Diffusion en file

Contact : pierre.illien@sorbonne-universite.fr

La "diffusion en file" désigne le mouvement de particules browniennes dans un canal étroit, et dans lequel les particules ne peuvent pas se dépasser et conservent leur ordre initial. Une telle situation est rencontrée quand on considère des molécules évoluant sous un fort confinement géométrique, par exemple dans un milieu poreux. Si on considère les fluctuations de position d'une particule marquée dans ce système, on observe que sa diffusion est très lente, ce qui est une conséquence des fortes corrélations de position induites par le confinement du système. L'objectif de ce projet est de simuler ce phénomène de diffusion en file en utilisant un modèle de gaz sur réseau.

1 Modèle

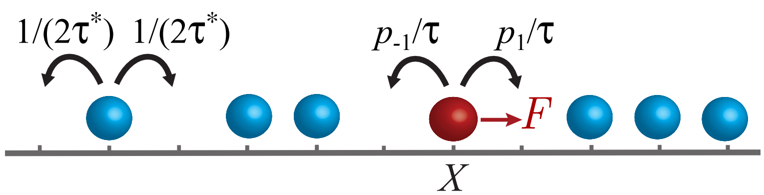

FIGURE 1 – Schéma du modèle de la "diffusion en file". Le traceur est représenté en rouge, les particules de l'environnement sont représentées en bleu.

Les particules sont placées sur une ligne discrète et sautent vers les sites voisins, avec la contrainte qu'il ne peut y avoir qu'une seule particule par site. On considère le cas général où le traceur peut avoir une fréquence de saut différente de celle des particules constituant son environnement, et où le traceur peut-être soumis à une force extérieure $\boldsymbol{F}$ qui dévie son mouvement dans une direction privilégiée. Plus précisément, le traceur saute à droite (resp. à gauche) avec une fréquence $k_1 = p_1/\tau$ (resp. $k_{-1} = p_{-1}/\tau$). On supposera que la force extérieure tire la particule vers la droite et donc que $1/2 \leq p_1 \leq 1$ et $p_{-1} = 1 - p_1$. Les particules qui constituent le bain sautent à droite où à gauche avec une fréquence $k = 1/(2\tau^*)$. Dans chaque cas, les sauts ne sont possibles que si le site cible est libre.

On note $X(t)$ le site occupé par le traceur à l'instant t. Initialement, on prend $X(0) = 0$ (i.e. le traceur occupe le site 0) tandis que chacun des autres sites est initialement occupé avec une probabilité $0 \leq \rho \leq 1$, qui représente la densité de particules sur le réseau.

2 Implémentation

La dynamique du système est représentée en temps continu : on suppose que chaque particule porte une "horloge" qui sonne à des temps espacés aléatoirement et distribués selon une loi exponentielle (de moyenne τ pour le traceur et de moyenne τ^* pour les particules du bain). A chaque sonnerie de l'horloge, la particule décide de sauter à droite ou à gauche, et le saut est réalisé si le site cible est libre.

L'algorithme de Gillespie (ou Monte Carlo cinétique) permet de simuler une telle dynamique. L'algorithme est décrit par exemple sur la page wikipedia : `https://en.wikipedia.org/wiki/Kinetic_Monte_Carlo`.

On construira un réseau de L sites $(0, 1, \ldots, L-1)$ avec des conditions aux limites périodiques (site $L =$ site 0). On appelle $x(t) = X(t) - X(0)$ le déplacement du traceur à l'instant X. L'objectif de la simulation est d'obtenir en sortie un tableau de la forme suivante :

t	$\langle x(t) \rangle$	$\langle x(t)^2 \rangle$
$\ldots$	$\ldots$	$\ldots$

où $\langle \ldots \rangle$ désigne une moyenne sur les conditions initiales et sur l'évolution aléatoire du système une fois que la condition initiale a été prescrite.

3 Observations

1. **Cas où le traceur est symétrique ($p_1 = p_{-1} = 1/2$).**
   Calculer les fluctuations de position du traceur : $\langle \delta x(t)^2 \rangle = \langle x(t)^2 \rangle - \langle x(t) \rangle^2$. Tracer $\langle \delta x(t)^2 \rangle$ en fonction de temps pour plusieurs valeurs de ρ et de τ^* et vérifier la relation théorique :

$$\langle \delta x(t)^2 \rangle \underset{t\to\infty}{\sim} \frac{1-\rho}{\rho} \sqrt{\frac{2t}{\pi \tau^*}} \tag{1}$$

   Que dire de la dépendance en temps de ces fluctuations ? Commenter les limites $\tau^* \to \infty$ et 0, et $\rho \to 0$ et 1.

2. **Cas d'un traceur biaisé ($p_1 > 1/2$).** Tracer la position moyenne du traceur, et montrer à l'aide des données numériques qu'on peut écrire son comportement asymptotique sous la forme

$$\langle x(t) \rangle \underset{t\to\infty}{\sim} A(p_1, \rho)\sqrt{2t} \tag{2}$$

   où A est un nombre dépendant de p_1 et ρ. Il a été montré que A était la solution de l'équation

$$\frac{1-\rho f(A)}{1-\rho f(-A)} = \frac{p_{-1}}{p_1} \tag{3}$$

   où $f(x) = [1 - \sqrt{\pi} x \mathrm{e}^{x^2}(1 - \mathrm{erf}\, x)]^{-1}$ et $\mathrm{erf}\, x = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x \mathrm{e}^{-t^2} \mathrm{d}t$ est appelée la fonction d'erreur. Ecrire un code permettant de résoudre l'équation (3) pour des valeurs données de ρ et p_1 et comparer avec les valeurs de A observées numériquement.

4 Pour aller plus loin

1. Dans le cas où le traceur est biaisé, on pourra calculer les fluctuations de position du traceur, et étudier leur dépendance en la densité ρ et la probabilité de saut vers la droite p_1.
2. On définit la variable aléatoire $\eta_x(t)$, qui vaut 0 si le site x est vide à l'instant t et 1 s'il est occupé (on prend pour convention $\eta_{X(t)} = 0$). On définit $\phi(r, t) = \langle \eta_{X(t)+r}(t) \rangle$. Que représente $\phi(r, t)$ physiquement ? Tracer ces fonctions pour différents paramètres et à différents temps. Comment dépendent-elles du temps ?