

THÈSE de DOCTORAT de l'UNIVERSITÉ PARIS VI
PIERRE ET MARIE CURIE

Spécialité :

Modélisation dynamique et statistique des systèmes complexes

présentée

par Pierre-Henry SUET

Pour obtenir le grade de

DOCTEUR de l'UNIVERSITÉ PARIS VI

Sujet de la thèse :

**Poursuite aléatoire d'une cible
et optimisation du temps de recherche.
Applications à la cinétique réactionnelle.**

soutenance prévue le *14 juin 2007*

devant le jury composé de :

Mme Anne-Marie CAZABAT *Examineur*
M. Joël de CONINCK *Rapporteur*
M. Michel MOREAU *Directeur de thèse*
M. Yves POMEAU *Examineur*
M. Janos TOTH *Rapporteur*
M. Pierre TURQ *Examineur*
M. Olivier BÉNICHOU *Co-Directeur de thèse, invité*

Remerciements

Cette thèse a été effectuée au sein du Laboratoire de Physique Théorique de la Matière Condensée, sous la direction de Michel Moreau, en co-direction avec Olivier Bénichou. Je remercie très chaleureusement Bertrand Guillot pour m'avoir accueilli au Laboratoire de Physique Théorique de la Matière Condensée à Paris 6.

Je suis très reconnaissant à Michel Moreau et à Olivier Bénichou qui ont accepté d'encadrer cette thèse et qui m'ont témoigné leur soutien et leur confiance. Ces trois dernières années au cours desquelles j'ai connu des moments difficiles ont été à leur côtés très enrichissantes tant j'ai appris aussi bien sur le plan scientifique qu'humain. Ils ont toujours su me consacrer un peu de leur temps, me guider et me conseiller. Ils sont pour moi des modèles de physiciens. J'ai connu Michel Moreau au cours de la Licence de physique à Paris VI puis je l'ai eu en Maîtrise de physique et enfin en DEA. J'ai donc eu plusieurs fois l'occasion d'apprécier ses qualités intellectuelles et pédagogiques. C'est un professeur en tout point exceptionnel. A cela s'ajoute des qualités de chercheur impressionnantes. Quant à Olivier Bénichou, je l'ai rencontré pour la première fois en DEA où il était chargé de Travaux Dirigés. C'est là aussi d'abord par sa clarté et sa gentillesse que j'ai pu l'apprécier. Enfin il faut bien dire que je n'ai jamais rencontré quelqu'un d'aussi efficace sur le plan scientifique. Son dynamisme et ses compétences scientifiques m'ont clairement permis de mener à bien cette thèse.

Je remercie Raphaël Voituriez pour son aide technique, son soutien et sa bonne humeur constante.

Je suis très sensible à la présence d'Anne-Marie Cazabat dans mon jury de thèse car elle m'a donné la chance d'accomplir cette thèse.

Je remercie Pierre Doussineau que j'ai eu comme professeur de Physique en première et deuxième année de DEUG à Paris VI pour ses cours captivants et pour m'avoir permis de faire du monitorat à Paris VI durant ma thèse. Cela a été une expérience très enrichissante.

Je remercie aussi les secrétaires du Laboratoire, Sylviane Carré, Sylvie Dalla Foggia et Martine Postic pour leurs soins affectueux et attentifs.

Je remercie également tous les professeurs et les chargés de Travaux Dirigés que j'ai eu au cours de mes années d'étude de la Physique à Paris VI.

Enfin, je remercie tous les membres du Laboratoire, tous les amis, et bien sûr mes parents et mon frère...

*A ma sœur Eléonore*¹.

¹1980-2005

Table des matières

Remerciements	iii
General introduction	1

Partie I Research of a hidden target by animals [2], [3], [4]

Introduction to the first part :	
search process in behavioral biology	7
Chapitre 1 Model and equations	11
1.1 Introduction	11
1.2 Mean first passage time	12
1.2.1 Backward Chapman-Kolmogorov equation	12
1.2.2 Computation of the mean first passage time in very simple cases	14
1.3 Ballistic-diffusive model with memory at one dimension	15
Chapitre 2 Resolution of ballistic-diffusive model with memory	19
2.1 Computation of the mean first passage time	19
2.2 Average of the mean first passage time on the position	20
Chapitre 3 Optimization of the mean first passage time	21
3.1 Introduction	21
3.2 Study of the mean first passage time with level lines	21

Chapitre 4 Application to animals	27
4.1 Analysis of experimental data and comparison with theoretical predictions	27
4.2 Conclusion	29

Partie II Intermittent search strategies with memory at one dimension

Introduction to the second part :

memory and intermittent search	33
---------------------------------------	-----------

Chapitre 5 Ballistic-ballistic model with memory at one dimension **35**

5.1 Model and equations	35
5.2 Resolution	36
5.3 Optimization	36

Chapitre 6 Ballistic-diffusive model for an extended target and a perfect reaction **39**

6.1 Introduction	39
6.2 Model and equations	39
6.3 Resolution	40

Chapitre 7 ballistic-diffusive model with an imperfect reaction **43**

7.1 Model and equations	43
7.2 Resolution	44
7.3 Optimization	44
7.3.1 Scaling laws	44
7.3.2 Level lines	45

Chapitre 8 Conclusion of the second part **47**

Partie III intermittent search process without memory and chemical reaction

Introduction to the third part :

reactivity and random processes 51

Chapitre 9 Diffusive-diffusive model at one dimension 53

9.1 Model and equations 53

9.2 Resolution 53

9.3 Optimization 55

Chapitre 10 ballistic-diffusive without memory at one dimension 57

10.1 Model and equations 57

10.2 Resolution 58

10.3 Optimization 59

Chapitre 11 Pearson walks and search processes in confined media [1 61

11.1 Introduction 61

11.2 Mean first exit time 62

11.3 General boundary conditions 63

11.4 Splitting probabilities 65

11.5 Residence time 65

11.6 Generalization 66

11.7 Conclusion 68

Chapitre 12 Chemical reactions and teleportation [5 71

12.1 Introduction 71

12.2 Teleportation in a continuous spherical system 74

12.2.1 Model 74

12.2.2 Mean search time 75

12.2.3 Optimization of the mean search time : 77

12.3 Discrete systems 83

12.3.1 One dimensional lattice	83
12.3.2 2 dim lattice	85
12.4 Mean search time. General results.	86
12.5 Conclusion	90
General conclusion	91
Annexes	93
Annexe A	93
Annexe B	99
B.1 Reactional kinetics	99
B.2 Smoluchowski Model	100
B.3 Link between mean first passage time and reaction rate	102
Publications list	105
Bibliographie	107
	113

General introduction

Cette thèse a pour objet de manière générale l'optimisation du temps de recherche d'une poursuite aléatoire d'une cible dans les sciences du vivant et de la matière ². De même que les systèmes dynamiques déterministes présentent deux visages, l'un à temps continu, l'autre à temps discret, les systèmes dynamiques aléatoires admettent une version à temps discret et une version à temps continu. Ici il s'agira essentiellement des processus stochastiques markoviens ³ à temps continu à une dimension. Les principes de la mécanique nous enseignent que si une particule matérielle se meut dans un champ de forces, l'avenir de la trajectoire ne dépend de la trajectoire passée que par la position et la vitesse à l'instant présent. La notion de processus de Markov [29] est la transposition probabiliste de la même idée. Un système dont l'évolution dépend du hasard est un processus de Markov si la loi de probabilité qui gouverne les états futurs du système ne dépend du passé que par l'état présent.

Que voulons-nous modéliser ? Essentiellement des problèmes issus des sciences du vivant et de la matière. Ainsi, cette thèse a commencé par la tentative de réalisation de nouveaux modèles sur la recherche d'un site cible spécifique sur l'ADN par une protéine enzymatique dans le prolongement de mon stage réalisé au Collège de France. Il s'agit là d'un problème très vaste et complexe qui touche essentiellement à la biologie moléculaire au sein du noyau des cellules pour les eucaryotes ou directement dans le cytosol pour les procaryotes. Résumons brièvement le problème. On s'intéresse à la cinétique de la réaction entre une protéine enzymatique typiquement un facteur de transcription ou un enzyme de restriction et l'ADN. Le problème est décrit de la façon la plus générale possible. Et les enjeux sont évidemment fondamentaux du point de vue biologique car ce problème est directement lié à la régulation de la synthèse protéique par exemple c'est à dire au contrôle de l'expression des gènes. En effet, pour induire ou réprimer la synthèse d'une protéine, il est nécessaire que des protéines appelés facteurs de transcription activent des séquences d'ADN de façon spécifique. Expérimentalement on constate de façon assez surprenante que la cinétique de cette réaction est beaucoup plus rapide que celle réalisée par une simple diffusion. Dans l'expérience réalisé par Bustamante et ses collaborateurs [23] à l'aide d'un Scanning Force Microscope (SFM) qui a l'avantage de pouvoir être utilisé directement dans les liquides, on peut visualiser directement le déplacement d'une E.coli

²La physique (du grec *φυσική*) est étymologiquement la science de la Nature. On peut rappeler aussi qu'Aristote emploie indifféremment les notions de physique, de philosophie naturelle ou même de recherche sur la nature dans son œuvre "la Physique".

³Andrei Andreevich Markov (2 juin 1856 à Razian - 20 juillet 1922 à St Petersburg) était un mathématicien russe. Ses travaux sur la théorie des probabilités l'ont amené à mettre au point les chaînes de Markov qui l'ont rendu célèbre. Ceux-ci représentent les prémices de la théorie du calcul stochastique.

polymerase par rapport à l'ADN qui est lui absorbé sur une surface de mica. On observe alors que la protéine enzymatique alterne en gros deux sortes de mouvements : soit des glissements diffusifs à une dimension le long de l'ADN soit des excursions diffusives à 3 dimensions dans la solution environnante. Récemment les expériences de Stanford ont confirmé ces phénomènes d'association-dissociation, et Slutsky [68] a rappelé que l'optimum était réalisé quand la durée de chaque phénomène était égales. Rappelons enfin que Berg [20, 84] dans son article fondateur avait déjà proposé un tel mécanisme et l'avait validé expérimentalement. Au niveau de la modélisation proprement dite de ce problème en particulier, on n'a pas proposé de nouveaux modèles par rapport à celui réalisé en stage de DEA. En revanche on a étendu ce phénomène intermittent à plusieurs dimensions en considérant cette fois un mouvement de "téléportation" (repositionnement aléatoire) . Ce sera l'objet du chapitre 12 de la troisième partie de ma thèse.

Ensuite, à une toute autre échelle, nous nous sommes intéressés au comportement général de recherche des animaux. Dans la nature, la capacité à pouvoir trouver de la nourriture, et un partenaire pour se reproduire sont des tâches de premières importances pour la survie d'une espèce. De manière générale, nous nous intéresserons aux stratégies de recherche intermittentes. En effet, le comportement de recherche de certains animaux peut se décomposer en deux phases élémentaires : une phase de déplacement rapide pour aller d'un endroit à un autre et une phase de recherche proprement dite. En outre, la cible sera considérée comme un objet immobile et difficile à trouver. Ce sont des restrictions très fortes qu'il faut garder à l'esprit. Par ailleurs, dans toute la thèse la phase de recherche sera modélisée par un processus diffusion au cours duquel l'espace est littéralement scanné par le chercheur. L'utilisation de la diffusion pour la modélisation en biologie et en écologie est maintenant largement acceptée et validée au sein de la communauté scientifique [58, 19]. Parmi les paramètres du modèle, la vitesse v de la phase balistique et le coefficient de diffusion D de la phase de recherche ne sont pas aléatoires dans la nature, ils seront pris comme fixes. Les fréquences λ_i ou les temps τ_i passés dans chaque état varieront de façon aléatoire suivant une loi de Poisson. La quantité physique la plus pertinente qui sera calculée systématiquement dans nos différents modèles est le temps moyen de premier passage en fonction des λ_i . Il représente la durée moyenne au bout de laquelle la cible est atteinte pour la première fois. Il s'agira ensuite d'optimiser ce temps moyen de premier passage en fonction des paramètres ce qui permettra de définir la stratégie optimale de recherche si elle existe.

Cette question de l'optimisation des stratégies de recherche a été formalisée pour la première fois par des mathématiciens au service de l'US-Navy au cours de la seconde guerre mondiale : il s'agissait alors de localiser au plus vite les sous-marins ennemis [43, 73]. La solution proposée consistait à déterminer la meilleure répartition spatiale des efforts de recherche, compatible avec les données disponibles sur la répartition supposée des cibles recherchées. Plus récemment, des prolongements de ces méthodes ont été mis en œuvre au cours d'opérations de sauvetage en mer par les garde-côtes américains. Cependant, ces méthodes ne sont utiles que dans le cas où l'on dispose d'informations a priori sur la position de la cible. Dans le cas contraire où aucune zone de recherche peut être a priori privilégiée, le chercheur doit choisir arbitrairement sa trajectoire. D'autre part, il faut distinguer le cas où le chercheur sait, au moins approximativement, où se trouve la cible et celui où il n'a pas d'information sur sa position. Dans la première éventualité,

l'optimisation du temps de recherche consiste à minimiser une fonctionnelle plus ou moins complexe sous diverses contraintes dépendant spécifiquement du système considéré. Ce problème classique de poursuite optimale a été étudié de longue date et a donné lieu à de nombreux travaux [73, 43]. Les propriétés particulières du chercheur et du milieu y jouant un rôle primordial, il n'y a pas lieu d'attendre des résultats généraux. Nous avons choisi de nous intéresser au cas contraire où la position de la cible est inconnue. Le chercheur doit alors faire usage de dispositifs de détection, et choisir arbitrairement sa trajectoire jusqu'au moment où la cible sera à portée des détecteurs. L'efficacité de ses choix ne peut alors s'évaluer qu'en introduisant des notions de probabilités. Le problème de recherche s'en trouve d'autant plus modifié que les détecteurs sont à courte portée, et que les déplacements arbitraires du chercheur risquent d'être longs. La dynamique propre au chercheur n'est plus seule en cause, mais aussi les détecteurs employés. Ceux-ci peuvent présenter certains points communs. C'est ainsi que la détection, qui exige l'analyse des données collectées, peut être relativement lente par rapport aux déplacements dont le chercheur est capable. Dans ce cas, celui-ci a intérêt à ralentir ses mouvements pour faciliter la détection, ou même à adopter un comportement intermittent comme c'est le cas chez certains animaux, alternant des phases de déplacement sans contrainte et des phases de détection durant lesquelles le déplacement est lent ou nul.

Puis, nous étudierons de manière systématique les processus de recherche intermittent avec mémoire à une dimension. On prendra ainsi quelques modèles toujours très simples reposant sur l'alternance entre différents régimes. Le chercheur reste des temps aléatoires dans chacun des états et ne trouve la cible que dans l'un des régimes. Pour chaque modèle, on calculera le temps de premier passage à la cible, et on essaiera d'optimiser. On aura alors une idée plus claire de l'avantage ou non à utiliser l'intermittence avec mémoire lors de la recherche d'une cible.

Ensuite, dans une troisième partie nous envisagerons les processus de recherche intermittent sans mémoire au travers de deux modèles à une dimension. Ces modèles trouvent leur application dans la réactivité chimique où le "chercheur" est une molécule qui n'a évidemment pas de "mémoire". Nous nous intéresserons aussi à des propriétés de type "première rencontre" qui constitue une première étape indispensable à la compréhension de la cinétique de réactions limitées par la diffusion. Nous présenterons dans cette partie des résultats récents portant sur l'influence du confinement sur ce type de propriétés de rencontre entre partenaires de réaction. Jusqu'à présent, l'essentiel des résultats que nous avons obtenus met en jeu un unique marcheur aléatoire qui évolue en milieu confiné. La question posée est la suivante : démarré d'une partie de la surface du domaine de confinement, combien de temps un marcheur aléatoire met-il pour revenir à cette même partie de la surface du domaine ? La réponse à cette question a récemment été apportée dans le cas d'une marche de Pearson ⁴ par Blanco et Fournier [22]. Nous présenterons dans cette partie les extensions que nous avons apportées à leur résultats. Enfin, nous étudierons un processus de recherche intermittent combinant des phases de diffusion et de "téléportation" (repositionnement aléatoire) dans un système continu sphérique à d dimensions et dans un réseau régulier. Le chercheur alternera des phases diffusives, du-

⁴Une marche aléatoire de Pearson est définie comme une succession de trajectoires balistiques à vitesse constante v , de durées exponentielles de fréquence λ dont la direction est réorientée aléatoirement.

rant lesquelles les cibles peuvent être découvertes, et des phases rapides (téléportation) qui relocalisent aléatoirement le chercheur, mais qui ne permettent pas de détecter les cibles. Nous montrerons que cette alternance peut être favorable pour minimiser le temps de première découverte, et que ce temps peut être optimisé par un choix approprié des temps d'attente de chaque mouvement. La stratégie de recherche optimale sera explicitement obtenue dans le cas continu et le cas discret. Des arguments seront donnés pour montrer que des mouvements intermittents beaucoup plus généraux ont des stratégies de recherche intermittente à d dimensions. Ces résultats peuvent être utiles dans le contexte de la catalyse hétérogène, ou dans de divers exemples biologiques de transport à travers les pores membranaires.

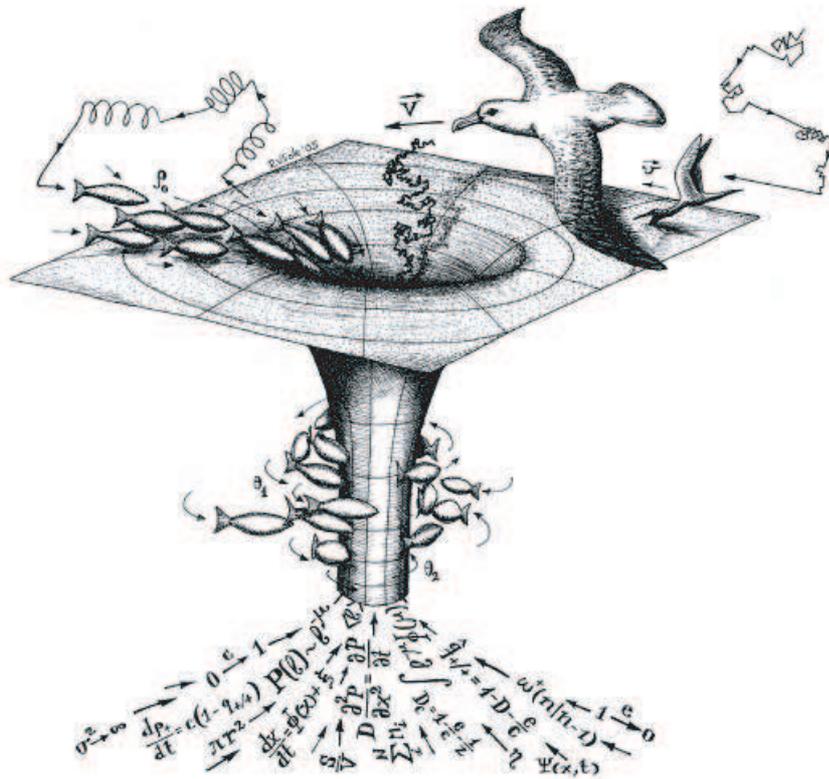


FIG. 1 – Dessin de Ricard Solé

Première partie

Research of a hidden target by animals
[2], [3], [4]

Introduction to the first part : search process in behavioral biology

L'observation du monde animal d'un point de vue éthologique c'est à dire l'étude scientifique du comportement des animaux dans leur milieu naturel, fait apparaître que le mouvement de certains animaux se réalise par intermittence avec des pauses allant de la milliseconde à la minute. Un mouvement sera dit par intermittence quand la force qu'exerce un animal pour se déplacer lui-même est appliquée de façon discontinue et que les pauses durent assez longtemps par rapport à la durée d'un simple mouvement cyclique des membres locomoteurs. Ce mouvement intermittent se trouve dans un très grand nombre d'espèces allant de simples protozoaires jusqu'aux mammifères et dans différents milieux (aquatiques, terrestres ou aériens). Il intervient naturellement lorsqu'il s'agit de rechercher de la nourriture, de poursuivre une proie, de rechercher un partenaire pour la reproduction, de trouver un habitat, de fuir un prédateur, ou tout simplement de se déplacer. Même si a priori cela doit augmenter les dépenses énergétiques, cela permet aux animaux qui ont ce type de comportement d'être plus attentifs au milieu dans lequel ils évoluent. Quand ils font des pauses, ils peuvent plus facilement repérer s'il y a des proies ou des prédateurs présents. Un rouge-gorge par exemple traverse une pelouse en une série de petites courses interrompues par des périodes sans mouvement apparent. Les écureuils quand la chance nous est donnée d'en apercevoir semblent avoir ce même type de mouvements quand ils cherchent de la nourriture sur le sol. La liste des exemples est longue [45, 25, 39, 56].

Cette première partie sera consacrée à un type de mouvement intermittent en particulier, celui de la recherche de nourriture. Il s'agira de modéliser ce phénomène simplement en calculant le temps moyen de premier passage d'un animal pour trouver une proie ou de la nourriture immobile et cachée.

Rappelons tout d'abord qu'il existe d'autres modèles qui reposent notamment sur des considérations énergétiques. Ainsi, en écologie comportementale, l'ensemble des recherches liées à l'Optimal Foraging Theory est jusqu'à présent dominé par le théorème de la valeur marginale, énoncé par Eric Charnov en 1976 [24]. Il s'agit de déterminer les stratégies comportementales optimales que devraient avoir adoptées les animaux au cours de l'évolution, et en particulier le temps optimal d'exploitation des agrégats de ressources disponibles dans l'environnement. Selon la théorie de l'évolution, le processus de sélection naturelle favorise la subsistance des organismes les mieux adaptés à leur environnement. Or l'aptitude darwinienne d'un animal s'apprécie principalement via sa capacité à transmettre son patrimoine génétique aux générations futures. Il est donc conjecturé qu'au

cours de l'évolution, l'animal a adopté un comportement optimal dans son environnement naturel. Afin de corroborer cette hypothèse, les écoéthologues recherchent quel est le meilleur compromis entre d'une part, la consommation d'énergie et la prise de risques, et d'autre part, l'efficacité du comportement. Cette problématique est à l'origine de l'Optimal Foraging Theory. Désormais classique, le modèle théorique de Charnov mène à des prédictions cohérentes en ce sens qu'elles correspondent à l'intuition et de surcroît aux observations expérimentales. Bien que les prédictions auxquelles ce modèle conduit soient le plus souvent vérifiées chez des animaux aussi différents qu'invertébrés, oiseaux, reptiles, et même mammifères, sa valeur n'est qu'heuristique. En effet, il repose sur quelques hypothèses contraignantes. D'une part il s'agit d'un individu isolé. Aucune concurrence avec ses congénères n'est pris en compte. D'autre part il est supposé l'omniscience de l'animal c'est à dire la connaissance des distributions spatiales et qualitatives des ressources dans l'environnement ce qui n'est pas vraiment plausible. Ainsi les contestations et les critiques ne manquent pas [61]. En effet, la détermination de ce que la sélection naturelle maximise vraiment n'est pas évidente. Les animaux ne sont pas manufacturés. Les stratégies optimales peuvent être inaccessibles. Les tests et les hypothèses n'ont pas été clairement vérifiées. Et enfin la valeur heuristique est discutable...

Beaucoup de modèles ont été proposés pour étudier le comportement de recherche des animaux [72, 8, 4, 5, 34, 44, 55, 60, 31]. Mais plus récemment un autre type de modèles de comportements optimaux de recherche reposant sur des vols de Lévy a été développé par Wiswanathan [76, 77, 78, 79, 80, 81, 49, 7, 62]. Ils considèrent une distribution de cibles aléatoires et un chercheur aléatoire (à un état) qui réalise une marche de type Lévy. Plus précisément, les règles du modèle sont les suivantes. Le chercheur commence par choisir au hasard une direction. Il réalise alors un vol balistique dont la longueur l est choisie selon une loi de Lévy $P(l) = 1/l^\mu$. Les deux éventualités suivantes sont alors à considérer : ou bien une cible est rencontrée au cours de cette étape balistique, auquel cas le marcheur interrompt sa phase balistique au moment de la rencontre ; ou alors aucune cible n'est rencontrée, et cette fois le marcheur réalise cette étape balistique en entier. Les auteurs se sont alors intéressés à l'efficacité de ce processus de recherche, définie comme le nombre moyen de cibles détectées par unité de temps. Plus précisément, il s'agit de savoir s'il est possible d'optimiser l'efficacité de la recherche par rapport au paramètre μ de la loi de Lévy. En fait, Viswanathan *et coll.* ont été amenés à considérer deux types de recherche différentes. Le premier cas correspond à une recherche dite « non destructive », ce qui signifie qu'une cible détectée réapparaît à la même position après la visite du chercheur. Cette situation peut être adaptée à la description de cibles générées à un taux régulier, mais elle n'est absolument pas pertinente du point de vue de la question de déterminer la stratégie optimale pour retrouver un objet « caché ». Dans ce cas, les auteurs ont montré que $\mu \approx 2$ correspondait à la marche de Lévy la plus efficace. Le second cas correspond à une recherche dite « destructive », ce qui signifie qu'une cible détectée disparaît après la visite du chercheur. Cette situation est bien la situation pertinente du point de vue de la question qui nous intéresse ici de l'optimisation du taux de rencontre avec des cibles cachées. Dans ce second cas, les auteurs ont montré que la stratégie optimale n'est pas une marche de Lévy, mais en fait une simple trajectoire balistique entre deux cibles consécutives (ce qui correspond à $\mu \rightarrow 1$). Finalement, dans la situation qui nous intéresse de l'optimisation du temps de rencontre avec une cible cachée,

si le chercheur est capable de chercher en même temps qu'il se déplace, la stratégie de recherche optimale est en fait une stratégie purement balistique. La question que nous posons ici est la suivante : que se passe-t-il si le chercheur ne peut pas chercher en même temps qu'il se déplace ? Cette situation est physiquement très importante, sachant que bien souvent le mouvement dégrade significativement la perception et que, par ailleurs, certaines recherches sont intrinsèquement à 2 états.

A l'échelle macroscopique, nous observons donc dans le cas de nombreuses espèces des stratégies de recherche intermittentes. Ce mouvement saltatoire est caractérisé par les observations expérimentales suivantes :

- Ces animaux manifestent une alternance entre des phases de déplacement et des phases qualifiées de "stationnaires". Ces phases stationnaires sont décrites comme des phases où l'animal se déplace peu et qui permettent la détection des proies. La nature précise de ces phases n'a cependant pas été élucidée.
- Les durées de ces phases varient notablement d'une espèce à l'autre
- Il semble exister une corrélation entre les temps passés dans chacune de ces phases.

Nous allons donc proposer un modèle stochastique très simple, visant à rendre compte de ces observations expérimentales, inexplicées jusque là.

Chapitre 1

Model and equations

Contents

1.1	Introduction	11
1.2	Mean first passage time	12
1.2.1	Backward Chapman-Kolmogorov equation	12
1.2.2	Computation of the mean first passage time in very simple cases	14
1.3	Ballistic-diffusive model with memory at one dimension	15

1.1 Introduction

Chercher un objet situé aléatoirement est une des tâches les plus fréquentes pour les organismes vivants, qu'ils'agissent de nourriture, d'un partenaire sexuel pour la reproduction ou d'un abri. Dans ces exemples, le temps de recherche est généralement un facteur limitant qui doit être optimisé pour la survie de l'espèce. La question de la détermination de l'efficacité d'un comportement de recherche est ainsi un problème crucial d'écologie comportementale qui a inspiré de nombreux travaux expérimentaux et théoriques . Cela relève aussi de plus larges domaines comme la théorie des processus stochastiques, de mathématiques appliqués, et de biologie moléculaire.

De nombreuses études d'animaux cherchant de la nourriture pour un grand nombre d'espèces ont montré qu'un mouvement intermittent est communément observé et que les durées de recherche et de déplacement varient grandement. Ce mouvement intermittent, parfois qualifié de saltatoire, est facilement compréhensible dans le cas de cibles difficiles à détecter et peu abondantes. Et puisqu'un mouvement trop rapide altère significativement ses capacités de perception, l'animal doit chercher lentement. Puis, il se déplace rapidement pour pouvoir explorer un nouvel espace et cherche lentement encore. Et ainsi de suite...

Dans la suite, nous supposerons donc que le chercheur peut avoir alternativement deux attitudes distinctes (voir fig. 1) :

- une phase de recherche minutieuse durant laquelle le chercheur explore son voisinage immédiat avec ses organes sensorielles. Cette phase sera modélisée par un "lent" mouve-

ment diffusif c'est à dire une marche aléatoire continue avec un coefficient de diffusion D . La cible est trouvée quand le mouvement atteint la location de la cible pour la première fois.

- une phase de déplacement durant laquelle le chercheur se déplace "rapidement" et où il est incapable de détecter une cible.

Ensuite, nous supposons que le chercheur peut passer d'un état à un autre aléatoirement avec un taux par unité de temps λ_i , et que les proies sont immobiles et distribuées aléatoirement avec une densité uniforme.

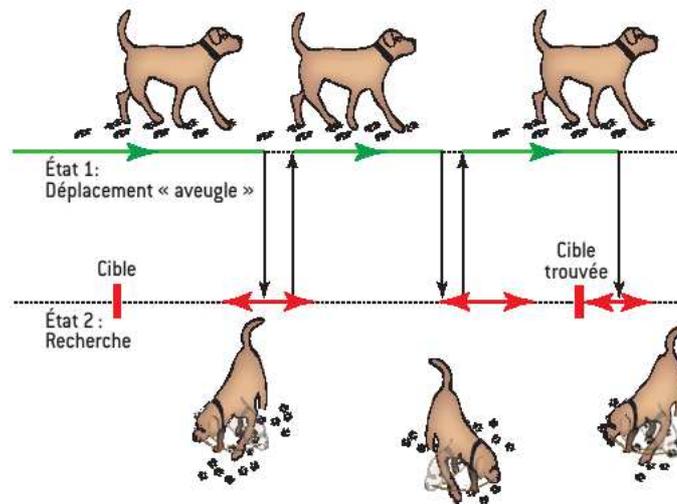


FIG. 1.1 – Un modèle à deux états du comportement de recherche des animaux

Dans un premier temps, nous introduirons la notion fondamentale de temps de premier passage, puis nous présenterons plus en détail notre modèle.

1.2 Mean first passage time

1.2.1 Backward Chapman-Kolmogorov equation

Il sera utilisé des modèles faisant intervenir des processus de Markov c'est-à-dire qu'il sera considéré que l'avenir des processus ne dépend pas de tout le passé mais seulement du présent. Chaque état dure un temps aléatoire suivant une loi de Poisson. Il faut rappeler en outre qu'il sera adopté une approche continue du problème. Il s'agit maintenant de montrer qu'en partant de l'équation différentielle de Chapman ⁵ - Kolmogorov ⁶ vers le

⁵Sydney Chapman (29 juin 1888 à Eccles - 16 juin 1970 à Boulder) est un mathématicien anglais. Il a travaillé sur la théorie cinétique des gaz, en météorologie, en géomagnétisme, en physique ionosphérique et en aréonomie.

⁶Andreï Nikolaïevich Kolmogorov (25 avril 1903 à Tambov - 20 octobre 1987 à Moscou) est un mathématicien russe dont les apports en mathématiques sont considérables. Les physiciens le connaissent pour sa contribution fondamentale en hydrodynamique (1941), et pour le fameux théorème KAM (1954) qui établit la stabilité des orbites quasipériodiques d'un mouvement conservatif classique par perturbations.

passé ou "rétrograde" qui joue un rôle fondamental dans l'utilisation des processus de Markov, il peut être obtenu le temps moyen de première atteinte.

Soit $p(\vec{r}, i, t | \vec{r}', j, t = 0)$ une densité de probabilité de transition, l'équation de Chapman-Kolmogorov vers le passé s'écrit de manière générale :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} p(\vec{r}, i, t | \vec{r}', j, t = 0) = & \overbrace{D_j \nabla_{\vec{r}'}^2 p(\vec{r}, i, t | \vec{r}', j, t = 0) + A_j \nabla_{\vec{r}'} p(\vec{r}, i, t | \vec{r}', j, t = 0)}^{\text{terme de diffusion et d'entraînement}} \\ & + \underbrace{\sum_k [p(\vec{r}, k, t | \vec{r}', j, t = 0) - p(\vec{r}, i, t | \vec{r}', j, t = 0)] W_{kj}}_{\text{terme de sauts}} \end{aligned} \quad (1.1)$$

Il est à noter que les opérateurs mathématiques $\nabla_{\vec{r}'}^2$ et $\nabla_{\vec{r}'}$ agissent sur la variable \vec{r}' de "départ" d'où l'expression "vers le passé" ou "rétrograde".

Soit $\langle t | \vec{r}', i, 0 \rangle$ le temps moyen première atteinte de la cible :

$$\langle t | \vec{r}', i, 0 \rangle = \sum_{j=1}^n \int d\vec{r} \int_0^{+\infty} p(\vec{r}, i, t | \vec{r}', j, 0) dt \quad (1.2)$$

En intégrant l'équation (18) par rapport à t entre $t = 0$ et $t = +\infty$, en supposant que $\lim_{t \rightarrow +\infty} p(\vec{r}, i, t | \vec{r}', j, 0) = 0$, et puisque $p(\vec{r}, i, 0 | \vec{r}', j, 0) = \delta_{i,j} \delta(\vec{r} - \vec{r}')$, il est obtenu :

$$\begin{aligned} -\delta_{i,j} \delta(\vec{r} - \vec{r}') = & D_j \nabla_{\vec{r}'}^2 P(\vec{r}, i | \vec{r}', j, 0) + A_j \nabla_{\vec{r}'} P(\vec{r}, i | \vec{r}', j, 0) \\ & + \sum_k [P(\vec{r}, k | \vec{r}', j, 0) - P(\vec{r}, i | \vec{r}', j, 0)] W_{kj} \end{aligned} \quad (1.3)$$

où $P(\vec{r}, i | \vec{r}', j, 0) = \int_0^{+\infty} p(\vec{r}, i, t | \vec{r}', j, 0) dt$

En intégrant l'équation (20) par rapport \vec{r}' :

$$-\delta_{i,j} = D_j \nabla_{\vec{r}'}^2 \bar{P}(i | \vec{r}', j, 0) + A_j \nabla_{\vec{r}'} \bar{P}(i | \vec{r}', j, 0) + \sum_k [\bar{P}(k | \vec{r}', j, 0) - \bar{P}(i | \vec{r}', j, 0)] W_{kj} \quad (1.4)$$

où $\bar{P}(i | \vec{r}', j, 0) = \int_0^{+\infty} P(\vec{r}, i | \vec{r}', j, 0) dt$

Enfin en sommant sur i cette expression, nous aboutissons à :

$$-1 = D_j \nabla_{\vec{r}'}^2 \langle t | \vec{r}', j, 0 \rangle + A_j \nabla_{\vec{r}'} \langle t | \vec{r}', j, 0 \rangle + \sum_k [\langle t | \vec{r}', k, 0 \rangle - \langle t | \vec{r}', j, 0 \rangle] W_{kj} \quad (1.5)$$

Nous disposons donc maintenant d'une équation faisant intervenir le temps moyen de première atteinte.

$$L_{i_0}^\dagger t(x_0, i_0) + \sum_i \lambda_{i_0} [t(x_0, i_0) - t(x_0, i)] = -1 \quad (1.6)$$

où $L_{i_0}^\dagger = D\partial_{xx} + v\partial_x$ et λ_{i_0} est le taux de transition d'un régime i_0 à un régime i .
conditions aux limites : $t(x_0, i_0) = 0$ si $x_0 = 0$ et $i_0 = 1$

1.2.2 Computation of the mean first passage time in very simple cases

Pour se familiariser avec la notion de temps moyen de premier passage, voyons ce que cela donne dans des cas très simples :

S'il y a seulement un chercheur qui diffuse alors l'équation de Chapman-Kolmogorov vers le passé se réduit à :

$$D \frac{d^2}{dx^2} t(x) = -1 \quad (1.7)$$

donc

$$t(x) = -\frac{x^2}{2D} + Ax + B \quad (1.8)$$

Avec deux bords absorbants i.e. $t(0) = t(L)$, nous avons :

$$t(x) = \frac{1}{2D} x(L-x) \quad (1.9)$$

Après moyenne sur la position :

$$\langle t \rangle = \frac{1}{L} \int_0^L \frac{1}{2D} x(L-x) dx = \frac{L^2}{12D} \quad (1.10)$$

Avec un bord absorbant et un bord réfléchissant i.e. $t(0) = 0$ et $\frac{d}{dx} t(x)|_{x=L}$, il en résulte :

$$t(x) = \frac{1}{2D} x(2L-x) \quad (1.11)$$

Après moyenne sur la position :

$$\langle t \rangle = \frac{1}{L} \int_0^L \frac{1}{2D} x(2L-x) dx = \frac{L^2}{3D} \quad (1.12)$$

Il peut arriver qu'un chercheur commençant en $x = \frac{L}{2}$ par exemple aille d'abord vers L puis reparte en arrière avant d'atteindre sa cible en $x = 0$. Des événements comme celui-là rallonge le temps moyen de premier passage. Ainsi, le temps moyen de premier passage dans ce cas est quatre fois plus long que précédemment.

Ces résultats donnent graphiquement :

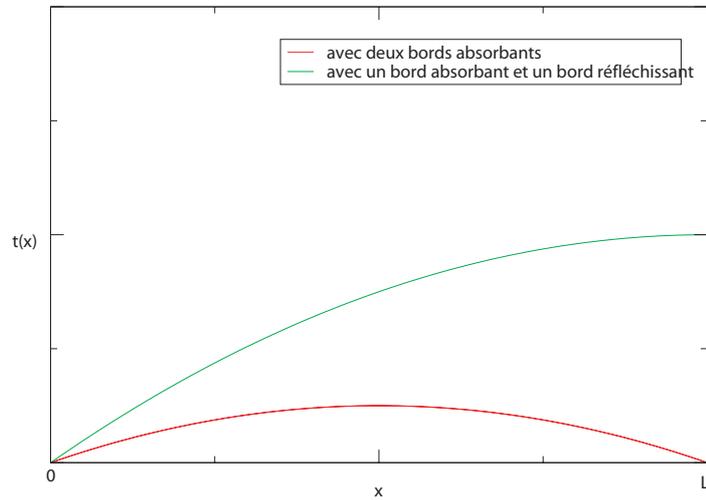


FIG. 1.2 – Représentation graphique du temps moyen de premier passage

1.3 Ballistic-diffusive model with memory at one dimension

Nous présentons ici un modèle idéaliste à une dimension décrivant approximativement le processus de recherche intermittent des animaux.

Considérons dans un premier temps un segment de longueur L avec des bords réfléchissants.

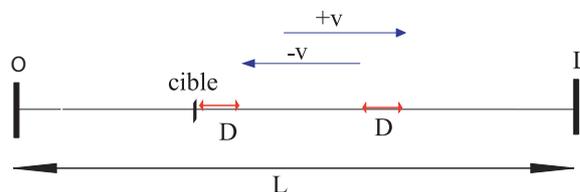


FIG. 1.3 – Représentation schématique du modèle

La position du chercheur le long du segment est noté par x . Le chercheur peut adopter deux régimes dynamiques différents indexés par $i = 1$ ou 2 :

-Pendant le régime 1, le chercheur réalise un simple processus de diffusion ou un mouvement brownien avec une constante de diffusion D , modélisant la phase de recherche intensive et de faible déplacement. Dans ce régime, la cible (nourriture) est découverte lors du premier passage du chercheur à cette position.

-Pendant le régime 2, le chercheur réalise un mouvement balistique avec une vitesse constante v .

L'utilisation du mouvement Brownien ⁷ pour modéliser la phase de recherche est justifiée par le fait que la cible est difficile à trouver. De même, le mouvement balistique est aussi utilisé dans un souci de simplicité. Des modèles plus sophistiqués peuvent être envisagés mais cela ne changera pas qualitativement nos conclusions.

Les durées successives de chaque régime i sont supposées être des variables stochastiques indépendantes T_i :

$$Prob(T_i > t) = e^{-\lambda_i t} = e^{-\frac{t}{\tau_i}} \quad (1.13)$$

λ_i peut être vue comme un taux de transition d'un régime à un autre. τ_i est la durée moyenne d'un de ces régimes.

Quant à la cible, elle est supposée ponctuelle et localisée en $x = 0$.

Nous calculons maintenant analytiquement le temps moyen de premier passage.

En utilisant l'équation de Chapman-Kolmogorov vers le passé, on obtient :

$$D \frac{\partial^2 t(x, 1)}{\partial x^2} + \lambda_1 [t(x, 3) - t(x, 1)] = -1 \quad (1.14)$$

$$v \frac{\partial t(x, 3)}{\partial x} + \lambda_2 [t(x, 1) - t(x, 3)] = -1 \quad (1.15)$$

$$D \frac{\partial^2 t(x, 2)}{\partial x^2} + \lambda_1 [t(x, 4) - t(x, 2)] = -1 \quad (1.16)$$

$$-v \frac{\partial t(x, 4)}{\partial x} + \lambda_2 [t(x, 2) - t(x, 4)] = -1 \quad (1.17)$$

Les conditions aux limites s'écrivent alors :

Nous avons un point absorbant en 0 : $t(0, 1) = 0$ et $t(0, 2) = 0$

et des bords réfléchissants en 0 et L :

pour les états diffusifs cela entraîne

$$\left(\frac{\partial t(x, 1)}{\partial x} \right)_{x=L} = 0$$

$$\left(\frac{\partial t(x, 2)}{\partial x} \right)_{x=L} = 0$$

⁷On attribue "traditionnellement" l'observation de ce mouvement pour la première fois au botaniste Robert Brown (21 décembre 1773 à Montrose - 10 juin 1858 à Londres) en 1827. Il observait alors au microscope le mouvement erratique des grains de pollen en suspension dans l'eau, qui ne sont soumis à aucune autre interaction que des chocs avec les « petites » molécules du fluide environnant. On trouve cependant une description détaillée de ce mouvement dès 1785 par le hollandais Jan Ingenhousz alors qu'il observait le mouvement irrégulier de la poudre de charbon de bois à la surface d'une solution alcoolique.

$$\left(\frac{\partial t(x,1)}{\partial x}\right)_{x=0} = 0$$

$$\left(\frac{\partial t(x,2)}{\partial x}\right)_{x=0} = 0$$

et pour les états balistiques : $t(L, 3) = t(L, 4)$ et $t(0, 3) = t(0, 4)$

Un modèle similaire mais plus simple considère une particule qui se déplace sur un cercle de longueur L , en alternant un mouvement diffusif (phase 1) et un mouvement de vitesse constante v (phase 2). La cible est placée en un point O du cercle, origine des coordonnées curvilignes. Ce modèle peut évidemment représenter l'évolution d'une particule dans un réseau unidimensionnel de cibles régulièrement espacées.

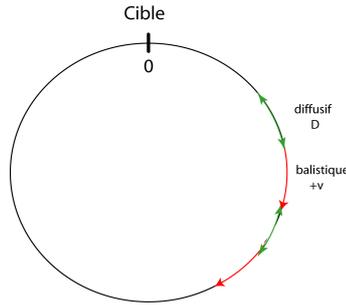


FIG. 1.4 – Représentation schématique du modèle

L'équation de Chapman-Kolmogorov vers le passé donne plus simplement :

$$D \frac{\partial^2 t(x, 1)}{\partial x^2} + \lambda_1 [t(x, 2) - t(x, 1)] = -1 \quad (1.18)$$

$$v \frac{\partial t(x, 2)}{\partial x} + \lambda_2 [t(x, 1) - t(x, 2)] = -1 \quad (1.19)$$

et cela revient avec les conditions aux limites périodiques à :

$$t(0, 1) = 0$$

$$t(L, 1) = 0$$

$$t(0, 2) = t(L, 2)$$

La résolution détaillée de ce problème est étudiée dans le chapitre suivant.

Chapitre 2

Resolution of ballistic-diffusive model with memory

Contents

2.1	Computation of the mean first passage time	19
2.2	Average of the mean first passage time on the position . .	20

2.1 Computation of the mean first passage time

Le système d'équations différentielles (1.18) s'écrit sous forme matricielle, en prenant $t(x, 3) = \frac{d}{dx}t(x, 1)$:

$$\frac{d}{dx} \begin{pmatrix} t(x, 1) \\ t(x, 2) \\ t(x, 3) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ -\frac{\lambda_2}{v} & \frac{\lambda_2}{v} & 0 \\ \frac{\lambda_1}{D} & -\frac{\lambda_1}{D} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} t(x, 1) \\ t(x, 2) \\ t(x, 3) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ -\frac{1}{v} \\ -\frac{1}{D} \end{pmatrix} \quad (2.1)$$

Il peut être facilement résolu :

$$\begin{cases} t(x, 1) = C_1 e^{\alpha x} + C_2 e^{\beta x} + C_3 + \frac{\lambda_1 + \lambda_2}{\lambda_1 v} \left(\frac{\lambda_2 D}{\lambda_1 v} - x \right) + \frac{1}{\lambda_1} \\ t(x, 2) = \frac{\lambda_2}{\beta v} C_1 e^{\alpha x} + \frac{\lambda_2}{\alpha v} C_2 e^{\beta x} + C_3 + \frac{\lambda_1 + \lambda_2}{\lambda_1 v} \left(\frac{\lambda_2 D}{\lambda_1 v} - x \right) \\ t(x, 3) = \alpha C_1 e^{\alpha x} + \beta C_2 e^{\beta x} - \frac{\lambda_1 + \lambda_2}{\lambda_1 v} \end{cases} \quad (2.2)$$

avec $\alpha = \frac{1}{2} \left(\frac{\lambda_2}{v} + \sqrt{\frac{\lambda_2^2}{v^2} + 4 \frac{\lambda_1}{D}} \right)$ et $\beta = \frac{1}{2} \left(\frac{\lambda_2}{v} - \sqrt{\frac{\lambda_2^2}{v^2} + 4 \frac{\lambda_1}{D}} \right)$

Les conditions aux limites périodiques sont :

$$\begin{cases} t(0, 1) = 0 \\ t(L, 1) = 0 \\ t(0, 2) = t(L, 2) \end{cases} \quad (2.3)$$

Après quelques calculs, on trouve :

$$\begin{cases} C_1 = \left(\frac{1}{\lambda_1} + \frac{1}{\lambda_2}\right)L \frac{\beta^2}{\alpha - \beta} \frac{1}{1 - e^{\alpha L}} \\ C_2 = \left(\frac{1}{\lambda_1} + \frac{1}{\lambda_2}\right)L \frac{\alpha^2}{\alpha - \beta} \frac{1}{1 - e^{\beta L}} \\ C_3 = -(C_1 + C_2) - \left(\frac{1}{\lambda_1} + \frac{1}{\lambda_2}\right) \frac{D}{\lambda_1} \frac{\lambda_2^2}{v^2} - \frac{1}{\lambda_1} \end{cases} \quad (2.4)$$

d'où

$$t(x, 1) = \frac{\lambda_1 + \lambda_2}{\lambda_1 \lambda_2} \frac{L}{\beta - \alpha} \left[\beta^2 \frac{1 - e^{\alpha x}}{1 - e^{\alpha L}} - \alpha^2 \frac{1 - e^{\beta x}}{1 - e^{\beta L}} \right] - \frac{\lambda_1 + \lambda_2}{\lambda_1} \frac{x}{v} \quad (2.5)$$

$$t(x, 2) = \frac{\lambda_1 + \lambda_2}{\lambda_1 \lambda_2} \frac{L}{\beta - \alpha} \left[\beta^2 \frac{1 - \frac{\lambda_2}{v} \frac{1}{\beta} e^{\alpha x}}{1 - e^{\alpha L}} - \alpha^2 \frac{1 - \frac{\lambda_2}{v} \frac{1}{\alpha} e^{\beta x}}{1 - e^{\beta L}} \right] - \frac{\lambda_1 + \lambda_2}{\lambda_1} \frac{x}{v} - \frac{1}{\lambda_1} \quad (2.6)$$

avec $\alpha = \frac{1}{2} \left(\frac{\lambda_2}{v} + \sqrt{\frac{\lambda_2^2}{v^2} + 4 \frac{\lambda_1}{D}} \right)$ et $\beta = \frac{1}{2} \left(\frac{\lambda_2}{v} - \sqrt{\frac{\lambda_2^2}{v^2} + 4 \frac{\lambda_1}{D}} \right)$

2.2 Average of the mean first passage time on the position

$$\langle t \rangle = \int_0^L t(x, 1) dx = \frac{\lambda_1 + \lambda_2}{\lambda_1 \lambda_2} \frac{L}{\beta - \alpha} \left[\beta^2 \frac{1 - \frac{e^{\alpha L} - 1}{\alpha L}}{1 - e^{\alpha L}} - \alpha^2 \frac{1 - \frac{e^{\beta L} - 1}{\beta L}}{1 - e^{\beta L}} \right] - \frac{\lambda_1 + \lambda_2}{\lambda_1} \frac{L}{2v} \quad (2.7)$$

Dans la limite de basse densité définie par $L \gg \frac{v}{\lambda_2}, \sqrt{\frac{D}{\lambda_1}}$,

$$\langle t \rangle = \frac{L}{2v} \left(\frac{1}{\lambda_1 \tau} + \frac{1}{\lambda_2 \tau} \right) \frac{\tau^2 \lambda_2^2 + 2 \lambda_1 \tau}{\sqrt{\tau^2 \lambda_2^2 + 4 \tau \lambda_1}} \quad (2.8)$$

où $\tau = \frac{D}{v^2}$ et $\frac{1}{L}$ la densité de cibles. Nous remarquons la dépendance linéaire en L (la distance typique entre les cibles). Cette stratégie est plus efficace qu'une simple diffusion qui évoluerait en L^2 .

En variables adimensionnées, (2.8) s'écrit :

$$\frac{\langle t \rangle}{\tau} = \frac{L}{2v\tau} \left(\frac{X + Y}{Y} \right) \frac{X^2 + 2Y}{\sqrt{X^2 + 4Y}} \quad (2.9)$$

où $X = \frac{1}{\lambda_1 \tau} = \frac{\tau_1}{\tau}$ et $Y = \frac{1}{\lambda_2 \tau} = \frac{\tau_2}{\tau}$ sont les variables adimensionnées des temps.

Chapitre 3

Optimization of the mean first passage time

Contents

3.1	Introduction	21
3.2	Study of the mean first passage time with level lines . . .	21

3.1 Introduction

C'est la partie la plus difficile et la plus technique de notre modélisation. Une première approche peut être basée sur une analyse par loi d'échelles, mais elle ne renseigne pas sur les comportements asymptotiques. L'étude complète qui fait intervenir les courbes de niveaux est donnée dans ce chapitre.

3.2 Study of the mean first passage time with level lines

Avec les notations précédentes, le temps moyen de recherche $\langle t \rangle$ est donné par

$$\frac{\langle t \rangle}{\tau} = \frac{L}{2v\tau} \left(\frac{X+Y}{Y} \right) \frac{X^2 + 2Y}{\sqrt{X^2 + 4Y}} \equiv \frac{L}{2v\tau} C \quad (3.1)$$

En introduisant une nouvelle variable $u = \frac{X}{Y}$, nous obtenons :

$$(1+u) \frac{u+2Y}{\sqrt{u^2+4uY}} = C \quad (3.2)$$

ce qui permet d'exprimer X et Y en fonction de u et C

$$Y = \frac{u}{2} \sqrt{\theta^2 - 1} [\theta + \sqrt{\theta^2 - 1}] \quad (3.3)$$

$$X = uY = \frac{u^2}{2} \sqrt{\theta^2 - 1} [\theta + \sqrt{\theta^2 - 1}] \quad (3.4)$$

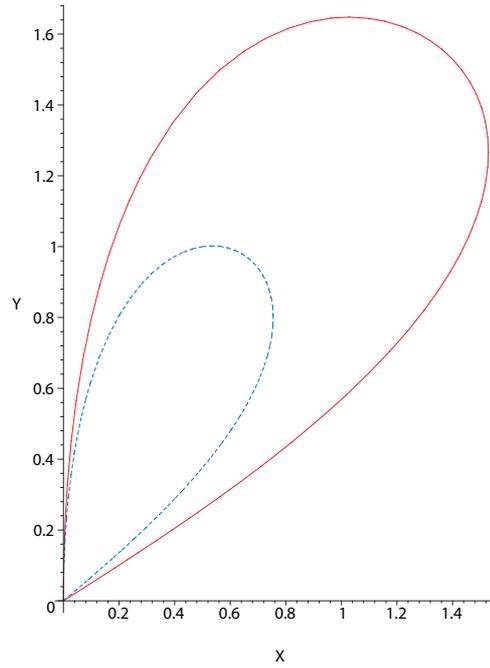


FIG. 3.1 – Courbes de niveaux du temps moyen de recherche. Courbe rouge pleine : $C = 3$. Courbe bleue hachée $C = 2.5$

avec

$$\theta = \frac{C}{1+u} \in [1, C] \quad (3.5)$$

Courbes de niveaux

Il est maintenant facile d'obtenir les courbes de niveaux du temps moyen de recherche dans le plan (X, Y) correspondant à une valeur donnée de C : X et Y sont donnés par (3.3,3.4) et 3.5 en tant que fonction paramétrées par u , avec $u \in [0, C-1]$. Quand $u \rightarrow 0$, X et Y tendent vers 0 et $\frac{X}{Y} \rightarrow 0$: la courbe est tangente à l'axe (Ox) . Quand $u \rightarrow C-1$, X et Y tendent vers 0 et $\frac{X}{Y} \rightarrow C-1$.

On voit que pour une valeur donnée de u , X et Y augmentent avec C et l'intervalle $[0, C-1]$ des valeurs possibles de u augmentent avec C si bien que la ligne de contour Γ_c correspondant à une valeur de C est contenue à l'intérieur de n'importe quelle ligne de contour Γ'_c tel que $C' > C$.

Valeurs maximum de X et Y

Il est clair que pour une valeur donnée de C , X et Y ont pour valeurs maximales respectives X_m et Y_m . A partir de (3.3,3.4,3.5), nous trouvons que

$$\begin{aligned} \frac{dY}{du} &= \frac{1}{2C} \theta [\theta + \sqrt{\theta^2 - 1}] \left[\frac{\theta^3 - C}{\theta \sqrt{\theta^2 - 1}} + \theta - C \right] \\ \frac{dX}{du} &= \frac{1}{2C} \theta [\theta + \sqrt{\theta^2 - 1}] \left[\frac{\theta^3 + C\theta^2 - 2C}{\theta \sqrt{\theta^2 - 1}} + \theta - C \right] \end{aligned} \quad (3.6)$$

A partir de ces expressions, nous pouvons montrer que dX/du et dY/du s'annulent pour $u = u_1$ et $u = u_2$, respectivement, u_1 et u_2 étant des valeurs déterminées de $[0, C - 1]$, correspondantes aux maxima de X et Y .

Courbes de X maximum

Si $dX/du = 0$, nous voyons à partir de (3.6) que

$$C = \frac{\theta^2(\theta + \sqrt{\theta^2 - 1})}{2 - \theta(\theta - \sqrt{\theta^2 - 1})} \text{ et } u = \frac{C}{\theta} - 1 = \frac{2(\theta^2 - 1)}{2 - \theta(\theta - \sqrt{\theta^2 - 1})} \quad (3.7)$$

En insérant l'expression de u dans (3.3,3.4), nous obtenons l'équation de la courbe de X maximum, paramétrée avec $\theta \in [1, \infty]$:

$$Y = (\theta^2 - 1)^{3/2} \frac{\theta + \sqrt{\theta^2 - 1}}{2 - \theta(\theta - \sqrt{\theta^2 - 1})}, \quad X = 2(\theta^2 - 1)^{5/2} \frac{\theta + \sqrt{\theta^2 - 1}}{[2 - \theta(\theta - \sqrt{\theta^2 - 1})]^2} \quad (3.8)$$

On voit que si $\theta \rightarrow 1$, ce qui correspond à $u \rightarrow 0$, ou $X \ll Y$, alors

$$Y \sim \left(\frac{X}{2}\right)^{3/5} \quad (3.9)$$

alors que si $\theta \rightarrow \infty$, alors $u \rightarrow \infty$, $X \gg Y$ et

$$Y \sim \left(\frac{3}{4}\right)^{1/3} X^{2/3} \quad (3.10)$$

Temps de recherche optimal avec τ_1 minimum

Nous avons montré que la plus petite valeur du temps moyen de recherche est $\frac{L}{2v\tau}$, obtenue quand $C = 1$, correspondant à $X = Y = 0$, ou $\tau_1 = \tau_2 = 0$: ce n'est clairement pas une condition réaliste, puisque, pratiquement, le chercheur ne peut pas réaliser des oscillations infiniment rapides entre les phases 1 et 2 ! En fait, il est raisonnable de supposer que le chercheur a besoin d'un temps minimum τ_{1m} , si bien que la durée moyenne de la phase 1, τ_1 , devrait être au moins τ_{1m} . Alors, la plus petite valeur accessible de C correspond à une courbe de niveau Γ_C pour laquelle la valeur maximum de X est $X_m = \tau_{1m}/\tau$. Ainsi, nous obtenons la condition optimale :

$$X = X_m, \quad Y \sim CX^\alpha \quad (3.11)$$

C et α étant donnés par (3.9) or (3.10), ce qui est en bon accord avec les données expérimentales pour une grande classe d'animaux cherchant de la nourriture.

Cependant, il peut être remarqué que la phase 2, correspondante à un mouvement rapide balistique devrait aussi avoir une durée minimum τ_{2m} , nécessaire pour que le chercheur réalise de meilleures performances physiques.

Temps de recherche optimal avec τ_2 minimum

Pour discuter de cette nouvelle situation, nous devons considérer les courbes de Y maximum.

Si $dY/du = 0$, nous voyons à partir de (3.6) que

$$C = \frac{\theta^2(\theta + \sqrt{\theta^2 - 1})}{1 + \theta\sqrt{\theta^2 - 1}} \text{ et } u = \frac{\theta^2 - 1}{1 + \theta\sqrt{\theta^2 - 1}} \quad (3.12)$$

Par (3.3) et (3.12), nous obtenons les équations pour la courbe de Y maximum :

$$Y = \frac{1}{2}(\theta^2 - 1)^{3/2} \frac{\theta + \sqrt{\theta^2 - 1}}{1 + \theta\sqrt{\theta^2 - 1}} \text{ et } X = \frac{1}{2}(\theta^2 - 1)^{5/2} \frac{\theta + \sqrt{\theta^2 - 1}}{[1 + \theta\sqrt{\theta^2 - 1}]^2} \quad (3.13)$$

à partir de laquelle on peut voir que si $\theta \rightarrow 1$, alors $u \rightarrow 0$, $X \ll Y$ et

$$Y \sim 2^{-2/5} X^{3/5} \quad (3.14)$$

et si $\theta \rightarrow \infty$, alors $u \rightarrow 1$, et

$$Y \sim X \quad (3.15)$$

Si nous voulons optimiser le temps de recherche avec la condition que $Y \geq Y_m \equiv \tau_{2m}/\tau$ (et pas de condition sur X), nous devons choisir C de telle manière que la valeur maximum de Y sur la courbe de niveau correspondante est juste τ_{2m}/τ , et nous obtenons les lois d'échelle (3.14,3.15), avec $Y = Y_m$.

Temps optimal de recherche : cas général

En fait, il semble raisonnable d'optimiser le temps de recherche avec les deux conditions

$$X \geq \frac{\tau_{1m}}{\tau}, \quad Y \geq \frac{\tau_{2m}}{\tau} \quad (3.16)$$

Alors, nous devons considérer plusieurs situations, dépendant des valeurs respectives τ_{1m} et τ_{2m} . Evidemment, il est très difficile de savoir ces valeurs pour les animaux. Néanmoins, nous pouvons remarquer que le temps minimum τ_{1m} nécessaire pour la phase de recherche - laquelle nécessite d'analyser l'information contenue dans les signaux faibles ou intriqués fournis par les récepteurs - devrait probablement être plus grand que τ_{2m} dans la phase de déplacement. Ainsi, nous supposons que

$$\tau_{1m} \geq \tau_{2m} \quad (3.17)$$

Alors, la valeur minimum de C correspond à une courbe de niveau Γ_C qui est tangente à la frontière de la région permise ($X \geq \tau_{1m}/\tau$, $Y \geq \tau_{2m}/\tau$) ou qui passe par un point (X_m, Y_m) . Mais le point de contact ne peut pas être un point de Y maximum, donné par (3.13), parce que pour ces points, $u = X/Y$ est toujours plus petit que 1, par (3.12).

Finalement, si le point de contact de Γ_c avec la ligne $X = \tau_{1m}/\tau$ correspond à $u = u_1 \geq \tau_{1m}/\tau_{2m}$, alors la valeur optimale du temps de recherche apparaît pour $X = X_m = \tau_{1m}/\tau$, $Y = Y_m = \tau_{2m}/\tau$: le chercheur devrait passer d'une phase à l'autre aussi fréquemment que possible. A partir de (3.7), cette situation arrive quand le paramètre θ satisfait l'inégalité

$$\frac{2(\theta^2 - 1)}{2 - \theta(\theta - \sqrt{\theta^2 - 1})} \geq \frac{\tau_{1m}}{\tau_{2m}} = \frac{X_m}{Y_m} \equiv u_m \quad (3.18)$$

Utilisant (3.3,3.4) et (3.6), l'inégalité (3.15) peut être écrite

$$4Y_m^2(1 + u_m) - 2Y_mu_m(1 + 2u_m) - u_m^3 \geq 0 \quad (3.19)$$

Ainsi, dans la région (A) du quart positif du plan (X_m, Y_m) où (3.19) est valable, la valeur minimal du temps moyen de recherche est obtenue pour $X = X_m$ et $Y = Y_m$, et aucune loi d'échelle ne devrait être valable. Au contraire, dans la région complémentaire (B) du quart positif du plan, la valeur minimal du temps de recherche est obtenue pour $X = X_m$ et Y d'après (3.9) et (3.10), dépendant si $Y \gg X$ ou $Y \ll X$. On peut noter que la courbe Γ séparant les régions (A) et (B) satisfait les équations

$$Y = \frac{u}{4(1+u)} [1 + 2u + \sqrt{1 + 8u(1+u)}], \quad u = X/Y \quad (3.20)$$

, si bien que, quand $u \rightarrow 0$, X et $Y \rightarrow 0$, avec $Y \sim \left(\frac{1+\sqrt{2}}{2}X\right)^{1/2}$, et quand $u \rightarrow \infty$, X et $Y \rightarrow \infty$, avec $Y \sim \left(\frac{X}{2}\right)^{1/2}$. Quand $u = 1$, $X = Y = \frac{1}{8}[3 + \sqrt{17}] \approx 0.89$

La région (B), où les lois d'échelle tiennent, se trouve à l'intérieur de Γ . Si la condition heuristique mais raisonnable (3.14) $Y_m \leq X_m$ est satisfaite, tous les points (X_m, Y_m) sont dans (B) pour $X_m \leq 0.89$ et la loi d'échelle (3.9) est valable.

Par ailleurs, pour $X_m \geq 0.89$, la loi d'échelle (3.10) est seulement justifiée si (X_m, Y_m) se trouve dans la région (B), i.e. si, pour $X_m \gg 1$, $Y_m \leq (X_m/2)^{1/2}$, lequel est considérablement plus fort que (3.14).

Après quelques calculs, nous montrons qu'il y a un seul minimum quand

$$\lambda_1 = \lambda_{1max} \quad (3.21)$$

$$\lambda_2^5 \lambda_1 + 6\lambda_2^3 \lambda_1 - \frac{8}{\tau^2} \lambda_1^3 = 0 \quad (3.22)$$

En écrivant $(\lambda_2 \tau) \approx C(\lambda_1 \tau)^\nu$, une simple analyse des lois d'échelles montre que l'équation donne deux différents régimes :

- si $\lambda_1 \tau \ll 1$ (regime S), nous trouvons

$$\lambda_1 = \lambda_{1max} \quad (3.23)$$

$$\lambda_2 \approx \left(\frac{2\sqrt{2}}{\tau}\right)^{\frac{1}{3}} \lambda_1^{\frac{2}{3}} \quad (3.24)$$

et le prédateur passe plus de temps à chercher qu'à se déplacer.

- si $\lambda_1 \tau \gg 1$ (regime M), nous avons

$$\lambda_1 = \lambda_{1max} \quad (3.25)$$

$$\lambda_2 \approx \left(\frac{8}{\tau^2}\right)^{\frac{1}{5}} \lambda_1^{\frac{3}{5}} \quad (3.26)$$

et le chercheur passe plus de temps à se déplacer qu' à chercher.

Nous aboutissons à deux lois d'échelle dépendant de λ_1 et de λ_2 avec des exposants très proches $\frac{2}{3}$ et $\frac{3}{5}$. La valeur seuil $\frac{1}{\tau}$ a la signification d'une limite de recouvrement : τ est la durée pour laquelle la distance limite couverte est la même pour les états 1 et 2. La condition de non recouvrement est déterminée en formant le rapport ρ de la longueur scannée en phase de recherche sur la distance couverte en phase de déplacement $\rho = \frac{\lambda_2}{v} \sqrt{\frac{D}{\lambda_1}}$. Dans le régime S, $\rho \approx (\lambda_1 \tau)^{\frac{1}{6}} < 1$ et il n'y a pas de recouvrement. Il est remarquable que dans ce régime, ρ peut être petit, ce qui veut dire que l'espace scannée n'est pas connexe mais laisse des trous d'espace non visités. En revanche, dans le régime M, nous avons $\rho \approx (\lambda_1 \tau)^{\frac{1}{10}} > 1$ et un recouvrement peut arriver, ce qui semble contre intuitif pour une exploration optimale. Néanmoins la puissance $\frac{1}{10}$ assure que ρ n'est jamais plus grand que 1 et la trajectoire optimale explore toujours des espaces non scannés de taille significative.

Chapitre 4

Application to animals

Contents

4.1	Analysis of experimental data and comparison with theoretical predictions	27
4.2	Conclusion	29

4.1 Analysis of experimental data and comparison with theoretical predictions

De nombreuses études sur le comportement des animaux ont montré que le comportement intermittent apparaissait sous différentes formes et chez beaucoup d'espèces. Dans cette section nous allons analyser les données expérimentales issues d'O'Brien *et al.* [56], et Kramer *et al.* [45]. Ces études fournissent la durée moyenne (et donc son inverse le taux) des phases de recherche et de déplacement pour 18 espèces différentes incluant des poissons planctonivores [56], des oiseaux se nourrissant sur le sol [25], des lézards [39] qui utilisent tous une stratégie de recherche intermittente. Les taux correspondants λ_1 vont de 0.1 à 100 Hz sans corrélation systématique avec la taille des animaux. Nous supposons que toutes ces espèces adoptent la stratégie optimale obtenue dans le cadre du modèle stochastique exposé précédemment. Cette hypothèse forte repose sur l'idée que l'évolution a eu tendance à sélectionner les comportements de recherche optimaux de ces animaux (pour autant qu'ils soient décrits par le modèle stochastique décrit ici!). On peut alors obtenir à partir de la relation optimale 3.22) et des fréquences mesurées le temps caractéristique inconnu τ . De manière assez inattendue, il se trouve que l'histogramme de $\log(\tau)$, représenté sur la figure (4.1), à la forme d'une distribution bimodale. Le premier pic (autour de $t = 0.1$ s.) correspond à des chercheurs dans le régime S , et le deuxième pic (autour de $t = 25$ s.) à des chercheurs dans le régime M . Un résultat surprenant est qu'en fait les animaux représentés par le pic de gauche sont ceux appartenant au groupe S défini précédemment, passant plus de temps à chercher qu'à se déplacer. Alternativement, le pic de droite correspond à l'ensemble des animaux, noté M précédemment, passant plus de temps à se déplacer qu'à chercher. Finalement, $\log(\tau)$ prend essentiellement deux valeurs,

et est grossièrement constant pour chacun des deux ensembles d'animaux S et M .

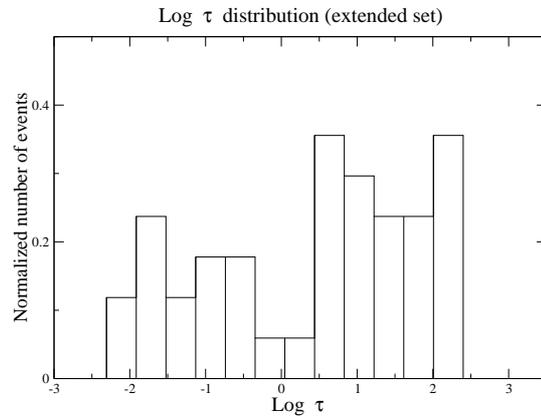


FIG. 4.1 – Histogramme des valeurs de $\log(\tau)$ pour les animaux au comportement saltatoire. Le premier pic autour de 0.1 s correspond aux animaux appartenant au groupe S. Le second pic autour de 25 s correspond aux animaux appartenant au groupe M.

La deuxième figure est la représentation graphique en log-log des données λ_1 et λ_2 des sets S et M . Les deux sets sont fortement corrélés avec un coefficient de corrélation $r > 0.9$ comme le montre les régressions linéaires. En outre, leur pente sont en bon accord avec nos prédictions théoriques à savoir $\frac{3}{5}$ pour M (pente expérimentale : 0.7 ± 0.1) et $\frac{2}{3}$ pour S (pente expérimentale : 0.6 ± 0.1). L'accord quantitatif est donc raisonnablement bon. Ce bon agrément suggère que de nombreuses espèces minimisent leur temps de recherche de nourriture selon la stratégie intermittente décrite par notre modèle et met en avant l'idée que la cinétique des trajectoires est un facteur prédominant optimisé par la sélection naturelle.

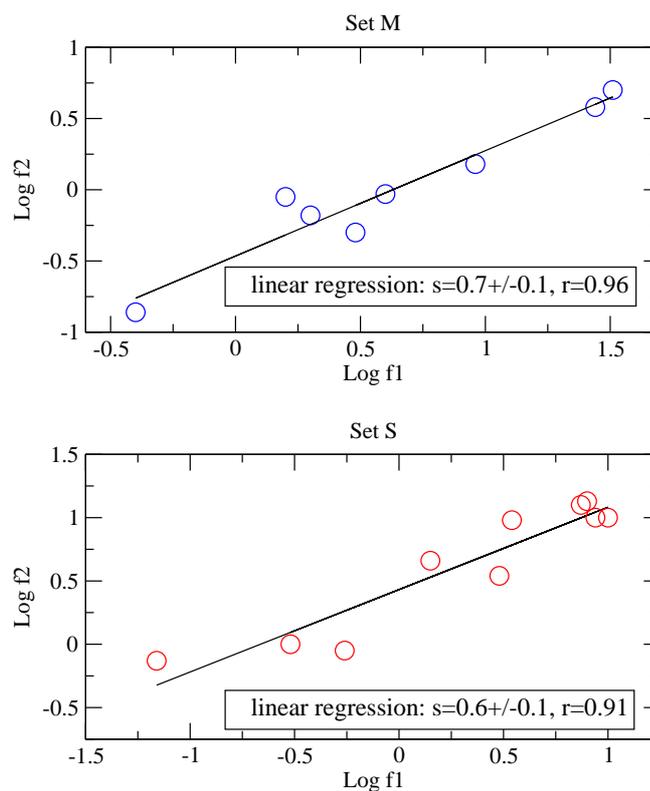


FIG. 4.2 – Courbes log-log de la fréquence expérimentale f_2 en fonction de la fréquence expérimentale f_1 : en haut les animaux du groupe S et en bas les animaux du groupe M . Chaque point correspond à un animal différent. Les droites sont les régressions linéaires des points expérimentaux.

4.2 Conclusion

Nous avons vu qu'il existe de nombreux modèles étudiant le comportement de recherche de nourriture des animaux. Les premiers étaient basés sur le théorème de la valeur marginale de Charnov (1976) en prenant en compte le gain net d'énergie, la prise de risque et l'efficacité du comportement. Cette approche, cependant, met en jeu des caractéristiques spécifiques de chaque espèce et ne permet guère d'obtenir des résultats généraux. Plus récemment, il y a eu la publication de plusieurs articles s'appuyant sur des vols de Lévy donnant des résultats généraux mais de portée limitée : les stratégies de Lévy ne sont optimales que dans le cas très artificiel de cibles "revisitables", c'est à dire qui sont régénérées au même endroit après avoir été visitées par le chercheur.

Les travaux présentés ici sont une alternative aux approches précédentes. Dans cette section nous nous sommes posés la question de déterminer la stratégie la plus rapide pour trouver une cible. Cette question d'intérêt général a été abordée dans le cas d'animaux cherchant leur nourriture, pour lequel de nombreuses données numériques sont disponibles. Nous avons proposé et résolu un modèle stochastique à deux états de la recherche de cible,

basée sur une modélisation du mécanisme de perception par de la diffusion. Ce modèle fournit une relation en lois de puissance entre les temps caractéristiques passés dans chaque état qui s'accorde bien avec les résultats expérimentaux. Notre modèle suggère qu'au cours de l'évolution les animaux qui ont adopté un mouvement intermittent ont optimisé ainsi leur temps de recherche de cibles cachées aléatoirement suivant les principes de l'évolution des espèces de Darwin ⁸

Soulignons que les stratégies de recherche intermittentes sont observées aussi à l'échelle microscopique dans la cas d'une protéine enzymatique qui recherche un site cible sur l'ADN. Doit on en déduire qu'il s'agit d'un mécanisme de recherche universel ? Au delà du détail de la dynamique mise en jeu, les deux exemples mentionnés ici (animaux cherchant de la nourriture et protéine cherchant un site cible) relèvent en fait d'un même schéma de recherche, combinant deux phases :

- la première phase est une phase “lente” mais réactive (permettant de trouver la cible) : c'est la cas de la diffusion 1D le long de l'ADN ou des phases de recherche attentive dans le cas des animaux ;
- la deuxième phase est une phase “rapide” mais non réactive (ne permettant pas de trouver la cible) : c'est la cas des excursions en volume pour la protéine ou des phases de déplacement pour des animaux.

Rappelons que c'est en partie grâce au hasard que les espèces ou les cellules s'adaptent à leur environnement. Les processus de recherche intermittents fournissent donc un nouvel exemple du rôle du hasard dans l'évolution et dans les processus naturels.

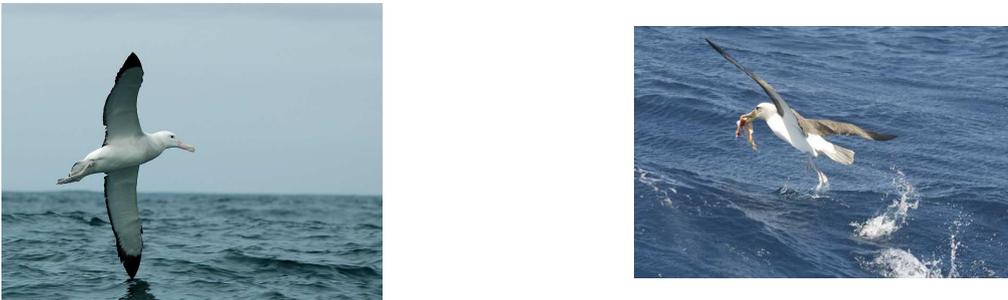


FIG. 4.3 – La chasse de l'albatros

⁸Charles Robert Darwin (12 février 1809 à Shrewsbury - 19 avril 1882 à Downe) est un biologiste britannique. Il développa la première théorie d'un mécanisme biologique de l'évolution, la sélection naturelle, qui explique la diversification de la vie à travers un lent processus de modification par l'adaptation.

Deuxième partie

Intermittent search strategies with memory at one dimension

Introduction to the second part : memory and intermittent search

Le sujet de cette deuxième partie est l'étude systématique de plusieurs modèles très simples du point de vue de la modélisation, du même type que celui introduit pour les animaux qui recherchent de la nourriture de façon intermittente. Aussi, tous ces modèles reposent sur l'alternance entre une phase de recherche, modélisée soit par une marche aléatoire brownienne soit par un mouvement balistique, et une ou plusieurs phases de déplacement diffusives ou balistiques. Par ailleurs, on étudiera aussi le cas d'une réaction imparfaite et d'une cible étendue. A chaque fois, on calculera le temps moyen de premier passage, pour étudier l'optimisation de ce temps moyen de premier passage en fonction des paramètres pertinents du système c'est à dire ici les fréquences ou les temps correspondant à chaque régime. Les calculs deviennent malheureusement vite compliqués analytiquement...

Dans cette partie, nous allons donc en particulier approfondir l'étude des recherches intermittentes et essayer de répondre aux questions suivantes :

- Quand est-il intéressant d'adopter une stratégie intermittente, i.e. d'interrompre les phases de recherche attentive par des phases de déplacement pur ?
- Et le cas échéant, comment répartir son temps entre les phases définies précédemment pour être le plus efficace possible ?

A ces questions primordiales pour toute application à des problèmes pratiques, il est difficile de répondre précisément et de manière générale. C'est pourquoi nous devons nous appuyer sur le traitement explicite de différentes situations typiques. De cette vision fragmentaire du problème, nous verrons cependant apparaître certains comportements généraux qui fournissent quelques éléments de réponse aux questions précédentes.

Mémoire et recherche intermittente

L'étude du modèle intermittent très simple développé dans la première partie fait apparaître quelques conclusions relativement surprenantes, qui semblent corroborées par les observations effectuées sur de nombreuses espèces animales. Un trait caractéristique de ce modèle est que le chercheur conserve la mémoire de sa vitesse d'une phase balistique à l'autre. Cette hypothèse est assez bien vérifiée pour les animaux considérés, et elle paraît assez logique : puisque la détection de la cible à courte distance est sans erreur (la cible est trouvée instantanément et avec certitude) lorsque le chercheur parvient à la position de la cible dans son état actif, celui-ci doit scruter des régions encore inexplorées lorsqu'il se trouve dans cet état, et il n'a donc aucun intérêt à revenir sur ses pas pendant ses phases de déplacement rapide. Cependant pour conserver la mémoire de sa vitesse,

certaines capacités physiques et mentales sont nécessaires. La plupart des animaux suffisamment élaborés les possèdent, mais il n'en va pas nécessairement de même pour "les chercheurs" élémentaires tels que les bactéries et les molécules. Afin d'étudier l'effet de cette mémoire éventuellement possédée par le chercheur, nous allons dans ce chapitre examiner les propriétés optimales de différents modèles où le chercheur fait preuve de mémoire. Nous considérerons d'autres modèles où, au contraire le chercheur ne possède pas cette mémoire spatiale dans la partie IV.

Chapitre 5

Ballistic-ballistic model with memory at one dimension

Contents

5.1	Model and equations	35
5.2	Resolution	36
5.3	Optimization	36

5.1 Model and equations

Le premier modèle que l'on va considérer ici est un modèle exclusivement balistique où un chercheur alterne entre deux phases de vitesse v_1 (régime 1) et v_2 (régime 2). Mais il ne peut trouver la cible que pendant le régime 1 de vitesse v_1 . Le chercheur passe un temps aléatoire de durée exponentielle dans chaque état. La question est de savoir si il existe une stratégie intermittente optimale en fonction des fréquences λ_i avec $i = 1, \dots, 2$. Pour cela on va s'intéresser au temps moyen de premier passage au niveau de la cible. En utilisant l'équation différentielle de Chapman-Kolmogorov vers le passé, il est obtenu :

$$v_1 \frac{\partial t(x, 1)}{\partial x} + \lambda_1 [t(x, 2) - t(x, 1)] = -1 \quad (5.1)$$

$$v_2 \frac{\partial t(x, 2)}{\partial x} + \lambda_2 [t(x, 1) - t(x, 2)] = -1 \quad (5.2)$$

Les conditions aux limites périodiques sont :

$$t(L, 1) = 0$$

$$t(0, 2) = t(L, 2)$$

5.2 Resolution

Les solutions s'écrivent sous la forme :

$$t(x, 1) = C_1 e^{\alpha x} + C_2 - \left[\frac{1}{v_1} + \frac{1}{\alpha} \frac{\lambda_1}{v_1} \left(-\frac{1}{v_1} + \frac{1}{v_2} \right) \right] x - \frac{1}{\alpha^2} \frac{\lambda_1}{v_1} \left(-\frac{1}{v_1} + \frac{1}{v_2} \right) \quad (5.3)$$

$$t(x, 2) = -\frac{v_1 \lambda_2}{\lambda_1 v_2} C_1 e^{\alpha x} + C_2 - \left[\frac{1}{v_1} + \frac{1}{\alpha} \frac{\lambda_1}{v_1} \left(-\frac{1}{v_1} + \frac{1}{v_2} \right) \right] x + \frac{1}{\alpha^2} \frac{\lambda_2}{v_2} \left(-\frac{1}{v_1} + \frac{1}{v_2} \right) \quad (5.4)$$

avec $\alpha = \frac{\lambda_1}{v_1} + \frac{\lambda_2}{v_2}$

Calculons la moyenne sur la position initiale x :

$$\langle t \rangle = \frac{\frac{1}{v_1} + \frac{1}{\alpha} \frac{\lambda_1}{v_1} \left(-\frac{1}{v_1} + \frac{1}{v_2} \right)}{\frac{\lambda_2 v_1}{v_2 \lambda_1}} \frac{L e^{\alpha L} - \frac{e^{\alpha L} - 1}{\alpha}}{e^{\alpha L} - 1} + \left[\frac{1}{v_1} + \frac{1}{\alpha} \frac{\lambda_1}{v_1} \left(-\frac{1}{v_1} + \frac{1}{v_2} \right) \right] L/2 \quad (5.5)$$

5.3 Optimization

On trouve numériquement que $\langle t \rangle$ est minimum par rapport à λ_1 quand $\lambda_1 = 0$, et est minimum par rapport à λ_2 en prenant λ_2 aussi grand que possible. le chercheur a donc toujours intérêt, dans ce cas, à rester dans la phase réactive 1, comme le suggère l'intuition. S'il ne peut le faire, et si les circonstances pratiques imposent une valeur finie de λ_1 , il doit rester le moins longtemps possible dans la phase 2. Ce modèle ne conduit donc pas à des comportements non triviaux si les fréquences λ_1 et λ_2 peuvent être choisies indépendamment : dans ce cas, l'intermittence entre les phases 1 et 2 n'est pas une stratégie utile pour diminuer le temps de recherche.

Voici ce que cela donne graphiquement.

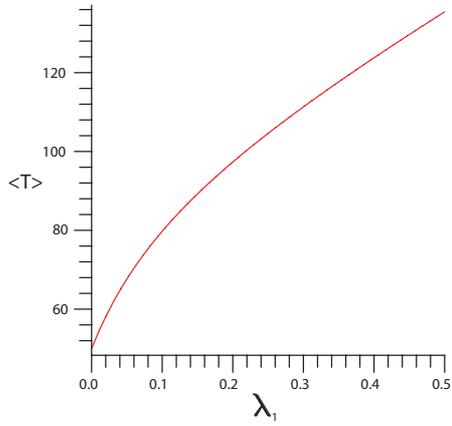


FIG. 5.1 – Graphe de $\langle t \rangle$ en fonction de λ_1 avec $v_1 = 1$, $v_2 = 10$, $\lambda_2 = 1$, $L=100$.

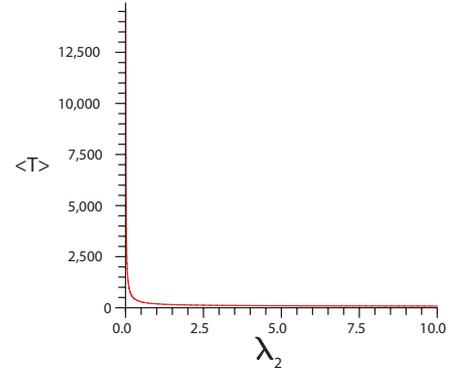


FIG. 5.2 – Graphe de $\langle t \rangle$ en fonction de λ_2 avec $v_1 = 1$, $v_2 = 10$, $\lambda_1 = 1$, $L=100$.

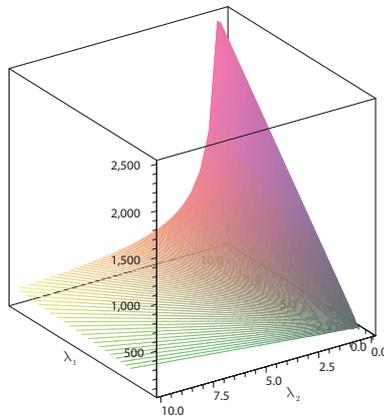


FIG. 5.3 – Graphe de $\langle t \rangle$ en fonction de λ_1 et λ_2 avec $v_1 = 1$, $v_2 = 10$, $L=100$.

Chapitre 6

Ballistic-diffusive model for an extended target and a perfect reaction

Contents

6.1	Introduction	39
6.2	Model and equations	39
6.3	Resolution	40

6.1 Introduction

Le modèle diffusif-balistique avec mémoire pour une cible ponctuelle a été traité de manière détaillé dans la partie I. Nous considérons ici et dans le chapitre suivant deux généralisations ce modèle, supposant d'abord que la cible a une dimension finie, puis que la détection de cette cible n'est pas instantannée.

6.2 Model and equations

Considérons un chercheur alternant entre des phases diffusives (régime 1) et des phases balistiques (régime 2) le long d'un cercle de longueur L . Comme précédemment, il reste un temps aléatoire dans chacune des phases selon une loi exponentielle. La grande nouveauté par rapport aux modèles précédents est que la cible est maintenant étendue de taille a . Par ailleurs la réaction est supposée parfaite c'est à dire instantannée dès que le chercheur se trouve dans la zone de longueur a .

L'équation différentielle de Chapman-Kolmogorov vers le passé nous donne donc le système d'équations différentielles à résoudre :

$$D \frac{\partial^2 t(x, 1)}{\partial x^2} + \lambda_1 [t(x, 2) - t(x, 1)] = -1 \tag{6.1}$$

$$v \frac{\partial t(x, 2)}{\partial x} + \lambda_2 [t(x, 1) - t(x, 2)] = -1 \tag{6.2}$$

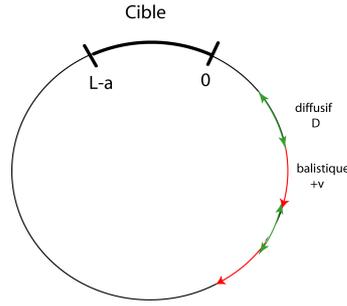


FIG. 6.1 – Schéma avec les conditions aux limites périodiques pour une cible étendue

Les conditions de raccordement s'écrivent :

$$\begin{cases} t(0^+, 1) = 0 \\ t(0^+, 2) = t(L, 2) \\ t(L - a, 1) = 0 \\ t((L - a)^-, 2) = t((L - a)^+, 2) \end{cases}$$

6.3 Resolution

On montre que suivant le segment, les solutions sont de la forme :

Pour le segment $[0, L - a]$:

$$t(x, 1) = C_1 e^{\alpha x} + C_2 e^{\beta x} + C_3 + \frac{\lambda_1 + \lambda_2}{\lambda_1 v} \left(\frac{\lambda_2 D}{\lambda_1 v} - x \right) + \frac{1}{\lambda_1} \quad (6.3)$$

$$t(x, 2) = \frac{\lambda_2}{\beta v} C_1 e^{\alpha x} + \frac{\lambda_2}{\alpha v} C_2 e^{\beta x} + C_3 + \frac{\lambda_1 + \lambda_2}{\lambda_1 v} \left(\frac{\lambda_2 D}{\lambda_1 v} - x \right) \quad (6.4)$$

avec les constantes $\alpha = \frac{1}{2} \left(\frac{\lambda_2}{v} + \sqrt{\frac{\lambda_2^2}{v^2} + 4 \frac{\lambda_1}{D}} \right)$ et $\beta = \frac{1}{2} \left(\frac{\lambda_2}{v} - \sqrt{\frac{\lambda_2^2}{v^2} + 4 \frac{\lambda_1}{D}} \right)$

Pour le segment $[L - a, L]$:

$$t(x, 1) = 0 \quad (6.5)$$

$$t(x, 2) = C_4 e^{\frac{\lambda_2}{v} x} + \frac{1}{\lambda_2} \quad (6.6)$$

Pour déterminer les constantes C_i avec $i = 1, \dots, 4$ qui apparaissent dans les expressions des solutions, on a donc à résoudre le système d'équations

$$C_1 + C_2 + C_3 + \frac{(\lambda_1 + \lambda_2) \lambda_2 D}{(\lambda_1 v)^2} + \frac{1}{\lambda_1} = 0 \quad (6.7)$$

$$C_1 e^{\alpha(L-a)} + C_2 e^{\beta(L-a)} + C_3 + \frac{\lambda_1 + \lambda_2}{\lambda_1 v} \left[\frac{\lambda_2 D}{\lambda_1 v} - (L - a) \right] + \frac{1}{\lambda_1} = 0 \quad (6.8)$$

$$\frac{\lambda_2}{\beta v} C_1 + \frac{\lambda_2}{\alpha v} C_2 + C_3 + \frac{(\lambda_1 + \lambda_2)\lambda_2 D}{(\lambda_1 v)^2} = C_4 e^{\frac{\lambda_2}{v} L} + \frac{1}{\lambda_2} \quad (6.9)$$

$$\frac{\lambda_2}{\beta v} C_1 e^{\alpha(L-a)} + \frac{\lambda_2}{\alpha v} C_2 e^{\beta(L-a)} + C_3 + \lambda_2 \lambda_1 v \left[\frac{\lambda_2 D}{\lambda_1 v} - (L-a) \right] = C_4 e^{\frac{\lambda_2}{v}(L-a)} + \frac{1}{\lambda_2} \quad (6.10)$$

Après quelques calculs assez longs, on trouve la valeur des constantes C_1 , C_2 et C_3 en fonction de wC_4 et f qui sont définis juste après.

$$C_1 = \frac{\alpha\beta}{\beta - \alpha} \frac{v}{\lambda_2} \frac{1}{1 - e^{\alpha(L-a)}} \left[-wC_4 + f \left(\frac{\lambda_2}{\alpha v} - 1 \right) \right] \quad (6.11)$$

$$C_2 = \frac{\alpha\beta}{\beta - \alpha} \frac{v}{\lambda_2} \frac{1}{1 - e^{\beta(L-a)}} \left[wC_4 + f \left(1 - \frac{\lambda_2}{\beta v} \right) \right] \quad (6.12)$$

avec

$$wC_4 = \frac{\frac{v}{\lambda_2} \frac{\beta\alpha}{\beta - \alpha} e \left[\frac{1}{1 - e^{\alpha(L-a)}} - \frac{1}{1 - e^{\beta(L-a)}} \right] - \frac{1}{\lambda_1} - \frac{1}{\lambda_2}}{\frac{1}{\beta - \alpha} \frac{v}{\lambda_2} \left[\frac{\alpha^2}{1 - e^{\alpha(L-a)}} - \frac{\beta^2}{1 - e^{\beta(L-a)}} \right] + \frac{1}{1 - e^{-\frac{\lambda_2}{v} a}}} \quad (6.13)$$

et

$$f = (a - L) \frac{\lambda_1 + \lambda_2}{\lambda_1 v} \quad (6.14)$$

Soit $\langle t \rangle$ le temps moyen de premier passage moyenné sur la position initiale x du chercheur, supposé uniformément distribuée sur le cercle $[0, L]$. Après avoir exprimé les constantes C_1 et C_2 en fonction de wC_4 , puis moyenné sur la position, on obtient

$$\begin{aligned} \langle t \rangle = \langle t(x, 1) \rangle &= \frac{1}{L} \int_0^{L-a} t(x, 1) dx = \frac{1}{\beta - \alpha} \frac{v}{\lambda_2} \left[wC_4 (\alpha + \beta) - f \left(\frac{\alpha^2}{\beta} + \frac{\beta^2}{\alpha} \right) \right] \\ &+ (a - L) \frac{\alpha\beta}{\beta - \alpha} \frac{v}{\lambda_2} wC_4 \left[\frac{1}{1 - e^{\beta(L-a)}} - \frac{1}{1 - e^{\alpha(L-a)}} \right] \\ &+ f \left[\frac{\frac{\beta}{\alpha}}{1 - e^{\beta(L-a)}} - \frac{\frac{\alpha}{\beta}}{1 - e^{\alpha(L-a)}} \right] - \frac{\lambda_1 + \lambda_2}{\lambda_1 v} \frac{1}{2} (L - a)^2 \end{aligned} \quad (6.15)$$

Dans la limite de basse densité définie par : $L \gg \frac{v}{\lambda_2}, \sqrt{\frac{D}{\lambda_1}}, \frac{\lambda_2 D}{\lambda_1 v}$, la constante wC_4 s'écrit

$$wC_4 \sim \frac{-\alpha\beta f \frac{v}{\lambda_2} \frac{1}{\beta - \alpha}}{-\frac{1}{\beta - \alpha} \frac{v}{\lambda_2} \beta^2 + \frac{1}{1 - e^{-\frac{\lambda_2}{v} a}}} \sim \alpha\beta \left[(a - L) \frac{\lambda_1 + \lambda_2}{\lambda_1 v} \right] \frac{1}{\frac{1}{\beta - \alpha} \frac{v}{\lambda_2} \beta^2 + \frac{1}{1 - e^{-\frac{\lambda_2}{v} a}}} \quad (6.16)$$

D'où

$$L \langle t \rangle \sim (a - L) \frac{\alpha\beta}{\beta - \alpha} \frac{v}{\lambda_2} \left[(a - L) \frac{\lambda_1 + \lambda_2}{\lambda_1 v} \right] \left[\frac{\alpha\beta \frac{v}{\lambda_2} \frac{1}{\beta - \alpha}}{\frac{1}{\beta - \alpha} \frac{v}{\lambda_2} \beta^2 + \frac{1}{1 - e^{-\frac{\lambda_2}{v} a}}} - \frac{\alpha}{\beta}} \right] - \frac{1}{2} \frac{\lambda_1 + \lambda_2}{\lambda_1 v} (L - a)^2 \quad (6.17)$$

avec $a \ll L$, on aboutit finalement à

$$\langle t \rangle = \langle t \rangle (a = 0) + L \left(\frac{\alpha\beta}{\beta - \alpha} \right)^2 \frac{\lambda_1 + \lambda_2}{\lambda_1 \lambda_2} \frac{v}{\lambda_2} \frac{1}{\frac{\beta^2}{\beta - \alpha} \frac{v}{\lambda_2} + \frac{1}{1 - e^{-\frac{\lambda_2}{v} a}}} } \quad (6.18)$$

$$\text{avec } \langle t \rangle (a = 0) = \frac{\lambda_1 + \lambda_2}{\lambda_1 \lambda_2} L \left(\frac{\alpha^2}{\alpha - \beta} - \frac{1}{2} \frac{\lambda_2}{v} \right)$$

On peut donc écrire le temps $\langle t \rangle$ dans la limite de basse densité comme la somme du temps $\langle t \rangle$ pour $a = 0$ c'est à dire avec une cible ponctuelle et d'un terme dépendant de la taille a de la cible. L'étude analytique de l'optimisation reste cependant assez difficile à mener ici du fait de la complexité de l'expression.

Chapitre 7

ballistic-diffusive model with an imperfect reaction

Contents

7.1	Model and equations	43
7.2	Resolution	44
7.3	Optimization	44
7.3.1	Scaling laws	44
7.3.2	Level lines	45

7.1 Model and equations

Dans le cas de la modélisation du processus de recherche intermittent des animaux, nous avons considéré un modèle idéalisé, très schématique, balistique-diffusif avec une réaction parfaite. Et nous avons obtenu des lois de puissance reliant les temps ou les fréquences de recherche et de déplacements en bon accord avec les données expérimentales. Mais qu'advient-il de ces relations si la réaction est imparfaite c'est à dire avec une constante de réaction k ?

Comme d'habitude nous allons utiliser l'équation différentielle de Chapman-Kolmogorov vers le passé et obtenir un système d'équations différentielles à résoudre.

L'équation de Chapman-Kolmogorov vers le passé donne :

$$D \frac{\partial^2 t(x, 1)}{\partial x^2} + \lambda_1(t(x, 2) - t(x, 1)) - k\delta(x) = -1 \quad (7.1)$$

$$v \frac{\partial t(x, 2)}{\partial x} + \lambda_2(t(x, 1) - t(x, 2)) = -1 \quad (7.2)$$

En $x = 0$ and $x = L$ où le chercheur trouve la cible, il y a un point absorbant : donc $t(0, 1) = 0$ et $t(L, 1) = 0$. La condition de continuité s'écrit : $t(0, 2) = t(L, 2)$

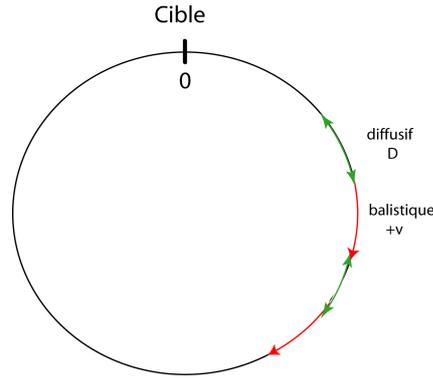


FIG. 7.1 – schéma avec les conditions aux limites périodiques pour une cible centrée

7.2 Resolution

Soit $\langle t \rangle$ le temps moyen de premier passage moyenné sur la position initiale x du chercheur, supposé uniformément distribuée sur le cercle $[0, L]$.

A basse densité, $L \rightarrow +\infty$,

$$\langle t \rangle \sim \frac{L}{2v} \frac{X+Y}{Y} \left[\frac{X+2Y^2}{\sqrt{X^2+4XY^2}} + K \right] \quad (7.3)$$

où $X = \frac{\tau_1}{\tau}$, $Y = \frac{\tau_2}{\tau}$ sont les variables sans dimension des temps, τ le temps caractéristique $\tau = \frac{D}{v^2}$, et $K = \frac{1}{k}$ caractérise la réactivité de la cible.

7.3 Optimization

L'optimisation peut être étudiée par les deux méthodes utilisées dans le cas des cibles parfaites.

7.3.1 Scaling laws

Il peut être montré qu'il n'y a pas de minimum global pour des valeurs finies de X et Y : la valeur minimum de $\langle t \rangle$

$$\langle t \rangle_{min} = \frac{L}{2v} (1 + K) \quad (7.4)$$

est obtenue quand X et $Y \rightarrow 0$, avec $Y \propto X^\nu$ et $\frac{1}{2} \leq \nu \leq 1$.

Ainsi, nous obtenons le résultat surprenant que la meilleure stratégie devrait être d'alterner les deux phases infiniment rapidement, comme c'était le cas pour une cible parfaite. Cependant, nous supposons raisonnablement que la phase diffusive doit avoir une durée minimum τ_{1min} , nécessaire pour détecter la cible. Alors, le temps de recherche minimum est obtenu pour $\tau = \tau_{1min}$, et Y satisfaisant $\frac{d}{dY} \langle t \rangle = 0$, ou

$$8Y^5 = 6X^2Y^2 + X^3 + K(X^2 + 4XY^2)^{\frac{3}{2}} \quad (7.5)$$

En écrivant que $Y \propto X^\nu$, avec $\frac{1}{2} \leq \nu \leq 1$, il en résulte que :

(i) : si $X \rightarrow 0$, le terme principal du membre de droite est X^3 ce qui donne $\nu = \frac{3}{5}$, comme pour la cible parfaite. Plus précisément :

$$Y \sim \left(\frac{1+K}{8}\right)^{\frac{1}{5}} X^{\frac{3}{5}} \quad (7.6)$$

(ii) : si $X \rightarrow \infty$, le terme principal dans le membre de droite est de l'ordre de $\frac{3}{2} + 3\nu$ if $K \neq 0$, ou $2 + 2\nu$ si $K = 0$ ce qui donne $\nu = \frac{3}{4}$ si $K \neq 0$, $\nu = \frac{2}{3}$ si $K = 0$. Précisément : si $K \neq 0$,

$$Y \sim K^{\frac{1}{2}} X^{\frac{3}{4}} \quad (7.7)$$

tandis qu'une cible parfaite, $K = 0$, a le comportement spécifique

$$Y \sim \left(\frac{3}{4}\right)^{\frac{1}{3}} X^{\frac{2}{3}} \quad (7.8)$$

Ainsi, une transition apparaît pour $K = 0$ si $X_{min} \gg 1$, i.e., si la durée minimum τ_{1min} de la phase de recherche est beaucoup plus grande que le temps caractéristique τ .

7.3.2 Level lines

Cette analyse des lois de puissance est confirmée par l'étude des courbes niveaux de

$$t \equiv \frac{2v \langle t \rangle}{L} = \frac{X+Y}{Y} \left[\frac{X+2Y^2}{\sqrt{X^2+4XY^2}} + K \right]. \quad (7.9)$$

Suivant les méthodes utilisées dans la partie modélisant les processus de recherche intermittent des animaux, nous voyons que

$$t = \left(1 + \frac{X}{Y}\right) \left[\left(1 + \frac{4Y^2}{X^2 + 4XY^2}\right)^{\frac{1}{2}} + K \right] \geq 1 + K. \quad (7.10)$$

En écrivant $X = uY$, nous avons

$$t = (1+u) \left[\frac{u+2Y}{\sqrt{u^2+4uY}} + K \right] \quad (7.11)$$

et si $\theta = \frac{t}{1+u} - K$, X et Y peuvent être exprimés à l'aide des paramètres u et $\theta \geq 1$

$$Y = \frac{u}{2} \sqrt{\theta^2 - 1} [\theta + \sqrt{\theta^2 - 1}] \quad (7.12)$$

$$X = uY = \frac{u^2}{2} \sqrt{\theta^2 - 1} [\theta + \sqrt{\theta^2 - 1}] \quad (7.13)$$

A partir de quoi il est facilement vu que pour une valeur donnée de t , la courbe de niveau Γ_t est une boucle commençant et retournant à l'origine $(0, 0)$ quand u augmente de $u = 0$ jusqu'à $u = \frac{t}{1+K} - 1$. Si $t' > t$, Γ_t est à l'intérieur de $\Gamma_{t'}$. Ainsi, si X a une valeur minimale réalisable X_m , le plus petit possible t correspond à la courbe de niveau Γ_t laquelle est tangente à la ligne $X = X_m$. Soit M l'unique point de Γ_t où $\frac{dX}{dt} = 0$. A partir de 7.12 et $\theta = \frac{t}{1+u} - K$ nous aboutissons à

$$\frac{dX}{du} = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\theta + K}{t}\right) (\theta + \sqrt{\theta^2 - 1}) \left[\frac{\theta^3 + \theta^2(2K + 1) + \theta K(K + 1) - 2t}{(\theta + K)\sqrt{\theta^2 - 1}} + \theta + K - t \right] \quad (7.14)$$

si bien qu'en M ,

$$t = \frac{(\theta + K)^2(\theta + \sqrt{\theta^2 - 1})}{D(\theta)} \text{ et } u = \frac{t}{1+u} - 1 = \frac{2(\theta^2 - 1)}{D(\theta)}$$

avec

$$D(\theta) = 2 - \theta(\theta - K) + (\theta + K)\sqrt{\theta^2 - 1} \quad (7.15)$$

Nous obtenons alors l'équation pour M , paramétrée avec $\theta \in [1, \infty[$:

$$Y = (\theta^2 - 1)^{\frac{3}{2}} (\theta + \sqrt{\theta^2 - 1}) / D(\theta) \quad (7.16)$$

$$X = 2(\theta^2 - 1)^{\frac{5}{2}} (\theta + \sqrt{\theta^2 - 1}) / D(\theta)^2 \quad (7.17)$$

Si $\theta \rightarrow 1$, $D(\theta) \rightarrow 1 + K$, X et Y tend vers θ ,

$$Y \sim \frac{(\theta^2 - 1)^{\frac{3}{2}}}{1 + K}, \quad X \sim 2 \frac{(\theta^2 - 1)^{\frac{5}{2}}}{(1 + K)^2}, \text{ et}$$

$$Y \sim \left(\frac{1 + K}{8}\right)^{\frac{1}{5}} X^{\frac{3}{5}} \quad (7.18)$$

En outre, $t \rightarrow 1 + K$ lequel est le minimum absolu pour t .

D'un autre côté, si $\theta \rightarrow \infty$, $K \neq 0$: X et Y tendent vers ∞ , $D(\theta) \sim 2\theta K$

$$Y \sim \frac{\theta^3}{K}, \quad X \sim \frac{\theta^4}{K^2}, \text{ et}$$

$$Y \sim K^{\frac{1}{2}} X^{\frac{3}{4}} \quad (7.19)$$

Alors, $t \sim \frac{\theta^2}{K} \sim X^{\frac{1}{2}}$: le temps minimal de recherche augmente comme la racine carrée de la valeur minimale de τ_1 .

Si $K = 0$, $D(\theta) \rightarrow \frac{3}{2}$,

$$Y \sim \frac{4}{3}\theta^4, \quad X \sim \frac{16}{9}\theta^6, \text{ et}$$

$$Y \sim \left(\frac{3}{4}\right)^{\frac{1}{3}} X^{\frac{2}{3}} \quad (7.20)$$

Le temps de recherche optimal est $t \sim \frac{4}{3}\theta^4 \sim X^{\frac{1}{2}}$, comme dans le cas précédent.

Chapitre 8

Conclusion of the second part

Nous avons considéré dans cette partie une série de modèles de recherche de cibles à une dimension sur un cercle tous basés sur l'intermittence entre deux phases réactives et non réactives qui peuvent être diffusives avec un coefficient de diffusion D ou balistiques c'est à dire de vitesse constante v . Le chercheur reste des temps aléatoires dans chacun des états suivant des lois exponentielles. Nous avons même étudié le cas d'une réaction imparfaite.

Récapitulons les résultats obtenus. Dans le cas du modèle dit "balistique-balistique" où le chercheur alterne entre une phase réactive, balistique de vitesse v_1 lente et une phase non réactive, balistique de vitesse v_2 rapide, le temps moyen de premier passage est minimum pour $\lambda_1 = 0$ et une valeur de λ_2 aussi grande que possible, les vitesses v_1 et v_2 étant fixées ainsi que la longueur du cercle L . Dans le cas d'un modèle du même type que celui utilisé pour les animaux autrement dit un modèle "diffusif-balistique avec mémoire orientée" mais une cible étendue, on a pu obtenir une solution analytique mais son optimisation par rapport aux fréquences reste difficile à faire... avec une réaction imparfaite, il y a apparition d'une transition pour une des lois de puissance qui permet de différencier ce modèle de celui avec une cible parfaite. Pour tous ces modèles, il faudrait bien sur pouvoir les appliquer à une situation concrète où le chercheur a une mémoire spatiale pour achever leur optimisation complètement. D'ailleurs si on avait accès avec suffisamment de précision aux lois de puissance vérifiées par les temps ou les fréquences dans chaque état au minimum pour un système donné, on pourrait prévoir si la réaction est parfaite ou imparfaite. Evidemment on peut imaginer toutes sortes de variantes combinant phases diffusives ou balistiques, réaction parfaite ou imparfaite, zone ponctuelle ou étendue. La seule limite étant la capacité à pouvoir déterminer analytiquement ou au moins numériquement la stratégie optimale si elle existe ...

Tentons maintenant de répondre à ces deux questions :

- Quand est-il intéressant d'adopter une stratégie intermittente, i.e. d'interrompre les phases de recherche attentive par des phases de déplacement pur ?
- Et le cas échéant, comment répartir son temps entre les phases définies précédemment pour être le plus efficace possible ?

Pour répondre à la première question, on se rend vite compte que toute la difficulté du problème réside dans la facilité ou non à pouvoir trouver la cible au moment de la phase de recherche propement dite. Il faudra suivant les cas un mécanisme de détection

adapté. On peut distinguer deux cas extrêmes : celui de cibles facilement détectables et celui des cibles cachées. Si l'on considère le cas des cibles facilement repérables, c'est à dire le cas où le stimulus émis par la cible est fort, alors le chercheur est capable de détecter la cible dès son premier passage. On modélise la phase de recherche par un mouvement balistique à vitesse constante suffisamment lente pour permettre la détection de la cible. Imaginons par exemple un conducteur de voiture sur l'autoroute à la recherche d'un panneau de signalisation, c'est exactement le comportement qu'il adoptera. Dans le cas des cibles cachées où le stimulus émis est trop faible, même en réduisant la vitesse, on n'est plus sûr de détecter la cible. Le chercheur doit explorer à plusieurs reprises la position de la cible si il veut la détecter. On modélisera ce mécanisme de recherche par un mouvement diffusif. C'est le type de modélisation utilisable pour les animaux au comportement saltatoire ou encore pour le mécanisme de recherche de la vision. Rappelons que l'on ne considère pas ici tous les processus biologiques qui entrent en jeu lors d'une recherche car ils sont bien trop complexes pour être modélisés en détail. On cherche seulement à en capturer les caractéristiques essentielles. En utilisant cette modélisation simplifiée, nous avons alors montré que dans le cas des cibles facilement repérables, l'intermittence n'est d'aucune utilité : il est toujours préférable d'adopter exclusivement le mode de recherche minutieux (mode lent mais réactif). Si la cible est cachée, il devient avantageux de suivre un comportement intermittent. Contrairement à ce que l'on pourrait penser : perdre du temps dans des phases de déplacements aveugles permet d'accélérer le temps de recherche de la cible. Soulignons par ailleurs que l'intermittence peut être vu comme un mécanisme de recherche intéressant à différentes échelles.

Prenons le cas des cibles cachées, avec une alternance entre une recherche diffusive (régime 1) et un déplacement balistique (régime 2), c'est à dire un cas où l'intermittence est favorable. Et tentons de répondre à la deuxième question : comment répartir son temps entre les phases 1 et 2 ? Pour y répondre, il faut considérer la notion de mémoire orientée. Si le chercheur est capable de conserver la direction de ses déplacements balistiques (cas des animaux au comportement saltatoire), la stratégie optimale consiste, dans la limite des faibles densités de cibles, à passer des temps très courts dans chacune des deux phases, ces deux temps étant liés par la loi de puissance donnée dans la première partie.

Troisième partie

intermittent search process without
memory and chemical reaction

Introduction to the third part : reactivity and random processes

Les modèles intermittents considérés jusqu'ici supposaient le chercheur apte à conserver la mémoire de sa vitesse au cours des différentes phases balistiques. De cette manière il évite au mieux de revenir sur ses pas. Comme il l'a été remarqué dans la partie II, une telle mémoire spatiale ne lui est pas toujours accessible, en particulier dans un environnement uniforme. Ce ne sera pas le cas, par exemple, si le "chercheur" est une molécule. Or cette troisième partie est principalement consacrée à l'application des processus intermittents à des réactions chimiques élémentaires.

C'est pourquoi nous allons traiter ici le cas de processus intermittents sans mémoire. Nous considérerons d'abord deux modèles simples à une dimension, qui font ressortir les différences avec les processus avec mémoire étudiés dans la seconde partie. Puis nous examinerons certaines propriétés remarquables de processus de recherche, en particulier les marches de Pearson, en milieux confinés. Ces propriétés, qui portent sur les temps moyens de résidence dans des zones spécifiques, trouvent en effet des applications intéressantes dans la modélisation d'une réaction chimique et seront utilisées dans la suite.

Le dernier chapitre sera consacré à cette modélisation, basée sur le processus aléatoire dit de "téléportation". Après avoir défini ce processus, nous traiterons explicitement le cas de molécules qui, dans leur phase réactive, se déplacent en diffusant dans un système à symétrie sphérique à d dimensions. Nous montrerons que l'intermittence peut encore permettre d'optimiser le processus, c'est à dire d'augmenter la constante de réaction. Puis nous envisagerons le cas où les molécules constituent un réseau discret, où l'optimisation est réalisée dans des conditions sensiblement différentes. Enfin, nous étendrons ces résultats à des cas beaucoup plus généraux, plus proches de la réalité.

Chapitre 9

Diffusive-diffusive model at one dimension

Contents

9.1	Model and equations	53
9.2	Resolution	53
9.3	Optimization	55

9.1 Model and equations

Dans ce modèle, on considère un chercheur qui alterne entre deux états diffusifs de constante de diffusion différentes D_1 (régime 1) et D_2 (régime 2). Le chercheur qui reste pendant des temps aléatoires dans chaque régime, ne peut trouver la cible que pendant le régime 1. La réaction est supposée instantanée. En utilisant l'équation différentielle de Chapman-Kolmogorov vers le passé, il est obtenu le système d'équations différentielles :

$$D_1 \frac{\partial^2 t(x, 1)}{\partial x^2} + \lambda_1 [t(x, 2) - t(x, 1)] = -1 \quad (9.1)$$

$$D_2 \frac{\partial^2 t(x, 2)}{\partial x^2} + \lambda_2 [t(x, 1) - t(x, 2)] = -1 \quad (9.2)$$

9.2 Resolution

En divisant chaque équation respectivement par λ_1 et λ_2 , puis en additionnant, on est finalement amené à résoudre :

$$\frac{d^2 g(x)}{dx^2} = -\left(\frac{1}{\lambda_1} + \frac{1}{\lambda_2}\right) \quad (9.3)$$

en posant, $g(x) = \frac{D_1}{\lambda_1} t(x, 1) + \frac{D_2}{\lambda_2} t(x, 2)$.

Cette équation admet pour solution :

$$g(x) = \left(\frac{1}{\lambda_1} + \frac{1}{\lambda_2}\right)\left(-\frac{1}{2} + L|x| + A\right) \quad (9.4)$$

avec $g(0) = \frac{\lambda_1 + \lambda_2}{\lambda_1 \lambda_2} A = \frac{D_2}{\lambda_2} t(0, 2) \Rightarrow A = \frac{\lambda_1}{\lambda_1 + \lambda_2} D_2 t(0, 2)$

En utilisant le fait que $t(x, 1) = \frac{\lambda_1}{D_1} (g(x) - \frac{D_2}{\lambda_2} t(x, 2))$, on obtient :

$$\frac{d^2 t(x, 2)}{dx^2} - \alpha^2 t(x, 2) = -\frac{\lambda_1 \lambda_2}{D_1 D_2} g(x) - \frac{1}{D_2} \quad (9.5)$$

avec $\alpha^2 = \frac{\lambda_1}{D_1} + \frac{\lambda_2}{D_2}$

Les solutions de cette équation s'écrivent sous la forme :

$$\begin{cases} t(x, 2) = K_1 \cosh \alpha(x - L) + K_2 \sinh \alpha x + f(x) & \text{pour } x > 0 \\ t(x, 2) = T_1 \cosh \alpha(x + M) + T_2 \sinh \alpha x + g(x) & \text{pour } x < 0 \end{cases} \quad (9.6)$$

où $f(x)$ et $g(x)$ sont des polynômes du 2ème degré de la forme $ax^2 + bx + c$.

En injectant ces solutions dans l'équation, puis en identifiant on détermine les constantes des polynômes.

En outre en utilisant les conditions aux limites $\begin{cases} \left(\frac{\partial t(x, 2)}{\partial x}\right)_{x=L} = 0 \\ \left(\frac{\partial t(x, 2)}{\partial x}\right)_{x=-M} = 0 \end{cases}$, il apparaît que

$$\begin{cases} K_2 = 0 \\ T_2 = 0 \end{cases}$$

On a donc finalement :

$$\begin{cases} t(x, 2) = K_1 \cosh \alpha(x - L) + \frac{\lambda_1 + \lambda_2}{D_1 D_2 \alpha^2} \left(-\frac{1}{2} + Lx + A - \frac{1}{\alpha^2} \frac{D_1}{\lambda_1 + \lambda_2}\right) & \text{pour } x > 0 \\ t(x, 2) = T_1 \cosh \alpha(x + M) + \frac{\lambda_1 + \lambda_2}{D_1 D_2 \alpha^2} \left(-\frac{1}{2} - Mx + A - \frac{1}{\alpha^2} \frac{D_1}{\lambda_1 + \lambda_2}\right) & \text{pour } x < 0 \end{cases} \quad (9.7)$$

En utilisant les raccordements en 0, c'est à dire $\begin{cases} t(0^+, 2) = t(0^-, 2) \\ \left(\frac{\partial t(x, 2)}{\partial x}\right)_{x=0^+} = \left(\frac{\partial t(x, 2)}{\partial x}\right)_{x=0^-} \end{cases}$

on détermine les constantes K_1 et T_1 :

$$\begin{cases} K_1 \cosh \alpha L = T_1 \cosh \alpha M \\ K_1 \sinh \alpha L + T_1 \sinh \alpha M = \frac{\lambda_1 + \lambda_2}{D_1 D_2} \frac{M+L}{\alpha^3} \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} K_1 = \frac{\lambda_1 + \lambda_2}{D_1 D_2} \frac{(M+L)}{\alpha^3} \frac{\cosh \alpha M}{\sinh \alpha(L+M)} \\ T_1 = \frac{\lambda_1 + \lambda_2}{D_1 D_2} \frac{(M+L)}{\alpha^3} \frac{\cosh \alpha L}{\sinh \alpha(L+M)} \end{cases}$$

enfin puisque $\frac{A}{\lambda_1} = \frac{D_2}{\lambda_1 + \lambda_2} t(0, 2) = \frac{D_2}{\lambda_1 + \lambda_2} \frac{\lambda_1 + \lambda_2}{D_1 D_2} \left(\frac{L}{\alpha^3} \coth \alpha L + \frac{1}{\alpha^2} \left(A + \frac{D_1}{\lambda_1 + \lambda_2} \right) - \frac{1}{\alpha^2} \right)$

on tire $A = \frac{\lambda_1}{D_1 \alpha^2 - \lambda_1} \frac{1}{\alpha^2} \left(\alpha(M+L) \frac{\cosh \alpha M \cosh \alpha L}{\sinh \alpha(M+L)} - 1 + \frac{\alpha^2 D_1}{\lambda_1 + \lambda_2} \right)$

Finalement

$$\begin{cases} t(x, 1) = \frac{\lambda_1 + \lambda_2}{\lambda_2 D_1} \frac{\lambda_1}{D_1 \alpha^3} \left[\frac{(M+L) \cosh \alpha M (\cosh \alpha L - \cosh \alpha(x-L))}{\sinh \alpha(L+M)} + \alpha L \frac{\lambda_2 D_1}{\lambda_1 D_2} x \left(\frac{x}{2L} - 1 \right) \right] & \text{pour } x > 0 \\ t(x, 1) = \frac{\lambda_1 + \lambda_2}{\lambda_2 D_1} \frac{\lambda_1}{D_1 \alpha^3} \left[\frac{(M+L) \cosh \alpha L (\cosh \alpha M - \cosh \alpha(x+M))}{\sinh \alpha(L+M)} + \alpha M \frac{\lambda_2 D_1}{\lambda_1 D_2} x \left(\frac{x}{2M} + 1 \right) \right] & \text{pour } x < 0 \end{cases} \quad (9.8)$$

Dans le cas symétrique,

$$\begin{cases} t(x, 1) = \frac{\lambda_1 + \lambda_2}{\lambda_2 D_1} \frac{\lambda_1}{D_1 \alpha^3} \left[L \frac{\cosh \alpha L - \cosh \alpha(x-L)}{\sinh \alpha L} + \alpha L \frac{\lambda_2 D_1}{\lambda_1 D_2} x \left(\frac{x}{2L} - 1 \right) \right] & \text{pour } x > 0 \\ t(x, 1) = \frac{\lambda_1 + \lambda_2}{\lambda_2 D_1} \frac{\lambda_1}{D_1 \alpha^3} \left[L \frac{\cosh \alpha L - \cosh \alpha(x+L)}{\sinh \alpha L} + \alpha L \frac{\lambda_2 D_1}{\lambda_1 D_2} x \left(\frac{x}{2L} + 1 \right) \right] & \text{pour } x < 0 \end{cases} \quad (9.9)$$

computation of the mean first passage time averaged on the position

En faisant la moyenne sur toutes les positions pour x allant de $-M$ à L , on trouve le temps de recherche moyen :

$$\langle t \rangle = \frac{\lambda_1 + \lambda_2}{\lambda_2 D_1} \frac{\lambda_1}{D_1 \alpha^3} \left[\frac{(M+L) \cosh \alpha L \cosh \alpha M}{\sinh \alpha(M+L)} - \frac{1}{\alpha} + \frac{1}{3} \alpha \frac{\lambda_2 D_1}{\lambda_1 D_2} (M^2 - ML + L^2) \right] \quad (9.10)$$

Dans le cas symétrique,

$$\langle t \rangle = \frac{\lambda_1 + \lambda_2}{\lambda_2 D_1} \frac{\lambda_1}{D_1 \alpha^3} \left[L \coth \alpha L - \frac{1}{\alpha} + \frac{1}{3} \alpha \frac{\lambda_2 D_1}{\lambda_1 D_2} L^2 \right] \quad (9.11)$$

9.3 Optimization

On trouve numériquement dans le cas symétrique que $\langle t \rangle$ est minimum par rapport à λ_1 pour une certaine valeur $\bar{\lambda}_1$, et est minimum par rapport à λ_2 pour une certaine valeur $\bar{\lambda}_2$. Il n'y a pas de minimum global cependant.

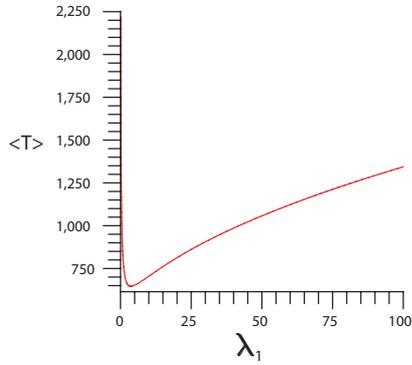


FIG. 9.1 – Graphe de $\langle t \rangle$ en fonction de λ_1 avec $D_1 = 1$, $D_2 = 10$, $\lambda_2 = 1$, $L=100$.

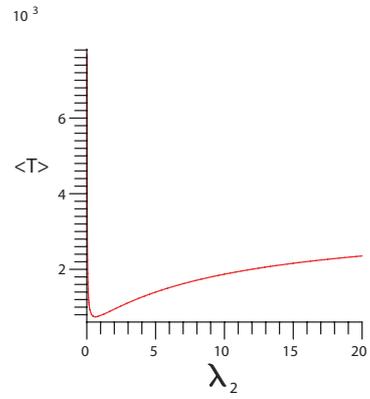


FIG. 9.2 – Graphe de $\langle t \rangle$ en fonction de λ_2 avec $D_1 = 1$, $D_2 = 10$, $\lambda_1 = 1$, $L=100$.

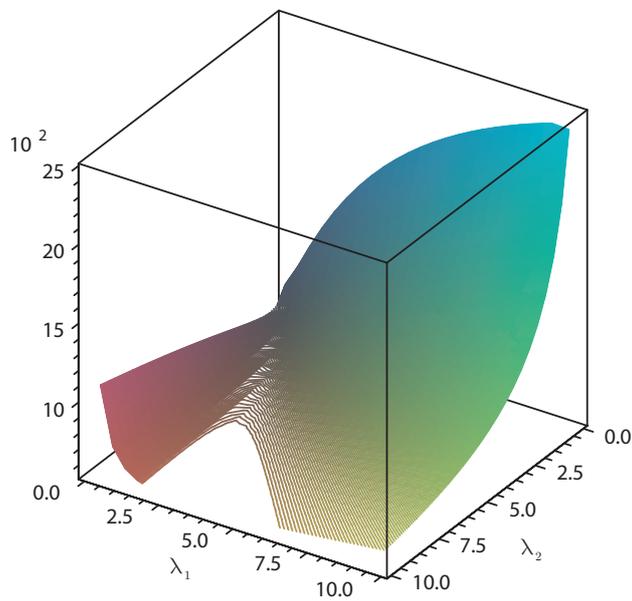


FIG. 9.3 – Graphe de $\langle t \rangle$ en fonction de λ_1 et λ_2 avec $D_1 = 1$, $D_2 = 10$, $L=100$.

Chapitre 10

ballistic-diffusive without memory at one dimension

Contents

10.1 Model and equations	57
10.2 Resolution	58
10.3 Optimization	59

10.1 Model and equations

Dans ce modèle, le chercheur alterne entre des phases diffusives de constante de diffusion D où il peut trouver la cible et des phases balistiques de vitesse constante v où il ne peut pas trouver la cible. Le chercheur reste des temps aléatoires de durées exponentielles dans chacun des états. Il est à noter qu'après chaque phase diffusive, le chercheur a une probabilité $1/2$ d'aller à gauche ou à droite en phase balistique. L'équation différentielle de Chapman-Kolmogorov vers le passé nous donne à nouveau un système d'équations différentielles à résoudre.

$$D \frac{\partial^2 t(x, 1)}{\partial x^2} + \frac{\lambda_1}{2} [t(x, 2) + t(x, 3) - 2t(x, 1)] = -1 \quad (10.1)$$

$$v \frac{\partial t(x, 2)}{\partial x} + \lambda_2 [t(x, 1) - t(x, 2)] = -1 \quad (10.2)$$

$$-v \frac{\partial t(x, 3)}{\partial x} + \lambda_2 [t(x, 1) - t(x, 3)] = -1 \quad (10.3)$$

10.2 Resolution

$$\begin{aligned}
 \begin{pmatrix} t(x, 1) \\ t(x, 2) \\ t(x, 3) \\ t(x, 4) \end{pmatrix} &= C_1 \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{\lambda_2}{v} \\ \frac{\lambda_2}{v} - \alpha \\ \frac{\lambda_2}{v} + \alpha \\ \alpha \end{pmatrix} e^{\alpha x} + C_2 \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{\lambda_2}{v} \\ \frac{\lambda_2}{v} + \alpha \\ \frac{\lambda_2}{v} - \alpha \\ \alpha \end{pmatrix} e^{-\alpha x} + K_0 \begin{pmatrix} \frac{1}{\alpha^2} (\frac{\lambda_2}{v})^2 x \\ \frac{1}{\alpha^2} (\frac{\lambda_2}{v})^2 (x + \frac{v}{\lambda_2}) \\ \frac{1}{\alpha^2} (\frac{\lambda_2}{v})^2 (x - \frac{v}{\lambda_2}) \\ \frac{1}{\alpha^2} (\frac{\lambda_2}{v})^2 \end{pmatrix} \\
 &+ K_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} \frac{1}{\alpha^2} \frac{\lambda_1}{D} (\frac{\lambda_2}{v})^2 (\frac{1}{\lambda_1} + \frac{1}{\lambda_2}) x^2 + \frac{1}{\alpha^4} \frac{\lambda_1}{D} (\frac{1}{D} - \frac{\lambda_2}{v^2}) \\ -\frac{1}{\alpha^2} \frac{\lambda_1}{D} (\frac{\lambda_2}{v})^2 (\frac{1}{\lambda_1} + \frac{1}{\lambda_2}) (\frac{x}{2} + \frac{v}{\lambda_2}) x - \frac{1}{\alpha^4} \frac{\lambda_1}{D} (\frac{1}{D} - \frac{\lambda_2}{v^2}) \\ -\frac{1}{\alpha^2} \frac{\lambda_1}{D} (\frac{\lambda_2}{v})^2 (\frac{1}{\lambda_1} + \frac{1}{\lambda_2}) (\frac{x}{2} - \frac{v}{\lambda_2}) x - \frac{1}{\alpha^4} \frac{\lambda_1}{D} (\frac{1}{D} - \frac{\lambda_2}{v^2}) \\ -\frac{1}{\alpha^2} \frac{\lambda_1}{D} (\frac{\lambda_2}{v})^2 (\frac{1}{\lambda_1} + \frac{1}{\lambda_2}) \end{pmatrix}
 \end{aligned} \tag{10.4}$$

Après résolution, on trouve :

$$\begin{aligned}
 \begin{pmatrix} t(x, 1) \\ t(x, 2) \\ t(x, 3) \\ t(x, 4) \end{pmatrix} &= A \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + B \begin{pmatrix} x \\ x \\ \frac{v}{\lambda_2} \\ 1 \end{pmatrix} + C \begin{pmatrix} \cosh \alpha x \\ (1 - \frac{D\alpha^2}{\lambda_1}) \cosh \alpha x \\ \frac{v\alpha^2}{\lambda_2} (1 - \frac{D\alpha^2}{\lambda_1}) \sinh \alpha x \\ \alpha \sinh \alpha x \end{pmatrix} \\
 &+ D \begin{pmatrix} \sinh \alpha x \\ (1 - \frac{D\alpha^2}{\lambda_1}) \sinh \alpha x \\ \frac{v\alpha^2}{\lambda_2} (1 - \frac{D\alpha^2}{\lambda_1}) \cosh \alpha x \\ \alpha \cosh \alpha x \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} ax^2 \\ ax^2 + c \\ bx \\ 2ax \end{pmatrix}
 \end{aligned} \tag{10.5}$$

$$\text{avec } \alpha^2 = \frac{\lambda_1}{D} + (\frac{\lambda_2}{v})^2$$

En utilisant les conditions aux limites et les conditions de raccordement en 0, on détermine les constantes de chaque côté :

$$A = -C = \frac{2a(L + M)}{\alpha(1 - \frac{D\alpha^2}{\lambda_1})(\tanh \alpha L + \tanh \alpha M)} \tag{10.6}$$

$$\begin{cases} B = -2aL & \text{pour } x > 0 \\ B = 2aM & \text{pour } x < 0 \end{cases} \tag{10.7}$$

$$\begin{cases} D = A \tanh \alpha L & \text{pour } x > 0 \\ D = -A \tanh \alpha M & \text{pour } x < 0 \end{cases} \tag{10.8}$$

$$\text{avec } a = -2 \frac{\lambda_2(\lambda_1 + \lambda_2)}{Dv^2\alpha^2}, b = 2 \frac{v}{\lambda_2} a \text{ et } c = -\frac{1}{\lambda_1}(1 + 2Da)$$

La moyenne sur la position de la cible est alors :

$$\langle t \rangle = \frac{1}{6\alpha^4} (\frac{1}{\lambda_1} + \frac{1}{\lambda_2}) (\frac{\lambda_1}{D_1})^2 \left[3(\alpha L \coth \alpha L - 1) + \frac{D_1}{\lambda_1} (\frac{\lambda_2}{v})^2 \alpha^2 l^2 \right] \tag{10.9}$$

10.3 Optimization

L'étude de l'optimisation au minimum à l'aide de Maple pour L grand donne le résultat :

$$\lambda_{1min} = 9^{\frac{1}{3}} 2^{\frac{2}{3}} L^{-\frac{2}{3}} \quad (10.10)$$

$$\lambda_{2min} = 9^{\frac{1}{3}} 2^{-\frac{1}{3}} L^{-\frac{2}{3}} \quad (10.11)$$

On a donc un minimum global par rapport à λ_1 et λ_2 avec des relations en lois de puissance au minimum.

Au minimum, pour L grand, on a alors :

$$\langle t \rangle \propto L^{\frac{4}{3}} \quad (10.12)$$

Voici ce que l'on obtient graphiquement. On peut observer ainsi le minimum global en fonction de λ_1 et λ_2 .

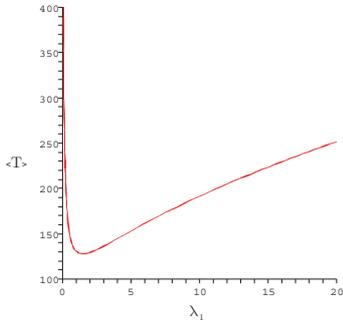


FIG. 10.1 – Graphe de $\langle t \rangle$ en fonction de λ_1 avec $D_1 = 1$, $v = 10$, $\lambda_2 = 1$, $L = 100$.

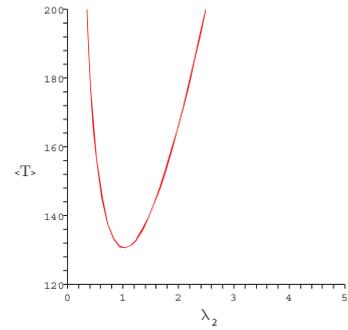


FIG. 10.2 – Graphe de $\langle t \rangle$ en fonction de λ_2 avec $D_1 = 1$, $v = 10$, $\lambda_1 = 1$, $L = 100$.

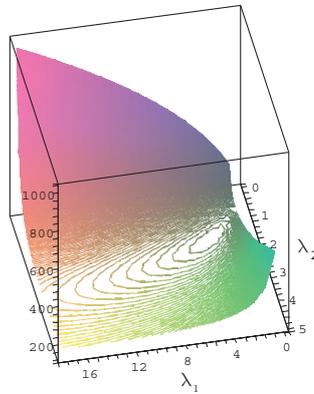


FIG. 10.3 – Graphe de $\langle t \rangle$ en fonction de λ_1 et λ_2 avec $D_1 = 1$, $v = 10$, $L = 100$.

Chapitre 11

]Pearson walks and search processes in confined media [1]

Contents

11.1 Introduction	61
11.2 Mean first exit time	62
11.3 General boundary conditions	63
11.4 Splitting probabilities	65
11.5 Residence time	65
11.6 Generalization	66
11.7 Conclusion	68

11.1 Introduction

Les modèles étudiés précédemment sont trop simplifiés pour représenter une réaction chimique. Nous allons dans ce chapitre considérer des mouvements aléatoires sans mémoire qui peuvent décrire assez bien le mouvement des molécules dans un système réactif, mais aussi les mouvements apparemment erratiques de certains animaux. C'est le cas des marches de Pearson. Une marche de Pearson est définie comme une succession de trajectoires balistiques à vitesse constante v , de durées exponentielles de fréquence λ dont la direction est réorientée aléatoirement. Motivé initialement par l'étude des trajectoires diffusives réalisées par des animaux (fourmis, blattes et autres insectes rampants...) dans des conditions variables, Blanco et Fournier [22] ont trouvé récemment un résultat théorique remarquable concernant le temps moyen de première sortie d'un domaine fermé pour une marche aléatoire de Pearson [40]. Au delà des applications pour les trajectoires des animaux, de nombreux systèmes physiques sont concernés, tel que les processus de diffusion de neutrons [63, 32]. Les marches aléatoires de Pearson peuvent être définies comme la trajectoire d'une particule qui est soumise à des temps stochastiques à des réorientations aléatoires de la direction de sa vitesse constante v . Les temps stochastiques sont exponentiellement distribués avec la valeur moyenne $1/\lambda$. Pour cette catégorie de marches aléatoires, Blanco et Fournier [22] ont montré que le temps moyen de première

sortie $\langle t \rangle$ d'une marche aléatoire commençant d'une frontière du domaine fini est indépendante de la fréquence λ et est simplement relié au rapport du volume du domaine V sur la surface S de la frontière du domaine, soit en trois dimensions :

$$\langle t \rangle = \frac{4V}{vS} \quad (11.1)$$

Le fait que ce résultat ne dépende pas de la fréquence λ mais seulement de la géométrie du système peut sembler contre-intuitif. Aussi Blanco et Fournier proposent une explication quelque peu heuristique pour cela. Très récemment, suivant la démonstration de Blanco et Fournier [22], Mazzolo [50] étendit leurs résultats et donna une relation entre le n -ième moment du temps de première sortie d'une particule partant de l'intérieur du domaine et le $n + 1$ -ième moment du temps de première sortie d'une particule partant de la frontière.

$$\langle r_n \rangle = \frac{\langle \ell_{n+1} \rangle}{n \langle \ell \rangle} \text{ pour } n \geq 1. \quad (11.2)$$

Dans cette partie, nous présentons une approche alternative, qui nous permet d'étendre ces résultats dans trois directions. D'abord, nous considérerons le cas général de n'importe quelle combinaison de conditions aux limites absorbantes et réfléchissantes, ce qui est utile dans beaucoup de processus stochastiques. Ensuite, nous étudierons non seulement les propriétés du temps de première sortie, mais aussi les propriétés du temps de résidence dans un sous-domaine, ce qui est une quantité plus générale. Enfin, nous montrerons que ces résultats peuvent être généralisés pour une large classe de mouvements stochastiques.

11.2 Mean first exit time

Avant de considérer le cas d'un mouvement général, nous restreignons notre discussion aux marches aléatoires de Pearson, qui correspondent à une succession de mouvements balistiques déterministes dans un domaine fermé V délimité par une frontière absorbante Σ , interrompus par des redistributions instantanées et isotropiques de la vitesse \vec{v} . Soit $p(\vec{r}', \vec{v}', t | \vec{r}, \vec{v})$ la densité de probabilité conditionnelle qu'au temps t la particule soit à la position \vec{r}' avec une vitesse \vec{v}' , sachant qu'elle est partie initialement de la position \vec{r} avec une vitesse \vec{v} . Cette quantité satisfait l'équation différentielle de Chapman-Kolmogorov vers le passé [33] :

$$\partial_t p(\vec{r}', \vec{v}', t | \vec{r}, \vec{v}) = \vec{v} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{r}'} p(\vec{r}', \vec{v}', t | \vec{r}, \vec{v}) + \frac{\lambda}{\sigma_d} \int d\tilde{v}'' [p(\vec{r}', \vec{v}'', t | \vec{r}, \vec{v}'') - p(\vec{r}', \vec{v}', t | \vec{r}, \vec{v})], \quad (11.3)$$

où $\sigma_d = \frac{2\pi^{\frac{d}{2}}}{\Gamma(\frac{d}{2})}$ est l'angle solide en dimension d et où l'intégrale $\int d\tilde{v}$ est prise sur les vecteurs unités de la vitesse. Cette équation peut être facilement transformée en une équation mettant en jeu les moments des temps de première sortie $T(\vec{r}, \vec{v})$ partant de la position \vec{r} avec la vitesse initiale \vec{v} [66] :

$$\vec{v} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{r}} t_n(\vec{r}, \vec{v}) + \frac{\lambda}{\sigma_d} \int d\tilde{v}'' (t_n(\vec{r}, \vec{v}'') - t_n(\vec{r}, \vec{v})) = -n t_{n-1}(\vec{r}, \vec{v}), \quad (11.4)$$

où $t_n(\vec{r}, \vec{v})$ est le n -ième moment du temps de première sortie, qui vérifie $t_n(\vec{r}, \vec{v}) = 0$ à la frontière absorbante ($\vec{r} \in \Sigma$), pour tout $n \geq 1$ et pour une vitesse dirigée vers l'extérieur. En remarquant que la quantité symétrique $\int d\tilde{v} d\vec{v}'' t_n(\vec{r}, \vec{v}'') - \int d\tilde{v} d\vec{v}'' t_n(\vec{r}, \vec{v})$ est évidemment égale à zéro, et que $\vec{v} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{r}} t_n(\vec{r}, \vec{v}) = \text{div}(t_n(\vec{r}, \vec{v})\vec{v})$, l'intégration de l'équation (11.4) sur toutes les positions et toutes les vitesses initiales possibles donne :

$$\int d\tilde{v} \int_V d\vec{r} \text{div}(t_n(\vec{r}, \vec{v})\vec{v}) = -n \int d\tilde{v} \int_V d\vec{r} t_{n-1}(\vec{r}, \vec{v}). \quad (11.5)$$

En appliquant le théorème de Gauss de la divergence sur le membre de gauche de l'équation (11.5), nous pouvons écrire que :

$$\langle t_n \rangle_{\Sigma} = \eta_d \frac{nV}{v \Sigma} \langle t_{n-1} \rangle_V, \quad (11.6)$$

où les deux moyennes mises en jeu dans l'équation (11.6) sont définies pour toute fonction f par :

$$\langle f \rangle_{\Sigma} = -\frac{1}{v\Sigma\alpha_d} \int d\tilde{v} \int_{\Sigma} d\vec{\Sigma} \cdot \vec{v} f(\vec{r}, \vec{v}), \quad \text{et} \quad \langle f \rangle_V = \frac{1}{V\sigma_d} \int d\tilde{v} \int_V d\vec{r} f(\vec{r}, \vec{v}) \quad (11.7)$$

avec $\alpha_d = \frac{2\pi^{\frac{d-1}{2}}}{(d-1)\Gamma(\frac{d-1}{2})}$ est le flux d'un vecteur unitaire distribué de façon isotrope à travers une surface unité, et $\eta_d = \frac{\sigma_d}{\alpha_d} = \sqrt{\pi}(d-1) \frac{\Gamma(\frac{d-1}{2})}{\Gamma(\frac{d}{2})}$ est une constante dépendant de la dimension. L'équation (11.6) peut être réécrite comme :

$$\langle t_1 \rangle_{\Sigma} = \frac{\eta_d V}{v \Sigma}, \quad \text{et} \quad \forall n \geq 1, \quad \langle t_{n-1} \rangle_V = \frac{\langle t_n \rangle_{\Sigma}}{n \langle t_1 \rangle_{\Sigma}} \quad (11.8)$$

ce qui correspond aux résultats précédemment obtenus par Blanco et Fournier [22] et Mazzolo [50]. Entre parenthèses, nous savons que puisque $\langle t_2 \rangle_{\Sigma} \geq \langle t_1 \rangle_{\Sigma}^2$, (11.8) donne une borne inférieure générale pour $\langle t_1 \rangle_V$:

$$\langle t_1 \rangle_V \geq \frac{1}{2} \langle t_1 \rangle_{\Sigma} = \frac{\eta_d V}{2v \Sigma}. \quad (11.9)$$

11.3 General boundary conditions

Nous étendons maintenant ces résultats au cas général de conditions aux limites mixtes. La frontière du domaine Σ est maintenant supposée être composée d'une combinaison de parties absorbantes et réfléchissantes (see fig.11.1,11.3). Soit Σ_{abs} la partie absorbante de Σ , et Σ_{refl} la partie réfléchissante, tel que $\Sigma = \Sigma_{\text{abs}} + \Sigma_{\text{refl}}$. Nous supposons qu'initialement la particule part de la surface absorbante. Si nous considérons que la frontière réfléchissante est parfaite, c'est à dire que l'angle que fait la vitesse dirigée vers l'intérieur égale l'angle de la vitesse dirigée vers l'extérieur, ou bien si nous considérons que l'angle

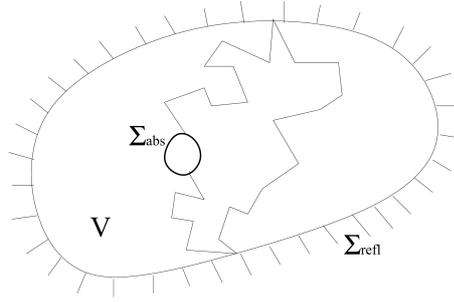


FIG. 11.1 – Une trajectoire particulière d’une particule qui part et se termine sur la frontière absorbante Σ_{abs} , pour une région absorbante à l’intérieur d’une surface fermée réfléchissante Σ .

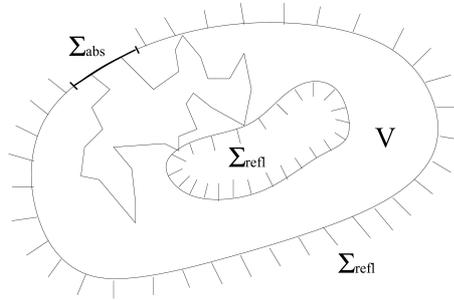


FIG. 11.2 – Une trajectoire particulière d’une particule pour une enceinte fermée avec un trou Σ_{abs}

de la vitesse de la particule est uniformément distribué après chaque collision avec la paroi réfléchissante, nous avons

$$\int d\vec{v} \int_{\Sigma_{\text{refl}}} d\vec{\Sigma} \cdot \vec{v} t_n(\vec{r}, \vec{v}) = 0. \quad (11.10)$$

Dans ce cas de conditions aux limites mixtes, l’équation (11.8) devient :

$$\langle t_1 \rangle_{\Sigma_{\text{abs}}} = \frac{\eta_d}{v} \frac{V}{\Sigma_{\text{abs}}}, \text{ et } \forall n \geq 1, \langle t_{n-1} \rangle_V = \frac{\langle t_n \rangle_{\Sigma_{\text{abs}}}}{n \langle t_1 \rangle_{\Sigma_{\text{abs}}}} \quad (11.11)$$

Considérons par exemple des animaux quittant leur gîte à travers sa frontière Σ_{abs} , et explorant un domaine V (see Fig.11.1). L’équation précédente donne une estimation simple du temps moyen de retour au gîte si la frontière Σ_{refl} est réfléchissante pour eux, pourvu que le mouvement balistique interrompu modélise correctement leur comportement.

11.4 Splitting probabilities

Considérons maintenant un volume fermé V avec deux surfaces absorbantes Σ_1 et Σ_2 , et calculons la probabilité d'absorption $\Pi_1(\vec{r}, \vec{v})$ sur la surface Σ_1 pour une particule partant initialement de la frontière $\Sigma_{\text{abs}} = \Sigma_1 + \Sigma_2$. Cette probabilité obéit à l'équation différentielle [75] :

$$\vec{v} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{r}} \Pi_1(\vec{r}, \vec{v}) + \frac{\lambda}{\sigma_d} \int d\tilde{v}' [\Pi_1(\vec{r}, \tilde{v}') - \Pi_1(\vec{r}, \vec{v})] = 0, \quad (11.12)$$

pour laquelle les conditions aux limites, pour une vitesse dirigée vers l'extérieur \vec{v} , sont $\Pi_1(\vec{r}, \vec{v})_{\vec{r} \in \Sigma_1} = 1$ et $\Pi_1(\vec{r}, \vec{v})_{\vec{r} \in \Sigma_2} = 0$. En suivant ce qui a été fait précédemment, nous pouvons montrer que

$$\langle \Pi_1 \rangle_{\Sigma_{\text{abs}}} = \frac{\Sigma_1}{\Sigma_1 + \Sigma_2}. \quad (11.13)$$

Autrement dit, la probabilité d'absorption avec une frontière absorbante est uniforme, quand la particule part uniformément de n'importe quel point de celle-ci.

11.5 Residence time

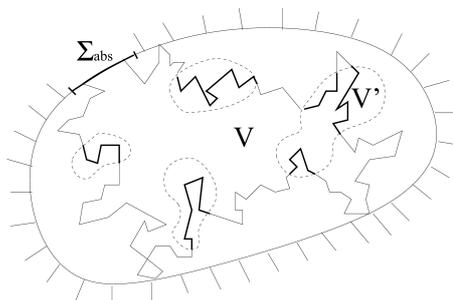


FIG. 11.3 – Temps de résidence d'une particule à l'intérieur du sous-domaine d'un volume

Une autre quantité importante intervenant dans la théorie de la réactivité et dans des problèmes similaires [18, 83, 2, 17], est le temps de résidence dans un sous-domaine V' (see fig.11.3) d'un domaine V . Afin de l'étudier, nous supposons que la particule peut disparaître dans V' (mais pas à l'extérieur de V') avec un taux de réaction constant et uniforme k . La quantité centrale est maintenant la probabilité de survie d'une particule par rapport à la réaction dans le volume V' qui peut être exprimée de deux façons [42, 18, 82] :

$$S(t|\vec{r}, \vec{v}) = \int d\vec{r}' d\tilde{v}' p(\vec{r}', \tilde{v}', t|\vec{r}, \vec{v}) = \langle e^{-kT_t(\vec{r}, \vec{v})} \rangle \quad (11.14)$$

où T_t est le temps de résidence en fonction du temps d'observation t à l'intérieur de V' d'une particule, partant de (\vec{r}, \vec{v}) , et où $p(\vec{r}', \tilde{v}', t|\vec{r}, \vec{v})$ est la densité de probabilité conditionnelle de la particule qui satisfait l'équation différentielle de Chapman-Kolmogorov suivante :

$$\begin{aligned} \partial_t p(\vec{r}', \vec{v}', t | \vec{r}, \vec{v}) &= \vec{v} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{r}} p(\vec{r}', \vec{v}', t | \vec{r}, \vec{v}) + \frac{\lambda}{\sigma_d} \int d\vec{v}'' [p(\vec{r}', \vec{v}', t | \vec{r}, \vec{v}'') - p(\vec{r}', \vec{v}', t | \vec{r}, \vec{v})] \\ &\quad - k \mathbf{1}_{V'}(\vec{r}) p(\vec{r}', \vec{v}', t | \vec{r}, \vec{v}) \end{aligned} \quad (11.15)$$

où $\mathbf{1}_{V'}(\vec{r})$ est la fonction indicatrice de V' qui est égale à zéro si $\vec{r} \notin V'$ et égale à un si $\vec{r} \in V'$. Notons que les conditions aux limites donnent $S(t | \vec{r}, \vec{v}) = 1$ pour une vitesse d'une particule dirigée vers l'extérieur de la surface absorbante Σ_{abs} . En effet, une telle particule absorbée sur cette surface ne disparaîtra jamais à l'intérieur du sous-domaine V' . En écrivant l'équation (11.15) pour la probabilité conditionnelle de survie, nous obtenons :

$$\begin{aligned} \partial_t S(t | \vec{r}, \vec{v}) &= \vec{v} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{r}} S(t | \vec{r}, \vec{v}) + \frac{\lambda}{\sigma_d} \int d\vec{v}'' [S(t | \vec{r}, \vec{v}'') - S(t | \vec{r}, \vec{v})] \\ &\quad - k \mathbf{1}_{V'}(\vec{r}) S(t | \vec{r}, \vec{v}). \end{aligned} \quad (11.16)$$

Comme $S(t | \vec{r}, \vec{v})$ est une fonction de t bornée qui n'augmente pas, elle tend vers une valeur finie quand $t \rightarrow \infty$, si bien que $\frac{\partial S}{\partial t} \rightarrow 0$. En faisant $t \rightarrow \infty$ dans (11.16), en l'intégrant sur $\vec{r} \in V$ et \vec{v} , en prenant en compte les conditions aux limites et en utilisant l'expression (voir (11.14) quand $t \rightarrow \infty$)

$$S_\infty(\vec{r}, \vec{v}) = \sum_{n=0}^{+\infty} (-1)^n \frac{k^n}{n!} \tau_n(\vec{r}, \vec{v}) \quad (11.17)$$

où $\tau_n(\vec{r}, \vec{v})$ est le n -ième moment du temps de résidence de la particule à l'intérieur de V' , nous tirons notre résultat principal pour le temps de résidence :

$$\langle \tau_1 \rangle_{\Sigma_{\text{abs}}} = \frac{\eta_d}{v} \frac{V'}{\Sigma_{\text{abs}}} \quad \text{et} \quad \forall n \geq 1, \quad \langle \tau_{n-1} \rangle_{V'} = \frac{\langle \tau_n \rangle_{\Sigma_{\text{abs}}}}{n \langle \tau_1 \rangle_{\Sigma_{\text{abs}}}}. \quad (11.18)$$

Notons que la fraction moyenne de temps dépensé à l'intérieur de V' par rapport au temps de sortie de V est donné par $\langle \tau_1 \rangle_{\Sigma_{\text{abs}}} / \langle t_1 \rangle_{\Sigma_{\text{abs}}} = V'/V$, ce qui peut être vu comme une propriété de type ergodique [75].

11.6 Generalization

Supposons maintenant que la particule réalise un processus de diffusion stochastique plus général, interrompu en des temps stochastiques par une redistribution instantanée de sa vitesse, sans changer de position. La densité de probabilité conditionnelle $p(\vec{r}', \vec{v}', t | \vec{r}, \vec{v})$ d'être à la position \vec{r}' avec la vitesse \vec{v}' au temps t , partant (\vec{r}, \vec{v}) au temps 0, correspondant au processus de diffusion général obéit à l'équation vers le passé

$$\partial_t p = v_i \partial_{x_i} p + \frac{F_i}{m} \partial_{v_i} p + D_{ij} \partial_{v_i v_j}^2 p \equiv L^+ p \quad (11.19)$$

où m est la masse de la particule, $\vec{F}(\vec{r}, \vec{v})$ est la force exercée sur la particule dans l'état (\vec{r}, \vec{v}) , D_{ij} est la matrice de diffusion générale, et L^+ est l'adjoint de L . Dans beaucoup de situations d'intérêt physique, \vec{F} est la somme d'une conservative force due à un potentiel U , $-\partial_{\vec{r}}U$, et une force de friction $-\eta\vec{v}$ due au fluide à l'entour, η étant un coefficient de friction constant. En outre, $D_{ij} = \delta_{ij}D\eta^2/m^2$, D étant le coefficient de diffusion usuel de la loi de Fick, qui est indépendant de \vec{r} dans un milieu inhomogène. Maintenant, nous supposons que ce processus général de diffusion est interrompu en des temps stochastiques, pour lesquels la vitesse \vec{v} de la particule est redistribuée instantanément avec un taux de transition donnée $q(\vec{r}, \vec{v}'|\vec{r}, \vec{v})$. Le processus stochastique tout entier, incluant la réorientation de la vitesse, obéit à l'équation :

$$\begin{aligned} \partial_t p(\vec{r}', \vec{v}', t|\vec{r}, \vec{v}) &= L^+ p(\vec{r}', \vec{v}', t|\vec{r}, \vec{v}) + \int d\vec{v}'' q(\vec{r}, \vec{v}''|\vec{r}, \vec{v}) [(p(\vec{r}', \vec{v}', t|\vec{r}, \vec{v}'') - p(\vec{r}', \vec{v}', t|\vec{r}, \vec{v}))] \\ &\equiv \mathcal{L}^+ p(\vec{r}', \vec{v}', t|\vec{r}, \vec{v}). \end{aligned} \quad (11.20)$$

La densité de probabilité conditionnelle au temps t , $p(\vec{r}', \vec{v}', t|\vec{r}, \vec{v})$ obéit aussi à l'équation vers le passé suivante :

$$\partial_t p(\vec{r}', \vec{v}', t|\vec{r}, \vec{v}) = \mathcal{L} p(\vec{r}', \vec{v}', t|\vec{r}, \vec{v}). \quad (11.21)$$

Supposons que cette équation, si la frontière toute entière Σ est supposée réfléchissante, admette une solution stationnaire $p_0(\vec{r}, \vec{v})$. Par exemple $p_0(\vec{r}, \vec{v})$ est l'équilibre thermodynamique $\propto e^{-(U + \frac{m\vec{v}^2}{2})/k_B T}$ si l'équation (11.19) est l'équation de diffusion usuelle d'une particule dans un fluide à l'équilibre à la température T et si le processus de redistribution de la vitesse définie précédemment n'affecte pas cette équilibre thermodynamique, ce qui est le cas si $\int d\vec{v}' (q(\vec{r}, \vec{v}'|\vec{r}, \vec{v})p_0(\vec{r}, \vec{v}) - q(\vec{r}, \vec{v}|\vec{r}, \vec{v}')p_0(\vec{r}, \vec{v}')) = 0$. Alors, il est possible de généraliser les résultats précédents. En effet, considérons le temps de résidence d'une particule dans un sous-domaine $V' \subset V$, et soit Σ_{abs} la partie absorbante de la surface totale Σ . Comme précédemment, nous supposons qu'à l'intérieur de V' , la particule peut disparaître avec un taux de réaction constant et uniforme k . La probabilité conditionnelle de survie au temps t , $S(t|\vec{r}, \vec{v}) = \int d\vec{r}' d\vec{v}' p(\vec{r}', \vec{v}', t|\vec{r}, \vec{v})$, partant de $(\vec{r} \in V, \vec{v})$ obéit l'équation vers la passé

$$\frac{\partial}{\partial t} S(t|\vec{r}, \vec{v}) = \mathcal{L}^+ S(t|\vec{r}, \vec{v}) - k \mathbf{1}_{V'}(\vec{r}) S(t|\vec{r}, \vec{v}) \quad (11.22)$$

où $\mathbf{1}_{V'}(\vec{r}) = 1$ si $\vec{r} \in V'$ et 0 sinon. Suivant la méthode utilisée pour les marches aléatoires de Pearson, nous faisons $t \rightarrow +\infty$ dans (11.22), et nous multiplions cette équation par la probabilité à l'équilibre $p_0(\vec{r}, \vec{v})$ calculée pour des conditions réfléchissantes sur la surface Σ de V . L'intégration de (11.22) sur toutes les positions $\vec{r} \in V$ et toutes les vitesses \vec{v} , conduit à :

$$\int_{\vec{r} \in V} d\vec{r} \int d\vec{v} p_0(\vec{r}, \vec{v}) \mathcal{L}^+ S_\infty(\vec{r}, \vec{v}) = k \int_{\vec{r} \in V'} d\vec{r} \int d\vec{v} p_0(\vec{r}, \vec{v}) S_\infty(\vec{r}, \vec{v}). \quad (11.23)$$

Le membre de gauche de (11.23) peut être transformé en :

$$\int_{\vec{r} \in V} d\vec{r} \int d\vec{v} S_\infty(\vec{r}, \vec{v}) \mathcal{L} p_0(\vec{r}, \vec{v}) + \int_{\vec{r} \in \Sigma} d\vec{\Sigma} \cdot \int d\vec{v} \vec{v} S_\infty(\vec{r}, \vec{v}) p_0(\vec{r}, \vec{v}). \quad (11.24)$$

La première intégrale disparaît, car $\mathcal{L}p_0(\vec{r}, \vec{v}) = 0$ si $\vec{r} \in V$. Dans la seconde intégrale nous séparons l'intégration sur la vitesse \vec{v} dirigée vers l'intérieur de l'intégration sur la vitesse \vec{v} dirigée vers l'extérieur.

La partie dirigée vers l'intérieur peut être écrite, en utilisant l'expression (11.17) de S_∞ : $\sum_{n=0}^{\infty} (-1)^{n+1} \frac{k^n}{n!} J \langle \tau_n \rangle_{\Sigma_{\text{abs}}}$, où $J = - \int_{\vec{r} \in \Sigma_{\text{abs}}} d\vec{\Sigma} \cdot \int d\vec{v} \vec{v} p_0(\vec{r}, \vec{v})$ est le courant de probabilité à l'équilibre sur Σ_{abs} , et où la moyenne sur la surface d'une quantité $f(\vec{r}, \vec{v})$ est définie par :

$$\langle f \rangle_{\Sigma_{\text{abs}}} = -\frac{1}{J} \int_{\vec{r} \in \Sigma_{\text{abs}}} d\vec{\Sigma} \cdot \int_{\vec{v}_{\text{in}}} d\vec{v} \vec{v} f(\vec{r}, \vec{v}) p_0(\vec{r}, \vec{v}). \quad (11.25)$$

La partie dirigée vers l'extérieur est en fait égale à J , comme $S_\infty(\vec{r}, \vec{v}) = 1$ si $\vec{r} \in \Sigma$ et \vec{v} est dirigée vers l'extérieur. Alors, en comparant les deux parties de (11.23), nous généralisons les relations (11.18) pour les moments des temps de résidence à l'intérieur de V' :

$$\langle \tau_1 \rangle_{\Sigma_{\text{abs}}} = \frac{P}{J} \quad \text{et} \quad \langle \tau_n \rangle_{\Sigma_{\text{abs}}} = n \frac{\langle \tau_{n-1} \rangle_{V'}}{J} \quad (11.26)$$

où $P = \int_{\vec{r} \in V'} d\vec{r} d\vec{v} p_0(\vec{r}, \vec{v})$ est la probabilité à l'équilibre du volume V' .

En considérant maintenant la cas particulier $V' = V$, nous obtenons les relations pour les moments du temps de première sortie de V :

$$\langle t_1 \rangle_{\Sigma_{\text{abs}}} = \frac{1}{J}, \quad \text{et} \quad \langle t_{n-1} \rangle_{V'} = \frac{1}{n} \frac{\langle t_n \rangle_{\Sigma_{\text{abs}}}}{\langle t_1 \rangle_{\Sigma_{\text{abs}}}}. \quad (11.27)$$

ce qui généralise les formules (11.8). De la même façon, les résultats des probabilités de partage (11.13) peuvent être généralisées pour le mouvement stochastique général discuté ici. L'équation (11.27) prend une forme particulièrement simple si nous considérons maintenant un fluide de particules identiques et si nous remplaçons $p_0(\vec{r}, \vec{v})$ par la densité de particules à l'équilibre dans l'espace des phases (\vec{r}, \vec{v}) . Alors, le courant de probabilité J est remplacé le flux de particules dans un sens à l'équilibre ϕ à travers Σ , et l'équation (11.27) devient :

$$\langle t_1 \rangle_{\Sigma} = \frac{N}{\phi} \quad (11.28)$$

N étant le nombre de particules dans V . Cette formule peut facilement être comprise intuitivement : si au temps 0 la frontière est supposé être réfléchissante, le nombre de particules quittant V par unité de temps devrait être $\sim \frac{1}{\langle t_1 \rangle_{\Sigma}}$, si bien que l'équilibre est maintenu à l'intérieur de V si V est soumis à un flux entrant de nouvelles particules $\phi \sim \frac{N}{\langle t_1 \rangle_{\Sigma}}$.

11.7 Conclusion

Nous avons montré que les relations géométriques précédemment obtenues par Blanco et Fournier, et Mazzolo pour des marches de Pearson dans des domaines fermés, sont des

cas particuliers de relations très générales entre les temps de résidence pour une large classe de processus stochastiques. La méthode que nous avons utilisé, très différente de celle employée par Blanco et Fournier, repose sur les équations de Chapman-Kolmogorov vers la passé ; elle présente l'intérêt d'être facilement adaptable à des conditions aux limites mixtes. Le cas de processus stochastiques plus généraux que les marches de Pearson a également été envisagé et conduit à des résultats analogues. Ces statistiques des temps de retour semblent mises en jeu dans de nombreuses situations physiques, notamment pour la description de milieux poreux. Signalons à ce sujet que l'influence des irrégularités de la surface confinante sur la statistique de retour a fait l'objet de travaux très récents [47]. Ils peuvent être aussi très utiles dans de nombreuses applications, quand les équations d'évolution ne peuvent pas être résolues exactement. En outre, elles peuvent être étendues aux systèmes intermittents, qui sont fréquents en biologie. Elles ont été appliquées en alternance avec la diffusion pour étudier l'intermittence dans un système à deux dimensions [12, 13]. Dans la suite, nous allons considérer des systèmes intermittents à 2 et 3 dimensions où la diffusion alterne avec un autre processus sans mémoire, bien adapté à certaines réactions chimiques, la téléportation.

Chapitre 12

]Chemical reactions and teleportation [5]

Contents

12.1 Introduction	71
12.2 Teleportation in a continuous spherical system	74
12.2.1 Model	74
12.2.2 Mean search time	75
12.2.3 Optimization of the mean search time :	77
12.3 Discrete systems	83
12.3.1 One dimensional lattice	83
12.3.2 2 dim lattice	85
12.4 Mean search time. General results.	86
12.5 Conclusion	90

12.1 Introduction

La cinétique chimique en milieu condensée est souvent contrôlée par la diffusion [65]. En fait, le processus de réaction élémentaire devrait être décrit à un niveau microscopique, par la mécanique quantique, mais une description classique, mesoscopique est possible dans le simple cas des réactions limitées par la diffusion [36] : une réaction étant réalisée aussitôt que les réactants se sont rencontrés.

Dans son travail pionnier de 1917, Smoluchowski [70] utilisa la théorie de la diffusion pour calculer le taux d'une réaction d'annihilation limitée par la diffusion du type $A + B \rightarrow B$ pour une particule immobile, sphérique B , entourée par des particules A (voir Appendice B). Il trouva que le taux de réaction $k(t)$ est dépendant du temps, et qu'il dépend de façon critique de la dimension de l'espace d : pour $d = 3$, il tend pour les grands temps vers un taux constant $k = 4\pi RD$, alors que pour $d = 1$ et $d = 2$ il tend vers 0. Ces résultats bien connus ont été étendus dans différentes directions [52, 53, 59, 9, ?], en particulier dans le cas de N particules A mobiles (catalyseurs, or prédateurs, dans le langage de l'écologie) et une particule B immobile (cible, ou proie) avec une réactivité

fluctuante. Ces études confirment que les lois usuelles de la cinétique en général tiennent à 3 dim (ou plus), et ce même si elles peuvent ne pas marcher, en particulier en régime asymptotique [52, 53, 59, 9].

Un exemple frappant où des chemins réactionnels en basse dimension modifient de façon drastique les lois usuelles de la cinétique est donné par le problème de la localisation d'un site cible spécifique de l'ADN par une protéine. Il est bien établi [20] que les trajectoires réactionnels combinent des diffusions à une dimension le long de l'ADN, et des excursions à trois dimensions dans la solution environnante suite à des événements d'association-dissociation (voir [37]). En bon accord avec les données expérimentales [71], des modèles stochastiques récents de cette réaction [71, 28] ont mis en avant l'existence d'une stratégie de recherche optimale, réalisée quand les deux régimes ont la même durée (voir aussi [68, 74, 48, 85, 69]), ce qui accélère significativement la réaction. De tels chemins réactionnels intermittents combinant deux régimes, un mouvement "lent" *réactif*, durant lequel la cible peut être découverte, et un mouvement "rapide" mais *non réactif*, durant lequel le chercheur est incapable de détecter la cible, ont prouvé qu'ils jouaient un rôle crucial dans de nombreux problèmes de recherche [10, 11, 45, 56, 54, 12, 13, 14, 15, 16, 52, 59].

En pratique, l'effet de la basse dimension sur la cinétique réactionnelle est important dès que les cibles A sont situés sur le bord ∂V d'un domaine V . La dynamique d'un réactant A peut être décrite de manière générale comme intermittente, comme dans le cas mentionné précédemment d'une protéine réagissant avec un site spécifique de l'ADN : une particule A alternera des phases où elle sera adsorbée sur l'interface ∂V , où un transport diffusif et la réaction peuvent intervenir, avec des phases de libre mouvement dans le volume environnant V où les cibles B sont absentes. Le cas d'une limite bidimensionnel ∂V arrive souvent en chimie dans le cas d'une catalyse hétérogène (see Fig.12.1), ou dans la physique des milieux poreux [46]. Un autre exemple vient de la physiologie : la respiration chez les mammifères peut être décrite par des molécules O_2 (réactants A) diffusants dans une unité d'échange gazeux, appelé acini, jusqu'à ce qu'elles soient adsorbées par un pore de la membrane (un cible B). La biologie cellulaire fournit d'autres exemples d'une réaction du type $A + B \rightarrow B$. En effet, certaines molécules (souvent ioniques) sont transportées à travers la membrane d'une cellule [3], ou même le cas d'une infection virale [67] à travers la membrane cellulaire qui met en jeu un chercheur A (molécule ou virus) alternant des diffusions dans le milieu intercellulaire avec des phases adsorbées sur la membrane cellulaire avant d'entrer dans la cellule par une "porte" B (pore or récepteur membranaire, see Fig.12.1)).

Dans cette partie, un modèle de recherche intermittent sera présenté, modèle qui généralisera un modèle à 1-dimension de recherche d'un site cible de l'ADN par une protéine [28], lui même généralisé plus tard par Eliazar et ses collaborateurs [30]. Ce modèle s'applique, en particulier, pour étudier les réactions citées plus haut du type $A + B \rightarrow B$, ou la réaction catalytique $A + B \rightarrow C + B$, où B sont des cibles immobiles localisés sur un espace d -dimensionnel $\Omega = \partial V$. Une molécule mobile A diffuse en Ω , et interagit avec B aussitôt qu'elle l'atteint. Cependant, en des temps stochastiques, A est désorbé de Ω et réalise une excursion à l'intérieur de V (où aucun B n'est présent) avant d'être réadsorbé sur Ω puis de diffuser encore. La principale hypothèse de notre modèle est de traiter ces phases d'excursions comme des phases de "téléportations" : nous supposons que A est relocalisé au hasard dans Ω après un temps distribué exponentiellement ou plus généralement, après

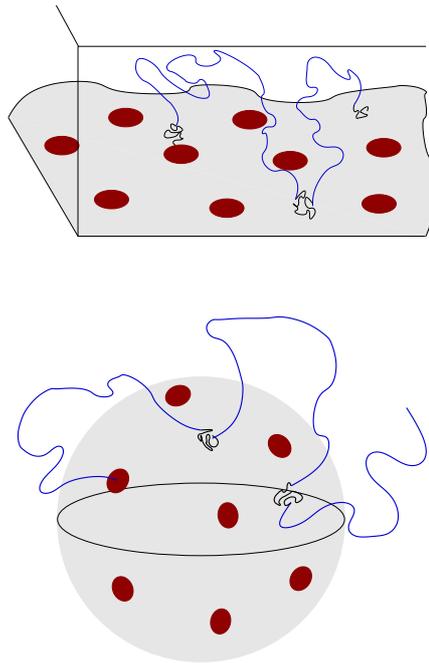


FIG. 12.1 – Catalyse hétérogène (en haut) et transport à travers une membrane cellulaire (en bas) en tant que processus de recherche intermittents. Le réactant (chercheur A) diffuse librement dans un volume confiné $3d$ (trajectoire bleue) jusqu'à ce qu'il atteigne le plan $2d$ ou l'interface sphérique, où il reste adsorbé et diffuse pendant un temps d'attente aléatoire (trajectoire noire), avant de désorber de retour dans le volume environnant. Le processus est poursuivi jusqu'à ce que A atteigne B (cercles rouges).

un temps stochastique avec une moyenne fini, indépendamment de ce déplacement (voir [6] pour des modèles apparentés). En gardant à l'esprit l'exemple de la catalyse hétérogène où Ω est un plan à $2d$, une "téléportation" est une approximation d'une excursion $3d$ dans le milieu environnant dans la limite suivante : le volume V doit être fini pour assurer un temps moyen de retour fini (par opposition aux distributions en lois de puissance obtenues pour V infini), et la distance typique couverte durant une excursion doit être plus large que la distance entre les cibles afin d'assurer que les relocations sont effectivement non corrélées. Remarquons qu'un volume fini accessible V peut être réalisé par un potentiel attractif confinant (électrostatique par exemple) vers l'interface Ω . Le gain net d'un tel comportement intermittent n'est pas évident, puisque la téléportation consomme du temps, et est en principe, improductive car aucune réaction n'intervient au cours de cette phase. Nous traiterons ce problème explicitement et montrerons que l'intermittence permet de minimiser le temps de première arrivée de A à B (ou temps de recherche) et ainsi, d'accélérer la réaction et d'augmenter le taux de réaction. En premier, nous présenterons un modèle continu à d dimensions, résolverons les équations correspondantes et calculerons le temps moyen de recherche B . Nous traiterons du problème d'optimisation et montrerons que la recherche peut être rendu plus courte grâce à l'intermittence. Alors, nous considérerons un modèle en réseau similaire et prouverons que l'optimisation est

aussi possible, mais que les conditions pour l'obtenir sont significativement différentes. Finalement, nous montrerons que les conclusions peuvent être étendues à des processus de recherche stochastiques plus généraux dans un espace arbitraire à d dimensions.

12.2 Teleportation in a continuous spherical system

12.2.1 Model

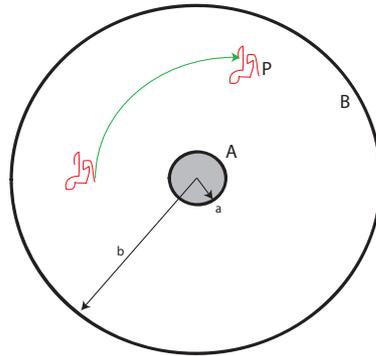


FIG. 12.2 – Chercheur : point P ; cible : sphère A de rayon a ; domaine de recherche : sphère B de rayon b

Nous considérons un point \mathbf{P} cherchant pour une cible immobile donnée. \mathbf{P} se déplace dans une région finie d'un espace à d dimensions, représentée par une sphère B de rayon b avec une surface interne réfléchissante. La cible est une sphère concentrique A de rayon $a < b$. Cependant, le chercheur peut seulement reconnaître la cible quand ses capteurs sont activés. En fait, le chercheur réalise un mouvement intermittent, alternant entre deux régimes dynamiques $i = 1, 2$:

- (1) durant le régime 1 (diffusion), il réalise une diffusion isotropique, et ses capteurs sont activés : il trouve la cible aussitôt qu'il l'atteint dans ce régime.
- (2) durant le régime 2 (teleportation), le chercheur est relocalisé avec une probabilité uniforme en n'importe quel point de la sphère B . Durant la teleportation, cependant, ses capteurs sont désactivés et la cible ne peut pas être trouvée.

La durée T_i de chaque régime i est une variable stochastique indépendante des autres événements, avec une loi exponentielle :

$$P(T_i > t) = \exp(-\lambda_i t), \quad (12.1)$$

avec $i = 1, 2$, les fréquences λ_i étant des paramètres constants.

La question est de trouver la stratégie optimale si elle existe pour atteindre la cible le plus rapidement possible.

12.2.2 Mean search time

Dans ce problème, le temps de recherche T_x est une variable basique, i.e. le temps de première arrivée T_x de P à la cible A dans le régime 1, partant de la position initiale \mathbf{x} . Soit $F(t|x)$ sa densité de probabilité et $F(t) = \langle F(t|x) \rangle_B$ sa moyenne sur la distribution initiale uniforme de P dans le volume B . Calculons la transformée de Laplace de $F(t)$, $\hat{F}(s) = \int_0^\infty dt e^{-st} F(t)$. Il peut être montré qu'elle (voir section IV et [28]) qu'elle peut s'écrire sous la forme,

$$\hat{F}(s) = \frac{\langle \tilde{j}_1(\lambda_1 + s|\mathbf{x}) \rangle_B + \frac{v(A)}{v(B)}}{1 - \frac{1 - \frac{v(A)}{v(B)} - \langle \tilde{j}_1(\lambda_1 + s|\mathbf{x}) \rangle_B}{(1 + \frac{s}{\lambda_1})(1 + \frac{s}{\lambda_2})}} \quad (12.2)$$

où A est l'espace occupé par la cible, B l'espace total disponible, $v(A)$ et $v(B)$ sont les volumes respectifs de ces régions.

Ici \tilde{j} est la transformée de Laplace de la densité de première arrivée qui est donnée par [64],

$$\tilde{j}_1(\lambda_1 + s|\mathbf{x}) = \left(\frac{r}{a}\right)^\nu \frac{D_{\nu,-}(r\sqrt{\frac{\lambda_1+s}{D}}, b\sqrt{\frac{\lambda_1+s}{D}})}{D_{\nu,-}(a\sqrt{\frac{\lambda_1+s}{D}}, b\sqrt{\frac{\lambda_1+s}{D}}} \quad (12.3)$$

où $r = |\mathbf{x}|$, et $D_{\nu,-}(x, y) = I_\nu(x)K_{\nu-1}(y) + K_\nu(x)I_{\nu-1}(y)$. $I_\nu(x)$ and $K_\nu(x)$ sont les fonctions de Bessel modifiées [1], with

$$\nu = 1 - \frac{d}{2} \quad (12.4)$$

Nous allons procéder ici au calcul de $\langle \tilde{j}(\lambda_1 + s|x) \rangle_B$ à partir de la formule (12.3).

$$\begin{aligned} \langle \tilde{j}(\lambda_1 + s|x) \rangle_B &= \int_{v(B)} \tilde{j}(\lambda_1 + s|x) \frac{dr}{v(B)} \\ &= \frac{1}{\int_0^b dr r^{2-2\nu-1} \int_a^b dr r^{2-2\nu-1} r^\nu} \frac{1}{a^\nu} \frac{I_\nu(\tilde{r})K_{\nu-1}(\tilde{b}) + K_\nu(\tilde{r})I_{\nu-1}(\tilde{b})}{I_\nu(\tilde{a})K_{\nu-1}(\tilde{b}) + K_\nu(\tilde{a})I_{\nu-1}(\tilde{b})} \\ &= \frac{2(1-\nu)}{b^{2(1-\nu)}} \frac{1}{a^\nu} \frac{1}{I_\nu(\tilde{a})K_{\nu-1}(\tilde{b}) + K_\nu(\tilde{a})I_{\nu-1}(\tilde{b})} \\ &\quad \left[K_{\nu-1}(\tilde{b}) \int_a^b dr r^{1-\nu} I_\nu(\tilde{r}) + I_{\nu-1}(\tilde{b}) \int_a^b dr r^{1-\nu} K_\nu(\tilde{r}) \right] \end{aligned}$$

Les intégrales précédentes peuvent être calculées explicitement,

$$\begin{aligned} \int_a^b dr r^{1-\nu} I_\nu(\tilde{r}) &= \left(\frac{D}{\lambda_1 + s}\right)^{1-\frac{\nu}{2}} \int_{\tilde{a}}^{\tilde{b}} du u^{1-\nu} I_\nu(u) = \left(\frac{D}{\lambda_1 + s}\right)^{1-\frac{\nu}{2}} \left[\tilde{b}^{1-\nu} I_{\nu-1}(\tilde{b}) - \tilde{a}^{1-\nu} I_{\nu-1}(\tilde{a}) \right] \\ \int_a^b dr r^{1-\nu} K_\nu(\tilde{r}) &= \left(\frac{D}{\lambda_1 + s}\right)^{1-\frac{\nu}{2}} \int_{\tilde{a}}^{\tilde{b}} du u^{1-\nu} K_\nu(u) = \left(\frac{D}{\lambda_1 + s}\right)^{1-\frac{\nu}{2}} \left[\tilde{a}^{\nu-1} K_{\nu-1}(\tilde{b}) - \tilde{b}^{\nu-1} K_{\nu-1}(\tilde{a}) \right] \end{aligned}$$

Finalement cela nous permet de calculer explicitement,

$$\begin{aligned}
 \langle \tilde{j}(\lambda_1 + s|x) \rangle_B &= \int_{v(B)} \tilde{j}(\lambda_1 + s|x) \frac{dr}{v(B)} = \frac{2(1-\nu)}{b^{2(1-\nu)}} \frac{1}{D_{\nu,-}(\tilde{a}, \tilde{b})} \frac{1}{a^\nu} \\
 &\quad \left[K_{\nu-1}(\tilde{b}) \left(\frac{D}{\lambda_1 + s} \right)^{1-\frac{\nu}{2}} [\tilde{b}^{1-\nu} I_{\nu-1}(\tilde{b}) - \tilde{a}^{1-\nu} I_{\nu-1}(\tilde{a})] \right. \\
 &\quad \left. + I_{\nu-1}(\tilde{b}) \left(\frac{D}{\lambda_1 + s} \right)^{1-\frac{\nu}{2}} [\tilde{a} K_{1-\nu}(\tilde{a}) - \tilde{b}^{1-\nu} K_{1-\nu}(\tilde{b})] \right] \\
 &= \frac{2(1-\nu)}{b^{2(1-\nu)}} a^{1-2\nu} \left(\frac{D}{\lambda_1 + s} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{K_{\nu-1}(\tilde{a}) I_{\nu-1}(\tilde{b}) - I_{\nu-1}(\tilde{a}) K_{\nu-1}(\tilde{b})}{K_{\nu-1}(\tilde{b}) I_{\nu}(\tilde{a}) + K_{\nu}(\tilde{a}) I_{\nu-1}(\tilde{b})} \equiv -k \frac{Y_\nu}{X_\nu}
 \end{aligned}$$

avec $k = \frac{da^{d-1}}{b^d} \left(\frac{D}{\lambda_1 + s} \right)^{\frac{1}{2}}$

On obtient donc,

$$\hat{F}(s) = \frac{-k \frac{Y_\nu}{X_\nu} + \frac{a^d}{b^d}}{1 - \frac{1 - \frac{a^d}{b^d} + k \frac{Y_\nu}{X_\nu}}{(1 + \frac{s}{\lambda_1})(1 + \frac{s}{\lambda_2})}} \quad (12.5)$$

avec

$$k = \frac{d}{b^d} \left(\frac{D}{\lambda_1 + s} \right)^{\frac{1}{2}} a^{d-1} \quad (12.6)$$

et

$$\bar{X}_\nu = K_{\nu-1}(b\sqrt{\frac{\lambda_1}{D}}) I_\nu(a\sqrt{\frac{\lambda_1}{D}}) + K_\nu(a\sqrt{\frac{\lambda_1}{D}}) I_{\nu-1}(b\sqrt{\frac{\lambda_1}{D}}) \quad (12.7)$$

$$\bar{Y}_\nu = K_{\nu-1}(b\sqrt{\frac{\lambda_1}{D}}) I_{\nu-1}(a\sqrt{\frac{\lambda_1}{D}}) - K_{\nu-1}(a\sqrt{\frac{\lambda_1}{D}}) I_{\nu-1}(b\sqrt{\frac{\lambda_1}{D}}) \quad (12.8)$$

Le temps moyen $\langle T \rangle$ est une quantité pertinente pour caractériser l'efficacité d'un chercheur. Elle est obtenue à partir de la dérivée de la densité de premier passage :

$$\langle T \rangle = - \left(\frac{\partial \hat{F}(s)}{\partial s} \right)_{s=0} \quad (12.9)$$

ce qui donne

$$\langle T \rangle = \frac{\lambda_1 + \lambda_2 \left[\left(\frac{b}{a} \right)^d - 1 \right] \bar{X}_\nu + \frac{d}{a} \sqrt{\frac{D}{\lambda_1}} \bar{Y}_\nu}{\lambda_1 \lambda_2 \bar{X}_\nu - \frac{d}{a} \sqrt{\frac{D}{\lambda_1}} \bar{Y}_\nu} \quad (12.10)$$

Cette formule explicite, exacte (12.10) est surtout utile pour minimiser le temps moyen de recherche en tant que fonctions de paramètres. Puisque a , b et D sont déterminés par la géométrie et les propriétés physiques du milieu, les fréquences de relaxation λ_1 et λ_2 , ou les durées moyennes $\tau_1 = 1/\lambda_1$ et $\tau_2 = 1/\lambda_2$ des phases 1 et 2, sont les paramètres ajustables principaux.

12.2.3 Optimization of the mean search time :

L'optimisation par rapport à λ_2 est évidente : le temps perdu en téléportation devrait être aussi court que possible, donc λ_2 devrait être aussi grand que possible. Nous considérons maintenant la minimisation de $\langle T \rangle$ par rapport à λ_1 . A partir de l'expression (12.10), le temps moyen de recherche peut être écrit

$$\langle T \rangle = \frac{\lambda_1 + \lambda_2 \left[\left(\frac{b}{a} \right)^2 - 1 \right] + 2 \frac{Z(x)}{x}}{\lambda_1 \lambda_2 \left(1 - 2 \frac{Z(x)}{x} \right)} \quad (12.11)$$

avec $Z(x) = \frac{K_\nu(x)}{K_\nu(x)}$ et $x = a \sqrt{\frac{\lambda_1}{D}}$

L'analyse de cette expression exacte (12.11) a été traitée numériquement dans les cas importants de deux et trois dimensions.

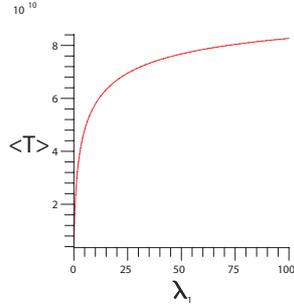


Fig 3a :

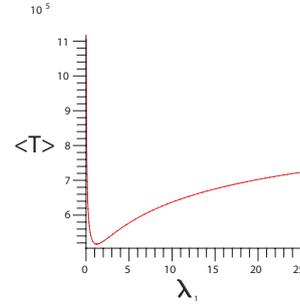


Fig 3b :

FIG. 12.3 – à 2 dimensions : graphes de $\langle T \rangle$ par rapport à λ_1 :

Fig 3a : $\langle T \rangle$ minimum pour $\lambda_1 = 0$ avec $a = 1$, $b = 10^3$, $d = 2$, $D = 1$, $\lambda_2 = 10^{-5}$

Fig 3b : $\langle T \rangle$ minimum pour un λ_1 fini with $a = 1$, $b = 10^3$, $d = 2$, $D = 1$, $\lambda_2 = 10$

On peut voir que deux cas peuvent arriver : pour les petites valeurs de λ_2 , $\langle T \rangle$ augmente avec λ_1 , et la valeur minimale est obtenue avec $\lambda_1 = 0$, ou $\tau_1 = \infty$, en ayant ainsi un régime diffusif ininterrompu. Alors, l'intermittence n'est pas favorable à la recherche et doit être évitée. D'un autre côté, pour de grandes valeurs de λ_2 , $\langle T \rangle$ décroît avec λ_1 ; pour λ_1 petit, il y a un minimum pour une valeur finie $\bar{\lambda}_1$ of λ_1 , puis il augmente pour $\lambda_1 > \bar{\lambda}_1$. Alors, l'intermittence est favorable à la recherche et cela permet de réduire le temps de recherche en partie.

La valeur critique λ_{2c} separant ces deux régimes peut être obtenus explicitement, dépendant de la dimension d . Dans le cas $b/a \gg 1$, cela donne simplement :

in 2 dimensions :

$$\lambda_{2c} \sim \frac{96D \ln(\frac{b}{a})}{7b^2} \quad \text{quand } b \gg a \quad (12.12)$$

in 3 dimensions :

$$\lambda_{2c} \sim \frac{35D}{12ab} \quad \text{quand } b \gg a \quad (12.13)$$

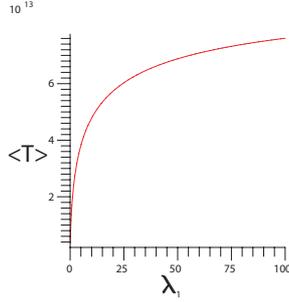


Fig 4a :

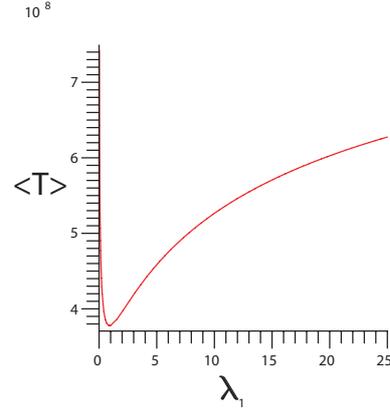


Fig 4b :

FIG. 12.4 – à 3 dimensions : graphes de $\langle T \rangle$ par rapport à λ_1 :

Fig 4a : $\langle T \rangle$ minimum pour $\lambda_1 = 0$ with $a = 1$, $b = 10^3$, $d = 3$, $D = 3$, $\lambda_2 = 10^{-5}$

Fig 4b : $\langle T \rangle$ minimum pour λ_1 fini avec $a = 1$, $b = 10^3$, $d = 3$, $D = 3$, $\lambda_2 = 10$

Si $\lambda_2 > \lambda_{2c}$, la valeur optimale $\bar{\lambda}_1$ of λ_1 peut être calculée numériquement. Il est possible aussi d'obtenir des approximations simples dans des situations spécifiques. C'est le cas important de la limite de basse densité qui est couramment observée.

limite de basse densité : on suppose maintenant que le volume de la région de recherche B est beaucoup plus grand que le volume de la cible A : $b^d \gg a^d$, et, par ailleurs, nous supposons que $b^2 \gg D/\lambda_1$, ce qui entraîne que fraction moyenne de B explorée durant une simple phase diffusive est très petite. Alors

$$Z(x) \sim -\frac{K_{\nu-1}(x)}{K_{\nu}(x)} \quad (12.14)$$

D'un autre côté, on suppose que b est assez grand pour satisfaire

$$\left(\frac{b}{a}\right)^d \gg d \left| \frac{Z(x)}{x} \right| \quad (12.15)$$

La formule (12.10) se simplifie alors beaucoup et permet d'étudier l'optimisation de $\langle T \rangle$ analytiquement dans les cas des temps d'attente longs et courts.

temps d'attente courts : Considérons en premier le cas $x = a\sqrt{\frac{\lambda_1}{D}} \gg 1$, ou $\tau_1 \ll \tau \equiv \frac{a^2}{D}$. Alors $Z(x) \sim -1$, l'inégalité(12.15) est valide et la formule exacte(12.10) peut être approximée par

$$\langle T \rangle \sim \frac{1}{2} \left(\frac{b}{a}\right)^d \frac{\lambda_1 + \lambda_2}{\lambda_1 \lambda_2} \frac{x}{x + d} \quad (12.16)$$

Il est facilement trouvé que cette expression atteint son minimum si

$$\lambda_1 = \lambda_2 \left[1 + \frac{2}{d} \sqrt{\frac{\lambda_1 a^2}{D}} \right] \quad (12.17)$$

Alors l'hypothèse $x = a\sqrt{\frac{\lambda_1}{D}} \gg 1$ entraîne que $a\sqrt{\frac{\lambda_2}{D}} \gg 1$ et la valeur optimale $\bar{\lambda}_1$ of λ_1 est

$$\bar{\lambda}_1 \sim \left(\frac{2}{d}\right)^2 \frac{a^2}{D} \lambda_2^2 \quad (12.18)$$

Autrement dit, ce cas s'applique quand les temps d'attente τ_1 et τ_2 sont tous les deux beaucoup plus petits que le temps caractéristique $\tau \equiv a^2/D$: la valeur optimale de τ_1 varie en τ_2^2 , nous avons $\bar{\tau}_1 \ll \tau_2 \ll \tau$ et

$$\frac{\bar{\tau}_1}{\tau} \sim \left(\frac{d}{2}\right)^2 \left(\frac{\tau_2}{\tau}\right)^2 \quad (12.19)$$

Il doit être remarqué que dans ce cas, le chercheur passe plus de temps en téléportation, bien qu'il ne puisse pas trouver la cible dans ce régime, qu'en diffusion. Ce résultat contre-intuitif avait aussi été remarqué dans le cas d'une diffusion alternant avec un mouvement balistique [10]. Alors le temps minimum de recherche est simplement

$$\langle T \rangle_{min} = \frac{1}{2} \left(\frac{b}{a}\right)^d \tau_2 \quad (12.20)$$

Ces résultats restent valides en toute dimension d . Ainsi $\langle T \rangle_{min}$ a sa plus petite valeur effective quand τ_2 est à son minimum τ_{2min} , comme nous l'avons déjà souligné.

L'efficacité de l'intermittence peut être caractérisée par le rapport $E = \frac{\langle T \rangle_{diff}}{\langle T \rangle_{min}}$, $\langle T \rangle_{diff}$ étant temps de recherche dans un régime purement diffusif. On trouve que si $b \gg a$, à 1,2 et 3 dimensions, E a les valeurs respectives

$$E = \begin{cases} \frac{2}{3} \frac{ab}{D\tau_2} = \frac{2}{3} \frac{b}{a} \frac{\tau}{\tau_2} & \text{si } d = 1 \\ \frac{a^2}{D\tau_2} \ln\left(\frac{b}{a}\right) = \ln\left(\frac{b}{a}\right) \frac{\tau}{\tau_2} & \text{si } d = 2 \\ \frac{2}{d(d-2)} \frac{\tau}{\tau_2} & \text{si } d \geq 3 \end{cases} \quad (12.21)$$

Ainsi E est beaucoup plus grand que 1 si $\tau_2 \ll \tau$ et en 1 et 2 dimensions, $\frac{b}{a} \gg 1$. L'amélioration qui apparaît dans le dernier facteur disparaît en 3 ou plus haute dimension. Comme conclusion, dans la limite des temps d'attente courts τ_2 , ou des larges fréquences λ_2 , l'efficacité est proportionnelle à λ_2 en toute dimension, comme c'est confirmé par des analyses numériques (Fig 5). Il est clair que l'efficacité de l'intermittence dépend de la valeur minimale possible τ_{2min} , et qu'elle décroît alors que d augmente. Néanmoins, l'intermittence peut toujours être une stratégie de recherche favorable si τ_2 peut être suffisamment petit, et si la valeur minimale réalisable de τ_1 , τ_{1min} lui permet d'atteindre la valeur optimale $\bar{\tau}_1$.

temps d'attente longs :

La limite opposée des *temps d'attente longs*, quand à la fois τ_1 et τ_2 sont beaucoup plus grand que τ , est en principe moins favorable, les conditions (12.12,12.13) imposent des bornes supérieures sur τ_2 pour que l'intermittence soit favorable. Néanmoins, ce cas est observé en pratique si le temps caractéristique τ , qui est imposé par les conditions physiques, est beaucoup plus petit τ_{1min} et τ_{2min} .

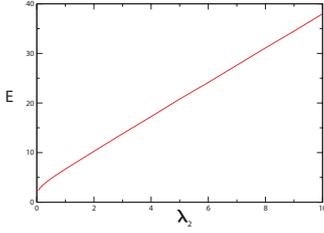


Fig 5a :

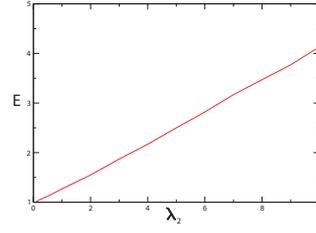


Fig 5b :

FIG. 12.5 – Graphes de l'efficacité $E = \langle T \rangle_{diff} / \langle T \rangle_{min}$ par rapport à λ_2 :

Fig 5a : 2 dimensions : $a = 1, b = 10^3, d = 2, D = 1$

Fig 5b : 3 dimensions : $a = 1, b = 10^3, d = 2, D = 1$

Dans cette limite $\tau_1 \gg \tau = \frac{a^2}{D}$, ou $x = a\sqrt{\frac{\lambda_1}{D}} \ll 1$, nous avons

$$Z(x) = -\frac{K_{\nu-1}(x)}{K_{\nu}(x)} \begin{cases} = -1 & \text{in } d = 1 \\ \sim -\frac{1}{x \ln(x)} & \text{in } d = 2 \\ \sim -\frac{d-2}{x} & \text{in } d = 3 \end{cases} \quad (12.22)$$

Alors, de façon à ce que (12.15) soit satisfaite, x ne doit pas être inférieure qu'une borne inférieure \underline{x} dépendant de $\frac{b}{a}$, ce que nous supposons.

Par ailleurs, nous avons quand $\lambda_1 \rightarrow \infty$:

$$\langle T \rangle_{diff} = \begin{cases} \frac{b^2}{3D} = \frac{1}{3} \left(\frac{b}{a}\right)^2 \tau & \text{in } d = 1 \\ \frac{b^2}{2D} \ln\left(\frac{b}{a}\right) = \frac{1}{2} \left(\frac{b}{a}\right)^2 \ln\left(\frac{b}{a}\right) \tau & \text{in } d = 2 \\ \frac{b^d}{d(d-2)Da^{d-2}} = \frac{1}{d(d-2)} \left(\frac{b}{a}\right)^d \tau & \text{in } d \geq 3 \end{cases} \quad (12.23)$$

A une dimension, les calculs sont les mêmes que dans la limite des temps courts et la valeur optimale de λ_1 satisfait (12.17), mais maintenant $x \ll 1$, si bien que

$$\bar{\lambda}_1 \sim \lambda_2 \quad (12.24)$$

et $\bar{\tau}_1 \sim \tau_2 \ll \tau$

La valeur minimum de $\langle T \rangle$ est maintenant donné par

$$\langle T \rangle_{min} \sim \frac{2b}{\sqrt{D}} \sqrt{\tau_2} \quad (12.25)$$

et l'efficacité est

$$E = \frac{2}{3} \frac{b}{\sqrt{D\tau_2}} = \frac{2}{3} \frac{b}{a} \sqrt{\frac{\tau}{\tau_2}} \quad (12.26)$$

A deux dimensions,

$$\begin{aligned} \langle T \rangle &\sim \frac{1}{2} \left(\frac{b}{a}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{\lambda_1 + \lambda_2}{\lambda_1 \lambda_2} x^2 |\ln(x)| \\ &= \frac{b^2}{2D} \left(1 + \frac{\lambda_1}{\lambda_2}\right) \left| \ln\left(a\sqrt{\frac{\lambda_1}{D}}\right) \right| \end{aligned} \quad (12.27)$$

Si $\lambda_2 > \lambda_{2c}$, la valeur optimale $\bar{\lambda}_1$ de λ_1 satisfait

$$\frac{\partial \langle T \rangle}{\partial \lambda_1} \propto \frac{\lambda_1}{\lambda_1 + \lambda_2} + \frac{1}{2 \ln(x)} = 0 \quad (12.28)$$

ce qui implique

$$x^2 |\ln(x^2)| = \frac{a^2 \lambda_2}{D} \equiv c^2 \quad (12.29)$$

et $c \ll 1$. Finalement, on obtient

$$\bar{\lambda}_1 \sim \frac{\lambda_2}{|\log(a^2 \frac{\lambda_2}{D})|} \left[1 - \frac{\log|\log(a^2 \frac{\lambda_2}{D})|}{|\log(a^2 \frac{\lambda_2}{D})|} \right] \quad (12.30)$$

si bien que $\bar{\lambda}_1 \ll \lambda_2$ et $\bar{\tau}_1 \gg \tau_2 \gg \tau$

Des analyses numériques des formules exactes montrent que les approximations sont très précises dans ces situations, l'erreur relative étant de l'ordre de 10^{-3} .

En insérant cette valeur dans (12.27) et en prenant en compte (12.29), nous trouvons le temps de recherche minimal

$$\begin{aligned} \langle T \rangle_{min} &\sim \frac{1}{4} \left(\frac{b}{a} \right)^2 \frac{a^2}{D} \left(\frac{\bar{x}}{c} + \frac{c}{\bar{x}} \right) \\ &\sim \frac{b^2}{4D} [\gamma + \ln(\gamma) + 1 + \dots] \end{aligned} \quad (12.31)$$

avec $\gamma = |\ln(c^2)| = \left| \ln\left(\frac{a^2 \lambda_2}{D}\right) \right|$

et à partir de (12.22) et (12.23), l'efficacité de l'intermittence est maintenant

$$E \sim 2 \frac{\ln(\frac{b}{a})}{\ln(c^2)} = \frac{\ln(\frac{b^2}{a^2})}{\ln(\frac{\tau_2}{\tau})} \quad (12.32)$$

Elle est beaucoup plus grande que 1 si la condition (12.15), est satisfaite, puisque nous avons

$$\frac{D\tau_2}{a^2} < \frac{7}{96} \frac{b^2}{\ln(\frac{b}{a})} \ll \frac{b^2}{a^2} \quad (12.33)$$

Finalement, à *trois dimensions*, nous avons

$$Z(x) \sim -\frac{K_{\frac{3}{2}}(x)}{K_{\frac{1}{2}}(x)} = -\frac{x+1}{x} \quad (12.34)$$

qui est valide pour n'importe quel $x = a\sqrt{\frac{\lambda_1}{D}}$, et

$$\begin{aligned} \langle T \rangle &\sim \frac{1}{3} \left(\frac{b}{a} \right)^3 \frac{\lambda_1 + \lambda_2}{\lambda_1 \lambda_2} \frac{x^2}{x+1} \\ &= \frac{b^3}{3Da} \left(1 + \frac{\lambda_1}{\lambda_2} \right) \frac{1}{1 + a\sqrt{\frac{\lambda_1}{D}}} \end{aligned} \quad (12.35)$$

si bien que

$$\frac{\partial \langle T \rangle}{\partial \lambda_1} \propto \frac{\lambda_1}{\lambda_1 + \lambda_2} - \frac{1}{2} \frac{1}{\lambda_1} \frac{x}{1+x} \quad (12.36)$$

La valeur optimale de λ_1 à 3 dimensions est alors

$$\bar{\lambda}_1 = \frac{D}{a^2} \left[-1 + \sqrt{1 + \frac{a^2 \lambda_2}{D}} \right]^2 \quad (12.37)$$

On en tire le temps de recherche minimal pour n'importe quel λ_2 ou τ_2

$$\langle T \rangle_{min} = \frac{b^3}{Da} \frac{1}{1 + \sqrt{1 + \frac{\lambda_2 a^2}{D}}} \quad (12.38)$$

La condition $x \equiv a\sqrt{\frac{\lambda_1}{D}} \ll 1$ entraîne $a\sqrt{\frac{\lambda_2}{D}} \ll 1$ et

$$\bar{\lambda}_1 \sim \frac{1}{4} \frac{a^2}{D} \lambda_2^2 \quad \text{or} \quad \frac{\bar{\tau}_1}{\tau} \sim \frac{1}{4} \left(\frac{\tau_2}{\tau} \right)^2 \quad (12.39)$$

Alors $\tau \ll \tau_2 \ll \tau_1$, et τ_1 varie en τ_2^2 , comme trouvé en (12.18), et nous avons

$$\langle T \rangle_{min} \sim \frac{b^3}{3Da} = \frac{b^3}{3a^3 \tau} \quad (12.40)$$

et l'efficacité est

$$E = \frac{1}{2} \left(1 + \sqrt{1 + \frac{\tau}{\tau_2}} \right) > 1 \quad (12.41)$$

Une fois encore, elle augmente si τ_2 décroît, mais si $\tau_2 \gg \tau$, elle est proche de 1. Il doit être noté que cette approximation est seulement valide si la condition (12.15) tient, ou, en utilisant (12.39)

$$\frac{\tau_2}{\tau} \ll \frac{2}{\sqrt{3}} \left(\frac{b}{a} \right)^{\frac{3}{2}} \quad (12.42)$$

L'efficacité n'est pas significativement supérieure à 1, l'intermittence est à peine utile dans une telle situation. De même, on peut voir que si $\tau_2 > \tau$ l'intermittence n'est pas une stratégie de recherche favorable en dimension $d > 3$.

L'intermittence permet de réduire le temps de recherche à une et deux dimensions mais cette stratégie perd de son intérêt à plus haute dimension.

Une partie des conclusions de cette section sont étendues qualitativement à des situations plus générales dans la section 13.4 .

12.3 Discrete systems

Nous supposons maintenant que le chercheur se déplace sur un réseau régulier.

12.3.1 One dimensional lattice

Considérons $N = 2L + 1$ points également espacés sur un réseau le long d'un axe Ox . Entre les coordonnées $-L$ et L une cible A est placée en 0. Le chercheur P alterne maintenant entre deux régimes dynamiques :

- (i) durant le régime 1, P réalise une marche aléatoire à temps continu entre les points $-L$ et L qui sont réfléchissants, alors que la cible A est absorbante. Le taux de transition d'un point du réseau x vers un des ses voisins les plus proches est $\frac{p}{2}$
- (ii) durant le régime 2, ou téléportation, P est au hasard relocalisé sur n'importe quel point compris dans $(-L, L)$
- (iii) La durée T_i d'un régime i , ($i = 1, 2$) est une variable exponentielle, indépendante.

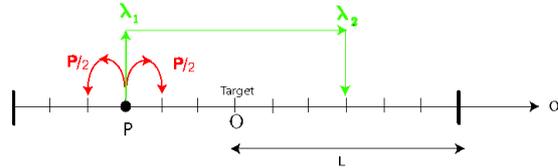


FIG. 12.6 – réseau à une dimension

Temps moyen de recherche

La formule (12.2) s'applique toujours et donne la transformée de Laplace de la densité du temps de recherche :

$$\hat{F}(s) = \frac{\langle j_1(s|x) \rangle + \frac{1}{2L+1}}{1 - \frac{1 - \frac{1}{2L+1} - \langle j_1(s|x) \rangle}{(1 + \frac{s}{\lambda_1})(1 + \frac{s}{\lambda_2})}} \quad (12.43)$$

$\langle j_1(s|x) \rangle$ est la transformée de Laplace de la densité de temps de recherche dans le régime 1, moyenné sur la position initiale x

En utilisant l'article de Montroll [51] et le livre de Hughes [40] en temps continu, on trouve que :

$$\langle j_1(s|x) \rangle = \frac{1}{N} \left[\frac{1}{(1 - \frac{p}{p+s})P(0, \frac{p}{p+s})} - 1 \right] \quad (12.44)$$

où $P(0, z)$ est la fonction génératrice pour toutes les marches qui partent et se terminent à l'origine.

$$P(0, z) = \frac{1}{N} \sum_{k=0}^{N-1} \frac{1}{1 - z \cos(\frac{2\pi k}{N})} = \frac{1 + x^N}{1 - x^N} \frac{1}{\sqrt{1 - z^2}} \quad (12.45)$$

avec

$$x = \frac{1}{z}[1 - \sqrt{1 - z^2}] \quad (12.46)$$

Finalement, après de longs calculs, $\langle T \rangle$ s'écrit

$$\langle T \rangle = \frac{\lambda_1 + \lambda_2}{\lambda_1 \lambda_2} \frac{2L(\lambda_1 + p - \alpha)(\alpha^{2L+1} + p^{2L+1}) - p(p + \alpha)(p^{2L} - \alpha^{2L})}{(2p + \lambda_1)(p^{2L+1} - \alpha^{2L+1})} \quad (12.47)$$

avec $\alpha = \lambda_1 + p - \sqrt{\lambda_1} \sqrt{\lambda_1 + 2p}$

Optimisation du temps moyen de recherche

On peut observer que $\langle T \rangle$ peut avoir trois comportements possibles comme fonction de λ_1 (Fig.7)

- (i) si $\frac{p}{\lambda_2} < \frac{2L}{2L+1}$, $\langle T \rangle$ augmente continuellement avec λ_1 , et $\langle T \rangle$ est minimum si $\lambda_1 = 0$
- (ii) si $\frac{2L}{2L+1} < \frac{p}{\lambda_2} < \frac{2}{15}(3 + L + L^2)$, $\langle T \rangle$ est minimum pour une valeur finie $\bar{\lambda}_1$ de λ_1
- (iii) si $\frac{p}{\lambda_2} > \frac{2}{15}(3 + L + L^2)$, $\langle T \rangle$ décroît avec λ_1 et la minimisation du temps de recherche nécessite de prendre λ_1 aussi grand que possible.

Il peut être remarqué qu'avec la condition (iii), $\langle T \rangle$ décroît avec λ_1 vers une borne inférieure. Alors l'intermittence est toujours favorable. C'est la différence principale avec le modèle continu. Nous verrons en section que ce comportement peut être observé dans des systèmes intermittents plus généraux mais pas si le régime 1 est diffusif.

Limite de basse densité

Pour $L \rightarrow \infty$, $\langle T \rangle$ peut être approximé par

$$\langle T \rangle = 2 \frac{\lambda_1 + \lambda_2}{\lambda_1 \lambda_2} \frac{1}{\sqrt{1 + 2\frac{p}{\lambda_1}}} L \quad (12.48)$$

Dans cette limite, la condition (iii) ne peut pas être satisfaite, mais on peut obtenir un temps de recherche minimum pour une valeur finie de λ_1 , si $p > \lambda_2$.

Alors, la valeur optimale de $\bar{\lambda}_1$ est donné par

$$\bar{\lambda}_1 = \frac{p}{p - \lambda_2} \lambda_2 \quad (12.49)$$

Si $p \gg \lambda_2$, la marche aléatoire est approximativement une diffusion et on trouve que $\bar{\lambda}_1 \sim \lambda_2$, comme dans le cas continu à une dimension.

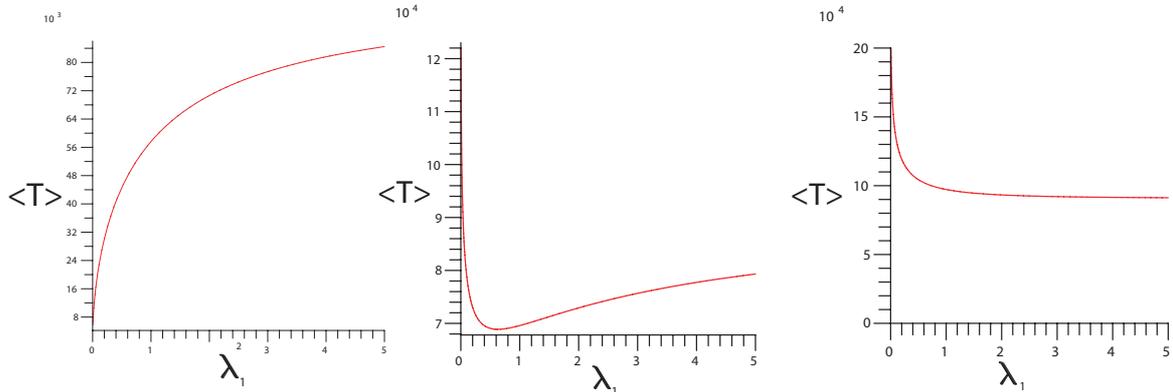


Fig 7a :

Fig 7b :

Fig 7c :

FIG. 12.7 – Réseau à 1 dimension : graphes de $\langle T \rangle$ par rapport λ_1 :

Fig 7a : $\langle T \rangle$ avec $L = 100$, $p = 1$, $\lambda_2 = 0.0001$

Fig 7b : $\langle T \rangle$ avec $L = 100$, $p = 1$, $\lambda_2 = 0.1$

Fig 7c : $\langle T \rangle$ avec $L = 100$, $p = 1$, $\lambda_2 = 1$

12.3.2 2 dim lattice

Pour une simple marche aléatoire sur un réseau carré de $m \times m = N$ points, nous avons [38], [51] :

$$P(0, z) = \frac{1}{m^2} \sum_{k_1=0}^{m-1} \sum_{k_2=0}^{m-1} \frac{1}{1 - \frac{1}{2}(c_{k_1} + c_{k_2})} \quad (12.50)$$

avec $c_k = \cos(\frac{2\pi k}{m})$ $0 \leq z \leq 1$

ou

$$P(0, z) = \frac{1}{m} \sum_{k=0}^{m-1} \frac{1}{1 - \frac{1}{2}z c_k} \frac{1}{1 - \rho_k^2} \frac{1 + x_k^m}{1 - x_k^m} \quad (12.51)$$

où $\rho_k = z(2 - z c_k)$, $x_k = (1 - (1 - \rho_k^2)^{1/2})\rho_k^{-1}$

On trouve numériquement que les trois situations décrites précédemment peuvent arriver (Fig.8) .

(i) Pour de très petites valeurs de λ_2 (par rapport à p) , $\langle T \rangle$ augmente continument avec λ_1 , et est minimum pour $\lambda_1 = 0$: l'intermittence n'est pas favorable

(ii) Pour des valeurs intermédiaires de λ_2 , $\langle T \rangle$ est minimum pour une valeur finie $\bar{\lambda}_1$ de λ_1

(iii) Pour de grandes valeurs de λ_2 , $\langle T \rangle$ décroît avec λ_1 et la recherche est optimisée en prenant λ_1 aussi grand que possible.

A cause de la complexité des formules analytiques, il est difficile de donner des conditions précises pour ces observations.

Dans le cas (ii), des calculs numériques de la valeur optimale $\bar{\lambda}_1$ montre que elle peut être approximativement estimée par la formule (??) quand $p \rightarrow \infty$

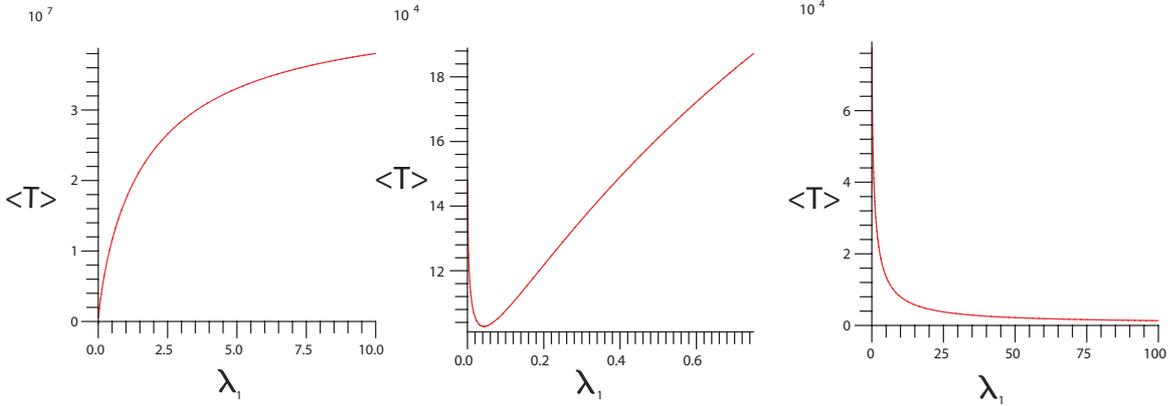


Fig 8a :

Fig 8b :

Fig 8c :

FIG. 12.8 – réseau à deux dimensions : graphes de $\langle T \rangle$ par rapport à λ_1 :

Fig 8a : $\langle T \rangle$ avec $L = 150$, $p = 2$, $\lambda_2 = 0.002$

Fig 8b : $\langle T \rangle$ avec $L = 150$, $p = 2$, $\lambda_2 = 0.2$

Fig 8c : $\langle T \rangle$ avec $L = 150$, $p = 2$, $\lambda_2 = 200$

12.4 Mean search time. General results.

Le mouvement intermittent d'un chercheur ponctuel alternant un lent mouvement (régime 1), qui permet la détection d'une cible immobile, et un mouvement rapide (régime 2) sans détection, peut être formulé plus généralement, quand la région de recherche est n'importe quel volume B fini d -dimensionnel et la cible est un sous-volume A inclus dans B . Des conclusions générales peuvent être obtenues bien que des modèles spécifiques soient nécessaires pour avoir des formules explicites. Nous décrivons maintenant le formalisme général.

Régime de recherche 1 : durant ce régime, la cible est trouvée aussitôt que \mathbf{P} est en B . $q_1(t|x)$ est la probabilité de survie de la cible au temps t au régime 1, partant de x .

La durée T_1 du régime 1, est une variable stochastique exponentielle, indépendante des autres événements

$$P(T_1 > t) = e^{-\lambda_1 t} \quad (12.52)$$

Alors la densité de probabilité que le régime 1 s'arrête au temps t sans découvrir la cible est

$$\bar{p}_1(t|x) \equiv \lambda_1 e^{-\lambda_1 t} q_1(t|x) \quad (12.53)$$

Régime de déplacement 2 : durant ce régime \mathbf{P} est redistribué dans le volume B avec une densité stationnaire $p_0(y)$, indépendamment de sa position initiale x et de la durée de ce régime. La "téléportation" correspond au cas particulier d'une densité stationnaire uniforme. La durée T_2 du régime 2 est une variable stochastique, indépendante des autres événements, pas nécessairement exponentielle dans le cas général. Nous notons $\varphi_2(t) = -\frac{d\psi_2(t)}{dt}$ sa densité de probabilité, $\psi_2(t)$ étant la probabilité de survie du régime 2 après un temps t .

Probabilité de survie totale : La probabilité de survie totale de \mathbf{P} au temps t , commençant au temps 0 de la position $x \in B-A$, et sachant que \mathbf{P} a réalisé précédemment $2n$ changements de régime aux temps $0 < t_1 < t_2 < \dots < t_{2n} < t$ est clairement donné par

$$S_{2n}(t|x, t_1, \dots, t_{2n}) = \int_{x_{2k} \in B-A} dx_2 \dots dx_{2n} \bar{p}_1(\tau_1|x) \bar{p}_1(\tau_3|x_2) p_0(x_2) \dots q_1(\tau|x_{2n}) p_0(x_{2n}) \quad (12.54)$$

avec $\tau_1 = t_1, \tau_i = t_i - t_{i-1}, \tau = t - t_{2n}$

En multipliant par $p_0(x)$ et en intégrant sur la position initiale x , on obtient la probabilité de survie moyenne

$$S_{2n}(t|t_1 \dots t_{2n}) = [\prod_{1 \leq k \leq n} \bar{p}_1(\tau_{2k-1})] q_1(\tau) \quad (12.55)$$

où $\bar{p}_1(\tau) = \int_{x \in B-A} dx \bar{p}_1(\tau|x) p_0(x)$, $q_1(\tau) = \int_{x \in B-A} dx q_1(\tau|x) p_0(x)$

Ainsi la probabilité moyenne que \mathbf{P} survive au temps t après $2n$ changements de régime est

$$S_{2n}(t) = \int_{\tau_1 + \dots + \tau_{2n+1} = t} \prod_{1 \leq k \leq n} [d\tau_{2k} e^{-\lambda_1 \tau_1}] \prod_{1 \leq k \leq n} [d\tau_{2k} \varphi_2(\tau_{2k})] e^{-\lambda_1 \tau_{2k}} S_{2n}(t|t_1, \dots, t_{2n}) \quad (12.56)$$

et sa transformée de Laplace est

$$\tilde{S}_{2n}(s) = [\lambda_1 \tilde{q}_1(s + \lambda_1)]^n \tilde{q}_1(s + \lambda_1) [\tilde{\varphi}_2(s)]^n \quad (12.57)$$

où $\tilde{q}_1(s)$ et $\tilde{\varphi}_2(s)$ sont les transformées de Laplace de $q_1(t)$ et $\varphi_2(t)$. De même, on trouve que la transformée de Laplace de la probabilité de survie après $2n+1$ changements de régime est

$$\tilde{S}_{2n+1}(s) = [\lambda_1 \tilde{q}_1(s + \lambda_1)]^{n+1} \tilde{\psi}_2(s) \quad (12.58)$$

$\tilde{\psi}_2(s) = \frac{1 - \tilde{\varphi}_2(s)}{s}$ étant la transformée de Laplace de $\psi_2(t)$, la probabilité de survie du régime 2

En sommant (12.57) et (12.58) sur n , on obtient la transformée de Laplace de la probabilité de survie totale de la particule P :

$$\tilde{S}(s) = \frac{\tilde{q}_1(s + \lambda_1) [\lambda_1 \tilde{\psi}_2(s) + 1]}{1 - \lambda_1 \tilde{q}_1(s + \lambda_1) \tilde{\varphi}_2(s)} \quad (12.59)$$

Dans le cas d'une *densité de probabilité uniforme* (téléportation), nous avons

$$\begin{aligned} \tilde{q}_1(s) &= \frac{1}{v(B)} \int_{x \in B-A} dx \frac{1}{s} [1 - \tilde{j}_1(s|x)] \\ &= \frac{1}{s} [\beta - \langle \tilde{j}_1(s) \rangle_B] \end{aligned} \quad (12.60)$$

où $\tilde{j}_1(s|x)$ est la transformée de Laplace du la densité du temps de recherche *durant le régime 1*, et $\langle \tilde{j}_1(s) \rangle_B$ est sa moyenne sur la région B . Par ailleurs, $v(A)$ et $v(B)$ sont les volumes de A et B , et $\beta = 1 - \alpha = \frac{v(A)-v(B)}{v(B)}$.

Si la densité initiale est uniforme et si T_2 est exponentiel, la transformée de Laplace $\tilde{F}(s)$ de la densité du temps moyen de recherche $-\frac{\partial S(t)}{\partial t}$ est donné par

$$\tilde{F}(s) = \frac{\langle \tilde{j}_1(s|x) \rangle_B + \alpha}{1 - \frac{1 - \langle \tilde{j}_1(s|x) \rangle_B - \alpha}{(1 + \frac{s}{\lambda_1})(1 + \frac{s}{\lambda_2})}} \quad (12.61)$$

Temps moyen de recherche

Le temps moyen de recherche $\langle T \rangle$ est obtenu en prenant $s = 0$ dans la formule (12.59) :

$$\langle T \rangle = \frac{\tilde{q}_1(\lambda_1)}{1 - \lambda_1 \tilde{q}_1(\lambda_1)} \left(1 + \frac{\lambda_1}{\lambda_2}\right) \quad (12.62)$$

où nous pouvons remarquer que $\tilde{\varphi}_2(0) = 1$ si le temps d'attente T_2 est fini avec la probabilité 1 et que $\tilde{\psi}_2(0) = \tau_2 \equiv \frac{1}{\lambda_2}$ est la durée moyenne du régime 2. Si τ_2 est infini, le temps moyen de recherche est aussi infini. Des résultats similaires et plus précis sont donnés dans [30] mais ne sont pas utilisés ici.

Supposons que la durée moyenne du régime 2 est fini. $\langle T \rangle$ est évidemment une fonction décroissante de λ_2 , ou une fonction croissante de τ_2 , si bien que τ_2 doit être aussi petit que possible. Il est clair qu'en pratique la durée du régime 2 a une valeur minimale réalisable τ_{2min} du aux temps finis nécessaires pour toutes les opérations. Ainsi nous supposons que la durée moyenne du régime 2 est τ_{2min} , et nous considérons $\langle T \rangle$ comme une fonction de τ_1 .

Comportement asymptotique de $\langle T \rangle$ quand $\lambda_1 \rightarrow +\infty$

On voit facilement que

$$\lambda_1 \tilde{q}(\lambda_1) = \beta [1 - \langle \tilde{j}_1(\lambda_1|x) \rangle_{B-A}] \quad (12.63)$$

où $\beta = \int_{x \in B-A} dx p_0(x)$ est la probabilité stationnaire que $P \in B-A$ et $\langle \tilde{j}_1(\lambda_1|x) \rangle_{B-A} = \frac{1}{\beta} \int_{x \in B-A} dx \tilde{j}_1(\lambda_1|x) p_0(x)$ est la moyenne stationnaire de $\tilde{j}_1(\lambda_1|x)$ normalisée sur $B-A$

Le comportement de $\tilde{j}_1(\lambda_1|x)$ quand $\lambda_1 \rightarrow \infty$ dépend du comportement de $j_1(t|x)$ quand $t \rightarrow 0$, et on trouve que *si la densité du temps de recherche est finie dans le régime 1 pour $t = 0$, $j_1(0|x) = a_1(x)$, alors $\lambda_1 \tilde{q}_1(\lambda_1) \sim \beta [1 - \frac{\langle a_1 \rangle_{B-A}}{\lambda_1}]$ quand $\lambda_1 \rightarrow \infty$ et*

$$\langle T \rangle \sim \frac{1}{\lambda_2} \frac{\beta}{1 - \beta} \left[1 - \frac{1}{\lambda_1} \left(\frac{\langle a_1 \rangle_{B-A}}{1 - \beta} - \lambda_2 \right) + \dots \right] \quad (12.64)$$

Ainsi, quand $\lambda_1 \rightarrow \infty$ le temps moyen de recherche $\langle T \rangle$ tend vers la limite finie $\frac{\beta}{1 - \beta} \tau_2$. En outre, à moins que $a_1(x) = 0$ pour n'importe quel $x \in B-A$, $\langle T \rangle$ tend vers cette limite par valeurs inférieures pourvu que $1 - \beta < \langle a_1(x) \rangle_{B-A} \tau_2$ (ce qui d'autant plus satisfait que la probabilité stationnaire $1 - \beta$ de la cible est très petite).

Cas où le régime 1 est diffusif. La formule (12.64) ne s'applique pas si la densité du temps de recherche n'est pas analytique en $t = 0$, ce qui est le cas pour un régime 1 diffusif. Si par exemple, durant le régime 1 \mathbf{P} réalise une diffusion à une dimension entre un point absorbant a (la cible) et un point réfléchissant b , nous avons $\langle \tilde{j}_1(\lambda_1) \rangle_{B-A} \sim C\lambda_1^{-1/2}$, C peut être une constante positive. Alors quand $\lambda_1 \rightarrow \infty$

$$\langle T \rangle \sim \frac{1}{\lambda_2} \frac{\beta}{1-\beta} \left[1 - \frac{1}{\sqrt{\lambda_1}} \frac{C}{1-\beta} + \dots \right] \quad (12.65)$$

et $\langle T \rangle$ tend toujours vers cette limite par valeurs inférieures. Cela peut être étendu à des diffusions à d dimensions.

Comportement de $\langle T \rangle$ quand $\lambda_1 \rightarrow 0$: l'expression (12.62) de $\langle T \rangle$ peut être écrite

$$\langle T \rangle = \frac{\beta \tilde{r}_1(\lambda_1)}{1 - \lambda_1 \beta \tilde{r}_1(\lambda_1)} \left(1 + \frac{\lambda_1}{\lambda_2} \right) \quad (12.66)$$

où $\tilde{r}_1(\lambda_1)$ est la transformée de Laplace de $\langle q_1(t) \rangle_{B-A}$, la moyenne $q_1(t)$ sur $B-A$. Quand $\lambda_1 \rightarrow 0$, nous avons

$$\langle T \rangle = \beta t_1 \left[1 - \lambda_1 t_1 \left(\frac{1}{2} \left(\frac{\sigma_1}{t_1} \right)^2 + \frac{1}{2} - \beta - \frac{\tau_2}{t_1} \right) \right] \quad (12.67)$$

où $t_1 \equiv \langle t_1(x) \rangle_{B-A}$ est le temps moyen de recherche de la cible dans le régime, moyenné sur $B-A$. De même, $\sigma_1^2 = \langle t_1^2(x) \rangle_{B-A} - t_1^2$ est la variance correspondante.

Quand $\lambda_1 = 0$, $\langle T \rangle$ est juste le temps moyen de recherche βt_1 si le régime 1 est maintenu constamment. Alors, l'intermittence est sûrement favorable soit si $\beta t_1 > \tau_2 \frac{\beta}{1-\beta}$ ou si $\left(\frac{\partial \langle T \rangle}{\partial \lambda_1} \right)_{\lambda_1=0} < 0$.

La première condition est vérifiée si

$$\frac{\tau_2}{t_1} < 1 - \beta \quad (12.68)$$

ce qui est toujours possible si la valeur possible minimale τ_{2min} est assez petite. La condition $\left(\frac{\partial \langle S \rangle}{\partial \lambda_1} \right)_{\lambda_1=0} < 0$ implique

$$\frac{\tau_2}{t_1} < \frac{1}{2} \left(\frac{\sigma_1}{t_1} \right)^2 - \beta \quad (12.69)$$

Puisque $\frac{\sigma_1}{t_1} > 1$, la condition (12.69) peut sûrement être réalisé pour de petits τ_2 si $\beta < \frac{1}{2}$, mais en général, si la cible est petite, $\beta \sim 1$. Alors cette condition implique que les fluctuations du temps de recherche dans le régime 1 doivent être assez grandes que le membre de droite de (12.69) soit positif. Si c'est le cas, l'intermittence est sûrement favorable si τ_{2min} si suffisamment petit.

Si le régime 1 est une diffusion à trois dimensions, il peut être montré ([26],[27]) que $\left(\frac{\sigma_1}{t_1} \right)^2 \sim 2$, si bien que les conditions (12.68) et (12.69) sont identiques. En supposant que (12.65) tienne, nous concluons que si la valeur minimale τ_{2min} est assez petite pour

satisfaire (12.69), le temps de recherche est minimisé pour une valeur finie de τ_1 . Si τ_2 dépasse la valeur critique $\tau_{2crit} = (1 - \beta)t_1$, l'intermittence n'est plus favorable, et le temps de recherche augmente avec λ_1 (à moins qu'il existe des minimums atypiques loin de $\lambda_1 = 0$).

Si le temps de recherche du régime 1 est régulier à $t = 0$, la formule (12.64) permet d'anticiper d'autres comportements, avec par exemple $\langle T \rangle$ décroissant continuellement avec λ_1 , comme cela a été retrouvé dans le modèle en réseau. Ces conclusions montrent que les résultats peuvent être étendus à de nombreux autres cas.

12.5 Conclusion

Nous avons montré qu'un chercheur, un animal ou une molécule, recherchant une cible qui ne permet pas de détection à distance, peut avoir intérêt à alterner des régimes de recherche minutieuse, avec des périodes de relocation aléatoire, quand il peut les réaliser. Comme dans d'autres mouvements intermittents alternant des phases de recherche minutieuse avec des phases de déplacements rapides, non réactives, l'intérêt d'une telle stratégie n'est pas évidente et dépend de la situation. Nous avons obtenu des résultats exacts et des conclusions explicites dans le cas particulier où le mouvement lent est une diffusion dans un système à symétrie sphérique à d dimensions. Alors il a été prouvé que l'intermittence peut permettre de réduire le temps de recherche considérablement si la nature physique du chercheur et de son environnement rend possible de réaliser une alternance entre deux régimes, chacun d'eux avec une très petite durée moyenne, comparé au temps caractéristique du système. Si c'est le cas, et si les durées moyennes de chaque régime satisfont certaines lois d'échelle, le temps de recherche peut être bien plus court que dans un régime purement diffusif, bien que l'efficacité de l'intermittence décroisse quand la dimension augmente. Si les durées moyennes des phases ne peuvent pas être plus courtes que le temps caractéristique du système, la situation est moins favorable. Néanmoins, l'intermittence peut toujours être une stratégie efficace à une et deux dimensions, mais ce n'est pas toujours le cas à plus haute dimension. Ces résultats explicites peuvent être en partie généralisés pour des systèmes intermittents comprenant de la teleportation, et il peut toujours être conclu que l'intermittence peut permettre d'augmenter l'efficacité de la recherche considérablement mais évidemment pas dans tous les cas. Ainsi, un tel comportement peut jouer un rôle important en cinétique chimique, en particulier pour des systèmes en basse dimension, quand le réactant peut réaliser des excursions temporaires dans une phase à plus haute dimension ce qui lui permet d'être relocalisé rapidement, (voir [28, 30]).

General conclusion

Nous avons commencé cette thèse par un modèle simple et idéalisé de recherche de cible caché par des animaux. Il existait déjà de nombreux modèles étudiant ce problème basés sur le théorème de la valeur marginale de Charnov, ou plus récemment sur les vols de Lévy. Nous avons proposé une alternative à ces modèles en considérant un animal recherchant une cible ponctuelle sur un cercle pouvant alterner entre une phase réactive diffusive et une phase non réactive balistique. A l'aide de l'équation de Chapman-Kolmogorov vers le passé, nous avons calculé le temps moyen de premier passage en fonction des fréquences passées dans chaque état (recherche ou déplacement). Dans le cas des faibles densités, l'étude de l'optimisation nous a fourni une relation en lois de puissance entre les temps passés dans chaque état qui s'accorde bien avec les résultats expérimentaux. Plus précisément, on observe l'apparition d'une courbe bimodale séparant deux classes d'animaux cherchant de la nourriture de façon optimale :

-Un ensemble d'animaux (noté M pour "moving"), pour lequel le chercheur passe plus de temps à se déplacer qu'à chercher et la loi de puissance entre les fréquences passées dans chaque état est en $3/5$.

-Un ensemble d'animaux (noté S pour "searching") pour lequel le chercheur passe plus de temps à chercher qu'à se déplacer et la loi de puissance entre les fréquences passées dans chaque état est en $2/3$.

Même si la valeur des coefficients des lois de puissance sont très proches numériquement, il semble qu'on arrive bien à séparer les deux groupes de chercheurs parmi les données expérimentales disponibles.

Puis, nous avons étudié de façon systématique des modèles intermittents avec mémoire à une dimension du même type que celui utilisé pour les animaux afin de cerner l'intérêt de l'intermittence avec mémoire dans les processus de recherche. Il apparaît que l'intermittence n'est favorable que dans le cas des cibles cachées ou avec un stimulus faible pour lesquels il est nécessaire de perdre du temps pour mieux chercher. Ainsi en premier, on a vu dans le modèle "balistique-balistique", que le temps moyen de premier passage est minimum pour une fréquence de recherche $\lambda_1 = 0$ et une fréquence de déplacement λ_2 aussi grande que possible. Dans le cas d'un modèle du même type que celui utilisé pour les animaux autrement dit un modèle "diffusif-balistique avec mémoire orientée" mais avec une cible étendue, on a pu obtenir une solution analytique mais son optimisation par rapport aux fréquences reste difficile à faire... Pour celui avec une réaction imparfaite, il y a apparition d'une transition pour une des lois de puissance qui permet de différencier ce modèle de celui avec une cible parfaite. Enfin, on peut bien sûr imaginer d'autres variantes avec différentes phases balistiques/diffusives, cibles ponctuelles/étendues, réaction

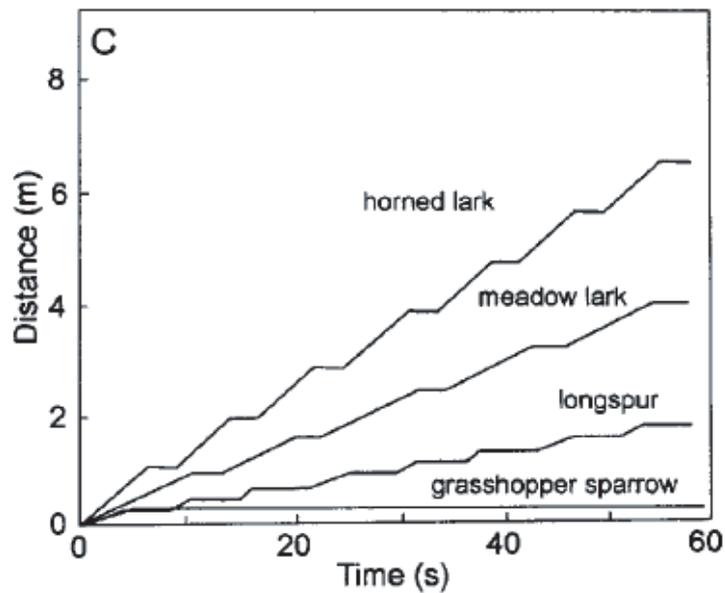
parfaite/imparfaite.

Dans la troisième partie, nous avons étudié les processus de recherche intermittents sans mémoire dans le cadre des réactions chimiques. Nous avons commencé par deux modèles de recherche intermittente sans mémoire à une dimension. Pour le modèle "diffusif-diffusif", on a deux minima locaux pour des valeurs précises de λ_1 et λ_2 mais pas de minimum global. Pour le modèle "diffusif-balistique sans mémoire orientée", il y a un minimum global avec une relation en lois de puissance entre les valeurs des λ_i au minimum. Ensuite, nous avons étudié l'influence d'un confinement géométrique sur les temps de résidence et les propriétés de rencontre entre les partenaires d'une réaction chimique. A l'aide de l'équation de Chapman-Kolmogorov vers le passé, nous avons alors montré que les relations géométriques précédemment obtenues pour des marches de Pearson dans des domaines fermés, sont des cas particuliers de relations très générales entre les temps de résidence pour une large classe de processus stochastiques. Enfin, nous avons examiné un processus de recherche intermittent alternant diffusion et "téléportation" (repositionnement aléatoire) pour un système sphérique continu à d dimensions et un réseau régulier. Les exemples d'application sont le transport à travers des membranes biologiques et la catalyse hétérogène. Nous avons alors montré que l'intermittence pouvait permettre de réduire considérablement le temps de recherche si la nature physique du chercheur et de son environnement rend possible de réaliser une alternance entre ces deux régimes.

Il y a un point qui mérite d'être souligné. C'est le caractère universel du processus de recherche intermittent. Il semble de fait couramment observé dans la nature, et ce aussi bien à l'échelle macroscopique (comme dans le cas des animaux cherchant de la nourriture [10]) qu'à l'échelle microscopique (c'est le cas par exemple dans le processus de recherche par une protéine d'un site cible sur un brin d'ADN [28]). On pourrait ainsi se demander si il n'y aurait pas une raison plus profonde pour les phénomènes de recherche intermittent observés dans la nature.

Annexe A

Voici d'abord une représentation graphique, extraite de l'article de Kramer *et al.* (2001) [45], de la distance parcourue par certains oiseaux se nourrissant sur le sol en fonction du temps. Nous visualisons bien sur ce graphe les pauses caractéristiques du mouvement intermittent. Le deuxième graphe extrait de l'article de O'Brien *et al.* (1990) [56] concerne aussi différentes espèces d'oiseaux (dont le nom est en latin...) cherchant de la nourriture sur le sol. On retrouve la forme en escalier caractéristique du mouvement intermittent. Ensuite, nous disposons d'un tableau récapitulatif pour un grand nombre d'espèces des différents types de mouvement intermittent, extrait de l'article de Kramer *et al.* (2001) [45].



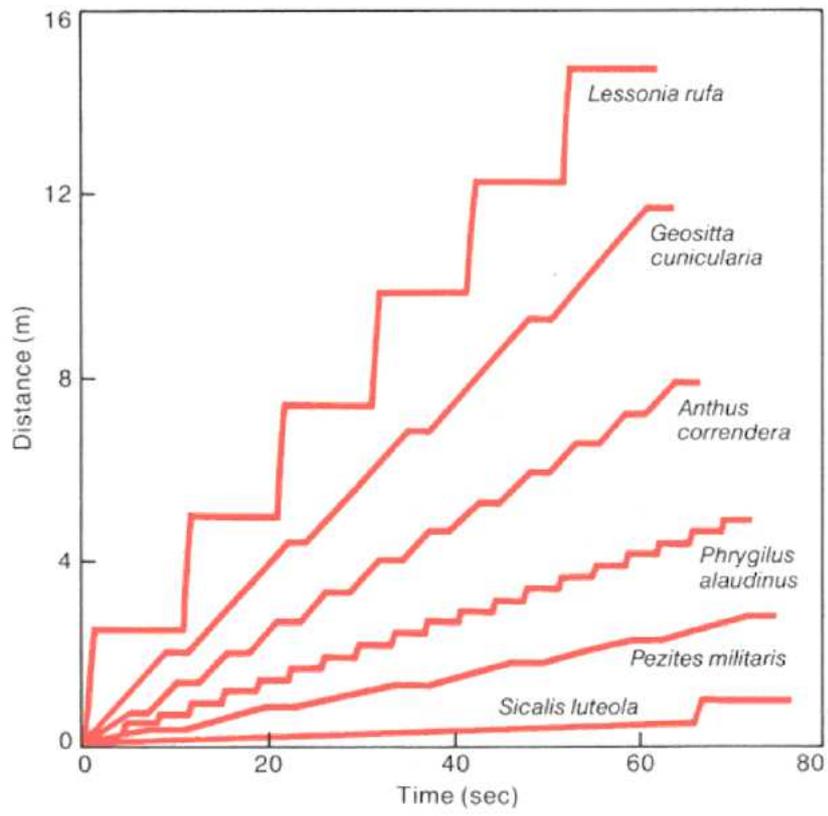


TABLE 1. Examples of intermittent locomotion in a variety of animal species and behavioral situations.

Type of organism (Genus and species)	Activity	Pause duration ¹ (s)	Move duration ¹ (s)	Move/pause frequency ² (No./min)	Time paused ³ (%)	Move speed ⁴ (cm s ⁻¹)	Source
1. hydrozoan medusae (<i>Goni- onemus vertens</i>)	general swimming in aquarium	50	2.2	1.1	96	—	Daniel (1985)
2. trematode cercaria (<i>Di- plostonum spathaceum</i>)	general swimming/search- ing for host at 26C	16.7	1.0	3.4	94	0.37	Haas (1969); personal communi- cation W. Haas
3. trematode cercaria (<i>Trichobilharzia ocellata</i>)	forward swimming/host searching at 25C	2.9	2.0	12.2	59	0.34	Feiler and Haas (1988); personal communication W. Haas
4. copepod nauplius, stage N2 (<i>Temora longicornis</i>)	general swimming with food present	1.2	1.7	20.0	42	0.27	van Duren and Videler (1995)
5. barnacle cyprid larva (<i>Bal- anus amphitrite</i>)	exploration of substrate prior to settlement	30.7	33.0	0.9	48	—	Walters <i>et al.</i> (1999); personal communication G. Miron
6A. ghost crab (<i>Ocypode quadrata</i>)	general locomotion	23.4	11.2	1.7	64	7.2	Weinstein (1995)
6B. ghost crab	fleeing observer	7.6	1.4	6.7	77	79.2	Weinstein (1995)
7. fly larva (<i>Drosophila me- lanogaster</i>)	crawling on non-feeding substrate	6.6	16.1	3.3	29	—	Suster (2000)
8A. phorid fly female (<i>Puti- liphora borinquensis</i>)	general locomotion under uncrowded conditions	0.038	0.094	454.5	29	4.0	Miller (1979)
8B. phorid fly female	crowded conditions	0.143	0.048	314.1	75	—	Miller (1979)
9A. cricket female (<i>Gryllus campestris</i>)	spontaneous walking	1.12	1.38	24	45	4.97	Schmitz <i>et al.</i> (1982)
9B. cricket female	presence of calling male	0.59	2.25	21	21	5.94	Schmitz <i>et al.</i> (1982)
10. social spider (<i>Anelosimus eximius</i>)	attacking prey captured in web (midpoint of se- quence)	0.60	0.15	80	80	—	Krafft and Pasquet (1991)
11. octopus (<i>Octopus cyanea</i>)	moving over reef while foraging	7.9	13.5	2.8	37	—	Forsythe and Hanlon (1997); J. Forsythe, personal communi- cation
12. zebrafish larva, 4 mm (<i>Danio rerio</i>)	general swimming of starved fish	0.9	0.13	58.3	87	1.0	Fuiman and Webb (1988)
13. cod larva (<i>Gadus morhua</i>)	feeding at low food densi- ty and medium turbu- lence	1.8	0.3	28.6	86	—	MacKenzie and Kjøboe (1985)
14. white crappie fish (<i>Pomox- is annularis</i>)	food search at 19C	1.6	0.9	24.0	64	6.3	O'Brien <i>et al.</i> (1986)
15A. arctic grayling (<i>Thymal- lus arcticus</i>)	food search with small prey	0.3	1.0	46.0	23	6.4	Evans and O'Brien (1988)
15B. arctic grayling	food search with large prey	0.07	0.74	74.1	6	16.2	Evans and O'Brien (1988)

TABLE 1. *Continued.*

Type of organism (Genus and species)	Activity	Pause duration ¹ (s)	Move duration ¹ (s)	Move/pause frequency ² (No./min)	Time paused ³ (%)	Move speed ⁴ (cm s ⁻¹)	Source
16A. viviparous lizard adult (<i>Lacerta vivipara</i>)	moving between ends of a large cage	0.12	0.30	142.8	29	14.6	Avery <i>et al.</i> (1987)
16B. viviparous lizard adult	active search for prey	0.40	0.14	111.1	74	10.3	Avery <i>et al.</i> (1987)
16C. viviparous lizard adult	active pursuit of prey	0.15	0.57	83.3	21	23.9	Avery <i>et al.</i> (1987)
16D. viviparous lizard adult	fleeing	0.18	0.52	85.7	26	54.7	Avery <i>et al.</i> (1987)
16E. viviparous lizard adult	'panic' escape attempts from glass bowl	0.29	0.58	69.0	33	—	Avery <i>et al.</i> (1987)
17. ringed plover (<i>Charadrius hiaticula</i>)	foraging on beach during day	2.01	0.66	22.5	75	—	Pienkowski (1983)
18. northern wheatear bird (<i>Oenanthe oenanthe</i>)	foraging on short-grass heath	4.0	0.94	12.1	81	73	Tye (1989)
19A. European kestrel female (<i>Falco tinnunculus</i>)	windhovering while forag- ing at windspeed of 6 m s ⁻¹	25	10	1.7	69	—	Videler <i>et al.</i> (1983)
19B. European kestrel male	gliding within windhover- ing bouts at 6 m s ⁻¹	0.30	1.56	32.3	16	0	Videler <i>et al.</i> (1983)
20. Eastern chipmunk (<i>Tamias striatus</i>)	returning to burrow with load of seeds (forest habitat)	0.3	3.2	16.2	9	15.3	McAdam and Kramer (1998)
21A. Gray squirrel (<i>Sciurus carolinensis</i>)	carrying nut to hoarding site in forest habitat	1.40	4.62	10.0	14	141	McAdam and Kramer (1998)
21B. Gray squirrel	approaching food source in open habitat	0.46	2.27	22.0	35	127	McAdam and Kramer (1998)

¹ Mean, median or midpoint of ranges provided by indicated source.

² Mean or median value from source or calculated as 60/(move duration + pause duration).

³ Mean or median value from source or calculated as (100 × pause duration)/(move duration + pause duration).

⁴ Estimated mean speed during moves.

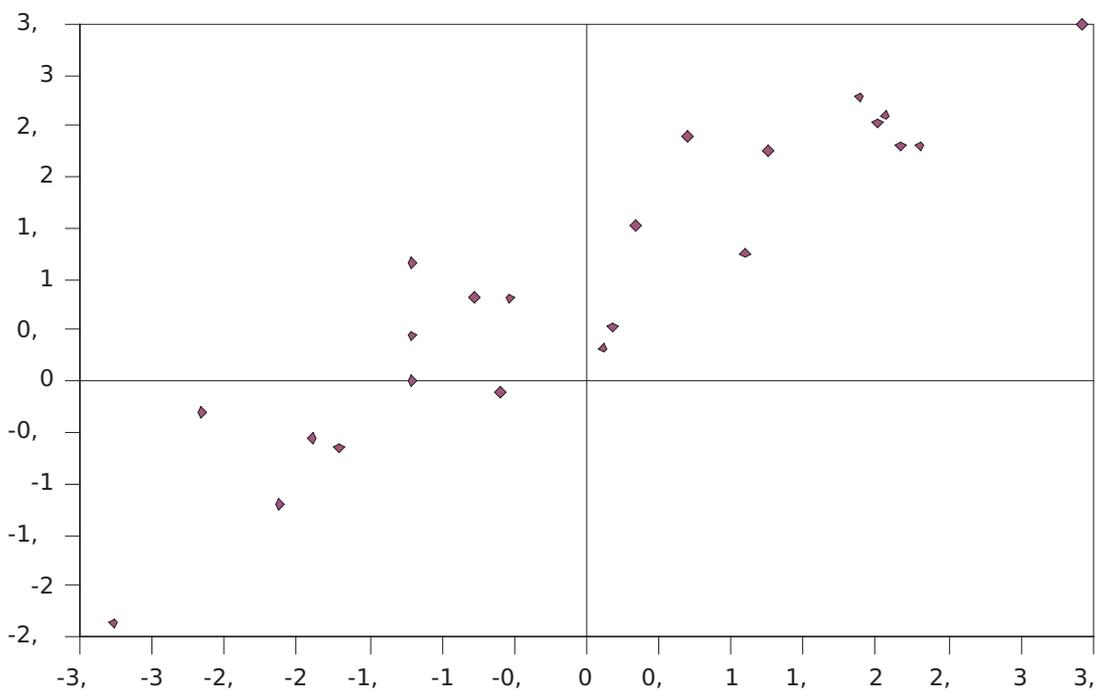


FIG. A.1 – Graphe log-log des temps de recherche en fonction des temps de déplacements pour toutes les données disponibles sur les animaux ayant un comportement intermittent.

Annexe B

B.1 Reactional kinetics

Considérons le cas très classique d'une réaction chimique d'équation-bilan du type :



L'interprétation de cette réaction en termes physiques est que, quand une molécule A et une molécule B réagissent, la molécule A est annihilée alors que la B reste intacte. Si l'on note $[A]$ et $[B]$ les concentrations des espèces A et B respectivement, alors l'équation cinétique caractérisant la disparition de l'espèce A dans cette réaction est

$$\frac{d[A]}{dt} = -k[A][B] \tag{B.2}$$

où k est la constante de réaction.

Il y a beaucoup d'hypothèses implicites dans le passage entre la réaction (B.1) et l'équation cinétique (B.2). La plus importante de celles-ci est que le taux de disparition de l'espèce A en (B.2) dépend seulement des concentrations macroscopiques des espèces A et B , alors que le schéma réactionnel en (B.1) se réfère à un processus microscopique au cours duquel une particule A interagit avec une particule B . De cette observation, on s'attend à ce que les fluctuations locales des concentrations des réactants soient prises en compte afin d'obtenir une description correcte du comportement cinétique. En effet, quand deux particules A et B réagissent afin d'annihiler A , ils modifient nécessairement la concentration des particules A dans la région environnante. En outre, l'annihilation des particules A est plus rapide dans les régions avec beaucoup de particules B que dans les régions où il y a moins de B . Cela entraîne que des effets à n corps devrait être incorporés dans l'analyse.

Le développement d'une théorie microscopique satisfaisante pour la réaction (B.1) nécessite de prendre en considération au moins deux effets physiques additionnels. Le premier, complètement absent de l'équation cinétique (B.2), est que les molécules sont mobiles et que par conséquent des variations locales dans la concentration arrivent même en l'absence de réaction. Le second, pas entièrement pris en compte en (B.2), est que la façon dont les deux molécules interagissent dépend de leur distance l'une de l'autre.

Deux modélisations sont généralement utilisées pour décrire le mouvement d'une particule. La première est le processus de diffusion ou le mouvement Brownien, et la seconde

est la marche aléatoire. Ces deux modèles sont en fait intimement liés. Une définition simple du mouvement Brownien dans un espace euclidien à d dimensions est qu'une particule à l'instant t , initialement à l'origine des coordonnées, se trouve dans un volume élémentaire infinitésimal $(\mathbf{r}, \mathbf{r} + d\mathbf{r})$ avec la probabilité $p(\mathbf{r}; t)dx_1 \cdots dx_d$ où la fonction $p(\mathbf{r}; t)$ est la Gaussienne

$$p(\mathbf{r}; t) = \frac{1}{(4\pi Dt)^{\frac{d}{2}}} e^{-\frac{r^2}{4Dt}} \quad (\text{B.3})$$

Dans cette équation, D est la constante de diffusion et $r = |\mathbf{r}|$ la distance radiale. La densité de probabilité en (), laquelle qui en terme plus physique est proportionnelle à la concentration de particules, vérifie l'équation de la diffusion

$$\frac{\partial}{\partial t} p(\mathbf{r}; t) = D\Delta p(\mathbf{r}; t) \quad (\text{B.4})$$

avec la condition initiale $p(\mathbf{r}; 0) = \delta(\mathbf{r})$, où $\delta(\mathbf{r})$ est la fonction delta de Dirac centrée au point $\mathbf{r} = \mathbf{0}$. Une définition simple d'une marche aléatoire est que la position d'une particule peut être regardé comme une somme de variables aléatoires, i.e., $Y_n = X_1 + \cdots + X_n$, où X_n qui peut être scalaire ou vectoriel correspond à un pas de la marche aléatoire.

B.2 Smoluchowski Model

Le physicien polonais, Marian von Smoluchowski ⁹, a été le premier à essayer de réconcilier le modèle macroscopique en (B.2) avec le modèle microscopique comme (B.1) en prenant en compte les fluctuations locales de densité. Il proposa que les dépendances en [A] et [B] devaient être retenues puisque cela décrit très bien la plupart des réactions chimiques, mais surtout que le taux de réaction k devait dépendre du temps, $k = k(t)$. Son modèle qui est très simplifié du point de vue physique donne des résultats en très bon accord avec de nombreuses expériences (et ce depuis pas mal d'années...) La concentration de l'espèce B est très faible par rapport à celle de A si bien que l'on peut se représenter le système comme un ensemble de particules A entourant une seule particule B . Les particules A sont supposées être des particules ponctuelles qui ne réagissent pas entre elles et qui diffusent librement à l'extérieur de B . La particule B est considérée comme une sphère immobile de rayon R .

Pour mieux caractériser le problème, notons $p(\mathbf{r}; t)$ la densité de probabilité d'une particule A d'être au point \mathbf{r} à l'instant t . $p(\mathbf{r}; t)$ doit bien sûr vérifier l'équation de diffusion

$$\frac{\partial}{\partial t} p(\mathbf{r}; t) = D\Delta p(\mathbf{r}; t) \quad (\text{B.5})$$

⁹Marian von Smoluchowski (né le 28 mai 1872 à Vorderbrühl en Autriche - mort le 5 septembre 1917 à Cracovie) était un physicien polonais. Il fit ses études à Vienne, et eut notamment comme professeur Ludwig Boltzmann. Il décrit le mouvement brownien et travailla sur la théorie cinétique des gaz en même temps qu'Albert Einstein. Dans ses travaux, il proposa une équation qui devint la base de la théorie des processus stochastiques.

avec les conditions aux limites et initiales :

Calculons le taux de réaction pour la dimension $d = 3$. C'est un cas où les calculs se mènent particulièrement bien. En effet, à trois dimensions, le Laplacien peut s'écrire en fonction du Laplacien à une dimension. En posant $u(r; t) = rp(r; t)$, on obtient l'équation

$$\frac{\partial}{\partial t}u(r; t) = D \frac{\partial^2}{\partial r^2}u(r; t) \quad (\text{B.6})$$

Nous allons maintenant calculer le taux de réaction à trois dimensions avec cette astuce. Mais d'abord comme préliminaire nécessaire, voyons ce que l'on trouve à une dimension.

L'équation de la diffusion s'écrit

$$\frac{\partial}{\partial t}p(x; t) = D \frac{\partial^2}{\partial x^2}p(x; t) \quad (\text{B.7})$$

avec $p(x; t = 0) = 1$, $p(0; t) = 0$ et $p(x \rightarrow \infty; t) = 1$.

La transformée de Laplace de cette équation est

$$sp(x; s) - 1 = p''(x; s) \quad (\text{B.8})$$

Cette équation admet comme solution particulière $p(x; s) = \frac{1}{s}$ et comme solution générale $p(x; s) = Ae^{x\sqrt{\frac{s}{D}}} + Be^{-x\sqrt{\frac{s}{D}}}$ où A et B sont deux constantes à déterminer.

En tenant compte des conditions aux limites, on obtient comme solution finale

$$p(x; s) = \frac{1}{s}[1 - e^{-x\sqrt{\frac{s}{D}}}] \quad (\text{B.9})$$

dont on peut calculer la transformée de Laplace inverse i.e.

$$p(x; t) = \text{erf}\left(\frac{x}{\sqrt{4Dt}}\right) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\frac{x}{\sqrt{4Dt}}} e^{-z^2} dz \quad (\text{B.10})$$

Le taux de réaction s'écrit de manière générale en fonction du flux :

$$k(t) = \int_{S(R)} \mathbf{J} \cdot d\mathbf{S} = D\sigma_d R^{d-1} \left. \frac{\partial p(\mathbf{r}; t)}{\partial t} \right|_{r=R} \quad (\text{B.11})$$

D'où à une dimension,

$$k(t) = D \left. \frac{\partial p(x; t)}{\partial t} \right|_{x=0} = \sqrt{\frac{D}{\pi t}} \quad (\text{B.12})$$

Revenons à trois dimensions où on avait défini la fonction $u(r; t) = rp(r; t)$. La condition absorbante au niveau de la sphère B est $u(R; t) = 0$. De même que précédemment on trouve en fonction des conditions aux limites, la solution finale :

$$u(r; s) = \frac{1}{s}[r - Re^{(r-R)\sqrt{\frac{s}{D}}}] \quad (\text{B.13})$$

donc

$$p(r; s) = \frac{1}{s} \left[1 - \frac{R}{r} e^{(r-R)\sqrt{\frac{s}{D}}} \right] \quad (\text{B.14})$$

et là encore on peut calculer la transformée de Laplace inverse à savoir :

$$p(r; t) = 1 - \frac{R}{r} + \frac{R}{r} \operatorname{erf} \left(\frac{r-R}{\sqrt{4Dt}} \right) = 1 - \frac{R}{r} + \frac{R}{r} \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\frac{r-R}{\sqrt{4Dt}}} e^{-z^2} dz \quad (\text{B.15})$$

Calculons la constante de réaction à trois dimensions :

$$k(t) = 4\pi R^2 D \left. \frac{\partial p(r; t)}{\partial t} \right|_{r=R} \quad (\text{B.16})$$

D'où la fameuse constante de Smoluchowski :

$$k(t) = 4\pi R D \left(1 + \frac{R}{\sqrt{\pi D t}} \right) \quad (\text{B.17})$$

Dans la limite $t \rightarrow \infty$, la constante de réaction à trois dimensions tend donc vers une constante ce qui donne une description utile de la cinétique. Au contraire à une dimension, le taux de réaction ainsi obtenu classiquement n'est pas utilisable car aux temps longs, $k(t) \rightarrow 0$.

A titre indicatif, on peut montrer qu' à deux dimensions [64],

$$k(t) \sim \frac{D}{\ln \left(\frac{Dt}{R^2} \right)} \quad (\text{B.18})$$

Après récapitulation, nous avons donc :

$$k_{smol}(t) \sim \begin{cases} \sqrt{\frac{D}{\pi t}} & \text{pour } d = 1 \\ \frac{D}{\ln \left(\frac{Dt}{R^2} \right)} & \text{pour } d = 2 \\ 4\pi R D \left(1 + \frac{R}{\sqrt{\pi D t}} \right) & \text{pour } d = 3 \end{cases} \quad (\text{B.19})$$

B.3 Link between mean first passage time and reaction rate

La probabilité de survie entre deux instants s'écrit $S_1(t) = \frac{c_1}{c_0}$ avec la relation [70]

$$c_1 = c_0 e^{-k c_0 t} \quad (\text{B.20})$$

En prenant la dérivée logarithmique en supposant que c_0 est constant,

$$\frac{dc_1}{c_1} = -k c_0 dt \quad (\text{B.21})$$

Mais en fait, en toute rigueur c_0 pourrait varier avec le temps, donc on est tenté de remplacer c_0 par c_1

$$\frac{dc_1}{c_1^2} = -kdt \quad (\text{B.22})$$

Après intégration,

$$\frac{1}{c_1} - \frac{1}{c_0} = -kt \quad (\text{B.23})$$

d'où,

$$S_1(t) = \frac{c_1}{c_0} = \frac{1}{1 + kc_0t} \quad (\text{B.24})$$

Pour des temps longs, et pour deux molécules de constante de diffusion D_1 et D_2 et de rayons r_1 et r_2 , on a :

$$k = 4\pi(D_1 + D_2)(r_1 + r_2) \quad (\text{B.25})$$

Si il y a N particules par puits, on a de manière générale [21] :

$$S_N(t) = \frac{(1 - \frac{1}{N})e^{-(N-1)kc_0t}}{1 - \frac{1}{N}e^{-(N-1)kc_0t}} \quad (\text{B.26})$$

Par construction, la probabilité de survie $S(t) = P(T > t)$ est une fonction décroissante de t qui tend vers 0 avec t .

Et la densité de probabilité corespondante s'écrit :

$$F(t) = -\frac{dS(t)}{dt} \quad (\text{B.27})$$

Le temps de premier passage est alors défini par

$$\tau = \int_0^{+\infty} tF(t)dt \quad (\text{B.28})$$

Soit

$$\tau = -\int_0^{+\infty} t \frac{dS(t)}{dt} dt = -[tS(t)]_0^{+\infty} + \int_0^{+\infty} S(t)dt = \int_0^{+\infty} S(t)dt \quad (\text{B.29})$$

Après quelques calculs, on trouve :

$$\tau = -\frac{1}{c_0k} \ln(1 - \frac{1}{N}) \quad (\text{B.30})$$

Pour $N \gg 1$, on trouve une formule reliant le temps de premier passage et la constante de réaction plus simple :

$$\tau = \frac{1}{Nc_0k} \quad (\text{B.31})$$

Publications list

[1] *Averaged residence times of stochastic motions in bounded domains* O. Bénichou, M. Coppey, M. Moreau, P.H. Suet, and R. Voituriez., *Europhys. Lett.*, **70**, pp. 42-48, (2005).

[2] *Optimal search strategies for hidden targets* O. Bénichou, M. Coppey, M. Moreau, P.H. Suet, and R. Voituriez., *PRL*, **94**, 198101, (2005).

[3] *A stochastic model for intermittent search strategies* O. Bénichou, M. Coppey, M. Moreau, P.H. Suet, and R. Voituriez., *J. Phys. : Condens. Matter* , **17**, pp. 4275-4286 (2005).

[4] *A stochastic theory for intermittent behaviour of foraging animals* O. Bénichou, M. Coppey, M. Moreau, P.H. Suet, R. Voituriez., *J. Phys. : Condens. Matter* , **17**, pp. 4275-4286 (2005).

Submitted :

[5] *Intermittent search process and teleportation* O. Bénichou, M. Moreau, P.H. Suet, and R. Voituriez, , (2007).

[6] *Intermittent search process : Chance against Strategy* M. Moreau, O. Bénichou, C.Loverdo, P.H. Suet, and R. Voituriez, , (2007).

Bibliographie

- [1] Abramowitz M., Stegun I.A., *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables* (Dover Publications, New York, 1972)
- [2] Agmon N., J. Chem. Phys., **81**, 3644, (1984)
- [3] Alberts B. et al., *Molecular Biology of the Cell* (Garland, New York (2002)
- [4] Anderson J.P., Stephens D.W. and Dunbar S.R., *Saltatory search : a theoretical analysis*, Behavioral Ecology, **8**, 307, (1997)
- [5] Andersson M., *On optimal predator search*, Theor. Pop. Biol., **19**, 58, (1981)
- [6] Antal T., Redner S., J. Stat. Phys. **123**, 1129, (2006)
- [7] Bartumeus F., Catalan J., Fulco U.L., Lyra M.L., and Viswanathan G.M., *Optimizing the encounter rate in biological interactions : Lévy versus Brownian strategies* , Phys. Rev. Lett., **88**, 097901, (2002)
- [8] Bell W.J., *Searching Behavior : the behavioral ecology of finding resources*, (Chapman and Hall, New York, 1991).
- [9] Bénichou O., Moreau M., Oshanin G., Phys. Rev. E. **61**, 3388, (2000)
- [10] Bénichou O. et al., Phys. Rev. Lett. **94**, 198101, (2005)
- [11] Bénichou O. et al., Europhys. Lett. **75**, 349, (2006)
- [12] Bénichou O., Loverdo C., Moreau M., Voituriez R., Phys. Rev. E **74**, 020102, (2006)
- [13] Bénichou O., Loverdo C., Moreau M., Voituriez R., J. Phys. : Condens. Matter **19**, 065141 (2007)
- [14] Bénichou O., Klafter J., M. Moreau, Oshanin G., Chem. Phys. **319**, 16, (2005)
- [15] Bénichou O., Coppey M., M. Moreau, Suet P.-H., Voituriez R., Physica A **356**, 151, (2005)
- [16] Bénichou O., Coppey M., M. Moreau, Suet P.-H., Voituriez R., J. Phys. : Condens. Matter **17**, 065142, (2005)
- [17] Bénichou, O., Coppey M., Klafter J., Moreau M., Oshanin G., J. Phys. A : Math. Gen., **36**, 7225, (2003)
- [18] Berezhkovskii A.M., Zaloj V., Agmon N., Phys. Rev. E, **57**, 3937, (1998)
- [19] Berg H.C., *Random Walks in Biology*, (Princeton University Press, Princeton, New Jersey, 1993)

- [20] Berg O.G., Winter R.B., von Hippel P.H., *Biochemistry* **20**, 6929, (1981)
- [21] Berg O.G., Blomberg C., *Biophys. Chem.* **4**, 367, (1976)
- [22] Blanco S., Fournier R., *An invariance property of diffusive random walks*, *Europhys. Lett.*, **61**, 168, (2003)
- [23] Bustamante C., Guthold M., Zhu X., Yang G., *Facilitated target location on DNA by individual Escherichia coli RNA polymerase molecules observed with the scanning force microscope operating in liquid*, *The journal of biological chemistry*, **274**, 16665, (1999)
- [24] Charnov E., *Optimal foraging : marginal value theorem*, *Theor. Pop. Biol.*, **9**, 129-, (1976)
- [25] Cody M.L., *On the methods of resource division in grassland bird communities*, *Am. Nat.*, **102**, 107, (1968)
- [26] Condamin S., Bénichou O., Moreau M., *Phys. Rev. E.*, **75**, 021111, (2007)
- [27] Condamin S., Bénichou O., Moreau M., *Phys. Rev. Lett.*, **95**, 260601, (2005)
- [28] Coppey M., Bénichou O., Voituriez R., and Moreau M., *Kinetics of target site localization of a protein on DNA : A stochastic approach*, *Biophys. J.*, **87**, 1640, (2004)
- [29] Dynkin E.B., *Markov Processes*, (Springer, 1965)
- [30] Eliazar I., Koren T., Klafter J., *J. Phys. : Condens. Matter*, **19**, 065140, (2007)
- [31] Fauchald P., Tveraa T., *Using first-passage time in the analysis of area-restricted search and habitat selection*, *Ecology*, **84**, pp. 282-288, (2003)
- [32] Freund I., Kaveh M., Rosenbluh M., *Phys. Rev. Lett.*, **60**, 1130, (1988)
- [33] Gardiner C.W., *Handbook of Stochastic Processes for Physics, Chemistry and the Natural Sciences*, (Springer, Berlin, 2004)
- [34] Getty T., Pulliam H.R., *Random prey detection with pause-travel search*, *American Naturalist*, **138**, 1459, (1991)
- [35] Goel N.S., Richter-Dyn N., *Stochastic Models in Biology*, (Academic Press Inc., London, 1974)
- [36] Hanggi P., Talkner P., Borkovec M., *Review of Modern Physics* **62**, 251, (1990)
- [37] Halford S.E., Marko J.F., *How do site-specific DNA-binding proteins find their targets ?*, *Nucleic Acid Res.*, **32**, 3040, (2004)
- [38] den Hollander W.T.F. and Kasteleyn P.W., *Physica A*, **112**, 523, (1982)
- [39] Huey R.B. et Pianka E.R., Reddingius J., *Ecological consequences of foraging mode*, *Ecology*, **62**, 991, (1981)
- [40] Hughes B.D., *Random Walks and Random Environments, Vol. :1 et 2*, (Clarendon Press., Oxford, 1995)
- [41] Jeanson R., Blanco S., Fournier R., Deneubourg J-L., Fourcassié V., Theraulaz G., *A model of animal movements in a bounded space*, *J. Theor. Biol.*, **225**, 443, (2003)

-
- [42] Kac M., *Probability and Related Topics in Physical Sciences.*, (Interscience Publishers, 1959)
- [43] Koopman B.O., *The Theory of Search.*, (Operation Research, 1956)
- [44] Knoppien P., Reddingius J., *Predators with two modes of searching : a mathematical model*, J. Theor. Biol., **114**, 273, (1985)
- [45] Kramer D.L., Mc Laughlin R.L., *The Behavioral Ecology of Intermittent Locomotion*, Amer. Zool., **41**, 137, (2001)
- [46] Levitz P., J. Phys. Condens. Mat. **17**, 4059, (2005)
- [47] Levitz P., Grebenkov D.S., Zinsmeister M., Kolwankar K.M., Sapoval B., Phys. Rev. Lett. **96**, 180601, (2006)
- [48] Lomholt M.A., Ambjornsson T., and Metzler R., Phys. Rev. Lett. **95**, 260603, (2005)
- [49] da Luz M.G.E, Buldyrev S.V.; Havlin S., Raposo E.P., Stanley H.E., Viswanathan G.M., *Improvements in the statistical approach to random Lévy flights searches*, Physica A, **295**, 89, (2001)
- [50] Mazzolo A., *Properties of diffusive random walks in bounded domains* , Europhys. Lett., **68**, 350, (2004)
- [51] Montroll E.W., *Random walks on lattices. III. Calculation of first passage times with application to exciton trapping on photosynthetic units.*, J.Math.Phys., **10**, (1968)
- [52] Moreau M., Oshanin G., Bénichou O. and Coppey M., Phys. Rev. E. **69**, 046101, (2004)
- [53] Moreau M., Oshanin G., Bénichou O. , Physica A. **306**, 169, (2002)
- [54] Moreau M., Bénichou O., Loverdo C., Voituriez R., Europhys. Lett. **77**, 20006, (2007)
- [55] Oaten A., *Optimal foraging in patches : a case for stochasticity*, Theor. Pop. Biol., **12**, pp. 263-285, (1977)
- [56] O'Brien W.J., Browman H.I., Evans B.I., *Search strategies of foraging animals*, American Scientist, **78**, 152, (1990)
- [57] O'Brien W.J., Evans B.I., Browman H.I., *Flexible search tactics and efficient foraging in saltatory searching animals*, oecologia, **80**,100, (1989)
- [58] Okubo A., Levin S.A., *Diffusion and Ecological Problems, Modern Perspectives*, (Springer, Berlin, 2004)
- [59] Oshanin G., Wio H.S., Lindenberg K., Burlatsky S.F., J. Phys. : Condens. Matter **19**, 065142, (2007)
- [60] Pienkowski M.W., *Changes in the foraging pattern of plovers in relation to environmental factors*, Anim. Behav., **31**, 244, (1983)
- [61] Pierce G.J., Ollason J.G., *Eight reasons why optimal foraging is a complete waste of time*, Oikos, **49**, 111, (1987)

- [62] Raposo E.P., Buldyrev S.V., da Luz M.G.E, Santos M.C., Stanley H.E., Viswanathan G.M., *Dynamical robustness of Lévy search strategies*, Phys. Rev. Lett., **91**, 240601, (2003)
- [63] Ray T.S., Glasser M.L., Doering C.R., Phys. Rev. A, **45**, 825, (1992)
- [64] S. Redner, *A guide to first passage time processes* (Cambridge University Press, 2001)
- [65] Rice S.A., *Diffusion-Limited Reactions*, in : Compr. Chem. Kinetics **25**, eds. : C.H.Bamford, C.F.H.Tipper, and R.G.Compton (Elsevier, New York, 1985)
- [66] Risken H., *The Fokker-Planck Equation, Methods of Solution and Applications.*, (Springer, 1988)
- [67] Seisenberger G. et al., Science **294**, 1929, (2001)
- [68] Slutsky M., Mirny L.A., Biophys. J **87**, 1640, (2004)
- [69] Sokolov I.M., Metzler R., Pant K., Williams M.C., Biophys J. **89**, 895, (2005)
- [70] von Smoluchowski M., Z. Phys. Chem. Leipzig **92**, 129, (1917)
- [71] Stanford N.P., Szczelkun M.D., Marko J.F., Halford S.E., *One- and three-dimensional pathways for proteins to reach specific DNA sites.*, The EMBO Journal, **19**, 6546, (2000)
- [72] Stephens D.W., Krebs J.R., *Foraging Theory*, (Princeton University Press, Princeton, New Jersey, 1986).
- [73] Stone L.D., *Theory of optimal search*, (Operations Research of America, VA Arlington, 1989)
- [74] Tao H., Grosberg A.Y. and Shklovskii B.I., Biophys. J. **90**, 2731, (2006)
- [75] Van Kampen N.G., *Stochastic Processes in Physics and Chemistry*, (Springer, New York, 2001)
- [76] Viswanathan G.M., Afanasyev V., Buldyrev S.V., Havlin S., da Luz M.G.E., Raposo E.P., Stanley H.E., *Lévy flights search patterns of biological organisms*, Physica A, **295**, 85, (2001)
- [77] Viswanathan G.M., Stanford N.P., Afanasyev V., Buldyrev S.V., Havlin S., da Luz M.G.E, Raposo E.P., Stanley H.E. *Statistical physics of random searches*, Brazilian Journal of Physics, **31**, 102, (2001)
- [78] Viswanathan G.M., Bartumeus, S.V. Buldyrev, J.Catalan, U.L. Fulco, S. Havlin, M.G.E. da Luz, M.L. Lyra, E.P. Raposo, H.E. Stanley, *Lévy flight random searches in biological phenomena*, Physica A, **314**, 2, (2002)
- [79] Viswanathan G.M., Afanasyev V., Buldyrev S.V., Havlin S., da Luz M.G.E, Raposo E.P., Stanley H.E., *Lévy flights in random searches*, Physica A, **282**, 1, (2000)
- [80] Viswanathan G.M., Buldyrev S.V., Havlin S., da Luz M.G.E., Raposo E.P., Stanley H.E., *Optimizing the success of random searches*, Nature, **401**, 911, (1999)

-
- [81] Viswanathan G.M., Afanasyev V., Buldyrev S.V., Murphy E.J., Prince P.A., Stanley H.E., *Lévy flight search patterns of wandering albatrosses*, Nature, **381**, 413, (1996)
- [82] Weiss G.H., *Aspects and Applications of the Random Walk.*, (North-Holland, 1994)
- [83] Wilemski G., Fixman M., J. Chem. Phys., **58**, 4009, (1973)
- [84] Winter R.B., Berg O.G. et von Hippel P.H., *Diffusion-driven mechanisms of protein translocation on nucleic acids. 3. The Escherichia coli lac repressor-operator interaction : kinetic measurements and conclusions.* Biochemistry, Vol.**20**, pp.6961-6977, (1981)
- [85] Zhou H.X., Szabo A., Phys. Rev. Lett. **93**, 178101 (2004)

Résumé

Cette thèse a pour objet l'optimisation des temps de recherche lors d'une poursuite aléatoire. Cette thèse commence par un modèle simple et idéalisé de recherche par des animaux de cible caché. Ce modèle nous a fourni une relation en lois de puissance entre les temps passés dans chaque état (recherche et déplacement) qui s'accorde bien avec les résultats expérimentaux. Puis, nous avons étudié de façon systématique des modèles intermittents avec mémoire à une dimension du même type que celui utilisé pour les animaux. Cette étude permet de mieux cerner l'intérêt des processus intermittents selon le type de recherche à effectuer. Ensuite, nous avons examiné les processus de recherche intermittents sans mémoire dans le cadre de la réactivité chimique. Nous avons ainsi envisagé deux modèles de recherche intermittente sans mémoire à une dimension. Puis, nous nous sommes intéressé à l'influence d'un confinement géométrique sur les temps de résidence et les propriétés de rencontre entre les partenaires d'une réaction chimique. Nous avons alors montré que les relations géométriques précédemment obtenues pour des marches de Pearson dans des domaines fermés, sont des cas particuliers de relations très générales entre les temps de résidence pour une large classe de processus stochastiques. Enfin, nous avons étudié un processus de recherche intermittent alternant diffusion et téléportation pour un système sphérique continu à d dimensions et un réseau régulier. Les exemples d'application sont le transport à travers des membranes biologiques et la catalyse hétérogène. Nous avons alors montré que l'intermittence pouvait permettre de réduire considérablement le temps de recherche si la nature physique du chercheur et de son environnement rend possible de réaliser une alternance entre ces deux régimes.

Mots clés : processus stochastique, temps de premier passage, recherche intermittente, optimisation

Abstract

This thesis deals with the optimization of mean search time for intermittent processes. This thesis starts with a simple and idealized model of foraging animals. This model leads us to power laws relationship between the durations of each state (search and move) that are in good agreement with experimental data. Then, we examine more systematically intermittent models with memory in one dimension in order to characterize the interest of intermittency in search process. Next, we study the case of intermittent process without memory within the framework of chemical reactivity. Next, we consider the influence of geometric confinement on residence times and properties of encounter between reactants of a chemical reaction. We show then that geometrical relations previously obtained for Pearson random walks in bounded domains, are particular cases of very general relations between residence times for a large class of stochastic processes. Last, we study intermittent search process switching between diffusion and teleportation for a continuous spherical system in d dimensions and a regular lattice. Applications are mainly in biology for transport through porous membrane and in chemistry with heterogeneous catalysis. We show that intermittency could reduce significantly search time if the physical nature of the searcher and of its environment makes possible to realize a fast alternation of the two regimes.

Keywords : stochastic process, first passage time, intermittent search, optimization