

Variables et processus aléatoires

Processus aléatoire classique :

- $\omega_1(y_1, t_1)$ la probabilité d'avoir $y_1 \leq y(t_1) \leq y_1 + dy_1$
- $\overline{y(t_1)} = \int y_1 \omega_1(y_1, t_1) dy_1$
- $\omega_2(y_1, t_1; y_3, t_3) = \int dy_2 \omega_3(y_1, t_1; y_2, t_2; y_3, t_3)$
- $P_1(y_2, t_2 | y_1, t_1)$ la proba de $y(t_2) = y_2$ sachant $y(t_1) = y_1$
- $\omega_2(y_1, t_1; y_2, t_2) dy_1 dy_2 = P_1(y_2, t_2 | y_1, t_1) \omega_1(y_1, t_1) dy_1$
- $P_1(y_3, t_3 | y_1, t_1) = \int dy_2 P_2(y_3, t_3 | y_2, t_2; y_1, t_1) P_1(y_2, t_2 | y_1, t_1)$

Processus de Markov :

- Ne dépend plus du passé ie $P_{n-1}(y_n, t_n | y_{n-1}, t_{n-1}; \dots; y_1, t_1) = P_1(y_n, t_n | y_{n-1}, t_{n-1})$
- Equation de Smoluchowski : $P(y_3, t_3 | y_1, t_1) = \int dy_2 P(y_3, t_3 | y_2, t_2) P_1(y_2, t_2 | y_1, t_1)$
- Equilibre détaillé : $W_{ij} P_j = W_{ji} P_i$ avec W_{ij} la proba de transition et $P_j = D(y_j, t) dy_j$

Fokker-Planck :

- $\frac{\partial D(y, t)}{\partial t} = \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \frac{\partial^n}{\partial y^n} Mn(y) D(y, t)$ avec $Mn(y) = \frac{1}{n!} \lim_{\delta t \rightarrow 0} \frac{(\delta y)^n}{\delta t}$

Processus aléatoire gaussien stationnaire :

- Fonction de corrélation : $g(t' - t) = \overline{y(t) y(t')}$

Analyse harmonique :

- Densité spectrale : $J(\omega) = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{2\pi}{T} |\tilde{y}(\omega)|^2$
- Wiener - Khintchine : $g(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega J(\omega) e^{-i\omega t}$ et $J(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dt g(t) e^{i\omega t}$

Système en contact avec un thermostat :

- $\frac{W_{ij}}{W_{ji}} = e^{-\beta(E_i - E_j)}$

Modèle de Langevin

Equation du mouvement :

- $m \frac{d}{dt} v(t) = -m\gamma v(t) + F(t)$ avec $F(t)$ la force aléatoire et $\overline{F(t)} = 0$

Relation fluctuation – dissipation :

- $\overline{v^2(t)} \rightarrow \frac{D}{\gamma}$ et $\gamma = \frac{mD}{kT}$

- $g(t) = 2Dm^2 \delta(t)$ pour des temps très courts.

- $D = \frac{1}{2m^2} \int_{-\infty}^{+\infty} dt g(t)$

- Il y a deux échelles de temps : rapide (vitesse) et lente (corrélation).

Equation de Fokker-Planck dans le modèle de Langevin :

- $\frac{\partial}{\partial t} P(v,t) = \gamma \frac{\partial}{\partial v} (v P(v,t)) + D \frac{\partial^2}{\partial v^2} P(v,t)$

Théorie macroscopique

Equation de conservation :

- $\frac{d}{dt} A_i(a, t) = - \sum_{b \neq a} \phi_i(a \rightarrow b) + \phi_i(\text{sources} \rightarrow a)$
- Avec $A_i(a, t) = \int_V d^3 r \rho_i(\vec{r}, t)$ et $\sum_{b \neq a} \phi_i(a \rightarrow b) = \int d\vec{S} \cdot \vec{j}_i = \int d^3 r \vec{\nabla} \cdot \vec{j}_i$

Equation de conservation locale :

- $\frac{\partial \rho_i}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{j}_i = \sigma_i$ et \vec{j}_i la densité de courant.

Variable locale :

- $\gamma_i(a) = \frac{\partial S(a)}{\partial A_i(a)}$
 - $S_{tot} = \sum_a S(a) = \sum_{i,a} \gamma_i(a) A_i(a)$
- $$A_i = N \quad \gamma_N = \frac{-\mu}{T}$$

$$A_i = E \quad \gamma_E = \frac{1}{T}$$

$$A_i = P_\alpha \quad \gamma_{P_\alpha} = \frac{-u_\alpha}{T} = -\frac{P_\alpha}{m} \frac{1}{T}$$

Affinités :

- Déviation par rapport à l'équilibre.
- $\Gamma_i(a, b) = \gamma_i(b) - \gamma_i(a) = -\Gamma_i(b, a)$
- $\phi_i(a \rightarrow b) = \sum_j L_{ij}(a, b) \Gamma_j(a, b)$

Relation de réciprocité d'Onsager :

- $L_{ij}(a, b) = L_{ji}(b, a) = L_{ji}(a, b)$

Equation de diffusion :

- Solution de la forme $\frac{\partial}{\partial t} A(\vec{r}, t) = D \nabla^2 A(\vec{r}, t)$ avec D le coefficient de diffusion.

Equation de transport :

- $j_\alpha^i(\vec{r}, t) - j_\alpha^{eq} = \sum_{j, \beta} L_{ij}^{\alpha\beta} \partial_\beta \gamma_j(\vec{r}, t)$

Courant d'énergie :

$$- \quad \overline{j_E}(\vec{r}, t) = -\kappa \overline{\nabla T}(\vec{r}, t) \quad \text{à} \quad \overline{j_N} = 0 \quad \text{et} \quad \overline{j_E} = L_{EE} \overline{\nabla} \left(\frac{1}{T} \right) + L_{EN} \overline{\nabla} \left(-\frac{\mu}{T} \right).$$

Continuité de la densité d'énergie :

$$- \quad \frac{\partial \epsilon}{\partial t} + \overline{\nabla} \cdot \overline{j_E} = 0 \quad \text{avec } \epsilon \text{ la densité d'énergie}$$

Loi de Fick : courant de particules

$$- \quad \overline{j_N}(\vec{r}, t) = -D \overline{\nabla n}(\vec{r}, t) \quad \text{à} \quad T = \text{cste} \quad \text{et} \quad \overline{j_N} = L_{NE} \overline{\nabla} \left(\frac{1}{T} \right) + L_{NN} \overline{\nabla} \left(-\frac{\mu}{T} \right).$$

Continuité de la densité d'entropie :

$$- \quad \frac{\partial s}{\partial t} + \overline{\nabla} \cdot \overline{j_s} = \sigma_s$$

Courant d'entropie :

$$- \quad \overline{j_s} = \sum_i \gamma_i \overline{j_i} + \frac{P}{T} \overline{u} = \frac{1}{T} \overline{j_E} - \frac{\mu}{T} \overline{j_N} + \frac{P}{T} \overline{u}$$

Conservation de la masse :

$$- \quad \frac{\partial \rho}{\partial t} + \overline{\nabla} \cdot \overline{j_{el}} = 0 \quad (\text{conducteur})$$

- Puissance = Courant x Surface

- $j_z^G = -v_L n$ le nombre de particules de surfaces par unité de temps $m^{-2}s^{-1}$.

$$- \quad \overline{j_{el}} = \overline{j_N} = \frac{I}{S} \hat{u}$$

Théorie cinétique

Densité de particules :

- $n(\vec{r}, t) = \int d^3 p f(\vec{r}, \vec{p}, t)$ avec $f(\vec{r}, \vec{p}, t)$ la fonction de distribution.

Section efficace différentielle de diffusion :

- $\sigma(v, \Omega')$

Section efficace totale :

- $\sigma_{tot} = \int d\Omega' \sigma(v, \Omega')$. Si le potentiel de diffusion est isotrope alors $\sigma(v, \Omega') \equiv \sigma(v) = \frac{\sigma_{tot}}{4\pi}$ indépendant de la direction.

Nombre de collisions par unité de temps et de volume :

- $\frac{dN}{dt dV} = F n_d \sigma(v, \Omega') d\Omega'$

avec $F = nv$ le flux incident, n_d la densité de diffuseur et $d\Omega'$ la direction de diffusion.

- $\frac{dN_{12}}{dt dV_2} = n_1 n_2 v \sigma(v_1, v_2, \Omega') d\Omega'$ (collisions de 2 sur 1) avec le flux $F_2 = n_2 v$ de particules incidentes et la vitesse relative (invariance galiléenne) $v = |\vec{v}_2 - \vec{v}_1|$

Temps de vol :

- $\tau^{-1} = n_d v \int d\Omega' \sigma(v, \Omega')$ donc $\tau \approx \frac{1}{n \langle v \rangle \sigma_{tot}}$

Libre parcours moyen :

- $l \approx \frac{1}{n \sigma_{tot}}$

Théorème de Liouville :

- $d^3 r d^3 p = d^3 r' d^3 p'$

Equation de la dynamique :

- $\left(\frac{\partial}{\partial t} + \vec{v} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{r}} + \vec{F} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{p}} \right) f(\vec{r}, \vec{p}, t) = C[f]$ avec $C[f]$ le terme de collisions.

$$\zeta = \frac{1}{m_d v \sigma_e} \quad \ell = \frac{1}{m_d \sigma_e}$$

$$Q[f] = v m_d \int d\Omega' \sigma(v, \Omega') [f(\vec{n}, \vec{p}', t) - f(\vec{n}, \vec{p}, t)]$$

$$C[f_1] = -\frac{f_1}{\tau} = -m_d v \sigma f_1$$

$$= (\vec{v} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{n}} + \vec{F} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{p}}) f_0 \quad \Rightarrow \quad f_1 = -\frac{\ell}{v} (\vec{v} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{n}} + \vec{F} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{p}}) f_0$$

$$J_N^0 = \int d^3 p \vec{v} f_1 = - \int d^3 p \zeta \vec{v} (\vec{v} \cdot \vec{\nabla}) f_0$$

$$J_E^0 = \int d^3 p \vec{v} \varepsilon f_1 = - \int d^3 p \zeta \varepsilon \vec{v} (\vec{v} \cdot \vec{\nabla}) f_0$$

) $\vec{F}=0$

Direns: $\zeta = e^\alpha = m d^3$

$$\mu = kT \ln(m d^3)$$

$$d = \sqrt{\frac{h^3}{2\pi m kT}}$$

$$\frac{1}{(2\pi m kT)^{3/2}} \int d^3 p e^{-\frac{p^2}{2mkT}} = 1$$

$$\int d^3 p (\vec{p} \cdot \vec{a}) \vec{p} g(p) = \frac{\vec{a}}{3} \int d^3 p p^2 g(p)$$