

TIPE 2017-2018

ETUDE ET
MODELISATION INFORMATIQUE
DE LA DIFFUSION DE
PARTICULES DANS UN MILIEU

DARGAUD LAURINE [MP]

OBJECTIF : CONCEVOIR UN OUTIL INFORMATIQUE POUR SIMULER LA DIFFUSION PARTICULAIRE

I – Une particule, des obstacles fixes

- A. Simulation informatique
- B. Visualisation

II – Un système de particules

- A. Simulation informatique
- B. Optimisation de l'algorithme

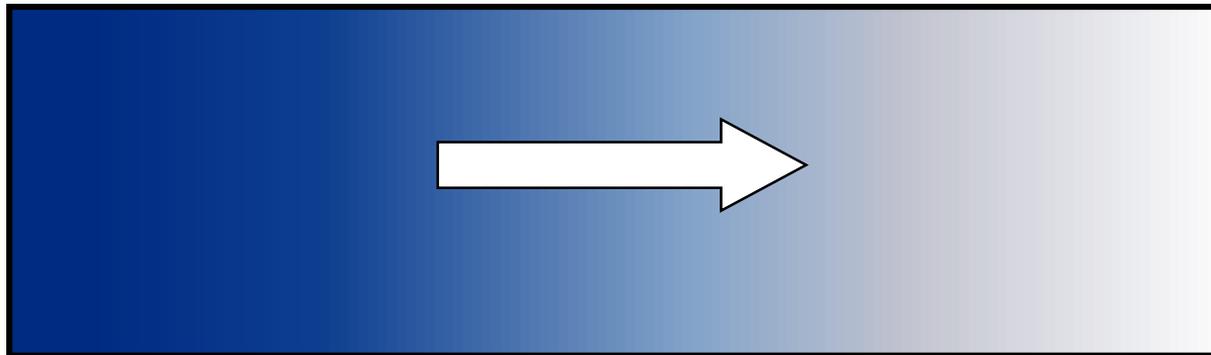
III – Application

- A. Homogénéisation
- B. Mouvement brownien
- C. Coefficient de diffusion

PHENOMENE DE DIFFUSION

Naturel & Spontané

Forte
densité



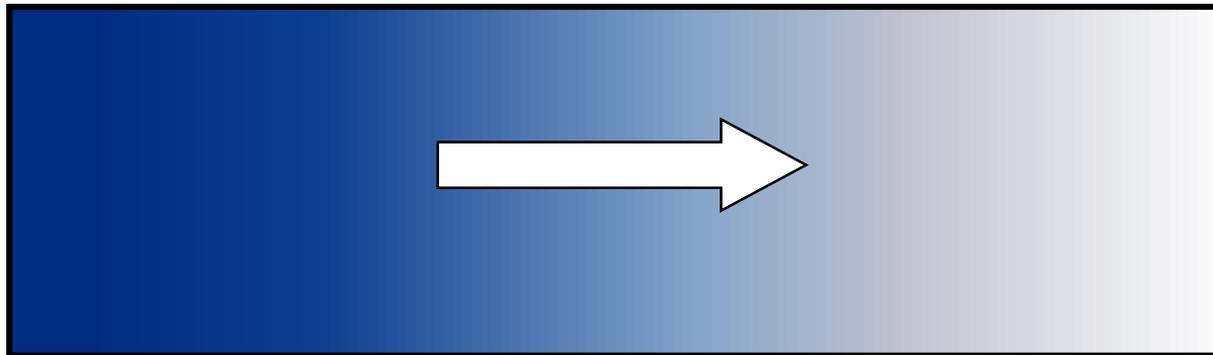
Faible
densité

« Continuum top-down approach »

VS

« Atomistic bottom-up approach »

Forte densité



Faible densité

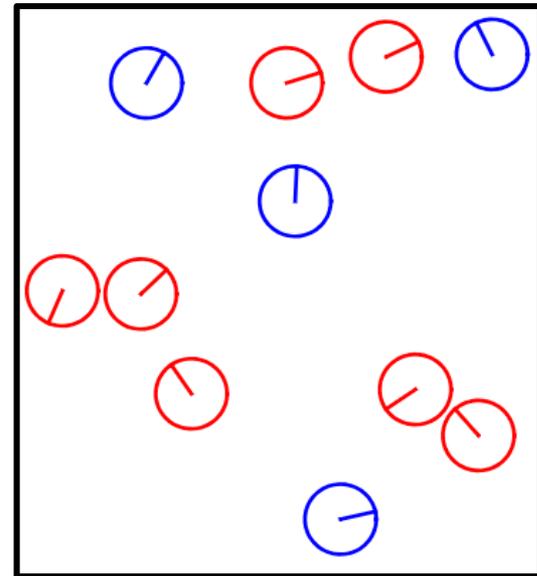
« Continuum top-down approach »

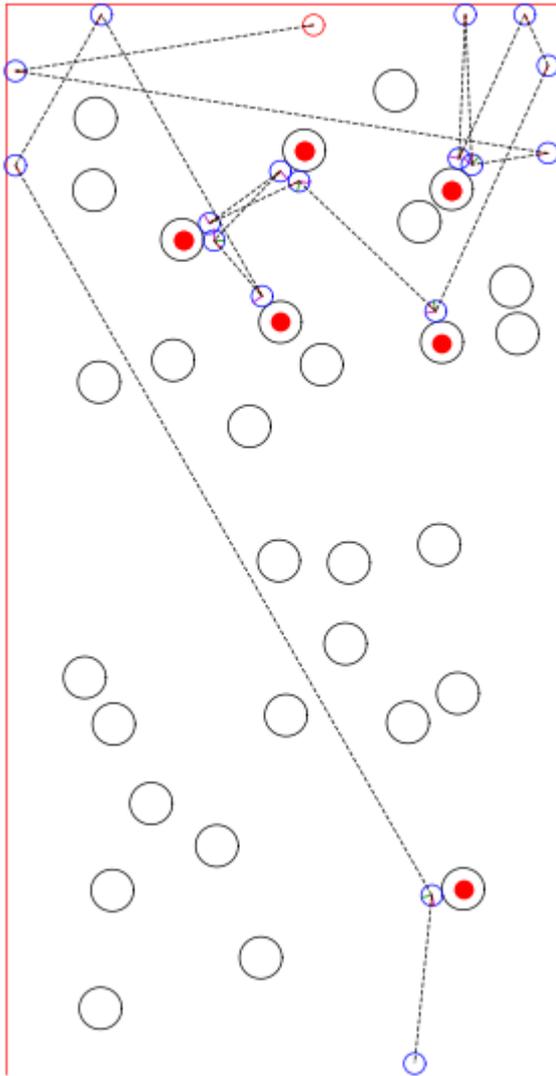
VS

« Atomistic bottom-up approach »

Modèle du
GAZ PARFAIT

- ▷ Sphères dures
- ▷ Aucune force : chocs uniquement
- ▷ Chocs élastiques : E_c se conserve



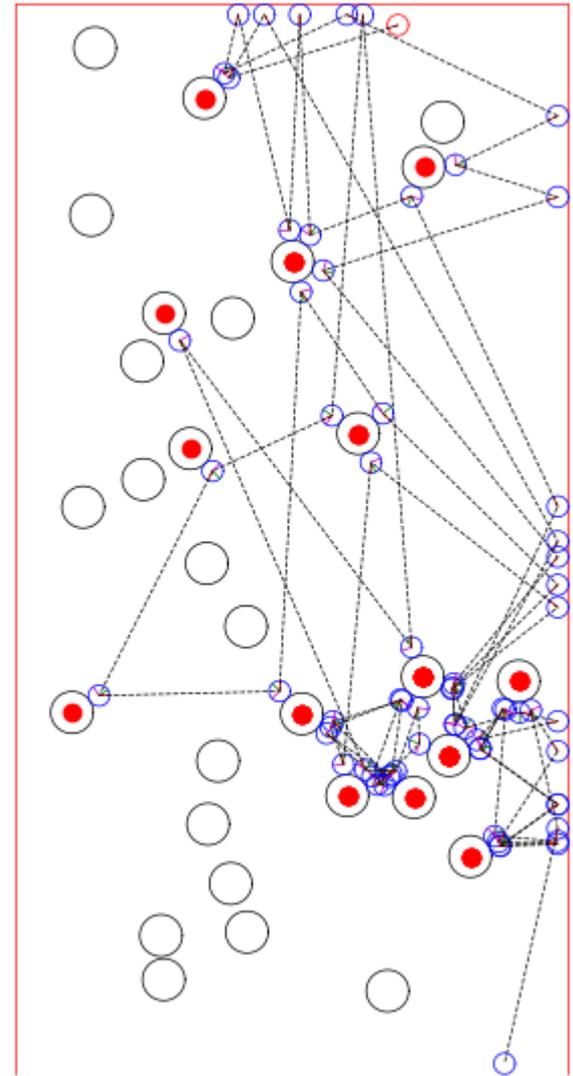


Densité : 30% ; 16 rebonds

Approche
déterministe

Méthode :
Pas de temps de
référence

Complexité : $O(n)$

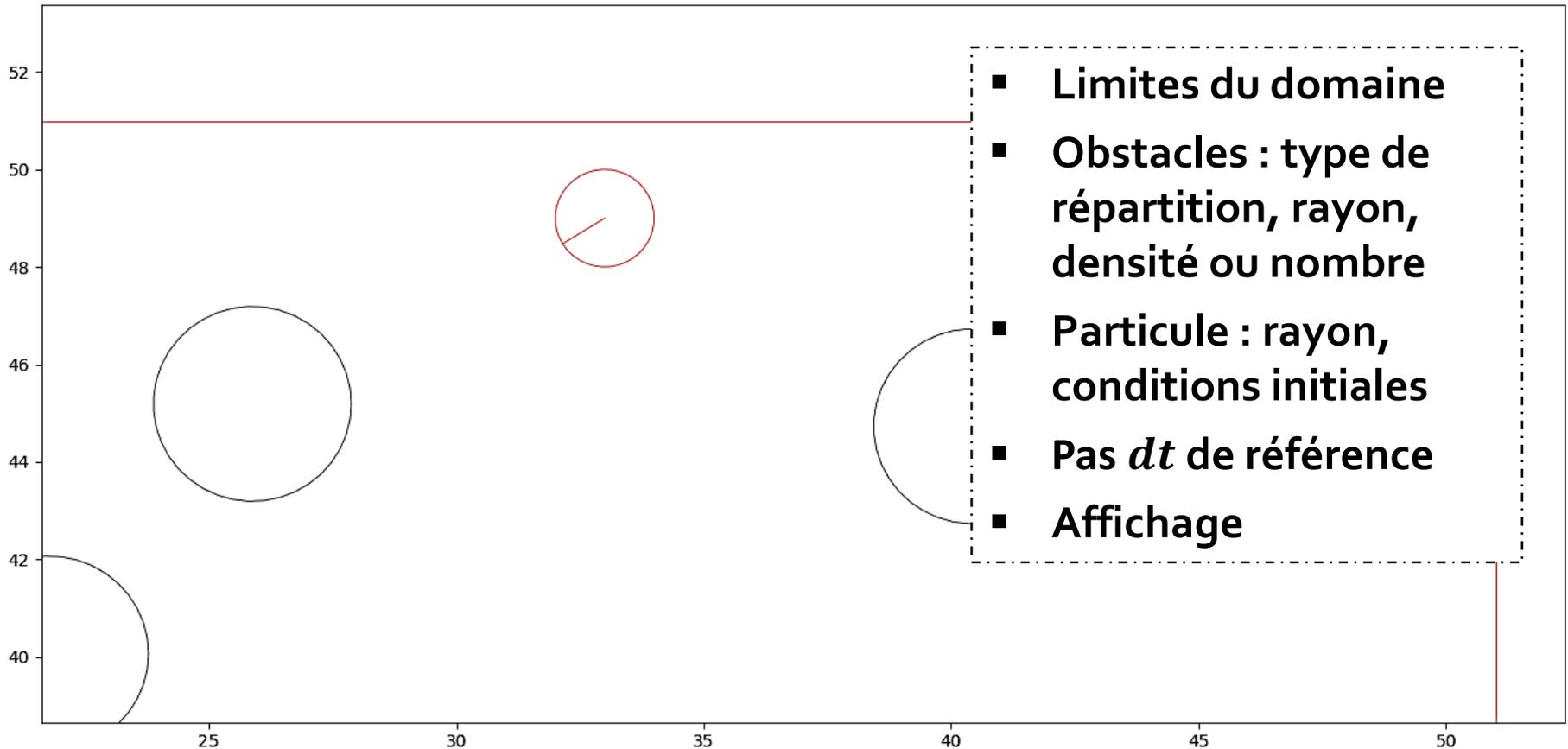


Densité : 30% ; 76 rebonds

Initialisation



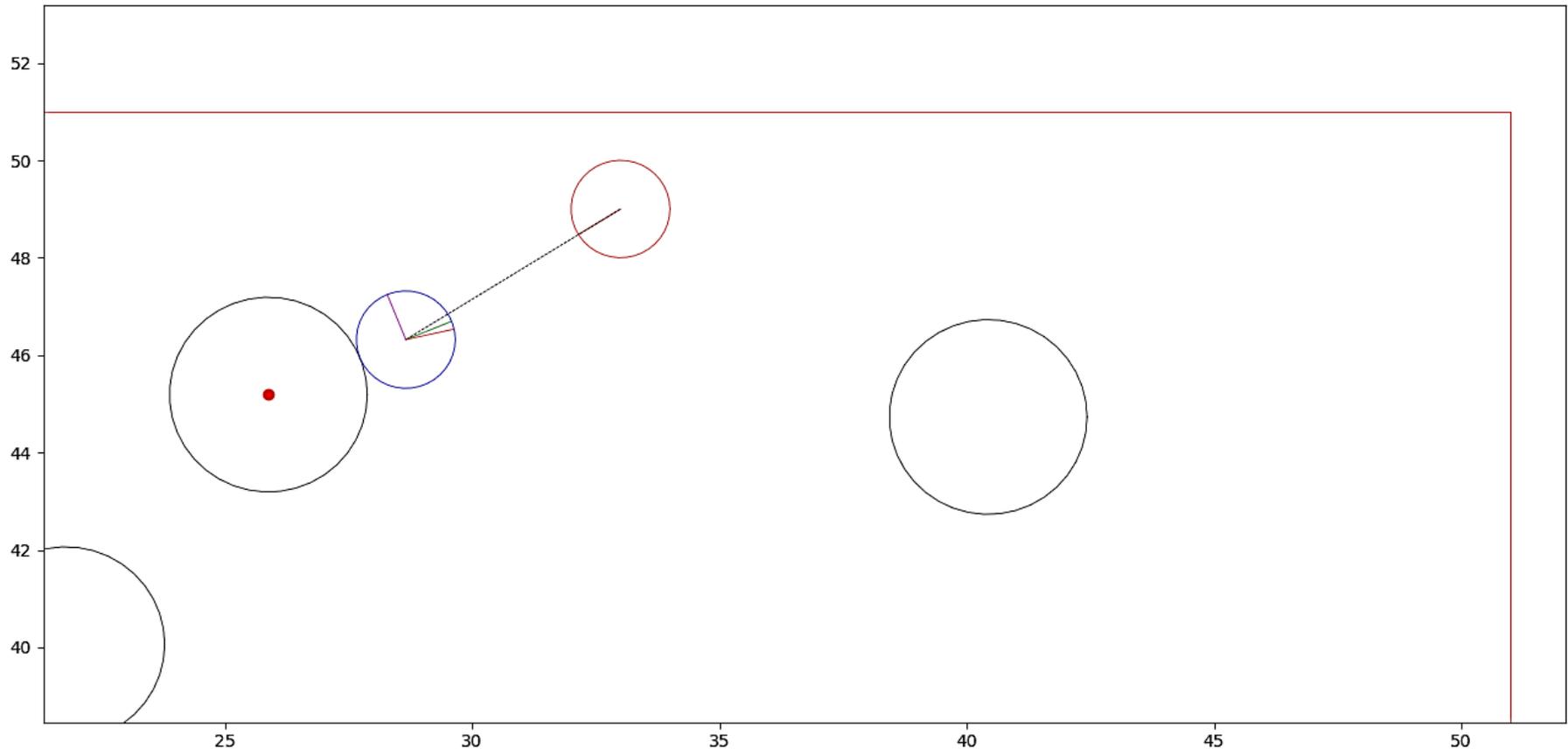
Tant que la particule ne sort pas :
Avancer \rightarrow si obstacle : calculer temps précis, effectuer choc



Initialisation



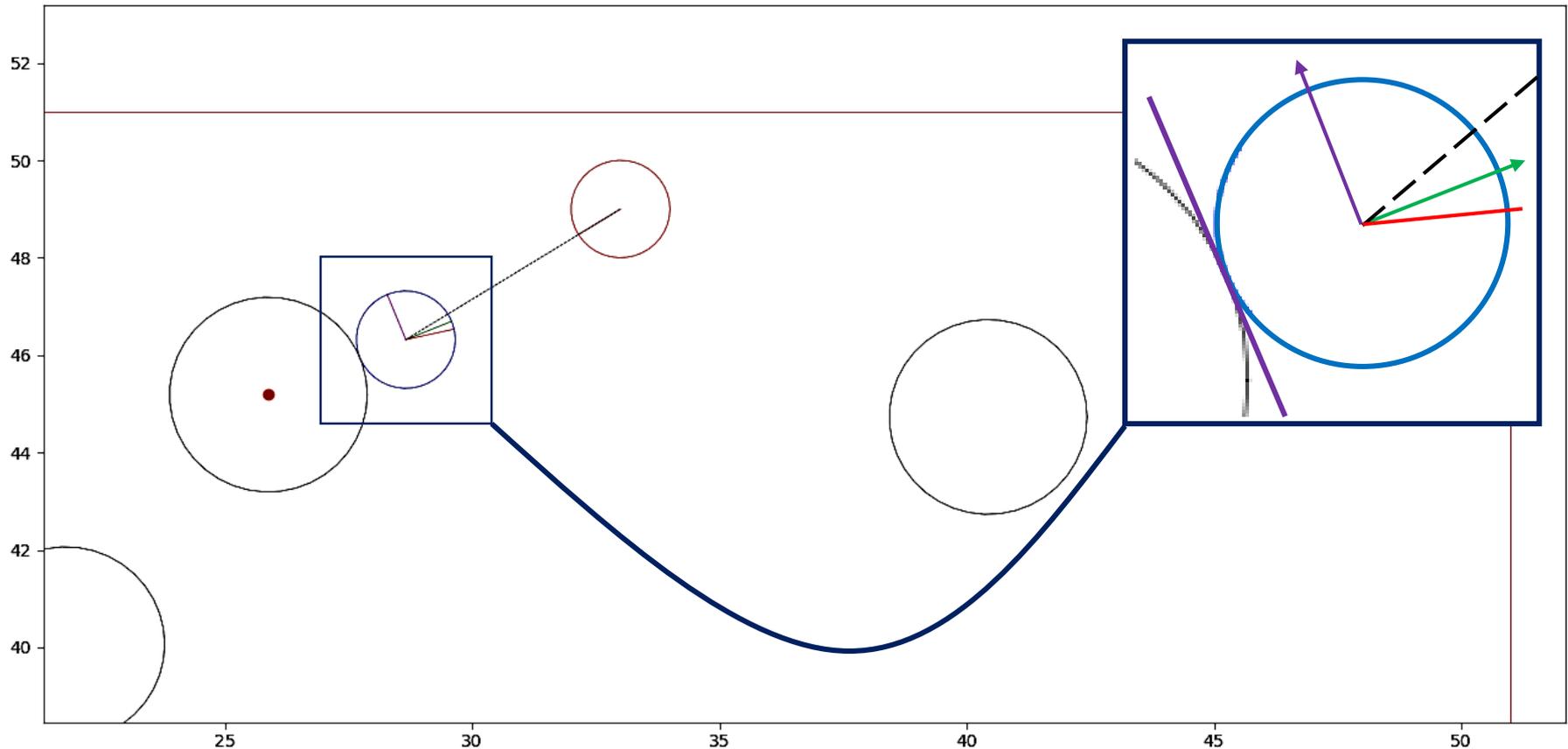
Tant que la particule ne sort pas :
Avancer \rightarrow si obstacle : calculer temps précis, effectuer choc



Initialisation



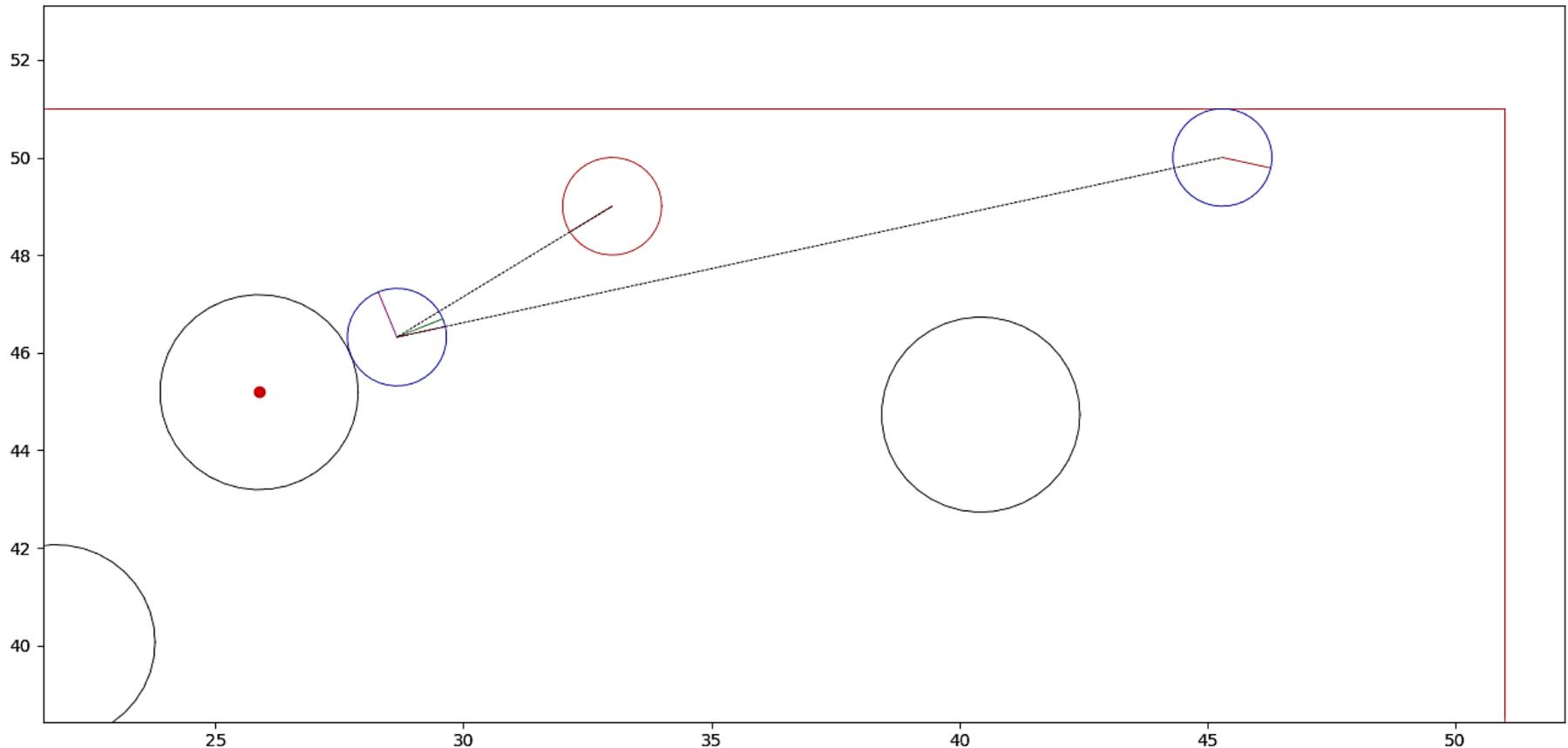
Tant que la particule ne sort pas :
Avancer \rightarrow si obstacle : calculer temps précis, effectuer choc



Initialisation



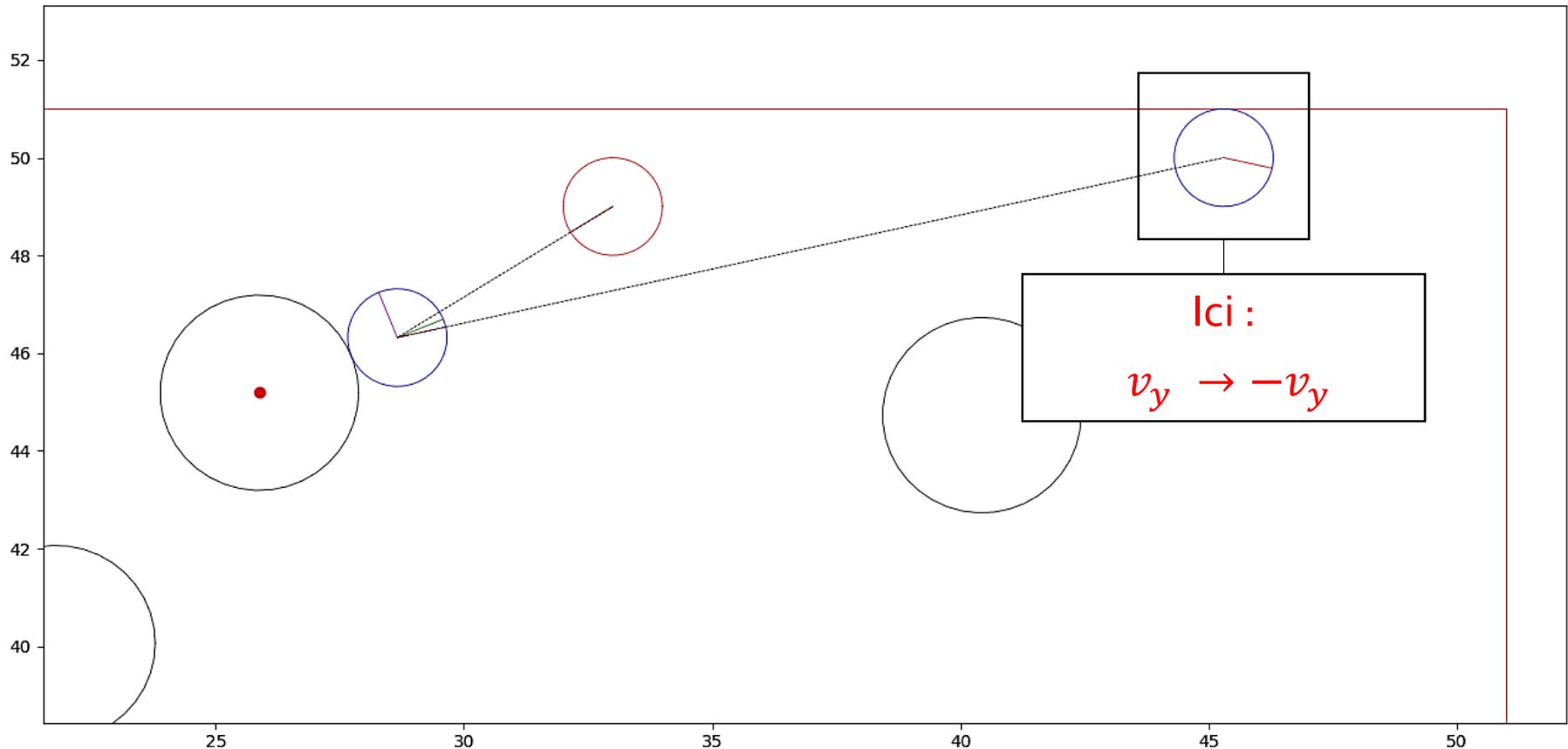
Tant que la particule ne sort pas :
Avancer \rightarrow si obstacle : calculer temps précis, effectuer choc



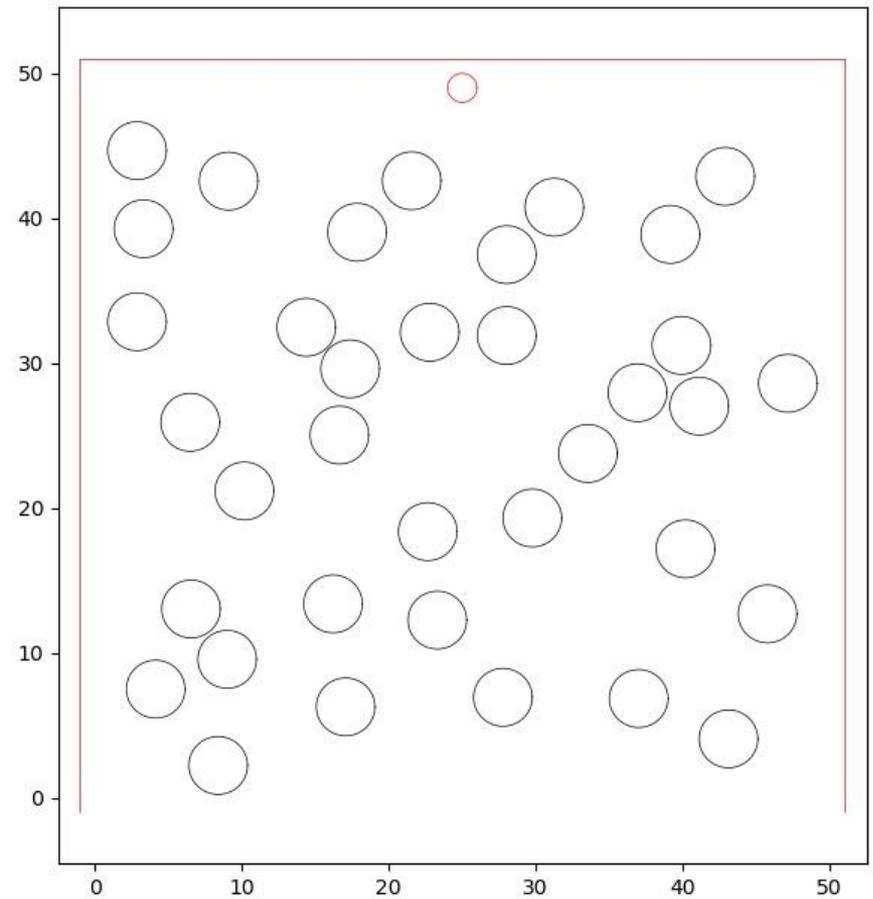
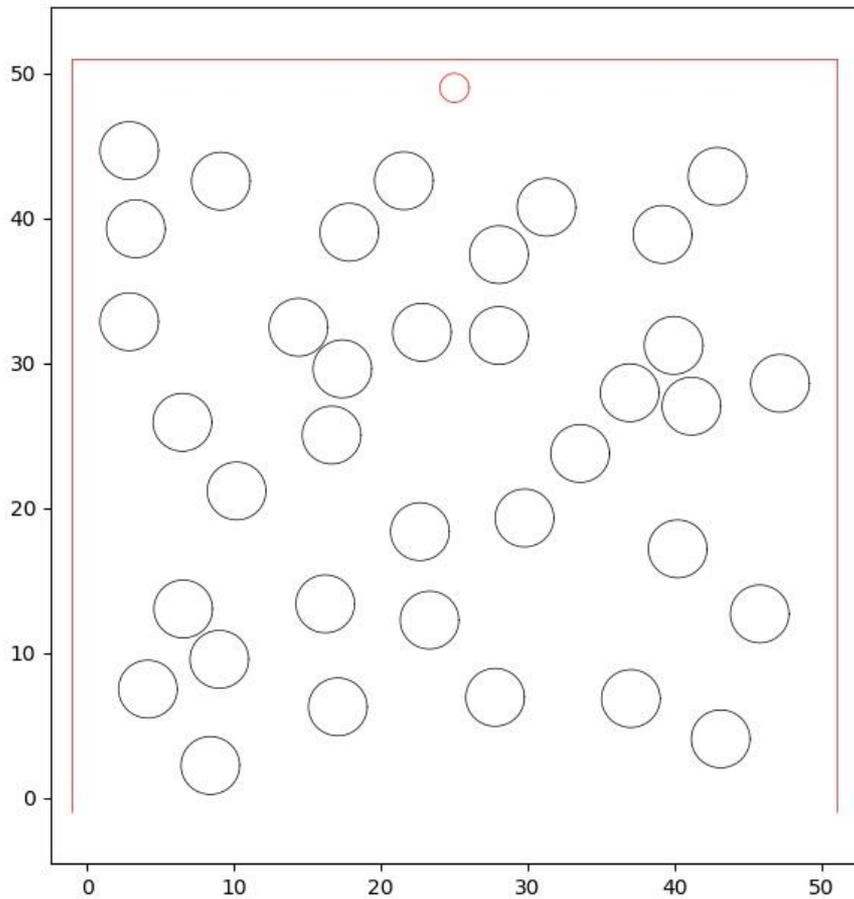
Initialisation



Tant que la particule ne sort pas :
Avancer \rightarrow si obstacle : calculer temps précis, effectuer choc

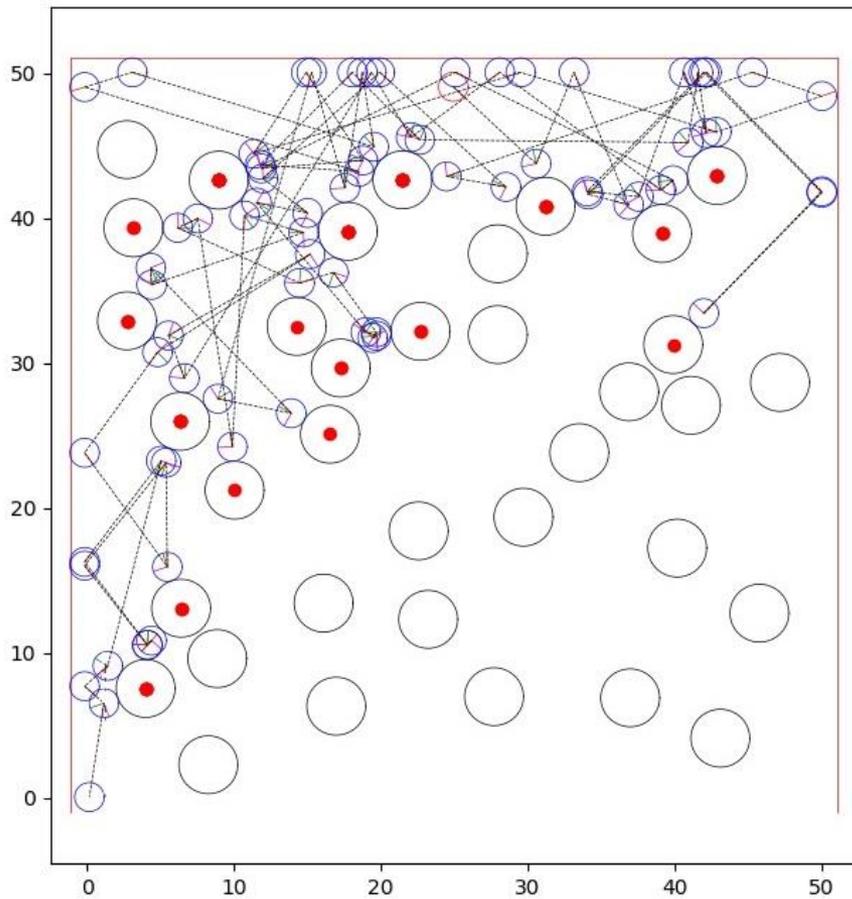
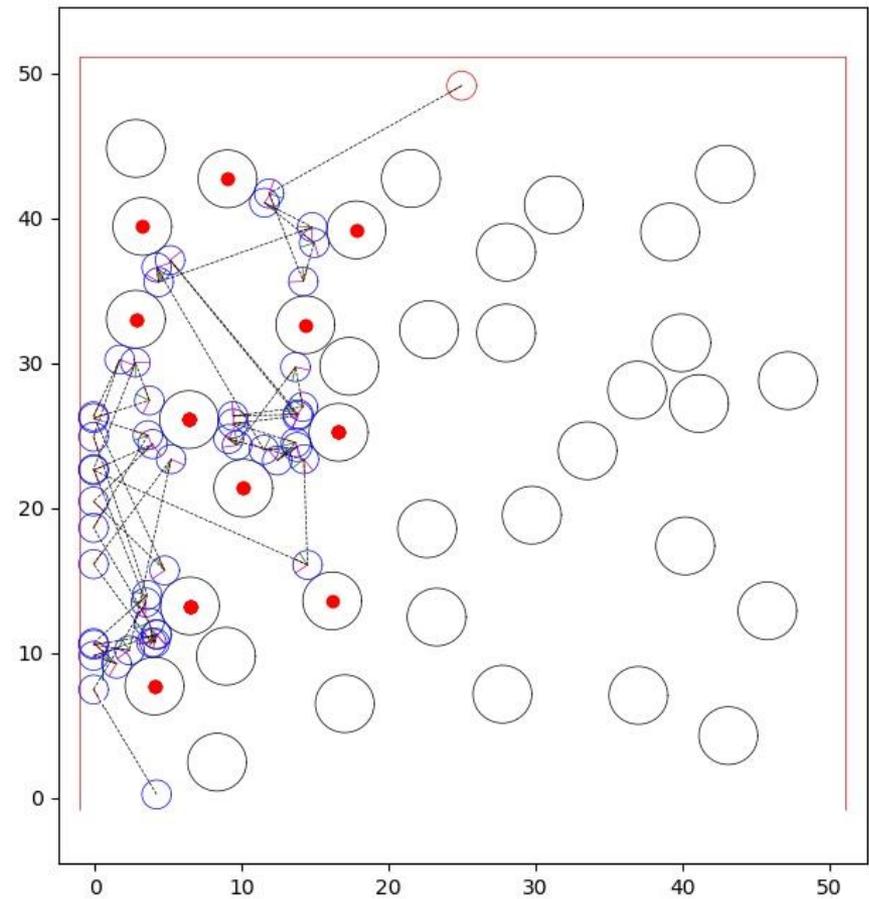


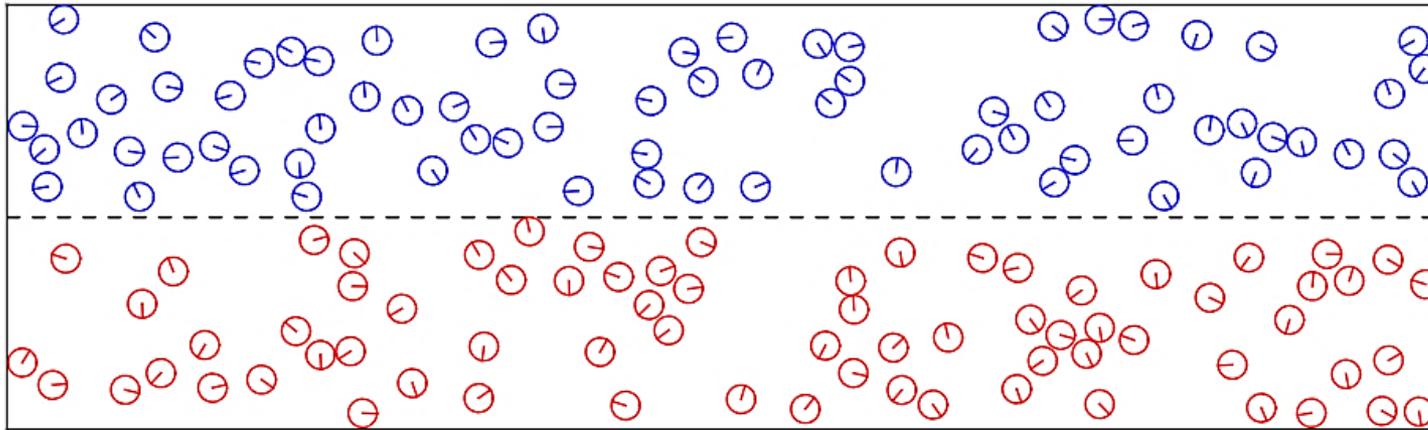
Visualisation



$v = 500 ; r = 1 ; r_{ob} = 2 ; \#ob = 36$

Visualisation

 $t_1 = 1,322 \text{ s}$  $t_2 = 0,619 \text{ s}$  $v = 500 ; r = 1 ; r_{ob} = 2 ; \#ob = 36$

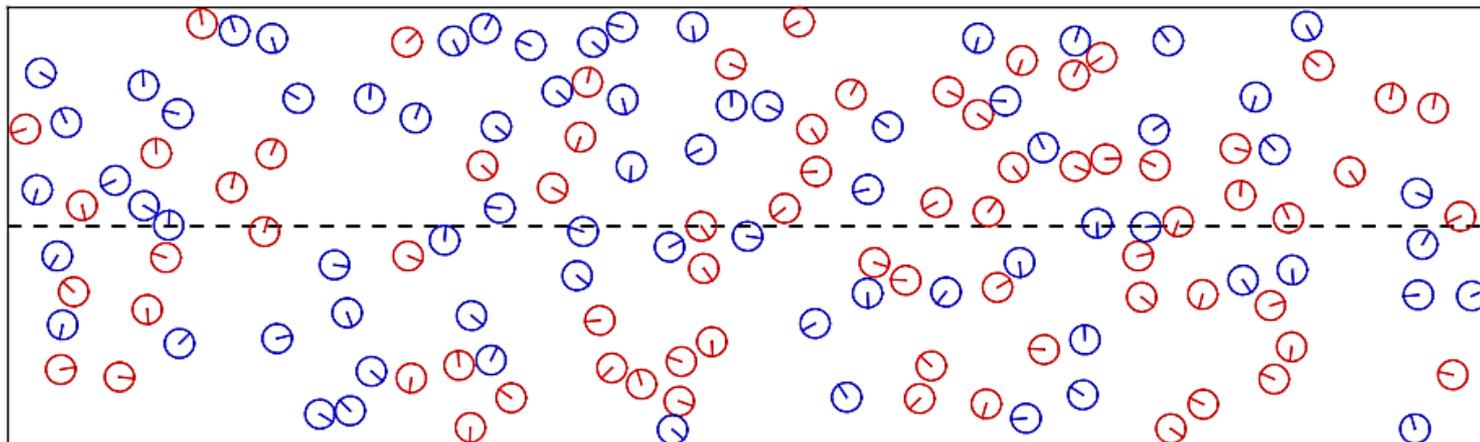


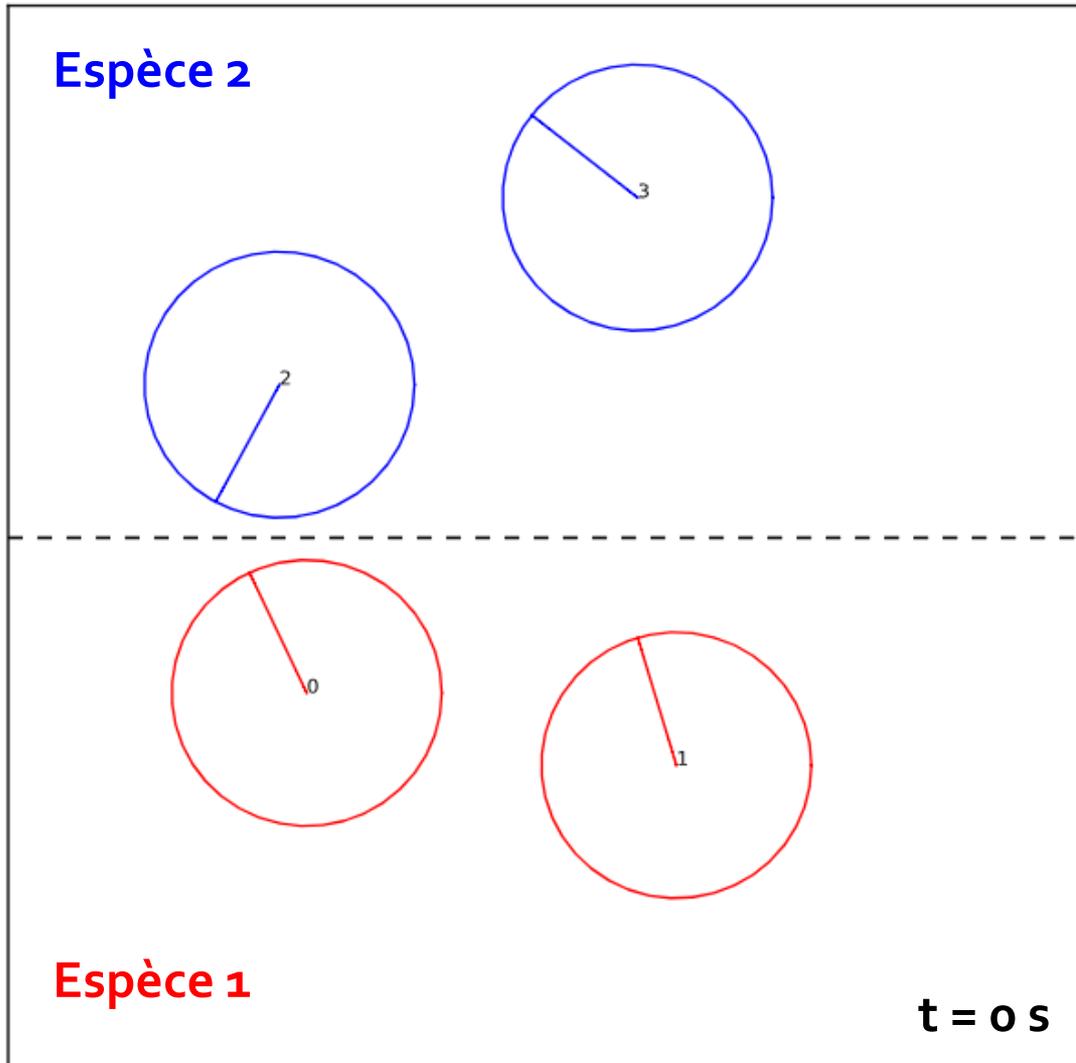
$t = 0 \text{ s}$
 $D_1 = D_2 = 15\%$

**Système de particules en
interaction dans une enceinte
fermée**

Méthode :
Pas de temps variable

$t = 25 \text{ s}$





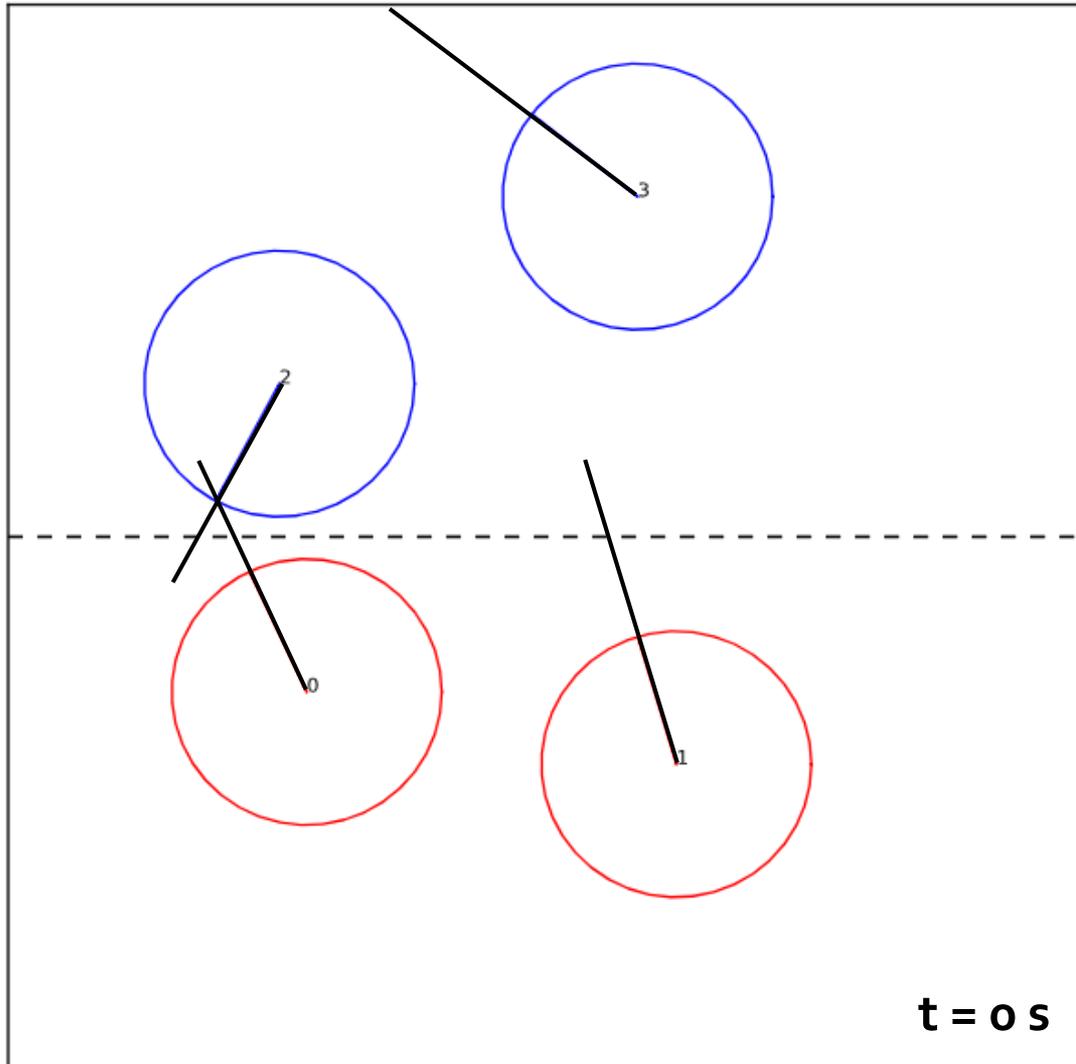
Initialisation



Boucle :
 calcul du temps t_{min} de collision, déplacement des particules puis traitement du choc

Ici :

- ▷ Enceinte 2D carrée (8x8)
- ▷ 2 particules / espèce
- ▷ $m_2 = 4 * m_1$
- ▷ $v_{norme} = 4 \text{ m. s}^{-1}$



Initialisation



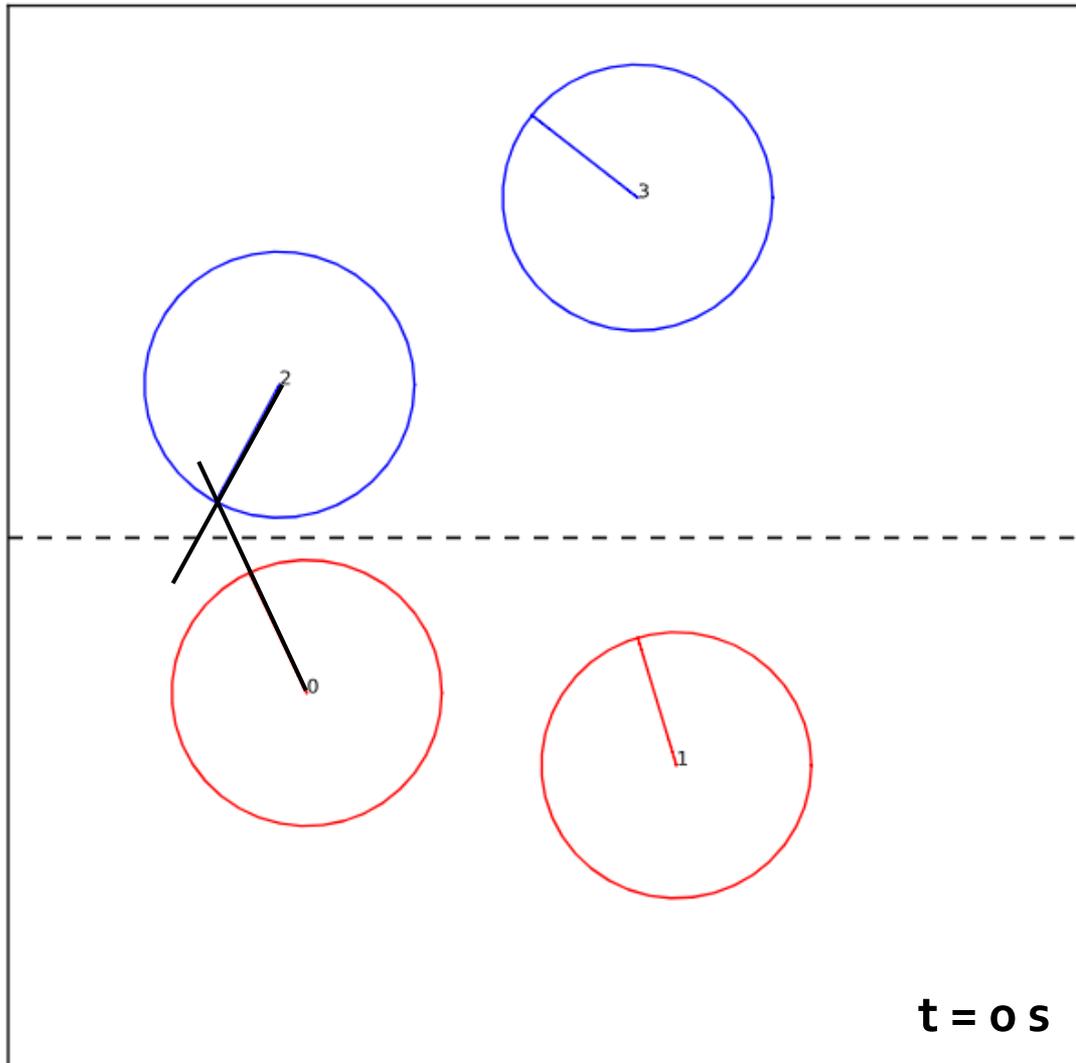
Boucle :
calcul du temps t_{min} de collision, déplacement des particules puis traitement du choc

$$t_{min} = \min_{\substack{i \in \llbracket 0, n-1 \rrbracket \\ j \in \llbracket i+1, n-1 \rrbracket}} (t_i, t_{ij})$$

t_{ij} tel que :

$$\| \overrightarrow{M_i(t)M_j(t)} \| = (r_i + r_j)$$

et : $t_i = \frac{\Delta d}{v_{x\parallel y}}$



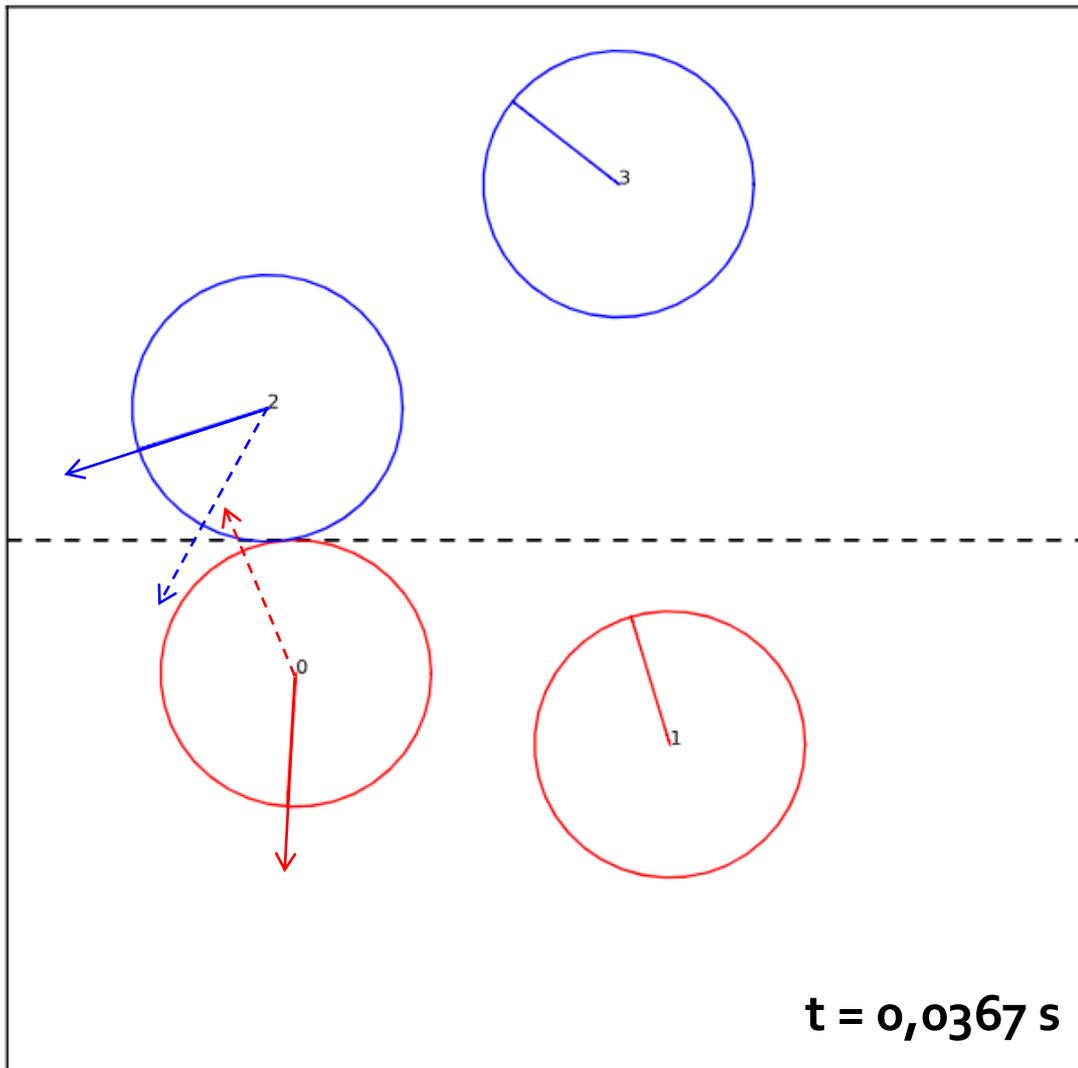
Initialisation



Boucle :
calcul du temps t_{min} de collision, déplacement des particules puis traitement du choc

Ici :

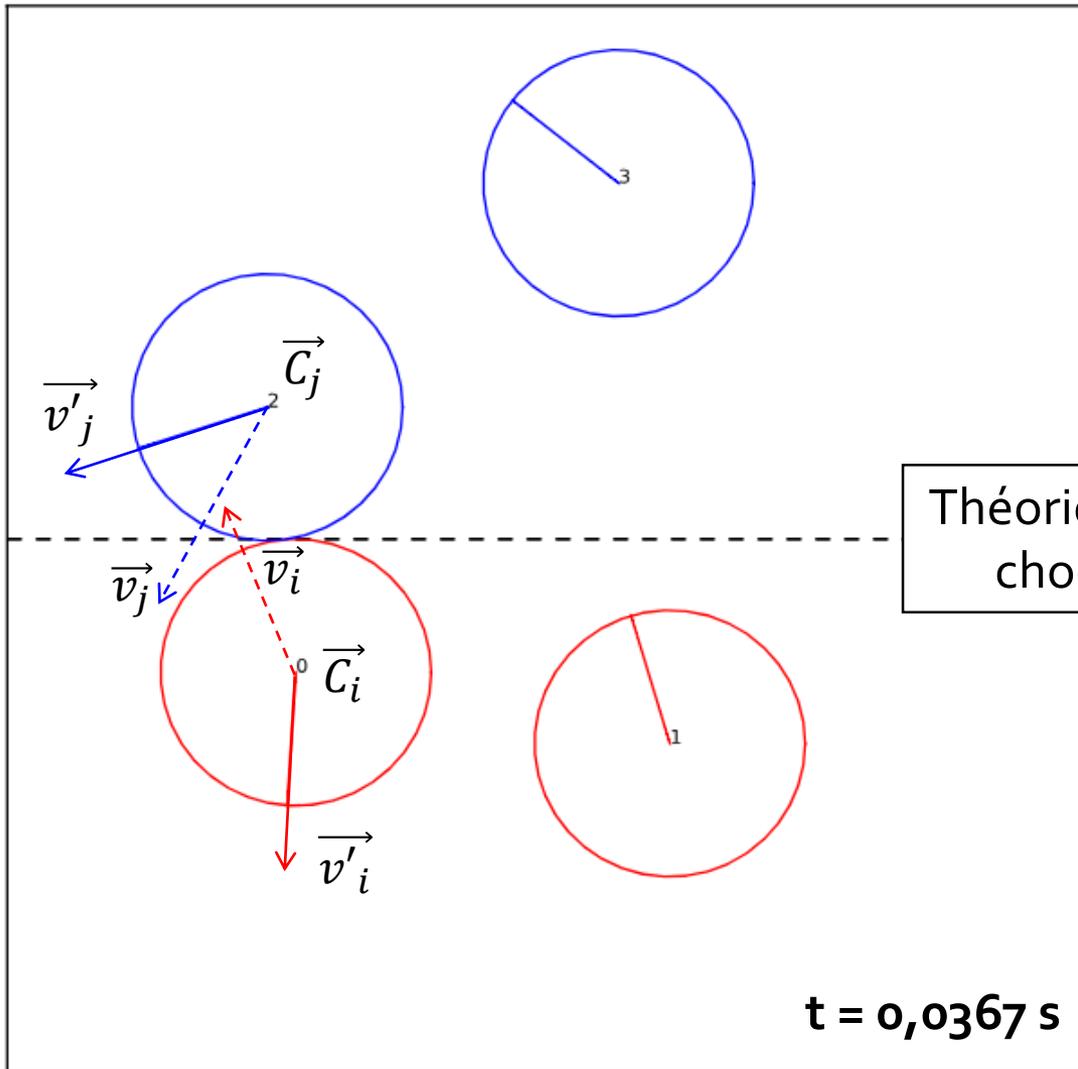
$$t_{min} = t_{02} = 0,0367 \text{ s}$$



Initialisation



Boucle :
calcul du temps t_{min} de
collision, **déplacement des**
particules puis traitement du
choc



Théorie des chocs

Initialisation



Boucle :

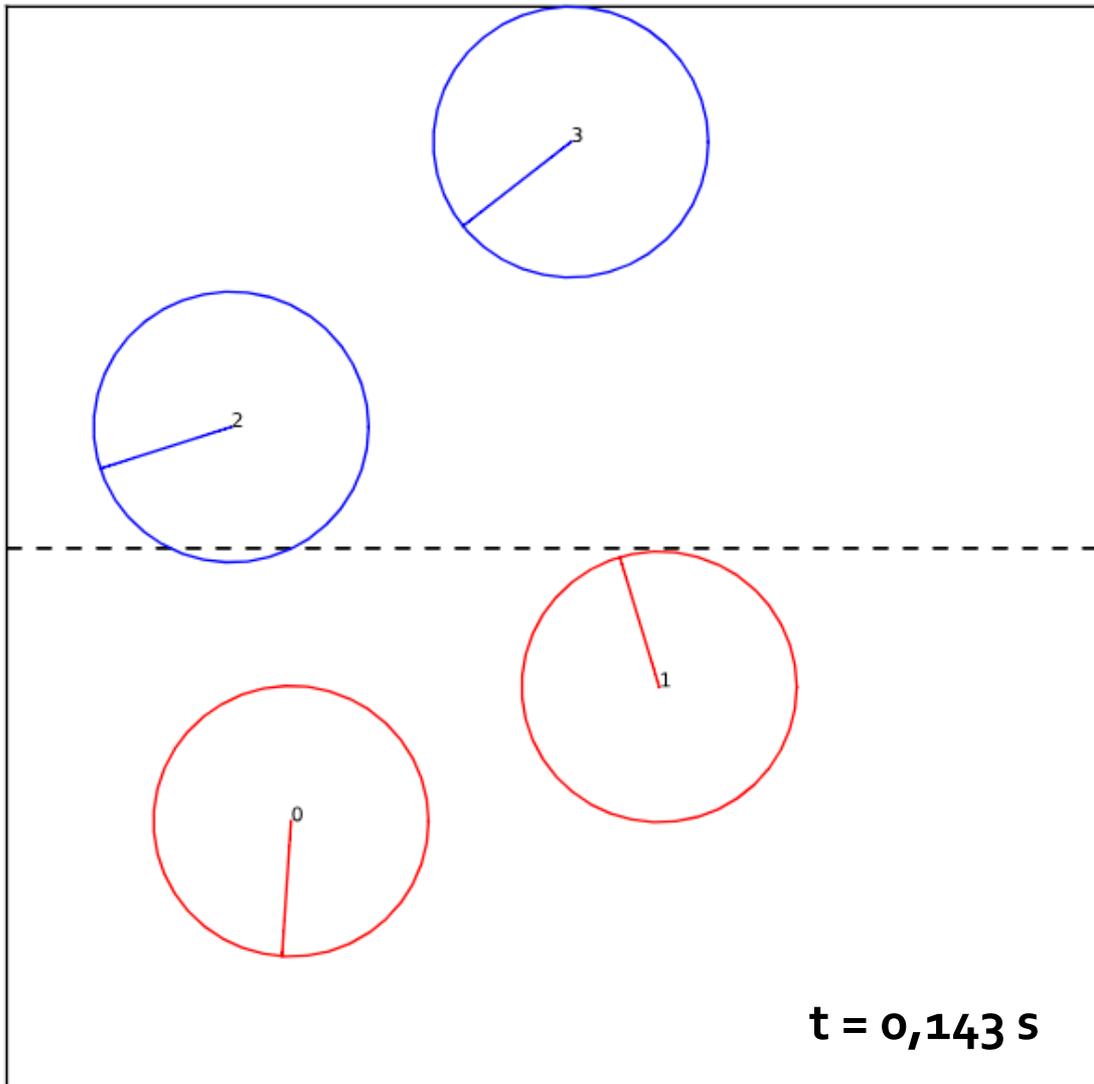
calcul du temps t_{min} de collision, **déplacement des particules puis traitement du choc**

$$\begin{cases} \vec{v}'_i = \vec{v}_i - \frac{a}{m_i} \vec{k} \\ \vec{v}'_j = \vec{v}_j + \frac{a}{m_j} \vec{k} \end{cases}$$

avec

$$a = \frac{2}{m_i^{-1} + m_j^{-1}} \vec{k} \cdot (\vec{v}_i - \vec{v}_j)$$

$$\text{et } \vec{k} = \frac{\vec{C}_i \cdot \vec{C}_j}{\| \vec{C}_i \cdot \vec{C}_j \|}$$



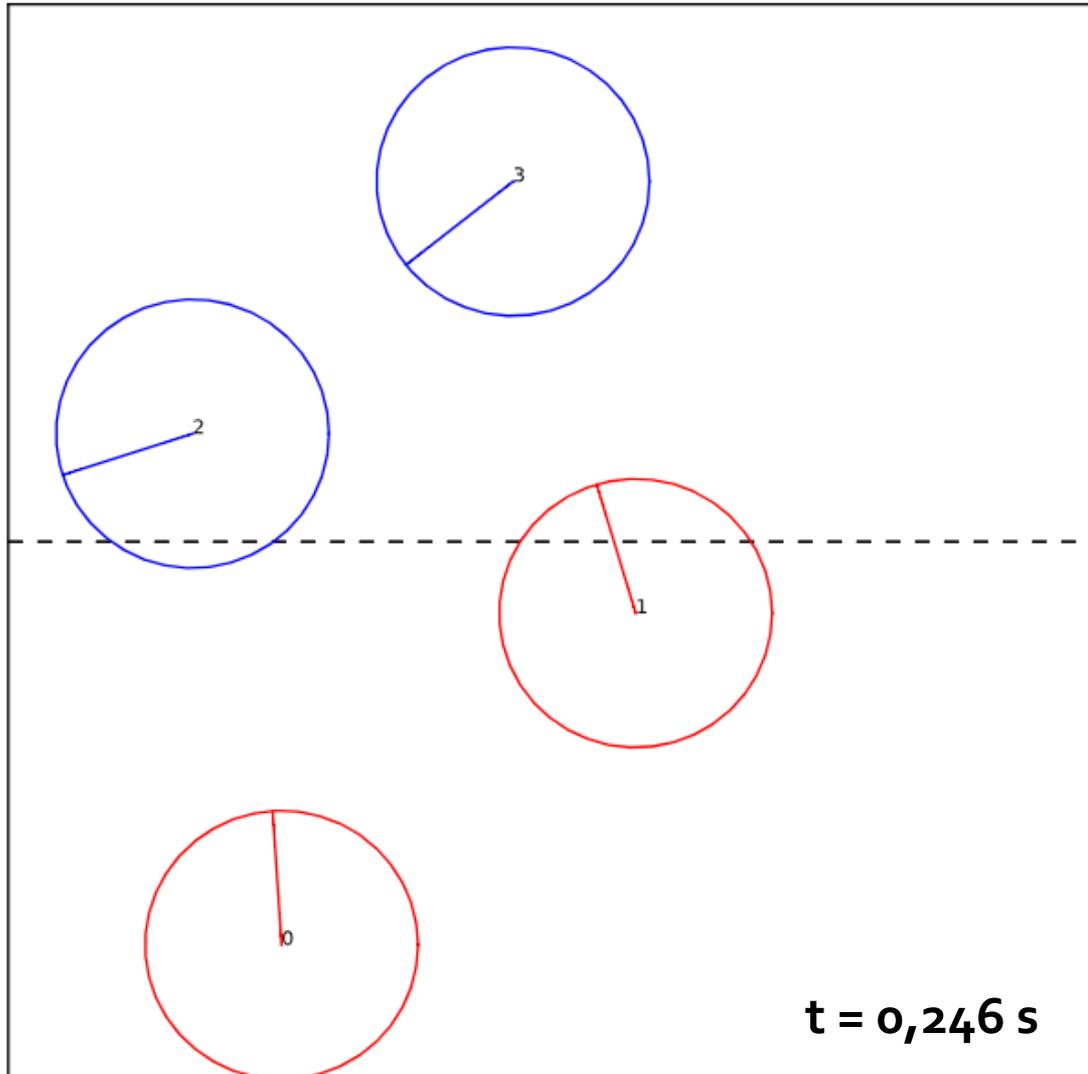
Initialisation



Boucle :

calcul du temps t_{min} de collision, déplacement des particules puis traitement du choc

3 avec le bord haut



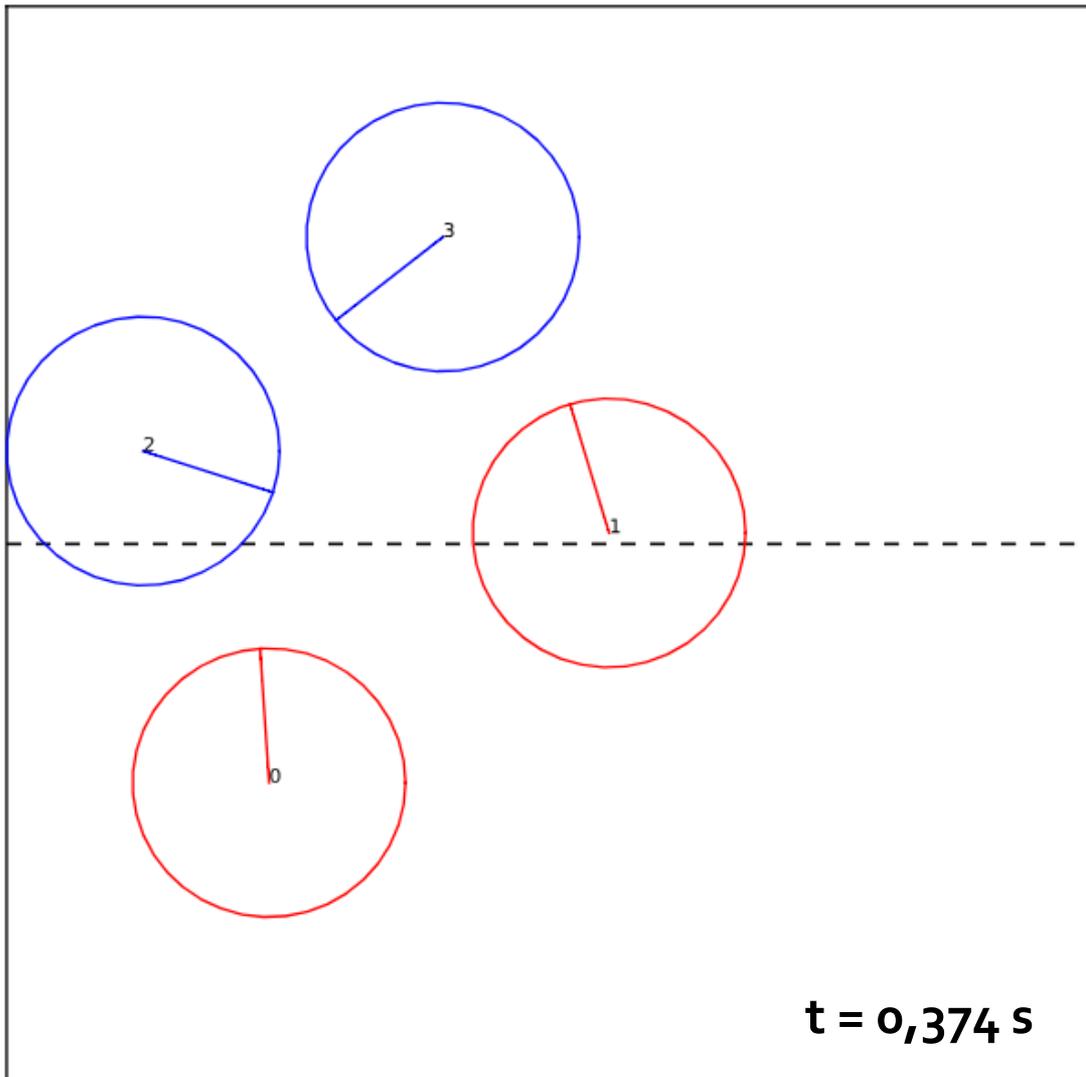
Initialisation



Boucle :

calcul du temps t_{min} de collision, déplacement des particules puis traitement du choc

3 avec le bord haut
0 avec le bord bas



Initialisation



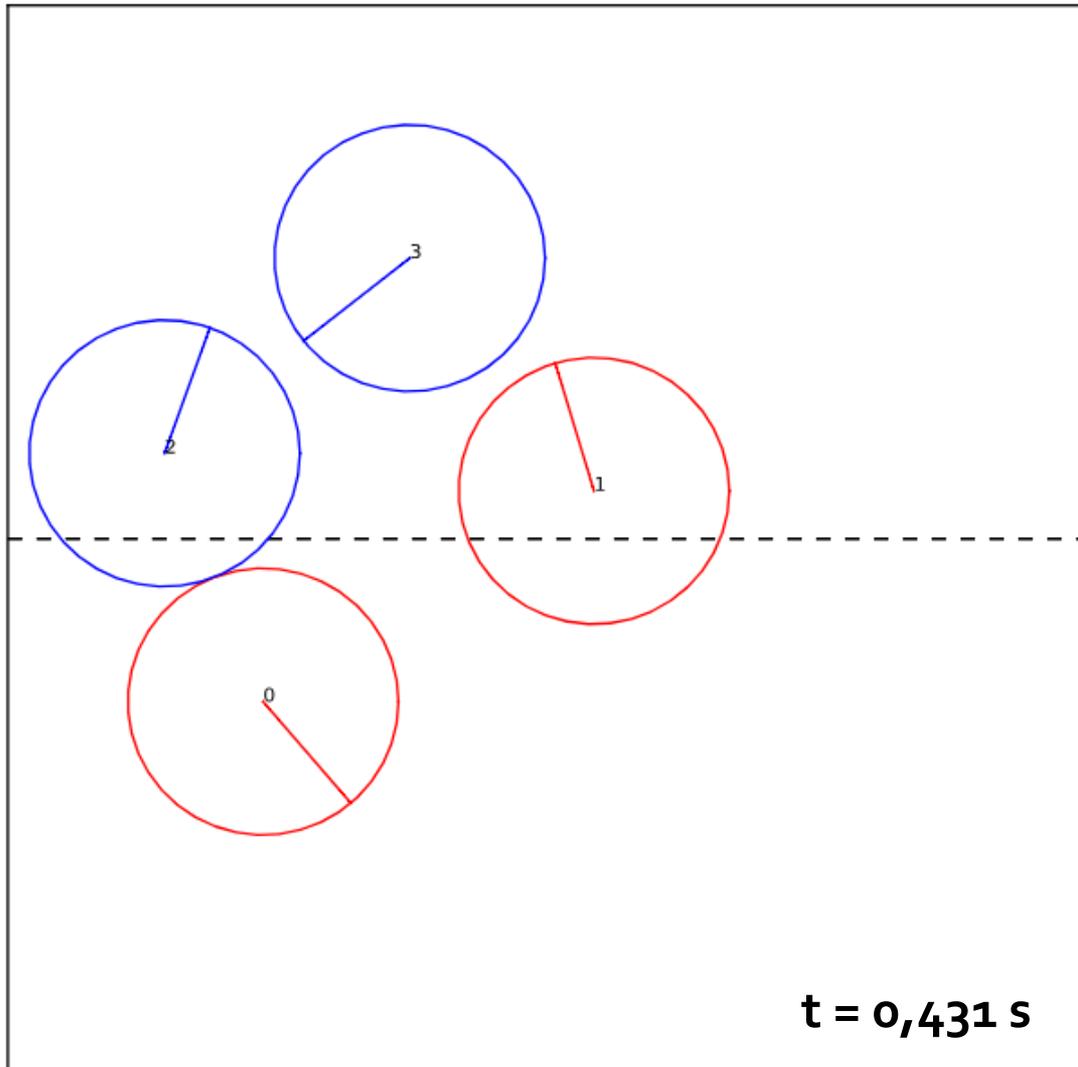
Boucle :

calcul du temps t_{min} de collision, déplacement des particules puis traitement du choc

3 avec le bord haut

0 avec le bord bas

2 avec le bord gauche



Initialisation



Boucle :

calcul du temps t_{min} de collision, déplacement des particules puis traitement du choc

3 avec le bord haut

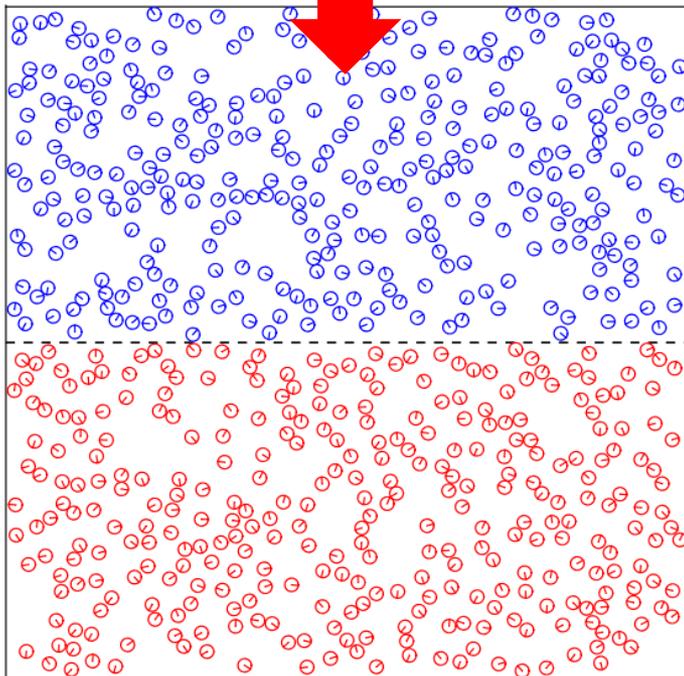
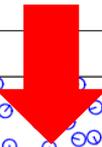
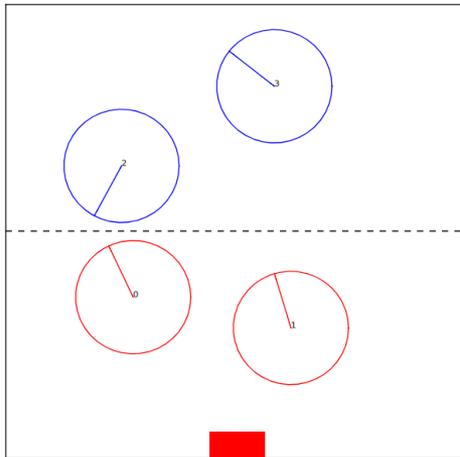
0 avec le bord bas

2 avec le bord gauche

Choc entre 2 et 0

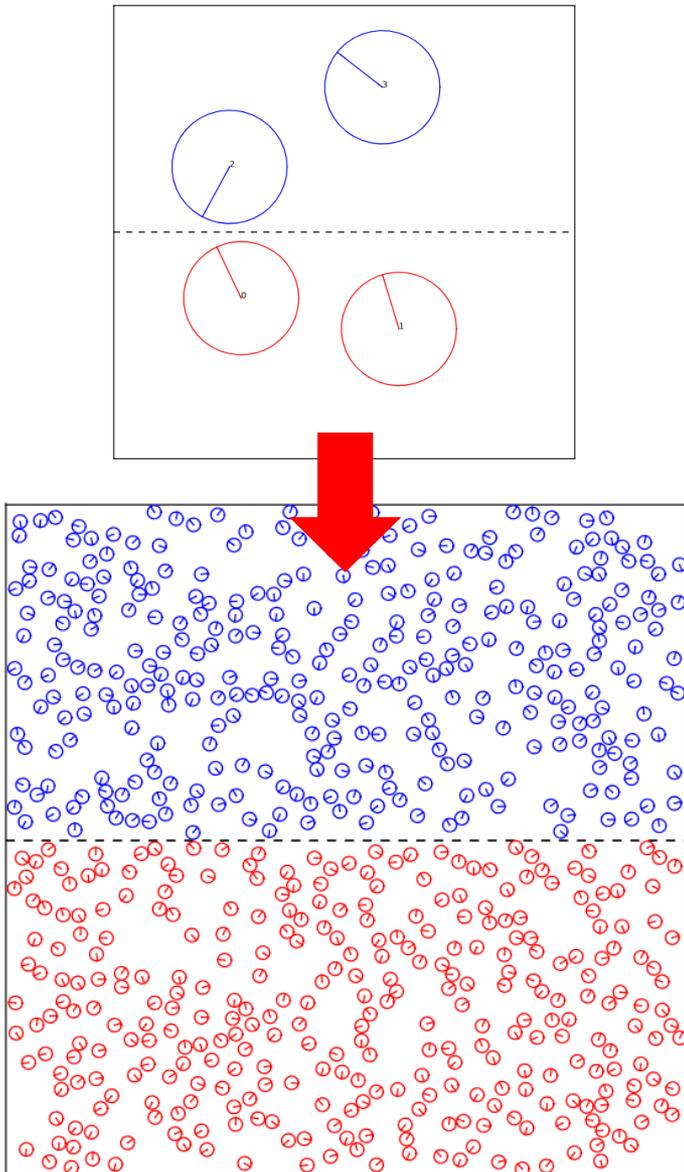
< Fin de la démo >

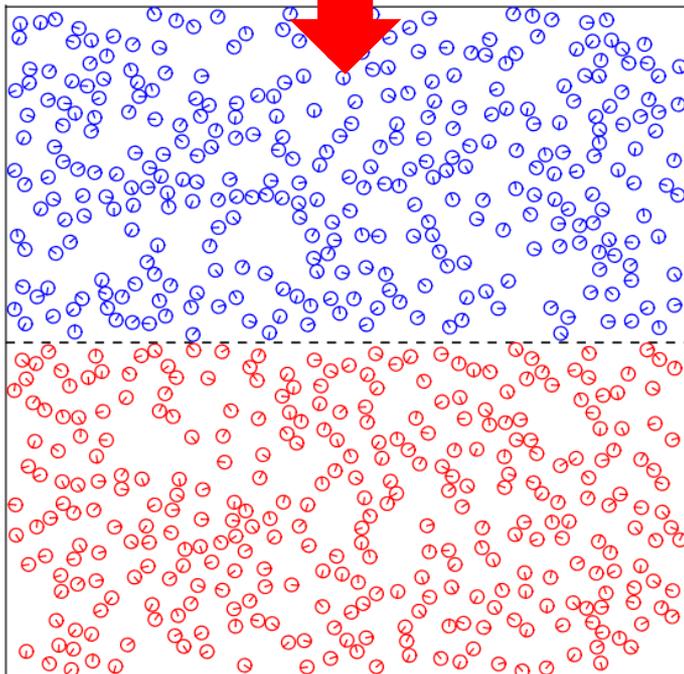
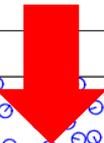
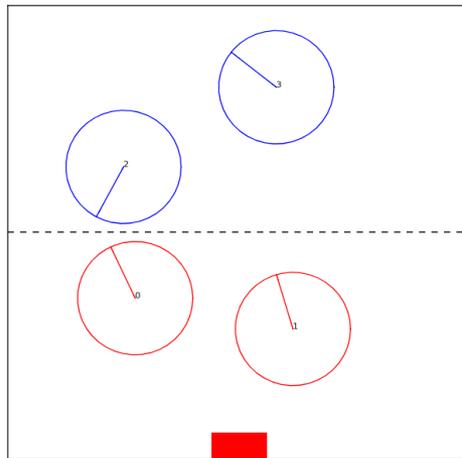
Version « naïve » :
 $O(n^2)$



Version « naïve » :
 $O(n^2)$

Première optimisation :
**Mettre à jour une liste
de chocs triée**

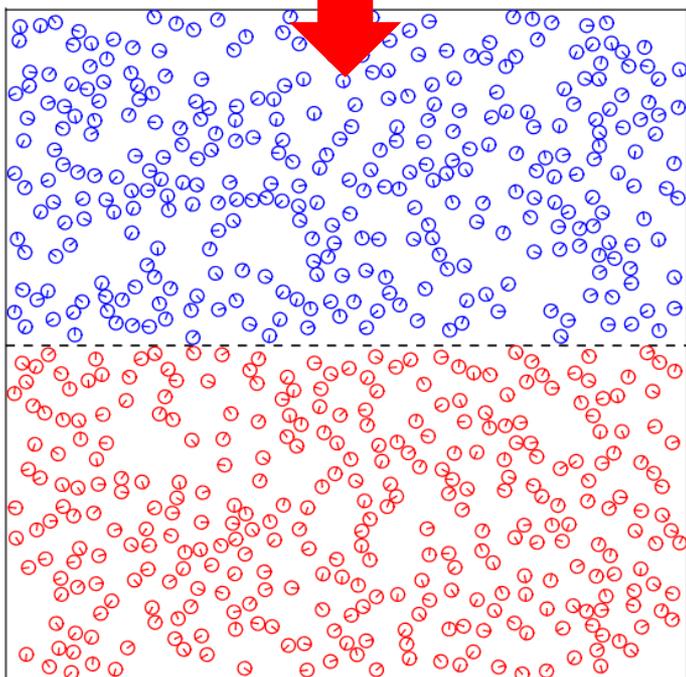
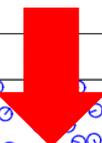
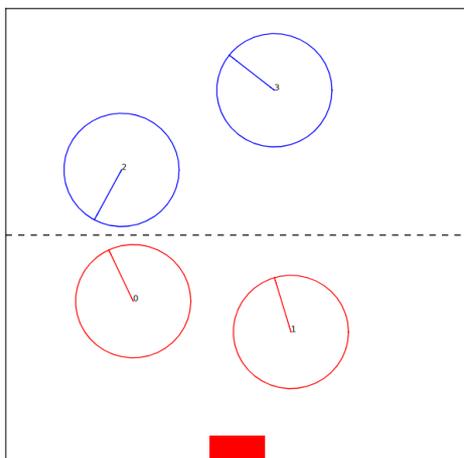




Version « naïve » :
 $O(n^2)$

Première optimisation :
**Mettre à jour une liste
 de chocs triée**

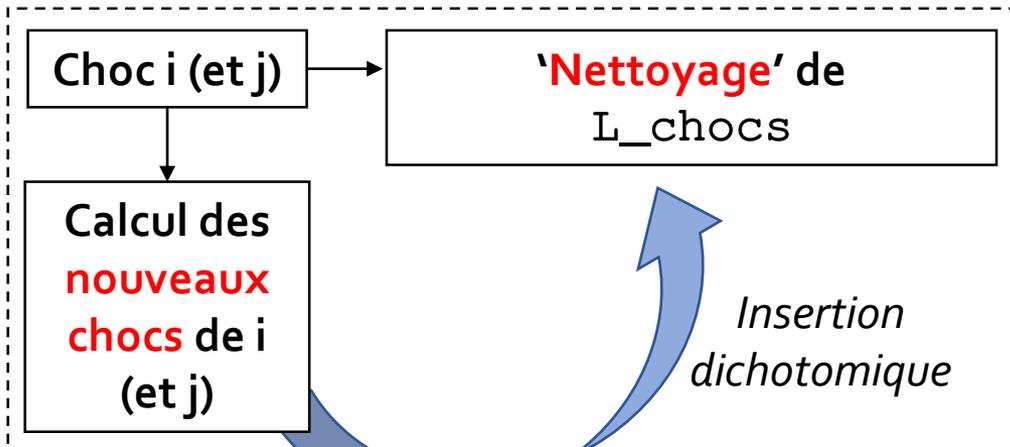
$L_chocs = [[tps, i, j]]$
 avec $j \in \begin{cases} \llbracket -4, -1 \rrbracket, & \text{si bord} \\ \llbracket 0, N \rrbracket, & \text{sinon} \end{cases}$



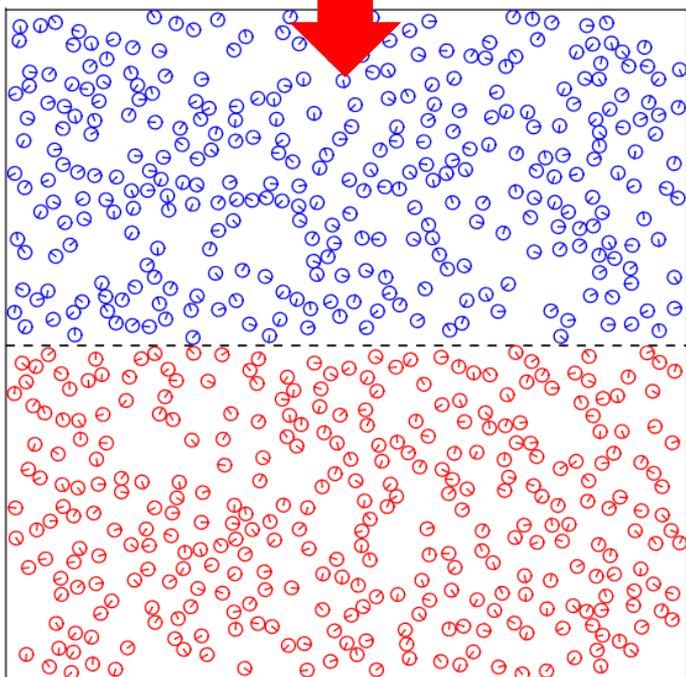
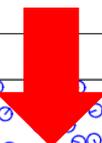
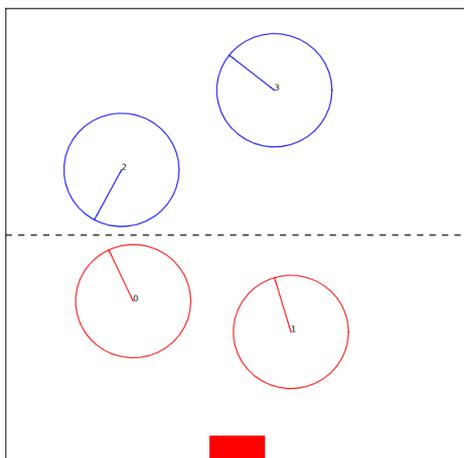
Version « naïve » :
 $O(n^2)$

Première optimisation :
**Mettre à jour une liste
 de chocs triée**

$L_chocs = [[tps, i, j]]$
 avec $j \in \begin{cases} [-4, -1], & \text{si bord} \\ [0, N], & \text{sinon} \end{cases}$



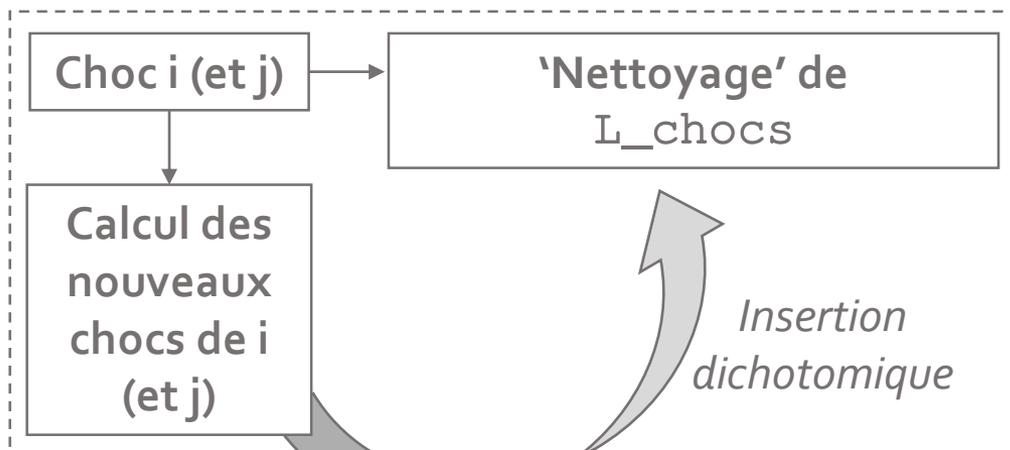
D'après IPT Centrale 2018

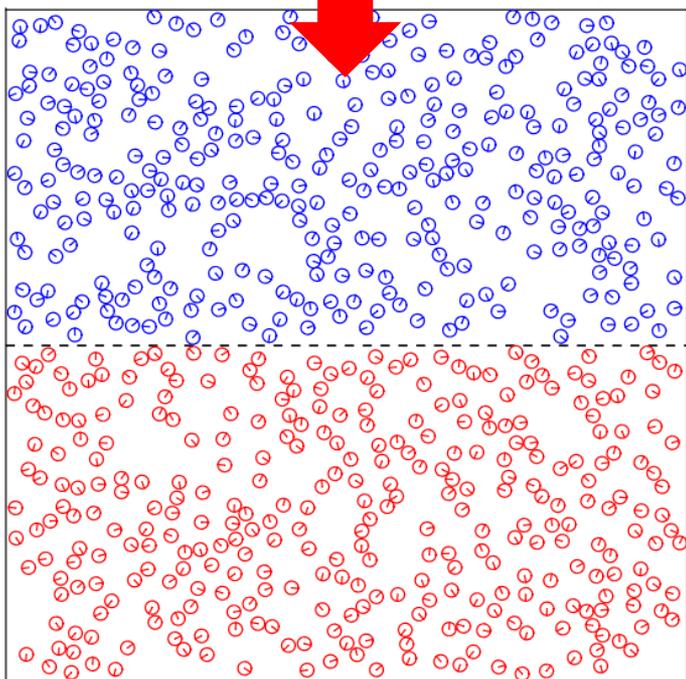
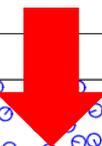
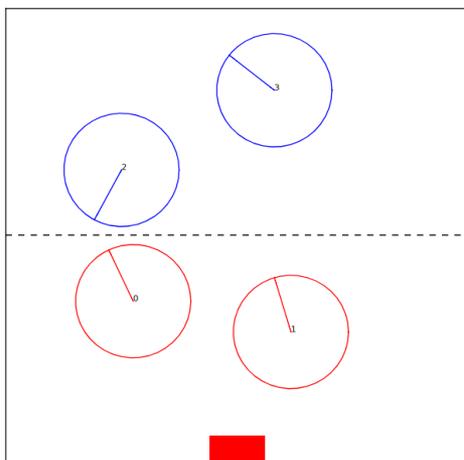


Version « naïve » :
 $O(n^2)$

Première optimisation :
**Mettre à jour une liste
de chocs triée**

Complexité :

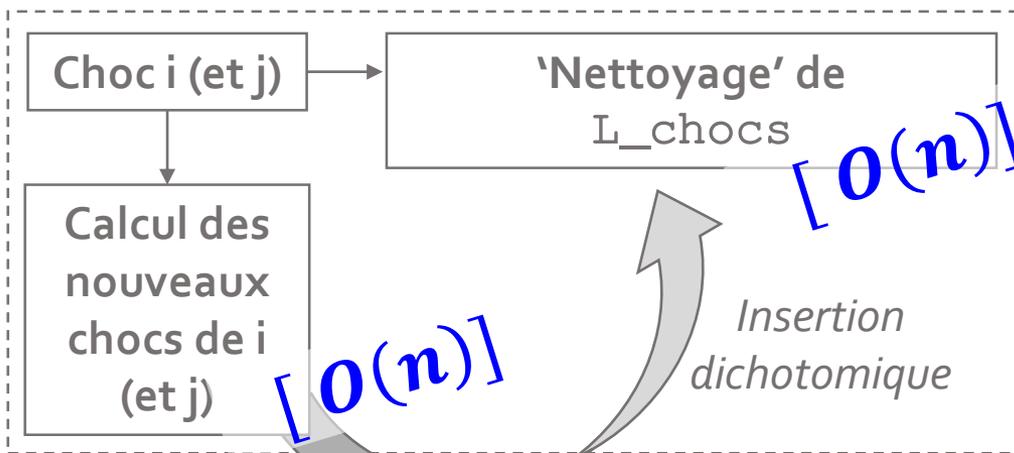


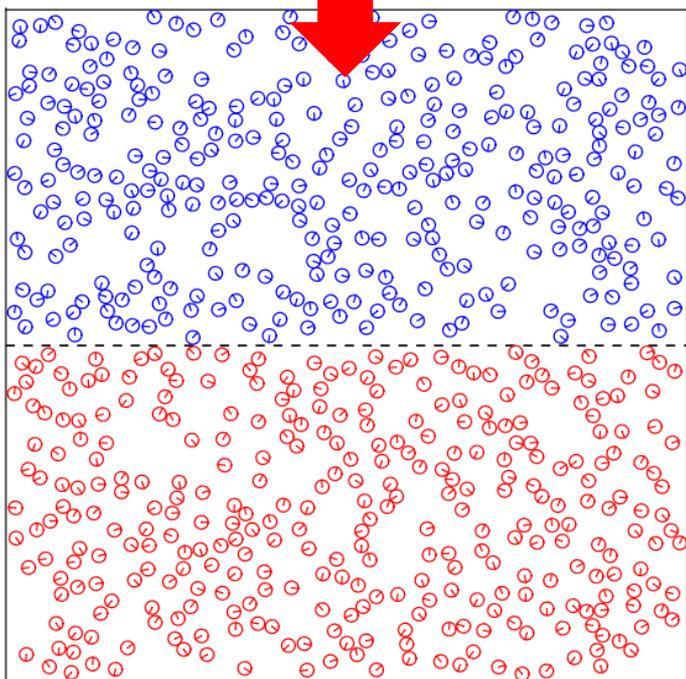
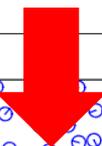
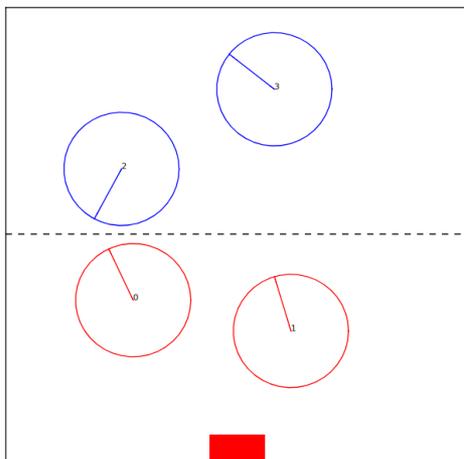


Version « naïve » :
 $O(n^2)$

Première optimisation :
**Mettre à jour une liste
de chocs triée**

Complexité :

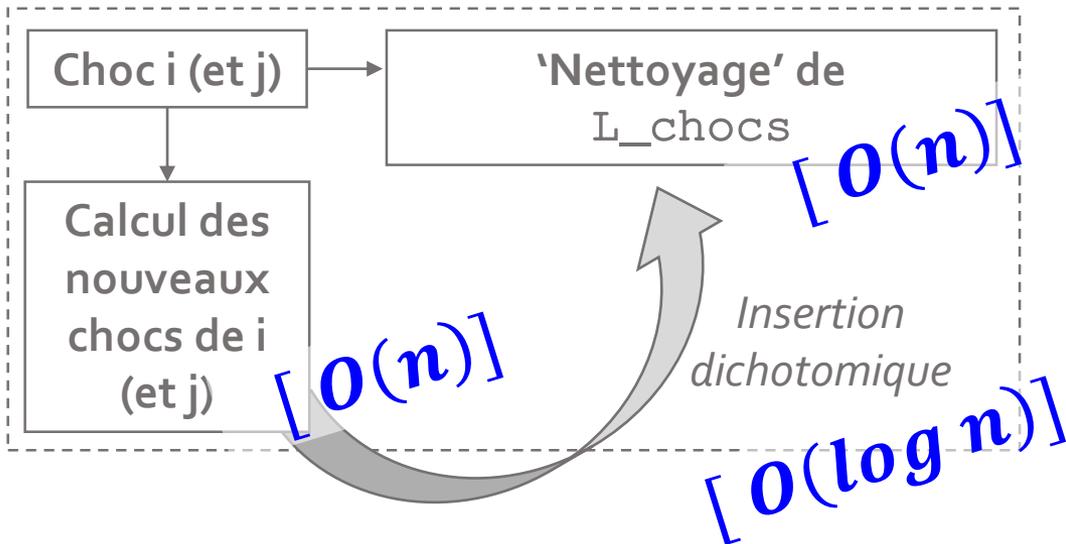


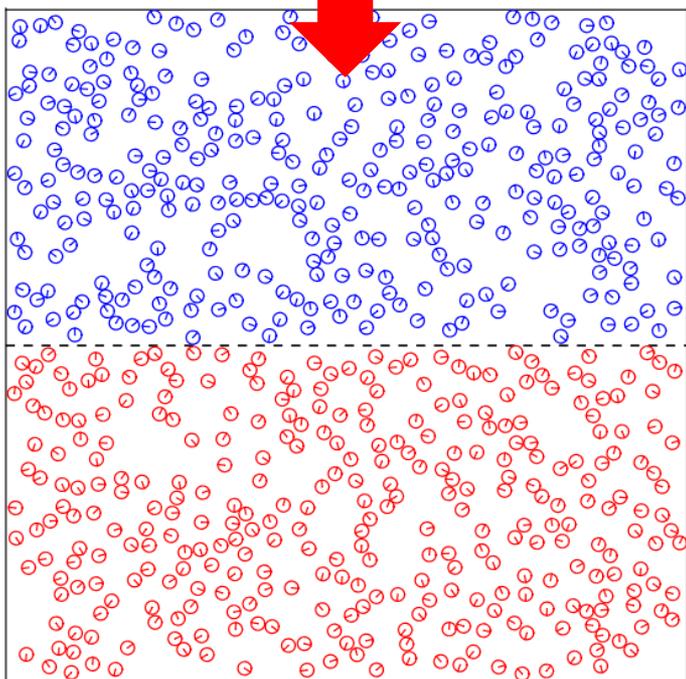
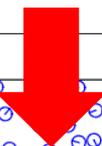
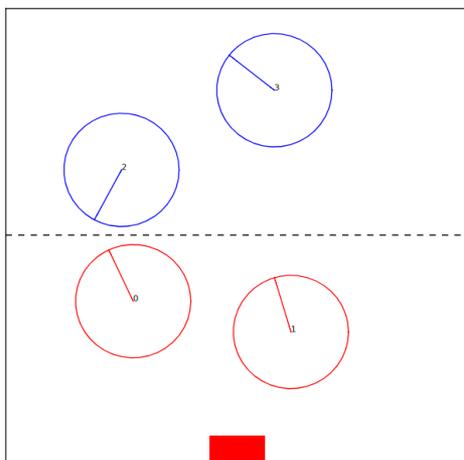


Version « naïve » :
 $O(n^2)$

Première optimisation :
**Mettre à jour une liste
de chocs triée**

Complexité :



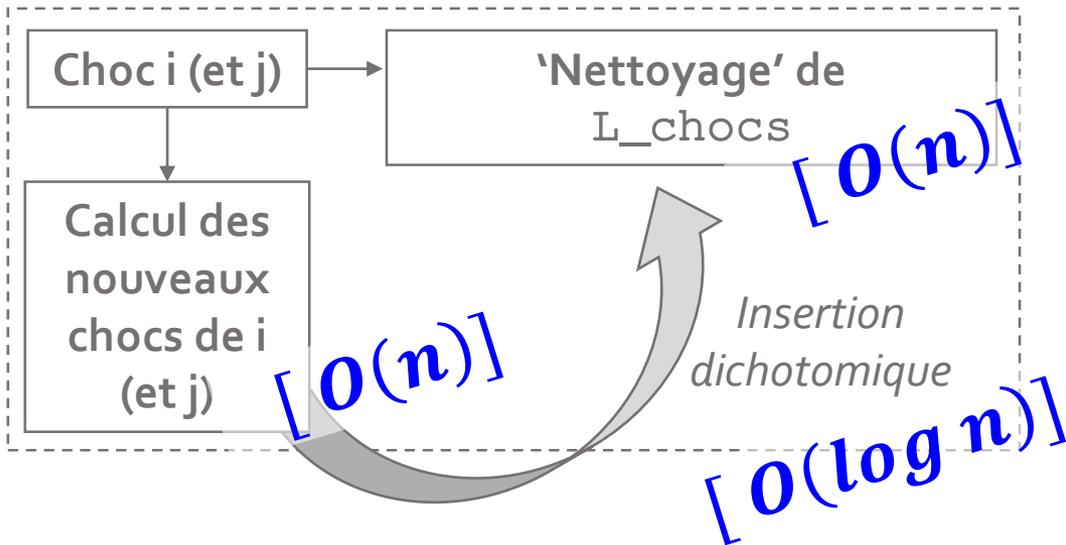


Version « naïve » :
 $O(n^2)$

Première optimisation :
**Mettre à jour une liste
de chocs triée**

⇒ Màj en $O(n \cdot \log n)$

MAIS : initialisation en $O(n^2)$



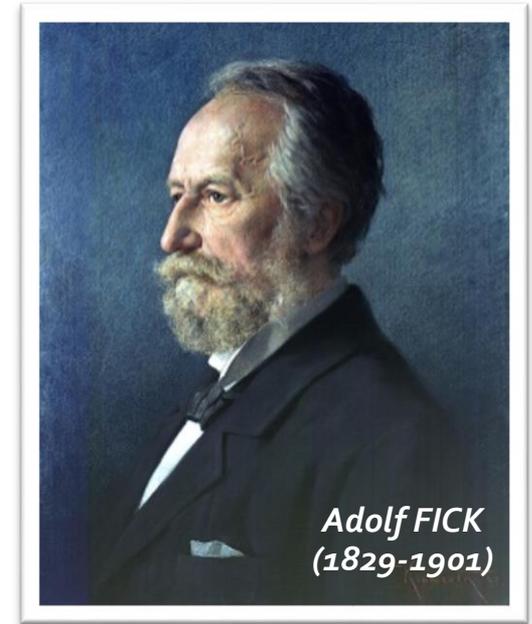
Point théorique :

Point théorique :

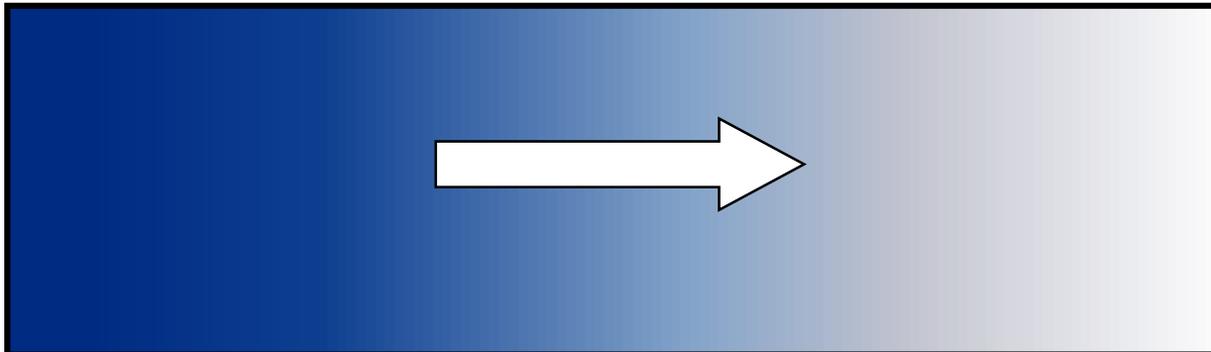
Première loi de **Fick** (1855) :

$$\vec{j} = -D \overrightarrow{\text{grad}}(n)$$

Flux Coefficient de diffusion Densité particulaire



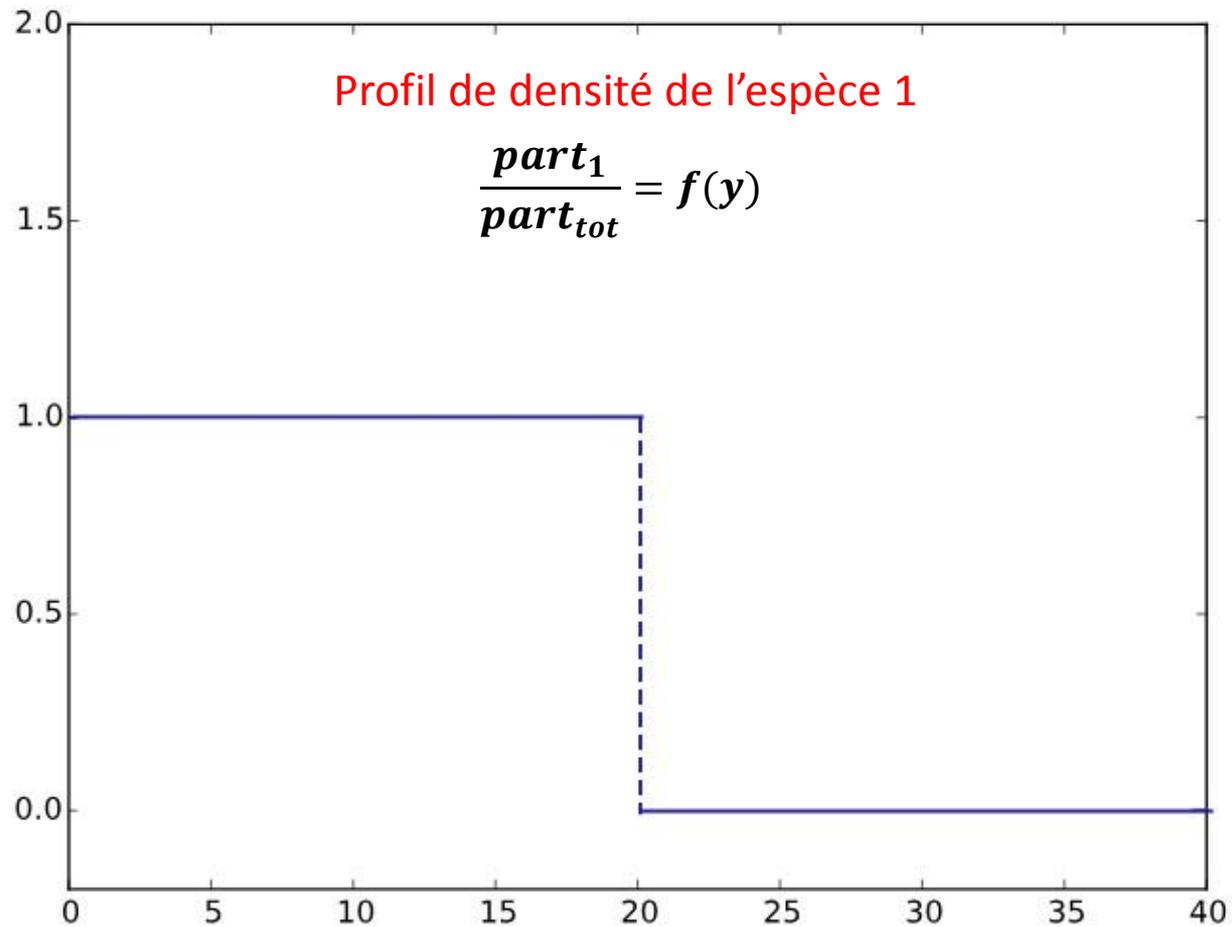
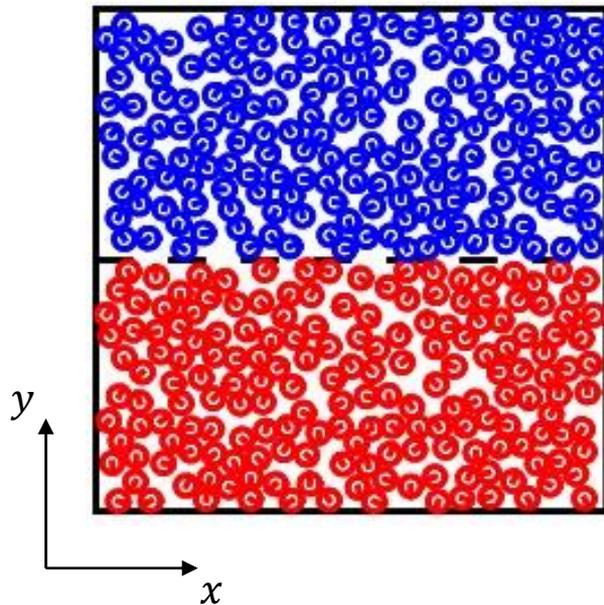
Forte densité



Faible densité

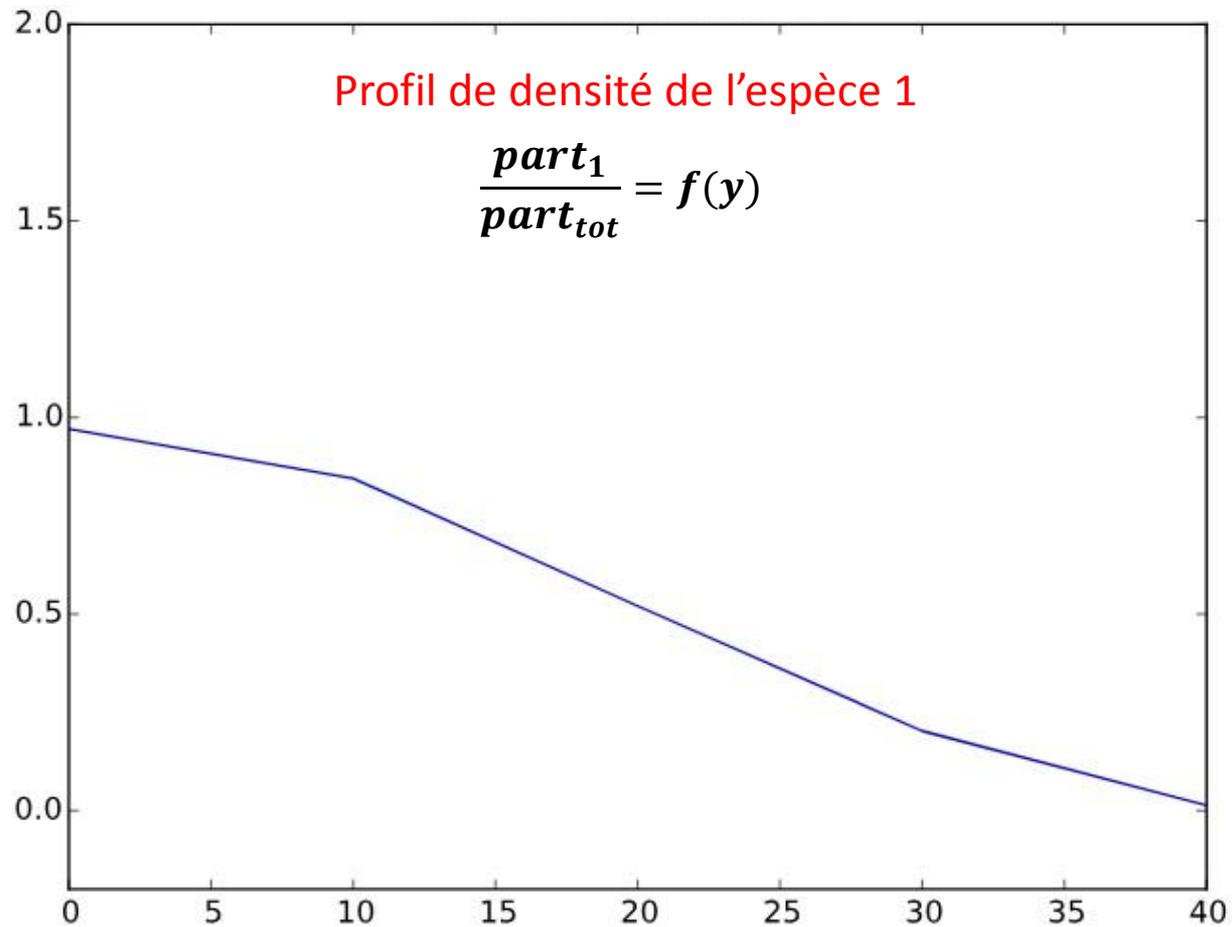
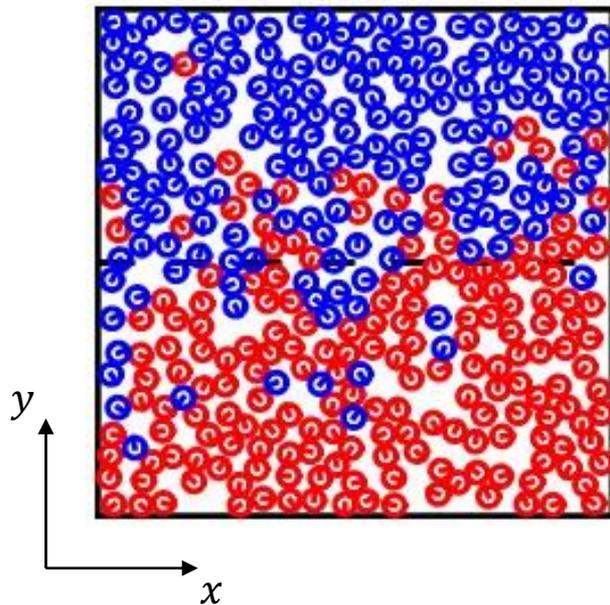
Paramétrage : 40x40, interface au milieu ; densité 50/50 ; même espèce ; subdivision de 4

$t = 0 \text{ s}$



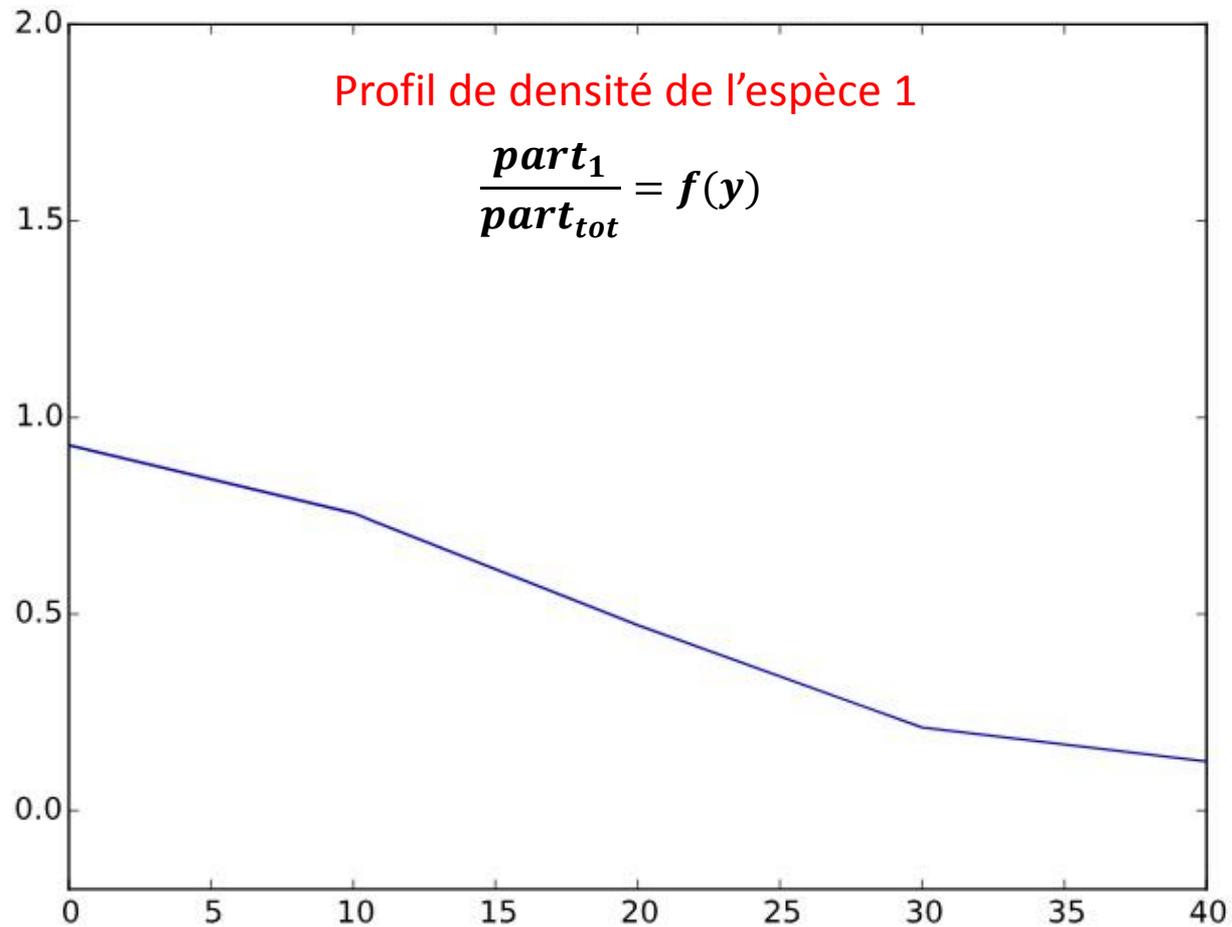
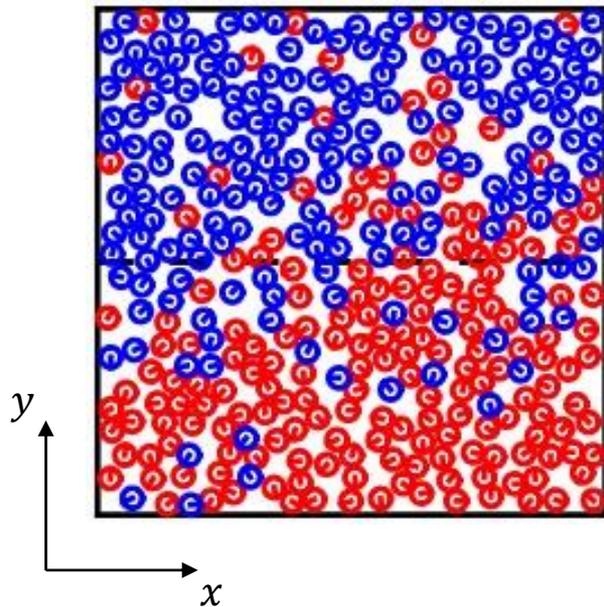
Paramétrage : 40x40, interface au milieu ; densité 50/50 ; même espèce ; subdivision de 4

$t = 25 \text{ s}$



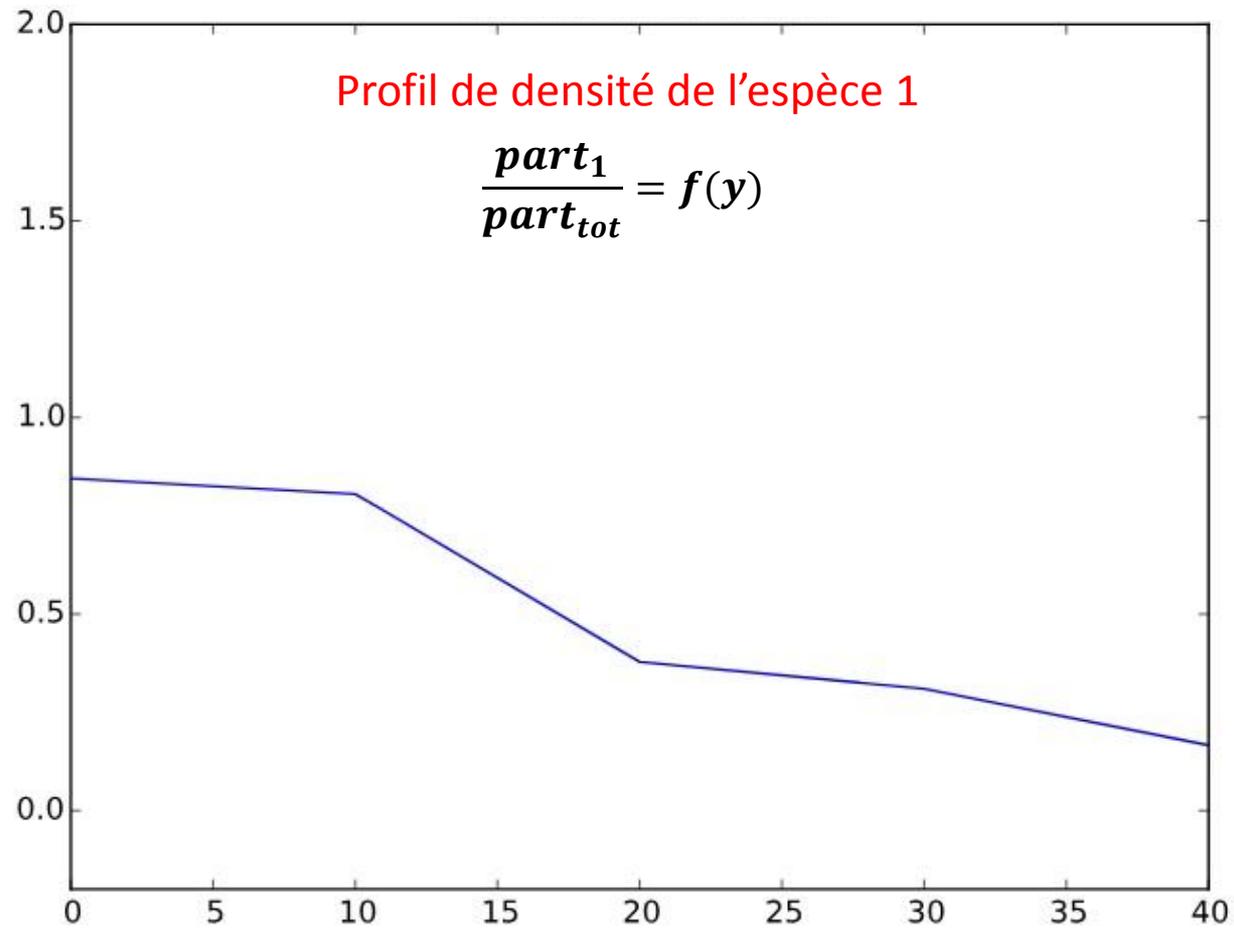
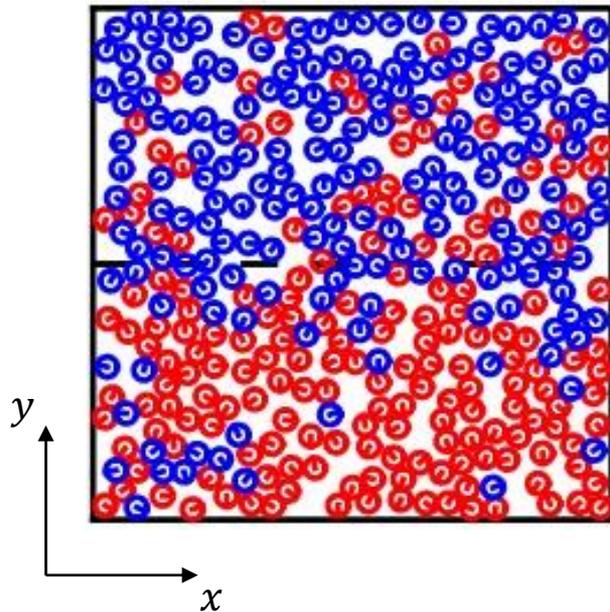
Paramétrage : 40x40, interface au milieu ; densité 50/50 ; même espèce ; subdivision de 4

$t = 50 \text{ s}$



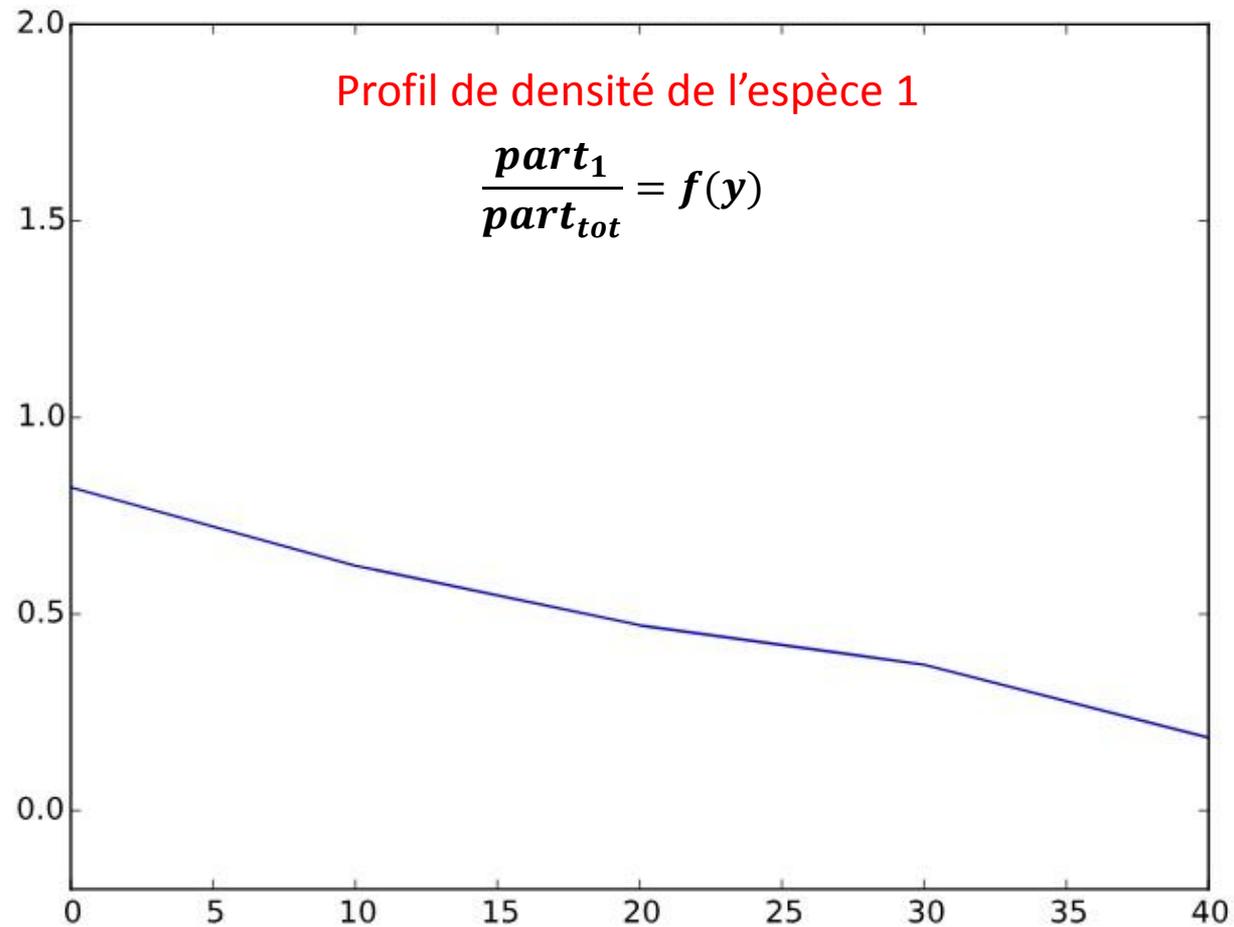
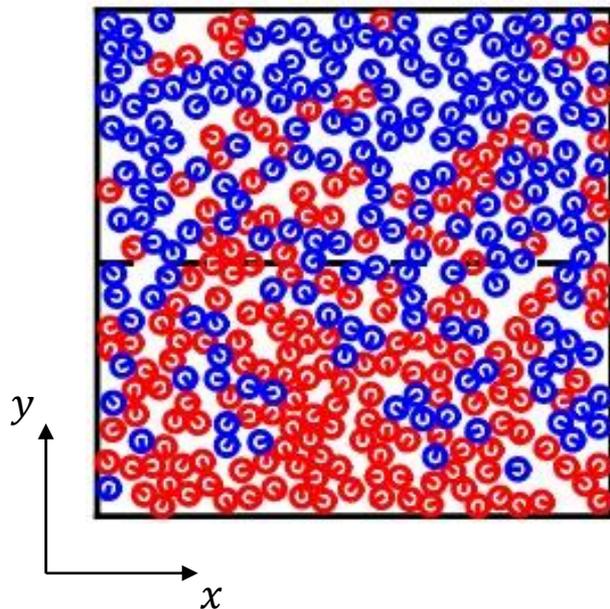
Paramétrage : 40x40, interface au milieu ; densité 50/50 ; même espèce ; subdivision de 4

$t = 75 \text{ s}$



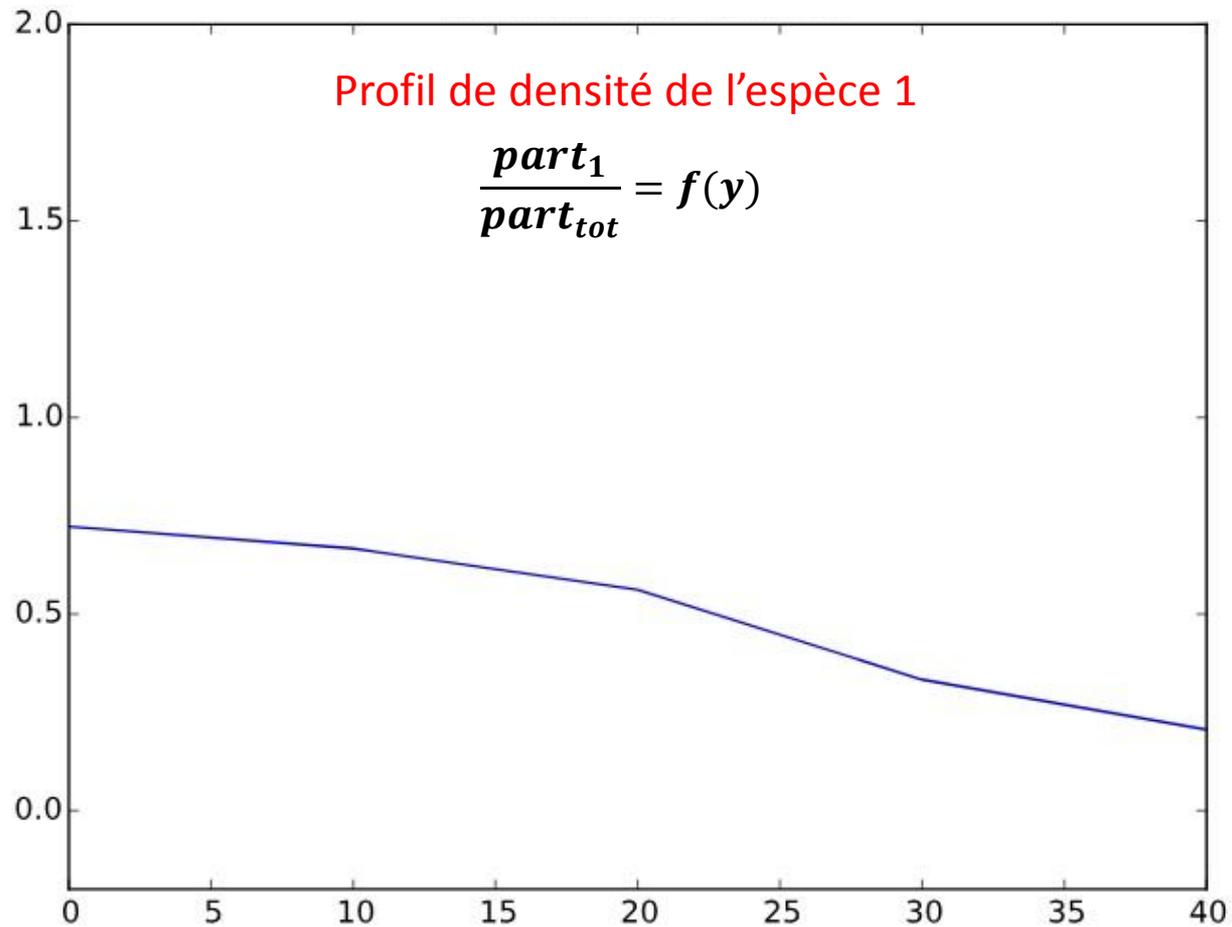
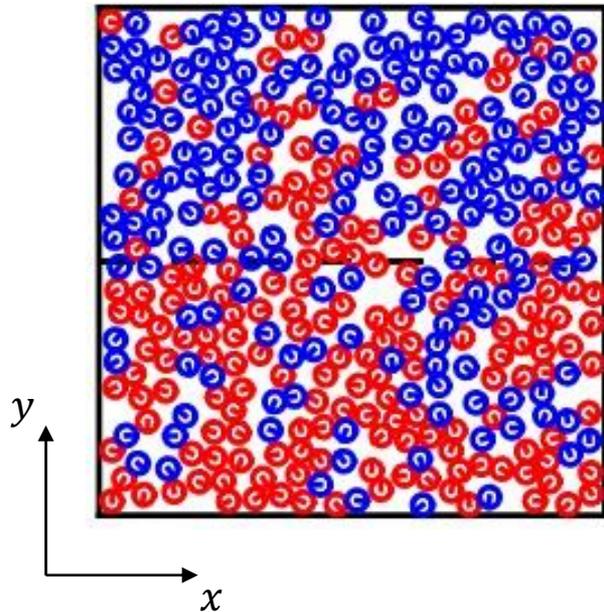
Paramétrage : 40x40, interface au milieu ; densité 50/50 ; même espèce ; subdivision de 4

t = 100 s



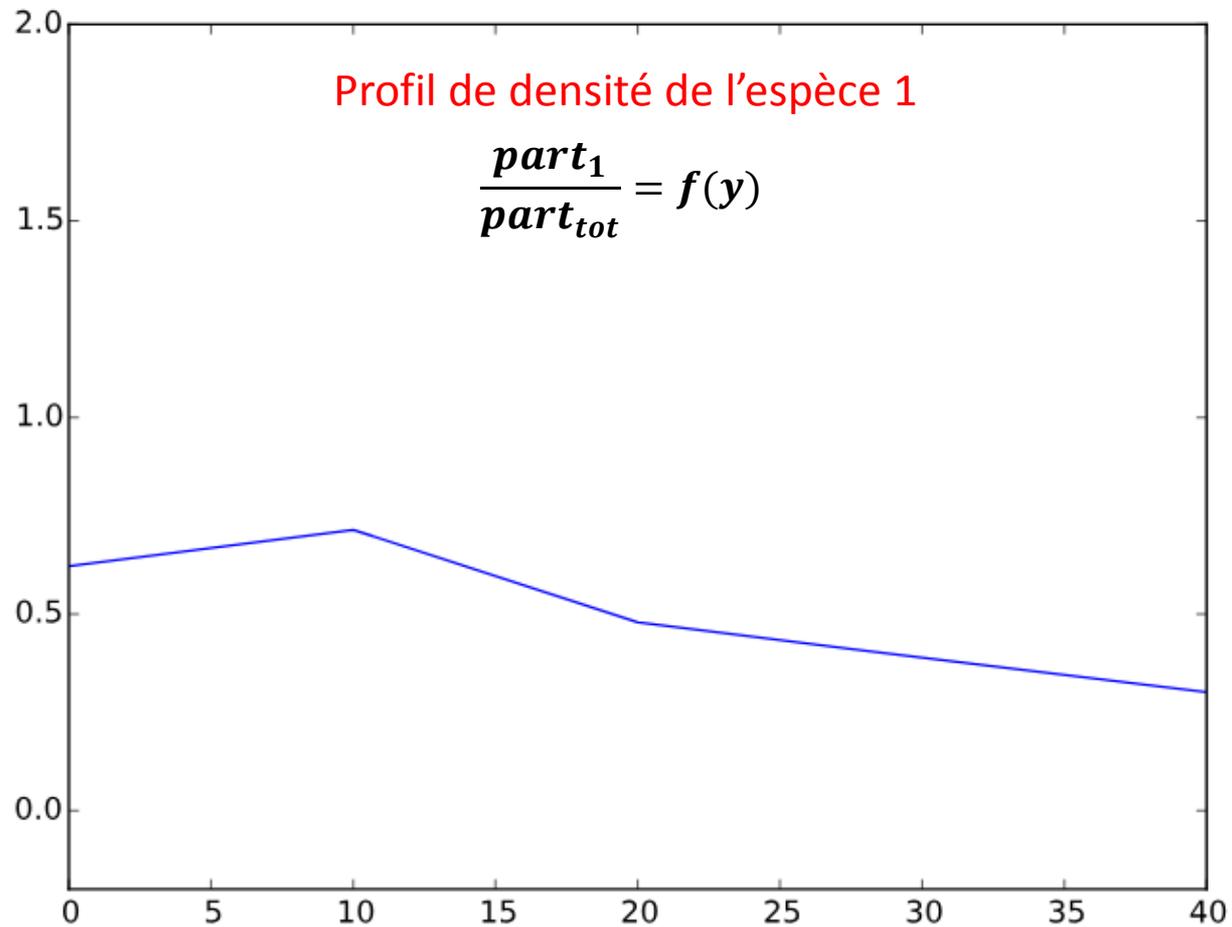
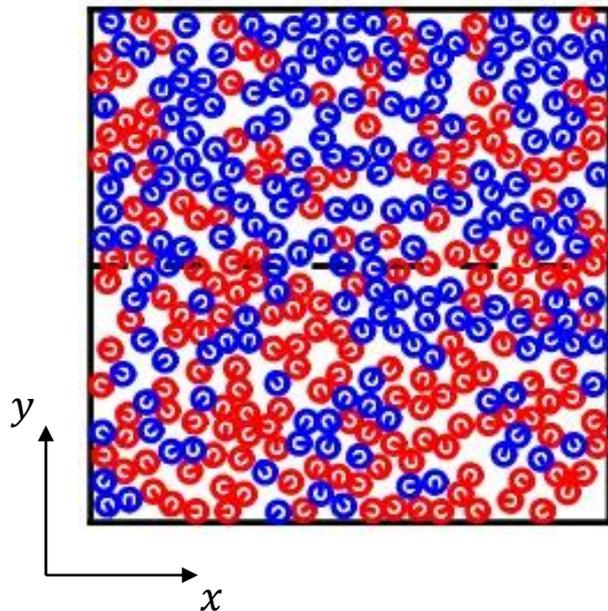
Paramétrage : 40x40, interface au milieu ; densité 50/50 ; même espèce ; subdivision de 4

t = 125 s

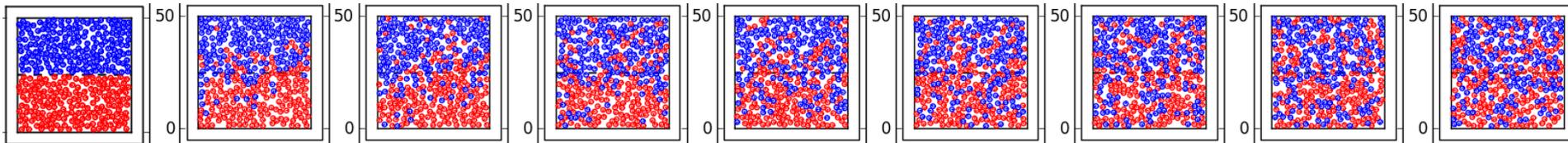
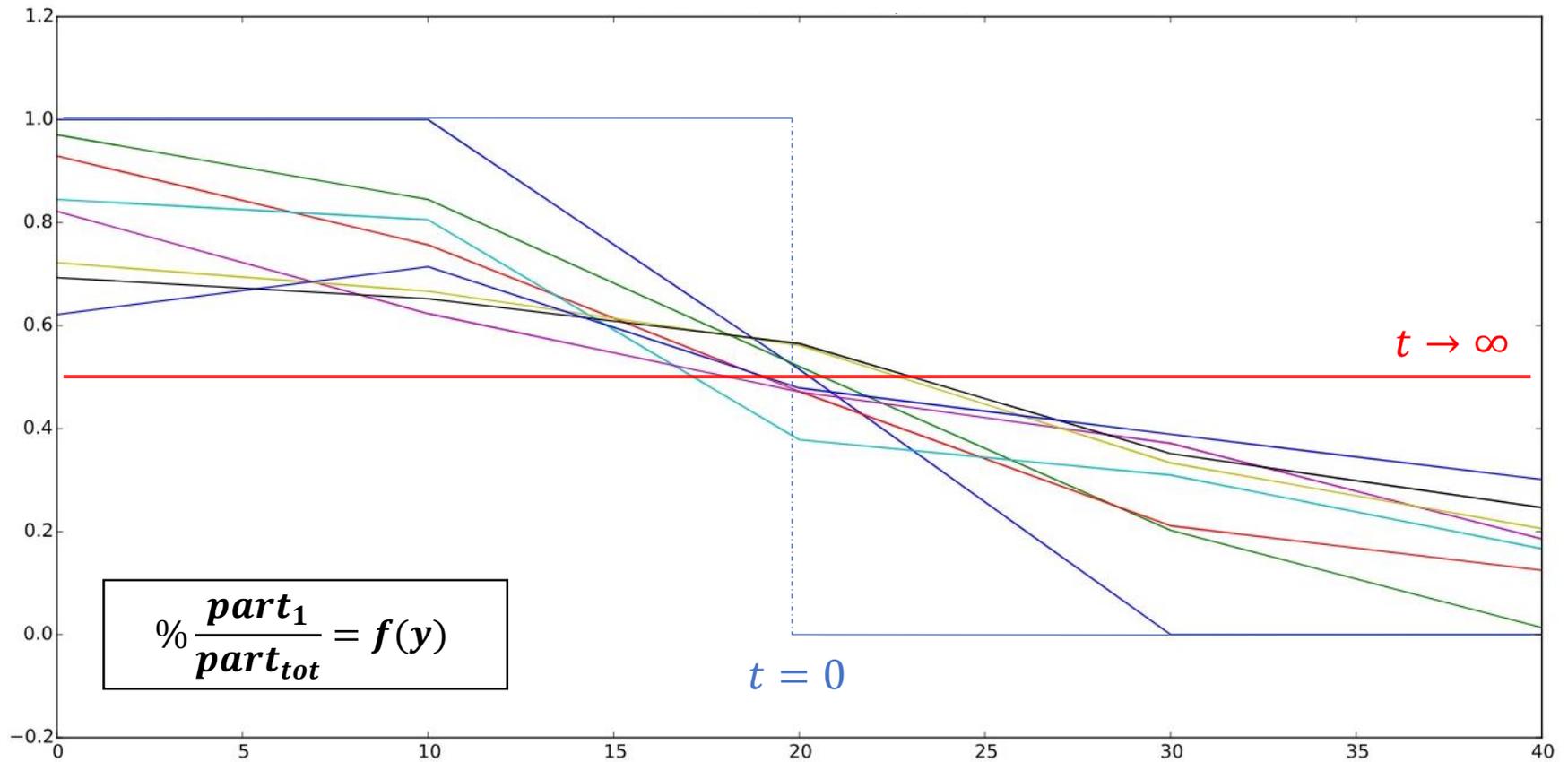


Paramétrage : 40x40, interface au milieu ; densité 50/50 ; même espèce ; subdivision de 4

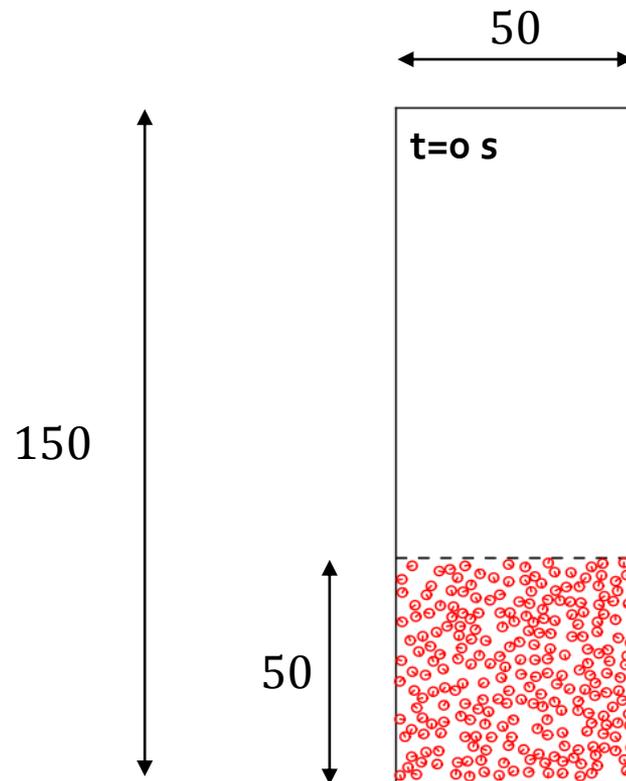
t = 200 s.



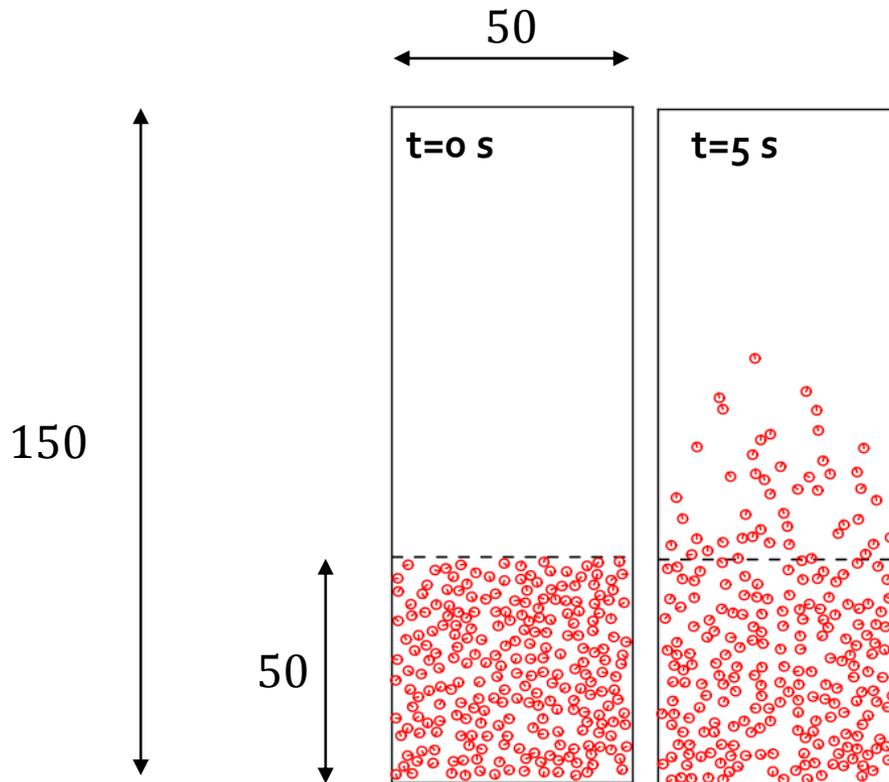
Profil de densité de l'espèce 1



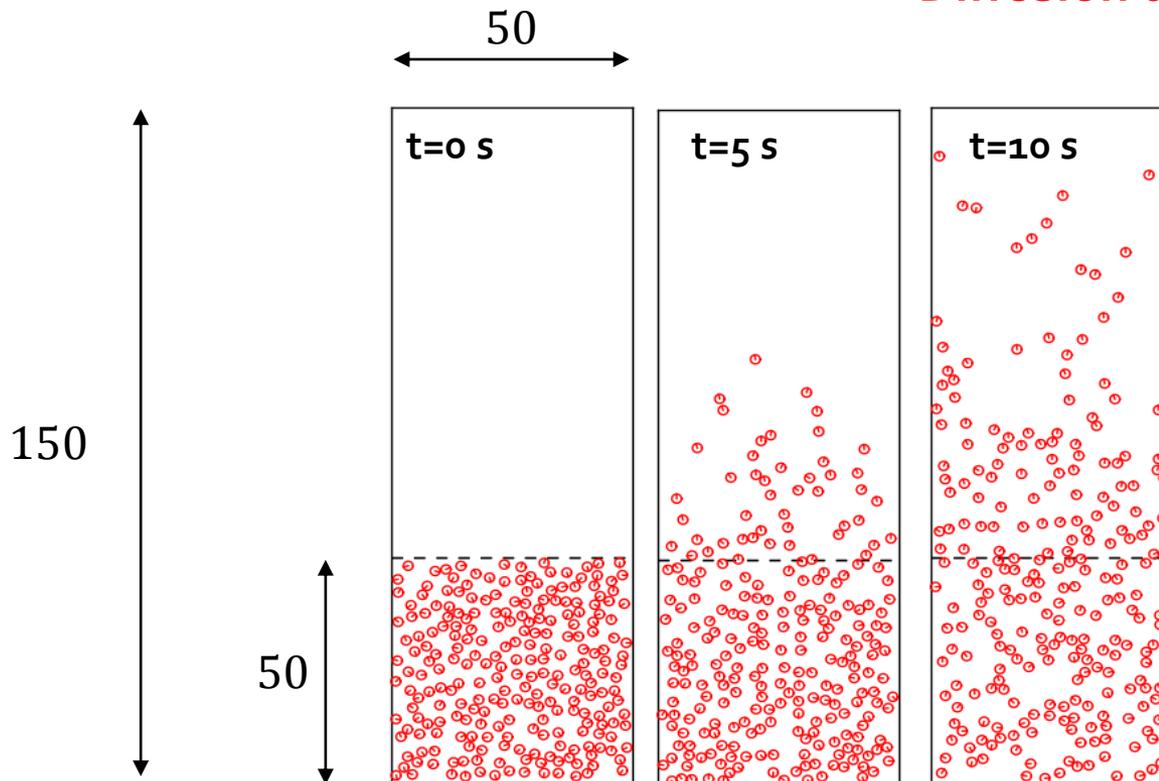
Diffusion dans le vide

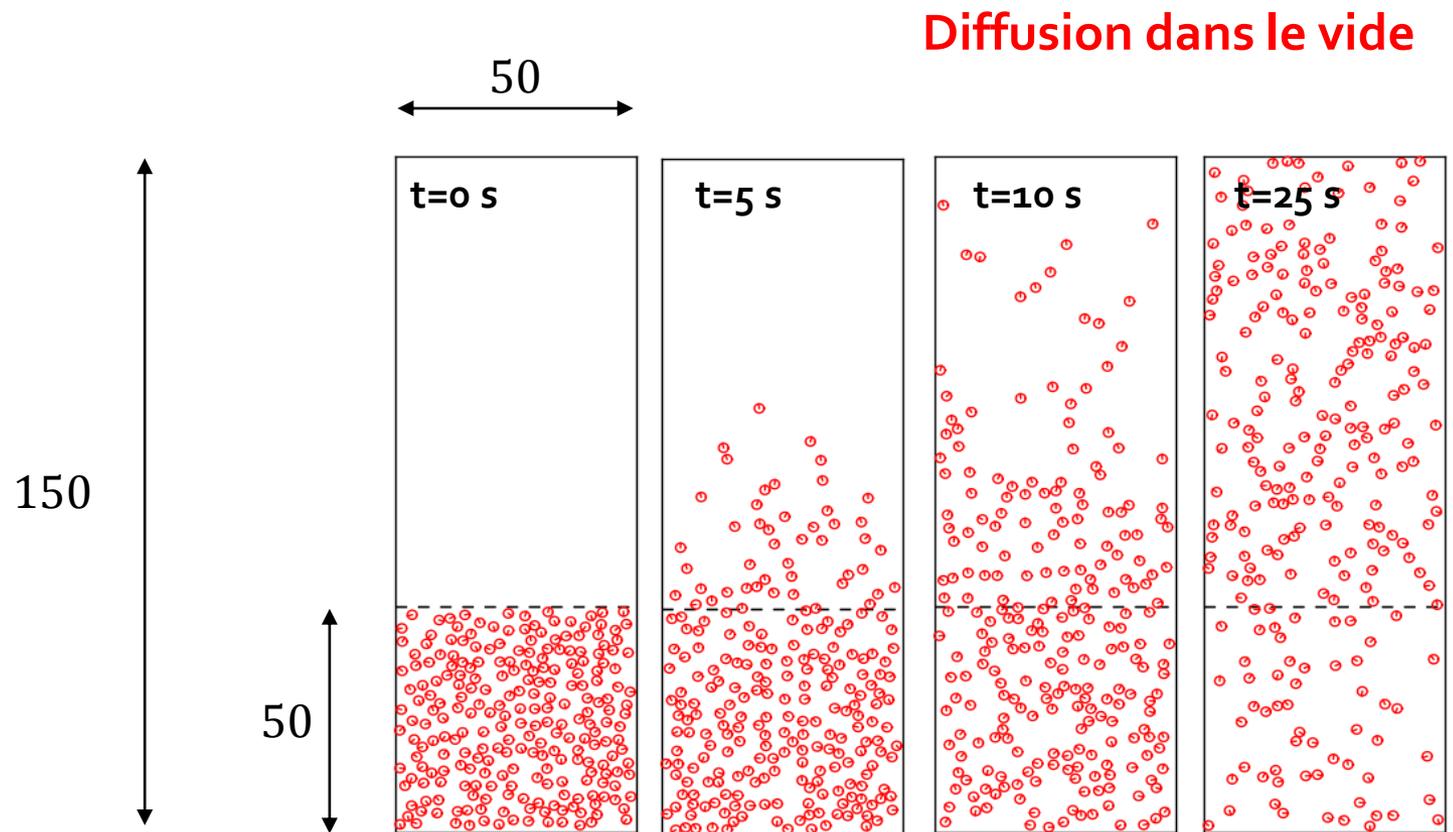


Diffusion dans le vide



Diffusion dans le vide

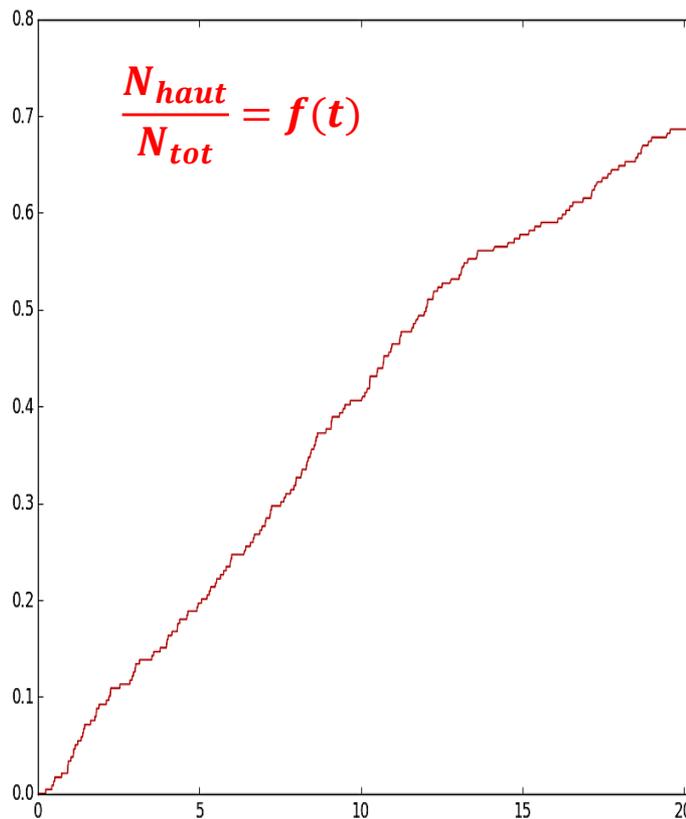




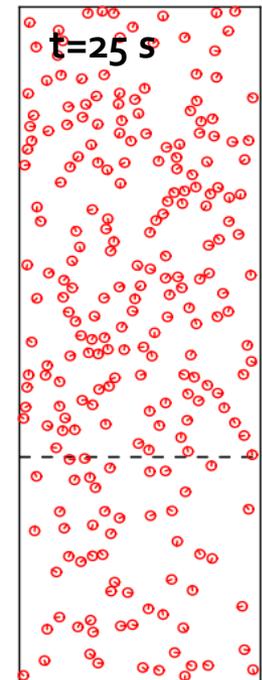
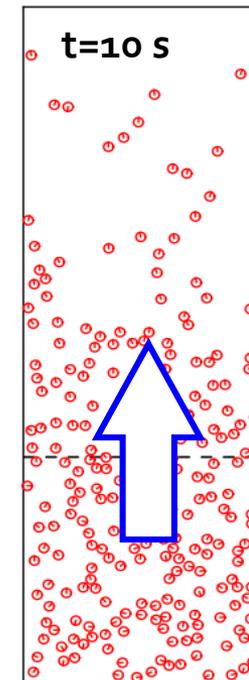
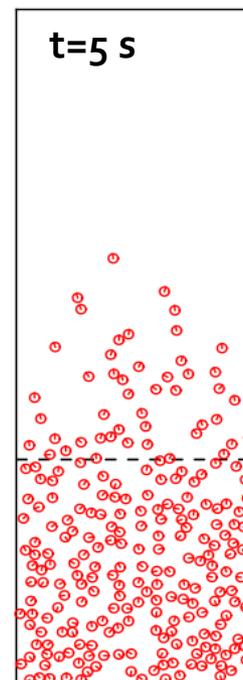
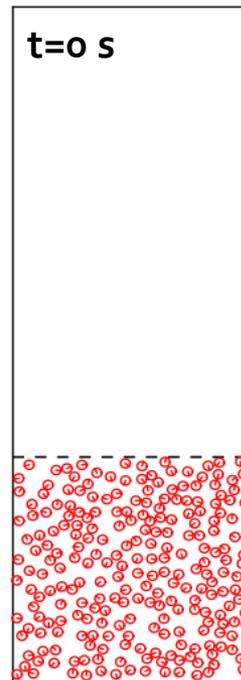
Macro :
Migration collective
Homogénéisation

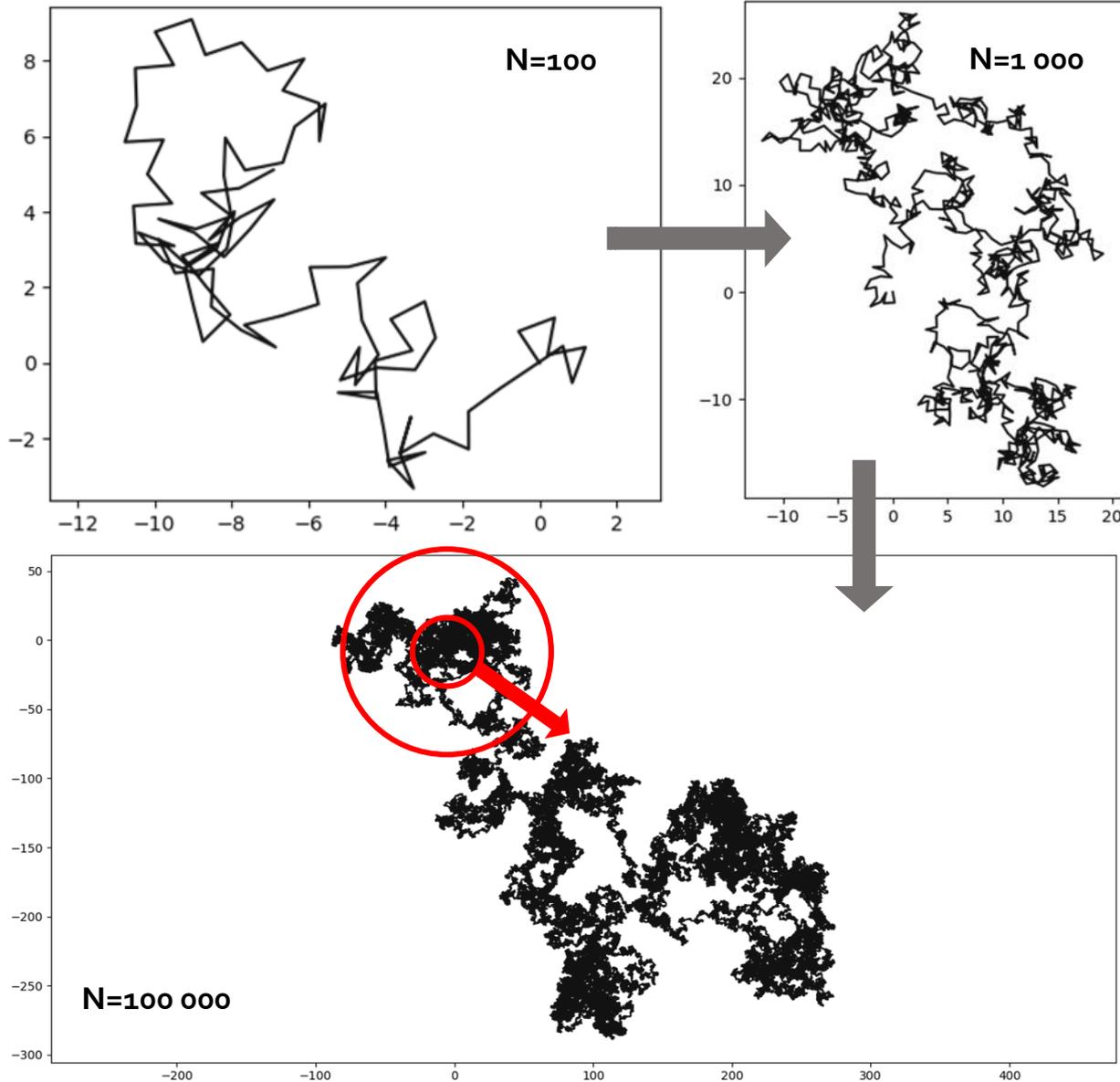
VS

Micro :
Collisions
Mouvement brownien



Diffusion dans le vide





Mouvement brownien

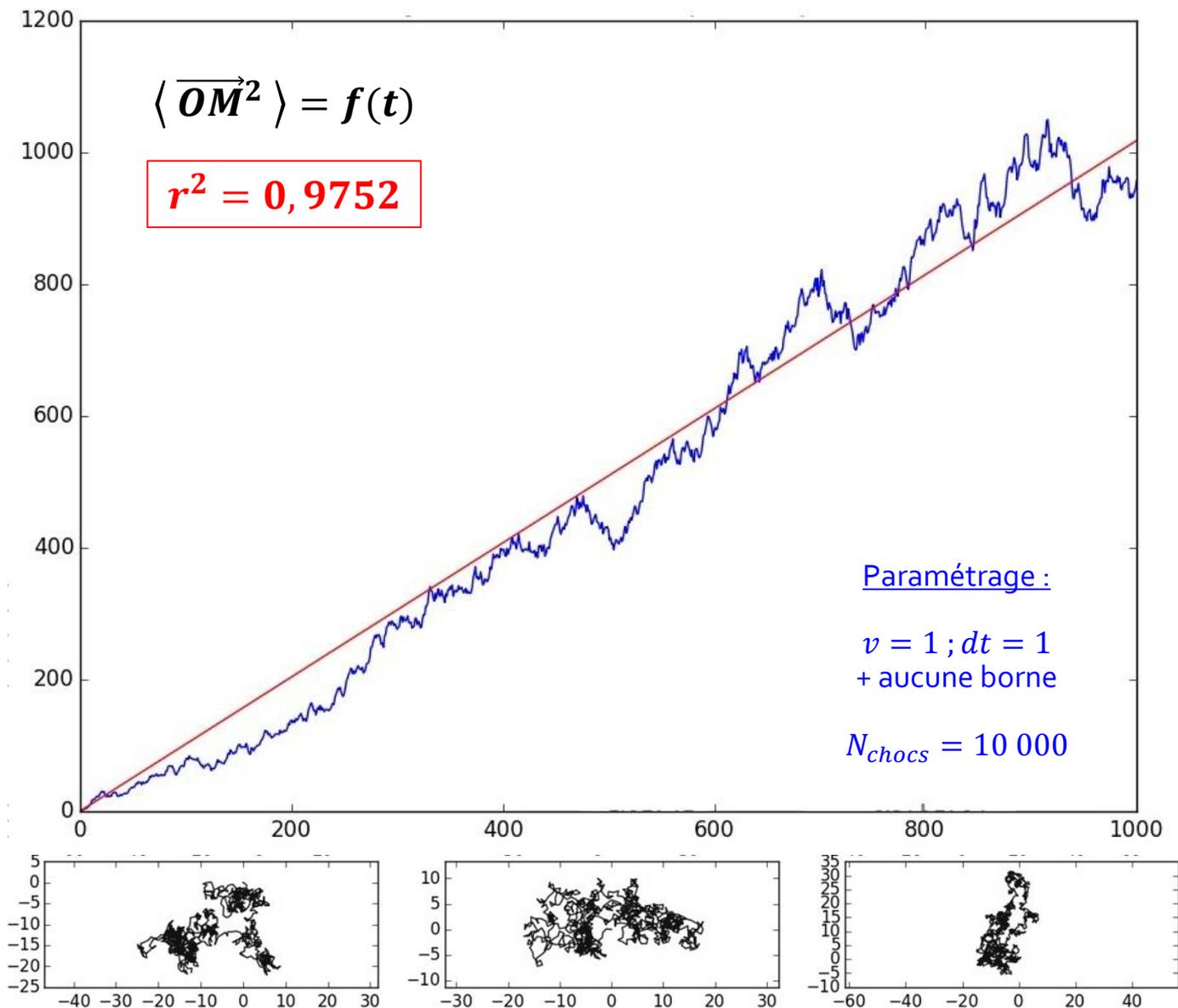
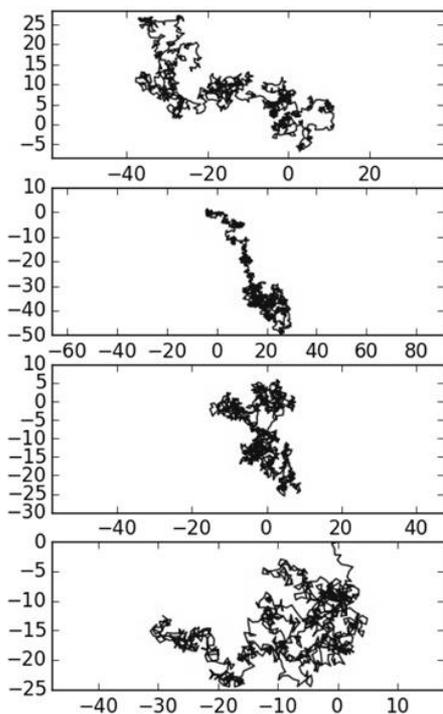
$$\langle \overline{OM^2} \rangle = 2dDt$$

1D → 1 ; 2D → 2 ; 3D → 3

Marche aléatoire implémentée

Marche aléatoire

Echantillon :
16 simulations
 indépendantes

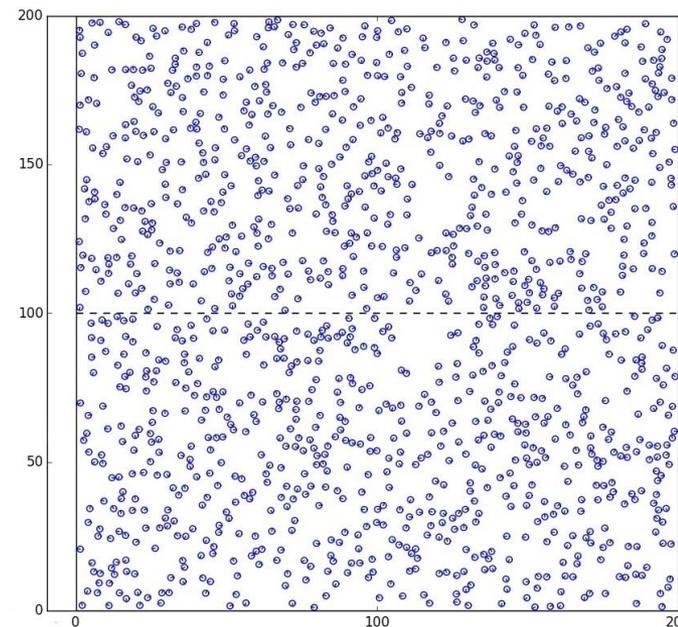
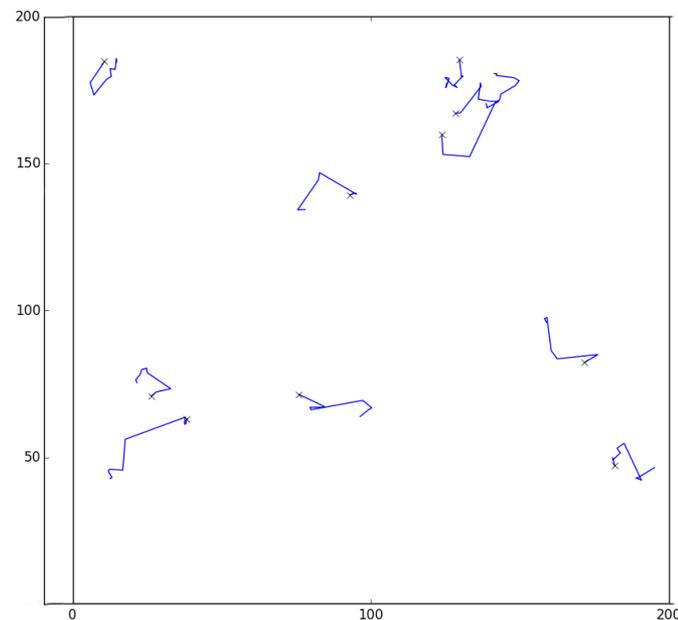
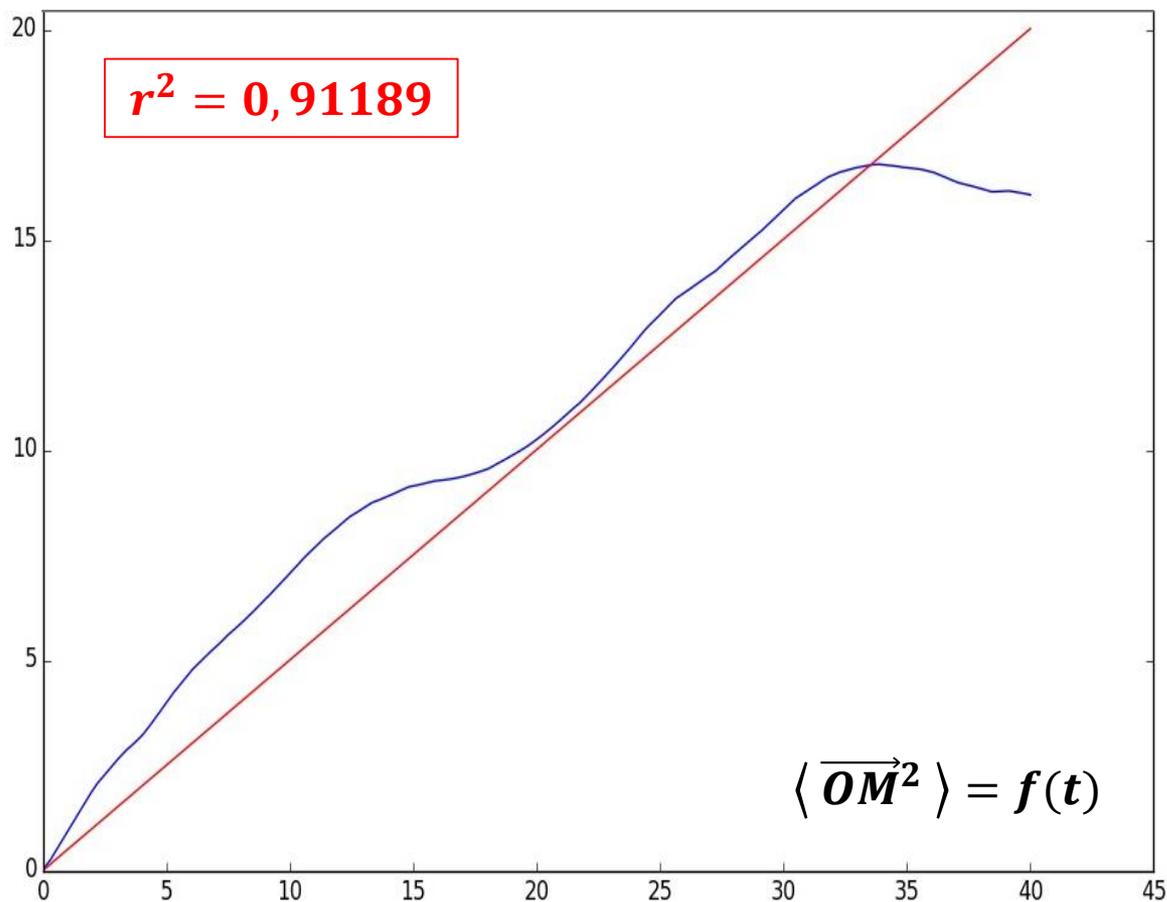


Simulation DM:

1 274 particules

Paramétrage :

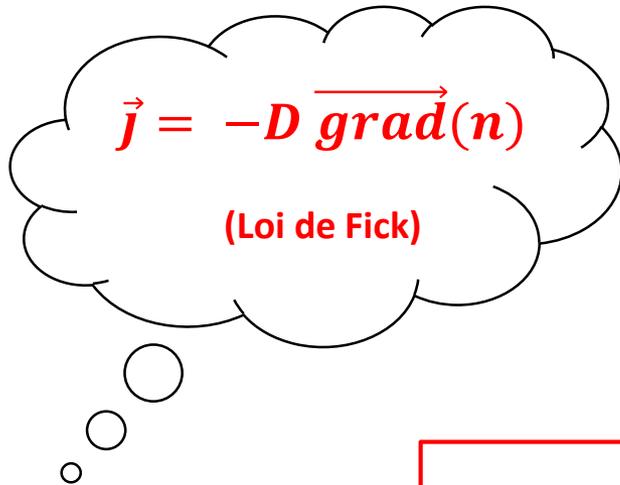
$r = 1 ; v = 1 ;$
 domaine 200x200





Mouvement brownien :

$$\langle \overline{OM^2} \rangle = 2dDt$$



Mouvement brownien :

$$\langle \overrightarrow{OM}^2 \rangle = 2dDt$$

Calculer le coefficient D de diffusion
via la dynamique moléculaire

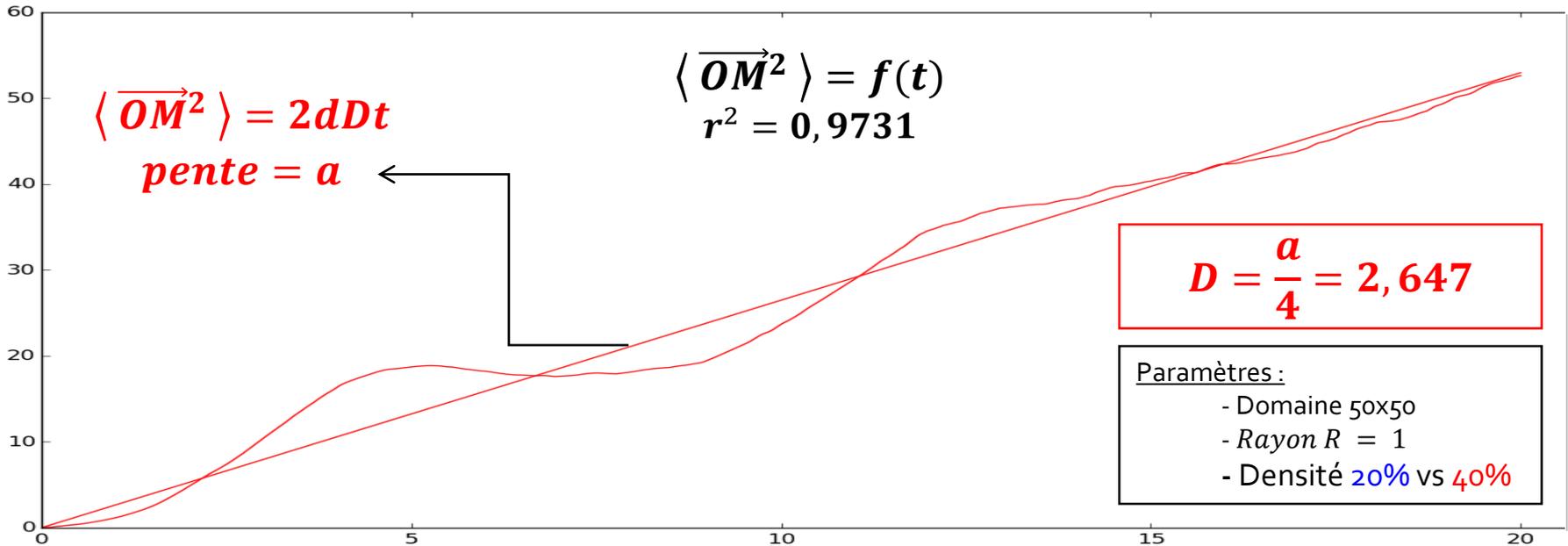
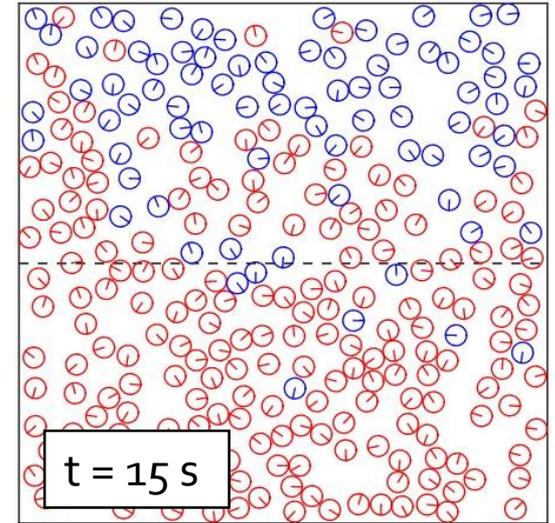
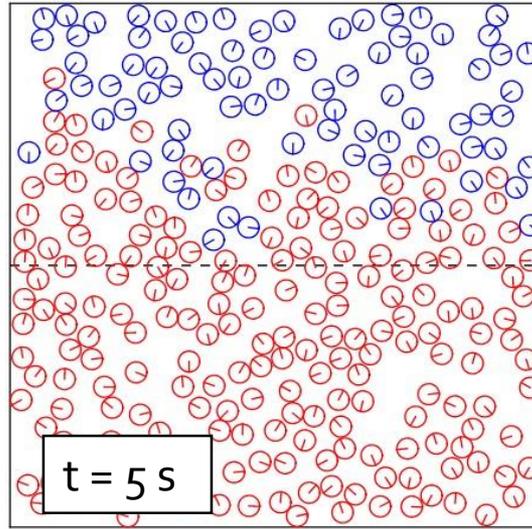
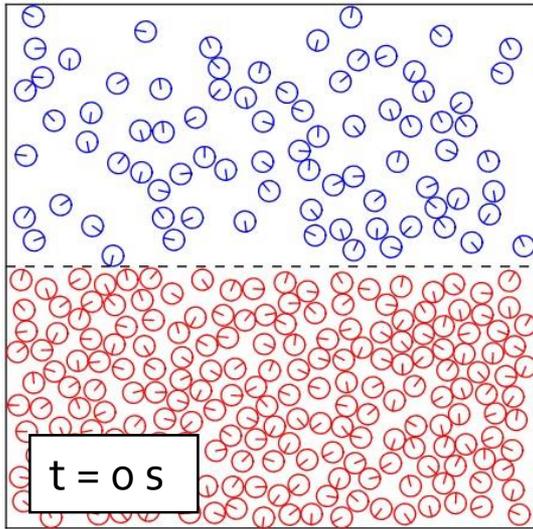
$$D = \frac{1}{2d} \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{d}{dt} \langle \Delta r^2(t) \rangle$$

avec

$$\langle \Delta r^2(t) \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=0}^{N-1} \underbrace{(r_i(t))}_{\text{Position de la}} \underbrace{- r_i(t=0)}_{\text{Position initiale de}}^2$$

Position de la
particule i à l'instant t

Position initiale de
la particule i



<u>AUTODIFFUSION</u>		Helium He	Argon Ar
Rayon atomique (<i>pm</i>)		128	71
Masse volumique (<i>g, mol⁻¹</i>)		0,178	1,78
<i>D</i> (<i>m².s⁻¹</i>)	<i>exp.</i>	1,396.10⁻⁴	1,57.10⁻⁵
	<i>sim.</i>	1,218.10⁻⁵	2,0798.10⁻⁵
	<i>r²</i>	0,99798	0,99816

Pour l'autodiffusion : CNTP

T = 273 K

P = 1,013 bar

Volume Molaire : 22,414.10⁻³ mol⁻¹

Espèce 1 : diffusante	Argon Ar	
Espèce 2 : milieu de diffusion	Helium He	
Température <i>T</i> (K)	298	
<i>D</i> (<i>m².s⁻¹</i>)	<i>exp.</i>	7,03.10⁻⁵
	<i>sim.</i>	4,491.10⁻⁶
	<i>r²</i>	0,996896

CONCLUSION

- Simulation fidèle à la théorie de la diffusion particulaire
 - ↳ Homogénéisation effective du milieu
 - ↳ Relation linéaire du mouvement brownien

CONCLUSION

- **Simulation fidèle à la théorie de la diffusion particulaire**
 - ↪ Homogénéisation effective du milieu
 - ↪ Relation linéaire du mouvement brownien

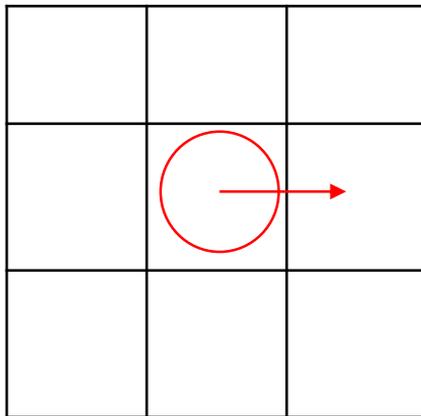
- **Limite du modèle à l'application au cas « réel » :**
 - ↪ Optimiser davantage ⇒ gestion de systèmes plus conséquents
 - ↪ Passage en 3D ⇒ plus fidèle à la réalité physique de la diffusion de la matière
 - ↪ Implémentation de forces (Van Der Waals, viscosité)

II – Un système de particules : optimisation 2

Deuxième optimisation :
Neighbour lists and cell structures

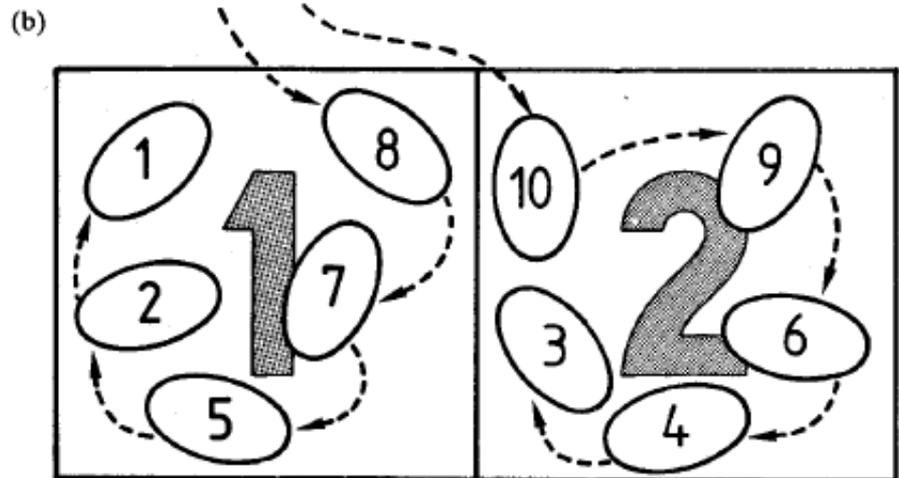
Restreindre la zone de recherche
en découpant l'espace

dt_{max} et v_{max} définis



(a)

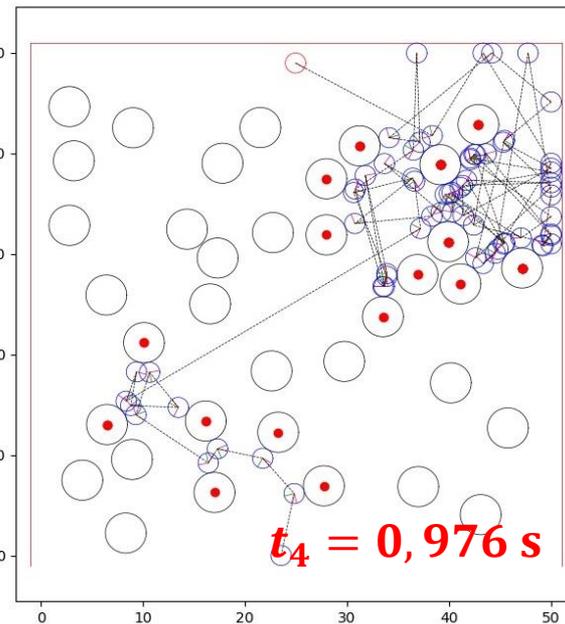
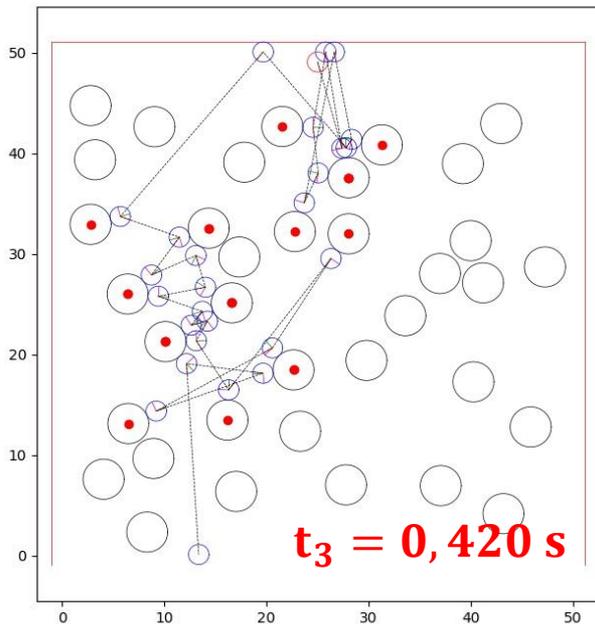
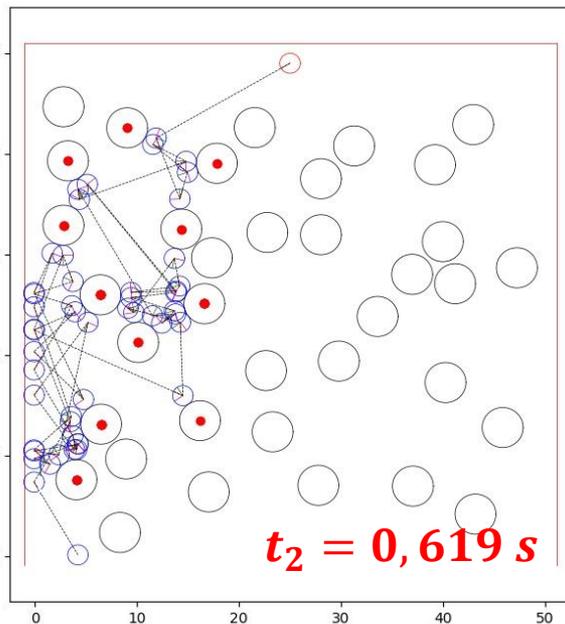
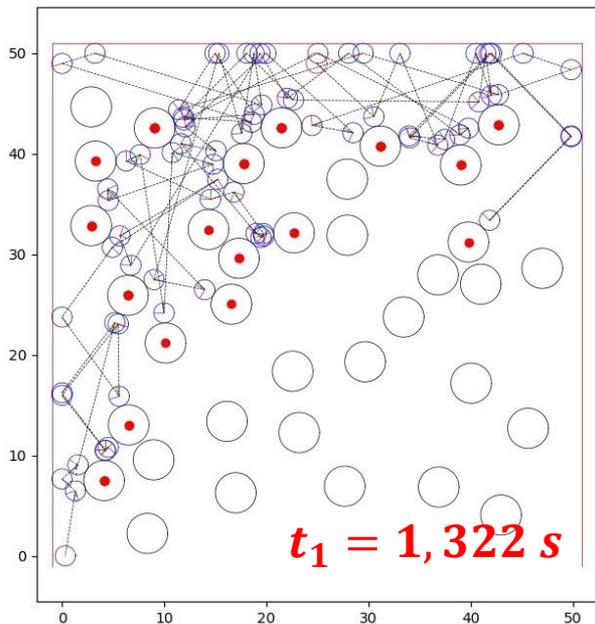
21	22	23	24	25
16	17	18	19	20
11	12	13	14	15
6	7	8	9	10
1	2	3	4	5



Source : *Computer Simulation of Liquids* (1987), Allen & Tildesley, p150

Fig. 5.5 The cell method in two dimensions. (a) The central box is divided into $M \times M$ cells ($M = 5$). (b) A close-up of cells 1 and 2, showing the molecules and the link-list structure.

I – Une particule, des obstacles fixes : résultats



Temps d'extraction

**ETUDE
STATISTIQUE**

Echantillon :
200 simulations

$\bar{t} = 1,070$
 $\sigma = 1,039$
Erreur-type = 0,166

$v = 500 ; r = 1 ;$
 $r_{ob} = 2 ; \#ob = 36$

I – Une particule, des obstacles fixes : résultats

Longueur moyenne de vol

$$\bar{L} = \frac{1}{n \pi d^2}$$

Densité particulaire Diamètre

