Approche stochastique des e.d.p

M.C.Néel

Université d'Avignon et des Pays de Vaucluse, UMR 1114 EMMAH, 84018 Avignon Cedex, France

Organisation

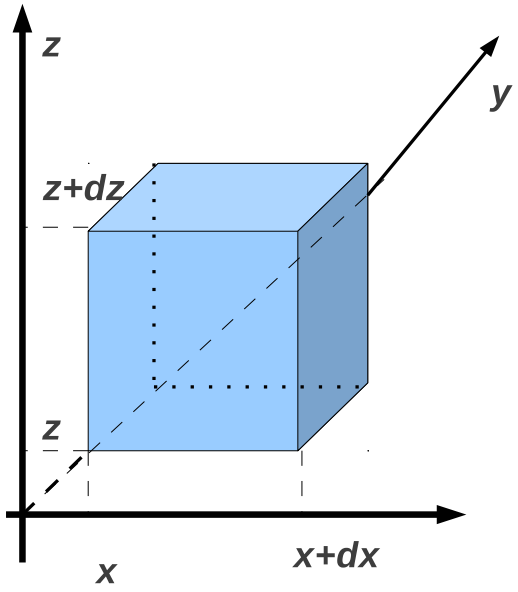
- 1. Lois de Fourier + Fick, expliqées par Einstein à la lumière du Mouvement Brownien (phénomène physique)
- 2. Version mathématique du Mouvement Brownien, ou pourquoi ce modèle marche si bien en physique
- 3. Généraliser, doucement d'abord
- 4. Généraliser +: prendre en compte grands evenements
- 5. Généraliser encore +: prendre en compte grands evenements et intermittence

1. Lois de Fourier et Fick, relation avec mouvement Brownien

1.1. Loi de Fourier u concentration en 1 substance, dans 1 fluide au repos, Si u ne dépend que d'1 coordonnée x:

$$\frac{\partial}{\partial t}u(x,t) = \Delta(Du) = \frac{\partial^2}{\partial x^2}Du(x,t)$$

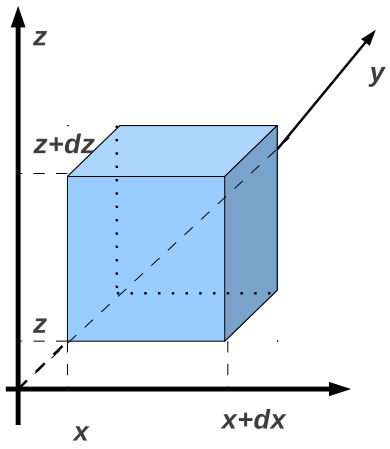
1.2. Loi (phénoménologique) de Fick



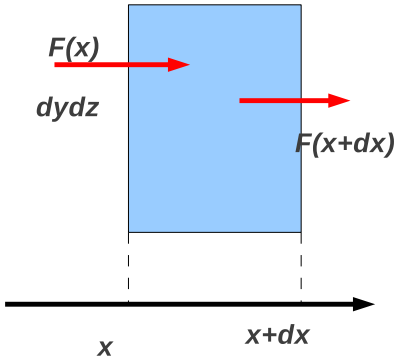
- densité de flux F de substance à travers 1 element de surface = flux à travers l' element de surface/aire
- densité de flux F de substance $-\vec{\nabla} Du$
- valeurs a priori différentes sur chaque face
- Si u ne dépend que d'1 coordonnée x:

$$F(x) = -\frac{\partial}{\partial x} Du(x,t)$$

1.3. Loi Fourier: conservation du flux

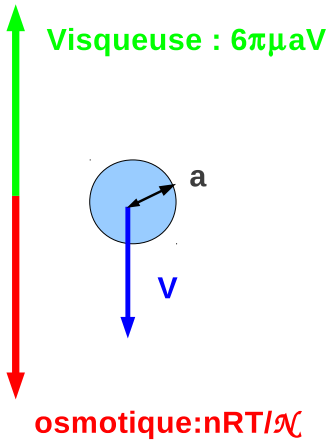


Vue de face



- Masse de substance dans volume élementaire $dxdydz$: $udxdydz$, u concentration u.
- évolue suivant bilan des flux à travers les bords de ce volume
- densité de flux F de substance, valeurs a priori $\neq$ sur chaque face
- Si u fonction d'1 coordonnée x: $F(x) = -\frac{\partial}{\partial x} Du(x,t)$, bilan: $dydz(F(x) - F(x+dx))$
- $\frac{\partial}{\partial t} u = \frac{\partial^2}{\partial x^2} Du$

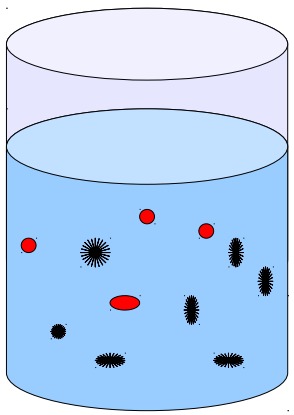
1.4. Interprétation loi Fick: thermodynamique



- Einstein (1905) relie le flux de particules sphériques rayon a avec pression osmotique et suggère 1 interprétation fondée sur agitation aléatoire particules colloidales
- énergie libre n particules/1 volume en suspension: force pression osmotique/ 1 volume $Force = \frac{R}{\mathcal{N}} T \nabla n$
- équilibre force visqueuse $\rightarrow$ vitesse limite $V = \frac{Force}{6\pi\mu a}$
- $\Rightarrow$ densité flux de particules $= -\frac{RT}{6\pi\mu a \mathcal{N}} \nabla n$

1.4. interprétation loi Fick: mouvement Brownien

1 pot avec de l'eau au repos et des petites particules en suspension



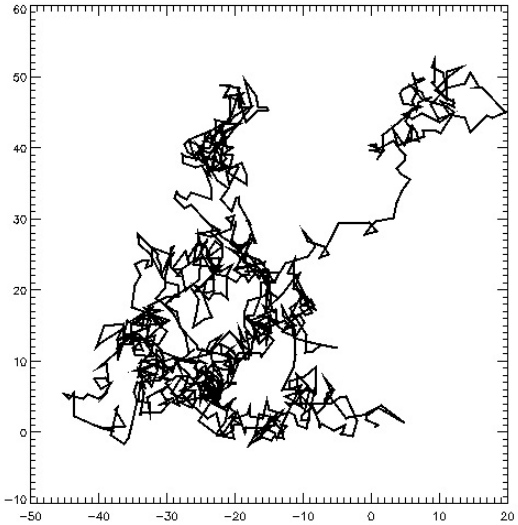
- Hypothèse: déplacements Δ indépendants pendant temps τ, $\varphi_\tau(\Delta)d\Delta =$ proba amplitude $\in [\Delta, \Delta + d\Delta]$
- fonction φ_τ symétrique ($\varphi_\tau(\Delta) = \varphi_\tau(-\Delta)$), 2nd moment $\langle \Delta^2 \rangle$ fini, $\int_R \varphi_\tau(\Delta)d\Delta = 1$
- $n(x, t+\tau) = \int_R n(x-\Delta, t)\varphi_\tau(\Delta)d\Delta$

$$n(x, t+\tau) = n(x,t) - \Delta\partial_x n(x,t) + \frac{\Delta^2}{2}\partial^2_{x^2} n(x,t) + ...$$

$$\Rightarrow \partial_t n = \partial^2_{x^2} n(x,t) \int_R \frac{\Delta^2}{2\tau}\varphi_\tau(\Delta)d\Delta = D\partial^2_{x^2} n(x,t)$$

$2D\tau$ second moment $\int_R \Delta^2\varphi_\tau(\Delta)d\Delta = \langle \Delta^2 \rangle$ des déplacements

1.5. Application mesure nb d'Avogadro



- Mesurer suffisamment de déplacements pour déterminer second moment $\Rightarrow D$
- particules sphériques rayon a, fluide viscosité μ, n , relation entre D et $\mathcal{N}$
- en déduire $\mathcal{N}$
- J. Perrin: $\mathcal{N} = 7,05 \times 10^{-23}$

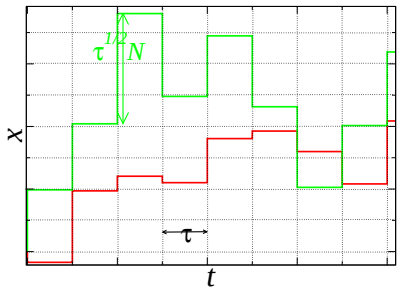
1.6.Ccl: idée sauts aléatoires identiquemnt distribués indépendants

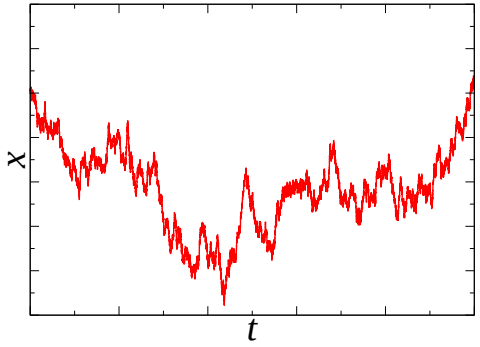
- modèle stochastique + edp + lois empirique/théorique Fick et Fourier
- associé idée atomique, justifie cette idée en permettant trouver $\approx$ nb Avogadro
- MB observable par tous, cependant mesures difficiles

2. Version mathématique du modèle Einstein

La loi de Fourier représente le mouvement Brownien des mathématiciens, 1 processus stochastique qui représente réellement 1 phènomène physique

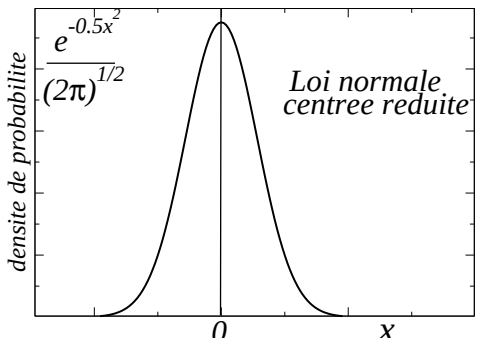
2.1. Le modèle stochastique d'Einstein

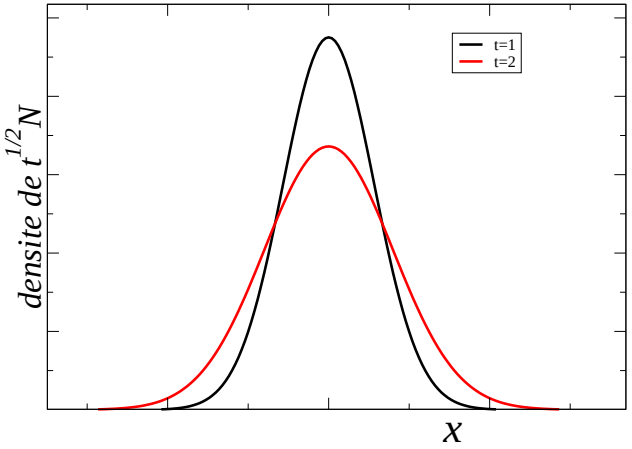




- marcheurs partis de 0, sauts à des instants séparés de τ
- sauts indépendants (ind), distribués comme $\sqrt{\tau}X$, la V.A. X ayant $\langle X \rangle = 0$, $\langle X^2 \rangle = 1$
- détail de 2 trajectoires du process valant $\sqrt{\tau}(X_1 + ... + X_n)$ à l'instant $t = n\tau$
- $\tau \to 0$: vue d'ensemble d'1 trajectoire de ce process

2.2. Th. limite centrale





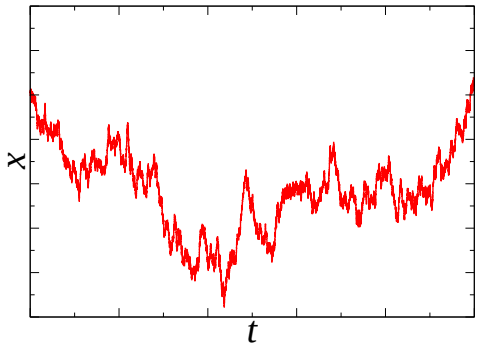
- Hyp: X_n V.A. ind, distribuées comme X ($\langle X \rangle = 0$, $\langle X^2 \rangle = 1$)
- Ccl: la distribution de $n^{-1/2}(X_1 + .. + X_n)$ ressemble de + en + à variable gaussienne centrée réduite N
- signifie: $\text{proba}(|\frac{X_1+..+X_n}{\sqrt{n}} - N| > \varepsilon|) \to 0$ qd $n \to \infty$
- loi normale attire les sommes de V.A. iid ayant 2nd moment fini
- la distrib de $\sqrt{\tau}(X_1 + .. + X_n)$ ressemble de + en + à $\sqrt{t}N$ qd $t = n\tau$, $\tau \to 0$

2.3. Stabilité loi normale

- $\Rightarrow$ Si $X_1 ... X_n$ ind, distribuées comme N: $\frac{X_1 + .. + X_n}{n^{1/\alpha}}$ est distribuée comme N,
- loi normale: stable par l'addition des V.A. i.i.d, index stabilité $= 2$
- la somme $X_1 + ... + X_n$ normalisée par $n^{1/\alpha}$, est distribuée comme X_1
- la fonction caractéristique: $\langle e^{ikN} \rangle = e^{-k^2/2}$

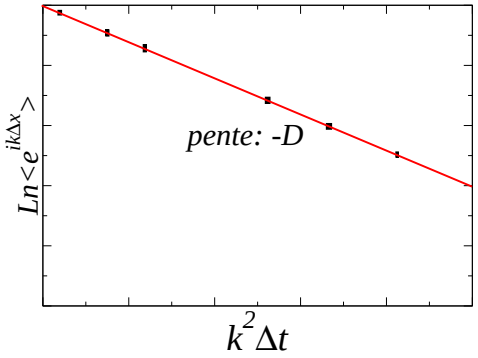
2.4. Le MB des mathématiciens

- cette limite: 1 processus $B(t)$ t.q. $\{B(t)\}$ continu, Markovien
- $B(0) = 0$, incréments ind: $0 < t_1 < t_2 < t_3 < t_4$, $B(t_4) - B(t_3)$ ind $B(t_2) - B(t_1)$
- $B(t + \Delta t) - B(t)$ VA gaussienne distribuée comme $B(\Delta t)$, c.a.d. comme $\sqrt{t}N$
- fonction caractéristique $\langle e^{ik(B(t+\Delta t)-B(t))} \rangle = e^{-k^2 \Delta t/2}$



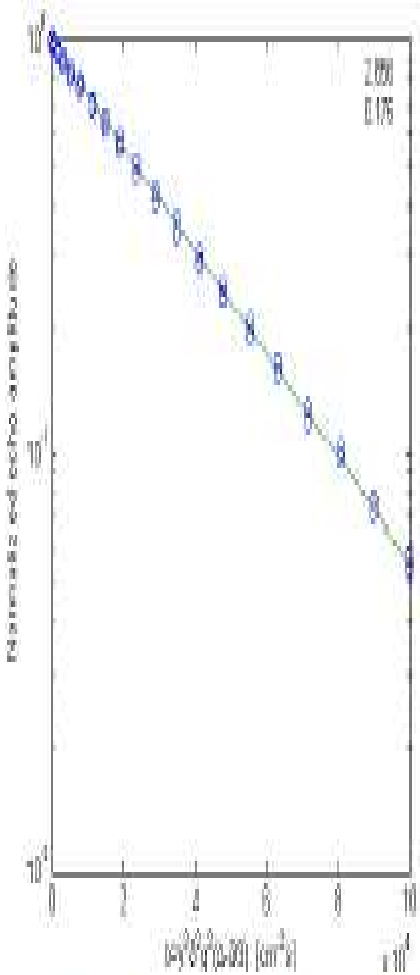
- densité $u(x,t)$ de $B(t)$: $\partial_t u = \frac{1}{2}\partial^2_{x^2} u$, celle de $\sqrt{2D}B(t)$ $\partial_t u = D\partial^2_{x^2} u$
- On approche $B(t)$ en prenant pour $t = n\tau + \theta$, $0 \leq \theta < \tau$ la somme $\sqrt{\tau}(X_1 + ... + X_n) + \sqrt{\theta}X_{n+1}$
- les V.A. $X_1, ...X_n, ...$ ind, distribuées comme N

2.5. Le MB ainsi défini est observé

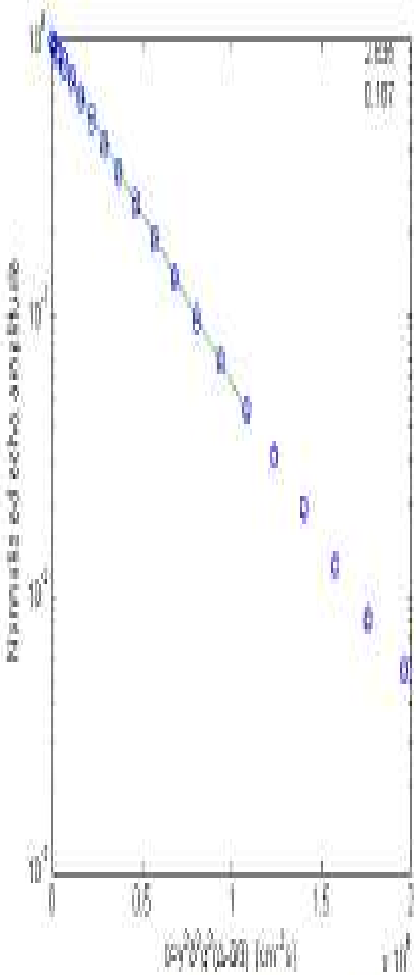


- eau au repos, chaque molécule position $x(t)$
- RMN: mesure $\langle e^{ik(x(t+\Delta t)-x(t))}\rangle$
- $x(t)$ et $\sqrt{2D}B(t)$?
- comparer mesure et $e^{-D\Delta t k^2} = \langle e^{ik(\sqrt{2D}B(t+\Delta t)-\sqrt{2D}B(t))}\rangle$?

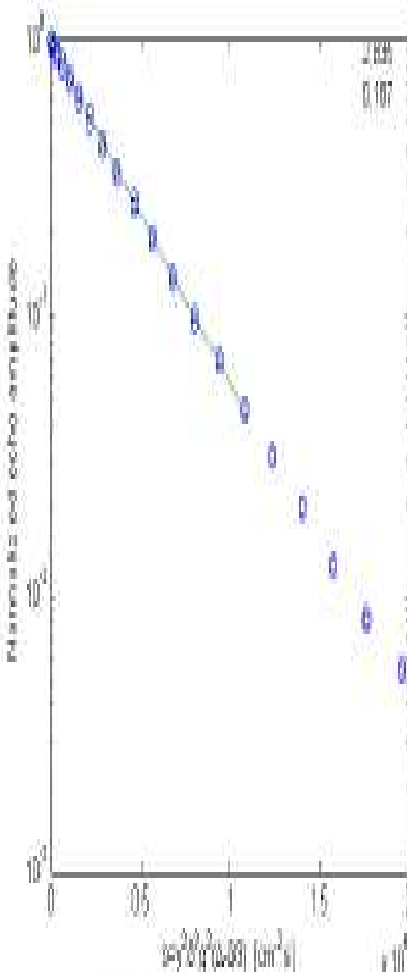
2.5. Le MB mesuré physiquement



(a) Coefficient de dispersion moléculaire de l'eau dans la direction x. $-52.8\ Gcm^{-1} < \alpha < 52.8\ Gcm^{-1}$

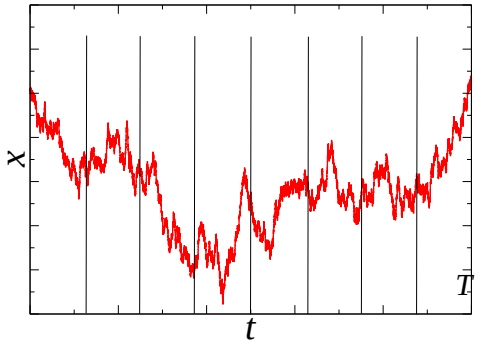


(b) Coefficient de dispersion moléculaire de l'eau dans la direction y. $-74.2\ Gcm^{-1} < \alpha < 74.2\ Gcm^{-1}$



(c) Coefficient de dispersion moléculair l'eau dans la direction z. $-66.5\ Gcm^{-1} < \alpha < 66.5\ Gcm^{-1}$

2.6. Propriétés individuelles des trajectoires



- continue partout, dérivable nulle part
- p variation $V_n^p(t) =: 0 < t < T$, somme des $|\text{variations}|^p$ partielles mesurées sur petits intervalles obtenus jusqu'à t en divisant $[0, T]$ par 2, n fois

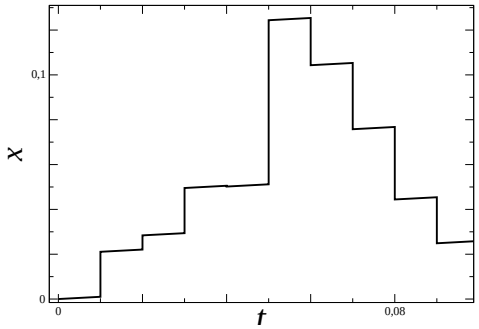
2.7.Ccl: les propriétés mathématiques du mouvement Brownien et les expériences

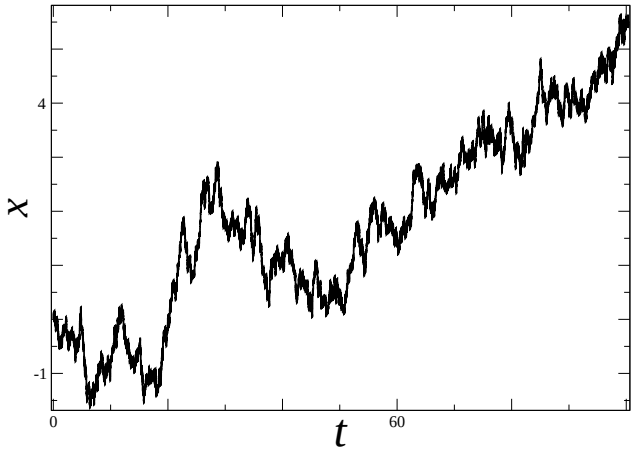
- loi normale attracteur
- stabilité: modèle très simple. Trop?
- fonction caractéristique mesurée physiquement
- nombreuses autres propriétés pour vérifications expérimentales

3. Adapter ce modèle ? généraliser?

- superposer MB et vitesse moyenne
- accepter vitesse moyenne et coeff diffusion variables / x et t, et même pouvant dépendre de la densité cad de u
- + intermittence?

3.1. Vitesse moyenne et paramètres variables



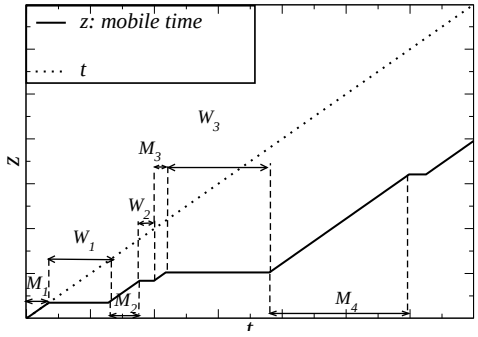


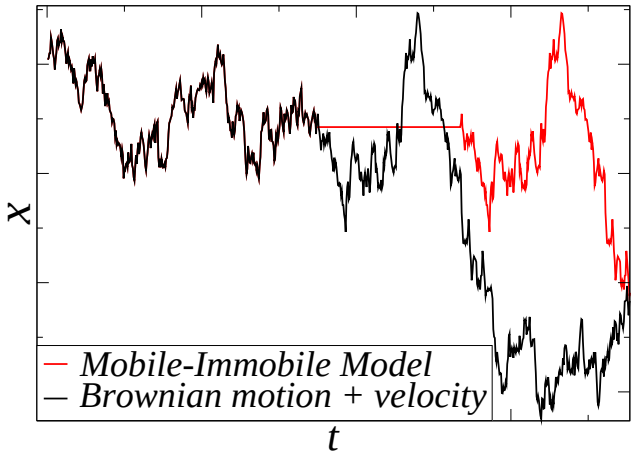
- au lieu de $x(t) = \sqrt{2D}B(t)$ et $\partial_t u = D\partial^2_{x^2} u$,
- $x(t) = x_0 + vt + \sqrt{2D}B(t)$ et $\partial_t u = \partial^2_{x^2}(Du) - \partial_x(vu)$,
- D et v pouvant dépendre de x, t, voire de u

3.2. Intermittence et changement de temps aléatoire

- déplacements du mouvement Brownien
- mais de temps en temps il s'arrête
- pour repartir ensuite
- modéliser adsorption, obstacles,...
- grande diversité

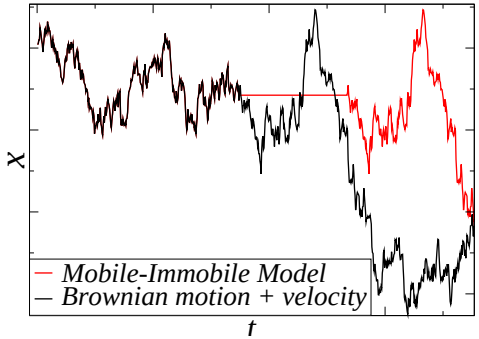
3.2. Exemple de changement de temps aléatoire

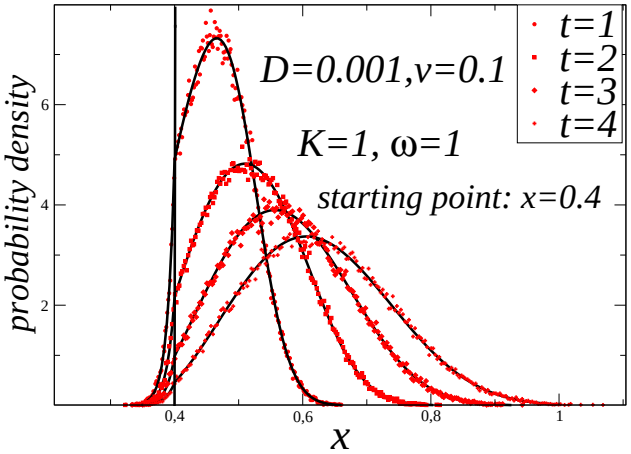




- déplacements du mouvement Brownien
- partager le temps en 1 succession d'étapes mobiles M_n aléatoires, chacune suivie d'1 immobilisation durée W_n
- indépendantes
- les M_n: distribution exponentielle moyenne $1/(K\omega)$
- les W_n: distribution exponentielle moyenne $1/\omega$

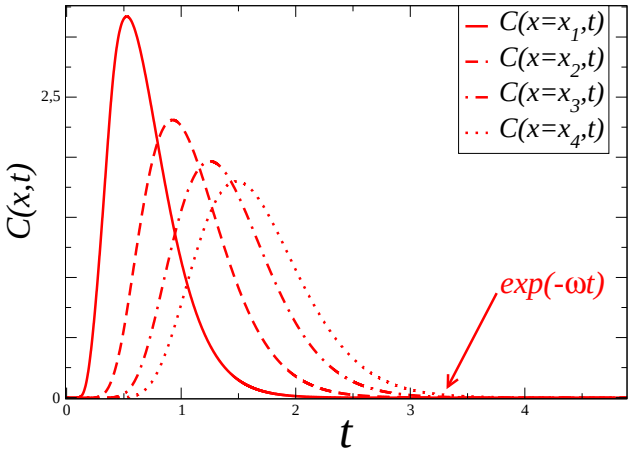
3.2. Changement de temps aléatoire





- milieux poreux
- la densité u d'1 ensemble de particules suivant le Mobile-Immobile Model
- $\partial_t u + K\omega e^{-\omega t} * \partial_t u = \partial^2_{x^2}(Du) - \partial_x(vu)$
- $\Leftrightarrow \partial_t u = \partial^2_{x^2}(Du_m) - \partial_x(vu_m)$, $u = u_m + u_{im}$ and $\partial_t u_{im} = \omega(Ku_m - u_{im})$
- système 1960, process 1984

3.3. le Mobile-Immobile Model



- utilisé pour la dispersion de traceur en milieu poreux
- profils temporels avec longues trainées
- d'autres modèles avec d'autres suites aléatoires M_n et W_n sont possibles: $\partial_t u + M(t) * \partial_t u = \partial^2_{x^2}(Du) - \partial_x(vu)$

3.4. Fonction caractéristique déplacements du MIM

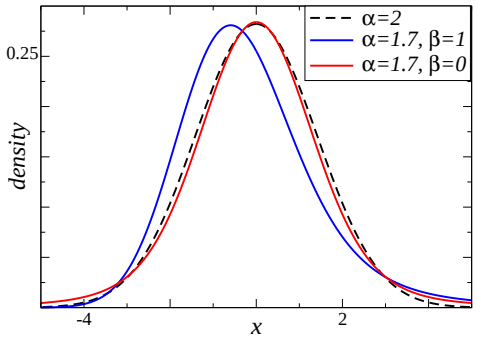
- pour ce modèle, pas Markovien
- $\langle e^{ik\Delta x} \rangle$ (Δx déplacement d'1 molécule d'eau pendant Δt) a 1 expression explicite en fonction de k, Δt, K, ω, v, D.
- d'autres modèles avec d'autres suites aléatoires M_n et W_n sont possibles

- autres modèles fondés sur changement de temps aléatoire, avec des immobilités pouvant ne pas avoir de moyenne finie

4. + de grands déplacements?

- lois stables + générales que loi normale
- aussi associées à des edp
- fonctions caractéristiques très simples

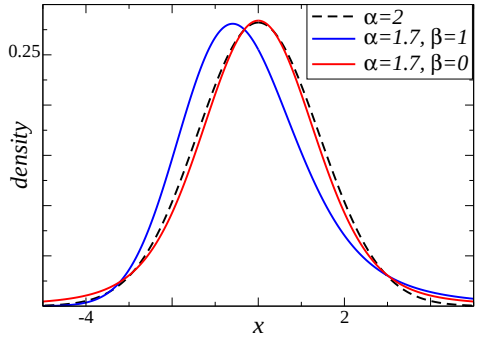
4.1. V.A. stables non gaussiennes



- déf: la V.A. X est stable, index stabilité $\alpha \in]0,2]$, si sa fonction caractéristique $\langle e^{ikX} \rangle =$ $e^{-\sigma^\alpha |k|^\alpha (1 - i\beta sign(k) \tan \frac{\pi\alpha}{2}) + ik\mu}$ si $\alpha \neq 1$, $e^{-\sigma|k|(1 + isign(k)\frac{2}{\pi} Ln(|t|) + ik\mu}$ si $\alpha = 1$

- paramètres: index stabilité α, paramètre dissymétrie $\beta \in [-1,1]$, échelle $\sigma \in R_+$ position $\mu \in R$
- loi normale = cas particulier, $\alpha = 2$

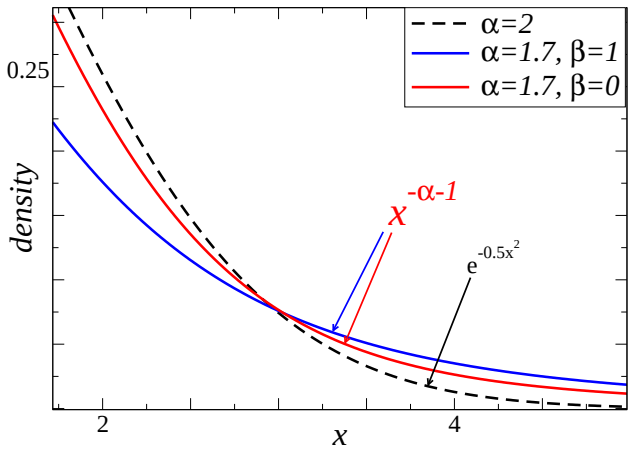
4.1. V.A. stables non gaussiennes



- V.A. X stable , index stabilité $\alpha \in]0,2]$ et param. dissymétrie β, fonction caractéristique $\langle e^{ikX} \rangle = e^{-\sigma^\alpha |k|^\alpha (1 - i\beta sign(k) \tan \frac{\pi\alpha}{2}) + ik\mu}$ si $\alpha \neq 1$,
- Si X_1 et X_2 V.A. ind distribuées comme X , $X_1 + X_2 - 2\mu$ est distribuée comme $2^{1/\alpha}(X - \mu)$

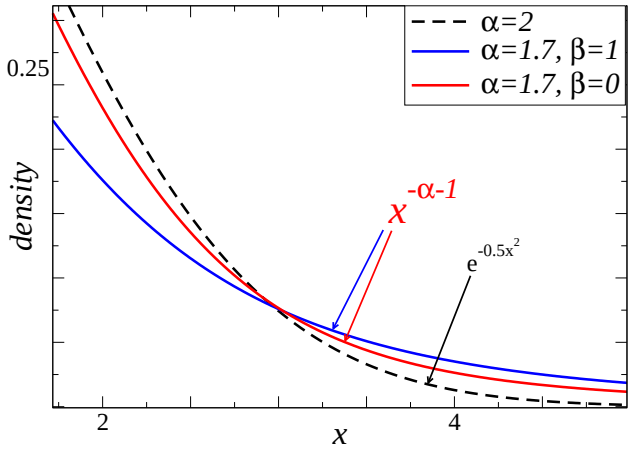
- $\Rightarrow$ Si $X_1 ... X_n$ ind, distribuées comme X: $X_1 + .. + X_n - n\mu \stackrel{d}{=} (X - \mu))n^{1/\alpha}$,
- des petites aux gdes échelles

4.2. Evenements extrêmes



- X V.A. stable , index stabilité α, paramètre échelle σ
- p.d.f: $f(x) \sim Cq|x|^{-\alpha-1}$ qd $x \to -\infty$, $f(x) \sim Cp|x|^{-\alpha-1}$ qd $x \to +\infty$
- $p + q = 1$, $p - q = \beta$

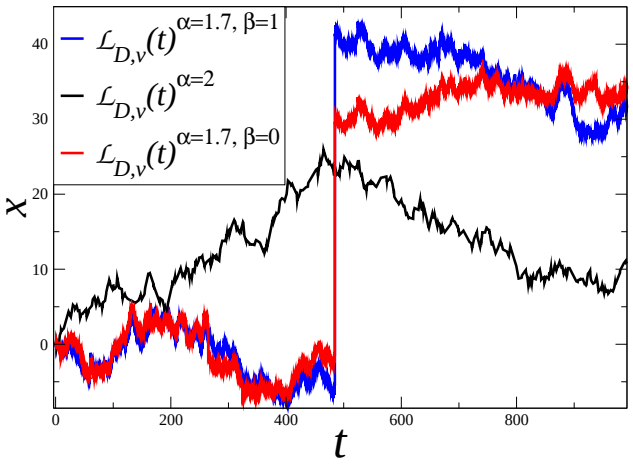
4.3. Attracteur



- X V.A. stable , index stabilité $\alpha \in]0,2[$, p.d.f $f(x)$ $\sim Cq|x|^{-\alpha-1}$ qd $x \to -\infty$, $f(x)$ $\sim Cp|x|^{-\alpha-1}$ qd $x \to +\infty$
- X attracteur pour les V.A. de même comportement asymptotique
- Y ayant le comportement asymptotique de X

- Si $Y_1 ... Y_n$ ind,distribuées comme Y: la distribution de $n^{-1/\alpha}(Y_1 + .. + Y_n - n\mu)$ ressemble à celle de $X - \mu$ qd $n \to \infty$

4.4. Processus stables, vols de Lévy



- X V.A. stable , index stabilité $\alpha \in]0,2[$, paramètre dissymétrie β, les X_n copies indépendantes
- $\sum_n \tau^{1/\alpha} X_n + vn\tau$: approx d'1 process stable
- trajectoires continues à droite avec limite à gauche
- process Markovien

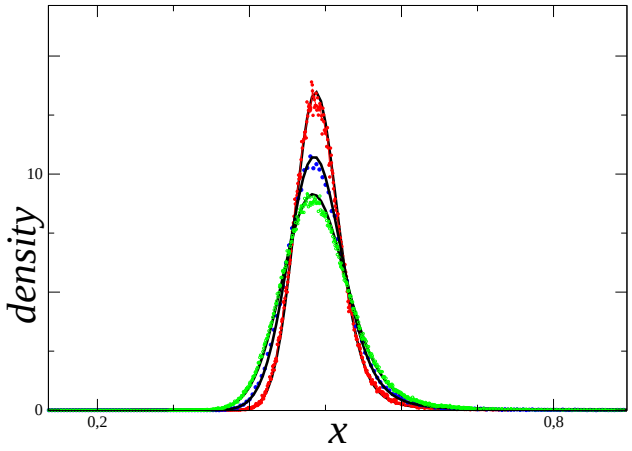
- valeur instant t: $\mathcal{L}^{\alpha,\beta}_{\sigma,v}(t)$ distribuée comme $t^{1/\alpha} X_n + vt$
- fonction caractéristique $e^{-\sigma^\alpha t|k|^\alpha(1-i\beta sign(k)\tan\frac{\pi\alpha}{2})+ikvt}$, $\alpha \neq 1$

4.4. Processus stables, vols de Lévy

Strange behaviour – albatrosses fly by the rules of anomalous diffusion

- $\mathcal{L}_{\sigma,v}^{\alpha,\beta}$
- recherche de ressource chez animaux (PNAS 2012, vol. 109(19)7169) comportement optimal?? (PNAS 2014, vol. 111(8) 2931)

4.5. edp associées aux processus stables



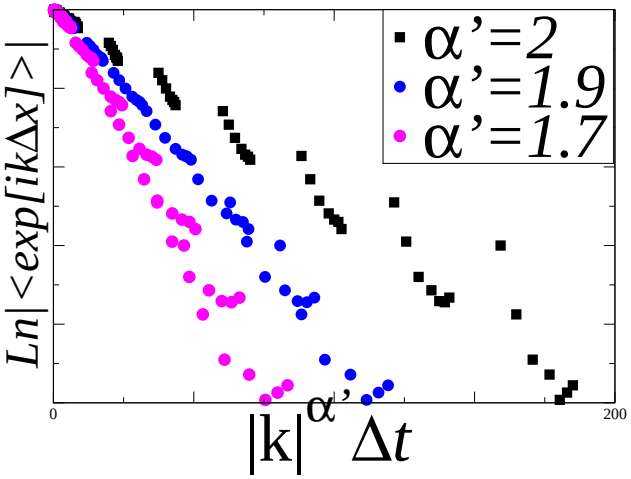
- valeur instant t: distribuée comme $t^{1/\alpha}X_n + vt$
- densité de proba $u(x,t)$ vérifie $\partial_t u(x,t) = -\partial_x(vu) - \frac{\sigma^\alpha}{2\cos\frac{\pi\alpha}{2}}[(1+\beta)D_+^\alpha + (1-\beta)D_-^\alpha)u]$

- $D_\pm^\alpha$ dérivée d'ordre α
- $D_+^\alpha u(x,t) = \partial_{x^2}^2 \int_{-\infty}^{x} \frac{f(y)}{(x-y)^{\alpha-1}} dy$ et $D_-^\alpha u(x,t) = \partial_{x^2}^2 \int_{x}^{+\infty} \frac{f(y)}{(y-x)^{\alpha-1}} dy$

5. Vols de Lévy + changement de temps aléatoire

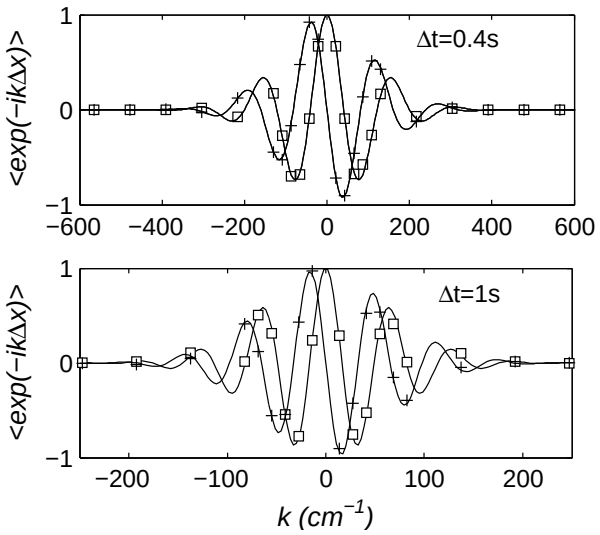
- c'est 1 possibilité, comme dans le cas du MB
- avec le changement de temps du MIM ou avec d'autres changements de temps
- non Markovien
- fonctions caractéristiques accessibles

5.1. Pourquoi vols de Lévy + changement de temps MIM?



- écoulement d'eau en milieu poreux (grains SiC)
- RMN mesure $\langle e^{ik\Delta x}\rangle$, Δx déplacements des molécules d'eau pendant durée Δt, 40 valeurs de k, de 5 à 10 valeurs de Δt
- Si $x(t)$ distribué comme MB: $Ln|\langle e^{ik\Delta x}\rangle|$ fonction de $k^2\Delta t$
- Si $x(t)$ distribué comme $\mathcal{L}^{\alpha,\beta}_{\sigma,v}(t)$: $Ln|\langle e^{ik\Delta x}\rangle| = F(k^\alpha \Delta t)$

5.2. Signal RMN si vols de Lévy + changement de temps MI



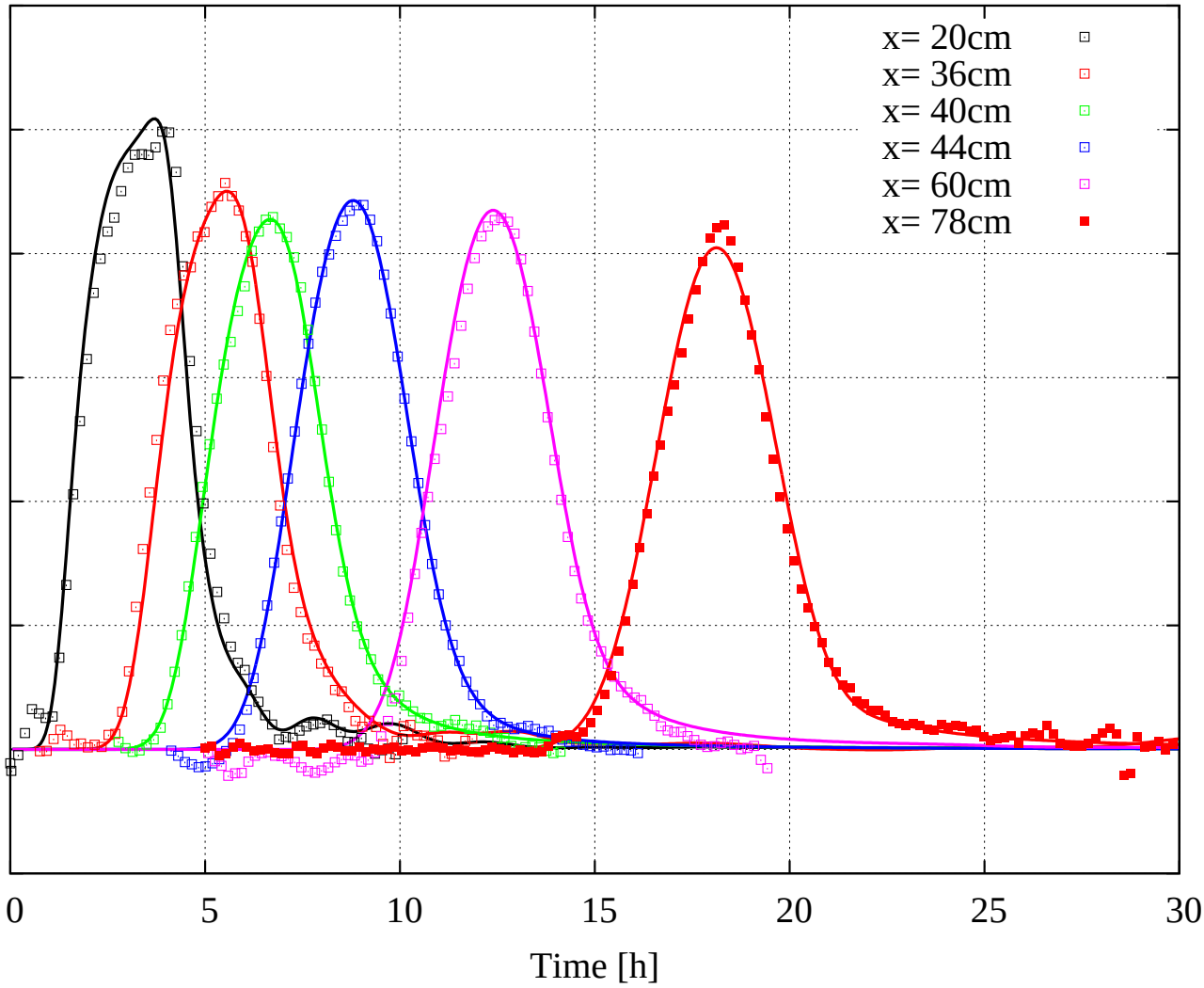
- le MIM: succession étapes mobiles M_n et immobiles W_n, distrib. expo. moyennes $1/(K\omega)$ et $1/\omega$
- temps mobile $Z(t)$
- Si $x(t)$ distribué comme $\mathcal{L}_{\sigma,v}^{\alpha,\beta}(Z(t))$: $\langle e^{ik\Delta x}\rangle = f(\omega, K, \alpha, \beta, D, v, \Delta t)$ explicitement connue
- moindres carrés $\rightarrow$ détermine les $\omega, K, \alpha, \beta, D, v$ les mieux adaptés aux signaux recueillis pour 1 ensemble de Δt

5.3. Autres changements de temps

- étapes mobiles M_n identiques, étapes immobiles W_n distrib. lois stables > 0, $\sim t^{-\gamma-1}$ grands t, $\beta = 1$ et $0 < \gamma < 1$
- CTRW, ou vol de Lévy subordonné par subordinateur stable
- densité: edp avec encore + de convolutions,temporelles cette fois

- expérience traçage sable insaturé

5.3. Autres changements de temps



5.3. CTRW subordinateur stable

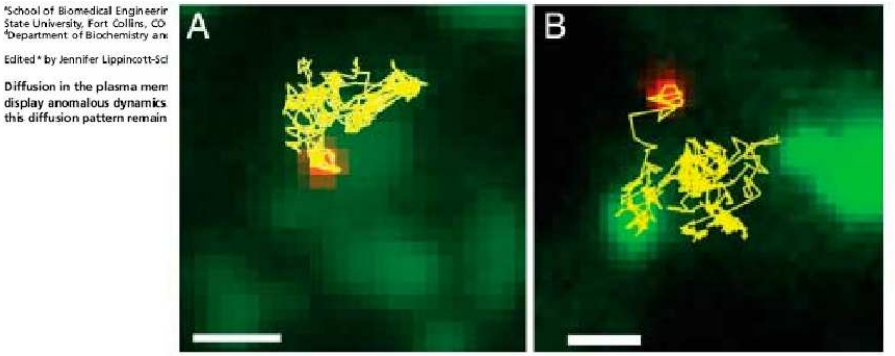


Fig. 1. Overlay image of GFP-tagged Kv2.1 clusters and individual QDs. Kv2.1 clusters are shown in green and QD-tagged channels in red. The trajectories of (*A*) a clustered and (*B*) a nonclustered (free) Kv2.1 channels are shown. Interestingly, the nonclustered channel ignores the compartment perimeters and the channel travels freely into and out of a cluster. Scale bars: 1 μm.

- étapes mobiles M_n identiques, étapes immobiles W_n distrib. lois stables > 0, $\sim t^{-\gamma-1}$ grands t, $\beta = 1$ et $0 < \gamma < 1$
- CTRW, ou vol de Lévy subordonné par subordinateur stable
- suivi de molécules individuelles dans membrane cellule, méthode p variation

Conclusion

- nombreux phénomènes transport
- concentration traceur vérifie edp
- concentration traceur= p.d.f. d'1 processus stochastique
- certaines grandeurs sont représentées par l'edp, d'autres par le processus
- 2 versions d'1 même modèle
- combiner les 2 pour savoir si le modèle est bon
- certains phénomènes échappent