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 4

12 avril 2005

Exercice 1.
Le processus de réaction-diffusion $A + B \to \varnothing$.
Soient deux espèces de particules A et B qui diffusent sur un réseau en 2 dimensions. Lorsqu'une particule A rencontre une particule B, elles s'annihilent avec taux k.

i) Soient $N_A(t)$ et $N_B(t)$ les nombres de particules des espèces A et B respectivement. Etablir les équations différentielles gouvernant l'évolution de ces densités dans une description de type champ-moyen.

ii) Résoudre le système d'équations obtenu sous i) pour les conditions initiales $N_A(0) = N_B(0)$. Constater le comportement asymptotique des densités.

iii) Soient $n_A(\mathbf{r}, t)$ et $n_B(\mathbf{r}, t)$ les densités *locales* de particules des espèces A et B respectivement. On a bien entendu $\int_V \mathrm{d}\mathbf{r} n_i(\mathbf{r}, t)/V = N_i(t)$, où V est le volume contenant les particules et $i = \{A, B\}$. Etablir les équations différentielles gouvernant l'évolution de ces densités dans une description de type champ-moyen.

iv) Vérifier que la solution des équations obtenues sous iii) [pour les densités locales $n_i(\mathbf{r}, t)$] a le même comportement asymptotique que celui obtenu au point ii) [pour les densités globales $N_i(t)$].

v) Programmer l'automate cellulaire pour un taux unité $k = 1$ et des densités initiales égales $N_A(0) = N_B(0)$. Remarquer la formation par la dynamique d'amas de particules.
Indications :
- Plusieurs particules de même espèce peuvent se trouver en même temps sur une même cellule.
- Il est essentiel que les particules d'espèces A et B soient initialement en nombre égal : $N_A(0) = N_B(0)$.
- Il peut être plus aisé de recourir à un logiciel tel que Matlab pour la visualisation en temps réel de la dynamique.

vi) Etudier numériquement l'évolution temporelle de la densité totale de particules $N(t) = N_A(t) + N_B(t)$ en fonction du temps.
Indications :
- Soit $f(t) \sim \alpha t^\beta$ pour $t \to \infty$, alors dans un graphique d'axes $\{x, y\} = \{\ln t, \ln f\}$ la relation devient asymptotiquement linéaire : $y = \ln \alpha + \beta x$, ce qui permet une détermination aisée de β par interpolation linéaire (par exemple avec *GnuPlot*).
- Il existe un régime transitoire en loi de puissance avec un exposant différent de celui qui est cherché. Le comportement désiré ne s'observe que pour de très longs temps. On prendra donc un système de très grande taille. Un langage de programmation plus rapide que Matlab est donc plus approprié pour cette partie.

vii) Comparer les résultats des points ii), iv), et vi). Quelle est la cause du ralentissement de la dynamique ? Expliquer en se basant sur les résultats du point v).

viii) Trouver un argument qualitatif qui permet de reproduire le comportement $N(t) \sim t^{-d/4}$, $d \leqslant 4$.