

## Chapitre 2

# Illustration

Nous utilisons ici l'exemple de la marche aléatoire de diffusion bidimensionnelle pour aborder une première fois, sans exigence d'exhaustivité, quelques-uns des concepts essentiels de la physique statistique du transport linéaire. L'objectif est avant tout de développer un ensemble d'images physiques qui pourront servir de fondement intuitif pour la suite de la lecture. Dans cet esprit, et de façon à éviter d'éventuelles réductions liées à une connaissance préalable de la physique des milieux continus (avec laquelle les liens seront faits ultérieurement), nous organisons la présentation autour d'un modèle issu de la biologie comportementale. Il s'agit de la représentation du déplacement d'insectes sur une surface plane lisse, en l'absence de marquage ou de repère géométrique, par exemple du déplacement de fourmis sur une surface horizontale préparée pour des expériences de laboratoire (surface nétoyée d'éventuelles traces chimiques, éloignée de tout repère visuel, etc, voir Fig. 2.1). Ce modèle sera ensuite étendu à la représentation d'actes d'agrégation ou de construction, de façon à introduire les concepts de source et de disparition que nous reprendrons lors de l'étude des réactions chimiques, ainsi que lorsque nous aborderons la modélisation des phénomènes d'émission et d'absorption dans le domaine du transfert radiatif.

**Enoncé du modèle de déplacement** A chaque instant  $t$ , chaque fourmi est repérée à l'aide d'une position  $\vec{r}(t)$  et on admet qu'elle se déplace en ligne droite, à module de vitesse  $c$  constant, jusqu'à un changement de direction supposé quasi-punctuel et quasi-instantané. La trajectoire est donc une succession de segments de droites et on note  $\theta(t)$  l'angle entre le vecteur direction  $\vec{\omega}(t)$  à l'instant  $t$  et un vecteur fixe, ici le vecteur  $\vec{e}_1$  d'un repère cartésien  $(0, \vec{e}_1, \vec{e}_2)$  attaché à la surface (voir Fig. 2.2). Pour simplifier, on admettra que lors de chaque changement de direction la fourmi choisit aléatoirement une nouvelle direction de façon isotrope (elle choisit aléatoirement un nouvel angle  $\theta$  selon une distribution uniforme entre 0 et  $2\pi$ ). Les observations indiquent pourtant que les changements de direction ne sont pas isotropes : ils sont fortement orientés vers l'avant (voir Fig. 2.3). Mais nous verrons ultérieurement que cette simplification est pourtant souvent très pertinente et qu'elle ne nous prive d'aucune des caractéristiques essentielles de la marche aléatoire de diffusion. Ce que l'on appelle *diffusion* dans un tel contexte est précisément cet acte de changement de direction quasi-punctuel et quasi-instantané.

Pour compléter le modèle comportemental, il suffit de proposer une description des *libres parcours*, c'est à dire des longueurs des trajectoires en ligne droite entre deux diffusions successives. On

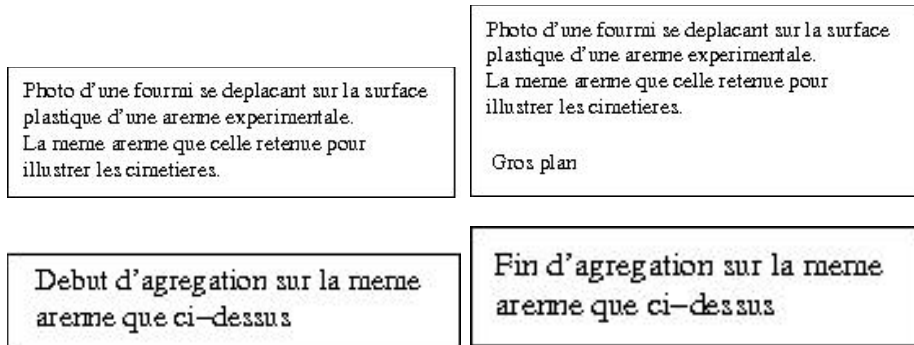


FIG. 2.1 – (a) Caractérisation expérimentale du déplacement de fourmis sur une surface plane nétoyée de tout marquage chimique, en l’absence de repère visuel. (b) Le même dispositif a ensuite été utilisé pour la caractérisation de l’agrégation de cadavres conduisant les fourmis à réaliser des cimetières dont l’organisation spatiale rappelle les phénomènes de morphogénèse auto-organisée résultant de certaines réactions chimiques en milieu diffusif.

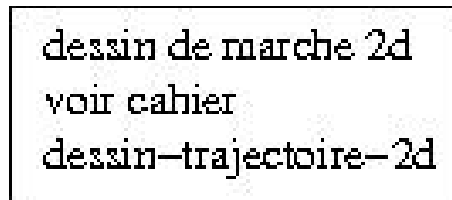


FIG. 2.2 – Marche aléatoire de diffusion bidimensionnelle sur une surface plane. Chaque changement de direction quasi-ponctuel et quasi-instantané est appelé une *diffusion*. La densité de probabilité des angles  $\alpha$  correspondants aux rotations effectuées à chaque changement de direction est appelée *fonction de phase de diffusion simple*. La distance parcourue en ligne droite entre deux diffusions successives est appelée *libre parcours*. L’hypothèse d’absence de mémoire implique que la densité de probabilité des libres parcours est exponentielle.

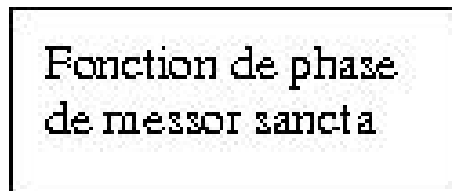


FIG. 2.3 – Fonction de phase de diffusion simple pour une fourmi de l’espèce *Messor Sancta* se déplaçant sur une surface plane. La longueur du rayon vecteur est proportionnelle à la densité de probabilité de l’angle entre les directions avant et après diffusion.

fera pour cela une hypothèse simple, largement confortée par l'expérience : la fourmi sera supposée ne pas faire appel à ses capacités de mémorisation lors du choix de sa trajectoire. Il est essentiel de retenir que cet énoncé ("absence de mémoire", ou "absence d'utilisation de la mémoire", ou "hypothèse de décorrélation temporelle") suffit à définir un modèle comportemental. Aucun ingrédient supplémentaire n'est nécessaire : nous allons montrer en effet que l'absence de mémoire, lorsqu'elle est associée à l'hypothèse de diffusion quasi-ponctuelle et quasi-instantannée, en l'absence de repère géométrique, implique rigoureusement que la distribution statistique des libres parcours est exponentielle. Nous retrouverons cet énoncé et ses conséquences aux fondements de l'équation de Boltzmann.

**Traduction statistique de l'absence de mémoire** Une traduction formelle de l'hypothèse d'absence de mémoire peut être obtenue de la façon suivante : Considérons une fourmi qui vient de changer de direction à un instant  $t_0$  et notons  $P_T(t)$  la probabilité qu'entre l'instant  $t_0$  et un instant  $t > t_0$  la fourmi n'ait pas de nouveau changé de direction. L'absence d'utilisation de la mémoire conduit à la propriété suivante : pour tout  $t_1 \in \mathbb{R}^+$  et tout  $t_2 \in \mathbb{R}^+$ ,

$$P_T(t_1 + t_2) = P_T(t_1)P_T(t_2) \quad (2.1)$$

En effet, si on note  $A$  l'événement "la fourmi n'a pas changé de direction entre  $t_0$  et  $t_1$ " et  $B$  l'événement "la fourmi n'a pas changé de direction entre  $t_1$  et  $t_1 + t_2$ " alors  $P_T(t_1 + t_2)$  est par définition la probabilité que  $A$  et  $B$  soient vrais, ce qui donne (avec les notations usuelles de la théorie des probabilités)

$$P_T(t_1 + t_2) = \text{Proba}(A \cap B) = \text{Proba}(A)\text{Proba}(B|A) \quad (2.2)$$

où  $\text{Proba}(B|A)$  est la probabilité conditionnelle que  $B$  soit vrai sachant que  $A$  est vrai. Mais l'absence de mémoire nous permet d'affirmer que le comportement de la fourmi entre  $t_1$  et  $t_1 + t_2$  est indépendant de son comportement précédent, c'est à dire que  $B$  est indépendant de  $A$ . On en conclut

$$\text{Proba}(B|A) = \text{Proba}(B) \quad (2.3)$$

L'absence de repère géométrique nous permet également d'affirmer que la probabilité que la fourmi ne change pas de direction entre  $t_1$  et  $t_1 + t_2$  est indépendante du lieu où elle se trouve à  $t_1$  et donc qu'elle est indépendante de  $t_1$  ; elle ne dépend que de la durée de l'intervalle de temps, c'est à dire de  $t_2$ . On peut alors prendre  $t_1 = t_0$  pour écrire  $\text{Proba}(B) = P_T(t_2)$ . De plus, par définition  $\text{Proba}(A) = P_T(t_1)$ . Les Eqs. 2.2 et 2.3 conduisent donc bien à l'Eq. 2.1.

Pour être compatible avec l'Eq. 2.1 quelque soient  $t_1$  et  $t_2$ , la fonction  $P_T$  doit être de forme exponentielle et comme  $P_T$  doit être décroissante, de par sa définition, nous en concluons qu'il existe  $\alpha \in \mathbb{R}^-$  tel que  $P_T(t) = \exp(\alpha t)$ . Nous introduisons alors  $\tau = -\frac{1}{\alpha}$ , positif, et nous retenons

$$P_T(t) = \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right) \quad (2.4)$$

Comme la fourmi se déplace à module de vitesse constant, nous pouvons traduire ce résultat en termes géométrique en introduisant la probabilité  $P_D(d)$  que la fourmi parcourt au moins une distance  $d$  sans changer de direction. Cette nouvelle probabilité est égale à  $P_T(t)$  pour  $d = vt$  ce qui conduit à

$$P_D(d) = \exp\left(-\frac{d}{\lambda}\right) \quad (2.5)$$

Courbe de survie de diffusion  
pour *Messor Sancta*  
et Idem en log

FIG. 2.4 – Courbe de survie correspondant à la distribution des libres parcours de diffusion pour la fourmi *Messor Sancta* dans son déplacement sur une surface plane. (a) Nombre de fourmis  $N(d)$ , sur les  $N_0 = 1000$  fourmis suivies, qui n’ont pas encore changé de direction après s’être déplacé d’une distance  $d$  depuis l’origine du suivi. (b) Idem en échelle logarithmique.

avec  $\lambda = c\tau$ . Nous verrons ultérieurement que  $\lambda$  est la valeur moyenne des distances parcourues par la fourmi entre deux changements de direction successifs :  $\lambda$  est le *libre parcours moyen*. Pour  $\tau$  on parle également de *libre temps moyen*, mais on introduit plus communément  $\nu = \frac{1}{\tau}$  pour parler de *fréquence de diffusion*. Le rapport  $k = \frac{1}{\lambda}$  est également régulièrement introduit et est appelé *coefficient d’extinction*, où dans notre cas *coefficient d’extinction par diffusion*, voire plus brièvement *coefficient de diffusion* (ce qui posera quelques difficultés lorsque l’on utilisera le modèle de la diffusion macroscopique qui fait apparaître un paramètre également appelé *coefficient de diffusion* et avec une signification très différente, voir le { } ”Enoncé du modèle de la diffusion macroscopique” ci-dessous).

**Images associées à l’atténuation exponentielle** On référence communément l’Eq. 2.5 comme la *loi d’atténuation de Beehr*. On peut y associer l’image suivante : Si on considère un grand nombre  $N_0$  de fourmis se déplaçant dans une direction donnée à l’instant  $t_0$ , alors le nombre de ces fourmis qui, ayant parcouru une distance  $d$ , n’ont pas encore changé de direction est approximativement

$$N(d) \approx N_0 \exp\left(-\frac{d}{\lambda}\right) \quad (2.6)$$

Si on imagine que les  $N_0$  fourmis sont parties d’un même point dans une même direction alors on interprète  $\exp\left(-\frac{d}{\lambda}\right)$  comme l’atténuation du “faisceau” de fourmis. Cette image sera bien sûr plus proche d’expériences effectives lorsqu’il sera question par exemple de l’atténuation d’un faisceau de photons dans un milieu diffusant (on peut penser à l’atténuation de la lumière d’un phare de voiture par un brouillard). Mais d’une part, quelque soit le contexte, cette image restera utile lors des tentatives de compréhension des mécanismes de transfert à des échelles grandes devant le libre parcours moyen, et d’autre part elle correspond assez étroitement à l’intuitif associé aux courbes de survie communément employées lors de l’analyse statistique du comportement en biologie animale. La Fig. 2.4 reproduit un exemple d’une telle courbe de survie, illustrant à quel point l’hypothèse d’absence d’utilisation de la mémoire peut être pertinente lors de la modélisation du déplacement de fourmis, dont les capacités de mémorisation sont par ailleurs clairement mises en évidence dans d’autres comportements. On retrouve des courbes de survie du même type dans de nombreux comportements d’animaux de niveaux cognitifs élevés, ainsi que chez l’homme lors de l’étude des déplacements urbains, des comportements de foule, de l’émergence de réseaux muletiers, etc. Nous prendrons le temps d’illustrer en détail ce qui est l’équivalent de cette absence de mémoire en Physique des particules, notamment lors de la discussion des limites de validité de l’équation de Boltzmann, mais quoiqu’il en soit l’atténuation de Beehr restera une pierre essentielle de l’édifice.

A ce stade, nous disposons d'un modèle complet du déplacement des fourmis sur une surface plane non marquée, sans possibilité de repérage géométrique : chaque fourmi marche en ligne droite, à vitesse constante, sur une distance  $d$  dont le choix résulte d'un comportement statistique sans mémoire compatible avec l'Eq. 2.5 (c'est à dire que  $d$  est généré aléatoirement selon une distribution exponentielle de moyenne  $\lambda$ ), puis au bout de cette distance la fourmi choisit aléatoirement une nouvelle direction de façon isotrope et repart en ligne droite sur une nouvelle distance  $d$ , etc. Les seuls paramètres de ce modèle sont le libre parcours moyen  $\lambda$  et le module de vitesse  $c$ .

**Simulation numérique** Communément, la première étape lors de l'analyse d'un tel modèle de marche aléatoire consiste à mettre en oeuvre le comportement retenu en utilisant des fourmis virtuelles, ne serait-ce que pour comparer les prédictions du modèle aux observables accessibles expérimentalement avec les fourmis réelles. Parfois cette mise en oeuvre peut être effectuée à l'aide de robots que l'on programme de sorte qu'ils suivent les lois statistiques énoncées ci-dessus, mais les solutions de simulation les plus courantes et les plus simples passent par l'utilisation d'un ordinateur. Nous allons décrire ici rapidement un exemple d'algorithme, ainsi que sa mise en oeuvre informatique. Le code de calcul complet est donné dans l'Annexe A. Imaginons que nous étudions le déplacement d'une fourmi sur un plan (aucune limite au déplacement). A l'instant  $t_0$  la fourmi est au point  $\vec{O}$  et se déplace dans la direction  $om\vec{e}ga_0 = \vec{e}_1$  (i.e.  $\theta_0 = 0$ ). On se donne un temps d'observation  $t_{obs} > t_0$  et un rayon  $a$  et on cherche à déterminer la probabilité qu'à l'instant  $t_{obs}$  la fourmi soit à l'extérieur du cercle de rayon  $a$  autour de  $\vec{O}$ . On notera cette probabilité  $P_R(a; t_{obs})$ , où l'indice  $R$  signifie la variable aléatoire correspondant à la valeur du module du vecteur position  $\vec{r}(t_{obs})$ . Pour déterminer cette probabilité nous allons suivre un nombre  $N$  de fourmis virtuelles dans des marches aléatoires indépendantes depuis  $t_0$  jusqu'à  $t_{obs}$  et compter le nombre de celles vérifiant  $\|\vec{r}(t_{obs})\| > a$  à l'instant d'observation. En notant ce nombre  $N_{obs}$ , la probabilité recherchée peut être estimée comme

$$P_R(a; t_{obs}) \approx \frac{N_{obs}}{N} \quad (2.7)$$

avec une incertitude statistique  $\sigma_N$  évaluée de la façon suivante :

$$\sigma_N \approx \frac{1}{\sqrt{N}} \sqrt{\frac{N_{obs}}{N} - \left(\frac{N_{obs}}{N}\right)^2} \quad (2.8)$$

Les fondements statistiques de ces estimations seront discutées ultérieurement, mais nous pouvons simplement retenir, à ce stade, que l'estimation de  $P_R(a; t_{obs})$  est effectuée, à partir des trajectoires des fourmis virtuelles, de la même façon que nous l'estimerions expérimentalement, à partir du suivi de trajectoires réelles. La simulation numérique n'a donc de spécifique que la façon avec laquelle le modèle de déplacement est mis en oeuvre, c'est à dire la façon avec laquelle sont générés aléatoirement les libres parcours et les directions de diffusion. Les directions de diffusion étant distribuées de façon isotrope, on peut procéder simplement de la façon suivante :

- générer un nombre  $z$  aléatoirement de façon uniforme sur l'intervalle  $[0, 1]$  (on admet qu'un tel générateur est disponible dans l'environnement de programmation retenu et que ses qualités statistiques sont satisfaisantes) ;
- calculer l'angle après diffusion comme  $\theta = 2\pi z$ .

Les libres parcours sont distribués exponentiellement sur  $[0, +\infty[$  avec une moyenne  $\lambda$  et la façon la plus courante de les générer aléatoirement consiste à

Simulation numérique du  
déplacement de *Messor Sancta*  
et mise en évidence de  
la limite de la diffusion  
ainsi que de la limite balistique

FIG. 2.5 – Simulation numérique de la marche aléatoire de diffusion utilisée pour la modélisation du déplacement de la fourmi *Messor Sancta*. ??? On présente les cumulées à 4 temps différents en superposant la gaussienne de l’approximation de diffusion ??? On compare à l’expérience.

- générer un nombre  $z$  aléatoirement de façon uniforme sur l’intervall  $[0, 1]$  ;
- calculer le libre parcours comme  $d = -\lambda \log(1 - z)$ .

L’algorithme correspondant est résumé dans l’annexe A. Un exemple de mise en oeuvre (de programmation) est proposé dans le même annexe et quelques résultats de simulation numérique sont présentés dans la figure 2.5.

**Comportement diffusif aux grands temps** Au delà de la capacité du modèle à reproduire les observations expérimentales, les résultats de simulation reportés dans la Fig. 2.5 suggèrent que pour  $t_{obs} - t_0 \gg \frac{\lambda}{c}$  la distribution spatiale des fourmis est gaussienne, de centre  $\vec{r}_c = \vec{O}$  et d’écart type  $\sigma(t_{obs}) = \sqrt{2c\lambda(t_{obs} - t_0)}$ . Cette propriété correspond à ce qui est communément appelé *approximation de diffusion* dans la littérature de physique statistique. On retiendra que les *marches aléatoires de diffusion* sont en accord avec *l’approximation de diffusion* lorsque l’on se place aux *grands temps*, en *champ infini*. Nous allons démontrer ce résultat essentiel dans le cas particulier de notre exemple bidimensionnel.

**Fonction de distribution, densité et flux** Pour cela, notons  $f(\vec{r}, \theta, t)$  la densité de probabilité que la fourmi suivie soit à la position  $\vec{r}$  et se déplace selon l’angle  $\theta$  à l’instant  $t$ . Ainsi  $f(\vec{r}, \theta, t)d\vec{r}d\theta$  est la probabilité qu’à l’instant  $t$  la fourmi soit située dans sur la surface élémentaire  $d\vec{r}$  autour de  $\vec{r}$  avec un angle dans  $d\theta$  autour de  $\theta$  (voir Fig. 2.6). La fonction  $f$  est communément appelée *fonction de distribution*. Notons ensuite  $\eta(\vec{r}, t)$  la densité de probabilité que la fourmi suivie soit à la position  $\vec{r}$  à  $t$ , indépendamment de sa direction de déplacement.  $\eta(\vec{r}, t)d\vec{r}$  est donc la probabilité qu’à  $t$  la fourmi soit dans  $d\vec{r}$  autour de  $\vec{r}$ , quelque soit  $\theta$ , ce qui conduit à

$$\eta(\vec{r}, t)d\vec{r} = \int_0^{2\pi} f(\vec{r}, \theta, t)d\vec{r}d\theta \quad (2.9)$$

et donc

$$\eta(\vec{r}, t) = \int_0^{2\pi} f(\vec{r}, \theta, t)d\theta \quad (2.10)$$

On note enfin

$$\vec{j}(\vec{r}, t) = \int_0^{2\pi} f(\vec{r}, \theta, t)c\vec{\omega}(\theta)d\theta \quad (2.11)$$

où  $\vec{\omega}(\theta)$  est le vecteur unitaire dans la direction définie par l’angle  $\theta$  ( $c\vec{\omega}(\theta)$  est donc le vecteur vitesse de la fourmi). Pour donner un sens à ce vecteur  $\vec{j}(\vec{r}, t)$ , considérons une partie  $\Omega$  de la surface.  $\Omega$  est délimité par une frontière linéique fixe  $\partial\Omega$  (voir Fig. 2.7). On peut alors interpréter

dessin donnant dr dtheta  
et ri theta i  
Faire apparaitre ce qui est  
dans le caption

FIG. 2.6 – D'un point de vue statistique, l'événement considéré (indiqué  $i$ ) est une trajectoire de déplacement conduisant, à l'instant  $t$ , la fourmi à la position  $\vec{r}_i(t)$ , dans la direction  $\vec{\omega}_i(t)$  (correspondant à l'angle  $\theta_i(t)$ ).  $f(\vec{r}, \theta, t)d\vec{r}d\theta$  est la probabilité que  $\vec{r}_i(t) \in d\vec{r}$  et  $\theta_i(t) \in d\theta$ . Le vecteur  $\vec{r}$  définit une position sur la surface et  $d\vec{r}$  est une surface élémentaire autour de cette position. Le vecteur  $\vec{\omega}(\theta)$  est un vecteur unitaire correspondant à la direction définie par l'angle  $\theta$  et  $d\theta$  est un angle élémentaire autour de cette direction.

dessiner Omega et sa frontiere  
Faire apparaitre de trapeze  
pour expliquer le flux

FIG. 2.7 –  $\Omega$  est une partie de la surface qui est délimitée par une frontière linéique fixe  $\partial\Omega$ . ???  
faire apparaitre le trapèze qui explique le flux ???

$\vec{j}$  comme un flux net de probabilité de présence en montrant que la probabilité  $\mathcal{P}_\Omega(t)$  que la fourmi soit dans  $\Omega$  à  $t$  vérifie la propriété suivante : pour deux instants  $t_1$  et  $t_2 > t_1$ ,

$$\mathcal{P}_\Omega(t_2) - \mathcal{P}_\Omega(t_1) = \int_{t_1}^{t_2} dt \int_{\partial\Omega} d\vec{r} \vec{j}(\vec{r}, t) \cdot \vec{n}(\vec{r}) \quad (2.12)$$

où  $\vec{r}$  est ici un point courant sur la frontière  $\partial\Omega$  ( $d\vec{r}$  est donc une différentielle de longueur le long de la frontière) et  $\vec{n}(\vec{r})$  est le vecteur unitaire normal à  $\partial\Omega$  en  $\vec{r}$ , sortant de  $\Omega$ . En effet  $d\vec{r}cdt|\vec{\omega}(\theta) \cdot \vec{n}(\vec{r})|$  est la surface correspondant à l'ensemble des positions que peut occuper la fourmi à l'instant  $t$  si elle traverse l'élément de frontière  $d\vec{r}$  avec l'angle  $\theta$  entre  $t$  et  $t + dt$ . De par la définition de  $f$ ,  $f(\vec{r}, \theta, t)d\vec{r}cdt|\vec{\omega}(\theta) \cdot \vec{n}(\vec{r})|d\theta$  est la probabilité que la fourmi soit dans cet élément de surface à l'instant  $t$  avec un angle dans  $d\theta$ ; il s'agit donc de la probabilité que la fourmi traverse  $d\vec{r}$  pendant  $dt$  avec un angle dans  $d\theta$ . C'est une augmentation de la probabilité d'être dans  $\Omega$  pour les directions entrantes et une diminution pour les directions sortantes. En enlevant la valeur absolue du produit scalaire on obtient une grandeur signée qui permet d'écrire (en sommant sur tous les instants, sur tous les points de la frontière et sur tous les angles)

$$\mathcal{P}_\Omega(t_2) - \mathcal{P}_\Omega(t_1) = \int_{t_1}^{t_2} dt \int_{\partial\Omega} d\vec{r} \int_0^{2\pi} d\theta f(\vec{r}, \theta, t)c\vec{\omega}(\theta) \cdot \vec{n}(\vec{r}) \quad (2.13)$$

ce qui est bien compatible avec les équations 2.11 et 2.12. On retient donc que  $f$  est une densité de probabilité de présence pour une direction donnée,  $\eta$  une densité de probabilité de présence indépendamment de la direction de déplacement, et  $\vec{j}$  un flux net de probabilité de présence résultant de toutes les directions de déplacement.

**Enoncé du modèle de la diffusion macroscopique** Avec ces notations, le fait qu'aux grands temps la distribution spatiale des fourmis soit gaussienne, de centre  $\vec{r}_c = \vec{O}$  et d'écart type  $\sigma(t) = \sqrt{2c\lambda(t-t_0)}$  revient à écrire

$$\eta(\vec{r}, t) \approx \frac{1}{\pi\sigma(t)^2} \exp\left(-\frac{\vec{r}^2}{\sigma(t)^2}\right) \quad (2.14)$$

et pour établir ce résultat il suffit de montrer que

$$\frac{\partial\eta}{\partial t} = -\text{div}(\vec{j}) \quad (2.15)$$

avec, pour  $t \gg \frac{\lambda}{c}$ ,

$$\vec{j} \approx -\frac{c\lambda}{2} \text{grad}(\eta) \quad (2.16)$$

En effet cela conduit à  $\frac{\partial\eta}{\partial t} \approx \frac{c\lambda}{2} \left( \frac{\partial^2\eta}{\partial r_1^2} + \frac{\partial^2\eta}{\partial r_2^2} \right)$  et il est facile de vérifier que l'équation 2.14 est solution de cette équation différentielle, avec comme condition initiale que la fourmi est de façon certaine en  $\vec{O}$  dans la direction  $\vec{\omega}_0 = \vec{e}_1$  à  $t_0$  et comme condition à la limite du domaine  $\lim_{|\vec{r}| \rightarrow +\infty} \eta(\vec{r}, t) = 0$ , ce qui correspond bien au cas du déplacement sur une surface d'extension infinie<sup>1</sup>. Nous allons donc nous attacher à établir l'équation 2.15 et l'équation 2.16.

*A faire : Introduire le coefficient de diffusion macro  $D = c\lambda/2$ .*

**Démonstration de l'équation de continuité** Pour démontrer l'équation 2.15 (souvent appelée *équation de continuité*) nous n'avons besoin d'aucun développement supplémentaire. Il suffit d'observer que par définition  $\mathcal{P}_\Omega(t) = \int_\Omega \eta(\vec{r}, t) d\vec{r}$  et de dériver cette équation par rapport à  $t$ , puis d'utiliser l'équation 2.12 pour exprimer la dérivée temporelle de  $\mathcal{P}_\Omega$  :  $\frac{\partial\mathcal{P}_\Omega}{\partial t} = \int_{\partial\Omega} \vec{j}(\vec{r}, t) \cdot \vec{n}(\vec{r}) d\vec{r}$ . On obtient ainsi l'équation intégrale suivante :

$$\int_{\partial\Omega} \vec{j} \cdot \vec{n} d\vec{r} = \int_\Omega \frac{\partial\eta}{\partial t} d\vec{r} \quad (2.17)$$

et l'application du théorème de Gauss conduit à

$$\int_\Omega -\text{div}(\vec{j}) d\vec{r} = \int_\Omega \frac{\partial\eta}{\partial t} d\vec{r} \quad (2.18)$$

Cette dernière équation étant vraie quelque soit  $\Omega$ , on en déduit la contrainte locale

$$-\text{div}(\vec{j}) = \frac{\partial\eta}{\partial t} \quad (2.19)$$

---

<sup>1</sup>L'équation 2.14 s'écrit  $\eta(\vec{r}, t) \approx \frac{1}{\pi\sigma(t)^2} \exp\left(-\frac{r_1^2}{\sigma(t)^2}\right) \exp\left(-\frac{r_2^2}{\sigma(t)^2}\right)$  ce qui conduit à  $\frac{\partial^2\eta}{\partial r_1^2} \approx \frac{2}{\pi\sigma(t)^4} \left( \frac{2r_1^2}{\sigma(t)^2} - 1 \right) \exp\left(-\frac{r_1^2}{\sigma(t)^2}\right) \exp\left(-\frac{r_2^2}{\sigma(t)^2}\right)$ . En procédant de même pour  $\frac{\partial^2\eta}{\partial r_2^2}$  on obtient  $\frac{\partial^2\eta}{\partial r_1^2} + \frac{\partial^2\eta}{\partial r_2^2} \approx \frac{4}{\pi\sigma(t)^4} \left( \frac{r_1^2+r_2^2}{\sigma(t)^2} - 1 \right) \exp\left(-\frac{r_1^2}{\sigma(t)^2}\right) \exp\left(-\frac{r_2^2}{\sigma(t)^2}\right)$ . Par ailleurs, en dérivant cette même expression de  $\eta$  par rapport au temps avec  $\sigma(t) = \sqrt{2c\lambda(t-t_0)}$  on obtient  $\frac{\partial\eta}{\partial t} \approx \frac{2c\lambda}{\pi\sigma(t)^4} \left( \frac{r_1^2+r_2^2}{\sigma(t)^2} - 1 \right) \exp\left(-\frac{r_1^2}{\sigma(t)^2}\right) \exp\left(-\frac{r_2^2}{\sigma(t)^2}\right)$ . Les expressions de  $\frac{\partial^2\eta}{\partial r_1^2} + \frac{\partial^2\eta}{\partial r_2^2}$  et  $\frac{\partial\eta}{\partial t}$  que nous avons ainsi obtenues sont bien compatibles avec l'équation  $\frac{\partial\eta}{\partial t} \approx \frac{c\lambda}{2} \left( \frac{\partial^2\eta}{\partial r_1^2} + \frac{\partial^2\eta}{\partial r_2^2} \right)$  ce qui confirme que l'expression de  $\eta$  de l'équation 2.14 est solution des équations 2.15 et 2.16. La solution générale de forme gaussienne est  $\eta(\vec{r}, t) = \frac{1}{\pi\sigma(t_{obs})^2} \exp\left(-\frac{(\vec{r}-\vec{r}_c)^2}{\sigma(t_{obs})^2}\right)$  où  $\vec{r}_c$  peut être différent de  $\vec{O}$  et  $\sigma(t_{obs}) = \sqrt{2c\lambda(t_{obs}-t_0)+K}$  avec  $K$  constant. La possibilité de prendre  $\vec{r}_c \neq \vec{O}$  et  $K \neq 0$  permet de rendre compte partiellement du comportement ballistique dans les premiers temps. ??? penser à reporter la solution analytique ???



qui correspond bien à l'équation 2.15. Cette équation est exacte. Nous n'avons utilisé ni la limite  $t \gg \frac{\lambda}{c}$  ni aucune des spécificités de notre modèle de déplacement. L'équation de continuité est donc rigoureusement exacte à tout temps et quelque soit le type de déplacement.

**Etablissement de l'équation de Boltzmann** La démonstration de l'équation 2.16 est plus subtile et est directement liée au modèle de la marche aléatoire de diffusion. Elle passe par l'établissement de l'équation d'évolution de la fonction de distribution  $f$ . On peut pour cela définir la probabilité  $\mathcal{P}_{\Omega, \theta_1, \theta_2}(t)$  qu'à l'instant  $t$  la fourmi soit située en un point de la surface  $\Omega$  avec un angle  $\theta$  dans l'intervalle  $[\theta_1, \theta_2]$ . La définition de  $f$  permet d'écrire

$$\mathcal{P}_{\Omega, \theta_1, \theta_2}(t) = \int_{\Omega} d\vec{r} \int_{\theta_1}^{\theta_2} d\theta f(\vec{r}, \theta, t) \quad (2.20)$$

et si  $\Omega$ ,  $\theta_1$  et  $\theta_2$  sont indépendants du temps on peut dériver cette équation par rapport au temps et obtenir

$$\mathcal{P}'_{\Omega, \theta_1, \theta_2}(t) = \int_{\Omega} d\vec{r} \int_{\theta_1}^{\theta_2} d\theta \frac{\partial f}{\partial t} \quad (2.21)$$

Par ailleurs, en procédant comme lors de l'établissement de l'équation 2.13, l'évolution temporelle de  $\mathcal{P}_{\Omega, \theta_1, \theta_2}$  peut être reliée au champs de  $f$  de la façon suivante :

$$\mathcal{P}_{\Omega, \theta_1, \theta_2}(t_2) - \mathcal{P}_{\Omega, \theta_1, \theta_2}(t_1) = \int_{t_1}^{t_2} dt \int_{\partial\Omega} d\vec{r} \int_{\theta_1}^{\theta_2} d\theta f(\vec{r}, \theta, t) c\vec{\omega}(\theta) \cdot \vec{n}(\vec{r}) \quad (2.22)$$

$$- \int_{t_1}^{t_2} dt \int_{\Omega} d\vec{r} \int_{\theta_1}^{\theta_2} d\theta \frac{1}{\tau} f(\vec{r}, \theta, t) \quad (2.23)$$

$$+ \int_{t_1}^{t_2} dt \int_{\Omega} d\vec{r} \frac{1}{\tau} \eta(\vec{r}, t) \frac{\theta_2 - \theta_1}{2\pi} \quad (2.24)$$

Le premier terme du membre de droite est semblable à celui de l'équation 2.13 et traduit le flux net de probabilité de présence à travers la frontière en ne considérant que les fourmis se déplaçant selon un angle  $\theta \in [\theta_1, \theta_2]$ . Le second terme traduit la diminution de  $\mathcal{P}_{\Omega, \theta_1, \theta_2}$  associée au fait que sur un interval de temps  $\delta t$ , selon notre modèle, la probabilité que la fourmi change de direction est  $1 - \exp\left(-\frac{\delta t}{\tau}\right)$ . Un développement de Taylor à l'ordre 1 de l'exponentielle permet de montrer que lorsque  $\frac{\delta t}{\tau}$  est petit devant l'unité, cette probabilité est approximativement égale à  $\frac{\delta t}{\tau}$ . En raisonnant avec les différentielles comme avec de petits interval, on peut donc interpréter  $\frac{dt}{\tau}$  comme la probabilité que la fourmi change de direction pendant  $dt$  et sachant que  $f(\vec{r}, \theta, t) d\vec{r} d\theta$  est la probabilité que la fourmi se trouve dans  $d\vec{r}$  avec un angle dans  $d\theta$  à  $t$ , le produit  $\frac{dt}{\tau} f(\vec{r}, \theta, t) d\vec{r} d\theta$  est la probabilité que la fourmi change de direction dans  $d\vec{r}$ , avec un angle initial dans  $d\theta$ , pendant  $dt$ . En intégrant sur  $[t_1, t_2]$ , sur  $\Omega$  et sur  $[\theta_1, \theta_2]$  on établit donc qu'au signe près le second terme du membre de droite de l'équation 2.24 correspond à la probabilité que la fourmi soit dans  $\Omega$  avec un angle dans  $[\theta_1, \theta_2]$  et change de direction dans l'intervalle de temps  $[t_1, t_2]^2$ . Le troisième terme du membre de droite s'interprète de façon très similaire :  $\eta(\vec{r}, t) d\vec{r}$  est la probabilité que la fourmi soit dans  $d\vec{r}$  à  $t$  (indépendamment de sa direction de déplacement),  $\frac{dt}{\tau}$  est la probabilité qu'elle change

<sup>2</sup>Il est important de noter que lors du changement de direction la fourmi peut choisir un nouvel angle qui est encore dans l'intervalle  $[\theta_1, \theta_2]$  et que par conséquent la probabilité qu'un tel événement ait lieu ne se traduit pas effectivement par une diminution de  $\mathcal{P}_{\Omega, \theta_1, \theta_2}$ . Cependant dans l'équation 2.24 tous les changements de direction sont comptés comme des contributions négatives car les changements de direction restant dans l'intervalle  $[\theta_1, \theta_2]$  seront également comptés comme des contributions positives dans le troisième terme du membre de droite et que les deux contributions se compenseront rigoureusement.

de direction pendant  $dt$  et  $\frac{\theta_2 - \theta_1}{2\pi}$  est la probabilité que sa nouvelle direction corresponde à un angle dans  $[\theta_1, \theta_2]$  ce qui fait que le produit  $\eta(\vec{r}, t) d\vec{r} \frac{dt}{\tau} \frac{\theta_2 - \theta_1}{2\pi}$  est une contribution positive à l'évolution de  $\mathcal{P}_{\Omega, \theta_1, \theta_2}$  pendant  $dt$ .

A partir de l'équation 2.21 et de l'équation 2.24 (transformée en une dérivée temporelle) on obtient

$$\int_{\Omega} d\vec{r} \int_{\theta_1}^{\theta_2} d\theta \frac{\partial f}{\partial t} = \int_{\partial\Omega} d\vec{r} \int_{\theta_1}^{\theta_2} d\theta f c\vec{\omega} \cdot \vec{n} - \int_{\Omega} d\vec{r} \int_{\theta_1}^{\theta_2} d\theta \frac{1}{\tau} f + \int_{\Omega} d\vec{r} \frac{1}{\tau} \eta \frac{\theta_2 - \theta_1}{2\pi} \quad (2.25)$$

On utilise alors le théorème de Gauss pour transformer le premier terme du membre de droite,

$$\int_{\Omega} d\vec{r} \int_{\theta_1}^{\theta_2} d\theta \frac{\partial f}{\partial t} = - \int_{\Omega} d\vec{r} \operatorname{div} \left( \int_{\theta_1}^{\theta_2} d\theta f c\vec{\omega} \right) - \int_{\Omega} d\vec{r} \int_{\theta_1}^{\theta_2} d\theta \frac{1}{\tau} f + \int_{\Omega} d\vec{r} \frac{1}{\tau} \eta \frac{\theta_2 - \theta_1}{2\pi} \quad (2.26)$$

et comme cette équation intégrale est vraie pour tout  $\Omega$ , elle est vraie localement ce qui conduit à

$$\int_{\theta_1}^{\theta_2} d\theta \frac{\partial f}{\partial t} = - \operatorname{div} \left( \int_{\theta_1}^{\theta_2} d\theta f c\vec{\omega} \right) - \int_{\theta_1}^{\theta_2} d\theta \frac{1}{\tau} f + \frac{1}{\tau} \eta \frac{\theta_2 - \theta_1}{2\pi} \quad (2.27)$$

Enfin on inverse la divergence et l'intégrale angulaire (les variables  $\vec{r}$  et  $\theta$  sont indépendantes), on remplace  $\frac{\theta_2 - \theta_1}{2\pi}$  par  $\int_{\theta_1}^{\theta_2} \frac{1}{2\pi} d\theta$  et on affirme que l'équation doit être vraie pour tout interval  $[\theta_1, \theta_2]$ , donc qu'elle est vraie localement en  $\theta$ . On aboutit ainsi à

$$\frac{\partial f}{\partial t} = - \operatorname{div}(f c\vec{\omega}) - \frac{1}{\tau} \left( f - \frac{\eta}{2\pi} \right) \quad (2.28)$$

Dans ces dernières écritures, les conventions de notation sont  $f \equiv f(\vec{r}, \theta, t)$ ,  $\vec{\omega} \equiv \vec{\omega}(\theta)$  et  $\eta \equiv \eta(\vec{r}, t)$ .

Nous proposerons par la suite des formes différentes de l'équation 2.28 que nous présenterons comme faisant partie de la famille des équations de Boltzmann (au sens le plus large). Notons seulement à ce stade qu'il s'agit d'une équation d'évolution de la fonction de distribution  $f$  et qu'il s'agit d'une équation intégréo-différentielle car la densité de probabilité de présence  $\eta$  est définie à partir de  $f$  comme  $\eta = \int_0^{2\pi} f d\theta$ .

**Etablissement de l'équation de continuité à partir de l'équation de Boltzmann** Nous disposons maintenant d'une équation d'évolution pour  $f$  et notre objectif est de démontrer l'équation 2.16 à la limite des grands temps. Avant d'aborder cette démonstration, nous pouvons prendre le temps de retrouver l'équation de continuité (Eq. 2.15) à partir de l'équation d'évolution de  $f$ . Pour cela, il suffit d'intégrer l'équation 2.28 sur l'ensemble des angles, en notant que l'on peut encore une fois intervertir la divergence et l'intégration sur les angles :

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_0^{2\pi} f d\theta = - \operatorname{div} \left( \int_0^{2\pi} f c\vec{\omega} d\theta \right) - \frac{1}{\tau} \left( \int_0^{2\pi} f d\theta - \eta \right) \quad (2.29)$$

ce qui, étant donné les définitions de  $\eta$  et  $\vec{j}$ , conduit bien à

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} = - \operatorname{div}(\vec{j}) \quad (2.30)$$

**L'équation d'évolution du vecteur flux** Si nous cherchons à procéder de la même manière pour caractériser l'évolution temporelle du vecteur flux, nous pouvons multiplier l'équation 2.28 par  $c\vec{\omega}$  avant d'intégrer sur les angles, ce qui fait bien apparaître la dérivée temporelle du vecteur  $\vec{j}$  :

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_0^{2\pi} f c\vec{\omega} d\theta = - \int_0^{2\pi} \operatorname{div}(f c\vec{\omega}) c\vec{\omega} d\theta - \frac{1}{\tau} \left( \int_0^{2\pi} f c\vec{\omega} d\theta - \frac{\eta}{2\pi} \int_0^{2\pi} c\vec{\omega} d\theta \right) \quad (2.31)$$

soit

$$\frac{\partial \vec{j}}{\partial t} = - \int_0^{2\pi} \text{div}(f c \vec{\omega}) c \vec{\omega} d\theta - \frac{1}{\tau} \vec{j} \quad (2.32)$$

Cependant l'équation 2.16 que nous cherchons à établir relie  $\vec{j}$  à  $\eta$  ( $f$  n'intervient plus qu'implicitement à travers les définitions de  $\eta$  et  $\vec{j}$ ) alors que, sans hypothèse simplificatrice supplémentaire, le premier terme du membre de droite de l'équation 2.32 ne peut être exprimé à l'aide de  $\eta$  et  $\vec{j}$  seulement : il s'agit d'un terme qui dépend de la dépendance angulaire de  $f$  d'une façon qui ne se résume pas à l'information portée par  $\vec{j}$  (c'est à dire au premier moment de la distribution des directions de déplacement)<sup>3</sup>. Nous allons alors utiliser le fait que la question posée concerne le comportement de la fourmi aux grands temps ( $t - t_0 \gg \frac{\lambda}{c}$ ) pour proposer une forme approchée de ce terme dans laquelle n'interviennent plus que  $\eta$  et  $\vec{j}$ .

**L'approximation "P1"** Au grands temps, on peut faire l'hypothèse que la fourmi a effectué tellement d'actes de diffusion qu'elle a perdu toute information concernant sa direction initiale. Cette phrase n'a bien sûr de sens que d'un point de vue statistique puisque nous avons admis que la fourmi ne fait pas appel à sa mémoire. Il s'agit seulement de supposer que la distribution des directions de propagation à tout instant  $t - t_0 \gg \frac{\lambda}{c}$  (où  $\frac{\lambda}{c}$  est le temps moyen entre deux diffusions) est indépendante de la direction initiale ( $\vec{\omega}_0 = \vec{e}_1$ ,  $\theta_0 = 0$ ). Comme la fourmi ne dispose d'aucun repère extérieur, on peut même admettre que cette distribution est isotrope. Cela revient à dire qu'aux grands temps,

$$f(\vec{r}, \theta, t) \approx \frac{1}{2\pi} \eta(\vec{r}, t) \quad (2.33)$$

Nous n'avons pas encore introduit le concept d'équilibre, mais dans le cas présent l'équilibre se traduira par une distribution isotrope et l'approximation correspondant à l'équation 2.33 sera communément appelée *approximation de l'équilibre thermodynamique local*. Si on reporte cette approximation dans le premier terme du membre de droite de l'équation 2.32, on obtient

$$\frac{\partial \vec{j}}{\partial t} \approx - \int_0^{2\pi} \frac{1}{2\pi} \text{div}(\eta c \vec{\omega}) c \vec{\omega} d\theta - \frac{1}{\tau} \vec{j} \quad (2.34)$$

c'est à dire

$$\frac{\partial \vec{j}}{\partial t} \approx - \int_0^{2\pi} \frac{c^2}{2\pi} \left[ \cos(\theta) \frac{\partial \eta}{\partial r_1} + \sin(\theta) \frac{\partial \eta}{\partial r_2} \right] [\cos(\theta) \vec{e}_1 + \sin(\theta) \vec{e}_2] d\theta - \frac{1}{\tau} \vec{j} \quad (2.35)$$

ce qui conduit à

$$\frac{\partial \vec{j}}{\partial t} \approx - \frac{c^2}{2} \text{grad}(\eta) - \frac{1}{\tau} \vec{j} \quad (2.36)$$

Or retient alors le système des deux équations suivantes (l'équation de continuité, qui est exacte, et l'équation d'évolution du vecteur flux, qui est approchée à la limite  $t - t_0 \gg \frac{\lambda}{c}$ ) :

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} = - \text{div}(\vec{j}) \quad (2.37)$$

$$\frac{\partial \vec{j}}{\partial t} \approx - \frac{c^2}{2} \text{grad}(\eta) - \frac{1}{\tau} \vec{j} \quad (2.38)$$

On a ainsi obtenu un système fermé permettant de prévoir l'évolution temporelle des champs de  $\eta$  et  $\vec{j}$  à partir de la connaissance de ces deux champs à un instant initial donné. Il s'agit de la forme

---

<sup>3</sup>Le rapport  $\frac{\vec{j}}{c\eta}$  est en effet la moyenne des directions de déplacement  $\vec{\omega}$ , alors que le premier terme du second membre de l'équation 2.32 fait apparaître des termes d'ordre 2 en  $\vec{\omega}$ .

que prend notre modèle de marche aléatoire diffusive bidimensionnelle sous l'hyp ... on parlera de ...

**L'approximation de diffusion**

**Solution intégrale**

**Enoncé du modèle d'agrégation/construction**

**Formalisation cinétique**

**Modèle macroscopique de réaction-diffusion**  $\cup \cap \cup \cap$