De l'échelle des particules à l'échelle humaine

Catherine Choquet

Mathez-moi ça !

21 mars 2013 - La Rochelle

- **Modélisation mathématique :** une partie du travail dit de mathématiques appliquées
  (réinvestir les techniques de mathématiques “pures” pour comprendre, voire contrôler, notre environnement).
- **Modélisation du mouvement :**
  - L’exemple simplissime :
    Au temps $t = 0$, je passe par le point x_o à la vitesse v_o avec une accélération constante a. Quelle sera ma position au temps $t > 0$?
    $$x(t) = x_o + v_o t + \frac{at^2}{2}.$$
  - La question se corse pour modéliser le mouvement d’un ensemble de particules : problème d’échelles !
  - Questions quasi-philosophiques :
    – nombre : impossible de suivre chaque particule ; quelle inconnue a du sens ?
    – impossible de faire des mesures à l’échelle des particules ; comment alors prédire des mouvements à l’échelle de la planète ?
    – comment passer de l’échelle des particules à l’échelle du continu ?
    – pourquoi un ensemble de comportements chaotiques peut-il être modélisé par des lois universelles ?
    – . . .

Oui, nous pouvons !

Avec :

- **De l'analyse...**
  (on cherche des fonctions qui dépendent du temps et de l'espace)
- **Des probabilités...**
  pour modéliser le hasard !
- **De l'algèbre, de la géométrie...**

Un peu de physique

le phénomène de diffusion


Br_2

- **1822** : loi de Fourier pour la diffusion de la **chaleur** :
  le transport tend à combler le déséquilibre et le flux de chaleur est proportionnel au "gradient" de température :

$$\vec{F} = -K \cdot \nabla T, \qquad \partial_t T - K \Delta T = 0.$$

-

- **1855** :

Fick propose un modèle **phénoménologique** analogue à la loi de Fourier pour tout phénomène de diffusion.

- **fin XIXe** : existence de l'**atome** ?

- **1822** : loi de Fourier pour la diffusion de la **chaleur** :
  le transport tend à combler le déséquilibre et le flux de chaleur est proportionnel au "gradient" de température :

$$\vec{F} = -K \cdot \nabla T, \qquad \partial_t T - K \Delta T = 0.$$

- **1827** :

  le botaniste Brown observe le mouvement de grains de pollen sur la lamelle de son microscope.

- **1855** :

  Fick propose un modèle **phénoménologique** analogue à la loi de Fourier pour tout phénomène de diffusion.

- **fin XIXe** : existence de l'**atome** ?

-
- **1905** :

  "L'année miraculeuse" d'Einstein :
  1ère justification de l'existence
  du **mouvement brownien**...

  ...et donc de l'atome (nombre
  d'Avogadro).

-

- **1900** :

Bachelier modélise les fluctuations boursières.

- **1905** :

"L'année miraculeuse" d'Einstein :
1ère justification de l'existence
du **mouvement brownien**...

...et donc de l'atome (nombre d'Avogadro).

- Depuis : des maths...

Montrer que les mouvements erratiques des atomes conduisent à l'équation suivante pour la concentration en thé :

$$\frac{\partial c(t,x,y,z)}{\partial t} - D\left(\frac{\partial^2 c(t,x,y,z)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c(t,x,y,z)}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 c(t,x,y,z)}{\partial z^2}\right) = 0.$$

Saisir avec les outils que vous connaissez déjà :

- Le passage du discret au continu.
- Le passage de l'aléatoire au déterministe.
- Une nouvelle perception de l'infini ?

Un peu de mathématiques

La loi des grands nombres

"Si on répète une même expérience un grand nombre de fois et de façon indépendante, la moyenne des résultats "tend" vers une valeur donnée, l'espérance".

$$\frac{X_1 + X_2 + \cdots + X_N}{N} \to E(X) \quad N \to +\infty.$$

Remarques :

- Bernoulli (1715), Khintchine (années 20).
- Exemple typique : pile ou face.
- C'est une convergence en loi de probabilité... Convergence de suites de fonctions, convergence de l'intégrale d'une suite de fonctions : avis aux L3 !

La loi des grands nombres

"Si on répète une même expérience un grand nombre de fois et de façon indépendante, la moyenne des résultats "tend" vers une valeur donnée, l'espérance".

$$\frac{X_1 + X_2 + \cdots + X_N}{N} \to E(X) \quad N \to +\infty.$$

La réponse à notre 1ère question existentielle ?

- Une répétition de hasards conduit invariablement à un résultat donné et prévisible.
- Passage de l'aléatoire au déterministe.

La loi des grands nombres

"Si on répète une même expérience un grand nombre de fois et de façon indépendante, la moyenne des résultats "tend" vers une valeur donnée, l'espérance".

$$\frac{X_1 + X_2 + \cdots + X_N}{N} \to E(X) \quad N \to +\infty.$$

La réponse à notre 1ère question existentielle ?

- Une répétition de hasards conduit invariablement à un résultat donné et prévisible.
- Passage de l'aléatoire au déterministe.
- Oui, mais où est l'équation ?

$$\left\{\begin{array}{l}\text{Poussée d'Archimède (stabilisation d'un corps)}\\ \textit{versus}\\ \text{Diffusion (déstabilisation des particules).}\end{array}\right.$$

$$f(x) = f(a) + (x-a)f'(a) + \frac{(x-a)^2}{2} f''(a) + \cdots + \frac{(x-a)^n}{n!} f^{(n)}(a) + R_n(x).$$

La Fomule de Taylor

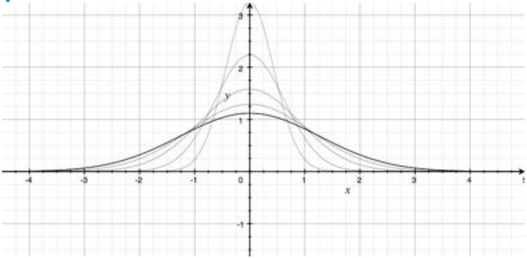
Si f est une fonction n fois dérivable en a

$$f(x) = f(a) + (x-a)f'(a) + \frac{(x-a)^2}{2} f"(a) + \cdots + \frac{(x-a)^n}{n!} f^{(n)}(a) + R_n(x).$$

Solution fondamentale d'un problème de diffusion

$$\frac{\partial c(t,x)}{\partial t} - D\frac{\partial^2 c(t,x)}{\partial x^2} = 0, \quad |x| < \infty, \; t > 0,$$
$$c(0,x) = \delta(x), \quad |x| < \infty,$$
$$c(x,t) \to 0, \quad x \to \pm\infty.$$

$$c(t,x) = \frac{1}{\sqrt{4\pi D t}} e^{-x^2/(4Dt)}.$$

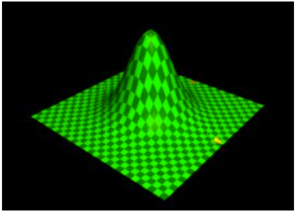


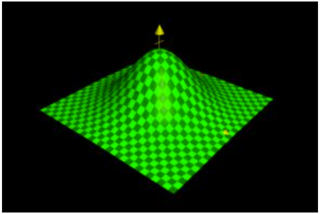
Forme universelle :
♣ Gaussienne
♣ Encore la loi des grands nombres.

Solution fondamentale d'un problème de diffusion

$$\frac{\partial c(t,x,y)}{\partial t} - D\left(\frac{\partial^2 c(t,x,y)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c(t,x,y)}{\partial y^2}\right) = 0, \quad |x| < \infty,\ |y| < \infty,\ t > 0,$$
$$c(0,x) = \delta(x), \quad |x| < \infty,\ |y| < \infty,$$
$$c(x,yt) \to 0, \quad \|(x,y)\| \to +\infty.$$

$$c(t,x,y) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-(x^2+y^2)/(4Dt)}.$$





Formule de Stirling

$$n! \sim \sqrt{2\pi n}\left(\frac{n}{e}\right)^n.$$

À la recherche de l'équation

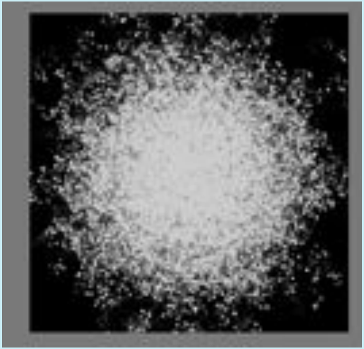
À la recherche de l'équation

À l'échelle des particules

Mouvement de particules à l'échelle du nanomètre :

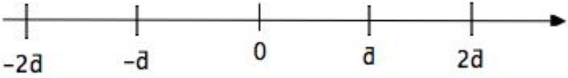
- Pas de mesures.
- Mouvement aléatoire.

Proposons un modèle aléatoire



Comportement collectif.

Comportement individuel.



Construction de la marche aléatoire

1. Le marcheur part du point $x = 0$.
2. À chaque étape, de durée τ, il parcourt une distance δ, avec la même probabilité de partir à gauche ou à droite.

Au temps $t = \tau$ **:** Le marcheur est en $-\delta$ (probabilité $1/2$) ou en $+\delta$ (probabilité $1/2$).

Au temps $t = 2\tau$ **:** Le marcheur est en -2δ (probabilité $1/4$) ou en $+2\delta$ (probabilité $1/4$) ou en 0 (probabilité $1/2$).
Au temps $t = 3\tau$ **:** ...

Modèle boursier de Bachelier : marche aléatoire 2D !

Méthode 1 : culture, calcul et révélation !

$$\boxed{p_{m,n}(x = m\delta, t = n\tau) = \left(\frac{1}{2}\right)^n \binom{n}{\frac{n-m}{2}} = \frac{n!}{2^n\big((n+m)/2)!((n-m)/2)!\big)}.}$$

1. Il faut passer à la limite δ, $\tau \to 0$.
2. Mais $x = \mathcal{O}(1)$, $t = \mathcal{O}(1)$ pour notre échelle d'observation !
   Donc $n \to \infty$, $m \to \infty$.
3. Que faire de $n!$ et $m!$? Stirling !

Pour le choix $\dfrac{\delta^2}{\tau} = 2D$:

$$p(x,t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-x^2/(4Dt)}.$$

Et c'est justement la solution fondamentale d'une équation de diffusion !
La "bonne" variable macroscopique est la densité de probabilité p de trouver une particule en x au temps t.

Méthode 2 : moins de culture et l'équation !

Si une particule se trouve en x au temps $t+\tau$: au temps t, soit elle était en $x-\delta$ soit en $x+\delta$ avec probabilité $1/2$:

$$\boxed{p(x,t+\tau) = \frac{1}{2}p(x-\delta,t) + \frac{1}{2}p(x+\delta,t).}$$

1. Taylor :

$$p(x,t+\tau) = p(x,t) + \tau\frac{\partial p(x,t)}{\partial t} + R_1(\tau),$$
$$p(x-\delta,t) = p(x,t) - \delta\frac{\partial p(x,t)}{\partial x} + \frac{\delta^2}{2}\frac{\partial^2 p(x,t)}{\partial x^2} + R_2(\delta),$$
$$p(x+\delta,t) = p(x,t) - \delta\frac{\partial p(x,t)}{\partial x} + \frac{\delta^2}{2}\frac{\partial^2 p(x,t)}{\partial x^2} + R_3(\delta).$$

Méthode 2 : moins de culture et l'équation !

Si une particule se trouve en x au temps $t+\tau$: au temps t, soit elle était en $x-\delta$ soit en $x+\delta$ avec probabilité $1/2$:

$$\boxed{p(x, t+\tau) = \frac{1}{2}p(x-\delta, t) + \frac{1}{2}p(x+\delta, t).}$$

1. Taylor :

$$p(x,t) + \tau\frac{\partial p(x,t)}{\partial t} + R_1(\tau) = \frac{1}{2}p(x,t) - \frac{1}{2}\delta\frac{\partial p(x,t)}{\partial x} + \frac{1}{2}\frac{\delta^2}{2}\frac{\partial^2 p(x,t)}{\partial x^2} + \frac{1}{2}R_2(\delta)$$
$$+\frac{1}{2}p(x,t) + \frac{1}{2}\delta\frac{\partial p(x,t)}{\partial x} + \frac{1}{2}\frac{\delta^2}{2}\frac{\partial^2 p(x,t)}{\partial x^2} + \frac{1}{2}R_3(\delta)$$

Méthode 2 : moins de culture et l'équation !

Si une particule se trouve en x au temps $t+\tau$: au temps t, soit elle était en $x-\delta$ soit en $x+\delta$ avec probabilité $1/2$:

$$\boxed{p(x, t+\tau) = \frac{1}{2} p(x-\delta, t) + \frac{1}{2} p(x+\delta, t).}$$

1. Taylor :

$$\frac{\partial p_{\tau,\delta}(x,t)}{\partial t} = \frac{\delta^2}{2\tau} \frac{\partial^2 p_{\tau,\delta}(x,t)}{\partial x^2} + R(\tau, \delta).$$

2. On passe à la limite $\tau \to 0$, $\delta \to 0$ en fixant $\dfrac{\delta^2}{\tau} = 2D$.

Méthode 2 : moins de culture et l'équation !

Si une particule se trouve en x au temps $t+\tau$: au temps t, soit elle était en $x-\delta$ soit en $x+\delta$ avec probabilité $1/2$:

$$\boxed{p(x, t+\tau) = \frac{1}{2}p(x-\delta, t) + \frac{1}{2}p(x+\delta, t).}$$

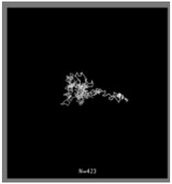
1. Taylor :
2. On passe à la limite $\tau \to 0$, $\delta \to 0$ en fixant $\dfrac{\delta^2}{\tau} = 2D$.

À la limite :

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

Et c'est justement l'équation de diffusion !
Petite interprétation : La particule n'a pas de mémoire.
Tout ce qui joue c'est la variance des déplacements.

La marche aléatoire



Géométrie :

• En dimension 2 : en temps infini, la particule brownienne visite chacun des points de l'espace. Une ligne qui remplit un espace de dimension 2 ? **Courbe fractale de dimension 2** !

• En dimension 3 : il existe au contraire des points qui ne sont jamais visités par la particule brownienne...

Les paradoxes de l'équation de diffusion

Irréversibilité :

- Problème inverse mal posé.
- Perte d'info au passage à la limite...

Vitesse infinie :

$$p(t,x) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-x^2/(4Dt)}.$$

- Dès que $t > 0$, la probabilité de trouver une particule en n'importe quel point x donné, si grand soit il, est non nulle : donc on admet la possibilité d'une propagation à une vitesse infinie dans le modèle macroscopique. Ce qui n'était pas le cas dans le modèle microscopique.
- En fait, quand on est passé à la limite, $\delta \to 0$, $\tau \to 0$, $\delta^2/\tau = 2D$, on a imposé $\delta/\tau \to \infty$: la vitesse instantanée devient infinie...

Universalité du modèle de diffusion

- Modèles financiers : Black Scholes :

$$dS_t = \mu S_t dt + \sigma S_t dB_t.$$

- Modèles météorologiques.
- Modèles de déplacement d'animaux.
- ...

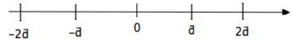
Mais :

- Échelles de temps et d'espace très différentes. Validité en temps du modèle ?
- "Persistance" : besoin de biais.

Modélisation "à la Einstein" :
Mouvements non corrélés : le déplacement ne dépend pas du précédent.
Mouvements sans biais : le marcheur n'a pas de direction préférentielle.

Plus

Construction de la marche aléatoire



1. Le marcheur part du point $x = 0$.
2. À chaque étape, de durée τ, il parcourt une distance δ avec la probabilité ℓ de partir à gauche et r de partir à droite, ou bien reste piégé avec la probabilité $1 - \ell - r$.

$$\boxed{p(x, t + \tau) = (1 - \ell - r)p(x, t)rp(x - \delta, t) + \ell p(x + \delta, t).}$$

1. Taylor :

$$\frac{\partial p_{\tau,\delta}(x,t)}{\partial t} = -\frac{\delta(r-\ell)}{\tau}\frac{\partial p_{\tau,\delta}(x,t)}{\partial x}\frac{(r+\ell)\delta^2}{2\tau}\frac{\partial^2 p_{\tau,\delta}(x,t)}{\partial x^2} + R(\tau,\delta).$$

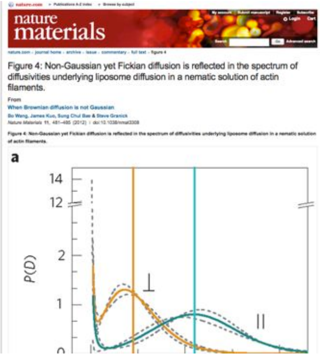
2. On passe à la limite $\tau \to 0$, $\delta \to 0$ en fixant $(r + \ell)\dfrac{\delta^2}{\tau} = 2D$ et $(r - \ell)\dfrac{\delta}{\tau} = v$.

À la limite : du biais au courant :

$$\frac{\partial p(x,t)}{\partial t} = -v\frac{\partial p(x,t)}{\partial x} + D\frac{\partial^2 p(x,t)}{\partial x^2}.$$

• Gestion des échelles :
Lorsqu'on choisit les vitesses de convergence $\tau \to 0$, $\delta \to 0$ *etc*, on fixe aussi l'échelle de l'observateur.

En jouant sur ces échelles, on peut retrouver des régimes prédiffusifs :



• Passage en 3D :
algèbre...

• Géographie du milieu :
géométrie...