T1

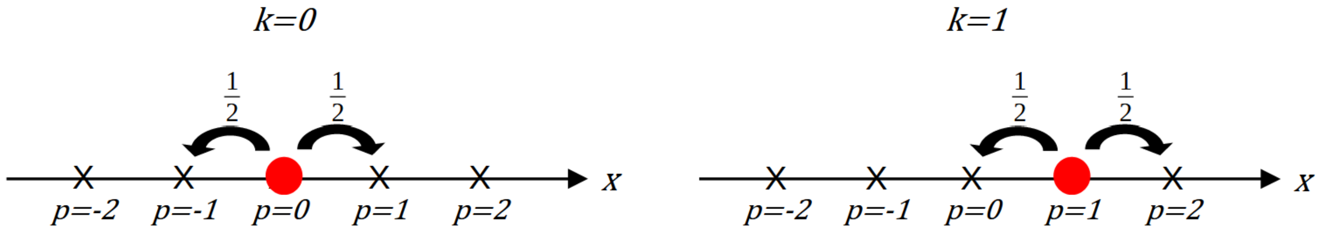
TD - Capacité numérique

Marche au hasard à 1D

Dans le chapitre T1 (diffusion de particules), nous élaborerons un modèle microscopique pour décrire le mouvement d'un grand nombre de particules au cours du temps. L'objectif de ce modèle est de décrire la réalité expérimentale de la diffusion de particules, observable à l'échelle macroscopique. Ce modèle est qualifié de *marche au hasard*.

Description du modèle :

Dans le cadre de ce TD, on se limite à une version unidimensionnelle selon l'axe (Ox) du modèle de marche au hasard. Cet axe (Ox) est décrit comme une chaîne infinie de sites S_p d'abscisse $x_p = p\ell$, avec p un entier relatif et ℓ une longueur caractéristique du déplacement d'une particule.



Une particule est libre d'occuper n'importe quel site S_p de la chaîne. A chaque instant $t_k = k\tau$, où k est un entier naturel et τ un temps caractéristique lié au déplacement de la particule, celle-ci se déplace en sautant d'un site S_p à l'un de ses deux plus proches voisins S_{p-1} ou S_{p+1} avec la même probabilité, égale à $\frac{1}{2}$. A l'instant $t = 0$, la particule se trouve au centre $x = 0$ de l'axe. L'exemple ci-dessus décrit une possibilité de saut de la particule entre l'instant $k = 0$ et l'instant $k = 1$.

Objectifs :

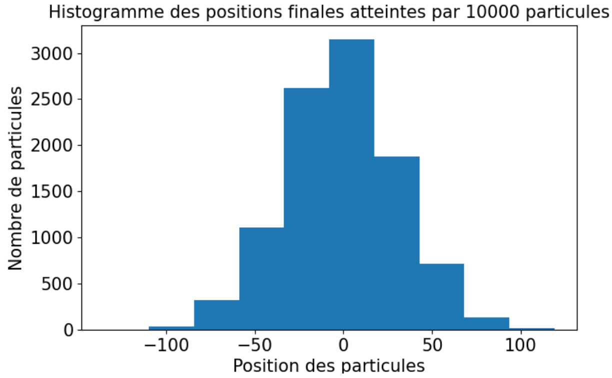
Le but de ce TD est de simuler numériquement la marche au hasard d'un grand nombre N de particules, et de caractériser l'étalement spatial de cet ensemble de particules au cours du temps.

Les objectifs d'apprentissage sont les suivants :

- Décomposer un problème complexe en plusieurs sous-problèmes plus simples.
- Utiliser des tableaux *numpy* : choix de la structure du tableau pour décrire correctement le modèle, accès à toutes les valeurs d'une ligne ou d'une colonne du tableau, opération simple.
- Tracer un histogramme.
- Analyser les résultats numériques pour choisir un nombre N pertinent de particules et pour proposer un modèle mathématique de la diffusion.

I Appropriation

L'histogramme ci-contre présente les positions p finales atteintes après $K = 1000$ pas de temps (instant final : $t_f = K\tau$) pour $N = 10\,000$ particules.



1. Commenter l'histogramme ci-dessus.

2. Proposer une grandeur mathématique permettant de caractériser l'étalement spatial de l'ensemble des particules.

L'objectif de toute la suite est donc de déterminer cette grandeur mathématique à différents instants k.

II Stratégie

On cherche ici à décomposer le problème complexe en sous-problèmes plus simples.

3. Proposer une stratégie de résolution en plusieurs étapes. A chaque étape, on précisera le sous-objectif en une phrase et on indiquera la structure de la grandeur numérique que l'on déterminera (taille du tableau numpy à calculer, type de graphique).

III Résolution

III.1 Détermination des positions p atteintes par une particule au cours du temps

On fournit le code Python suivant :

```python
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt

### Pour 1 seule particule

def pos1(K):
    # Entree : K : nombre de pas de temps
    # Sortie : x : ???

    x=np.zeros(K)
    for i in range(1,K):
        x[i]=x[i-1]+np.random.choice([-1,1])
    return x
```

4. Présenter le fonctionnement de la fonction *pos1* (entrée ? sortie ? principe ?).

III.2 Détermination des positions p atteintes par chacune des N particules au cours du temps

5. Ecrire une fonction *posN*, prenant en entrée le nombre total K de pas de temps et le nombre N de particules, et retournant un tableau numpy à deux dimensions où chaque ligne contient toutes les positions p atteintes par une particule au cours du temps. Vous vérifierez le bon fonctionnement de votre fonction.

III.3 Analyse

a Histogrammes des positions atteintes par les particules à l'issue de la simulation

6. Calculer le tableau numpy *tabx* de l'ensemble des positions p atteintes par $N = 10$ particules à chaque instant de la simulation de durée totale $K = 100$.

7. Tracer l'histogramme des positions finales atteintes par ces $N = 10$ particules au bout de $K = 100$ pas de temps.

8. Commenter le choix du nombre N de particules. Proposer un critère permettant de choisir un nombre N de particules plus pertinent. Déterminer ce nombre N pertinent.

9. Observer l'effet d'une augmentation de la durée K de la simulation.

b Caractérisation de l'étalement des particules au cours du temps

On fournit la portion de code suivante, permettant de calculer puis de tracer la moyenne et l'écart-type de la distribution de particules pour différents instants k :

```python
### Caracterisation de l'etalement des particules

k_list=np.linspace(0,K-1,100)    # Liste des pas de temps pour le trace graphique
```

```
# Calcul de la liste des moyennes et des ecarts-types
moy_list=[]
ecart_type_list=[]
for k in k_list:
    moy_list.append(np.mean(tabx[:,int(k)]))
    ecart_type_list.append(np.std(tabx[:,int(k)]))

plt.subplot(2,1,1)
plt.plot(k_list,moy_list)
plt.title('Position moyenne pour '+str(N)+' particules')
plt.xlabel('Numero du pas de temps')
plt.ylabel('Position')
plt.grid()
plt.subplot(2,1,2)
plt.plot(k_list,ecart_type_list)
plt.title('Ecart-type pour '+str(N)+' particules')
plt.xlabel('Numero du pas de temps')
plt.ylabel('Ecart-type')
plt.grid()
plt.tight_layout()
plt.show()
```

10. Commenter les graphes obtenus. Proposer un modèle mathématique semblant régir l'étalement de l'ensemble des particules au cours du temps.

IV Validation

Vous ne pouvez pas encore répondre à cette dernière question. On y répondra donc dans le cours, à l'issue du chapitre T1.

11. Ce modèle mathématique obtenu à l'issue de la simulation numérique est-il cohérent avec une loi de diffusion ?

Annexe : spécification de quelques fonctions Python

Le jour des concours, on vous donnerait la spécification des fonctions suivantes :

- *np.random.choice*
- *plt.hist*
- *np.mean*
- *np.std*

Ici, comme vous êtes sur ordinateur, je vous laisse aller chercher les spécifications de ces fonctions sur internet (tester les avec le minimum de paramètres pour observer leur fonctionnement si besoin).