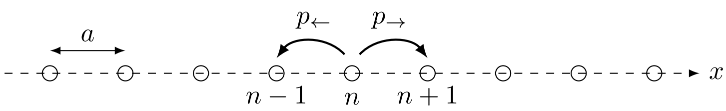
CN 4

# Étude numérique d'une marche aléatoire

Dans ce TD numérique, on cherche à étudier le modèle de marche aléatoire modélisant la diffusion de particules (chapitre D1). Plusieurs variations de la marche aléatoire symétrique du cours seront abordées.

## CN4 — 01 Trajectoire pour le modèle unidimensionnel symétrique

Comme dans le cours, on modélise le système de particules diffusantes en le considérant unidimensionnel, discrétisé en espace (réseau de pas $a$) et en temps (un choc, donc un déplacement à chaque temps $\tau$).




**1)** On considère que les particules ne peuvent sauter que d'un site $n$ à un site immédiatement voisin $n \pm 1$. On considère de plus un modèle de marche aléatoire symétrique : lors d'un déplacement, les particules ont autant de chance d'aller à droite qu'à gauche

$$p_\rightarrow = p_\leftarrow = \frac{1}{2}$$

Écrire alors une équation dynamique donnant la probabilité $p(x, t+\tau)$ pour une particule de se retrouver en $x$ au temps $t+\tau$.

**2)** En dressant des développements limités ($a$ et $\tau$ sont petits puisque ce sont des grandeurs caractéristiques de l'échelle microscopique justement), obtenir l'équation de diffusion vérifiée par la probabilité $p(x,t)$ pour une particule d'être en $x$ à $t$. Identifier le coefficient de diffusion $D$.

**3)** `[Numérique]` On veut étudier cette dynamique numériquement. On rappelle que la commande

```
>>> import numpy as np
>>> np.random.choice([-1,1])
```

renvoie le nombre 1 ou $-1$ aléatoirement avec probabilité uniforme. Écrire une fonction `evol(N)` qui renvoie la trajectoire d'une particule sur une durée $T = \mathtt{N}\,\tau$ correspondant à `N` sauts (c'est-à-dire la liste de ses `N` positions successives) sous forme de liste `[pos1, pos2, ... posN]`. La position sera repérée par le numéro $n$ du site (la position spatiale est alors $x = n\,a$). On fera partir la particule de la position $n = 0$ au temps initial $t = 0$.

**4)** `[Numérique]` Tracer une trajectoire unique de `N`$=200$ sauts, avec la position $n$ en ordonnée et le numéro du saut $i$ en abscisse. On rappelle les commandes suivantes, où `Abs` et `Ord` sont à définir préalablement

```
from matplotlib import pyplot as plt

plt.xlim([0, N])
plt.ylim([-N/10, N/10])
plt.xlabel(r"Pas de temps $t$", fontsize=14)
plt.ylabel(r"Position $x(t)$ en pas d'espace", fontsize=14)
plt.grid()
plt.plot(Abs, Ord, color='darkorange', linewidth=2.)
plt.xticks(fontsize=12)
plt.yticks(fontsize=12)
plt.tight_layout()
plt.savefig("traj.pdf")
plt.show()
```

## CN4 — 02 Étude statistique de la diffusion

**1)** `[Numérique]` Pour le même modèle que celui de l'exercice CN4-01, écrire avec Python une fonction `posfinale(Npart, N)` (qui peut se servir de la fonction précédente `evol`) renvoyant sous forme de liste la position finale de `Npart` particules au bout de `N` = 200 chocs.

**2)** `[Numérique]` Tracer l'histogramme des positions finales pour `Npart` = 50000 particules. On utilisera pour cela la commande

```
>>> plt.hist(Liste, bins=200, width=2)
```

**3)** `[Numérique]` La solution analytique de ce problème est gaussienne (avec $N(x,t)$ le nombre de particules en $x$ à $t$) :

$$N(x,t) = \frac{A}{\sqrt{t}}\,\exp\left(-\frac{x^2}{\sqrt{4\,D\,t}}\right)$$

Tracer cette solution en ajustant la constante $A$ sur le même graphique et comparer.

## CN4 — 03 Obtention de la loi d'échelle $\ell \propto \sqrt{D\,t}$

**1)** `[Numérique]` Toujours dans le même modèle, écrire un programme `trajMoy(Npart, N)` qui renvoie la liste des positions moyennes de `Npart` particules à chaque saut $i$ ($i$ va de 0 à `N`$-1$). Tracer alors la distance au centre moyenne des particules $\ell$ en fonction du pas de temps $i$.

**2)** Pour tester la loi d'échelle du cours $\ell \propto \sqrt{D\,t}$, que pourrait-on tracer ?

**3)** `[Numérique]` Mener ce test quantitativement.

## CN4 — 04 Modèle non symétrique

On reprend l'exercice CN4-02, mais on change la dynamique des particules. On suppose cette fois que les particules ont, pour une raison ou une autre, un plus de chance d'aller à droite qu'à gauche

$$p_{\rightarrow} = \frac{1}{2} + \varepsilon \qquad \text{et} \qquad p_{\leftarrow} \frac{1}{2} - \varepsilon \qquad \text{avec} \qquad \varepsilon = 0{,}05$$

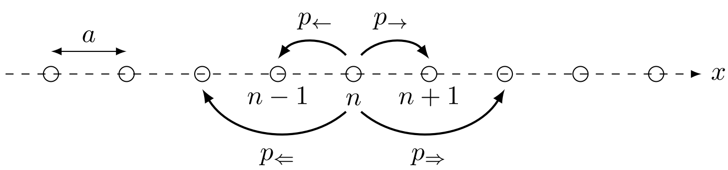
**1)** Établir l'équation aux dérivées partielles (dite « d'advection-diffusion ») vérifiée par la probabilité $p(x,t)$ d'être en $x$ à l'instant $t$ (on fera des développements limités). Interpréter $\varepsilon$.

**2)** `[Numérique]` Obtenir l'histogramme des positions finales de `Npart` = 50000 particules après `N` = 200 pas de temps.

**3)** `[Numérique]` Obtenir la trajectoire moyenne des particules en fonction du temps et comparer au modèle du cours.

## CN4 — 05 Modèle à saut double

On reprend l'exercice CN4-02, mais on change encore la dynamique des particules. On suppose cette fois que les particules sauter directement sur un site distant de $2\,a$.




On considère les probabilités suivantes, où les notations sont explicitées sur le schéma :

$$p_{\rightarrow} = p_{\leftarrow} = \frac{1}{2} - \varepsilon \qquad \text{et} \qquad p_{\Rightarrow} = p_{\Leftarrow} = \varepsilon \qquad \text{avec} \qquad \varepsilon = 0{,}05$$

**1)** `[Numérique]` Obtenir l'histogramme des positions finales de `Npart` = 50000 particules après `N` = 200 pas de temps.

**2)** `[Numérique]` Obtenir la trajectoire moyenne des particules en fonction du temps et comparer au modèle du cours.

## CN4 — 06 Modèle non linéaire avec terme de création

On reprend l'exercice CN4-02, mais on change encore la dynamique des particules. On suppose cette fois que des particules peuvent apparaître, par exemple par réaction chimique, avec le mécanisme suivant :

— s'il y a exactement 2 particules sur le même site $n$, alors ces deux particules ont une probabilité $1/3$ de sauter à gauche ou à droite, et aussi une probabilité $1/3$ de rester sur place et de créer une troisième particule (ou quatrième si les deux particules réalisent ce processus)

$$p_{\rightarrow} = p_{\leftarrow} = p_{\circlearrowleft} = \frac{1}{3}$$

— s'il n'y a pas exactement deux particules sur le même site, alors la dynamique des particules est inchangée

$$p_{\rightarrow} = p_{\leftarrow} = \frac{1}{2}$$

**1)** `[Numérique]` Obtenir l'histogramme des positions finales de `Npart` $= 50000$ particules initiales après `N` $= 200$ pas de temps.

**2)** `[Numérique]` Obtenir la trajectoire moyenne des particules en fonction du temps et comparer au modèle du cours.