

Outils, modélisation et simulation en calcul numérique – Corrigé série 6

26 avril 2005

**Exercice 1.**

Les collisions possibles du modèle FHP sont représentées par les Figs. 1 et 2.

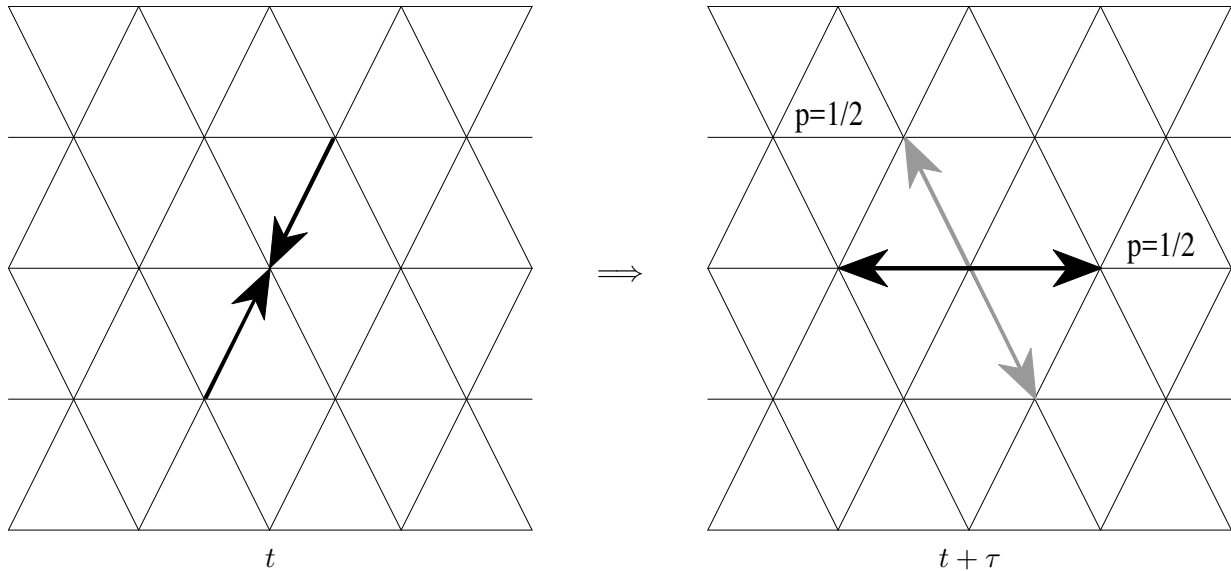


FIG. 1 – Collision à deux corps dans le modèle FHP. L'image de droite représente les deux possibles configurations de sortie en noir et gris foncé respectivement. Elles sont choisies avec probabilité 1/2.

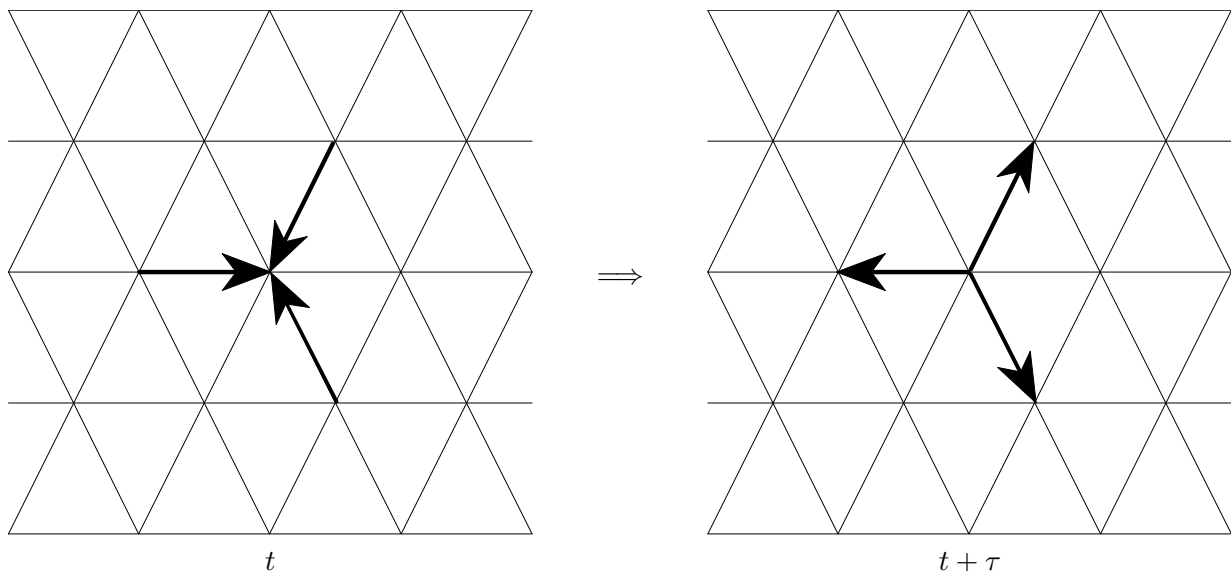


FIG. 2 – Collision à trois corps dans le modèle FHP.

Sans interaction entre particules, les équations d'évolution décrivant le mouvement libre de  $n_i$  sont données par

$$n_i(\mathbf{r} + \lambda \mathbf{c}_i, t + \tau) = n_i(\mathbf{r}, t). \quad (1)$$

En effet, une particule entrant au site  $\mathbf{r}$  selon la direction  $\mathbf{c}_i$  poursuit sa trajectoire de façon à entrer au temps  $t + \tau$  dans le site  $\mathbf{r} + \lambda\mathbf{c}_i$  avec la même direction de propagation. Il est ensuite nécessaire de décrire les collisions représentées par les Figs. 1 et 2 pour permettre des modifications de la direction de propagation.

Par exemple, supposons que seuls  $n_i$  et  $n_{i+3}$  soient différents de 0 au site  $\mathbf{r}$  [pour alléger l'écriture on note  $n_i = n_i(\mathbf{r}, t)$ ]. Il y a alors une collision, et la particule de vitesse  $\mathbf{v}_i$  aura la vitesse  $\mathbf{v}_{i\pm 1}$ . Chacun de ces deux états finaux est sélectionné avec probabilité 1/2, et les opérations sur les indices sont réalisées modulo 6. Ainsi, lorsque la quantité

$$D_i = n_i n_{i+3} (1 - n_{i+1}) (1 - n_{i+2}) (1 - n_{i+4}) (1 - n_{i+5}) \in \{0, 1\} \quad (2)$$

est égale à 1 une telle collision se produit. Par conséquent,

$$-D_i \quad (3)$$

donne le nombre de particules ne se propageant plus dans la direction  $\mathbf{c}_i$  à cause de telles collisions.

D'autre part, supposons à présent que  $n_i = 0$ . Une nouvelle particule peut alors apparaître dans la direction  $\mathbf{c}_i$  à la suite d'une collision entre deux particules en  $n_{i+1}$  et  $n_{i+4}$ , ou bien deux particules en  $n_{i-1}$  et  $n_{i+2}$ . Introduisons la variable  $q(\mathbf{r}, t) \in \{0, 1\}$  qui décrit si lors d'une telle collision binaire une particule est déviée vers la droite ( $q = 1$ ) ou vers la gauche ( $q = 0$ ). Le nombre de particules créées dans la direction  $\mathbf{c}_i$  est alors

$$qD_{i-1} + (1 - q)D_{i+1}. \quad (4)$$

Enfin, des particules peuvent aussi être ajoutées ou enlevées de la direction de propagation  $\mathbf{c}_i$  par l'effet des collisions à 3 corps. La grandeur

$$T_i = n_i n_{i+2} n_{i+4} (1 - n_{i+1}) (1 - n_{i+3}) (1 - n_{i+5}) \in \{0, 1\} \quad (5)$$

est égale à 1 si une telle collision se produit. Ainsi,

$$-T_i \quad (6)$$

donne le nombre de particules ne se propageant plus dans la direction  $\mathbf{c}_i$  à cause de telles collisions, et

$$T_{i+3} \quad (7)$$

donne le nombre de particules créées dans la direction  $\mathbf{c}_i$  à cause de telles collisions.

En insérant les Eqs. (3), (4), (6), et (7) dans l'Eq. (1) on obtient finalement l'expression de la microdynamique du modèle de FHP :

$$n_i(\mathbf{r} + \lambda\mathbf{c}_i, t + \tau) = n_i(\mathbf{r}, t) - D_i + qD_{i-1} + (1 - q)D_{i+1} - T_i + T_{i+3}. \quad (8)$$

On voit que cette dynamique n'est pas réversible dans le temps à cause de la présence de la variable aléatoire  $q(\mathbf{r}, t)$ .

### Exercice 2.

Il faut s'assurer que le nombre de particules (ou la quantité de mouvement, ou l'énergie) sortant du site après collision est identique au nombre de particules (ou la quantité de mouvement, ou l'énergie) entrant dans ce site avant collision. Notons

$$n_i^{\text{out}} = n_i^{\text{in}} + \Omega_i (\{n_j^{\text{in}}\}_{j=1}^6). \quad (9)$$

i) Nombre de particules : il faut vérifier que

$$\sum_{i=1}^6 n_i^{\text{out}} = \sum_{i=1}^6 n_i^{\text{in}}, \quad (10)$$

et donc que

$$\sum_{i=1}^6 \Omega_i (\{n_j^{\text{in}}\}_{j=1}^6) = 0. \quad (11)$$

En utilisant les résultats de l'exercice 1, cela revient à vérifier

$$\sum_{i=1}^6 [-D_i + qD_{i-1} + (1-q)D_{i+1} - T_i + T_{i+3}] = 0. \quad (12)$$

Ceci se vérifie aisément en modifiant les indices de sommation. On a

$$\sum_{i=1}^6 T_{i+3} \stackrel{j=i+3}{=} \sum_{j=4}^{6+3} T_{(j \bmod 6)+1} = \sum_{j=1}^6 T_j = \sum_{i=1}^6 T_i, \quad (13)$$

et de façon similaire

$$\sum_{i=1}^6 (-D_i + qD_{i-1}) = -\sum_{i=1}^6 (1-q)D_{i-1} = -\sum_{i=1}^6 (1-q)D_i. \quad (14)$$

En substituant les relations (13) et (14) dans (12) on obtient bien le résultat cherché.

ii) Energie : comme  $\mathbf{v}_i^2 = cte \forall i$  est constante, la conservation de l'énergie est une conséquence triviale de la conservation du nombre de particules.

iii) Quantité de mouvement : il faut vérifier que

$$\sum_{i=1}^6 n_i^{\text{out}} \mathbf{v}_i = \sum_{i=1}^6 n_i^{\text{in}} \mathbf{v}_i, \quad (15)$$

et donc que

$$\sum_{i=1}^6 \Omega_i (\{n_j^{\text{in}}\}_{j=1}^6) \mathbf{v}_i = 0. \quad (16)$$

A nouveau, en utilisant les résultats de l'exercice 1 cela revient à vérifier

$$\sum_{i=1}^6 [-D_i \mathbf{v}_i + qD_{i-1} \mathbf{v}_i + (1-q)D_{i+1} \mathbf{v}_i - T_i \mathbf{v}_i + T_{i+3} \mathbf{v}_i] = 0. \quad (17)$$

On a de plus les relations  $\mathbf{v}_{i+k} = \mathbf{v}_{i+\{(k+1)\bmod 6\}} + \mathbf{v}_{i+\{(k-1)\bmod 6\}}$ , c'est-à-dire

$$\mathbf{v}_{i+1} = \mathbf{v}_{i+2} + \mathbf{v}_i, \quad (18)$$

$$\mathbf{v}_{i+2} = \mathbf{v}_{i+3} + \mathbf{v}_{i+1}, \quad (19)$$

$$\mathbf{v}_{i+3} = \mathbf{v}_{i+4} + \mathbf{v}_{i+2} = -\mathbf{v}_i, \quad (20)$$

$$\mathbf{v}_{i+4} = \mathbf{v}_{i+5} + \mathbf{v}_{i+3}, \quad (21)$$

$$\mathbf{v}_{i+5} = \mathbf{v}_i + \mathbf{v}_{i+4}. \quad (22)$$

En utilisant ces relations ainsi que des manipulations algébriques similaires à celles du point i) on vérifie l'Eq. (17). Cette vérification ne présente aucune difficulté technique, mais se révèle être par contre calculatoirement longue. C'est pourquoi nous ne présentons pas plus de détails.

### Exercice 3.

Il suffit de modifier le programme HPP de la série 5. Programme Matlab :

```
clear;
N=500; %size of the system NxN
density=0.8; %initial average density
tmax=5*N; %stops when tmax iterations reached
Nplot=1; %plot every Nplot iterations (speed)
black=[1 1 1]; %black-white-map
white=[0 0 0];
bcmap(1,:)=black;
bcmap(2,:)=white;
colormap(bcmap);
geometry=zeros(N,N,4); %creates the geometry (boundaries)
geometry(1:N,1,1)=1;
geometry(1,1:N/2-5,4)=1;
geometry(1:N/2-5,N/2-5,3)=1;
geometry(N/2-5,N/2-5:N/2+5,4)=1;
geometry(1:N/2-5,N/2+5,1)=1;
geometry(1,N/2+5:N,4)=1;
geometry(1:N,N,3)=1;
geometry(N,N/2+5:N,2)=1;
geometry(N/2+5:N,N/2+5,1)=1;
geometry(N/2+5,N/2-5:N/2+5,2)=1;
geometry(N/2+5:N,N/2-5,3)=1;
geometry(N,1:N/2-5,2)=1;
lattice=zeros(N); %random initial conditions
for i=2:N-1 %on average, density particles
    for j=2:N/2-6
        if (rand(1,1) < density),lattice(i,j)=2^(floor(rand(1,1)*4));end
    end
end
l=[N 1:N-1]; %array: N,1,2,...,N-1
r=[2:N 1]; %array: 2,3,4,...,N,1
for t=1:tmax %time loop
    i = find(lattice == 5); %collision
```

```

j = find(lattice == 10);
lattice(i)=10;
lattice(j)=5;
bin=zeros(N,N,4); %binary decomposition
for i=1:N
    for j=1:N
        d1 = lattice(i,j);
        for k=0:3
            nn=3-k;
            d2 = 2^nn;
            if (d1-d2 >= 0)
                d1 = d1-d2;
                bin(i,j,nn+1)=1;
            end
        end
    end
end
for i=1:N %geometry: bounce back
    for j=1:N
        for k=1:4
            if ((bin(i,j,k)==geometry(i,j,k)) & (geometry(i,j,k)==1))
                bin(i,j,k)=0;
                bin(i,j,mod(k+1,4)+1)=1;
            end
        end
    end
end
bin(:, :, 1)=bin(:, r, 1); %propagation
bin(:, :, 2)=bin(1, :, 2);
bin(:, :, 3)=bin(:, 1, 3);
bin(:, :, 4)=bin(r, :, 4);
for i=1:N %decimal recomposition
    for j=1:N
        lattice(i,j)=bin(i,j,1)+2*bin(i,j,2)+4*bin(i,j,3)+8*bin(i,j,4);
    end
end
if (mod(t,Nplot)==0) %plot
    geo=zeros(N);
    for i=1:4
        j = find(geometry(:, :, i) == 1);
        geo(j)=1;
    end
    imagesc(lattice+geo>0);
    axis square off;
    drawnow
end
end

```

La Fig. 3 représente l'état du système pour trois temps distincts  $t_0 < t_1 < t_2$ .

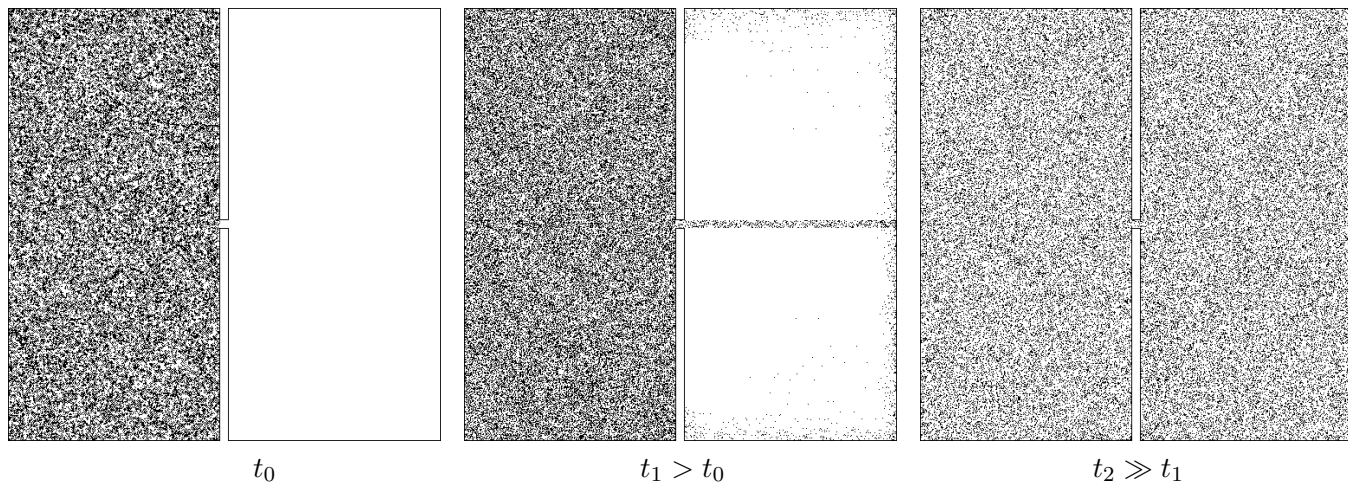


FIG. 2 – Automate cellulaire HPP avec conditions aux bords. Taille du système :  $N = 500$ .

Une animation correspondante se trouve à l'adresse

<http://cui.unige.ch/~chopard/CA/Animations/HPP/hpp-forward.html>

#### Exercice 4.

Lorsque la quantité

$$B_i = n_i n_{i+2} (1 - n_{i+1}) (1 - n_{i+3}) \quad (23)$$

est égale à 1, une collision se produit et les vitesses finales sont orientées dans les directions  $\mathbf{c}_{i+1}$  et  $\mathbf{c}_{i+3}$ . Par conséquent

$$-B_i \quad (24)$$

donne le nombre de particules ne se propageant plus dans la direction  $\mathbf{c}_i$  à cause de telles collisions. D'autre part, une nouvelle particule peut apparaître dans la direction  $\mathbf{c}_i$  suite à une collision entre deux particules en  $n_{i+1}$  et  $n_{i+3}$ . Ainsi,

$$B_{i+1} \quad (25)$$

donne le nombre de particules créées dans la direction  $\mathbf{c}_i$  à cause de telles collisions. La microdynamique HPP s'écrit donc :

$$n_i(\mathbf{r} + \lambda \mathbf{c}_i, t + \tau) = n_i(\mathbf{r}, t) + \Omega_i, \quad (26)$$

où

$$\Omega_i = B_{i+1} - B_i. \quad (27)$$

Soit l'opérateur de renversement du temps  $R$  (ou de renversement des vitesses, ce qui est équivalent dans ce contexte) dont l'action est définie par

$$Rn_i = n_{i+2}. \quad (28)$$

Le système est alors réversible si en renversant la direction des particules sortantes  $n_i^{\text{out}}$  et en les faisant interagir par la règle de collision on retrouve la configuration entrante mais avec vitesses opposées. Il faut ainsi vérifier que

$$Rn_i^{\text{out}} + \Omega_i(Rn^{\text{out}}) = Rn_i^{\text{in}}. \quad (29)$$

Pour cela, il est nécessaire d'exprimer le membre de gauche de l'Eq. (29) en fonction de  $n_i^{\text{in}}$ . Les particules  $n_i^{\text{out}}$  sont données par la microdynamique (26), i.e.,

$$\begin{aligned} n_i^{\text{out}} &= n_i^{\text{in}} + \Omega_i \\ &= n_i^{\text{in}} + \underbrace{n_{i+1}^{\text{in}} n_{i+3}^{\text{in}} (1 - n_{i+4}^{\text{in}}) (1 - n_i^{\text{in}})}_{=B_{i+1}^{\text{in}}} - \underbrace{n_i^{\text{in}} n_{i+2}^{\text{in}} (1 - n_{i+3}^{\text{in}}) (1 - n_{i+4}^{\text{in}})}_{=B_i^{\text{in}}}. \end{aligned} \quad (30)$$

Ainsi

$$\begin{aligned} Rn_i^{\text{out}} &= Rn_i^{\text{in}} + R\Omega_i \\ &= n_{i+2}^{\text{in}} + RB_{i+1}^{\text{in}} - RB_i^{\text{in}} \\ &= n_{i+2}^{\text{in}} + B_{i+3}^{\text{in}} - B_{i+2}^{\text{in}}, \end{aligned} \quad (31)$$

et

$$\begin{aligned} \Omega_i(Rn^{\text{out}}) &= B_{i+1}(Rn^{\text{out}}) - B_i(Rn^{\text{out}}) \\ &= B_{i+1} \left( \{n'_j(n^{\text{in}})\}_{j=1}^4 \right) - B_i \left( \{n'_j(n^{\text{in}})\}_{j=1}^4 \right), \end{aligned} \quad (32)$$

où

$$n'_j(n^{\text{in}}) = Rn_j^{\text{out}} = n_{j+2}^{\text{in}} + B_{j+3}^{\text{in}} - B_{j+2}^{\text{in}}, \quad j = 1, \dots, 4. \quad (33)$$

Les Eqs. (31) à (33) dans (29) donnent, en faisant usage de  $Rn_i^{\text{in}} = n_{i+2}^{\text{in}}$  :

$$n_{i+2}^{\text{in}} + B_{i+3}^{\text{in}} - B_{i+2}^{\text{in}} + B_{i+1} \left( \{n'_j(n^{\text{in}})\}_{i=1}^4 \right) - B_i \left( \{n'_j(n^{\text{in}})\}_{i=1}^4 \right) = n_{i+2}^{\text{in}}, \quad (34)$$

c'est-à-dire qu'il faut vérifier la relation

$$B_{i+3}^{\text{in}} - B_{i+1}^{\text{in}} + B_{i+1} \left( \{n'_j(n^{\text{in}})\}_{j=1}^4 \right) - B_i \left( \{n'_j(n^{\text{in}})\}_{j=1}^4 \right) = 0. \quad (35)$$

La vérification de la relation (35) ne présente aucune difficulté technique, mais se révèle être par contre calculatoirement longue. C'est pourquoi nous ne présentons pas plus de détails.