Système hors équilibre : Modèle de diffusion-coagulation

Références

[1] Haye Hinrichsen, *Non-equilibrium critical phenomena and phase transitions into absorbing states*, Advances in Physics, **49** (7) (2000), 815

1 Modèle de diffusion-coagulation

Sur un réseau unidimensionnel de L sites avec des conditions aux limites périodiques, on place aléatoirement à l'instant $t = 0$ $N < L$ particules notées A. Une particule peut sauter avec la même probabilité à droite ou à gauche sur un site voisin. Si le site est vide, la particule occupe le site et libère son site d'origine, si le site est occupé, la particule "coagule" avec la particule présente pour donner une seule particule : $A + A \to A$.

▷ **1-1** En générant cette dynamique, quel est l'état final du système ? En déduire la densité finale $\rho_L(\infty)$. Que vaut cette densité quand $L \to \infty$?

▷ **1-2** On veut faire la simulation numérique de ce modèle stochastique avec une dynamique séquentielle. Proposer un algorithme permettant d'étudier ce modèle sur un réseau de taille L.

▷ **1-3** Est-ce que l'algorithme proposé vérifie le bilan détaillé ?

On note $P(l,t)$ la probabilité qu'un intervalle de l sites, choisi arbitrairement à l'instant t, ne contienne aucune particule.

▷ **1-4** Exprimer la probabilité $Q(l,t)$ de trouver une particule sur au moins l'un des deux sites bordant un intervalle vide de longueur l en fonction de $P(l,t)$ et $P(l+1,t)$.

▷ **1-5** Montrer que l'évolution de la probabilité $P(l,t)$ est donnée par l'équation différentielle suivante :

$$\frac{\partial P(l,t)}{\partial t} = Q(l-1,t) - Q(l,t).$$

▷ **1-6** Exprimer la densité de particules $\rho(t)$ sur le réseau en fonction de $P(0,t)$ et $P(1,t)$. Que vaut $P(0,t)$?

▷ **1-7** En passant à la limite continue, c'est-à-dire en posant

$$P(l+1,t) = P(l,t) + \frac{\partial P(l,t)}{\partial l} + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 P(l,t)}{\partial l^2} + ...,$$

montrer que l'on obtient l'équation différentielle suivante :

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

et que

$$\rho(t) = -\frac{\partial P(l,t)}{\partial l}\Big|_{l=0}.$$

▷ **1-8** Vérifier que $1 - erf(\frac{l}{2\sqrt{t}})$ est une solution pour $P(l,t)$ dans la limite continue, où erf est la fonction erreur ($erf(x) = \frac{2}{\pi}\int_0^x dt\, exp(-t^2)$). En déduire la densité $\rho(t)$.

2 Approche de champ moyen

On considère maintenant une approche de champ moyen pour étudier la dynamique du modèle de diffusion-coagulation. On suppose alors que le processus de coagulation ($A + A \rightarrow A$) a lieu avec une fréquence proportionnelle à $\lambda\rho^2(t)$, où λ est une constante de réaction. En négligeant le processus de diffusion, la dynamique du système est donnée par :

$$\frac{\partial\rho(t)}{\partial t} = -\lambda\rho^2(t)$$

▷ **2-1** Résoudre cette équation différentielle et comparer avec le résultat exact obtenu dans la première partie. Quelle est l'origine de la différence ?