Importance de la marche au hasard dans l'étude du transport

Rémi MEVAERE

23 juillet 2019

Dans l'étude du transport de grandeurs physiques par des molécules [2], le physicien peut en première approximation adopter un modèle stochastique appelé marche au hasard. C'est le cas par exemple dans l'interprétation de la **viscosité** comme transport de la **quantité de mouvement**. À la manière d'un ivrogne, les particules (molécules) effectuent soit un pas en avant soit un pas en arrière d'une longueur constante que l'on appelle **libre parcours moyen** et que l'on note **l**.

Pour résoudre le problème on se place, comme souvent en physique dans le cas arbitraire d'un système simplifié. Ici une marche aléatoire unidimensionnelle, décrite par un axe **x**. Il sera a posteriori facile de généraliser le résultat à un mouvement tridimensionnel.

Mathématiquement on utilise les travaux sur les probabilités. Il s'agit de considérer **N** *épreuves* pouvant conduire à deux *évènements* :

- Événement $(+)$: La particule se déplace vers les **x** positifs
- Événement $(-)$: La particule se déplace vers les **x** négatifs

La question à se poser est : quelle est la probabilité pour que la particule effectue **finalement** un déplacement $\mathbf{m_l}$ selon les $\mathbf{x > 0}$?

Dans un premier temps relions **n**, le nombre de déplacements vers la droite (positifs) avec **N**, le nombre de déplacements total et **m** la position finale des déplacements à droite. On trouve sans aucune difficulté :

$$m = 2n - N$$

$$n = \frac{1}{2}(m + N)$$

Remarque : *On peut suivre le même raisonnement avec des déplacements vers la gauche, les résultats finaux seront forcément identiques considérant les symétries de notre modèle. La particule n'a pas de raison particulière de privilégier un déplacement vers la gauche ou vers la droite.*

En se rappelant les cours du lycée et les résultats sur la **loi binomiale**. On obtient la probabilité d'avoir **n** évènements $(+)$ parmi **N** épreuves.

$$p(n, N) = C_N^n . p_+^n . p_-^{N-n}$$

Soit on utilise l'approximation de ***Stirling*** pour faciliter la manipulation des factoriels puis on renormalise. Soit plus rapidement nous utilisons les conclusions du ***Théorème central limite***. Pour ce faire, on considère alors $\mathbf{X_N}$, une variable aléatoire correspondant à la somme des petits déplacements élémentaires. Un déplacement élémentaire est aussi une variable aléatoire que l'on nomme $\delta\mathbf{X_N}$ ayant deux valeurs possibles $\epsilon_\mathbf{n} = \pm\mathbf{1}$.

La variable aléatoire $\mathbf{X_N}$ pour une trajectoire donnée est :

$$X_N = \sum_{n=1}^{N} \delta X_N$$

Calculons la moyenne et la variance de cette variable aléatoire :

$$< \delta X_N >= p_+ \times (+1) + (1 - p_+) \times (-1) = 2p_+ - 1$$
$$< \delta X_N^2 >= p_+ \times (+1)^2 + (1 - p_+) \times (-1)^2 = 1$$

$$\sigma^2_{\delta X_N} \equiv < \delta X_N^2 > - < \delta X_N >^2 = 4p_+(1-p+)$$

Le ***théorème central limite***[1] permet d'affirmer que si $\mathbf{N >>> 1}$ alors $\mathbf{X_N}$ tend vers une loi gaussienne avec une moyenne $< \delta\mathbf{X_N} >$ et un écart type $\sqrt{\mathbf{N}}\sigma_{\delta\mathbf{X_N}}$.

$$P_{X_N}(n) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_{\delta X_N}} \exp\left[-\frac{(n - < \delta X_N >)^2}{2\sigma^2_{\delta X_N}}\right]$$

$$P_{X_N}(m) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sqrt{4p_+(1-p+)N}} \exp\left[-\frac{(m - N(2p_+ - 1))^2}{2\sqrt{4p_+(1-p+)N}^2}\right]$$

Or l'espace est isotrope donc $\mathbf{p_+ = \frac{1}{2}}$ (épreuve de ***Bernoulli***) cela implique que $< \delta\mathbf{X_N} >= \mathbf{0}$.

$$\boxed{P_{X_N}(m) = \frac{1}{\sqrt{2\pi N}} \exp\left[-\frac{m^2}{2N}\right]}$$

En considérant maintenant la distance parcourue $\mathbf{x = m \times l}$ et la durée totale $\mathbf{\Delta t = N \times \tau}$ où $\boldsymbol{\tau}$ est la durée nécessaire pour parcourir le libre parcours moyen à la vitesse moyenne $\mathbf{v_m}$. La probabilité d'avancer de $\mathbf{x}$ est :

$$P_x = Cte \times \exp\left[-\frac{\tau.x^2}{2.\Delta t.l^2}\right]$$

Calculons la distance quadratique moyenne parcourue :

$$x_q^2 = \bar{x^2} = \frac{\int_0^\infty x^2.P_x.dx}{\int_0^\infty x.P_x.dx} \implies \boxed{x_q = l\left(\frac{\Delta t}{\tau}\right)^{1/2}}$$

La distribution s'élargit proportionnellement à la racine carrée de la durée $\mathbf{\Delta t}$. Formulé autrement on peut dire que la région visitée par la particule croît comme la racine carrée de la durée.

Références

[1] Claude ASLANGUL. *Des mathématiques pour les sciences.* DE BOECK, 2011.

[2] José philippe PEREZ. *Thermodynamique - Fondements et Applications.* DUNOD, 3ème edition, 2001.