UNIVERSITÉ DE GENÈVE FACULTÉ DES SCIENCES
Sections d'Informatique et de Physique Profs. B. Chopard et M. Droz

**Outils, modélisation et simulation en calcul numérique – Série 3**

**5 avril 2005**

**Exercice 1.**
**Le développement de Chapman-Enskog.**
Soit un oscillateur harmonique faiblement amorti dont la position $x(t)$ satisfait

$$\ddot{x} + \varepsilon \dot{x} + x = 0. \tag{1}$$

i) Etablir la solution générale pour $x(t)$, avec conditions initiales $x(0) = A$, $\dot{x}(0) = B$. Constater l'existence de deux échelles de temps distinctes.

ii) La méthode de Hilbert : supposons $\varepsilon$ petit et un développement de la forme

$$x(t, \varepsilon) = \sum_{k \geqslant 0} \varepsilon^k x_k(t).$$

Résoudre l'Eq. (1) pour $x(t)$ ordre par ordre en $\varepsilon$. Interpréter la solution obtenue.

iii) On demande d'exploiter explicitement la connaissance de l'existence de *deux* échelles de temps distinctes à l'aide du développement de Chapman-Enskog. Soit une solution de la forme $x = x(\tau_0, \tau_1)$, où $\tau_k = \varepsilon^k t$, ainsi que la hiérarchie d'échelles de temps $\partial_t = \sum_{k=0}^{1} \varepsilon^k \partial_{\tau_k}$. On développe perturbativement $x$ en fonction du petit paramètre $\varepsilon$ : $x(\tau_0, \tau_1) = x_0(\tau_0, \tau_1) + \varepsilon x_1(\tau_0, \tau_1)$.
Résoudre l'Eq. (1) pour $x(t)$ pour l'ordre 0 en éliminant les divergences séculaires à l'aide de l'équation à l'ordre 1. Interpréter la solution obtenue.
**Indication :** comme constaté dans le point i), les divergences séculaires sont issues des termes en $\cos t$ et $\sin t$ à l'ordre $\varepsilon^k$, $k \geqslant 1$. Il faut donc éliminer les contributions à ces ordres.

— **Tourner la page** —

**Exercice 2.**
**La marche aléatoire.**
Soit un réseau unidimensionnel. Entre les temps $t$ et $t+1$, une particule se déplace avec probabilité $p$ vers la droite, et avec probabilité $(1-p)$ vers la gauche.

i) Programmer le système correspondant dans le langage de votre choix. Dans le cas symétrique ($p = 0.5$), choisir une particule test et étudier sur plusieurs réalisations sa position moyenne $\langle x \rangle$ ainsi que son écart-type $\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$. En particulier, montrer numériquement que le comportement de ces grandeurs est bien diffusif : $\langle x \rangle = 0$, $\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 \sim t$, où $t$ est le temps.
**Indication :** en pratique on réalise les moyennes empiriques $\langle x(t) \rangle$ et $\left\langle x^2(t) \right\rangle$ comme suit. Soit $x_i(t)$ la $i^{\text{ème}}$ réalisation d'un chemin brownien au temps $t$, soient $N$ expériences ou réalisations du processus, $1 \leqslant i \leqslant N$. Bien entendu, le nombre de mesures réalisées $N$ est en pratique fini mais en principe aussi grand qu'on le désire. Les valeurs moyennes considérées sont alors données par

$$\begin{aligned} \langle x(t_i) \rangle &= \lim_{N \to \infty} \frac{1}{N} \sum_{j=1}^{N} x_j(t_i), \\ \left\langle x^2(t_i) \right\rangle &= \lim_{N \to \infty} \frac{1}{N} \sum_{j=1}^{N} x_j^2(t_i). \end{aligned}$$

Pour obtenir les résultats désirés, choisir plusieurs valeurs $t_i$ puis étudier $\langle x(t_i) \rangle$ et $\left\langle x^2(t_i) \right\rangle$ pour chacune d'entre elles.

ii) Etudier $\langle x \rangle$ pour une marche aléatoire asymétrique ($p \neq 0.5$).

iii) Soit $P(x,t)$ la distribution de probabilité de trouver une particule à la position $x$ au temps $t$ pour une marche aléatoire symétrique. Nous savons que la distribution de probabilité satisfait l'équation de diffusion (cf. cours)

$$\frac{\partial}{\partial t} P(x,t) = D \frac{\partial^2}{\partial x^2} P(x,t),$$

où $D$ est la constante de diffusion.

a) Pour une particule en $x = 0$ au temps $t = 0$, montrer que la solution de l'équation de diffusion est

$$P(x,t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi D t}} \exp\left( -\frac{x^2}{4Dt} \right).$$

b) En utilisant le résultat du point précédent, montrer que $\langle x \rangle = 0$ ainsi que $(\Delta x)^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = 2Dt$, et donc $\Delta x \sim t^{1/2}$.