

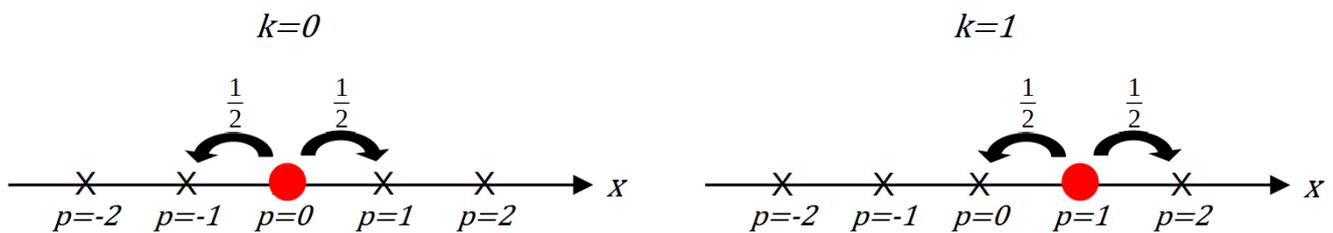
TD - Capacité numérique

Marche au hasard à 1D

Dans le chapitre T2 (diffusion de particules), nous avons décrit un modèle microscopique pour décrire le mouvement d'un grand nombre de particules au cours du temps. 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 $\frac{1}{2}$. Chaque particule évolue indépendamment des autres. A l'instant $t = 0$, les particules se trouvent toutes au centre $x = 0$ de l'axe. L'exemple ci-dessus décrit une possibilité de saut d'une particule entre l'instant $k = 0$ et l'instant $k = 1$.

Objectifs :

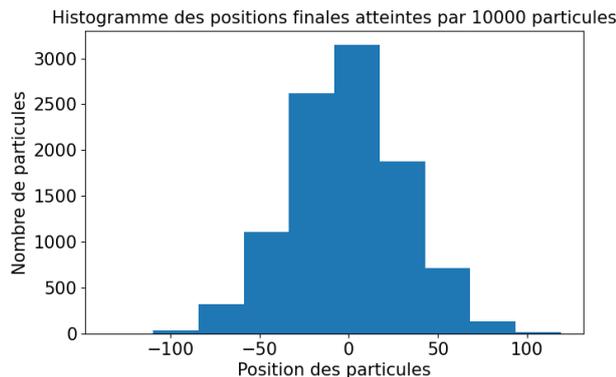
Le but de ce TD est de simuler numériquement la marche au hasard d'un grand nombre N de particules, et de caractériser l'étalement spatial de cet ensemble de particules au cours du temps.

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 et un graphe.
- 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 :

```
1 import numpy as np
2 import matplotlib.pyplot as plt
3
4 ### Pour 1 seule particule
5
6 def pos1(K):
7     # Entree : K : nombre de pas de temps
8     # Sortie : x : ???
9
10    x=np.zeros(K)
11    for i in range(1,K):
12        x[i]=x[i-1]+np.random.choice([-1,1])
13    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

La fonction *posN* prendra en entrée le nombre total K de pas de temps et le nombre N de particules. Elle retournera un tableau numpy à deux dimensions où chaque ligne contient toutes les positions p atteintes par une particule au cours du temps.

5. Compléter les instructions 1 du code fourni pour écrire cette fonction. L'instruction 1.1 initialisera le tableau à 2 dimensions des positions *tabx*. L'instruction 1.2 permettra le parcours des lignes. L'instruction 1.3 permettra de stocker toutes les positions atteintes par l'une des particules.
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. Compléter l'instruction 2 pour 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. Compléter l'instruction 3 pour extraire du tableau *tabx* l'ensemble des positions finales atteintes par les différentes particules.
8. Compléter les instructions 4 afin de tracer l'histogramme des positions finales atteintes par ces $N = 10$ particules au bout de $K = 100$ pas de temps. L'instruction 4.1 permet de tracer l'histogramme. L'instruction 4.2 génère le titre de l'axe des abscisses. L'instruction 4.3 génère le titre de l'axe des ordonnées. L'instruction 4.4 nomme le graphique "Histogramme des positions finales".
9. 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.
10. 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 une portion de code, permettant de calculer puis de tracer la moyenne et l'écart-type de la distribution de particules pour différents instants k . Exécuter cette portion de code.

11. Commenter les graphes obtenus. Proposer un modèle mathématique semblant régir l'étalement de l'ensemble des particules au cours du temps. Quel graphe faut-il tracer pour valider ce modèle mathématique ?
12. Compléter les instructions 5 afin de tracer le graphe proposé à la question précédente.

IV Validation

Vous ne pouvez pas encore répondre à cette dernière question. On y répondra donc dans le cours, à l'issue du chapitre T2.

13. 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`
- `np.zeros`
- `plt.hist`
- `np.mean`
- `np.std`
- `plt.plot`

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).