
–Texte–

Diffusion d'une particule

1 Modélisation de mouvement d'une particule

Le phénomène appelé « mouvement brownien » a été observé pour la première fois en 1827 par le botaniste écossais Robert Brown au cours d'une étude portant sur le processus de fertilisation d'une nouvelle espèce de fleur. Brown observa au microscope que les grains de pollen de cette fleur, en suspension dans de l'eau, étaient animés d'un mouvement désordonné rapide (qui fut appelé mouvement brownien). Les observations suggéraient qu'il n'y avait pas de corrélation entre les mouvements de deux particules voisines, que la probabilité associée au déplacement d'une particule à partir d'une position donnée était isotrope, que le mouvement passé d'une particule n'avait aucune influence sur le mouvement présent et futur et que ce mouvement était incessant. Albert Einstein, en 1905, montra qu'une particule de taille observable, soumise au bombardement moléculaire du milieu, devait être animée d'un mouvement aléatoire dû à la différence entre les nombres (très grands) d'impacts agissants sur les parties opposées de sa surface à un instant donné.

D'autre part, lorsque l'on observe l'évolution au cours du temps de la concentration de l'hémoglobine dans le sang (par exemple) après une injection en un point, les mesures révèlent que cette concentration ressemble à une cloche gaussienne centrée au point d'injection.

Proposons une modélisation de ce phénomène qui permette de rendre compte de la distribution des particules à un temps quelconque. Pour simplifier les écritures, on supposera que tous les mouvements se font dans la même direction, le long d'un axe de référence. Discrétisons le temps et l'espace et assimilons la trajectoire de la particule à une marche aléatoire. Dans toute la suite, les pas de discrétisation temporelle et spatiale seront notés respectivement Δt et Δx . Considérons donc une particule observée aux instants $0, \Delta t, 2\Delta t, \text{etc.}$ On suppose que cette particule est à l'origine à l'instant 0 . Notons S_n sa position à l'instant $n\Delta t$, et $\Delta x X_n$ son déplacement entre $(n-1)\Delta t$ et $n\Delta t$, de telle sorte que $S_n = \Delta x(X_1 + \dots + X_n)$. On suppose que les v.a. $(X_i)_i$ sont indépendantes et identiquement distribuées de loi donnée par :

$$\mathbb{P}(X_i = 1) = \mathbb{P}(X_i = -1) = 1/2.$$

Plusieurs questions émergent de ce modèle :

1. Quel doit être le lien entre Δt et Δx pour que la limite quand Δt et Δx tendent vers 0 soit non triviale ? Quelle est cette limite ? Rend-elle compte des observations ?

2. Comment au vu de plusieurs observations d'un grain de pollen à différents instants peut-on estimer les paramètres du modèle ?
3. Quels autres phénomènes peuvent-ils être décrits par un modèle voisin ?

2 Étude de la marche aléatoire et passage à la limite

Quelle est la « bonne » échelle entre les deux pas de discrétisation ? La réponse est relativement simple. Pendant un temps Δt , la particule subit un grand nombre de petits chocs proportionnel à Δt . Or, la variance de la somme de N variables aléatoires indépendantes est de l'ordre de N . On a donc la relation suivante :

$$\Delta x = \sqrt{2D\Delta t},$$

où la constante D sera interprétée par la suite. On supposera dans toute la suite que Δx est ainsi relié à Δt .

Théorème 2.1. Soient n instants $0 < t_1 < \dots < t_n$. On note $m(t_i, \Delta t)$ la partie entière de $t_i/\Delta t$. Alors, lorsque

$$(S_{m(t_1, \Delta t)}, \dots, S_{m(t_n, \Delta t)}) \xrightarrow[\Delta t \rightarrow 0]{\mathcal{L}} \mathcal{N}(0, 2DK_n),$$

où la matrice de covariance K_n est définie par $K_{ii} = t_i$ et $K_{ij} = \min(t_i, t_j)$.

Démonstration. Donnons quelques éléments pour la preuve de ce résultat pour $n = 1$. Soit $t > 0$. On a alors

$$S_{m(t, \Delta t)} = \sqrt{2D m(t, \Delta t) \Delta t} \frac{1}{\sqrt{m(t, \Delta t)}} \sum_{i=1}^{m(t, \Delta t)} X_i.$$

D'une part, par définition de $m(t, \Delta t)$, $t - \Delta t \leq m(t, \Delta t) \Delta t \leq t$ et ainsi,

$$\sqrt{2D m(t, \Delta t) \Delta t} \xrightarrow[\Delta t \rightarrow 0]{} \sqrt{2Dt}.$$

D'autre part, puisque $m(t, \Delta t) \rightarrow +\infty$ quand $\Delta t \rightarrow 0$, le théorème central limite assure que

$$\frac{1}{\sqrt{m(t, \Delta t)}} \sum_{i=1}^{m(t, \Delta t)} X_i \xrightarrow{\mathcal{L}} \mathcal{N}(0, 1).$$

□

Remarque 2.2. On peut obtenir le même résultat en supposant seulement que les variables aléatoires (X_i) sont indépendantes, identiquement distribuées, centrées et de variance 1. La contrainte sur le mouvement de la particule est ainsi considérablement amoindrie.

Remarque 2.3. La constante D s'appelle coefficient de diffusion, ou diffusivité de la particule, dont elle est une caractéristique intrinsèque. Par exemple, la diffusivité de l'hémoglobine dans le sang est de l'ordre de $10^{-7} \text{cm}^2/\text{s}$ tandis que celle de l'oxygène, toujours dans le sang, est de l'ordre de $10^{-5} \text{cm}^2/\text{s}$.

Corollaire 2.4. *Pour $D = 1/2$, le processus à temps continu limite mis en évidence (on la notera $(B_t)_{t \geq 0}$) vérifie les propriétés suivantes :*

1. *pour tout $t > 0$, la loi de B_t est la loi normale $\mathcal{N}(0, t)$,*
2. *les accroissements sont indépendants : pour tous $0 < t_1 < \dots < t_n$, les v.a.*

$$(B_{t_1}, B_{t_1} - B_{t_2}, \dots, B_{t_n} - B_{t_{n-1}})$$

sont indépendantes de lois gaussiennes de variances respectives

$$(t_1, t_2 - t_1, \dots, t_n - t_{n-1}).$$

3. *les trajectoires du processus, c'est-à-dire les applications (indexées par Ω) $t \mapsto B_t$ sont continues p.s.*

Ce processus est appelé mouvement brownien standard.

3 Modélisation de la pollution d'une rivière

On peut adapter le modèle continu précédent pour essayer de prévoir la pollution engendrée par le déversement de substances chimiques dans une rivière. Pour cela, il faut ajouter au phénomène de diffusion celui de la dérive due au courant de la rivière qui sera supposé constant (dans le temps et l'espace).

On observe une particule polluante à plusieurs instants $0 < t_1 < \dots < t_n$, ce qui fournit les mesures X_1, \dots, X_n . D'après ce qui précède, il paraît judicieux de modéliser l'évolution de la particule de la manière suivante : on interprète les variables aléatoires $(X_i)_i$ comme des observations d'un mouvement brownien avec dérive :

$$X_i = at_i + \sqrt{2D}B_{t_i},$$

où a rend compte de la vitesse du courant de la rivière et D mesure le phénomène de diffusion. On voudrait estimer ces coefficients (a, D) qui sont *a priori* inconnus.

Pour cela, on peut, grâce au corollaire 2.4, simplifier le problème. On notera par convention $X_0 = 0$ et $t_0 = 0$ et, pour $i = 1, \dots, n$, on définit

$$s_i = t_i - t_{i-1} \quad \text{et} \quad Y_i = X_i - X_{i-1}.$$

On peut encore réécrire Y_i comme $as_i + \sqrt{2D}(B_{t_i} - B_{t_{i-1}})$. Les variables aléatoires $(Y_i)_i$ apparaissent alors comme des v.a. indépendantes de lois respectives $(\mathcal{N}(as_i, 2Ds_i))_i$.

La méthode la plus efficace pour construire un estimateur de (a, D) est la méthode du maximum de vraisemblance. Elle consiste à écrire la densité $L_{a,D}(y_1, \dots, y_n)$ (que l'on appelle encore vraisemblance) du n -uplet (Y_1, \dots, Y_n) et à choisir a et D qui rendent maximum la quantité $L_{a,D}(Y_1, \dots, Y_n)$. Maximiser la vraisemblance revient à maximiser son logarithme ou encore la quantité :

$$\sum_{i=1}^n \left(-\frac{1}{2} \log D - \frac{(y_i - as_i)^2}{4Ds_i} \right).$$

On en déduit alors le résultat suivant.

Proposition 3.1. *L'estimateur du maximum de vraisemblance de (a, D) est donné par*

$$\begin{cases} \hat{a} = \frac{\sum_{i=1}^n Y_i}{\sum_{i=1}^n s_i}, \\ \hat{D} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{(Y_i - \hat{a}s_i)^2}{2s_i}. \end{cases}$$

4 Suggestions.

1. Décrire le modèle en commentant notamment le lien entre Δt et Δx et le choix de la marche aléatoire simple. On fera le lien entre le modèle et les observations expérimentales données en introduction.
2. Démontrer le théorème 2.1 pour $n = 2$.
3. Illustrer informatiquement le théorème 2.1 pour deux instants $0 < t_1 < t_2$.
4. Démontrer les points 1 et 2 du corollaire 2.4.
5. Démontrer la proposition 3.1.
6. Illustrer, grâce à la simulation, la convergence de l'estimateur (\hat{a}, \hat{D}) .
7. Comment pourrait-on modéliser le phénomène de pollution dans le delta d'un fleuve où l'influence des marées se fait sentir (on modélisera le flux et le reflux par des dérives constantes par morceaux) ?