

Correction TP2

I. Équation de Langevin

I.1. La distribution de probabilité de la force subie par la particule brownienne en suspension doit être à moyenne nulle car globalement les molécules du fluide lui transfèrent de l'énergie cinétique de manière isotrope, comme le fluide n'a pas de direction privilégiée et n'a pas de mouvement d'ensemble.

I.2. f doit être décroissante en fonction de l'intensité de la force, car la distribution de vitesse typique dans un fluide sera de type Maxwell-Boltzmann, qui est une exponentielle décroissante de la vitesse.

II. Principe de la simulation de dynamique brownienne

II.1. Pour pouvoir étudier numériquement l'équation de Langevin, on a besoin de la discrétiser. On peut d'abord utiliser la définition d'une dérivée ou la formule de Taylor-Young à l'ordre 1 pour estimer la valeur de la dérivée ($h \rightarrow 0$)

$$f(a+h) = f(a) + \frac{f'(a)}{1!}h + O(h^2) \quad (15)$$

d'où on déduit

$$f'(a) = \frac{f(a+h) - f(a)}{h} \quad (16)$$

Appliqué à l'équation de Langevin pour les particules browniennes de faible taille

$$\alpha \frac{dx}{dt} = f \text{ devient } x_{n+1} - x_n = \frac{f \Delta t}{\alpha} = \xi \quad (17)$$

II.2. La variance d'une variable aléatoire est définie comme $V = \langle x_i^2 \rangle - \langle x_i \rangle^2$. Sa dimension est donc celle du carré de la variable aléatoire. Dans notre cas, $[\xi] = L$ donc $[V_\xi] = L^2$ et ainsi $[D] = L^2 T^{-1}$, ce qui est bien la dimension attendue d'un coefficient de diffusion.

III. Mesure des propriétés physiques

III.1. On observe $\forall D$ que, plus le temps passe, plus les particules ont tendance à s'éloigner de l'origine, sans direction privilégiée. On observe aussi que, plus $D \nearrow$, plus la distance parcourue en 100 itérations semble importante.

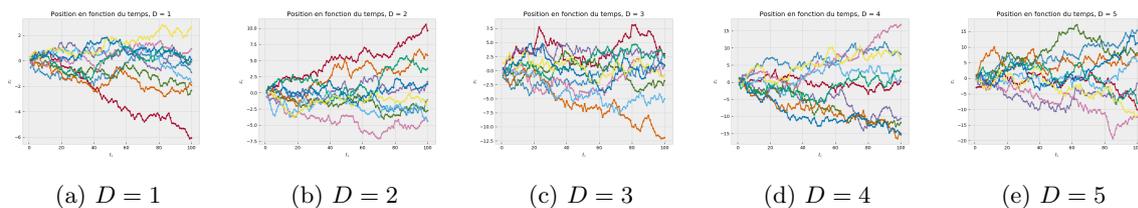


Figure 1: Évolution de $x_i(t)$, la position des 10 particules, pour différentes valeurs du coefficient de diffusion D .

Mais si on fait la moyenne de toutes les trajectoires de couleurs différentes obtenues pour même valeur de D , on trouve que le déplacement moyen est nulle :

$$\langle x(t) \rangle = \frac{1}{\#couleurs} \sum_{couleurs} x(t) = 0 \quad \forall t \quad (18)$$

III.2. Après avoir étudié l'évolution temporelle de la position des particules (t variant, on regarde $x(t)$ pour chaque particule), on peut désormais tracer la distribution spatiale des particules à un temps fixé (t fixé, on regarde la distribution des $x(t)$). Si on trace cette distribution à différents instants t , on observe que sa forme semble à chaque fois gaussienne, avec un écart-type qui augmente avec t . Ce comportement est en accord avec nos précédentes observations, et montre bien que les particules ont spontanément tendance à diffuser de plus en plus loin de l'origine.

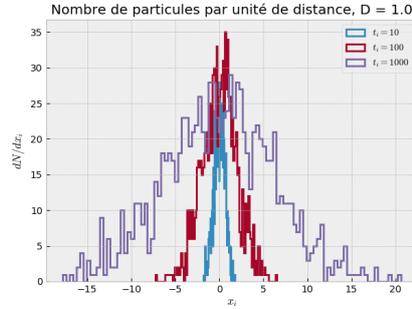


Figure 2: Distribution spatiale de 1000 particules à différents temps.

Remarque : dans notre cas on a fixé le nombre d'intervalles mais pas leur taille, ce qui explique que la hauteur des distributions soient similaires, alors que si on fixait la taille des intervalles on aurait une distribution bien plus haute pour $T = 10$ que pour $T = 100$

III.3. On aimerait maintenant quantifier le déplacement moyen des particules en fonction du temps. Pour ce faire, on va calculer la moyenne d'ensemble sur toutes les particules au bout du temps t de la position au carré, ce qui permettra de ne pas dépendre de la direction (positive ou négative) prise par les particules.

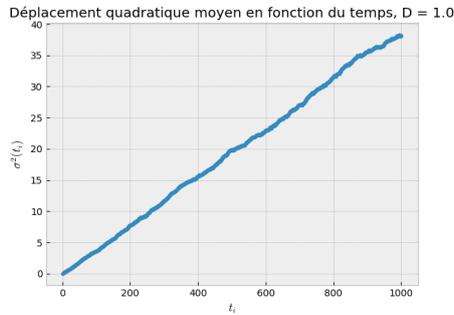


Figure 3: Déplacement quadratique moyen en fonction du temps.

On observe que le déplacement quadratique moyen $\sigma^2(t)$ est bien linéaire en fonction du temps. On comprends ce comportement en remarquant qu'il correspond dans la figure 10 à la largeur à mi-hauteur de la gaussienne à l'instant t . On constate en effet que lorsque que l'on passe de la distribution bleu à la distribution violette, on multiplie le temps t par 100, mais la largeur à mi-hauteur n'est multipliée que par $\sqrt{100} = 10$, comme $\sigma(t)$.

III.4. On veut désormais modéliser un mouvement Brownien en deux dimensions. Comme le fluide environnant est isotrope, on peut raisonnablement supposer que nous pouvons utiliser deux coordonnées $x(t)$ et $y(t)$ qui soient indépendantes l'une de l'autre, avec un coefficient de diffusion identique.

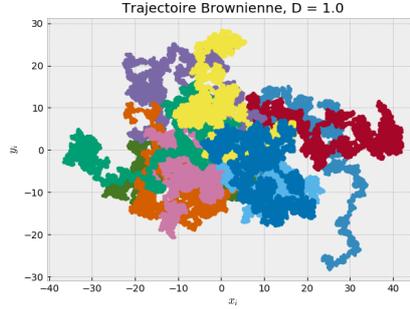


Figure 4: Trajectoires Browniennes à deux dimensions.

Si on observe la taille de la structure formée par la trajectoire pour différents temps de simulation, on remarquera que son rayon semble croître en \sqrt{t} , comme attendu, donc sa surface croît comme t .

III.5. Afin de complexifier le modèle, on peut vouloir rajouter de nouvelles forces dans l'équation de Langevin, comme par exemple un champ électrique ou une force de rappel harmonique. Pour ce second cas, cette force est modélisée par $F_r = -kx$. On peut donc insérer cette force dans l'équation de Langevin 17

$$\alpha \frac{dx}{dt} = f - kx \quad (19)$$

puis la discrétiser de nouveau, en choisissant (arbitrairement) d'utiliser le point x_i pour la force de rappel (on aura pu prendre $\frac{x_i + x_{i+1}}{2}$)

$$x_{i+1} - x_i = \left(\frac{f}{\alpha} - \frac{k}{\alpha} x_i \right) \Delta t \quad (20)$$

En posant $\kappa = \frac{k}{\alpha}$ et en implémentant cette modification dans la fonction `move_brownian` du module `brownian` on obtient

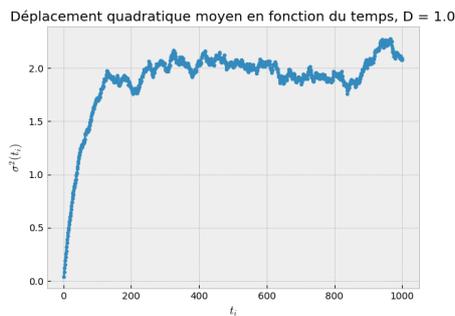


Figure 5: Déplacement quadratique moyen en fonction du temps, avec $\kappa = 0.1$.

On remarque, comme on pouvait s'y attendre, que le déplacement quadratique moyen se stabilise autour d'une certaine valeur. En effet, la diffusion va avoir tendance à écarter les particules de l'origine, alors que la force de rappel va avoir tendance à l'y ramener. Cette distance correspond à la distance à laquelle ces deux contributions se compensent (en moyenne). Il y a donc un "confinement" (on parle aussi de particule dans une "cage").