

# Projets d'informatique

## Module d'informatique – L3 ENS Lyon

Les projets d'informatique seront réalisés en binôme. Chaque binôme devra avoir choisi un sujet **avant** la première séance. Quatre séances « de TD » de 2h permettront aux enseignants de vous aider et de répondre à vos questions. Cependant, le travail que l'on attend de vous ne pourra pas se limiter à ces séances.

Pour indication, il faut :

- pour la 1<sup>ère</sup> séance, que vous ayez réfléchi à comment aborder le problème
- pour la 2<sup>ème</sup> séance, que vous ayez défini la structure du programme (routines, fonctions...) et que vous ayez commencé à coder
- pour la 3<sup>ème</sup> séance, que le code soit terminé et opérant
- pour la 4<sup>ème</sup> séance au plus tard, que vous obteniez des résultats.

Les sujets proposés sont vastes et il ne vous est pas demandé d'explorer toutes les pistes mais vous n'êtes pas non plus limités à nos suggestions. Les différents sujets sont de difficulté variable et l'évaluation en tiendra compte (les étoiles après le titre du sujet indiquent sa difficulté). Les élèves qui le souhaiteraient peuvent également proposer un sujet, à faire valider par l'enseignant lors de la première séance. L'utilisation des bibliothèques externes est autorisée et même recommandée.

L'évaluation portera sur :

1. l'analyse et l'élaboration du projet au cours des séances d'étude,
2. un rapport écrit comprenant une brève analyse du problème, une présentation des méthodes numériques et une analyse critique détaillée des résultats,
3. une soutenance orale en binôme (10 min d'exposé et 5 min de questions).

La forme du rapport est libre (latex préféré, word possible pour les réfractaires) et il comprendra au maximum 10 pages, sans annexes. Il sera soumis **au format PDF** par mail à [Nicolas.Taberlet@ens-lyon.fr](mailto:Nicolas.Taberlet@ens-lyon.fr) et un exemplaire papier relié sera déposé au secrétariat DSM, le tout au plus tard le **Jeudi 17 Décembre à midi**. Le programme (commenté) sera envoyé par mail à la même adresse.

Les soutenances orales auront lieu dans l'après-midi du **Jeudi 7 Janvier**.

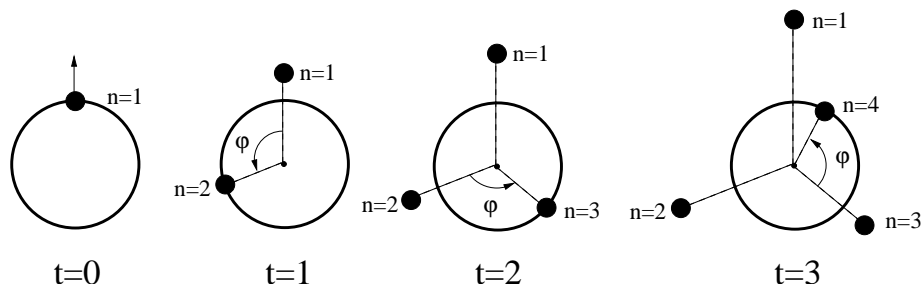
## 1. Spirales végétales \*\*



Dans le monde végétal, de nombreuses espèces présentent des structures régulières. L'étude de la répartition des éléments botaniques (feuilles, écailles, graines, pétales...) sur un végétal est nommée phyllotaxie. La croissance est bien entendue en partie déterminée par le code génétique de la plante mais certaines structures se retrouvent chez des espèces très diverses ce qui suggère que d'autres facteurs entrent en jeu. C'est en particulier le cas des structures spiralées (voir figures).

De nombreuses espèces présentent une structure complexe faite des deux réseaux imbriqués de spirales ou d'hélices tournant en sens opposés. De plus, les nombres de spirales gauches et droites sont toujours deux termes consécutifs de la suite de Fibonacci (liée au nombre d'or). Certains y voient une signification paranormale ou métaphysique mais un modèle physique simple a pu montrer que cette structure n'est pas déterminée par l'ADN, mais par des règles très simples de croissance et d'encombrement.

Dans un végétal, un embryon de feuille (ou graine, écaille...) apparaît en périphérie d'un noyau, appelé apex, situé au cœur du bourgeon. Il migre ensuite radialement et à vitesse constante vers l'extérieur du bourgeon et un nouvel embryon naît. Dans notre modèle, nous supposons que les feuilles naissent à intervalles de temps réguliers. La question est de savoir où.

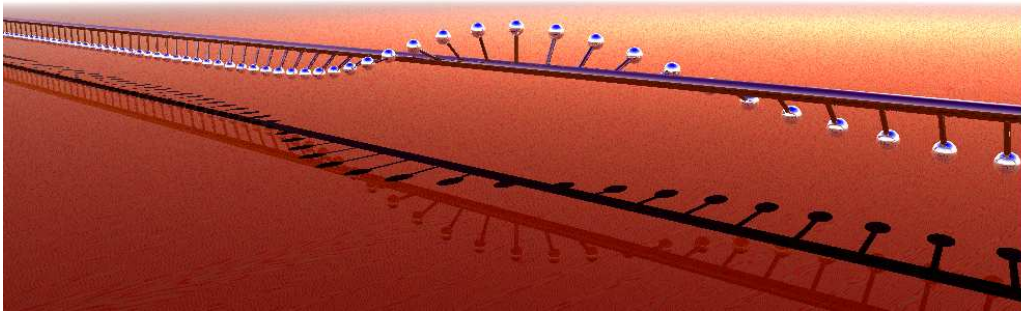


Dans un premier temps, on supposera que les feuilles se répartissent autour de l'apex avec un angle  $\phi$  constant (voir figure). On cherchera à produire différents motifs pour diverses valeurs de  $\phi$ , de la vitesse radiale, du rayon de l'apex ou de la période de naissance des feuilles. On pourra étudier entre autres les cas  $\phi=180^\circ$ ,  $\phi=90^\circ$  et  $\phi=137.5^\circ$  (pourquoi cette valeur ?).

**Dans un deuxième temps**, on ne supposera plus que  $\phi$  est constant. L'angle d'apparition d'une feuille  $n$  sera déterminé par la position des  $n-1$  feuilles déjà existantes : on choisira l'emplacement le moins encombré. Pour ce faire, on introduira un potentiel répulsif entre les feuilles et on placera le nouvel embryon à l'endroit de la périphérie de l'apex où le potentiel est minimal. Etudier ce modèle. Montrer que sous certaines conditions, l'angle  $\phi$  est constant. Comment  $\phi$  varie-t-il avec le rayon de l'apex, la période des naissances ou la vitesse de migration ? Quand observe-t-on un mode de croissance alterné ? Que se passe-t-il si la vitesse d'éloignement augmente dans le temps pour une même plante ou fleur (ce qui se produit lors de la floraison) ? Sous quelles conditions retrouve-t-on la valeur  $\phi=137.5^\circ$  ?

## 2. Solitons dans une chaîne d'oscillateurs couplés \*\*\*

On considère un câble sous tension auquel sont rigidement et régulièrement attachés des pendules. Les pendules sont couplés grâce au câble (à travers sa constante de torsion). Dans un tel système on peut observer une large gamme de phénomènes ondulatoires. Le but de cet projet est d'étudier une solution très particulière : le soliton.



Imaginons qu'une des extrémités du câble est attachée à une manivelle qui peut tourner librement. Il est alors possible de donner une impulsion au système en faisant un tour rapide ce qui déclenche la propagation d'un soliton. Dans ce projet, on considérera les pendules individuellement. Il n'est pas demandé de passer au modèle continu et de résoudre l'équation obtenue. Pour chaque pendule  $n$ , l'équation d'évolution s'écrit :

$$d^2\theta_n/dt^2 = \alpha \sin(\theta_n) + \beta (\theta_{n+1} + \theta_{n-1} - 2\theta_n)$$

où  $\alpha$  et  $\beta$  sont des paramètres à déterminer.

On résoudra cette équation pour chaque pendule.

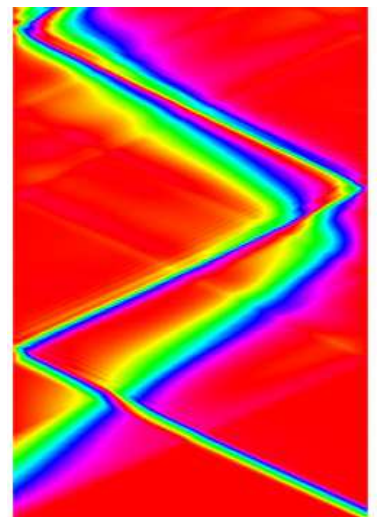
En donnant un « tour de manivelle numérique », on essaiera d'obtenir la solution soliton. On cherchera en particulier à fitter la solution par une équation du type :

$\theta_n = a \tan^{-1}(\exp(b(n-n_0)))$ , où  $a$ ,  $b$ , et  $n_0$  sont des paramètres à déterminer.

De très nombreuses questions se posent (il ne vous est pas demandé de répondre à chacune d'entre elle):

Est-il toujours possible d'obtenir un soliton ? Sa vitesse est-elle constante ? Le soliton conserve-t-il sa forme ? Que se passe-t-il avec des pendules plus lourds ? ou plus rapprochés ? avec un câble plus rigide ? avec un frottement ? Comment le soliton se réfléchit-il si l'extrémité du câble est rigidement fixée ? et si elle tourne librement ? Dans ce système, le soliton est chiral. En effet, on peut tourner la manivelle à gauche ou à droite. Un anti-soliton a-t-il les mêmes propriétés (taille, vitesse, énergie) qu'un soliton ?

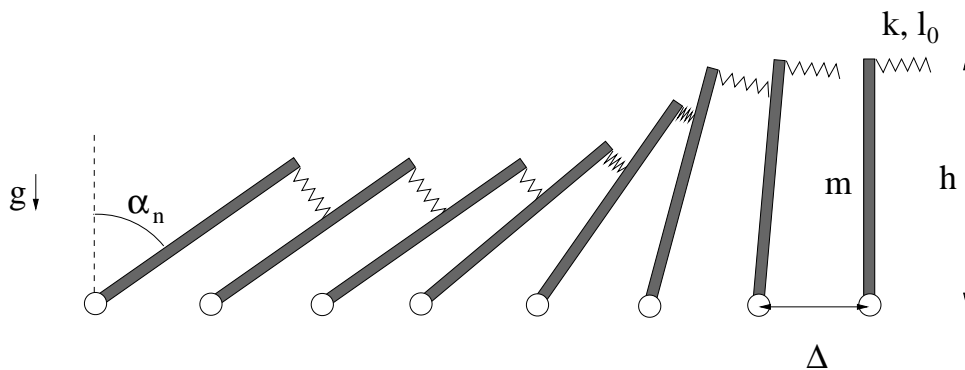
Si on place une manivelle à chaque extrémité, on peut faire se collisionner des solitons. Cette étude est très intéressante et pleine de surprises. Que se passe-t-il lors de la collision de deux solitons ? Et entre un soliton et un anti-soliton ?



### 3. Chaîne de dominos \*\*

On cherche à modéliser la propagation d'une « onde de chute » dans une chaîne de dominos. Les dominos pourront être modélisés par une tige de longueur  $h$ , d'épaisseur négligeable et de masse  $m$  qui pivote autour de sa base. Un ressort de masse négligeable et de longueur à vide  $l_0$  est placé au sommet du domino. On pourra également rajouter une force de dissipation visqueuse, soit sur le ressort, soit sur le mouvement des dominos (en modélisant par exemple le frottement dû à l'air). On utilisera des relations géométriques pour déterminer si deux dominos sont en contact et le cas échéant, pour calculer la force qu'exerce le ressort. On pourra alors intégrer numériquement l'équation mécanique associée à chaque domino.

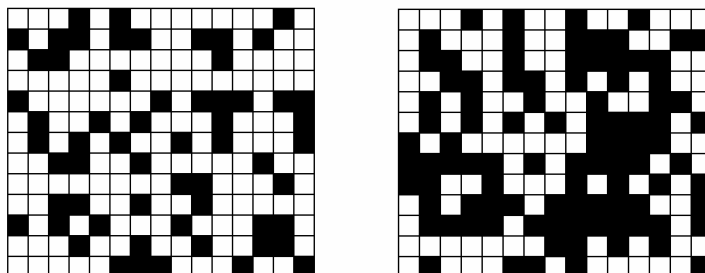
On pourra étudier de nombreuses questions : le système atteint-il un régime permanent où la vitesse de propagation reste constante ? Est-ce que cette vitesse dépend de l'impulsion initiale ? Comment varie-t-elle avec  $m$ ,  $h$ ,  $\Delta$  ? Comment la dissipation modifie-t-elle ces résultats ?



### 4. Percolation \*

Ce sujet propose d'étudier le phénomène de percolation. La percolation est un processus physique qui décrit pour un système, une transition d'un état vers un autre. Le système que nous étudierons est composé ici d'une grille carrée dont les cases sont soit vides, soit pleines. Initialement, la matrice est vide et l'on tire aléatoirement une case que l'on remplit. On définit la concentration comme le rapport du nombre de cases noires sur le nombre total de cases.

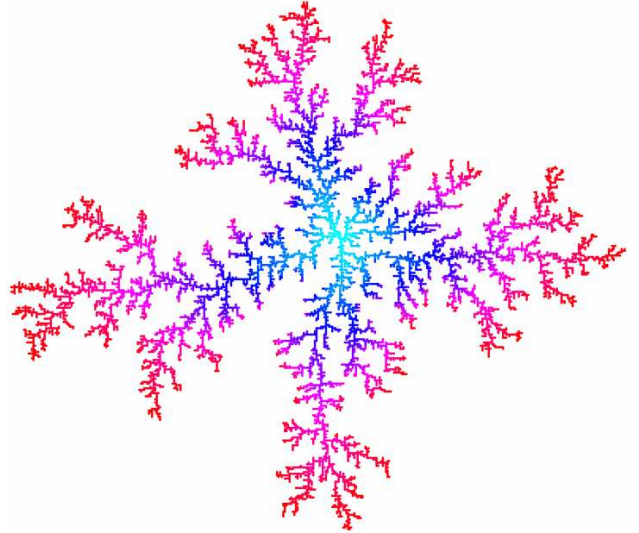
À partir d'une certaine concentration critique un chemin continu de cases noires s'établit entre deux bords opposés du système (haut et bas, ou gauche et droite) et on dit alors que le système percole. Le but du sujet est d'étudier la transition d'un système qui ne percole pas (à gauche sur la figure) vers un système qui percole (à droite). Pour ce faire, on établira un algorithme qui pour une configuration donnée détermine si le réseau de cases noires percole ou non. On étudiera également la taille et le nombre des amas de cases noires en fonction de la concentration. On étudiera aussi les effets de la taille du système.



Cette étude repose sur un tirage pseudo aléatoire et pas conséquent nécessite un traitement statistique. On ne pourra pas se contenter d'étudier un cas particulier mais on prendra soin au contraire d'effectuer des moyennes sur un très grand nombre de tirages (plusieurs centaines).

## 5. Formation d'agrégats \*

Le but de ce projet est d'étudier la formation d'agrégats de particules diffusantes. Pour cela, on prendra une grille au centre de laquelle on place une particule. On fait ensuite effectuer une marche aléatoire à une deuxième particule sur le réseau. Si cette particule vient toucher la première elle s'y colle. On recommence alors le processus avec une troisième particule. Remarque : si une particule s'éloigne trop, on peut l'abandonner.



La marche aléatoire pourra être réalisée sur un réseau carré de la façon suivante :

On place un grain en  $(i,j)$

On tire au sort une direction (E, N, W, S)

La particule avance d'un pas dans cette direction.

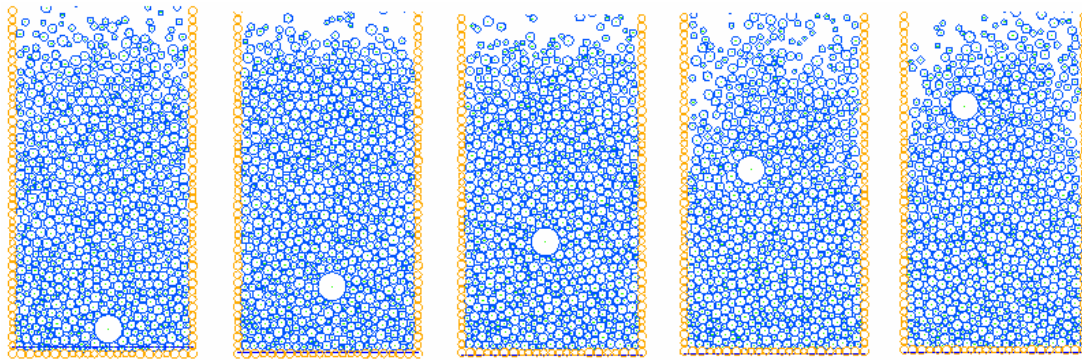
On pourra étudier le cas 2D ou 3D. On pourra faire varier les paramètres de la marche aléatoire (par exemple choisir une direction parmi 8, ou effectuer un saut d'une longueur aléatoire). On cherchera à étudier la forme de l'agrégat obtenu, la vitesse de croissance. Y a-t-il des directions privilégiées pour la croissance ? Les branches poussent-elles simultanément ? Les agrégats obtenus sont-ils fractals (justifier) ? On pourra calculer leur dimension fractale. On pourra également placer plusieurs particules initiales sur le réseau.

## 6. Ségrégation par taille dans un milieu granulaire vibré \*\*\*\*

On appelle matériau granulaire toute assemblée de grains indépendants. Cette dénomination rassemble des matériaux aussi différents qu'un sac de ciment, tas de sable, un paquet de riz, les avalanches rochers ou les nuages d'astéroïdes. Le comportement de ces matériaux est très riche et beaucoup d'aspects sont aujourd'hui encore mal compris. L'un des phénomènes les plus surprenants est la tendance que possède un mélange de grains à s'auto trier. En effet, si l'on place du sel et du poivre dans un tube horizontal que l'on fait tourner autour de son axe, on observe une séparation des deux espèces. Ce phénomène est appelé ségrégation et existe sous de nombreuses formes.

Le but de ce projet est d'étudier la ségrégation par taille dans un milieu granulaire soumis à des vibrations répétées. On place une bille d'un diamètre important au fond d'un récipient puis on le remplit de billes plus petites. Le récipient est ensuite soumis à des vibrations (par exemple sinusoïdales). La figure ci-dessous montre qu'au cours du temps, la grosse bille remonte à la surface.

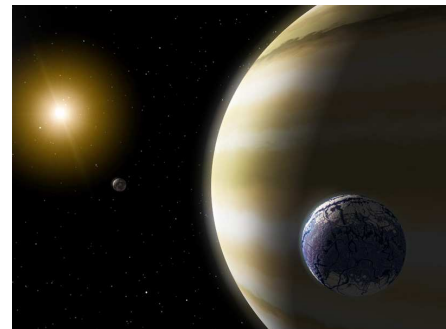




On cherchera donc à reproduire ce phénomène. Les grains interagissent entre eux par chocs inélastiques. Lors d'une collision, deux grains se déforment. La force qu'ils exercent l'un sur l'autre est alors proportionnelle à la déformation (en d'autres termes, les grains agissent comme des ressorts). Les grains seront ici modélisés par des disques non déformables et la « déformation » sera calculée comme la distance entre les centres à laquelle on soustrait un diamètre. Les murs seront constitués de grains collés (en jaune ci-dessus) et seront animés d'un mouvement sinusoïdal.

## 7. Mécanique céleste \*\*

Le but de ce projet est d'étudier numériquement la mécanique céleste. On se bornera ici à la mécanique du point, c'est-à-dire que l'on ne tiendra pas compte de la rotation des objets sur eux-mêmes. L'idée du projet est très simple : on se donne deux (ou plus) corps et on résout numériquement les équations du mouvement. On se limitera à une étude en 2D.

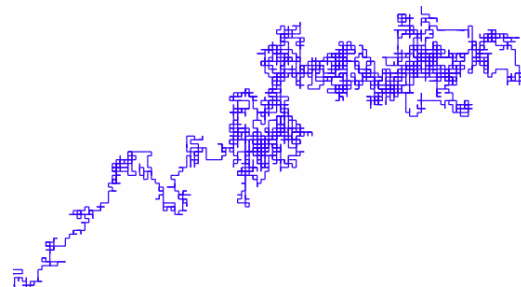


On pourra commencer par le cas simple de deux corps ayant des masses très différentes (la Terre et un satellite par exemple). On cherchera à obtenir les différents types de trajectoire (circulaire, elliptique, hyperbolique). On pourra chercher à mesurer la vitesse de libération. On vérifiera si l'énergie est conservée et si la loi de aires est vérifiée.

On pourra ensuite passer au problème plus complexe de deux satellites. Si on les place sur des orbites proches, comment interagissent-ils ? Le système est-il stable (i.e. Jupiter perturbe-t-elle les autres planètes) ? On pourra également étudier le problème à trois corps de masses proches. Peut-on trouver des trajectoires stables ?

## 8. Marche aléatoire en 2D \*

On considère  $N$  particules qui se déplacent de façon aléatoire sur une grille carrée. Deux particules ne peuvent pas être sur le même site, et on va appliquer des conditions limites périodiques (une particule sortant d'un côté est réintroduite de l'autre).



### Cas $N=1$

On définit le coefficient de diffusion comme  $D = \langle R^2(t) \rangle / 4t$ . Montrer que  $D$  est constante et mesurer sa valeur pour  $N=1$ .

Modifier le programme pour que la probabilité de bouger suivant  $x$  soit supérieure à la probabilité de bouger suivant  $y$ . Refaire les mesures et expliquer.

Modifier le programme en mettant les conditions aux limites périodiques seulement suivant  $x$ . Que se passe-t-il ?

Ajouter un certain nombre de particules « gelées » (c-à-d sites interdits). Etudier l'influence sur la diffusion.

### Cas $N>1$

Mesurer la diffusivité (coefficient de diffusion moyen) en fonction de la densité de particules  $\rho$ . A faible densité, on approxime la diffusivité par  $D = D_0 (1 - \rho)$ , où  $D_0$  est le coefficient de diffusion d'une particule seule. Cette loi est-elle vérifiée ?

## 9. Etats de diffusion pour l'équation de Schrödinger 1D stationnaire \*\*

On s'intéresse à la diffusion d'une particule de masse  $m$  à travers un potentiel carré défini par :

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & \text{pour } 0 \leq x \leq a \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

Les solutions de cette équation en dehors de la région où règne le potentiel sont connues. Les paramètres d'intégration de ces fonctions d'onde peuvent se déterminer par les relations de continuité aux frontières avec la région où règne le potentiel. En résolvant l'équation différentielle dans la région du potentiel pour  $x$  allant de  $a$  à  $0$  on peut obtenir une autre valeur pour ces paramètres d'intégration. Il faut ensuite appliquer un algorithme de minimisation pour déterminer les constantes d'intégration.

Les objectifs de ce projet sont :

- Ecrire un programme qui résolve l'équation de Schrödinger.
- En déduire les coefficients de transmission et de réflexion.

Bibliographie :

“A numerical method for quantum tunnelling”, Pang T., Computers in Physics, **9**, p 602-605.

## 10. Modèle d'inversion de la molécule d'ammoniac \*\*

Ce projet consiste à étudier l'effet « parapluie » dans la molécule d'ammoniac. On décrira le potentiel de cette molécule en fonction de la coordonnée d'inversion (retournement du parapluie), par une expression analytique donnant un potentiel en forme de W.

La hauteur de la barrière sera tout d'abord infinie, c'est-à-dire que les deux configurations d'équilibre de la molécule seront traitées comme des oscillateurs harmoniques indépendants. Si on abaisse la barrière, les deux oscillateurs deviennent couplés par effet tunnel, et on calculera l'effet de ce couplage sur la position des niveaux énergétiques de la molécule et sur les fonctions d'onde. La méthode consistera à évaluer le terme de couplage, construire la matrice hamiltonien dans la base des fonctions d'onde de l'oscillateur harmonique, et la diagonaliser. On pourra tester la pertinence de ce modèle en étudiant les effets de ce couplage en fonction de la hauteur de la barrière.

Bibliographie :

- Hollas, « Spectroscopie », Dunod, 1998, Chapitre 6.
- Atkins and Friedman, « Molecular Quantum Mechanics », Oxford University Press, 1997, Chapitre 10.