Diffusion

- I La planche de Galton
- II La marche aléatoire
- III Le mouvement Brownien
- IV La loi de Fick
- V Les réactions oscillantes
- VI **Le(s) modèle(s) de Alan Turing**

La diffusion dans le vivant

PRL 102, 048103 (2009) PHYSICAL REVIEW LETTERS week ending 30 JANUARY 2009

Inferring Maps of Forces inside Cell Membrane Microdomains

J.-B. Masson,[1,*] D. Casanova,[2] S. Türkcan,[2] G. Voisinne,[1] M. R. Popoff,[3] M. Vergassola,[1] and A. Alexandrou[2]

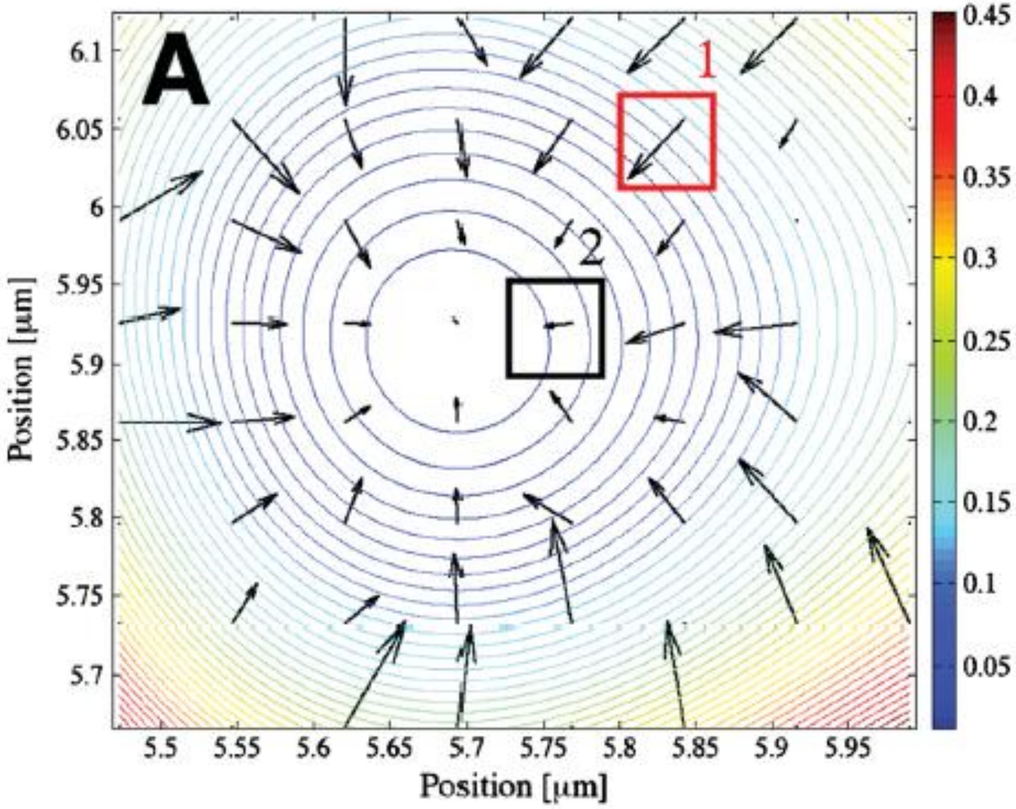
[1]Institut Pasteur, CNRS URA 2171, Unit In Silico Genetics, 75724 Paris Cedex 15, France

[2]Laboratoire d'Optique et Biosciences, Ecole Polytechnique, CNRS, INSERM, 91128 Palaiseau, France

[3]Institut Pasteur, Bactéries anaérobies et Toxines, 75724 Paris Cedex 15, France

(Received 9 September 2008; published 29 January 2009)

Mapped the forces and the potentials involved in the confined motion of the toxin receptor in the membrane of Madin-Darby Canine Kidney cells.

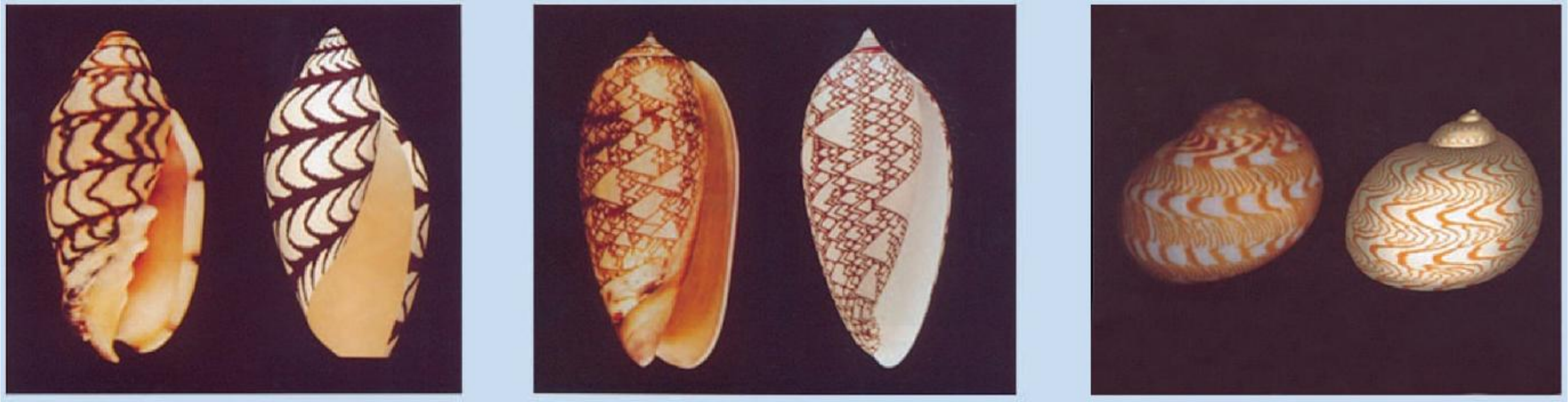


Processus de réaction-diffusion

« Le(s) modèle(s) de Alan Turing »

(1912 – 1954)

Emergence spontanée de motifs réguliers



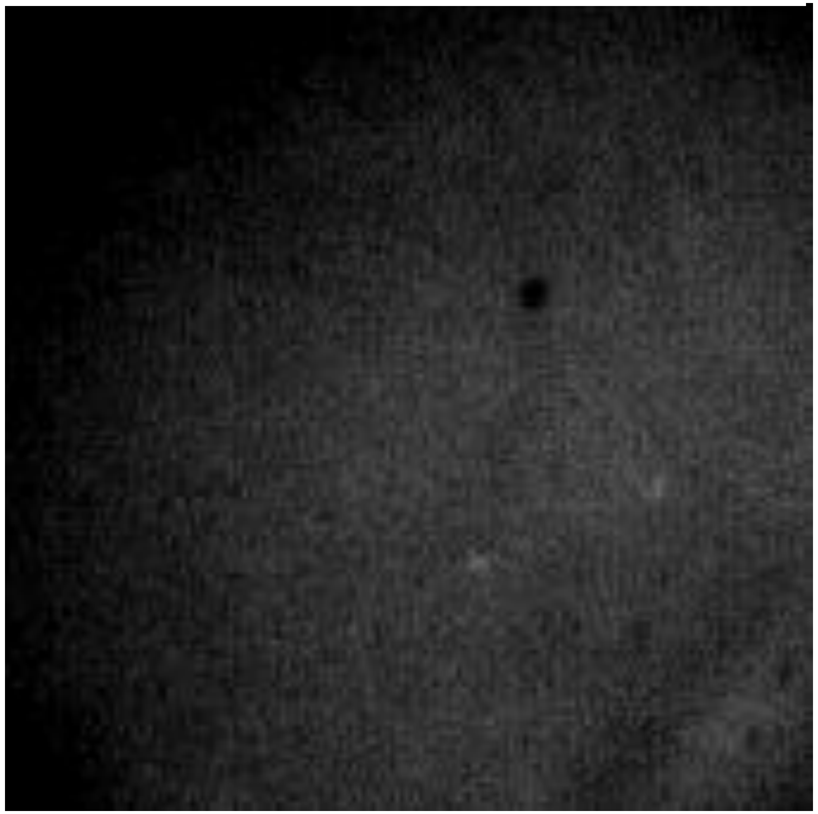
H. Meinhardt, The Algorithmic Beauty of Seashells (Springer-Verlag, Berlin, 1995).

Processus de réaction-diffusion

Spiral Calcium Wave Propagation and Annihilation in *Xenopus laevis* Oocytes

JAMES LECHLEITER, STEVEN GIRARD, ERNEST PERALTA,
DAVID CLAPHAM*

Science 05 Apr 1991:
Vol. 252, Issue 5002, pp. 123-126
DOI: 10.1126/science.2011747



Réaction oscillante impliquant des phénomènes de diffusion

Comprendre la diffusion

Le phénomène de diffusion d'une espèce (ici l'encre dans l'eau) est lié au mouvement individuel des « particules » (ici les molécules d'encre) composant l'espèce diffusant.

Ce mouvement est un mouvement aléatoire, le mouvement Brownien

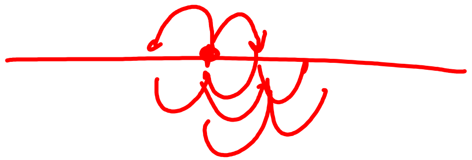
Passage au continu

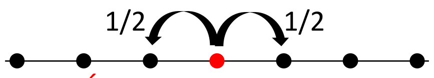
Une description intuitive du mouvement Brownien s'appuie sur la description de la marche aléatoire (description discrète).

Déroulement pédagogique

La marche aléatoire présente deux avantages pédagogiques :

- Elle permet de montrer que la probabilité de présence P(X,t) d'une particule à un emplacement donné X après un temps donné t est la solution d'une E.D.P. caractéristique de la diffusion.
- La marche aléatoire se décrit à partir de la loi binomiale, résultant d'une série d'épreuves de Bernoulli indépendantes. La loi binomiale converge donc en loi vers une loi normale (Théorème central limite), ce qui s'illustre à partir de la planche de Galton… La loi normale avec une variance proportionnelle au temps est une solution des équations de diffusion !





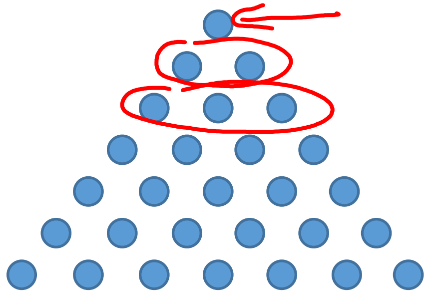
Épreuve de Bernoulli

I La planche de Galton

<u>a) Objectifs:</u>

- Faire sentir l'origine stochastique du phénomène de diffusion
- Faire comprendre le passage expérience de Bernoulli / loi binomiale
- Montrer que la loi binomiale converge vers la loi Normale

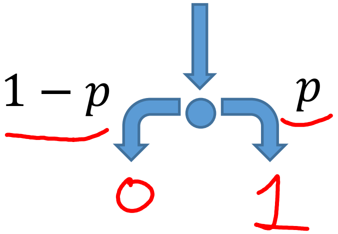
I La planche de Galton



b) Description de la planche de Galton:

Suppositions:

- Une bille a 50% (p) de chance de passer à droite du clou et 50% de chance de passer à gauche $(1-p)$.



expérience de Bernoulli de probabilité p:
épreuve « réussite » (p) – « échec » $(1-p)$ $p = \frac{1}{2}$

- Chaque étape est indépendante de la précédente. On répète donc un grand nombre de fois la même expérience de Bernoulli

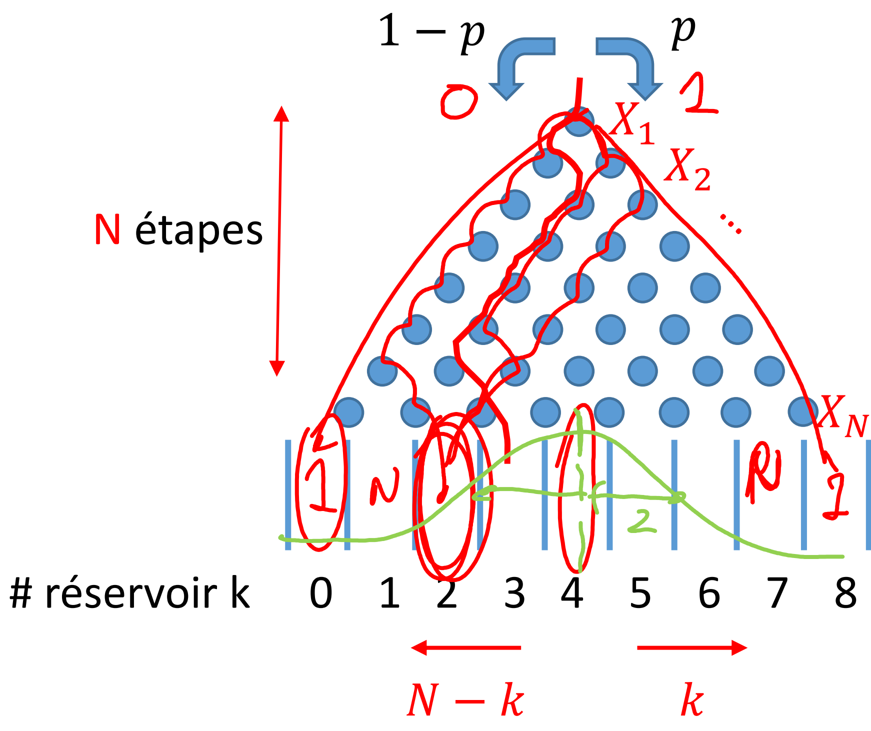
Le dispositif permet donc de visualiser la loi des écarts à la moyenne dans le cadre d'une série d'un grand nombre d'expériences aléatoires indépendantes. Mise en évidence de:

- La loi des grands nombres
- Le théorème central limite.

I La planche de Galton

k : droite
N-k : gauche

c) Observation



pour $k \in [\![0, N]\!]$

- Une bille est lâchée. Elle subit des déviations (expériences de Bernoulli) toutes indépendantes les unes des autres et finit par tomber dans l'un des réservoirs
- Chaque chemin est équiprobable (si $p = 0{,}5$) : $\dfrac{1}{2^N}$ $\left(\text{sinon } p^k(1-p)^{N-k}\right)$

  $p = 1/2 \quad p^k(1-p)^{N-k} = \frac{1}{2^N}$
- A chaque réservoir est attribué un nombre k correspondant au nombre de déviations « vers la droite ».
- La probabilité de tomber dans le réservoir k est donc proportionnel au nombre de chemins menant au réservoir, qui est donné par le coefficient Binomiale C_N^k

v.a. $Y = \sum_{i=1}^{n} X_i$

X_i : exp de Bernoulli

$P(X_i = 0) = 1 - p$

$P(X_i = 1) = p$

Loi binomiale $B(N, p)$

si $p = \frac{1}{2}$, $P(Y = k) = C_N^k \dfrac{1}{2^N}$

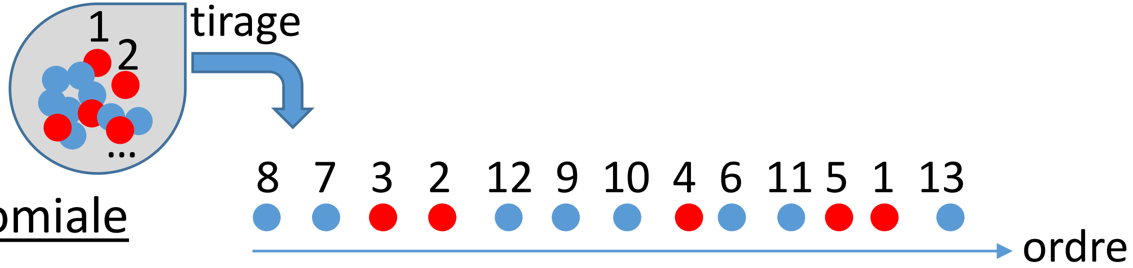
sinon $P(Y = k) = C_N^k \, p^k (1-p)^{N-k}$

coefficient Binomiale C_N^k, également noté $\binom{N}{k}$: Nombre de manières de choisir k parmi N, sans notion d'ordre. Par exemple, c'est le nombre de manières de placer k billes indiscernables dans N trous.

$$\binom{N}{k} = \boxed{C_N^k = \frac{N!}{k!\ (N-k)!}}$$

$0! = 1$

I La planche de Galton



d) Quelques propriétés du coefficient binomiale et de la loi binomiale

C’est le nombre de manière d’organiser deux groupes d’objets. Les objets dans chacun des deux groupes n’étant pas distinguables

$$C_N^k = \frac{N!}{k!\ (N-k)!}$$

$N!$ → Nombre de manières d’organiser N objets distinguables (numérotés).

$(N-k)!$ → Nombre de manières d’organiser $(N-k)$ objets distinguables.

$k!$ → Nombre de manières d’organiser k objets distinguables

$$C_{N-1}^{k-1} + C_{N-1}^{k} = \frac{(N-1)!\ k}{\underbrace{\cancel{(k-1)!}}_{k!}\ (N-k)!} + \frac{(N-1)!\ \times (N-k)}{k!\ \underbrace{\cancel{(N-1-k)!}}_{(N-k)!}}$$

Triangle de Pascal

N \ k	0	1	2	3	4
0	1	0			
1	1	1	0		
2	1	2	1	0	
3	1	3	3	1	
4	1	4	6	4	1
…					

$$\boxed{C_N^k = C_{N-1}^{k-1} + C_{N-1}^{k}}$$

$$C_N^0 = C_N^N = 1$$

$$C_N^k = C_N^{N-k}$$

Exemple d’utilisation:

$$(a+b)^N = \sum_{k=0}^{N} C_N^k\ a^k\ b^{N-k}$$

$(a+b)(a+b)(a+b) \times (a+b)$

$$= \frac{(N-1)! \times (N-k+k)}{k!\ (N-k)!} = \frac{N!}{k!\ (N-k)!}$$

CQFD

$N! = N \times (N-1) \times (N-2) \times \dots \times 1$

$p = \frac{1}{2} \rightarrow E(Y) = \frac{N}{2}$

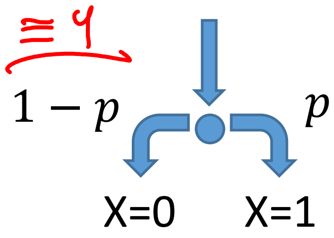
$\sigma_Y^2 = \frac{N}{4}$

$\sigma_Y = \frac{\sqrt{N}}{2} = 1,2$

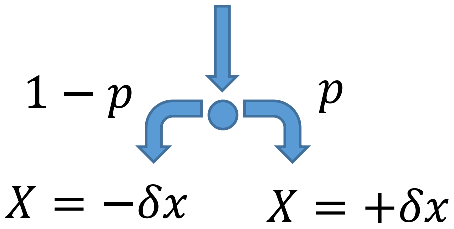
d) Quelques propriétés du coefficient binomiale et de la loi binomiale

$$P(X=k) = C_N^k\, p^k (1-p)^{N-k} \text{ pour } k \in [\![0, N]\!]$$

$N = 1$: Epreuve de Bernoulli



Exercice : Calculer $\langle X \rangle$ et σ^2



N quelconque :

Exercice : Montrer que $\langle X \rangle = \cancel{N}p$ et $\sigma^2 = \cancel{N}p(1-p)$

Exercice : Déduire de $\langle X \rangle$ et σ^2 pour l'épreuve de Bernoulli (v.a. X_i), la loi associée à $Y = \sum_{i=1}^{N} X_i$

$E(Y) = N\,E(X) = Np$

$\sigma_Y^2 = N\,\sigma_X^2 = N(1-p)p$

$$\langle X \rangle = E(X) = 0 \times (1-p) + 1 \times p = p$$

$$\sigma^2 = E(X^2) - E^2(X) = \underbrace{0^2 \times (1-p) + 1^2 \times p}_{E(X^2)} - p^2 = p(1-p) = pq$$

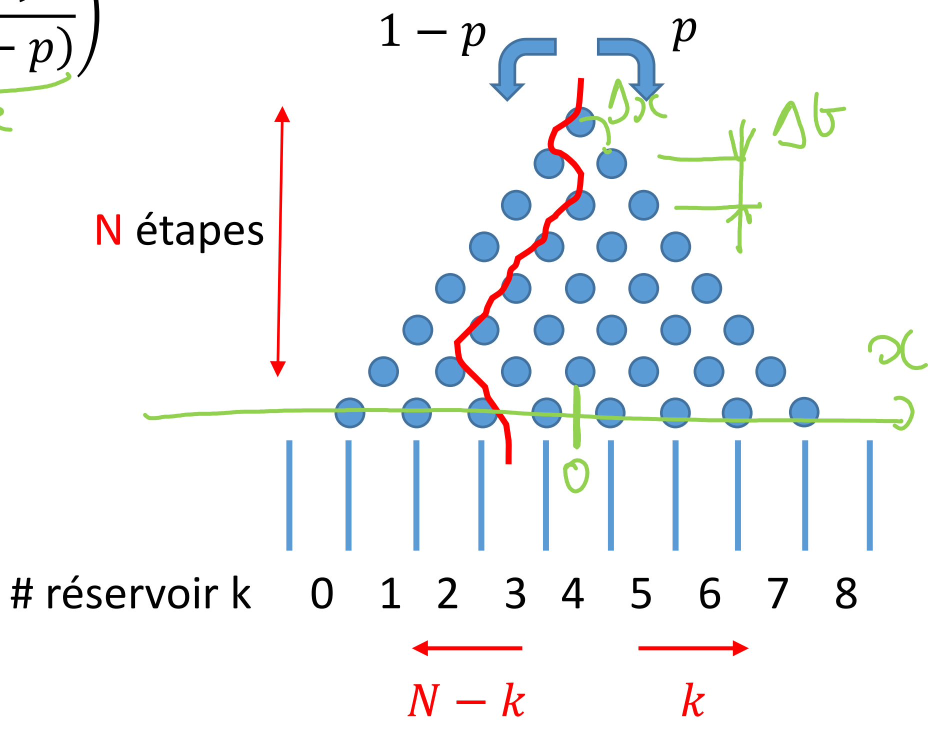
e) Lien avec la loi normale:

Pour N grand et p « équilibré », la loi binomiale tend vers la loi normale.

On obtient donc la courbe de Gauss:

$$g(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi \underbrace{Np(1-p)}_{\sigma^2}}} exp\left(-\frac{(k-\overbrace{Np}^{m})^2}{\underbrace{2Np(1-p)}_{\sigma^2}}\right)$$

$= \mathcal{N}(m, \sigma^2)$



I La planche de Galton

<u>Conclusion:</u>
De nombreuses grandeurs résultent de la combinaison d'un grand nombre de paramètres sans rapports les uns avec les autres… de variables aléatoires indépendantes donc.

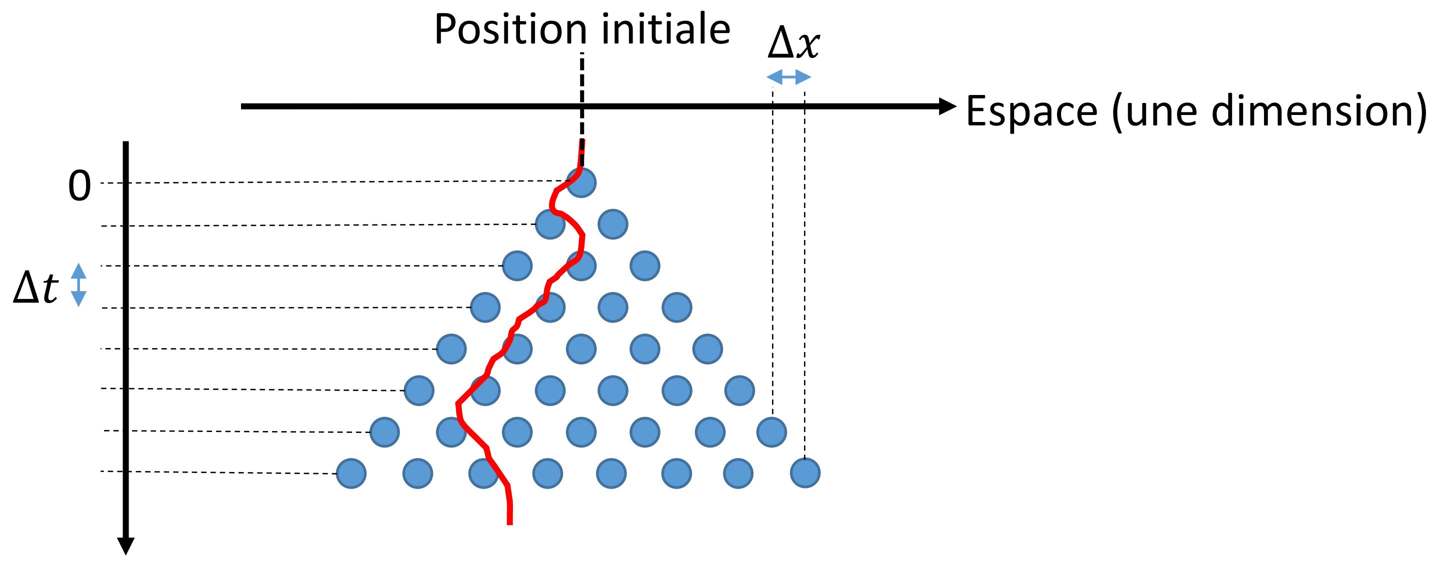
Les valeurs prisent pas ces grandeurs se répartissent alors souvent selon une courbe de Gauss

C'est constaté en physique, avec les fluctuations autour de la valeur moyenne d'une observable, mais également en biologie. La taille d'un individu dépend pas exemple de facteurs génétiques, de son régime alimentaire, des soins dont il a bénéficié etc… On constate alors une répartition des tailles selon une courbe de Gauss.

II Marche Aléatoire

a) Objectifs:

- Faire sentir l'origine stochastique du phénomène de diffusion…
- Passer d'une approche discrète (planche de Galton) à l'écriture d'une équation aux dérivées partielles (EDP) avec des variables continues temps/espace.
- Introduire le concept de diffusion de probabilité

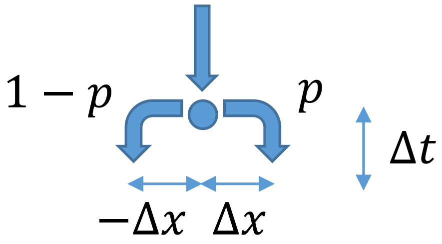


Distribution de probabilité de s'écarter de la position initiale

$\times$ *Nombre de billes*

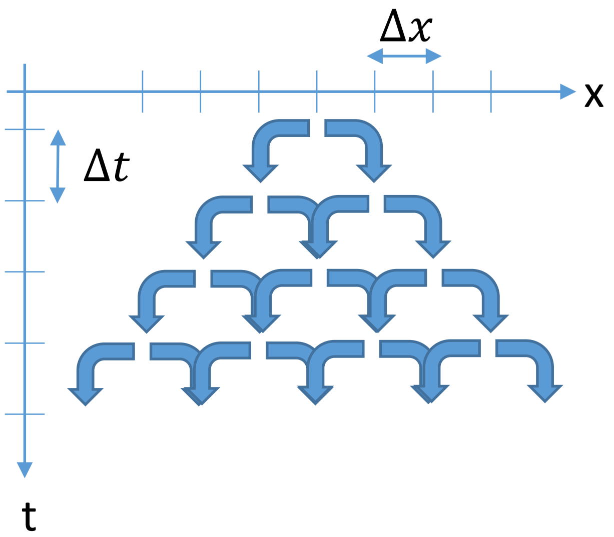
II Marche Aléatoire

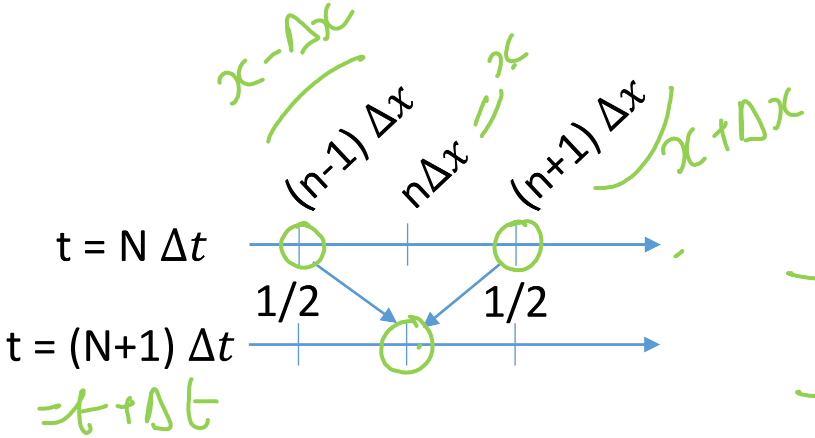
b) Mise en équations:

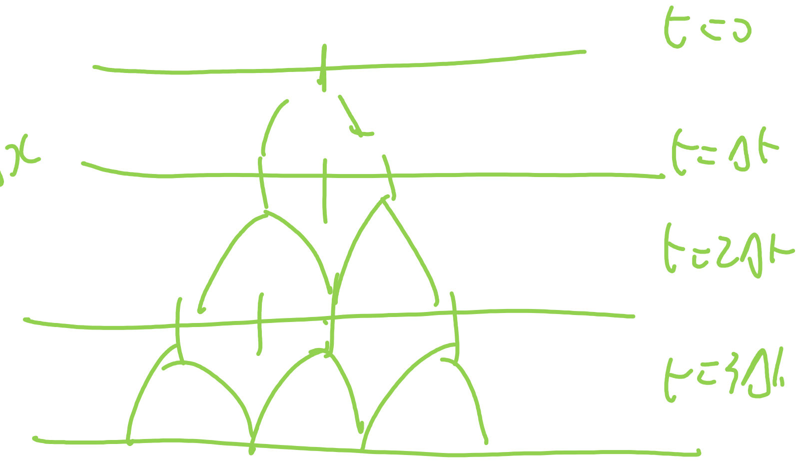


$p = \frac{1}{2}$

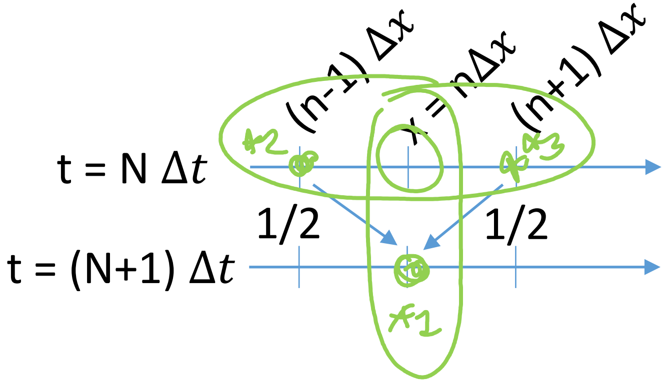
A une dimension, durant un pas de temps Δt, on se déplace sur un axe x d'une distance $\pm\Delta x$, avec une probabilité (1-p) pour $-\Delta x$ et une probabilité p pour Δx (Δt et Δx arbitraires, mais petits).
Dans un premier temps, on prendra (1-p)=p=0,5.







Exercice: Ecrire les relations entre les probabilités
$P(n\Delta x,(N+1)\Delta t)$, $P\big((n+1)\Delta x, N\Delta t\big)$ et $P\big((n-1)\Delta x, N\Delta t\big)$
En déduire l'équation aux dérivées partielles régissant la diffusion.



c) Equation aux dérivées partielles:

Par construction:

*1

x   t + Δt   x + Δx , t   x - Δx , t

$$P(n\Delta x,(N+1)\Delta t) = \frac{1}{2}P\big((n+1)\Delta x, N\Delta t\big) + \frac{1}{2}P\big((n-1)\Delta x, N\Delta t\big)$$

*3   *2

On peut soustraire $P(n\Delta x, N\Delta t)$ des deux cotés:

$$P(n\Delta x,(N+1)\Delta t) - P(n\Delta x, N\Delta t) = \frac{1}{2}\Big(P\big((n+1)\Delta x, N\Delta t\big) + P\big((n-1)\Delta x, N\Delta t\big) - 2 * P(n\Delta x, N\Delta t)\Big)$$

x   t

On note $x \equiv n\Delta x$ et $t = N\Delta t$:

$$P(x,t+\Delta t) - P(x,t) = \frac{1}{2}\big(P(x+\Delta x,t) + P(x-\Delta x,t) - 2 * P(x,t)\big)$$

Δt ∂_t ∂x^2 x ∂_{x^2}

Pour Δt et Δx infinitésimaux, on reconnait la dérivée première du temps ($\times\ \Delta t$) et la dérivée seconde par rapport à l'espace ($\times\ \Delta x^2$).

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

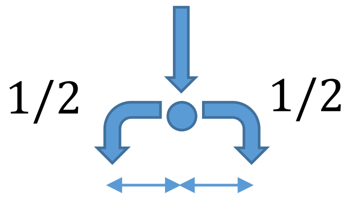
$$\boxed{D = \frac{\Delta x^2}{2\Delta t}}$$

C'est une équation de diffusion de la densité de probabilité $p(x,t)$ (en passant aux variables continues, P est maintenant une densité de probabilité), de la forme $\frac{\partial p(x,t)}{\partial t} = D\frac{\partial^2 p(x,t)}{\partial x^2}$, avec $D = \frac{\Delta x^2}{2\Delta t}$ le coefficient de diffusion.
$p(x,t)$ représente la distribution de probabilité de s'écarter d'une distance x de la position initiale (celle à t=0) après un temps t. Ici Δx et Δt, donc D, sont arbitraires, mais on montrera dans le cadre du mouvement Brownien comment relier D à des grandeurs physiques !

II Marche Aléatoire

d) Inférer une solution possible de l'EDP:

Attention: ce qui suit n'est pas une démonstration générale.
On repart de l'expérience de Bernoulli.



Chaque saut est une v.a. X: $-\Delta x \quad \Delta x$

$$\langle X\rangle = \frac{1}{2}(-\Delta x\,) + \frac{1}{2}\Delta x = 0$$

$$\sigma_X^2 = \langle X^2\rangle - \langle X\rangle^2 = \frac{1}{2}(-\Delta x\,)^2 + \frac{1}{2}\Delta x^2 - 0 = \Delta x^2$$

Après N pas de temps $(t = N\Delta t)$, le marcheur s'est déplacé d'une distance $Y = \sum_{i=1}^{N} X_i$ $\longrightarrow \sigma_Y^2 = N\Delta x^2$

$N = \frac{t}{\Delta t}$

Pour N grand, on s'attend donc à ce que la densité de probabilité $p(x,t)$ tendent vers la loi normale $\mathcal{N}(N\langle X\rangle\,, N\sigma_X^2) = \mathcal{N}(0\,, 2Dt)$ avec $N = \frac{t}{\Delta t}$ et $D = \frac{\Delta x^2}{2\Delta t}$

$\sigma_Y^2 = \frac{t\,\Delta x^2}{\Delta t} = 2tD$

Cette distribution s'écrit explicitement (on considère le marcheur en $x = 0$ à $t = 0$):

$$p(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\, 2Dt}}\, exp\left(-\frac{x^2}{4Dt}\right)$$

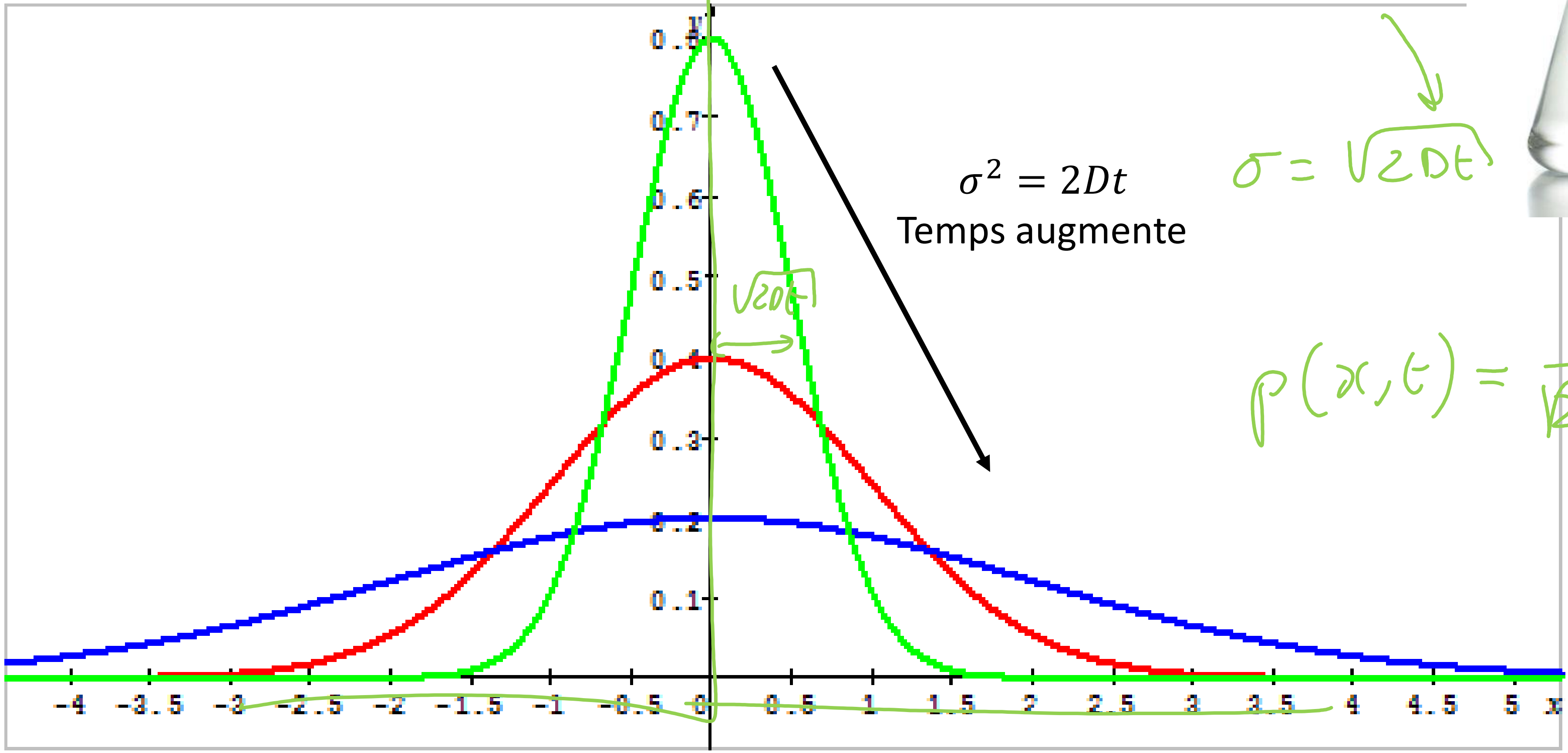
$$\frac{\partial p(x,t)}{\partial t} = D\,\frac{\partial^2 p(x,t)}{\partial x^2}$$

Exercice: vérifier que $p(x,t)$ est bien une solution possible de $\frac{\partial p(x,t)}{\partial t} = D\,\frac{\partial^2 p(x,t)}{\partial x^2}$

II Marche Aléatoire

ps-cours_loi-normale-2684c72e.svg

d) Inférer une solution possible de l’EDP:



$\sigma = \sqrt{2Dt}$

$$\rho(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\, 2Dt}} \exp\left(\frac{x^2}{4Dt}\right)$$

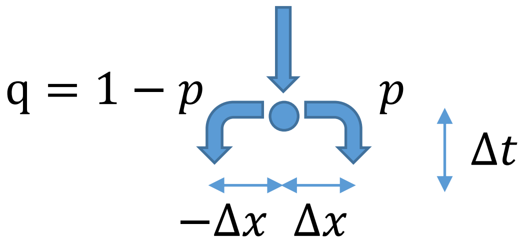
La diffusion correspond à un étalement dans temps de la densité de probabilité de présence. Pour un ensemble de marcheurs lâchés simultanément d’une même position (goutte d’encre), il y a donc une évolution de la répartition spatiale des marcheurs (colorants) qui va suivre une courbe de Gauss, centrée sur la position initiale, et caractérisée par un écart type $\sqrt{2Dt}$.

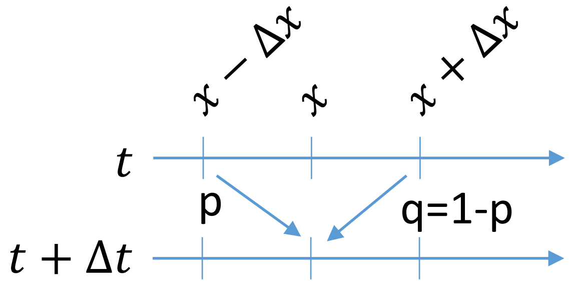
II Marche Aléatoire

e) Notion de dérive:

Ex: il peut y avoir une direction globale de déplacement si les objets diffusant sont soumis à une force (par exemple un ions dans un champ électrique).

Expérience de Bernoulli:





$$q = \frac{1}{2}\underbrace{(q-p)}_{=1-2p} + \frac{1}{2}\underbrace{(q+p)}_{=1} = -\frac{1}{2}(p-q) + \frac{1}{2}$$

$$p = \frac{1}{2}(p-q) + \frac{1}{2}(p+q) = \frac{1}{2}(p-q) + \frac{1}{2}$$

$$P(x, t+\Delta t) = qP(x+\Delta x, t) + pP(x-\Delta x, t)$$

$$-P(x,t)$$

$$P(x, t+\Delta t) - P(x,t) = qP(x+\Delta x, t) + pP(x-\Delta x, t) - P(x,t)$$

$$P(x, t+\Delta t) - P(x,t) = -\frac{1}{2}(p-q)P(x+\Delta x, t) + \frac{1}{2}P(x+\Delta x, t) + \frac{1}{2}(p-q)P(x-\Delta x, t) + \frac{1}{2}P(x-\Delta x, t) - P(x,t)$$

$$\Delta t \frac{\partial p(x,t)}{\partial t} = -\frac{1}{2}(p-q) * 2\Delta x * \frac{\partial p(x,t)}{\partial x} + \frac{\Delta x^2}{2}\frac{\partial^2 p(x,t)}{\partial x^2}$$

$$\frac{\partial p(x,t)}{\partial t} = -(p-q)\frac{\Delta x}{\Delta t}\frac{\partial p(x,t)}{\partial x} + \frac{\Delta x^2}{2\Delta t}\frac{\partial^2 p(x,t)}{\partial x^2}$$

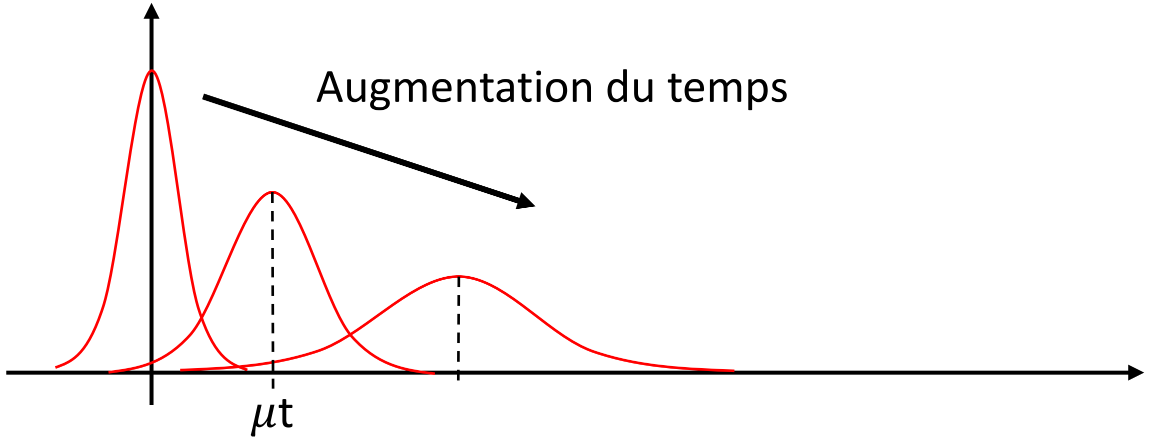
II Marche Aléatoire

e) Notion de dérive:

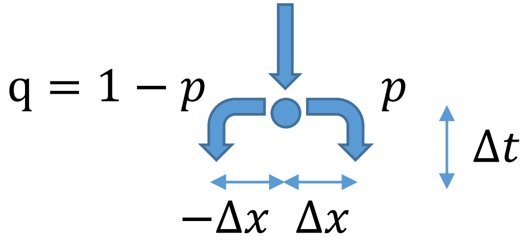
$$\frac{\partial p(x,t)}{\partial t} = -\mu \frac{\partial p(x,t)}{\partial x} + \mathrm{D}\frac{\partial^2 p(x,t)}{\partial x^2}$$

$$\begin{cases} \mu = (p-q)\dfrac{\Delta x}{\Delta t}, \text{terme de dérive associé à la dérivée première} \\ D = \dfrac{\Delta x^2}{2\Delta t}, \text{terme de diffusion associé à la dérivée seconde} \end{cases}$$

Attention cette forme n'est pas complètement satisfaisante (p=0) …



Expérience de Bernoulli:



$P(x = -\Delta x) = 1 - p = q$

$P(x = +\Delta x) = p$

Espérance de l'expérience de Bernoulli: $\langle X_i \rangle = -\Delta x * P(x = -\Delta x) + \Delta x * P(x = +\Delta x) = (p-q)\Delta x$

Après N itérations: $\langle Y \rangle = N(p-q)\Delta x = \frac{t}{\Delta t}(p-q)\Delta x \equiv \mu \mathrm{t}$

μ correspond donc à la vitesse de la dérive !

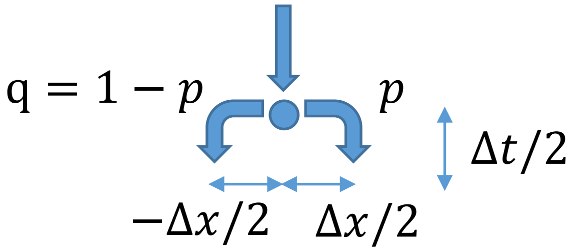
($\langle Y \rangle$ Espérance sur la position)

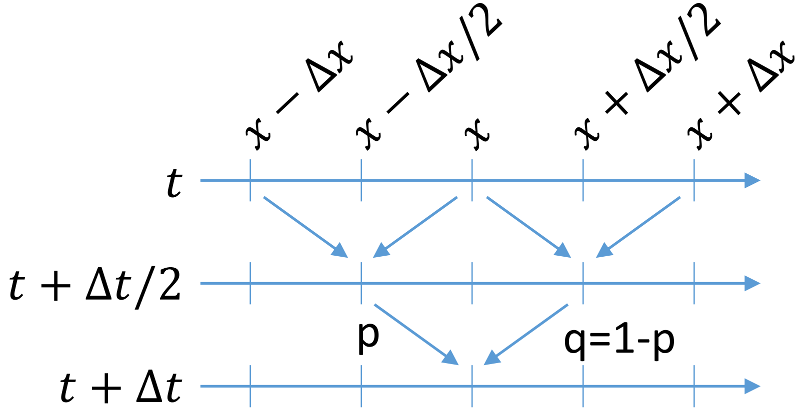
II Marche Aléatoire

e) Notion de dérive:

$D = \frac{\Delta x^2}{2\Delta t}$, terme de diffusion associé à la dérivée seconde… cette expression n'est pas complètement satisfaisante, $p = 0$ devrait conduire à $D = 0$

Solution: on ajoute une étape pour gagner un ordre de grandeur sur les approximations.





Exercice : Montrer la nouvelle expression

$$\frac{\partial p(x,t)}{\partial t} = -(p-q)\frac{\Delta x}{\Delta t} * \frac{\partial p(x,t)}{\partial x} - \mathrm{pq}\frac{\Delta x^2}{\Delta t}\frac{\partial^2 p(x,t)}{\partial x^2}$$