

1-Introduction:

L'état macroscopique d'un système en équilibre ou en équilibre local peut être paramétré par un certain nombre de variables extensives ou par leurs densités locales. A l'échelle microscopique l'état d'un tel système n'est pas connu exactement. Pour pouvoir déduire les grandeurs macroscopiques des propriétés microscopiques, il est nécessaire de les traiter comme des moyennes statistiques sur l'ensemble des particules du système d'où l'utilité d'utiliser des probabilités. Les grandeurs physiques mesurables, appelées observables, dépendent des coordonnées et des impulsions de toutes les particules du système. Leurs moyennes statistiques se calculent, pour un système classique, à l'aide de la fonction de distribution dans l'espace des phases, et à l'aide de l'opérateur densité pour un système quantique.

1-1-Fonction de distribution dans l'espace des phases:

-Espace des phases:

On considère un système classique de N particules, tel que par exemple un gaz ou un liquide. Le nombre N est supposé fixé (système fermé). Un état microscopique est donné par 3N coordonnées spatiales q_1, q_2, \dots, q_{3N} des centres de masses de particules et des 3N composantes p_1, p_2, \dots, p_{3N} de leurs impulsions. On peut construire un espace à 6N dimensions de coordonnées $q_1, \dots, q_{3N}, p_1, \dots, p_{3N}$ appelé espace des phases.

La mécanique statistique est fondée sur le principe ergodique qui consiste à postuler l'équivalence entre moyenne d'ensemble et moyenne temporelle.

1-2-fonction de distribution dans l'espace des phases. Moyenne d'ensemble.

Soit l'exemple d'un fluide classique de N particules ponctuelles, la fonction de distribution dans l'ensemble des phases $f(q_1, \dots, q_{3N}, p_1, \dots, p_{3N}, t)$ est définie de la manière suivante: la quantité

$$f(q_1, \dots, q_{3N}, p_1, \dots, p_{3N}, t) dq_1 \dots dq_{3N} dp_1 \dots dp_{3N} \quad (1-2-1)$$

représente la probabilité pour que le point représentatif de l'état microscopique d'un système se trouve à l'instant t dans l'élément de volume $dq_1 \dots dq_{3N} dp_1 \dots dp_{3N}$ centré au point $(q_1, \dots, q_{3N}, p_1, \dots, p_{3N})$. Cette probabilité s'écrit d'une manière abrégée $f(q, p, t) dq dp$.

Cette fonction doit être normalisée de telle sorte que

$$\int f(q, p, t) dq dp = 1 \quad (1-2-2)$$

On peut calculer maintenant la moyenne d'ensemble d'une variable dynamique $A(q, p)$ comme suit:

$$\langle A(t) \rangle = \frac{\int A(q, p) f(q, p, t) dq dp}{\int f(q, p, t) dq dp} \quad (1-2-3)$$

On utilise souvent, au lieu de l'équation de normalisation donnée ci-dessus, la convention suivante:

$$\frac{1}{N! h^{3N}} \int f(q, p, t) dq dp = 1 \quad (1-2-4)$$

Nous allons maintenant étudier l'évolution temporelle de la fonction de distribution donnée par l'équation de Liouville.

Le système auquel l'on s'intéresse dans la théorie cinétique classique des gaz est un gaz dilué de N molécules identiques de masse m contenu dans une boîte de volume V . Le gaz est suffisamment dilué pour être presque parfait: la distance moyenne entre molécules, $d \sim (V/N)^{1/3}$, est grande devant la portée des forces intermoléculaires, r_0 de sorte que les molécules sont la plupart du temps libres et indépendantes. Nous analysons l'influence des collisions qui jouent un rôle important dans l'évolution du gaz vers l'équilibre macroscopique. On tient compte que des collisions binaires et on suppose que les molécules n'ont pas de structure interne: ce sont des molécules monoatomiques.

Chaque molécule peut être considérée comme une particule classique avec une position et une impulsion. Les particules sont cependant considérées comme indiscernables.

La plupart des propriétés d'un gaz classique dilué sont décrites au moyen de la fonction de distribution à une particule $f(r, p, t)$; par définition: $f(r, p, t) dr dp$ représente le nombre de molécules qui, à l'instant t , ont une position dans un élément de volume dr centré en r et une impulsion dans un élément de volume dp centré en p .

2-Equations de transport:

Nous nous proposons d'étudier les principes de modélisation conduisant à la famille des équations de transport, appelées aussi équations cinétiques.

2-1-Transport non accéléré entre deux collisions:

Prenons un ensemble de corpuscules décrits par une position et une vitesse, et qui se déplacent en ligne droite à vitesse constante entre deux événements d'interaction avec un autre corpuscule de même espèce. On considère ensuite les interactions quasi-instantanées et quasi-ponctuelles aux échelles considérées. On note $f(\vec{x}, \vec{v}, t) d\vec{x} d\vec{v}$ le nombre de corpuscules se trouvant, à l'instant t , dans un volume élémentaire $d\vec{x}$ autour du point \vec{x} et dans un élément $d\vec{v}$ autour de \vec{v} dans l'espace des vitesses. On suppose, les lieux des interactions, distribués spatialement aléatoirement de façon continue et indépendant. On note $\lambda(\vec{x}, \vec{v}, t)$ le libre parcours moyen avant interaction.

Nous montrerons dans le cadre de ces suppositions que la fonction de distribution f vérifie l'équation de transport suivante:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v} \cdot \text{grad}_X(f) = -\frac{\|\vec{v}\|}{\lambda} f + S \quad (2-1-1)$$

Ou $S(\vec{x}, \vec{v}, t)$ est le taux temporel, en \vec{x} , auquel apparaissent des corpuscules de vitesse \vec{v} .

Il faut noter que toutes les équations de transport évoquées ultérieurement, sont soumises à trois hypothèses communes:

_les corpuscules sont décrits par une position et une vitesse.

_les interactions sont supposées quasi-instantanées et quasi-ponctuelles aux échelles considérées.

_les lieux des interactions possibles sont distribués spatialement aléatoirement d'une façon continue et indépendante.

3-Equation de Liouville:

Pour décrire l'état d'un gaz on peut adopter les méthodes de l'hydrodynamique avec l'introduction d'un certain nombre de grandeurs macroscopiques telles que la densité, la vitesse du fluide, la pression etc... On peut aussi pour des études plus fines, tenir compte de la nature moléculaire du fluide et ceci en introduisant des grandeurs telles que les fonctions de distribution des vitesses donnant une description microscopique de fluide.

La méthode suivie dans notre étude est dite régressive. Nous partirons de la description la plus fine possible du fluide et nous établirons l'équation d'évolution de la densité dans l'espace des phases. C'est l'équation de Liouville qui est la seule qui donne une description complète de l'évolution du fluide.

Par une série d'intégrations correspondante chacune à la disparition d'une variable et par suite à la perte de l'information, nous établirons des équations d'évolution des fonctions de distributions simples f_1 , double f_{12} ...

En se contentant de définir une densité de probabilité: $D(r_1, r_2, \dots, r_N, w_1, w_2, \dots, w_N, t)$

Avec r_i : vecteur position

w_i : vecteur vitesse

Nous aboutirons après des transformations faites et des considérations, à l'équation de Liouville relative à D sous la forme :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \sum_{i=1}^N v_i \cdot \nabla_{r_i} f + \sum_{i=1}^N F_i \cdot \nabla_{p_i} f = 0 \quad (3-1)$$

En désignant par F_i la force totale agissant sur la particule i

$$F_i = X_i + \sum_{j=1(i \neq j)}^N X_{ij} \quad (3-2)$$

3-1Système d'équation de BBGKY

En multipliant l'équation de Liouville (1) par N et en l'intégrant sur les variables $r_2, w_2, \dots, r_N, w_N$, on obtient l'équation d'évolution de f_1 :

$$\frac{\partial f^{(1)}}{\partial t} + v_1 \cdot \nabla_{r_1} f^{(1)} + X_1 \cdot \nabla_{p_1} f^{(1)} + \underbrace{\int X_{12} \cdot \nabla_{p_2} f^{(2)} d\Omega_2}_{B(f_{12})} = 0 \quad (3-1-1)$$

Sous cette forme elle exprime que la variation, en un point donné du gaz, de la fonction de distribution est donnée par la somme de trois termes :

*Le premier terme $-w_1 df_1/dr_1$ exprime l'influence des phénomènes de diffusion.

*Le deuxième terme $-X_1/m \cdot df_1/dw_1$ exprime l'action des forces appliquées.

*Le troisième terme B représente l'influence des interactions entre particules.

En suivant le même raisonnement on peut obtenir l'équation d'évolution suivante pour $f^{(2)}$:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f^{(2)}}{\partial t} + v_1 \cdot \nabla_{r_1} f^{(2)} + v_2 \cdot \nabla_{r_2} f^{(2)} + (X_1 + X_{12}) \cdot \nabla_{p_1} f^{(2)} + (X_2 + X_{12}) \cdot \nabla_{p_2} f^{(2)} + \\ + \int (X_{13} \cdot \nabla_{p_1} f^{(3)} + X_{23} \cdot \nabla_{p_2} f^{(3)}) d\Omega_3 = 0 \end{aligned} \quad (3-1-2)$$

Où les deux derniers termes représentent l'effet des interactions triples.

Il est clair que les équations (2) et (3) forment un système indéterminé, la première ne permet de déterminer $f^{(1)}$ que si on connaît $f^{(2)}$; et la deuxième de déterminer $f^{(2)}$ que si on connaît $f^{(3)}$.

A partir de l'équation de Liouville ,déjà établie ,on obtient un système de N équations couplées de proche en proche; ce système est appelé système de Born_Bogolioubov_Green_Kirkwood_Yvon ou plus simplement système BBGKY.

Pour pouvoir l'utiliser, il faut l'arrêter à un stade quelconque en passant par une hypothèse simplificatrice sur l'une des fonctions de distribution.

Les méthodes de fermeture proposées par divers auteurs conduisent à donner, à partir des approximations différentes,les diverses équations d'évolution :

-Equation de Boltzmann

-Equation de Liouville à une particule.

-Equation de Vlasov.

-Equation de Fokker Planck.

-Equation de Balescu.

Les plus importantes de ces équations sont celles de Boltzmann et de Vlasov.

Les approximations faites sont telles que:

1-l'approximation la plus simple consiste à négliger purement et simplement les interactions entre particules donc de poser $B(f_{12})=0$ dans l'équation (3-1-1) et par suite on aura l'équation de la forme:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v \cdot \nabla_r f + F \cdot \nabla_p f = 0. \quad (3-1-3)$$

Qui n'est autre que l'équation de Boltzmann sans second membre, utilisable dans les domaines suivants:

- trajectoire des particules dans la magnétosphère.
- accélérateurs de particules, source d'ions.
- machines à plasma pour la fusion contrôlée (régime à basse densité, problèmes d'injection)

2-L'hypothèse la plus simple que l'on puisse faire, quand la densité des particules est telle que l'on ne peut plus négliger les interactions, consiste à négliger les corrélations entre particules

Dans B (f_{12}), on peut poser $f_{12}=f_1.f_2$.

Approximation valable si les points 1 et 2 sont assez éloignés l'un de l'autre.

Après des suppositions faites on aura l'équation finale:

$$\partial_t(f) + W \cdot \nabla(f) + \frac{q}{m} (E + W \times B) \cdot \nabla_w(f) = 0 \quad (3-1-4)$$

C'est l'équation de Vlasov. Elle est l'équation cinétique fondamentale de la théorie des plasmas.

Physiquement, elle consiste à ne tenir compte, dans les interactions qui déterminent les trajectoires des particules, que des interactions collectives.

3-on peut faire une hypothèse extrême: les phénomènes d'interactions sont les collisions binaires et brutales, et qu'entre deux collisions, les particules ne sont soumises à aucune force et suivant une trajectoire rectiligne. On aboutira à l'équation générale de Boltzmann.

4-EQUATION DE BOLTZMANN: il s'agit d'étudier la dynamique d'un système fermé constitué d'un grand nombre de particules.

En 1872 Boltzmann a proposé sa fameuse équation décrivant l'évolution d'un gaz dilué dans une enceinte thermiquement isolée. Les seules interactions sont les collisions binaires entre particules gouvernées par le potentiel $V(r_i-r_j)$.

Cette théorie de Boltzmann garde de nos jours sa forme initiale et sa valeur pour les questions touchants aux problèmes de transport.

Il faut rappeler qu'un gaz dilué est un gaz presque parfait : la distance moyenne entre molécules $d \sim (V/N)^{1/3}$, est grande devant la portée des forces intermoléculaires r_0 .

D'une manière générale, les phénomènes de transport décrivent la réponse d'un système maintenu dans des conditions extérieures de déséquilibre. Ce dernier est créé par des gradients de potentiel, de vitesse, de température, de concentration, ... imposés au sein du système.

4-1-Echelles de temps et de longueur:

4-1-1-Echelle de temps:

L'établissement de l'équation de Boltzmann consiste à obtenir une expression df/dt . Dans cette dérivée dt ne représente pas un intervalle de temps infinitésimal mais un intervalle beaucoup plus long que la durée τ_0 d'une collision. L'échelle de temps est donc un intervalle $\Delta t \gg \tau_0$.

L'évolution macroscopique des grandeurs thermodynamiques locales se fait sur une échelle de temps longue par rapport au temps de collision τ . L'équation de Boltzmann, quant à elle, permet de décrire l'évolution du gaz vers un équilibre local. L'échelle de temps Δt reste petite par rapport au temps de collision τ . L'équation de Boltzmann décrit l'évolution de la fonction de distribution sur une échelle de temps intermédiaire Δt , telle que:

$$\tau_0 \ll \Delta t \ll \tau$$

4-1-2-Echelle de longueur:

La fonction de distribution change peu sur des distances de l'ordre de la portée r_0 des forces intermoléculaires. Donc il faut choisir les dimensions de l'élément de volume spatial dr grandes devant r_0 . A l'échelle de dr , les collisions sont traitées comme locales.

-Equation de transport de Boltzmann:

On considère un gaz monoatomique: atomes assimilés à des particules ponctuelles de masse m .

La quantité sur laquelle porte cette équation est la densité $f(r,v,t)$ dans l'espace des phases avec la normalisation

$$\int_{\Lambda} d^3r \int_{\mathbb{R}^3} d^3v f(r,v,t) = N \quad (4-1-2-1)$$

N : nombre total des particules.

Volume du système.

-on définit la densité locale $n(r,t)$ comme l'intégrale la fonction de distribution à une particule sur toutes les quantités de mouvement.

$$n(r,t) = \int f(r,p,t) dp \quad (4-1-2-2)$$

- En l'absence de collisions, la force s'exerçant sur une particule se réduit à la force extérieure F . La fonction de distribution à une particule obéit à l'équation d'évolution:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v \cdot \nabla_r f + F \cdot \nabla_p f = 0, \quad (4-1-2-3)$$

Cette équation traduit la conservation de la densité $f(r, p)$ dans l'espace

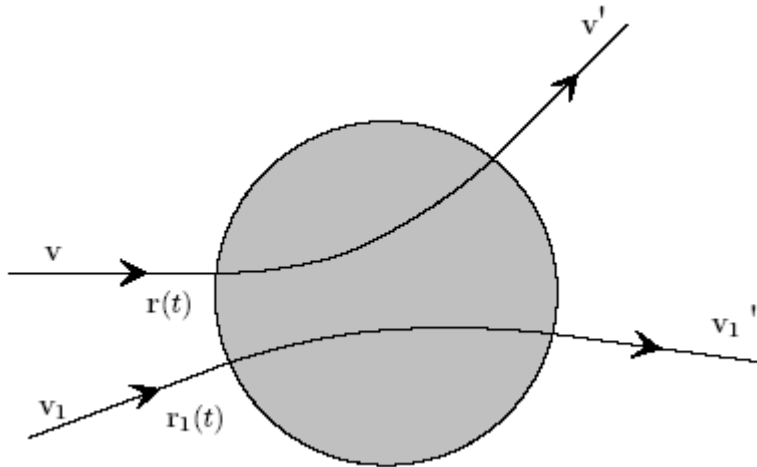
-Effet des collisions: en présence de collisions, le nombre de particules à l'intérieur d'un volume donné de l'espace n'est plus conservé, et cette dernière équation s'écrit formellement:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v \cdot \nabla_r f + F \cdot \nabla_p f = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{coll}}. \quad (4-1-2-4)$$

On remarque l'introduction d'un terme de collision. C'est en le spécifiant que l'hypothèse de gaz dilué avec des collisions binaires prendra toute sa pertinence.

4-2- Description d'une collision:

On considère deux particules de vitesses initiales v et v_1 avec un potentiel d'interaction radial $V(|r - r_1|)$ subissant une collision, de vitesses finales v' et v_1'



Collision entre deux particules

On décrit le processus dans le référentiel de centre de masse à l'aide des coordonnées relatives:

- Vitesse de centre de masse : $V = \frac{1}{2}(v + v_1)$
- Vitesse relative : $u = v_1 - v$
- Position relative : $\rho = r_1 - r$
- Position réduite : $\mu = \frac{1}{2}m$

Les lois de conservation de la quantité de mouvement:

$$v + v_1 = v' + v_1'$$

$$|v|^2 + |v_1|^2 = |v'|^2 + |v_1'|^2$$

Et de l'énergie:

Cette dernière égalité donne:

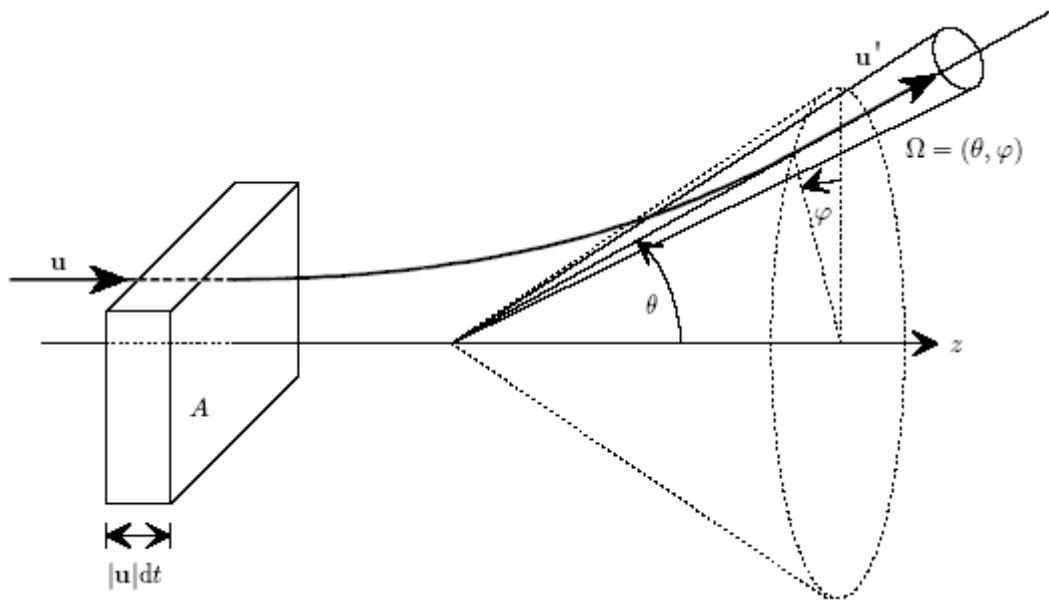
$$\begin{aligned} &|v + v_1|^2 = |v' + v_1'|^2 \\ \Rightarrow &|v|^2 + |v_1|^2 + 2v \cdot v_1 = |v'|^2 + |v_1'|^2 + 2v' \cdot v_1' \\ \Rightarrow &v \cdot v_1 = v' \cdot v_1' \\ \Rightarrow &|v|^2 + |v_1|^2 - 2v \cdot v_1 = |v'|^2 + |v_1'|^2 - 2v' \cdot v_1' \\ \Rightarrow &|v - v_1|^2 = |v' - v_1'|^2, \end{aligned}$$

On en déduit que:

$$\begin{aligned} V &= V', \\ |u| &= |u'|. \end{aligned}$$

La première de ces deux égalités signifie que le centre de masse est en translation uniforme, tandis que pour la deuxième l'énergie relative (ou le module de la vitesse

relative) est conservée. Le phénomène de diffusion dans le référentiel de centre de masse est illustré dans la figure suivante:



Cela consiste uniquement en un changement de direction de la vitesse relative. L'information sur le processus de diffusion est contenu dans le concept de section $\sigma(\Omega)$ efficace

Imaginons un flux de particules incidentes I de vitesse u , alors:

$I = \{ \text{nombre de particules traversant une unité de surface perpendiculaire à } u \text{ par unité de temps} \}$

$$= n(u) \frac{A |u| dt}{A dt}$$

$$= n(u) |u|,$$

Avec $n(u)$ est le nombre de particules par unité de volume

La section efficace $\sigma(\Omega, |u|)$ est définie par:

$$I \sigma(\Omega, |u|) d\Omega = \begin{cases} \text{nombre de particules diffusées dans l'élément d'angle solide } d\Omega \\ \text{autour de } \Omega \text{ par unité de temps, quand le flux incident est } I. \end{cases}$$

4-3- Etablissement de la forme finale de l'équation:

On introduit la notation suivante:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{coll.}} = \bar{R} - R,$$

Ce terme de collision est difficile à déterminer, mais il contient toute la physique du problème. Pour calculer ce terme on fait des hypothèses suivantes:

*Seules les collisions binaires sont prises en compte, ce qui est valable si le gaz est suffisamment dilué.

*Les molécules sont monoatomiques ce qui implique l'élasticité des collisions puisqu'il ne peut y avoir d'échange d'énergie avec les degrés de liberté internes.

*On néglige les effets des parois du récipient

*Les collisions sont considérées comme locales et instantanées.

*enfin, dans une collision entre deux molécules, on néglige toutes les corrélations éventuelles entre les vitesses des deux molécules avant la collision.

Cette dernière, appelée l'hypothèse du chaos moléculaires a été formulée par L. Boltzmann en 1872. Elle est justifiée si la densité du gaz est suffisamment faible.

Il faut noter que \bar{R} est appelé terme entrant et R terme sortant. La quantité $R dr dp dt$ représente le nombre moyen de molécules effectuant une collision entre les instants t et $t+dt$, l'une des deux molécules se trouvant, avant la collision, dans l'élément de volume $dr dp$ autour du point (r,p) ; de même la quantité $\bar{R} dr dp dt$ représente le nombre moyen de molécules effectuant une collision entre les instants t et $t+dt$, l'une des deux molécules se trouvant, après la collision, dans l'élément de volume $dr dp$ autour du point (r,p) .

Après des calculs faits en introduisant la notion de section efficace et de flux

incident, on aura une forme explicitée du terme $(\partial f / \partial t)_{\text{coll}}$.

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{coll}} = \bar{R} - R = \int dp_2 \int d\Omega \sigma(\Omega) |v_1 - v_2| (f'_1 f'_2 - f_1 f_2). \quad (4-3-1)$$

$$f_1 \equiv f(r, p_1, t),$$

$$f_2 \equiv f(r, p_2, t),$$

$$f'_1 \equiv f(r, p'_1, t),$$

$$f'_2 \equiv f(r, p'_2, t).$$

En reportant cette forme trouvée dans l'équation (2) on aura la fameuse équation de transport de Boltzmann

$$\frac{\partial f_1}{\partial t} + v_1 \cdot \nabla_r f_1 + F \cdot \nabla_{p_1} f_1 = \int dp_2 \int d\Omega \sigma(\Omega) |v_1 - v_2| (f'_1 f'_2 - f_1 f_2) \quad (4-3-2)$$

C'est une équation intégral-différentielle non linéaire pour la fonction de distribution à une particule.

Il faut noter que la dynamique décrite par l'équation de Boltzmann est irréversible du fait de la non invariance par renversement de temps.

5- Equation de Vlasov:

Cette équation proposée par Vlasov en 1937 étudie l'évolution d'un gaz fortement ionisé (plasma) ou les forces coulombiennes entre particules ont leur rôle important.

Il faut noter que ce cas se distingue de celui d'un gaz dilué du fait de la portée des forces intermoléculaires qui est supérieure à la distance moyenne entre molécules voisines. En remplaçant la fonction de distribution à deux particules par l'expression suivante:

$$f^{(2)}(r_1, r_2, p_1, p_2, t) \approx f^{(1)}(r_1, p_1, t) f^{(1)}(r_2, p_2, t)$$

Et sachant que les corrélations dans l'espace des phases sont négligées, l'équation de Vlasov s'énonce comme suit:

$$\frac{\partial f^{(1)}}{\partial t} + v_1 \cdot \nabla_{r_1} f^{(1)} + (X_1 + \int X_{12} f^{(1)}(r_2, p_2, t) d\Omega_2) \cdot \nabla_{p_1} f^{(1)} = 0 \quad (5-1)$$

Cette équation est invariante par renversement de temps.

La force $\int X_{12} f^{(1)}(r_2, p_2, t) d\Omega_2$, produite en moyenne par les autres particules, s'ajoute donc à la force extérieure X_1 .

Il est important d'insister sur la différence fondamentale entre l'équation de Boltzmann et l'équation de Vlasov. Cette dernière pour les plasmas est valable dans une phase transitoire de l'évolution temporelle du système. Elle est réversible; elle est d'ailleurs dite sans collisions.

L'équation de Boltzmann quant à elle, décrit une évolution statistique dans laquelle les collisions sont prises en compte. Elle est irréversible.

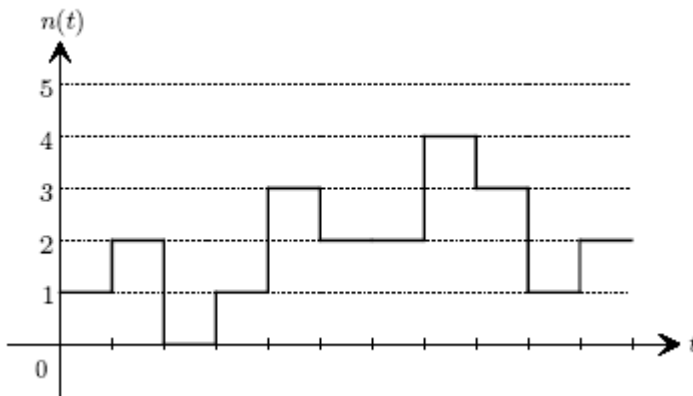
L'information sur la dynamique à deux particules intervient dans l'équation de Boltzmann dans une quantité de nature statistique; la section efficace de collision.

6- Equation maîtresse:

Les équations maîtresses sont une autre spécialisation des relations de Chapman Kolmogorov qui s'appliquent au cas d'un processus de Markov homogène à valeurs discrètes notées $n(t)$.

Par exemple $n(t)$ peut représenter le nombre de particules au temps t (photons, noyaux radioactifs...), le nombre de personnes infectées par une maladie, etc.

Le système possède un ensemble d'états Σ distingués par une indexation appropriée:



Représentation d'un processus discret $n(t)$

6-1-Processus stochastique: tout processus dont l'évolution temporelle peut être analysée en terme de probabilités. Le processus stochastique se manifeste en observant une grandeur $X(t)$ variable dans le temps. Il s'agit d'une observable macroscopique soumise aux effets d'un grand nombre de variables microscopiques.

6-2-Processus de Markov:

Définition: un processus est dit de Markov si:

$$P(x_1, t_1; x_2, t_2; \dots; x_{n-1}, t_{n-1} / x_n, t_n) = P(x_{n-1}, t_{n-1} / x_n, t_n)$$

Le membre de gauche donne la probabilité de trouver $x(t_n)$ sachant que $x(t_1)$, $x(t_2)$, \dots , $x(t_{n-1})$.

Une telle définition veut dire que le processus est sans mémoire.

6-3- Equation de Chapman-Kolmogorov:

soit un processus stochastique de Markov, alors la probabilité de transition

$P(x_1, t_1 / x_2, t_2)$ et la transition $W(x, t)$ satisfont:

$$P(x_1, t_1 / x_3, t_3) = \int dx_2 P(x_1, t_1 / x_2, t_2) P(x_2, t_2 / x_3, t_3)$$

$$W(x_2, t_2) = \int dx_1 W(x_1, t_1) P(x_1, t_1 / x_2, t_2)$$

6-4-Processus de Markov homogène:

Définition: un processus stochastique de Markov est dit homogène dans le temps si:

$$P(x_1, t_1 | x_2, t_2) = P(x, 0 | x_2, t_2 - t_1).$$

6-5-Equation Maître:

On considère un processus de Markov homogène sur un ensemble Σ (discret), on établit une équation différentielle appelée équation maître qui régit la probabilité de transition $P(n_1/n_2, t)$ du processus avec :

$$P(n_1 / n_2, t = 0) = \delta_{n_1, n_2} \quad (6-5-1)$$

L'hypothèse de base est celle de l'existence d'un taux de transition $W(n_1/n_2)$ de n_1 à n_2 avec n_1 différent de n_2 , défini par:

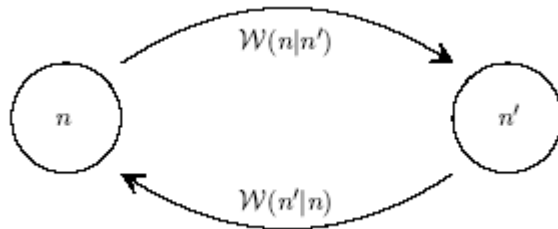
$$W(n_1/n_2) = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{P(n_1/n_2, t)}{t} = \left. \frac{\partial P(n_1/n_2, t)}{\partial t} \right|_{t=0} \quad (6-5-2)$$

L'équation maître est de la forme générale:

$$\frac{\partial}{\partial t} P(n, t) = \sum_{n' \in \Sigma} (P(n', t) W(n'/n) - P(n, t) W(n/n')) \quad (6-5-3)$$

Le premier terme du membre de droite représente un terme de gain pour l'état n alors que le deuxième terme représente un terme de perte pour l'état n .

Les équations maîtresses traduisent le fait que, en termes de probabilités, le gain par unité de temps de l'état n provient de tout les transitions de l'état n' , dont la probabilité d'occupation est $P(n', t)$, vers l'état n et ceci avec taux de transition $W(n/n')$. Par contre l'état n se dépeuple proportionnellement à sa probabilité d'occupation multipliée par le taux de transition vers chacun des états n'



Interprétation des équations maîtresses

6-6- Processus birth and death:

On suppose qu'il soit possible de classer les états selon un certain ordre linéaire. Donc les états voisins de n sont $n-1$ et $n+1$.

Définition: on appelle processus à un pas ou birth and death la situation ou il n'y a transition qu'entre états voisins dans un temps infinitésimal. Et ceci s'explique par le fait que:

$$W(n|n') = 0, \quad n' \neq n \pm 1.$$

On note désormais que $W(n/n+1)=g_n$ et $W(n/n-1)=r_n$ et $P(n, t)=P_n(t)$. Les équations maîtresses prennent la forme suivante:

$$\frac{\partial}{\partial t} P_n(t) = g_{n-1} P_{n-1}(t) + r_{n+1} P_{n+1}(t) - (g_n + r_n) P_n(t).$$

Les deux premiers termes du membre de droite représentent un gain pour l'état n , alors que le troisième terme est une perte.

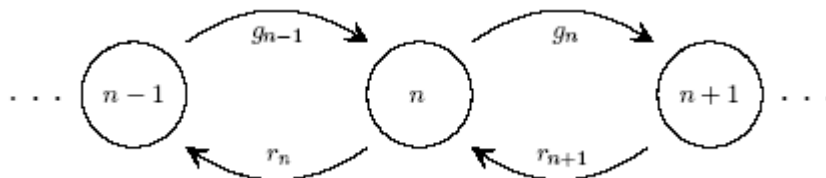


FIG: la transition entre deux états d'un processus à un pas ne se fait qu'entre plus proches voisins

Si le processus est stationnaire, alors il existe une distribution $P^s(n)$ telle que pour tout temps on a:

$$\sum_{n' \in \Sigma} (P^s(n')W(n'|n) - P^s(n)W(n|n')) = 0$$

7-Equation de Shrodinger:

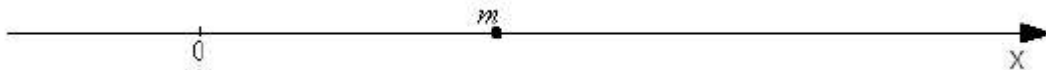
L'équation de Shrodinger a été proposée en 1926. L'objet central de cette théorie, nommée aussi mécanique ondulatoire, est une fonction à valeurs complexes, appelée fonction d'onde. Cette dernière est réputée contenir toute l'information possible sur le système à étudier.

L'équation ne se démontre pas, sa validité se mesure par la confrontation entre les résultats théoriques qu'elle engendre et les observations expérimentales. Ses succès sont immenses: à ce jour, aucune expérience ne permet de mettre en doute cette théorie.

Etablissement de l'équation de Shrodinger:

-Système étudié:

Soit une particule de masse m , se déplaçant sur un axe (Ox) et soumise à une force $\vec{F} = -\text{grad } V$ dérivant d'un potentiel $V(x)$.



Pour établir l'équation de Shrodinger, la propriété de conservation de l'énergie nous est utile: on établit simplement:

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(x) = \text{cste} \quad (7-1)$$

Nous allons nous appuyer aussi sur deux relations quantiques: $E = \hbar \omega$ qui donne l'énergie d'un photon à la pulsation ω et $p = \hbar k$ qui donne l'impulsion p d'un photon de vecteur d'onde k

On généralise ces relations quantiques à une particule en considérant, la grande idée du monde quantique, qu'elle peut être décrite par une onde, caractérisée par une

fonction d'onde $\psi(x, t)$ complexe et dont le module au carré caractérisera la probabilité de présence de la particule en un point.

Nous poserons:

$$\psi(x, t) = \psi_0 e^{j(kx - \omega.t)} \quad (7-2)$$

On calcule quelques dérivées de ψ :

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -k^2 \psi \quad \text{et} \quad \frac{\partial \psi}{\partial t} = -j. \omega \psi \quad (7-3)$$

D'après les deux relations quantiques déjà rappelées, cela équivaut aux égalités suivantes:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -\frac{p^2}{\hbar^2} \psi \quad \text{et} \quad \frac{\partial \psi}{\partial t} = -j \cdot \frac{E}{\hbar} \psi \quad (7-4)$$

Nous obtenons : ψ par $E = \frac{P^2}{2m} + V$ En multipliant la formule

$$E \psi = \frac{P^2}{2m} \psi + V \psi \quad (7-5)$$

Soit encors grâce aux relations sur les dérivées:

$$j \hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V \psi \quad (7-6)$$

C'est la célèbre équation de Shrodinger.

Une autre écriture de cette équation est la suivante:

$$i \frac{\partial |\psi(t)\rangle}{\partial t} = H |\psi(t)\rangle \quad (7-7)$$

Cette équation fait jouer à l'opérateur Hamiltonien un rôle particulier puisque c'est de cet opérateur que dépend l'évolution temporelle de la fonction d'onde.

Shrodinger a essayé de trouver une équation permettant de décrire le mouvement ondulatoire des particules atomiques.

Il n'y a pas de preuve rigoureuse de la validité de l'équation cependant elle est à la base de notre connaissance des atomes et des molécules.

La fonction d'onde $\psi(\mathbf{r},t)$: modèle mathématique, sans signification physique, permet de déterminer la probabilité de distribution de la particule.

Equation de Shrodinger pour une particule de masse m et d'énergie E :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \Psi}{dx^2} + V \Psi = E \Psi \quad (7-8)$$

V : énergie potentielle

L'équation de Shrodinger pour une particule se propageant dans une direction quelconque dans tout l'espace a la forme:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} \right] + V \Psi = E \Psi \quad (7-9)$$

Ou sous la forme:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi + V\Psi = E\Psi \quad (7-10)$$

L'équation de Shrodinger est l'une des équations les plus fondamentales de la physique moderne, est à la base de la mécanique quantique.

8-Equation de Navier Stokes:

Les équations de (N-S) décrivent le mouvement d'un fluide visqueux dans l'espace par l'intermédiaire des variables $u(x, t)$ et $p(x, t)$ qui donnent, en un point x de l'espace et au temps t , respectivement la vitesse et la pression du fluide. Nous considérons le cas d'un fluide incompressible (ce qui entraîne la condition $\text{div } u=0$). Les équations de Navier Stokes prennent alors la forme suivante:

$$(NS) \begin{cases} \partial_t u - \Delta u + u \cdot \nabla u = -\nabla p \\ \text{div } u = 0 \\ u|_{t=0} = u_0 . \end{cases}$$

Nous considérerons aussi le cas où une force extérieure dérivant d'un potentiel V est appliquée. Le système devient alors:

$$(NSF) \begin{cases} \partial_t u - \Delta u + u \cdot \nabla u = -\nabla p + \nabla V \\ \text{div } u = 0 \\ u|_{t=0} = u_0 . \end{cases}$$