

Bloc 2: Du microscopique au macroscopique

DAVID AMANS

david.amans@univ-lyon1.fr

I Fondements mathématiques d'une approche microscopique

- Variable aléatoire. Loi et densité de probabilité. **Variables aléatoires indépendantes** et théorème de la limite centrale.
- Conséquences sur les grandeurs physiques macroscopiques résultant d'un ensemble **d'évènements microscopiques**.
- Dérivées et différences finies

II. Théorie Cinétique des gaz

III. Diffusion – Réaction Oscillantes - Réaction-Diffusion d'Alan Turing

Physique microscopique et physique statistique

La mécanique quantique donne les outils pour comprendre et prévoir les propriétés à l'échelle microscopique, d'un électron, d'un atome, d'une molécule...

Mais dans les expériences, on mesure des propriétés macroscopiques (température, courant, ...) sur un système constitué d'un grand nombre de *particules*, de l'ordre du nombre d'Avogadro:

$$N_A = 6.022 \cdot 10^{23}$$

Il est possible de comprendre les propriétés macroscopique à partir des propriétés microscopique, mais le passage micro-macro n'est pas trivial.

La physique statistique donne un cadre théorique permettant de faire le lien entre mécanique quantique (propriétés individuelles régies par l'équation de Schrödinger) et thermodynamique classique (propriétés macroscopiques caractérisées par un petit nombre de grandeurs mesurables). Elle permet de plus d'expliquer:

- les **fluctuations autour de l'équilibre** (attention différent de la notion d'incertitude quantique)
- les **comportements collectifs** (comme les transitions de phase).

Physique microscopique et physique statistique

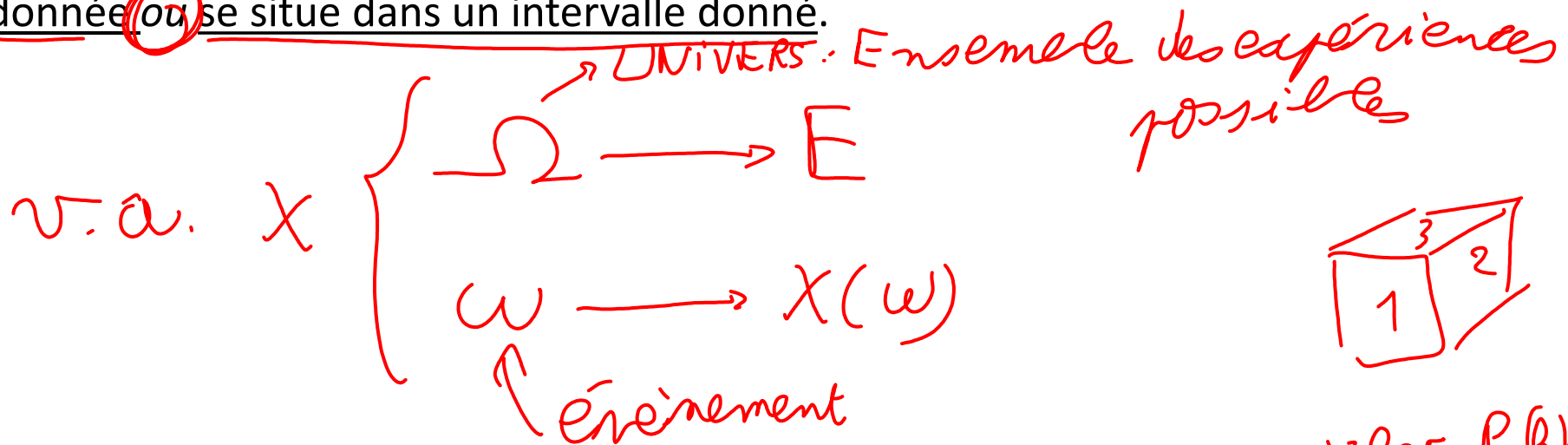
Nécessité d'une approche statistique

- Nombre énorme de degrés de liberté microscopique mis en jeu,
- Notion de chaos déterministe et sensibilité aux conditions initiales,
 - proposer une approche probabiliste permettant de caractériser l'état d'un système macro à l'aide d'un nombre restreint de variables moyennées.

Sans complètement décrire la physique statistique, nous allons montrer qu'une description microscopique peut permettre de retrouver des propriétés macroscopiques

1. Notion de variable aléatoire (def « à la physicienne »)

v.a. = fonction X à valeur dans l'ensemble E des résultats possibles d'une **expérience aléatoire** et pour laquelle on peut déterminer la probabilité qu'elle prenne une valeur donnée ou se situe dans un intervalle donné.



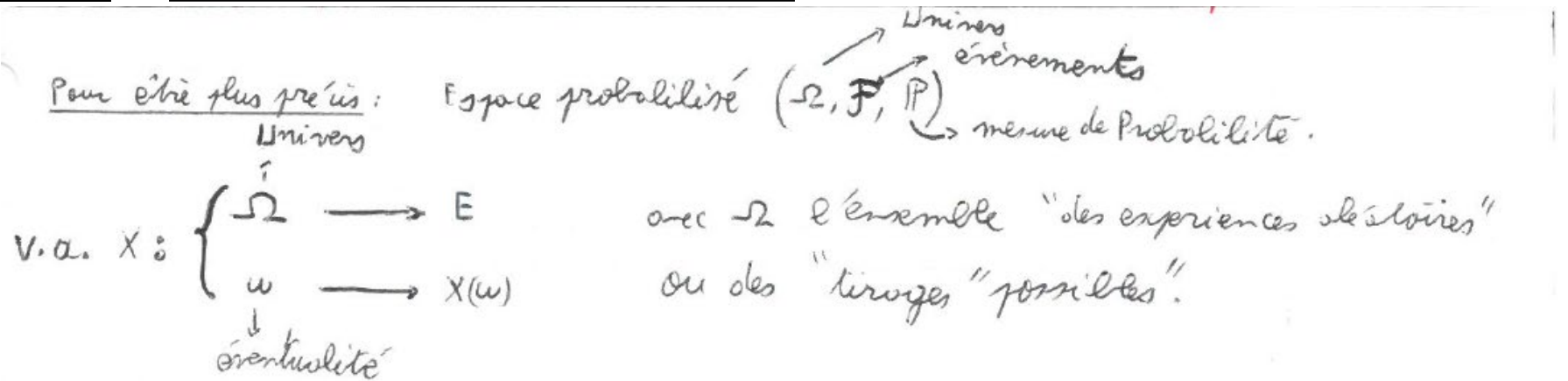
$$\forall k \in E, P_X(k) = \frac{1}{6}$$

Dé à 6 faces: v.a. valeur d'un jet du dé
 $E = \{1, 2, 3, 4, 5, 6\}$

$$P(X \text{ prenne une valeur } h \text{ dans } E) = \boxed{P_X(h)} \quad \text{Loi}$$

1. Notion de variable aléatoire (def « à la physicienne »)

v.a. = fonction X à valeur dans l'ensemble E des résultats possibles d'une **expérience aléatoire** et pour laquelle on peut déterminer la probabilité qu'elle prenne une valeur donnée ou se situe dans un intervalle donné.



Loi d'une variable aléatoire :

$$\mathbb{P} \left[\underbrace{\{ \omega : X(\omega) \text{ vérifie quelque chose } \}}_{\text{un élément de } \mathcal{F}} \right] \equiv \underbrace{\mathbb{P}[F]}_{\substack{\text{occurrence de l'événement} \\ F}}$$

que l'on note $\mathbb{P} [X \text{ vérifie quelque chose }]$ de manière simplifiée.

2. Loi et moments d'une variable

Loi d'une v.a. **discrète** X : fonction P_x qui à un résultat k donné de l'expérience aléatoire associe $P_x(k) = \text{Prob}(\{X=k\})$

E denombrable

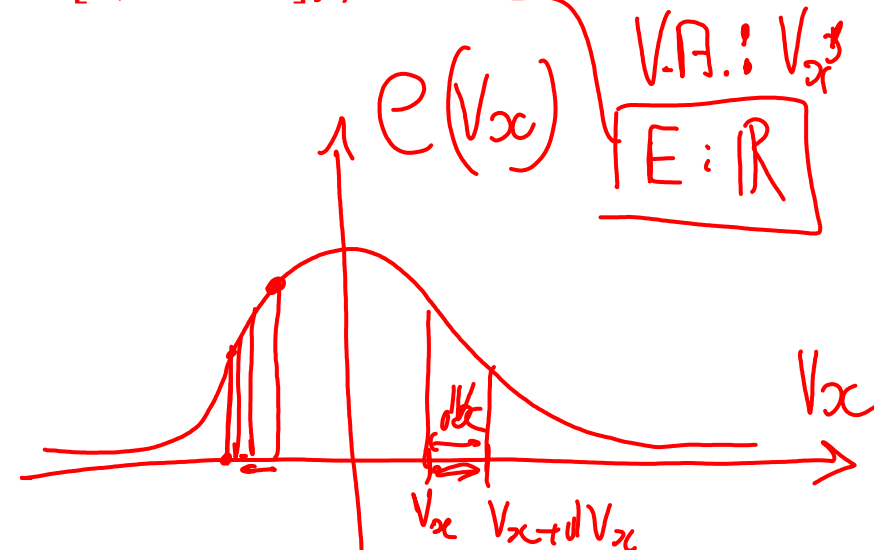
$$E = \{1, \dots, 6\} \quad \forall k \in E; \quad P_x(k) = \frac{1}{6} \quad \#$$

Densité de probabilité d'une v.a. continue X : Fonction p_x qui à un résultat x de l'expérience aléatoire associe $p_x(x)dx = \text{Prob}(\{x \in [x, x + dx]\})$

- $p_x(x)dx$ est une probabilité
- $p_x(x)$ est une densité de probabilité

$$p_x(x)dx \quad \circ \quad \#$$

$[m-1] \quad [m]$



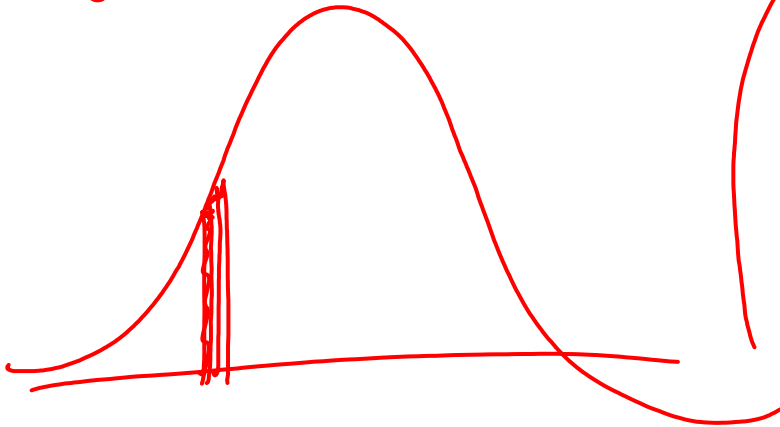
Condition de normalisation

v.a. discrète

$$\sum_{k \in E} P_x(k) = 1$$

$E: \{1, \dots, 6\}$

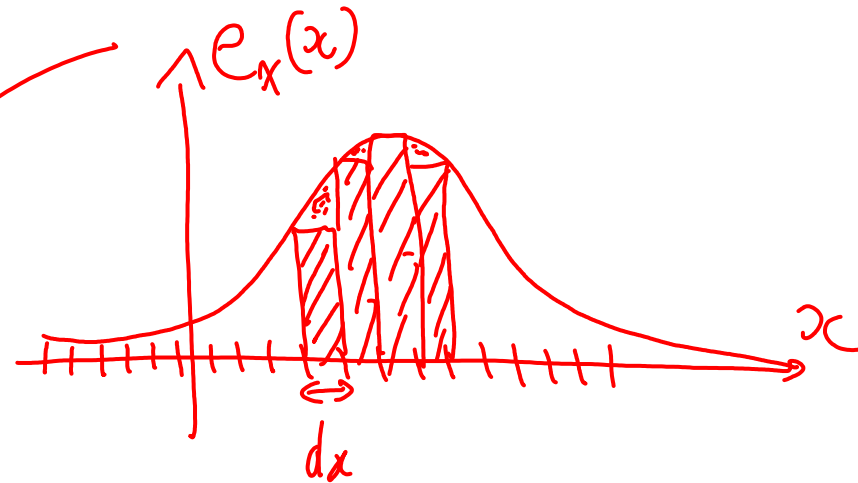
$$P_X(2) = \frac{1}{6}$$



v.a. continue

$$\int_E p_x(x) dx = 1$$

infinitésimal



Espérance de X:

v.a. discrète

$$E(X) = \langle X \rangle = \sum_{k \in E} k \times P_x(k)$$

 $E(k) = 3, 5$

$$\begin{matrix} x_1 & x_2 & x_3 & \dots & x_N \\ 1 & 5 & 2 & \dots & 1 \end{matrix}$$

$$\frac{1}{N} (1 + 5 + 2 + \dots + 1) = \frac{1}{N} (1 \times N_1 + 2 \times N_2 + \dots + 6 \times N_6)$$

$$= 1 \times \left(\frac{N_1}{N} \right) + 2 \times \frac{N_2}{N} + \dots + 6 \times \left(\frac{N_6}{N} \right) + \dots + 1$$

$\rightarrow$ $\left(\frac{N_1}{N} \right) \rightarrow P_x(1)$
 $\rightarrow$ $\left(\frac{N_6}{N} \right) \rightarrow P_x(6)$

v.a. continue

$$\langle X \rangle = \int_E x \times p_x(x) dx$$

N_1 fois 1 123
 N_2 fois 2 254
 $\vdots$
 N_6 fois 6

Moments ($n \in \mathbb{N}$):

v.a. discrète

$$m_n = \sum_{k \in E} k^n \times P_x(k) = E(x^n)$$

v.a. continue

$$m_n = \int_E x^n \times \rho_x(x) dx$$

Moyenne d'une fonction f

v.a. discrète

$$\langle f \rangle = \sum_{k \in E} f(k) \times P_x(k)$$

v.a. continue

$$\langle f \rangle = \int_E f(x) \times \rho_x(x) dx$$

$$E_c = \frac{1}{2} m v_{\text{cl}}^2$$

$$\langle E_c \rangle = \left\langle \frac{1}{2} m v_{\text{cl}}^2 \right\rangle$$

Variance σ_x^2 et écart type σ_x :

$$\sigma_x^2 = \langle (X - \langle X \rangle)^2 \rangle = \langle X^2 \rangle - \langle X \rangle^2$$

$$= E((X - E(X))^2)$$

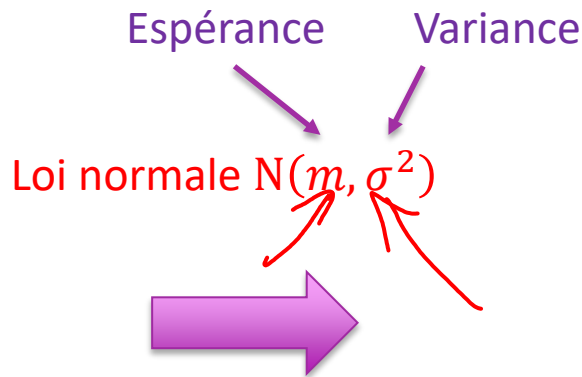
$E()$ linéaire.
 $\langle \rangle$

$$\sigma_x^2 = E((X - E(X))^2) = E(X^2 - 2XE(X) + E(X)^2)$$

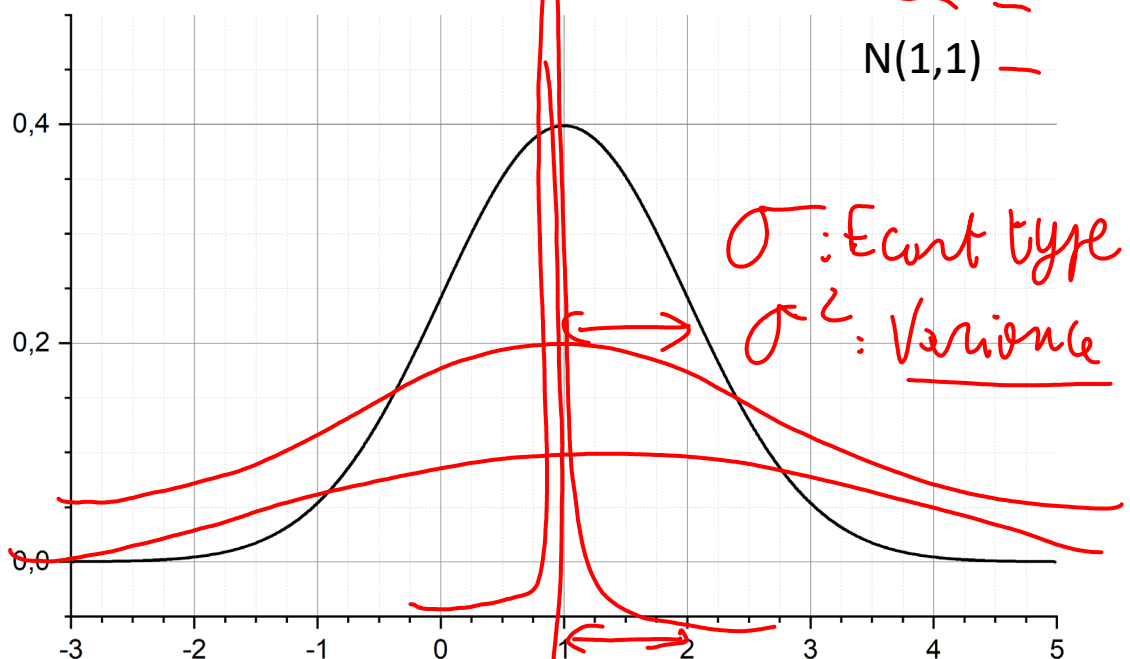
$$= E(X^2) - E(2XE(X)) + E(E(X)^2)$$

v.a. v.a.
#

Exemple important en physique, les v.a. gaussiennes qui seront omniprésentes:



$$p_x(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{(x-m)^2}{2\sigma^2}\right)$$



$$E((X - E(X))^2) = E(X^2 - 2X E(X) + E(X)^2)$$

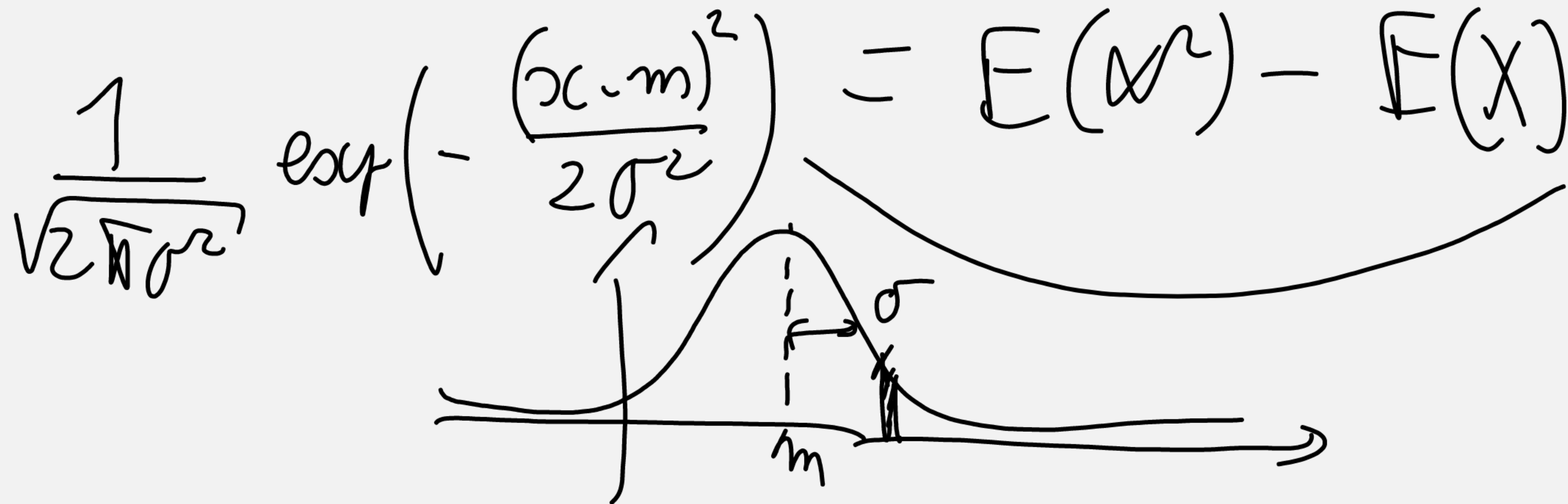
$$= E(X^2) - E(2X \underbrace{E(X)}_{\#}) + E(\underbrace{E(X)^2}_{\#})$$

$N(m, \sigma^2)$
 $\uparrow$ Expectance $\uparrow$ Variance

$$= E(X^2) - 2E(X) \times E(X) + E(X)^2$$

$$= E(X^2) - 2E(X)^2 + E(X)^2$$

$$= E(X^2) - E(X)^2$$



Formules utiles

Soit
$$I_n = \int_0^{\infty} t^n e^{-at^2} dt \quad \text{avec } (a>0)$$

(Handwritten red arrow points from $a>0$ to the a in the exponent)

Relation de récurrence
$$I_{n+2} = \frac{n+1}{2a} I_n$$

Avec
$$I_0 = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{a}}$$
 et
$$I_1 = \frac{1}{2a}$$

$$L(t) \quad L'(t) = \frac{dL}{dt}$$

$$W(t) = L(t) V(t)$$

$$W'(t) = L'(t) \cdot V(t) + L(t) V'(t)$$

$$\int_a^b W'(t) dt = \int_a^b L'(t) V(t) dt + \int_a^b L(t) V'(t) dt$$

$$\begin{aligned} [W(t)]_a^b \\ [L(t)V(t)]_a^b \end{aligned}$$

$$\int_a^b L'(t) V(t) dt = [L(t)V(t)]_a^b - \int_a^b L(t)V'(t) dt$$

$$I_n = \int_0^{\infty} t^n e^{-at^2} dt$$

$\left(\frac{1}{2a} e^{-at^2} \right)' = -t e^{-at^2}$

$\underbrace{t}_{V(t)} \underbrace{e^{-at^2}}_{U'(t)}$

$$\hookrightarrow I_{n+2} = \int_0^{\infty} t^{n+2} e^{-at^2} dt$$

$$\left(e^{U(t)} \right)' = U'(t) e^{U(t)}$$

$$U(t) = -at^2$$

$$I_{n+2} = \int_0^{\infty} \underbrace{t^{n+1}}_{V(t)} \underbrace{t e^{-at^2}}_{U'(t)} dt$$

$$= \left[t^{n+1} \times \left(-\frac{1}{2a} \right) e^{-at^2} \right]_0^{\infty} - \underbrace{(n+1)}_{\text{circled}} t^n \times \left(-\frac{1}{2a} \right) \int_0^{\infty} e^{-at^2} dt$$

$0 - 0 + \frac{n+1}{2a} \int_0^{\infty} t^n e^{-at^2} dt$

$\text{circled } + \frac{n+1}{2a} I_n$

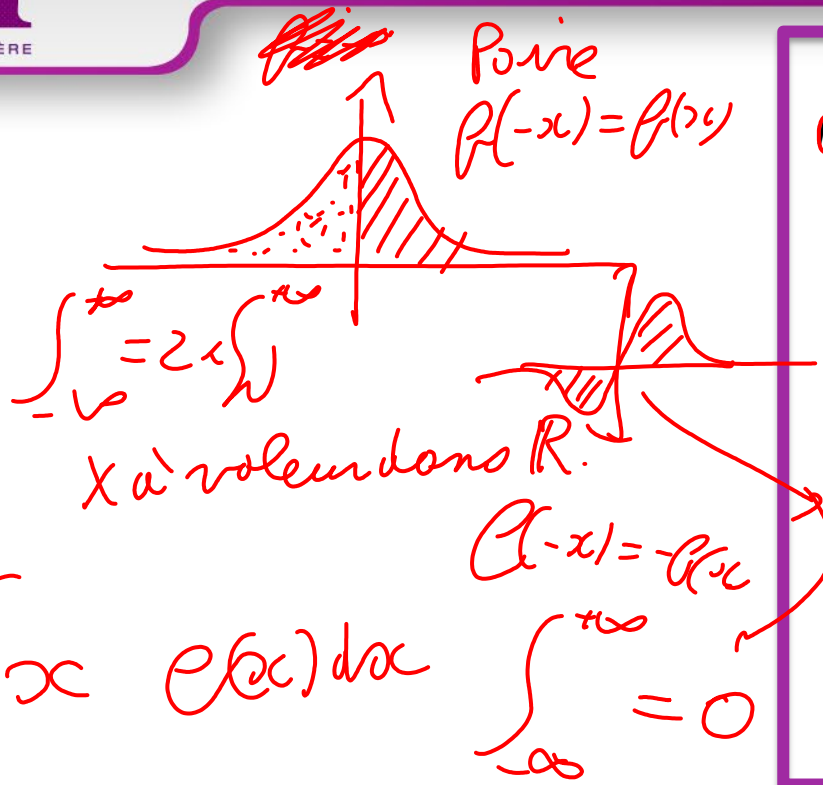
A vos stylos !

$\rho_x(x)$ Normée ?
m espérance ?
 σ^2 variance ?

$m = E(X)$

$$E(X) = \int_{-\infty}^{+\infty} x \rho(x) dx$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} x \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{(x-m)^2}{2\sigma^2}\right) dx$$



$$\rho_x(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{(x-m)^2}{2\sigma^2}\right)$$

$$I_n = \int_0^{\infty} t^n e^{-at^2} dt$$

$$I_{n+2} = \frac{n+1}{2a} I_n$$

$$I_0 = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{a}} \quad \text{et} \quad I_1 = \frac{1}{2a}$$

- $y = x - m$
- Parité de la fonction
- C'est I_1 ?