

Mouvement Brownien.

1 Introduction

Le mouvement brownien fut découvert en 1827, par le botaniste anglais Brown, qui examinait au microscope des grains de pollen dispersés dans une goutte de liquide. Il constata que les particules de pollen effectuaient, indépendamment les unes des autres des mouvements incessants et complètement désordonnés. Il fut étudié expérimentalement par le physicien français Gouy entre 1887 et 1895. Il établit alors que la cause du mouvement était l'agitation thermique des molécules du liquide.

Au début de ce siècle (1905), Einstein et Schmoluchowsky obtinrent les premiers résultats théoriques sur les propriétés statistiques du mouvement brownien. En particulier, ils montrèrent que le déplacement quadratique moyen Δx^2 des particules browniennes est proportionnel au temps. Une description mathématique de ce type de processus dans le cadre du calcul des probabilités a été effectuée par Wiener (1923) et Levy (1937-1948).

Dans ce projet informatique, nous vous proposons d'illustrer le mouvement brownien d'une particule soumise aux collisions aléatoires avec les particules d'un gaz.

2 Simulation de la dynamique d'un gaz parfait.

Pour ceci nous allons simuler la dynamique d'un gaz parfait, n'échangeant ni chaleur, ni travail avec l'extérieur. Notre gaz sera constitué de particules se déplaçant à vitesse constante entre deux collisions. Lorsque deux particules se rencontrent, nous supposons le choc élastique : l'énergie et l'impulsion de l'ensemble des deux particules seront conservées. Ces deux lois ne suffisent pas à déterminer les trajectoires futures. Dans un espace à deux dimensions, nous obtenons 3 équations pour 4 inconnues : soit en effet \mathbf{p}_1 et \mathbf{p}_2 les impulsions des molécules avant le choc. On veut, à l'aide de ces deux vecteurs et des lois de conservation, déterminer les impulsions après le choc. On choisit des atomes de même masse. Effectuons le changement de variables :

$$\mathbf{p}_G = \mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 \quad (1)$$

$$\mathbf{p}_r = \mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2 \quad (2)$$

C'est à dire :

$$\mathbf{p}_1 = \frac{\mathbf{p}_G + \mathbf{p}_r}{2} \quad (3)$$

$$\mathbf{p}_2 = \frac{\mathbf{p}_G - \mathbf{p}_r}{2} \quad (4)$$

La conservation de l'impulsion pour le système avant et après le choc s'écrit : $\mathbf{p}_G = \mathbf{p}'_G$ (On affectera d'un ' les quantités après le choc). La conservation de l'énergie s'écrit : $|\mathbf{p}_r| = |\mathbf{p}'_r|$.

Nous avons donc une indétermination sur la direction de $|\mathbf{p}'_r|$. *L'hypothèse que nous allons utiliser (hypothèse de Boltzmann) consiste à dire que toutes les directions sont équiprobables pour $|\mathbf{p}_r|$.*

La dynamique de notre gaz étant ainsi modélisée, nous allons la simuler. Nous tracerons ensuite la trajectoire d'une des particule du gaz lui même. Nous visualiserons cette trajectoire. Ce travail étant terminé, vous :

- Généralisez ce modèle au cas où une des particules (la particule brownienne) a une masse plus grande (beaucoup plus grande) que les particules composant le gaz.
- Etudiez les propriétés statistiques de la trajectoire obtenue. (Ecart quadratique moyen entre la position au temps t et la position initiale en fonction du temps, etc)

3 Le programme

Pour ce programme, on se contentera de modéliser le réservoir par un tableau divisé en petites cases.

La procédure principale du programme se déroule en deux phases. Pendant une première phase d'évolution, on calcule les nouvelles positions et vitesses des particules à l'instant $t + dt$ à l'aide de leurs positions et vitesses à l'instant t :

$$\mathbf{x} \leftarrow \mathbf{x} + \mathbf{v}dt \quad \mathbf{p} \leftarrow \mathbf{p} \quad (5)$$

Si pendant cette phase, une des particules sort des limites du réservoir, on suppose qu'elle a eu un choc élastique sur la paroi. Il suffit de prendre son image miroir dans la paroi concernée pour avoir ses vraies position et vitesses. La masse des particules est prise égale à l'unité ($\mathbf{v}dt = \mathbf{p}$).

La seconde phase consiste à gérer les collisions éventuelles. Le critère de collision sera : deux particules ont une collision si elles se trouvent dans la même case. Si deux particules doivent avoir une collision, on procède comme suit (hypothèse de Boltzman) :

- Calculer $\mathbf{p}_G = \mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2$ et $\mathbf{p}_r = \mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2$.
- Modifier la direction de \mathbf{p}_r sans changer son module.
- $\mathbf{p}_1 \leftarrow (\mathbf{p}_G + \mathbf{p}_r)/2$ et $\mathbf{p}_2 \leftarrow (\mathbf{p}_G - \mathbf{p}_r)/2$.

On répète ces deux phases tant que l'on souhaite observer la trajectoire brownienne.

3.1 Les structures de données

La première structure de notre programme est un tableau de taille `NbrAtomes*4` de flottants qui contient les positions et les vitesses des particules. Les coordonnées de la particule i sont mémorisées dans la colonne i . (On commencera avec `NbrAtomes = 20`).

```
struct Coordonnees
{
  int x[NbrAtomes];
  int y[NbrAtomes];
  int px[NbrAtomes];
  int py[NbrAtomes];
}
```

}

L'autre structure importante du programme est le réservoir. Il s'agit d'un tableau de taille $\text{TailleReservoir} \times \text{TailleReservoir}$ d'entiers qui contient le numéro de la molécule qui à l'instant t est dans la case (i,j) du réservoir.

int Reservoir[Taille][Taille]

Si il n'y a pas de particules dans la case (i,j) , on pose $\text{Reservoir}[i][j]=0$. Quand la particule numéro n entre dans cette case, si la case est vide, on pose $\text{Reservoir}[i][j]=n$; si la case n'est pas vide ($\text{Reservoir}[i][j] = m \neq 0$), alors on gère la collision entre les particules n et m et on remet la case à zéro.

Quand la particule quitte une case, on remet la case à zéro.

3.2 Structure du programme

Procédez de façon méthodique : décomposez votre programme en petites procédures pour chaque tâche distincte. Tester chacune de ces procédures dès quelle est écrite.

Vous écrirez une procédure qui permet de visualiser l'ensemble des particules.

Vous commencerez avec quelques particules dont vous fixerez les positions et vitesses initiales. Voici la liste des procédures du projet :

La première procédure fait avancer un atome pendant un temps infinitésimal :

void avancer(int i)

La deuxième procédure teste si la particule est sortie de la boîte. Si oui, elle simule un choc sur la paroi :

void paroi(int i)

La troisième procédure gère les deux procédures précédentes pour faire évoluer le système d'un temps dt , pour l'instant sans chocs. Vous choisirez la constante de temps dt de manière à ce que la particule la plus rapide ne puisse pas parcourir plus de la taille d'une des cases du réservoir en un seul pas.

void évoluer()

La quatrième procédure gère les chocs. Selon la méthode probabiliste indiquée, elle modifie les impulsions des particules impliquées :

void choquer(int i,int j)

Vous modifierez la procédure *évoluer* de façon à tenir compte des chocs.

La cinquième procédure choisit au hasard les positions et les vitesses initiales des particules : prenons un réservoir rempli d'un gaz presque parfait, n'échangeant ni chaleur, ni travail avec l'extérieur. La mécanique statistique nous apprend qu'à l'équilibre thermodynamique, la distribution des vitesses $n(v)$ vérifie $n(v) = Av \exp(-(v - u)^2/\sigma^2)$ où u est la

vitesse la plus probable (dépendant de la température). Ceci signifie qu'une telle distribution est stationnaire lors de l'évolution du gaz. Nous choisirons donc cette distribution comme distribution initiale. Lors du remplissage du tableau initial, vous testerez que deux particules ne prennent pas la même position dans le réservoir.

void initial()

Nous choisissons la première particule comme la particule brownienne. Modifier la procédure d'affichage de manière à ce que cette particule ait une couleur différente des autres particules, et ensuite de manière à visualiser sa trajectoire. Vous modifierez ensuite la procédure de collision de manière à tenir compte de la masse différente ($m \gg 1$) de la particule brownienne.