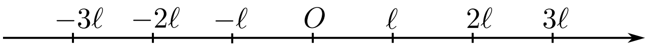
# Diffusion depuis une origine et loi binomiale

Reprenons la marche aléatoire étudiée en cours. Les particules partent de l'origine $O$ puis, à intervalles réguliers de durée $\tau$, effectuent des pas aléatoires de longueur $\ell$, dirigés vers la droite ou vers la gauche avec une égale probabilité 1/2.




Après une succession de $N$ pas, une particule atteint à la date $t_N = N\tau$ l'abscisse $x_N$, variable aléatoire donnée par

$$x_N = \sum_{i=1}^{N} \Delta x_i \qquad \text{avec} \quad \forall i \in [\![1, N]\!]\,, \quad \begin{cases} P(\Delta x_i = \ell) = 1/2 \\ P(\Delta x_i = -\ell) = 1/2 \end{cases} .$$

Les abscisses accessibles s'étendent dans l'intervalle $[-N\ell, N\ell]$, mais certaines sont bien plus probables que d'autres et on souhaite formaliser cette idée. Pour cela, on calcule pour tout $L$ dans $[\![-N, N]\!]$ la probabilité

$$p_{N,L} = P(x_N = L\ell).$$

L'entier $L$ sans dimension désigne l'indice de la position finale de la particule. Remarquons tout d'abord qu'après un nombre $N$ pair de pas, la particule arrive forcément sur une abscisse d'indice pair ; après un nombre $N$ impair de pas, elle arrive forcément sur une abscisse d'indice impair. Si $N$ et $L$ ne sont pas de même parité, on a donc $p_{N,L} = 0$. Dans la suite, nous excluons ce cas de sorte que $N + L$ est divisible par 2.

Soit $N_d$ le nombre de pas effectués vers la droite et $N_g$ le nombre de ceux effectués vers la gauche. L'abscisse finale est donnée par $x_N = N_d\ell - N_g\ell$ et on peut écrire les deux relations

$$N = N_d + N_g \quad \text{et} \quad L\ell = N_d\ell - N_g\ell \tag{1}$$

d'où on tire

$$N_d = \frac{N+L}{2} \qquad N_g = \frac{N-L}{2} \quad . \tag{2}$$

La probabilité pour que l'abscisse finale $x_N$ soit égale à $L\ell$ est donc celle pour que, parmi les $N$ pas, il s'en trouve exactement $N_d$ dirigés vers la droite et $N_g$ vers la gauche, $N_d$ et $N_g$ étant donnés par les relations (1). Elle s'exprime par la loi binomiale :

$$p_{N,L} = \left(\frac{1}{2}\right)^{N_d} \left(1 - \frac{1}{2}\right)^{N-N_d} \binom{N}{N_d} \quad .$$

Un théorème important relevant de la théorie des probabilités assure que, pour $N$ suffisamment grand, la loi binomiale de paramètres $N$ et $p$ peut être approximée par une loi normale de même espérance $\mu = Np$ et de même écart-type $\sigma = \sqrt{Np(1-p)}$. Cette fameuse loi normale concerne une variable aléatoire continue $u$ et sa densité de probabilité est donnée par

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{(u-\mu)^2}{2\sigma^2}} \quad .$$

Dans notre cas, $p = 1/2$, $\mu = N/2$ et $\sigma = \sqrt{N}/2$. La variable aléatoire est $u = N_d$ et

$$u - \mu = N_d - \frac{N}{2} = \frac{L}{2} \quad \text{d'après (2).}$$

On a donc

$$p_{N,L} \simeq \frac{1}{\sqrt{2\pi}\frac{\sqrt{N}}{2}} \exp\left(-\frac{\left(\frac{L}{2}\right)^2}{N/2}\right) = \frac{2}{\sqrt{2\pi N}} e^{-L^2/(2N)} \quad . \tag{3}$$

Comme ni les variables aléatoires continues, ni la loi gaussienne, ne figurent à votre programme de mathématique, ces arguments risquent de vous heurter. Afin de vous convaincre, j'ai représenté en annexe, sur la figure (1), la loi binomiale et son approximation par une loi normale : on constate que l'accord est excellent. Si cela ne suffit pas à vous rassurer, un calcul fondé sur la formule de Stirling permet d'établir la relation (3) d'une autre manière.

Si une multitude de particules, au nombre de $N_{\text{part}}$, effectuent simultanément ces marches aléatoires, l'abcisse $L\ell$ sera atteinte par environ $p_{N,L} \times N_{\text{part}}$ particules. À cause des questions de parité évoquées plus haut, une abscisse sur deux est inoccupée et le nombre de particules $n$ par unité de longueur s'obtient en divisant par $2\ell$ :

$$n_{N,L} = \frac{p_{N,L}}{2\ell} \simeq \frac{1}{\sqrt{2\pi\ell^2 N}} e^{-L^2/(2N)} \quad .$$

Revenons aux grandeurs dimensionnées $t$ et $x$ (par $N = t/\tau$ et $L = x/\ell$) et faisons apparaître le coefficient de diffusion $D = \frac{\ell^2}{2\tau}$. On obtient

$$n(x,t) \simeq \frac{1}{\sqrt{2\pi\ell^2 \frac{t}{\tau}}} \exp\left(-\frac{x^2/\ell^2}{2\frac{t}{\tau}}\right) \qquad \boxed{n(x,t) \simeq \frac{1}{\sqrt{4\pi D t}} \exp\left(-\frac{x^2}{4Dt}\right)} \quad .$$

On retrouve ainsi la solution de l'équation de la diffusion rencontrée en cours pour décrire l'étalement progressif de particules initialement regroupées à l'origine des coordonnées. Ce calcul conforte l'interprétation microscopique du phénomène de diffusion : il s'agit d'une conséquence, à l'échelle mésoscopique, du mouvement aléatoire des particules associé à leur agitation thermique.

---

**ANNEXES**

## Approximation de la loi binomiale par la loi normale

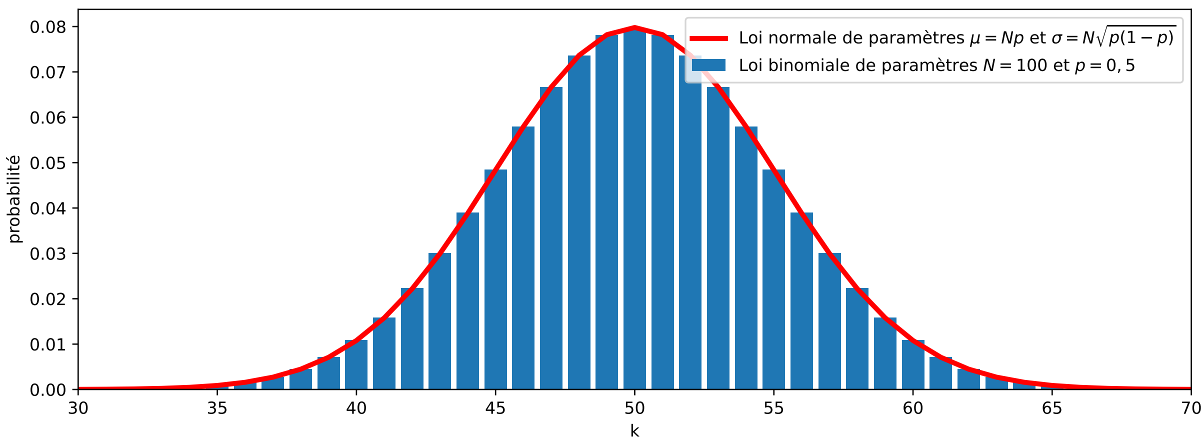



FIGURE 1 – Représentation de la loi binomiale de paramètres $N = 100$ et $p = 0,5$, et de la loi normale de même espérance et de même écart-type. On constate que les deux lois de probabilité sont très proches. Elles le seraient encore davantage avec une valeur de $N$ plus élevée, comme c'est le cas dans un problème de diffusion de particules.

## Démonstration de la relation (3) à partir de la formule de Stirling

La probabilité $p_{N,L}$ est donnée par la loi binomiale

$$p_{N,L} = \left(\frac{1}{2}\right)^{N_d} \left(1 - \frac{1}{2}\right)^{N-N_d} \binom{N}{N_d} = \frac{1}{2^N} \frac{N!}{N_d!\,(N-N_d)!} = \frac{1}{2^N} \frac{N!}{\left(\frac{N+L}{2}\right)!\,\left(\frac{N-L}{2}\right)!} \quad .$$

Nous allons obtenir une forme approximative de ce résultat en utilisant la formule de Stirling

$$N! \sim N^N e^{-N} \sqrt{2\pi N} \quad .$$

$$p_{N,L} \sim \frac{1}{2^N} \frac{N^N e^{-N}\sqrt{2\pi N}}{\left(\frac{N+L}{2}\right)^{\left(\frac{N+L}{2}\right)} e^{-\left(\frac{N+L}{2}\right)}\sqrt{2\pi\left(\frac{N+L}{2}\right)} \times \left(\frac{N-L}{2}\right)^{\left(\frac{N-L}{2}\right)} e^{-\left(\frac{N-L}{2}\right)}\sqrt{2\pi\left(\frac{N-L}{2}\right)}}$$

$$p_{N,L} \sim \frac{N^N}{\sqrt{2\pi}} \frac{\sqrt{N}}{\sqrt{N^2-L^2}} \frac{1}{(N+L)^{(N+L)/2}\,(N-L)^{(N-L)/2}} \quad .$$

On poursuit en écrivant

$$\begin{aligned}(N+L)^{(N+L)/2}\,(N-L)^{(N-L)/2} &= \exp\left(\tfrac{N+L}{2}\ln(N+L)\right)\,\exp\left(\tfrac{N-L}{2}\ln(N-L)\right) && (4)\\ &= \exp\left(\tfrac{N+L}{2}\ln(N+L)+\tfrac{N-L}{2}\ln(N-L)\right) \quad . && (5)\end{aligned}$$

On se place dans la limite $L \ll N$ (relativement près du centre de la région accessible). Un développement limité à l'ordre 2 en $L/N$ donne

$$\begin{aligned}\frac{N+L}{2}\ln(N+L) &= \frac{N}{2}\left[\ln N + \frac{L}{N} + \frac{L}{N}\ln N + \frac{L^2}{2N^2} + o\left(\frac{L^2}{N^2}\right)\right]\\ \frac{N-L}{2}\ln(N+L) &= \frac{N}{2}\left[\ln N - \frac{L}{N} - \frac{L}{N}\ln N + \frac{L^2}{2N^2} + o\left(\frac{L^2}{N^2}\right)\right]\end{aligned}$$

En sommant membre à membre puis en reportant dans la relation (5), on obtient

$$(N+L)^{(N+L)/2}\,(N-L)^{(N-L)/2} = \exp\left[N\left(\ln N + \frac{L^2}{2N^2} + o\left(\frac{L^2}{N^2}\right)\right)\right] = N^N\, e^{\frac{L^2}{2N}}\; e^{o\left(\frac{L^2}{N}\right)} \quad .$$

Supposons de plus $L^2 \ll N$. Dans ce cas, l'exponentielle avec le « petit $o$ » tend vers 1. Par ailleurs, dans l'expression de $p_{N,L}$, on peut écrire $\sqrt{N^2-L^2} \simeq N$ et donc

$$p_{N,L} \sim \frac{2}{\sqrt{2\pi N}} e^{-L^2/(2N)} \quad .$$

Remarque
La condition $L^2 \ll N$ utilisée pour parvenir à ce résultat s'écrit aussi

$$\left(\frac{x}{L}\right)^2 \ll \frac{t}{\tau} \quad \text{c'est à dire} \quad x^2 \ll \frac{\ell^2}{\tau}t \quad \text{ou encore} \quad x \ll \sqrt{Dt} \quad .$$

Le membre de droite est la longueur de diffusion à l'instant $t$. Il est décevant de s'appuyer sur une hypothèse aussi restrictive. En effet, la solution de l'équation de la diffusion encadrée plus est valable indépendamment de cette condition.