

Regards Croisés Mathématiques & Physique

Bloc 2 : Processus de diffusion

Lucie Le Briquer

18 décembre 2017

Table des matières

1 Diffusion normale	1
1.1 Théorème Central Limite	2
1.2 Marches aléatoires	3
1.3 Paul Langevin (1907)	4
1.4 Forme générale	4
2 Diffusion anormale	5
3 Diffusion et mouvement brownien : applications	11

Robert Brown 1827-1828 : observe le mouvement aléatoire de micro-plantes dans l'eau, conclut à une origine non biologique → mouvement brownien/diffusion. Il faut attendre **1905** pour qu'**Albert Einstein** donne une interprétation physique et mathématique.

“grosse” molécule ($\sim \mu\text{m}$) entourée de petites molécules d'eau (en 1905 la théorie atomiste n'est pas encore acceptée pleinement!). $N = 6.10^{23}\text{mol}$: dans 18 grammes d'eau, il y a 10^{25} molécules d'eau. La mécanique classique est impraticable, même si le système obéit de manière déterministe aux lois de Newton. Incapacité à résoudre 10^{20} équations et à mesurer 10^{20} conditions initiales en position/vitesse.

1 Diffusion normale

Les molécules d'eau rebondissent contre la grosse molécule en lui transmettant une impulsion, en moyenne nulle, mais qui peut-être localement (en temps) non-nulle → ξ_k variable aléatoire décrivant le mouvement résultant à l'instant k . X_t position de la particule au temps t (on réduit à une dimension pour l'instant).

$$X_t = \sum_{k=1}^{n=t/\tau} \xi_k$$

où ξ v.a., X_t v.a. et $n \gg 1$. La densité de probabilité : $p(x_1, x_2, \dots, x_n)dx_1\dots dx_n = \mathbb{P}\{\xi_1 \in (x_1, x_1 + dx_1), \dots\}$

Dans sa forme la plus générale, cette description ne sert pas à grand chose, car il faut obtenir p pour $n \gg 1$.

Hypothèses (Einstein)

1. Indépendance de ξ_k : $p(x_1, \dots, x_n) = p_1(x_1) \dots p_n(x_n)$
2. Stationnarité : $p_k(x) = p(x)$, ainsi :

$$p(x_1, \dots, x_n) = p(x_1) \dots p(x_n)$$

3. Variance finie : $\text{Var}\{\xi_k\} = \sigma^2 < +\infty$

De manière générale on peut toujours trouver des preuves physiques à l'une des hypothèses est fausse. L'indépendance se gère en jouant sur τ : on prend le "temps de décorrélation" ($\tau \sim ps = 10^{-12}s$ dans une solution aqueuse).

La stationnarité dépend du temps d'observation.

$$\mathbb{E}\{X_t\} = \sum_{k=1}^n \underbrace{\mathbb{E}\{\xi_k\}}_a = na = \underbrace{\frac{a}{\tau}}_v t = vt = 0$$

On fait l'hypothèse supplémentaire qu'il n'y a pas de courant cohérent ($a = 0 \Rightarrow v = 0$). Hypothèse faible on généralise facilement.

$$\mathbb{E}\{X_t^2\} = \mathbb{E}\left\{\left(\sum_{k=1}^n \xi_k\right)^2\right\} = \mathbb{E}\left\{\sum_{k=1}^n \xi_k^2 + \sum_{k=1}^n \sum_{j \neq i} \xi_k \xi_i\right\} = n\sigma^2 = \frac{2t}{2\tau} \sigma^2 = 2Dt$$

On note donc $D = \frac{\sigma^2}{2\tau}$ qui représente le coefficient de diffusion.

$\sqrt{\mathbb{E}(X_t^2)} = \sqrt{2Dt}$: la distance est proportionnelle à la racine carrée du temps ce qui est typique des phénomènes diffusifs.

1.1 Théorème Central Limite.

$$P(X, t) = \frac{\exp\left(-\frac{X^2}{2\text{Var}\{X_t\}}\right)}{\sqrt{2\pi\text{Var}\{X_t\}}} = \frac{\exp\left(-\frac{X^2}{4Dt}\right)}{\sqrt{2\pi Dt}}$$

(comportement asymptotique). Densité de probabilité de $\tilde{X}_t = \frac{X_t}{\sqrt{2Dt}}$ pour $n \gg 1$.

— Propriété 1 (de la densité gaussienne) —

1. $\int_{-\infty}^{+\infty} P(x, t) dx = 1$
2. $\mathbb{E}\{X_t\} = \int_{-\infty}^{+\infty} x P(x, t) dx = 0$ et $\mathbb{E}\{X_t^2\} = \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 P(x, t) dx = 2Dt$
3. $P(X, t) \xrightarrow[t \rightarrow 0]{} \delta(X)$ distribution de Dirac
4. La densité gaussienne vérifie l'*équation de diffusion* :

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial t} P(X, t) = D \frac{\partial^2}{\partial x^2} P(X, t) \\ P(X, t_0) = \delta(X) \end{cases}$$

5. Si on change le problème en :

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial t} u(x, t) = D \frac{\partial^2}{\partial x^2} u(x, t) \\ u(x, 0) = u_0(x) \end{cases}$$

La solution est :

$$u(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} u_0(x) p(x - x_0, t) dx_0$$

En $t = 0$

$$u(x, 0) = \int_{-\infty}^{+\infty} u_0(x) p(x - x_0, 0) dx_0 = \int_{-\infty}^{+\infty} u_0(x) \delta(x - x_0) dx_0 = u_0(x)$$

6. Généralisation à d dimensions. $d = 2$

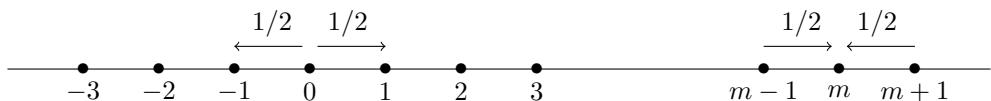
$$P(x_1, \dots, x_d, t) = p(x_1, t) \dots p(x_d, t) = \left(\frac{1}{4\pi Dt} \right)^{\frac{d}{2}} \exp \left(-\frac{x_1^2 + \dots + x_d^2}{4Dt} \right)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} P(\vec{r}, t) = \sum_{i,j=1}^d \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} D_{ij} P(\vec{r}, t)$$

Remarque. On a $\forall \alpha > 0$:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha x^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$$

1.2 Marches aléatoires



$$P_{n+1}(m) = \frac{1}{2} P_n(m-1) + \frac{1}{2} P_n(m+1)$$

$$\underbrace{\frac{P_{n+1}(m) - P_n(m)}{\tau}}_{\frac{\partial}{\partial t} P(X, t)} = \frac{\sigma^2(P_n(m-1) + P_n(m+1) - 2P_n(m))}{2\tau\sigma^2} = D \underbrace{\frac{P_n(m-1) + P_n(m+1) - 2P_n(m)}{\sigma^2}}_{\frac{\partial^2}{\partial x^2}}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} f = \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{f(t+\tau) - f(t)}{\tau} \quad \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} = \lim_{\sigma \rightarrow 0} \frac{f(x+\sigma) + f(x-\sigma) - 2f(x)}{\sigma^2}$$

1.3 Paul Langevin (1907)

$$m\ddot{x} = \underbrace{-\gamma\dot{x}}_{\text{force de friction}} + \underbrace{F(t)}_{\text{aléatoire}}$$

Hypothèses sur la force thermique.

1. $F(t)$ est distribuée par une loi gaussienne
2. $\mathbb{E}\{F(t)\} = 0 \quad \mathbb{E}\{F(t)F(t')\} = C(t, t') = A\delta(t - t')$

Si on néglige l'inertie ($m\ddot{x} = 0$), alors $0 = -\gamma\dot{x} + F(t)$ d'où :

$$\frac{dx}{dt} = \frac{F(t)}{\gamma} \quad x(t) = \int_0^t \frac{F(t')}{\gamma} dt' \approx \sum_{k=1}^{t/\tau} \underbrace{\frac{F(k\tau)}{\gamma}}_{\xi_k} \tau$$

équivalent à la description d'Einstein en l'absence d'autres forces.

1.4 Forme générale

$$\frac{dx}{dt} = \frac{F_{\text{ext}}(x(t), t)}{\gamma} + \frac{F(t)}{t}t$$

$$dX_t = \underbrace{\frac{F_{\text{ext}}(x(t), t)}{\gamma} dt}_{=\mu} + \underbrace{\frac{F(t)}{\gamma} dt}_{=\sigma dW_t} = \mu(X(t), t)dt + \sigma(X(t), t)dW_t$$

Remarque. (équation de Fokker-Planck)

$$\begin{cases} \frac{\partial P}{\partial t} = D\Delta P - \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{F_{\text{ext}}}{\gamma} P \right) \\ P(x, 0) = \delta(x) \end{cases}$$

Si on ne néglige plus l'inertie (particules massives) :

$$m\ddot{x} = -\gamma\dot{x} + F(t) \Leftrightarrow \begin{cases} \dot{x} = v \\ m\dot{v} = -\gamma v + F(t) \end{cases}$$

$$\frac{\partial P}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} P + \frac{\gamma}{m} \frac{\partial}{\partial v} P + \frac{1}{m} \frac{\partial^2}{\partial v^2} P$$

2 Diffusion anormale

On s'intéresse désormais à des marches aléatoires à temps continu (CTRW).

Modèle.

- ξ_1, \dots, ξ_k : déplacements aléatoires qui durent un temps aléatoire :
- τ_1, \dots, τ_n : temps d'attente aléatoire (correspondant à la durée entre chaque collision)

$$X(t) = \sum_{k=1}^{\mathcal{N}(t)} \xi_k \quad \text{est la position au temps } t \text{ et } \mathcal{N}(t) \text{ le nombre de déplacements avant le temps } t$$

Hypothèses.

- indépendance : ξ_k sont indépendants, τ_k sont indépendants, et indépendance entre les deux
- stationnarité : $p(x)$ densité de probabilité pour ξ_k , $\psi(t)$ densité de probabilité pour τ_k

On cherche à déterminer $P(x, t)$.

$$P(x, t) = p_0(x)\eta_0(t) + p_1(x)\eta_1(t) + p_2(x)\eta_2(t) + p_3(x)\eta_3(t) + \dots$$

où $p_k(x)$ est la densité de probabilité de déplacement en x en k sauts.

où $\eta_k(t)$ est la probabilité de faire k sauts avant le temps t . Cela se réécrit :

$$P(x, t) = \sum_{n=0}^{+\infty} p_n(x)\eta_n(t)$$

Comme arriver en x après n sauts correspond à arriver en x' après $n - 1$ sauts puis faire la suite en 1 saut, les deux étant indépendants, on a :

$$p_n(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} p_{n-1}(x')p(x - x')dx'$$

On introduit la transformée de Fourier :

$$\hat{p}_n(k) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx} p_n(x) dx$$

On obtient alors la relation

$$\hat{p}_n(k) = \hat{p}_{n-1}(k) = \hat{p}(k) = (\hat{p}(k))^n$$

Définissons :

- $\eta_n(t)$: la probabilité de faire n déplacements avant le temps t
- $\psi_n(t)$: la densité de probabilité de faire le n -ième déplacement en temps t

Alors :

$$\eta_n(t) = \int_0^t \psi_n(t') \eta_0(t-t') dt'$$

Car une fois que l'on a fait n déplacements au temps t' il ne faut pas se déplacer à nouveau pendant le temps restant. Par un raisonnement similaire :

$$\psi_n(t) = \int_0^t \psi_{n-1}(t') \psi(t-t') dt'$$

On définit la transformée de Laplace :

$$\tilde{f}(s) = \int_0^{+\infty} f(t) e^{-ts} dt$$

On réécrit la relation :

$$\tilde{\psi}_n(s) = \tilde{\psi}_{n-1}(s) \tilde{\psi}(s) = (\tilde{\psi}(s))^n$$

Et :

$$\eta_0(t) = \int_t^{+\infty} \psi(t') dt' = 1 - \int_0^t \psi(t') dt'$$

Donc,

$$\tilde{\eta}_0(s) = \frac{1}{s} - \tilde{\psi}(s) \frac{1}{s}$$

Calculons $\hat{\tilde{P}}(k, s)$.

$$\begin{aligned} \hat{\tilde{P}}(k, s) &= \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx} \left(\int_0^{+\infty} e^{-ts} P(x, t) dt \right) dx \\ &= \sum_{n=0}^{+\infty} \hat{p}_n(k) \tilde{\eta}_n(s) \\ &= \sum_{n=0}^{+\infty} (\hat{p}(k))^n (\tilde{\psi}(s))^n \frac{1 - \tilde{\psi}(s)}{s} \\ &= \frac{1 - \tilde{\psi}(s)}{s} \times \frac{1}{1 - \hat{p}(k) \tilde{\psi}(s)} \end{aligned}$$

On s'intéresse au comportement lorsque $x \rightarrow +\infty$ ($\Leftrightarrow k \rightarrow 0$) et $t \rightarrow +\infty$ ($\Leftrightarrow s \rightarrow 0$). Regardons tout d'abord $\hat{p}(k)$ lorsque $k \rightarrow 0$.

$$\begin{aligned} \hat{p}(k) &= \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx} p(x) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \left(1 + ikx - \frac{k^2 x^2}{2} + \dots \right) dx \\ &= 1 + ik \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} x p(x) dx}_{\mathbb{E}[\xi]=0} - \frac{k^2}{2} \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} x^2 p(x) dx}_{\mathbb{E}[\xi_n^2]=\sigma^2} + \dots \\ &\approx 1 - \frac{k^2 \sigma^2}{2} + \dots \end{aligned}$$

D'un autre côté,

$$\begin{aligned}
\tilde{\psi}(s) &= \int_0^{+\infty} e^{-ts} \psi(t) dt = \int_0^{+\infty} (1 - ts + \dots) \psi(t) dt \\
&= 1 - s \underbrace{\int_0^{+\infty} t \psi(t) dt}_{\mathbb{E}[\tau_n] = \tau} + \dots \\
&= 1 - s\tau + \dots
\end{aligned}$$

Alors,

$$\hat{\tilde{P}}(k, s) \approx (\tau + \dots) \frac{1}{1 - \left(1 - \frac{k^2 \sigma^2}{2}\right) (1 - s\tau + \dots)} = \frac{\tau}{\frac{k^2 \sigma^2}{2} + s\tau + \dots} \approx \frac{1}{s + \underbrace{\frac{\sigma^2}{2\tau} k^2}_D} + \dots$$

D'où :

$$\hat{\tilde{P}}(k, s) \approx \frac{1}{s + Dk^2}$$

On vérifie facilement que $\mathcal{L}^{-1}\{\hat{\tilde{P}}(k, s)\} = e^{-Dt k^2}$. Ainsi,

$$P(x, t) = \mathcal{F}^{-1} \mathcal{L}^{-1}(\hat{\tilde{P}}(k, s)) = \mathcal{F}^{-1}\{e^{-Dt k^2}\} = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{2\pi} e^{-ikx} e^{-Dt k^2} dk = \frac{\exp\left(-\frac{x^2}{4Dt}\right)}{\sqrt{4\pi Dt}}$$

On retrouve la même expression que dans le cas de la diffusion normale. Le comportement macroscopique est identique.

Reprenons l'expression trouvée :

$$s\hat{\tilde{P}}(k, s) + Dk^2 \hat{\tilde{P}}(k, s) = 1 \quad \text{on en déduit} \quad s\tilde{P}(x, s) - D \frac{\partial^2}{\partial x^2} \tilde{P}(x, s) = \delta(x)$$

Finalement en appliquant \mathcal{L}^{-1} ,

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial t} P(x, t) = D \frac{\partial^2}{\partial x^2} P(x, t) \\ P(x, t=0) = \delta(x) \end{cases}$$

Où se trouve l'“anormalité” de cette diffusion ?

Il y a quatre cas possibles :

$\sigma^2 < +\infty$ et $\tau < +\infty$ classique	$\sigma^2 = +\infty$ et $\tau < +\infty$ (1)
$\sigma^2 < +\infty$ et $\tau = +\infty$ (2)	$\sigma^2 = +\infty$ et $\tau = +\infty$ (3)

(1) :

$$\begin{aligned}
\sigma^2 &= \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 p(x) dx = +\infty \\
p(x) &\underset{|x| \rightarrow +\infty}{\sim} \frac{A}{|x|^{1+\beta}} \quad 0 < \beta < 2
\end{aligned}$$

Exemple. (distribution de Cauchy)

$$p(x) = \frac{a}{\pi(x^2 + a^2)}$$

On a bien :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} p(x)dx = 1 \quad \int_{-\infty}^{+\infty} \underbrace{xp(x)}_{\text{impaire}} dx = 0 \quad \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 p(x)dx = +\infty$$

Dans le cas d'une variance infinie, l'expression de $\hat{p}(k)$ n'est plus valable, reprenons le calcul :

$$\begin{aligned} \hat{p}(k) &= \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx} p(x)dx = 1 - \int_{-\infty}^{+\infty} (1 - e^{ikx})p(x)dx \\ &\stackrel{x'=kx}{=} 1 - \frac{1}{k} \int_{-\infty}^{+\infty} (1 - e^{ix})p\left(\frac{x}{k}\right)dx \\ &\approx 1 - \frac{1}{k} \int_{-\infty}^{+\infty} (1 - e^{ix}) \frac{A}{|x/k|^{1+\beta}} dx + \dots \quad (*) \\ &= 1 - |k|^\beta \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} (1 - e^{ix}) \frac{A}{|x|^{1+\beta}} dx}_{\text{constante } \frac{a^\beta}{2}} + \dots \\ &= 1 - \frac{|k|^\beta a^\beta}{2} + \dots \end{aligned}$$

(*) La justification se fait en séparant l'intégrale $\int_{-\infty}^{-y} \dots + \int_{-y}^y \dots + \int_y^{+\infty}$. On arrive à montrer que \int_{-y}^y est négligeable par rapport aux deux autres et pour $y \rightarrow +\infty$ on peut utiliser l'expression asymptotique de $p(\cdot)$.

On obtient alors :

$$\hat{P}(k, s) = \frac{1}{s + |k|^\beta \underbrace{\frac{a^\beta}{2\tau}}_{D_\beta}} \stackrel{\mathcal{L}^{-1}}{\Rightarrow} \tilde{P}(k, t) = e^{-D_\beta |k|^\beta t} \stackrel{\mathcal{F}^{-1}}{\Rightarrow} P(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{2\pi} e^{-ikx} e^{-D_\beta |k|^\beta t} dk$$

$P(x, t)$ est une distribution de Lévy.

Comme précédemment appliquons les transformées inverses. On a :

$$\begin{aligned} s\hat{P}(k, s) + D_\beta |k|^\beta \hat{P}(k, s) &= 1 \\ \stackrel{\mathcal{F}^{-1}}{\Rightarrow} s\tilde{P}(x, s) + D_\beta \mathcal{F}^{-1}\{|k|^\beta \hat{P}\} &= \delta(x) \end{aligned}$$

Définissons un nouvel opérateur :

$${}_{-\infty} \mathcal{D}_x^\beta f(x) = \mathcal{F}^{-1}\{|k|^\beta \mathcal{F}(f)\}(x)$$

C'est un opérateur linéaire. Et si $\beta = 2$, ${}_{-\infty}\mathcal{D}_x^2 f = \frac{\partial^2}{\partial x^2} f(x)$. On a aussi :

$${}_{-\infty}\mathcal{D}_x^\beta f(x) \text{ ``=`` const } \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{f(x')}{|x - x'|} dx'$$

On se ramène alors à :

$$s\tilde{P}(x, s) + D_\beta {}_{-\infty}\mathcal{D}_x^\beta \tilde{P}(x, s) = \delta(x)$$

On trouve enfin :

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial t} P(x, t) = D_\beta {}_{-\infty}\mathcal{D}_x^\beta P(x, t) \\ P(x, t=0) = \delta(x) \end{cases}$$

Remarque. On est passé d'un opérateur différentiel $\frac{\partial^2}{\partial x^2}$ à un opérateur intégral ${}_{-\infty}\mathcal{D}_x^\beta$ puisqu'on prend désormais en compte le comportement global de la fonction. En effet, on s'intéresse aux déplacements vers un point x effectué dans le temps t qui peuvent provenir d'un x' quelconque.

(2) : On a comme dans le cas classique $\hat{p}(k) = 1 - \frac{k^2 \sigma^2}{2} + \dots$. En revanche l'expression de $\tilde{\psi}$ n'est plus valable.

$$\psi(t) \underset{t \rightarrow +\infty}{\sim} \frac{A}{t^{1+\alpha}} \quad \underbrace{\int \psi = 1}_{0 \leq \alpha} \quad \underbrace{\int t\psi = +\infty}_{\leq 1}$$

$$\begin{aligned} \tilde{\psi}(s) &= \int_0^{+\infty} e^{-ts} \psi(t) dt = 1 - \int_0^{+\infty} (1 - e^{-ts}) \psi(t) dt \\ &= 1 - \frac{1}{s} \int_0^{+\infty} (1 - e^{-t}) \psi\left(\frac{t}{s}\right) dt \\ &\approx 1 - \frac{1}{s} \int_0^{+\infty} (1 - e^{-t}) \frac{s}{(t/s)^{1+\alpha}} dt \\ &= 1 - s^\alpha \underbrace{\int_0^{+\infty} (1 - e^{-t}) \frac{s}{t^{1+\alpha}} dt}_{\text{constante } \delta^\alpha} \\ &= 1 - s^\alpha \delta^\alpha + \dots \end{aligned}$$

Alors :

$$\hat{\tilde{P}}(k, s) = \frac{1}{s + s^{1-\alpha} k^2 \frac{\sigma^\alpha}{2\delta^\alpha}} = \frac{1}{s + D_\alpha s^{1-\alpha} k^2}$$

Comme précédemment :

$$\begin{aligned} &s\hat{\tilde{P}}(k, s) + D_\alpha s^{1-\alpha} k^2 \hat{\tilde{P}}(k, s) = 1 \\ \xrightarrow{\mathcal{F}^{-1}} \quad &s\tilde{P}(x, s) - D_\alpha s^{1-\alpha} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \tilde{P}(x, s) = \delta(x) \\ \xrightarrow{\mathcal{L}^{-1}} \quad &\frac{\partial}{\partial t} P(x, t) - D_\alpha \frac{\partial^2}{\partial x^2} \mathcal{L}^{-1}(s^{1-\alpha} \mathcal{L}(P(x, t))) = 0 \end{aligned}$$

On définit de la même manière que (1) un opérateur (ici dans le cas temporel) :

$${}_0\mathcal{D}_t^{1-\alpha} = \mathcal{L}^{-1}(s^{1-\alpha}\mathcal{L}(f)) = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \frac{\partial}{\partial t} \int_0^t \frac{f(t')}{(t-t')^{1-\alpha}} dt'$$

Finalement on se ramène au système :

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial t} P(x, t) = D_\alpha \frac{\partial^2}{\partial x^2} {}_0\mathcal{D}_t^{1-\alpha}(P(x, t)) \\ P(x, t=0) = \delta(x) \end{cases}$$

Remarque. L'opérateur que l'on vient de définir s'appelle *la dérivée de Riemann-Liouville*.

On peut calculer $\frac{\partial \mathbb{E}(X_t^2)}{\partial t}$ et on en déduit :

$$\mathbb{E}\{X_t^2\} = \frac{2D_\alpha t^\alpha}{\Gamma(1+\alpha)}$$

3 Diffusion et mouvement brownien : applications

Taille des cellules: $\sim 10\text{-}100\mu\text{m}$. Certains neurones traversent notre corps ! (dans $\sim 1\text{m}$)
Les cellules ont des fonctions (ex: système immunitaire)

Structure des cellules:

Chez l'homme: $\sim 10^{14}$ cellules, typiquement $5\text{-}20\mu\text{m}$, min $0,2\mu\text{m}$, 70-80% d'eau

Prokaryote/eucaryote: avec/sans noyau

Cytosquelette: permet de structurer la cellule

↳ microtubules: réseau de transport \rightarrow tendance de rapidité de déplacement, piste pour le défilé animale

↳ filaments d'actine (polymère): maintien d'une forme de déplacement, exerce des forces mécaniques

↳ membrane plasmique: protection et perméabilité ($5\text{-}10\mu\text{m}$ d'épaisseur)

↳ mitochondrie: transforment l'oxygène et les nutriments en adénosine triphosphate, très énergétiques. Jusqu'à $1000 \frac{\text{ATP}}{\text{min}}$ dans une cellule

Des protéines motrices se déplacent le long des microtubules: dyneine ($1\mu\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$ vers les charges \ominus , ie le noyau) et kinesine ($2\text{-}3\mu\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$ dans l'autre sens)

Processus de transport dans les cellules:

passif } \hookrightarrow diffusion (gaz), molécules liposolubles...)
osmose (eau)

actif } \hookrightarrow Transport actif (myosine, dyneine, kinesine)

lumière de l'ATP } \hookrightarrow Endocytose et exocytose: phagocytose pour les particules, pinocytose par les liquides

Comment observer ces phénomènes ?

↳ tracers: particules fluorescentes (le plus fréquent/développé), particules magnétiques, pince optiques

→ On obtient des trajectoires

Comment caractériser/identifier un processus donné à partir de trajectoires individuelles ? \rightarrow problème inverse stochastique !

« La technique universelle, sinon ce serait impossible enseigner »

Trois questions interdisciplinaires: quel est le mécanisme physique? Quelles sont les conséquences biologiques? Quels sont les meilleurs outils statistiques?

Mécanismes physiques

$$\langle x^2(t) \rangle \approx 2D_{\text{eff}} t^{\alpha}$$

↳ Effet mémoire à long terme : corrélation entre les pas

↳ Effet de cage : temps long entre chaque pas (il faut que plusieurs éléments du réseau se déplace en même temps pour briser la cage)

↳ Diffusion sur un milieu fractal : complexité structurelle.

1) Effet mémoire à long terme

Équation de Langevin: (Loi de Newton), $ma(t) = f_s(t) + F(t)$

Force de Stokes : $F_s(t) = -\gamma v(t)$ où $f_s(t) = -\int_0^t \gamma(t-t') v(t') dt'$

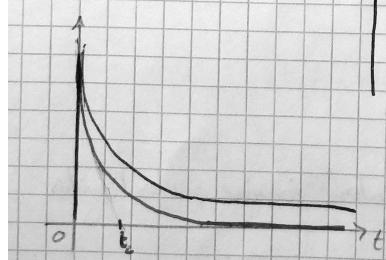
force de Stokes généralisée

fonction décroissante qui pondère l'importance du passé

Le noyau de mémoire : instantané : $\gamma(t) = \gamma \delta(t)$ - (on retrouve la force de Stokes classique)

court terme : $\gamma(t) = \gamma e^{-\frac{t}{\tau_c}}$ -

long terme : $\gamma(t) = \gamma_a t^{-\beta}$ -



Crowding, caging, trapping... : diffusion normale/anormale selon le temps d'attente

CTRW et vieillissement
continuous time
random walk

$t=0$: Début de l'expérience? Naissance de la cellule? \rightarrow recharge rien pour un processus stationnaire mais ce n'est pas toujours le cas!

$$\Delta x(t) = x(t_0 + t) - x(t_0)$$

à début de l'expérience

Rappel: $x(t) = \sum_{i=1}^{N(t)} \xi_i$

$$\langle \Delta x^2(t) \rangle = \mathbb{E}_{\xi} (\Delta x^2(t)) = \mathbb{E}_{\xi} ((x(t_0 + t) - x(t_0))^2)$$

$$\text{Or, } x(t_0 + t) - x(t_0) = \sum_{k=N(t_0)+1}^{N(t_0+t)} \xi_k \Rightarrow \langle \Delta x^2(t) \rangle = \mathbb{E}_{\xi} \left(\left(\sum_{k=N(t_0)+1}^{N(t_0+t)} \xi_k \right)^2 \right)$$

moyenne sur toutes les déplacements et tous les temps d'attente; on peut faire séparément car les deux sont indépendants

$$\langle \Delta x^2(t) \rangle = \mathbb{E}_{\xi} \left(\sum_{k=N(t_0)+1}^{N(t_0+t)} \xi_k^2 \right) = \mathbb{E}_{\xi} \left(\sum_{k=N(t_0)+1}^{N(t_0+t)} \tau^2 \right) = \tau^2 \mathbb{E}_{\tau} (N(t_0 + t) - N(t_0))$$

moyenne des ξ_k moyenne spatiale moyenne sur les temps d'attente

$$\langle \Delta x^2(t) \rangle = \tau^2 \left(\mathbb{E}_{\tau} (N(t_0 + t)) - \mathbb{E}_{\tau} (N(t_0)) \right)$$

Pour $b_0=0$: $\langle \Delta x^2(t) \rangle = \tau^2 \mathbb{E}_{\tau} (N(t)) = \frac{2D_w}{\zeta(\omega+1)} t^\omega$

D'où: $\langle \Delta x^2(t) \rangle = \frac{2D_w}{\zeta(\omega+1)} [(t+t_0)^\omega - t_0^\omega] = 2D_w ((t+t_0)^\omega - t_0^\omega)$

$D_w = \frac{D_w}{\zeta(\omega+1)}$

Pour $\omega=1$, on retrouve $\langle \Delta x^2(t) \rangle = 2Dt$: diffusion normale

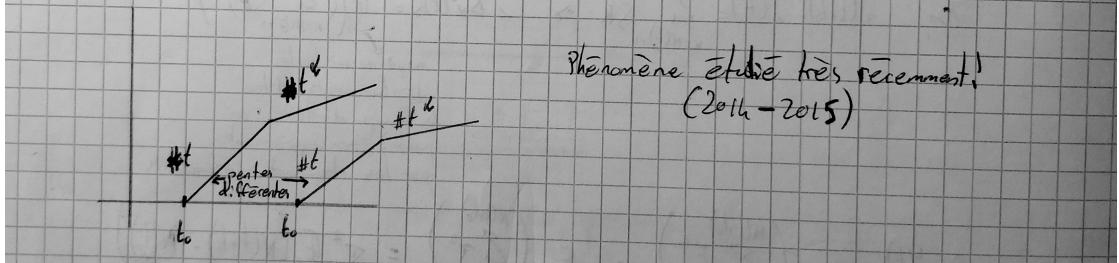
En sous-diffusion: ($\alpha < 1$)

$$\text{Pour } t \gg t_0, \langle \Delta x^2(t) \rangle \approx 2D_\alpha t^\alpha$$

Pour $t \ll t_0, \langle \Delta x^2(t) \rangle \approx 2D_\alpha t_0^{\alpha-1}t$: on retrouve une dépendance temporelle linéaire!

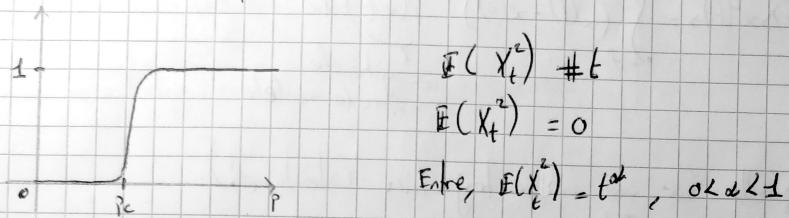
On voit que pour $t > t_0$ pour une cellule biologique, en conséquence, on peut croire observer une "diffusion classique", mais avec un coefficient de diffusion qui varie d'une expérience à l'autre \rightarrow effet de vieillissement (par au sens du vieillissement biologique de la cellule ici)

D'où fait que $E(\tau_{\text{att}}) = +\infty$, donc le temps d'attente n'est pas négligeable devant la durée de l'expérience / la durée de vie du système \rightarrow le moment du début de l'expérience compte !



3) Diffusion sur un support fractal

Phénomènes de percolation



Modèle peu adapté à la cellule, mais bon pour le noyau (noyau de chromatine, pas de réseau stable, tout est dynamique)

$$D_f \approx 2,2 - 2,6$$

Comment choisir le "bon" modèle ?

fBm (mémoire à long terme), CTRW, percolation...? → Défi mathématique important pour choisir, chacun est physiquement/biologiquement justifié et a des avantages/inconvénients

$\langle x^2(t) \rangle = 2D_a t^\alpha$ que soit le modèle, et dans la cellule, donc ne permet pas d'avoir d'autre → il faut d'autres tests statistiques (par ex. l'ergodicité).

→ sur les images en exemple

Flowing time averaging

Moyenne d'ensemble (sur plusieurs réalisations):

$$\langle \Delta x^2(t) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} (x(t) - \bar{x}(t))^2 p(x, t) dx$$

↑
necessité de
construire un modèle

Moyenne temporelle sur une unique trajectoire (à l'échelle!):

$$\langle \Delta x^2(t) \rangle_T = \frac{1}{T-t} \int_0^{T-t} (x(t+t') - x(t'))^2 dt'$$

ça va être faux, mais on ne peut pas espérer faire si c'est faux

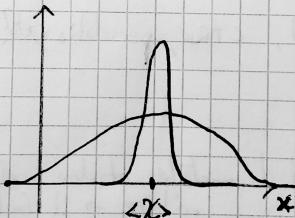
But: Si on suppose que le processus est stationnaire (i.e. les propriétés ne changent pas au cours du temps), moyennant sur le temps ou sur les réalisations revient au même \rightarrow hypothèse d'ergodicité: $\langle \Delta x^2(t) \rangle_T \xrightarrow[T \rightarrow +\infty]{} \langle \Delta x^2(t) \rangle$

$\chi = \langle \Delta x^2(t) \rangle_T$ apporte de l'information utile si T est assez grand pour que la distribution de $\langle \Delta x^2(t) \rangle_T$ soit resserrée.

Pour la diffusion normale:

$$\langle x \rangle = 2Dt$$

$$\sigma(x) \rightarrow 0$$



Pour la sous-diffusion:

$$\chi = \langle \Delta x^2(t) \rangle_T$$

$$\langle \chi \rangle = \frac{1}{T-t} \int_0^{T-t} (x(t+t') - x(t'))^2 dt'$$

$$\begin{aligned} \langle \Delta x^2(t) \rangle_T &\approx 2D_\alpha T^{\alpha-1} t^\alpha (t \ll T) \\ \neq \langle \Delta x^2(t) \rangle &\approx 2D_\alpha t^\alpha \end{aligned}$$

} les CTRW ne sont pas un modèle ergodique ! (Donc une seule trajectoire n'est pas représentative)

Comment choisir?

Imagerie d'une particule: trajectoire $x(t)$)

$\langle \text{mean square} \rangle$

Root mean square

Power density spectrum

Stiffness of a living cell, dynamics of particles