$\frac{dN(t)}{dt} = -\gamma N(t)$$

- Epreuve de Bernoulli et Loi binomiales.

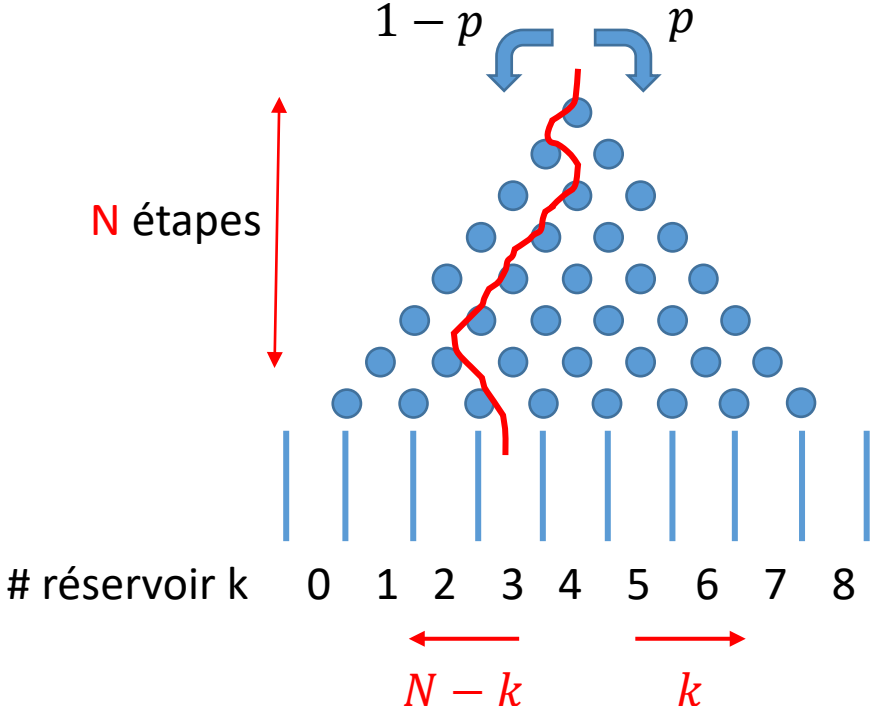
Applications des outils mathématiques:

- Savoir dériver l'équation de la diffusion à une dimension à partir du modèle de la marche aléatoire:

$$\Delta t \frac{\partial p(x, t)}{\partial t} = \frac{\Delta x^2}{2} \frac{\partial^2 p(x, t)}{\partial x^2}$$

- Savoir retrouver la courbe de Gauss à partir de N répétitions d'une épreuve de Bernoulli de probabilités p et 1-p (p=1/2 correspondant à la planche de Galton):

$$g(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi Np(1-p)}} \exp\left(-\frac{(k - Np)^2}{2Np(1-p)}\right)$$



Modèles et concepts physiques:

- Savoir interpréter un gradient
- Savoir interpréter une force dérivant d'un gradient.
- Connaitre l'expression de la distribution des vitesses $\vec{v}(v_x, v_y, v_z)$ de Maxwell pour un gaz composé de molécules de masse m à la température cinétique T :

$$f(v_x, v_y, v_z) = \left(\frac{m}{2\pi k_b T} \right)^{3/2} \exp\left(-\frac{mv^2}{2k_b T} \right)$$

$f(v_x, v_y, v_z)$: densité de probabilité du triplet v_x, v_y, v_z

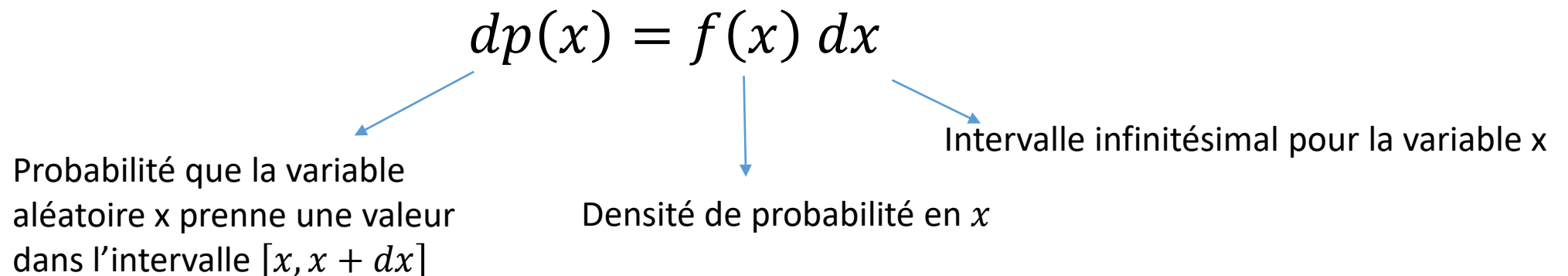
$f(v_x, v_y, v_z) dv_x dv_y dv_z$: Probabilité que \vec{v} soit dans un élément de volume $dv_x dv_y dv_z$

Savoir tracer $f()$ et interpréter son évolution en fonction de la température.

Connaitre les suppositions du modèle (les vitesses sont des variables aléatoires indépendantes, isotropie).

Savoir interpréter cette relation en termes de distribution de Boltzmann $\exp\left(-\frac{E}{k_b T}\right)$

- De manière générale, savoir interpréter physiquement une densité de probabilité



- Savoir expliquer l'origine microscopique du mouvement Brownien

Modèles et concepts physiques (suite):

- Savoir identifier les différents termes d'une équation de diffusion:

Exemple à 1D pour la densité $P(x, t)$:
$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = -\mu \frac{\partial P(x, t)}{\partial x} + D \frac{\partial^2 P(x, t)}{\partial x^2}$$

Coefficient de diffusion

Tendance (*Drift*)

- Connaître la relation de Stokes-Einstein:
$$D = \frac{k_B T}{3\pi\eta d}$$

- Pour le cas simple de la diffusion de probabilité $\frac{dP(t, \mathbf{r})}{dt} = D \Delta P(t, \mathbf{r})$, avec D le coefficient de diffusion:

→ Savoir qu'une solution naturelle de cette équation est la loi normale $N(0, \sigma^2)$, avec $\sigma^2 = 2Dt$ la variance.

→ Savoir interpréter la dépendance temporelle de σ^2 .

- Savoir définir et identifier un modèle de Turing (réaction-diffusion)

Evolution temporelle des concentrations spatiales en espèces u (activateur) et v (inhibiteur)

Production / Dégradation

Diffusion

$$\left[\begin{array}{l} \frac{\partial u}{\partial t} = F(u, v) + D_u \Delta u \\ \frac{\partial v}{\partial t} = G(u, v) + D_v \Delta v \end{array} \right.$$

Modèles et concepts physiques (suite):

- Loi de Fick

La loi de Fick traduit la diffusion de la matière dans un milieu binaire, par exemple des particules dans un solvant. A l'approximation linéaire, elle décrit la proportionnalité entre le courant volumique de particules $\vec{J}_n(\vec{r}, t)$ et le gradient de concentration des particules $n_v(\vec{r}, t)$:

$$\vec{J}_n(\vec{r}, t) = -D \overrightarrow{\text{grad}}(n_v(\vec{r}, t))$$

$[\# m^{-2} s^{-1}]$ $[m^2 s^{-1}]$ $[m^{-1}]$ $[\# m^{-3}]$

- Savoir calculer $\vec{J}_n(\vec{r}, t)$ pour une concentration $n_v(\vec{r}, t)$ donnée.
- Enfin, savoir verbaliser l'intérêt d'une approche microscopique dans la description des phénomènes physiques macroscopiques et savoir faire une mise en équation simple (en étant guidé) en raisonnant sur des évolutions sur de petit pas de temps (dt) ou d'espace (dx, dy, dz).