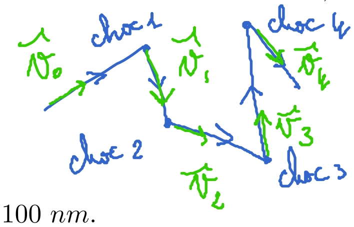
PC - Lycée Dumont D'Urville

# Complément chapitre th3 : marche au hasard

## I. Rappel : libre parcours moyen et vitesse quadratique moyenne

Dans un fluide, les particules sont en mouvement incessant. Ces particules subissent de nombreuses collisions avec les particules qui les entourent et avec les parois du récipient qui les contient. Entre deux collisions, leur mouvement est rectiligne uniforme et à chaque collision, le vecteur vitesse est modifiée en sens, norme et direction.

On appelle *libre parcours moyen,* la distance moyenne entre deux collisions successives.




Ordre de grandeur: dans l'air à température et pression ambiantes: $l = 100\ nm$.

Les particules ont toutes des vitesses différentes mais on peut définir une vitesse particulière: la vitesse que possèdent le plus grand nombre de particules dans le fluide. On l'appelle *vitesse quadratique moyenne*, c'est la racine carrée de la moyenne de la vitesse au carré soit $v_q = \sqrt{< v^2 >}$.

*Cas du GPM:* d'après la statistique de Boltzman: l'énergie d'une particule est de $\frac{1}{2}k_B T$ par degré de liberté.

$e_c = \frac{1}{2} m v^2 = 3 \times \frac{1}{2} k_B T$ d'où $v_q = \sqrt{< v^2 >} = \sqrt{\frac{3 k_B T}{m}} = \sqrt{\frac{3RT}{M}}$

3 degrés de liberté de translation

masse d'une particule

masse d'une mole

Ordre de grandeur: $N_2$ à $T = 293\ K$: $v_q = 510\ m/s$.

## II. Simulation du mouvement brownien d'une particule dans le plan $Oxy$

### 1. Le modèle:

L'objectif est de modéliser le mouvement incessant (appelé mouvement brownien) d'une particule microscopique dans un fluide. Le principe de la modélisation repose sur le fait que:

- la particule subit aux instants $t = \tau$, $t = 2\tau$, $t = 3\tau$..., une collision qui modifie aléatoirement la direction de son vecteur vitesse.

- entre deux collisions, la particule a un mouvement rectiligne uniforme. On note $l$ le libre parcours moyen, soit la distance moyenne parcourue par la particule entre deux collisions successives.

### 2. Simulation de la marche au hasard d'une particule dans le plan $Oxy$

#### 2.a. *Principe de la simulation*

La simulation de la marche au hasard d'une particule consiste à:

- Initialiser sa position, choisir un nombre de collisions et le libre parcours moyen

- Pour chaque collision : tirer au sort le déplacement, calculer la nouvelle position et la stocker.

#### 2.b. *Le code proposé et les résultats*

```
import random
l=1
def marche(N):
——x0,y0=0.0,0.0
——xlist,ylist=[x0],[y0]
——for i in range(N):
—— ——dx,dy=random.uniform(-l,+l),random.uniform(-l,+l)
—— ——xlist.append(xlist[i]+dx)
—— ——ylist.append(ylist[i]+dy)
——return xlist,ylist
```

libre parcours moyen

on initialise les listes xlist et ylist

à chaque choc, on tire au sort deux déplacements en x et y sur l'intervalle $[-l,+l]$

on ajoute aux listes la nouvelle position $x_i, y_i$ de la particules

liste des position x(t)

liste des positions y(t)

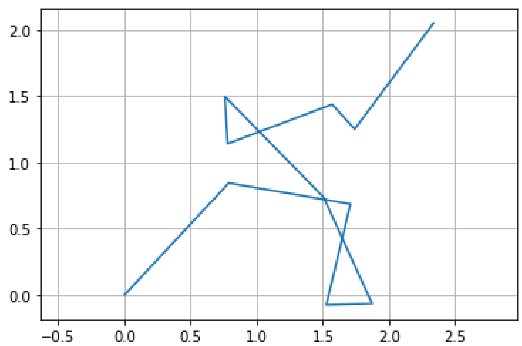
```
x=marche(N)[0]
y=marche(N)[1]
plt.plot(x,y)
plt.axis('equal')
plt.grid()
plt.show()
```

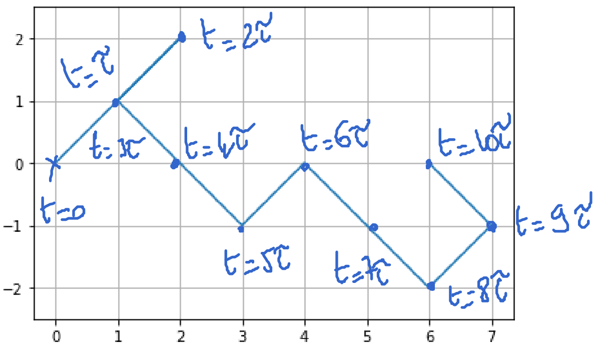
on applique la fonction marche(N) pour N chocs
cette fonction renvoie deux listes : le résultat est donc une liste de 2 listes : marche(N) = [[x list, ylist]]

on trace y en fonction de x

on tire au sort +l ou -l

L'exécution du code donne la courbe: random.choice([-l,+l]) remplace random.uniform:






Expliquez la différence entre random.uniform et random.choice et donner les valeurs de l et de N.

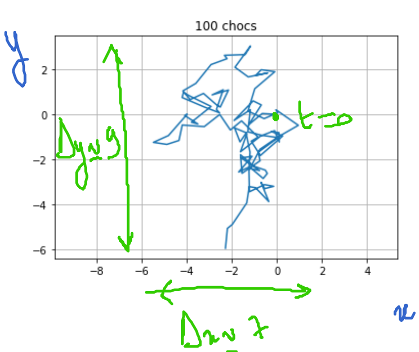
Compléter le code pour tracer les courbes $x(t)$ et $y(t)$.

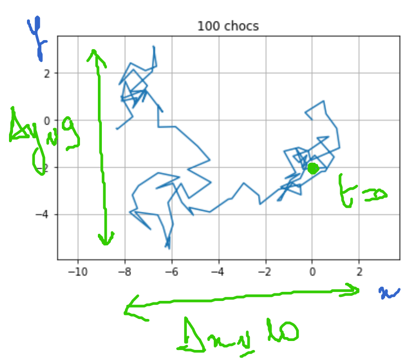
```
t=np.linspace(0,N,N+1)
plt.plot(t,x)
plt.title('x(t)')
plt.show()
plt.plot(t,y)
plt.title('y(t)')
plt.show()
```

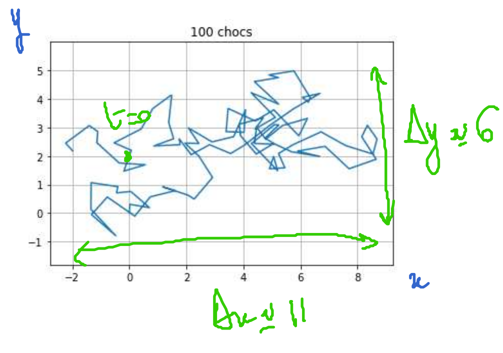
t = array([0, 1, 2 ... , N])

On donne les résultats des simulations pour 100, 1000, 10 000 et 100 000 chocs

$L_{moy} \approx 10\, l$

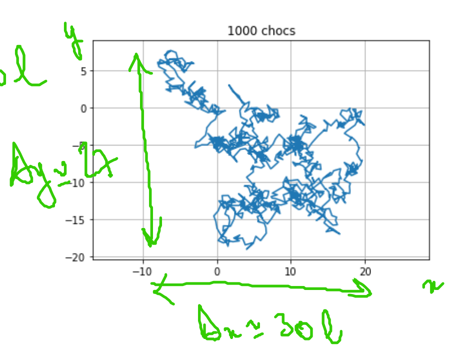


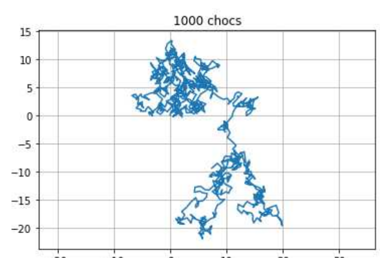



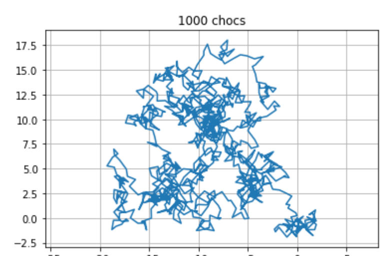



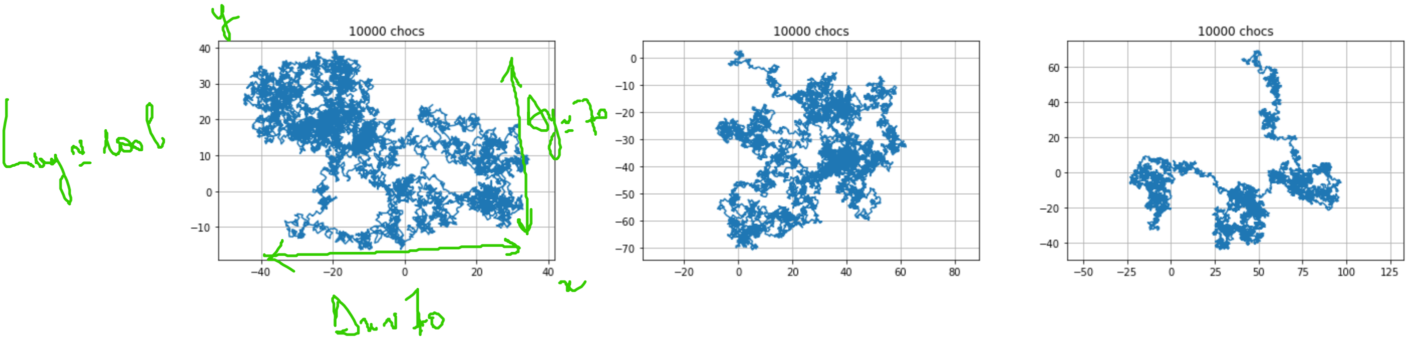

.

$L_{moy} \approx 100\, l$






.

On note $L$ la distance moyenne de diffusion pendant un temps $\Delta t$. On cherche la relation entre $L$ et $\Delta t$. Cette relation n'est pas linéaire en effet:

Quand le nbre de chocs est multiplié par 10 (cela revient à multiplier le temps par 10), la distance moyenne parcourue est multipliée par $3 \sim \sqrt{10}$

soit $\underline{L^2 \text{ proportionnel à } \Delta t}$

### 2.c. *L'interprétation*

$l$ : libre parcours moyen $\quad \tau$ : temps moyen entre 2 chocs $\quad v_q = \dfrac{l}{\tau}$

On note $p(x,t)$ la probabilité qu'une particule se trouve en $x$ à l'instant $t$. D'un instant à l'autre, l'abscisse de la particule varie aléatoirement de $+l$ ou $-l$ avec une égale probabilité.

On a $p(x, t+\tau) = \dfrac{1}{2}\, p(x-l,t) + \dfrac{1}{2}\, p(x+l,t)$

Pour que la particule soit en $x$ à l'instant $t+\tau$, il faut qu'elle soit en $x-l$ ou $x+l$ à l'instant $t$. Les probabilités d'aller à gauche ou à droite sont égales.

$\tau$ petit : DL à l'ordre 1 de $p(x, t+\tau) = p(x,t) + \dfrac{\partial p}{\partial t}(x,t) \times \tau$

$l$ petit :

DL à l'ordre 2 de $p(x+l,t) = p(x,t) + \dfrac{\partial p}{\partial x}(x,t) \times l + \dfrac{\partial^2 p}{\partial x^2}(x,t) \times \dfrac{l^2}{2}$

DL à l'ordre 2 de $p(x-l,t) =$ " $-$ " $+$ "

d'où $p(x+l,t) + p(x-l,t) = 2\, p(x,t) + l^2 \dfrac{\partial^2 p}{\partial x^2}(x,t)$

soit $p(x,t+\tau) = \cancel{p(x,t)} + \dfrac{\partial p}{\partial t}(x,t)\,\tau = \cancel{p(x,t)} + \dfrac{l^2}{2} \dfrac{\partial^2 p}{\partial x^2}$

d'où $\boxed{\dfrac{\partial p}{\partial t} = \dfrac{l^2}{2\tau} \dfrac{\partial^2 p}{\partial x^2}}$ on trouve bien une équation de diffusion avec $D = \dfrac{l^2}{2\tau}$ pour coefficient de diffusion

$l^2$ est bien proportionnel à $\tau$

comme $L$ est proportionnel à $\Delta t$