

FACULTÉ DES SCIENCES ET GÉNIE
DÉPARTEMENT DE PHYSIQUE, DE GÉNIE PHYSIQUE ET D'OPTIQUE
PHYSIQUE NUMÉRIQUE
PHY - 3500



MÉTHODES STOCHASTIQUES : MOUVEMENT BROWNIEN ET AGRÉGATION PAR DIFFUSION LIMITÉE

Travail présenté à monsieur Philippe Després

Par Mélissa CINQ-MARS
melissa.cinq-mars.1@ulaval.ca
111 179 946

Pierre-Olivier JANVIER
pierre-olivier.janvier.1@ulaval.ca
111 187 987

Maxence LAROSE
maxence.larose.1@ulaval.ca
111 188 447

Hiver 2021

Résumé

Les modèles de prédiction permettent d'évaluer l'évolution dans le temps au moyen de procédés stochastiques. Le mouvement brownien en est un exemple et est étudié à l'aide d'un algorithme qui simule le mouvement d'une particule sur une grille. La distance que parcourt une particule pour chacune des 10000 marches aléatoires en deux dimensions simulées s'exprime par une distribution de Rayleigh. Les distributions des distances parcourues répondent davantage aux attentes théoriques du mouvement brownien lorsque les particules effectuent des marches de 1000 pas que de 50 pas. Le modèle de l'agrégation par diffusion limitée (DLA) est simulé et des structures fractales sont obtenues lorsque la particule se déplace dans quatre directions et lorsqu'elle se déplace sur les diagonales en plus. Le nombre de particules placées sur la grille avant qu'une rejoigne le centre est de respectivement 6838 et 4464 lorsque la particule ne peut et peut se déplacer en diagonal. La version originale de la DLA est également simulée et les distances fractales calculées pour le déplacement d'une particule qui peut et ne peut pas aller en diagonale sont respectivement de 1.8 et 1.6. En définitive, au prix d'un long temps de calcul, plus le nombre de pas, la taille de la grille et les directions de déplacement possible sont élevés et plus les simulations répondent aux théoriques liés aux procédés stochastiques.

1 Introduction

Les procédés stochastiques sont utilisés dans de nombreux domaines tels que les finances, le météorologie, la médecine et bien d'autres. Ces derniers reposent sur les notions probabilistes dans le but déterminer l'évolution, en fonction du temps, d'une variable aléatoire. Le présent rapport a pour but de simuler le déplacement d'une particule confinée dans un réseau en deux dimensions qui se déplace aléatoirement dans quatre directions. Le mouvement brownien est caractérisé en déterminant la distance moyenne parcourue par la particule ainsi que son écart-type pour plusieurs simulations. L'algorithme a également pour but de simuler les modèles de l'agrégation par diffusion limitée et sa version originale. Les concepts théoriques pertinents à la simulation du mouvement brownien sont d'abord expliqués dans la section qui suit, les méthodes utilisées pour réaliser les algorithmes sont ensuite présentées et finalement, les résultats obtenus sont présentés et analysés.

2 Contexte théorique

Le mouvement brownien est un exemple de procédé stochastique qui permet de décrire le mouvement aléatoire d'une particule mésoscopique dans un gaz soumise à des collisions. Le mouvement effectué par les particules est nommé la marche aléatoire où, en deux dimensions, la position finale de la particule est décrite par une distribution de Rayleigh. La distance moyenne parcourue par une particule, soit la distance séparant sa position finale de sa position initiale est donnée par [1]

$$r_n = \sqrt{x_n^2 + y_n^2}. \quad (1)$$

La valeur moyenne quadratique est utilisée pour faire le calcul de la distance afin que tous les déplacements, positif ou négatif, de la particule soient comptabilisés dans le calcul de la distance moyenne parcourue. Cette dernière est donnée par [1]

$$\langle x_n^2 \rangle = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N x_{n,j}^2, \quad (2)$$

où N est le nombre de marche aléatoire et j est l'indice représentant chacune des marches. Sachant que la position finale de la particule est donnée par

$$x_n = \sum_{i=1}^n \delta_i, \quad (3)$$

où δ_i est la longueur du pas effectué, il est possible de prouver que la valeur moyenne quadratique de la distance parcourue est donnée par [1]

$$\text{RMS}(x_n) = \sqrt{n\delta^2} = \sqrt{n}\delta, \quad (4)$$

pour une marche aléatoire en une dimension. Pour une marche aléatoire en deux dimensions, la valeur moyenne quadratique est également donnée par

$$\sqrt{\langle r_n^2 \rangle} = \sqrt{\langle x_n^2 \rangle + \langle y_n^2 \rangle} = \sqrt{n}\delta \quad (5)$$

Dans le cas d'une marche aléatoire en une dimension, la distribution des distances parcourues par une particule, pour un nombre marches simulées $N \gg 1$, suit une distribution gaussienne centrée à 0. Dans le cas où la

marche aléatoire effectuée est en deux dimensions, la distribution des distances parcourues suit une distribution de Rayleigh. Sachant que la valeur théorique du paramètre σ est donnée par $\sigma = RMS/\sqrt{2}$, la valeur moyenne d'une distribution de probabilités de Rayleigh est [2]

$$E[x] = \sigma \sqrt{\frac{\pi}{2}},$$

et l'écart-type sur la distance moyenne parcourue obtenue par

$$\sqrt{Var(x)} = \sqrt{\sigma^2 \left(\frac{4 - \pi}{2} \right)}.$$

L'agrégation par diffusion limitée est un processus par lequel des particules sont soumises à une marche aléatoire due au mouvement brownien et qui, alors, se regroupent. Ce processus mène à l'apparition d'une figure nommée un arbre brownien. Ces derniers se forment d'abord avec un noyau qui est placé dans la grille à une position choisie, ensuite une seconde particule est placée à une position aléatoire dans la grille également, et finalement, cette dernière se déplace aléatoirement, selon un mouvement brownien, jusqu'à ce qu'elle heurte le noyau. Une fois que la particule a atteint la particule noyau, une nouvelle particule est placée à une position dans la grille et débute sa marche aléatoire en vue d'atteindre le noyau, et ainsi de suite. La dimension fractale permet de caractériser le déplacement d'une particule sous la forme d'un arbre brownien. Elle caractérise la façon qu'a un ensemble fractale à remplir un espace. Avec des structures finies telles que celles faites via DLA, la dimension fractale obtenue n'est valable que pour une gamme limitée de taille de grille. En pratique, les dimensions fractales sont déterminées par une régression sur une courbe des logarithmes de la grandeur sur l'échelle. Pour ce faire, on suppose qu'il existe une relation de loi de puissance entre le rayon du centre de la fractale r et la masse de la fractale dans ce rayon $M(r)$, qui correspond précisément au nombre de particules dans ce rayon donné. Cette relation est donnée par

$$M(r) = kr^d \tag{6}$$

$$\log(M(r)) = d \log(r) + c \tag{7}$$

où d est la dimension fractale et k et c sont des constantes arbitraires. Une régression permet simplement d'obtenir la valeur du paramètre d et de le comparer à la valeur théorique de la dimension fractale d'un DLA bidimensionnel généré par marche aléatoire, qui est de $1,69 \pm 0,02$ [3].

3 Méthodes

Afin de simplifier le développement du code lié au projet, le paradigme de programmation utilisé est la programmation orientée objet. Cela permet de séparer en blocs distincts les principales structures qui doivent être implémentées pour simuler les différents processus à l'étude. On sait que les algorithmes auront tous besoin d'une grille carrée en deux dimensions de $L \times L$ avec la possibilité d'ajouter des particules sur cette grille. De plus, on sait que ces particules peuvent se déplacer dans quatre directions aléatoirement et que leur comportement pourra dépendre des cellules adjacentes, par exemple, sur les côtés de la grille. On implémente donc une classe nommée **WalkersGrid** qui implémente ces fonctions de base. On y implémente par exemple une

méthode qui permet de définir l'état d'occupation d'une position sur la grille (*set_state*), une autre qui permet d'obtenir les positions adjacentes d'une position donnée sur la grille (*get_adjacent_positions*), une qui retourne aléatoirement l'une de ces positions adjacentes (*get_random_adjacent_position*) et plusieurs autres méthodes. Le but ici est d'utiliser le mécanisme de l'héritage pour que les classes des différents processus à l'étude héritent des caractéristiques de la classe de base **WalkersGrid**.

La section du code **animation** contient une classe nommée *Animation* qui contient différentes fonctions permettant de réaliser les animations des différents problèmes résolus. Tout d'abord, la classe contient la fonction *colormap* qui vient créer une palette de couleur avec laquelle les différents agrégats et mouvements seront illustrés. Cette palette de couleur est choisie afin d'offrir une large bande de couleur permettant alors de distinguer plusieurs éléments ou faits des illustrations réalisées. Ensuite, la classe contient la fonction *brownian_motion_animation* qui permet de prendre les différentes données de l'algorithme de mouvement brownien et d'animer les déplacements de la particule suivi lors de l'algorithme. L'animation fait alors usage de la palette de couleur afin d'indiquer les positions les plus fréquemment occupées par la particule. Finalement, la classe contient la fonction *DLA_animation* qui permet de prendre les différentes données des deux algorithmes d'agrégation par diffusion et d'animer la formation des agrégats. Dans ce cas, l'animation fait usage de la palette de couleur afin d'indiquer l'âge de la particule placée dans le ou les agrégats.

La section du code **theoretical_tools** regroupe les fonctions permettant de faire l'affichage de valeurs pertinentes extraites du mouvement brownien et des arbres browniens en diffusion limitée. La fonction *show_distance_distribution* permet de tracer un histogramme des distances parcourues pour un nombre de marches aléatoires (*number_of_walkers*) N . Les distances sont calculées, pour chaque marche simulée, à partir de l'équation 1, soit l'hypoténuse des différences en x et en y entre la position finale et la position initiale. Tel que mentionné à la section 2, les distances parcourues, pour un mouvement brownien en deux dimensions, suivent une distribution de Rayleigh. La fonction permet de déterminer les paramètres de la distribution de Rayleigh qui s'applique à l'histogramme des distances obtenues. À partir de cette distribution, il est possible d'extraire la valeur RMS ainsi que le paramètre σ expérimental et de les comparer avec les valeurs théoriques qui s'appliquent aux conditions du mouvement brownien effectué. Ces distributions sont obtenues pour un nombre de marches aléatoires fixé à 10 000 et pour différents nombre de pas (*nb_steps*) effectués lors de chaque marche. La section **theoretical_tools** regroupe également une fonction *plot_2d_displacement* qui permet d'afficher la position finale de la particule, en x et en y , d'un nombre N de marches aléatoires. Finalement, la fonction *plot_fractal_dimension* permet d'obtenir la courbe du nombre de particules présentes dans l'agrégat en fonction du rayon maximal de cet agrégat. La pente de cette droite correspond à la dimension fractale des agrégats formés par le processus DLA.

Un premier algorithme est conçu dans le but de simuler le mouvement aléatoire d'une particule pour étudier le mouvement brownien. La classe associée se nomme **BrownianMotion** et possède deux méthodes. La méthode principale, nommée *random_walk*, permet de simuler la marche aléatoire d'une particule sur un réseau carré de taille $L \times L$. La particule est d'abord placée au centre de la grille et, à chaque étape de la simulation, la particule se déplace aléatoirement d'une position dans la grille, soit en haut, en bas, à gauche ou à droite, sans la possibilité de sortir du cadre. La particule performe un nombre arbitraire N de pas. L'algorithme

permet d'observer le mouvement de la particule sous forme d'une animation et d'une image et permet aussi de déterminer la distance euclidienne parcourue. D'ailleurs, la seconde méthode implémentée dans cette classe, soit *show_final_distances*, permet d'observer la distribution de la distance parcourue pour plusieurs réalisations du processus et permet ainsi de calculer la distance parcourue et son écart-type.

Un second algorithme est conçu dans le but d'étudier l'agrégation par diffusion limitée et la classe associée à ce problème se nomme donc simplement **DLA**. La méthode principale, nommée *dla_cluster*, permet de simuler le processus DLA sur un réseau carré de taille $L \times L$. À chaque itération, une particule est d'abord placée au centre de la grille et effectue une marche aléatoire sauf que cette fois, la particule reste immobile lorsqu'elle atteint la surface du réseau ou lorsqu'elle atteint une autre particule immobile. Ces conditions d'arrêt de la marche aléatoire sont vérifiées à chaque itération avec la méthode *check_walk_terminate_conditions*. Par ailleurs, le processus DLA est arrêté lorsqu'une particule atteint le centre de la grille, ce qui est vérifié avec la méthode *check_dla_terminate_condition*. Finalement, l'algorithme permet aussi d'observer une animation ainsi qu'une image de la formation de l'agrégat.

Un troisième algorithme est conçu dans le but d'étudier l'agrégation par diffusion limitée selon la démarche originale. La classe associée à ce problème se nomme donc **DLAOriginal** afin de la différencier de l'autre méthode d'agrégation par diffusion limitée utilisée. De manière semblable au deuxième algorithme, la méthode principale est nommée *dlaoriginal_cluster* et permet de simuler de processus DLA sur un réseau carré de taille $L \times L$. Tout d'abord, une particule est ancrée au centre de la grille et est donc placée sur un cercle de rayon $r = 0$ au centre du centre de la grille. Ensuite, une autre particule est placée sur la grille à une position aléatoire sur le contour d'un cercle de rayon $r = 1$ centré au centre de la grille. La deuxième particule débute alors sa marche aléatoire et la complète avec une probabilité égale à S si celle-ci entre en contact avec la particule précédemment placée. Cette probabilité S se nomme le coefficient d'adhésion et il est de 1 dans la version originale de la DLA. En fait, ce coefficient S permet d'ajuster la chance qu'à une particule de se coller aux autres, et donc, d'ajuster l'adhésion des particules simulées [4]. En outre, la particule est effacée si elle s'éloigne à plus de $2r$ du centre de la grille. Cette décision est réalisée à l'aide de la méthode *check_walk_terminate_conditions*. Si elle est effacée, la particule est alors replacée à une position aléatoire sur le cercle et le processus recommence jusqu'à ce que celle-ci se joigne à la précédente. Par la suite, une autre particule est placée sur le contour d'un cercle de rayon r centré sur le centre de la grille et le processus se répète. Le rayon r du cercle servant à placer les particules est alors déterminé par la particule de l'agrégat qui est le plus loin du centre de la grille. La formule exprimant le rayon r peut se résumer par

$$r = \text{Distance}_{\max} + 1$$

et est utilisée avec la méthode *walker_spawn_coordinates* qui donne aussi la position où la prochaine particule sera placée. Le processus de placement de particule se répète ainsi de suite jusqu'à ce que, finalement, le rayon r soit d'une taille plus grande ou égale à une distance équivalente au quart de la dimension L de la grille. Cette condition est vérifiée à chaque itération à l'aide de la méthode *check_dla_terminate_condition* de la classe. Par ailleurs, l'algorithme permet d'observer le processus à l'aide d'une animation de la formation de l'agrégat et d'une image illustrant l'agrégat à son état final. De plus, afin d'étudier le comportement de l'agrégation par diffusion limitée originale, la méthode *show_fractal_dimension* est aussi réalisée dans la classe afin de pouvoir obtenir la dimension fractale de l'agrégat formé. Cette méthode fait alors plusieurs simulations en changeant la

taille de la grille afin de calculer la dimension fractale des agrégats de l'agrégation par diffusion limitée à l'aide de la formule 7.

Afin de mieux illustrer le fonctionnement du code, le schéma de la figure 1 a été réalisé. Celui-ci présente les différents liens entre les différents algorithmes et fonctions programmés pour la réalisation du projet.

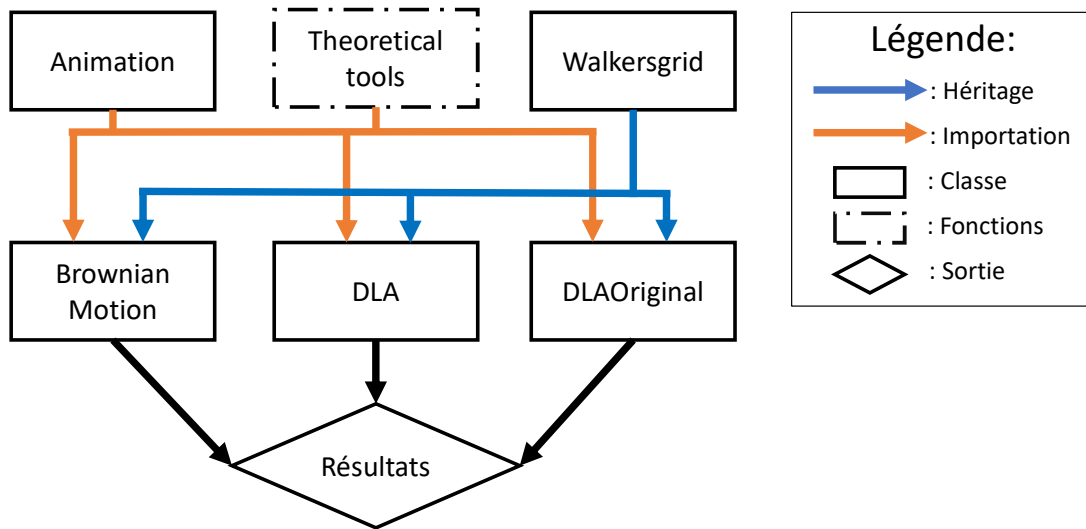
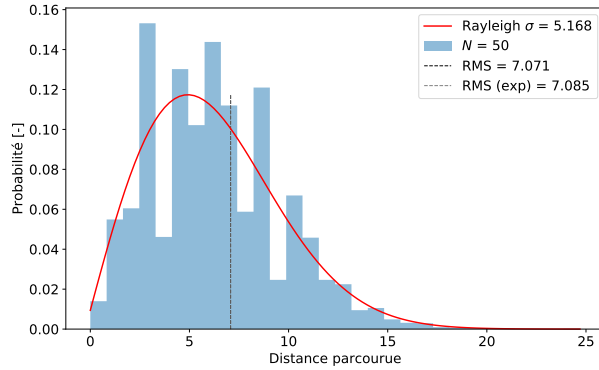


FIGURE 1 – Schéma fonctionnel des algorithmes réalisés.

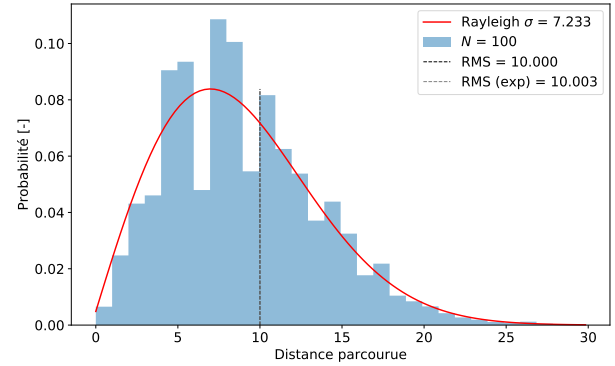
4 Résultats

4.1 Le mouvement brownien

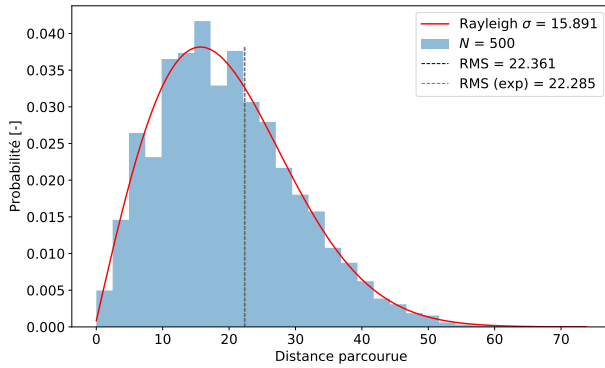
Pour ce qui est du mouvement brownien, une série de plusieurs simulations a été réalisée afin de pouvoir évaluer la distribution des distances parcourues par les particules lors d'une simulation avec un nombre de pas arbitraire. Afin d'obtenir des distributions illustrant bien le comportement, chacune des distributions compile les distances obtenues pour 10000 différentes particules. Les distributions obtenues sont présentées à la figure 2.



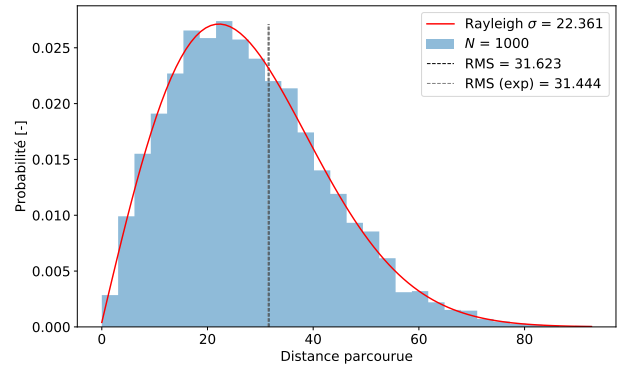
(a) Résultat pour 50 pas de mouvement brownien.



(b) Résultat pour 100 pas de mouvement brownien.



(c) Résultat pour 500 pas de mouvement brownien.



(d) Résultat pour 1000 pas de mouvement brownien.

FIGURE 2 – Distributions des distances parcourues pour l'algorithme de mouvement brownien pour 10000 simulations et pour des nombres de pas totaux différents.

De plus, afin d'illustrer d'aider à visualiser les distributions, la figure 3 est réalisée et celle-ci présente des résultats du mouvement brownien pour les mêmes nombres de pas totaux que ceux utilisés dans les distributions. Dans ces figures, la couleur noire est utilisée si la particule n'a jamais été à cette position et la palette de couleur représente le nombre de temps passé à une certaine position par la particule.

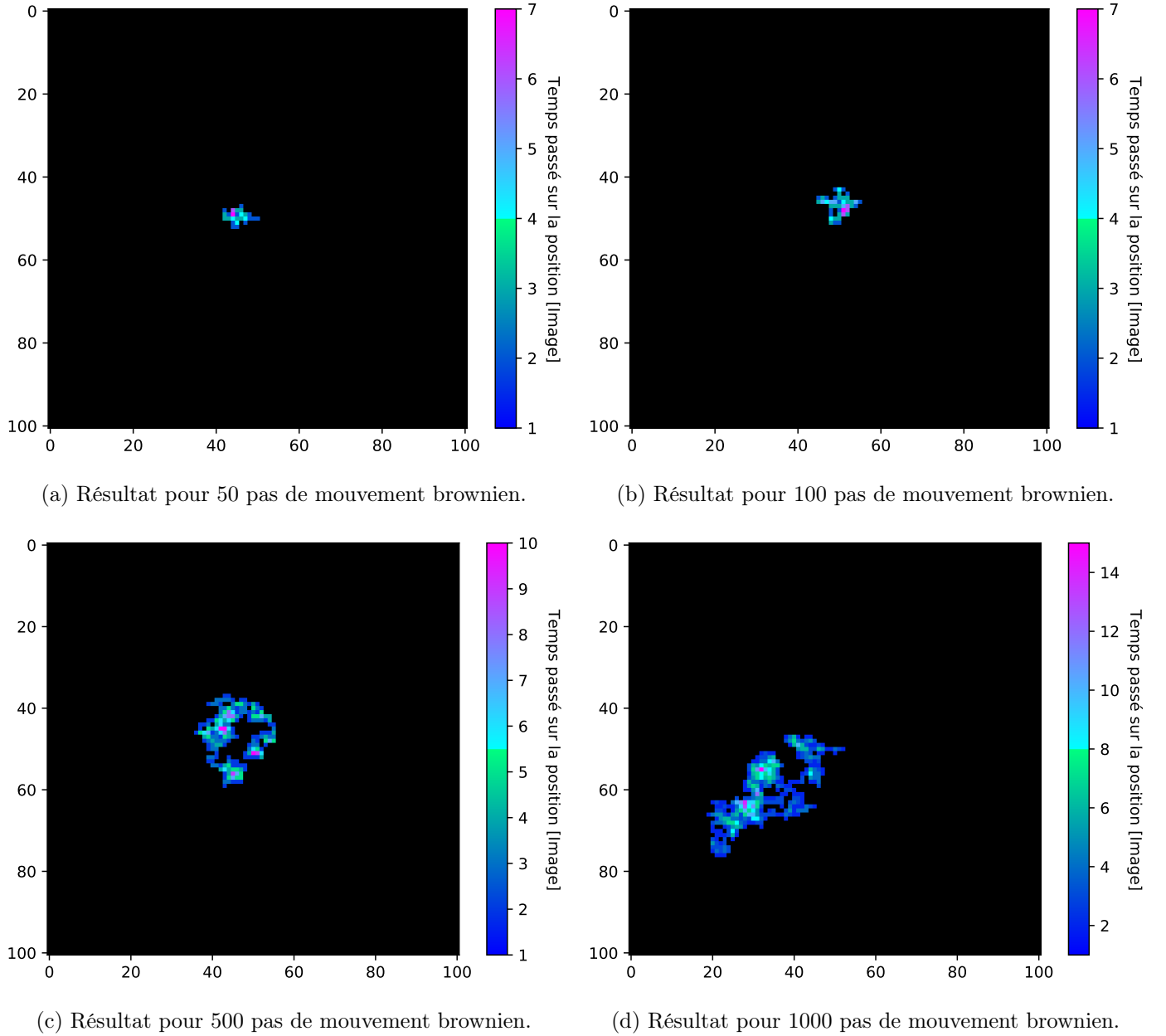
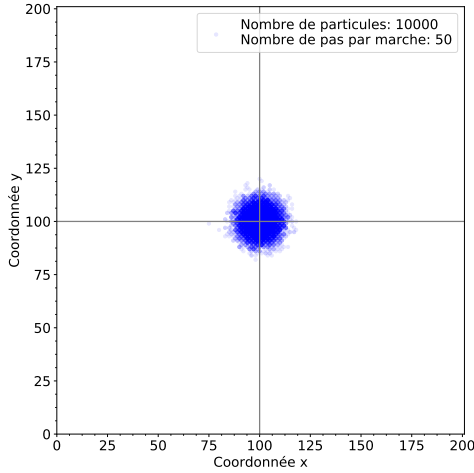
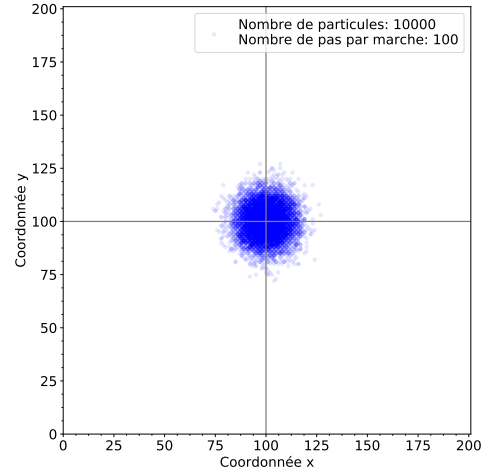


FIGURE 3 – Exemples de résultats des images obtenues pour l'algorithme de mouvement brownien.

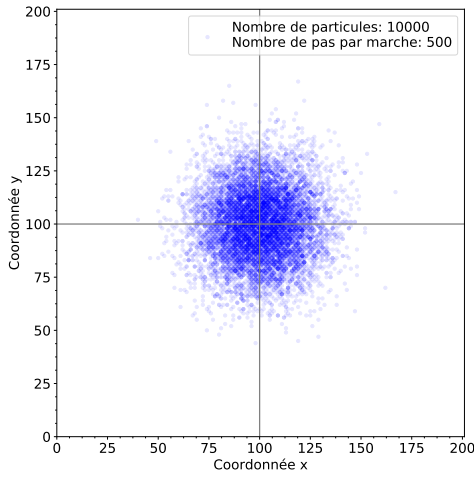
Par ailleurs, la figure 4 a aussi été réalisée afin de représenter les distributions obtenues. La figure présente les positions finales des 10000 particules dont le mouvement brownien a été simulé, et ce, pour différents nombres de pas. L'opacité des points est utilisée afin de représenter l'occurrence d'une certaine position.



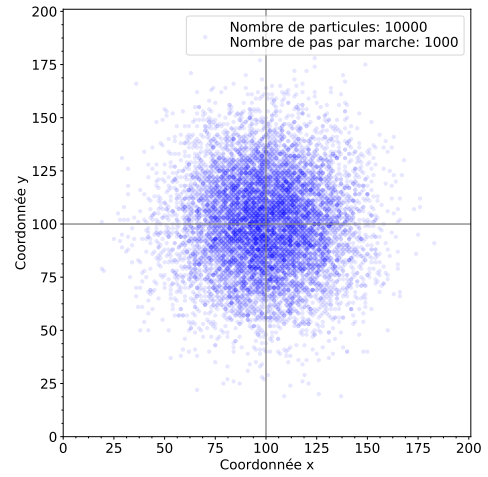
(a) Résultat pour 50 pas de mouvement brownien.



(b) Résultat pour 100 pas de mouvement brownien.



(c) Résultat pour 500 pas de mouvement brownien.



(d) Résultat pour 1000 pas de mouvement brownien.

FIGURE 4 – Position finale après 10 000 marches aléatoires.

Le tableau 1 présente les paramètres, théoriques et expérimentaux, issus de la distribution des déplacements effectués par une particule pour une simulation de N marches aléatoires. Le nombre de marches est fixé, mais le nombre de pas par marches est varié et le paramètre σ , la valeur RMS, la moyenne des distances, la variance ainsi que l'écart-type sont déterminés à l'aide des données obtenues. Le tableau 2 résume les erreurs relatives obtenues pour les paramètres extraits des distributions des distances parcourues par une particule après 10 000 marches aléatoires.

N	σ		RMS		Moyenne		Variance		Écart-type	
	Théorie	Exp.	Théorie	Exp.	Théorie	Exp.	Théorie	Exp.	Théorie	Exp.
1000	22.36	22.36	31.63	31.45	28.02	28.03	214.60	214.60	14.65	14.65
500	15.81	15.89	22.36	22.24	19.82	19.92	107.30	108.38	10.36	10.41
100	7.07	7.23	10.00	10.00	8.86	9.07	21.46	22.45	4.63	4.74
50	5.00	5.17	7.07	7.09	6.27	6.48	10.73	11.46	3.28	3.39

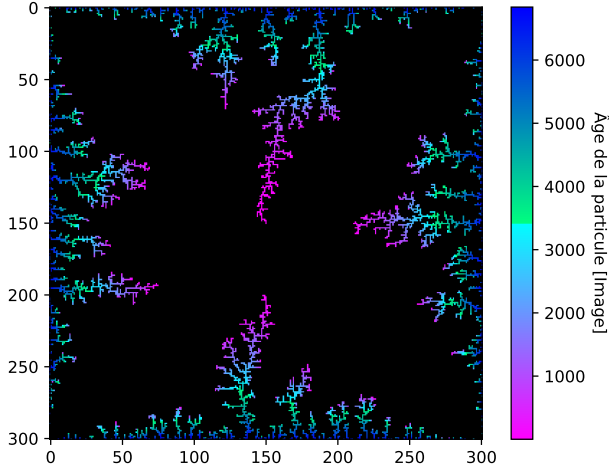
TABLE 1 – Synthèse des paramètres obtenus sur les distributions des distances parcourues pour 10 000 marches aléatoires

N	σ	RMS	Moyenne	Variance	Écart-type
	[%]	[%]	[%]	[%]	[%]
1000	0	0.57	0.04	0	0
500	0.51	0.54	0.51	1.01	0.48
100	2.26	0	2.37	4.61	2.38
50	3.40	0.28	3.35	6.80	3.35

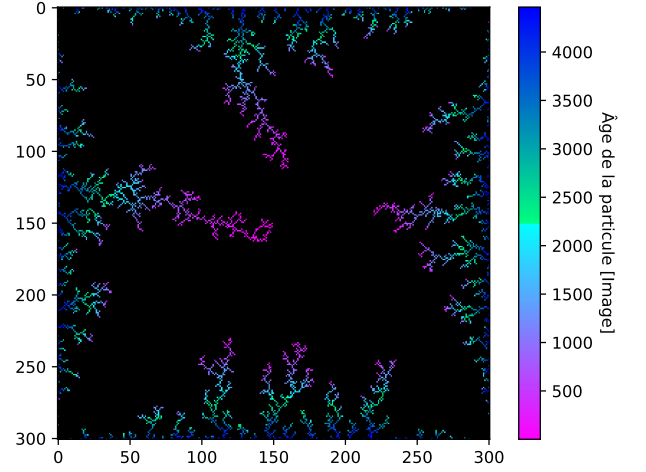
TABLE 2 – Erreurs relatives sur les paramètres issus des distributions des distances parcourues calculées pour 10 000 marches aléatoires. Les valeurs mises en évidence dans le tableau sont les erreurs minimales obtenues pour un même paramètre, mais un nombre de pas par marche différent.

4.2 L'agrégation par diffusion limitée

Pour ce qui est de l'agrégation par diffusion limitée, celle-ci a été testée pour plusieurs tailles de grilles afin d'observer les différents agrégats nommés « arbres browniens » qui apparaissent lors de ce processus. Un des meilleurs résultats obtenus est celui présenté à la figure 5a où on peut observer la formation d' « arbres browniens » pour une grille de taille $L = 301$. Dans ce cas, l'algorithme a dû placer 6838 particules afin qu'une d'entre elles soit finalement placée au centre de la grille. Dans cette figure, on peut observer un autre cas 5a testé avec cet algorithme qui consiste à permettre aux particules de se déplacer et de s'agréger en diagonale.



(a) Les particules **ne peuvent pas** se déplacer et s'agréger en diagonale. Total de 6838 particules placées.

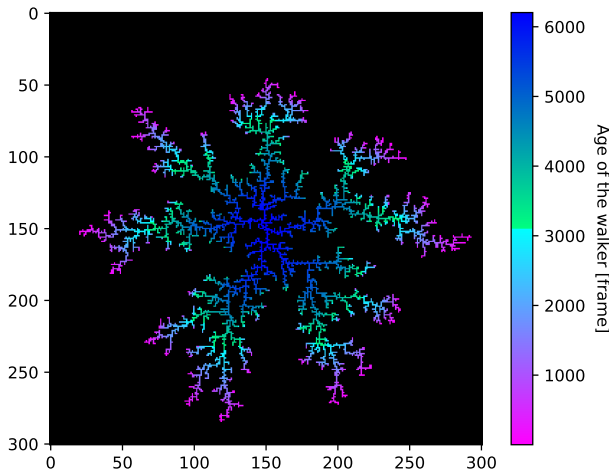


(b) Les particules **peuvent** se déplacer et s'agréger en diagonale. Total de 4464 particules placées.

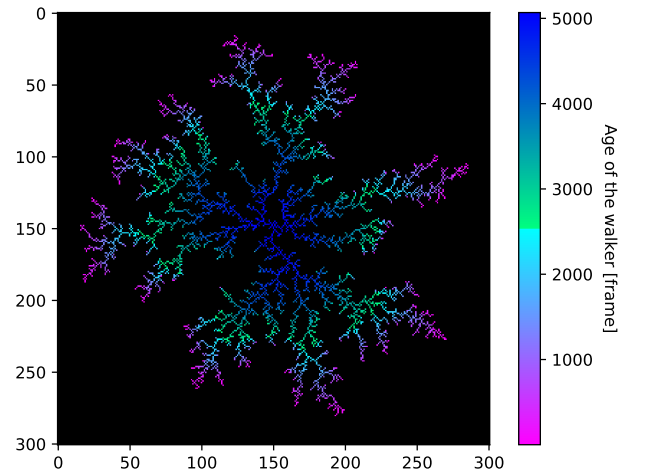
FIGURE 5 – Agrégation par diffusion limitée avec le nouvel algorithme sur une grille de 301×301 .

4.3 Version originale de l'agrégation par diffusion limitée

Pour ce qui est de la version originale de l'agrégation par diffusion limitée, on observe aussi la formation d'arbres browniens, mais, cette fois, ceux-ci débutent au centre de la grille. Des résultats de cet algorithme sont présentés à la figure 6 où 6a présente un résultat de l'algorithme sur une grille 301×301 où les particules ne peuvent pas se déplacer en diagonale et où 6b présente le cas où les particules peuvent faire usage des diagonales.



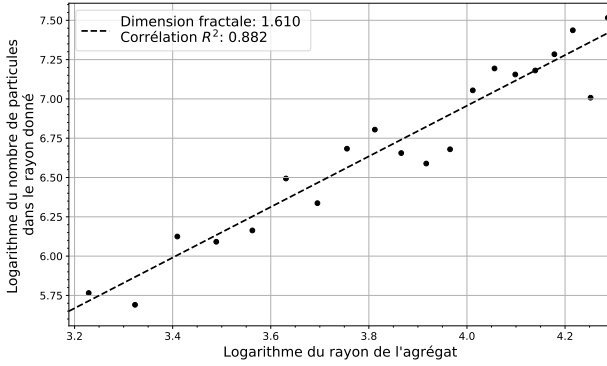
(a) Les particules **ne peuvent pas** se déplacer et s'agréger en diagonale. Total de 6203 particules placées.



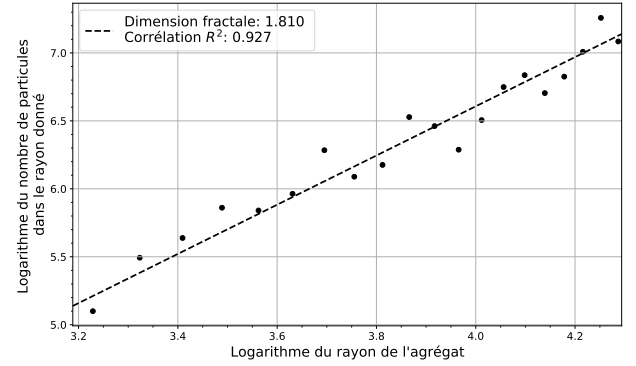
(b) Les particules **peuvent** se déplacer et s'agréger en diagonale. Total de 5067 particules placées.

FIGURE 6 – Agrégation par diffusion limitée avec l'algorithme original sur une grille de 301×301 avec un coefficient d'adhésion $S = 1$.

De plus, la dimension fractale des deux types d'agrégations par diffusion limitée présentées à la figure précédente a été calculée à l'aide de la méthode `show_fractal_dimension` de la classe qui utilise l'équation 7 pour déterminer la dimension fractale par régression. En fait, la dimension fractale correspond directement à la pente de la droite tracée à partir des données. Les résultats sont présentés aux figures 7a et 7b. Des dimensions fractales de 1.61 ± 0.08 et de 1.81 ± 0.05 sont alors respectivement obtenues sans l'utilisation des diagonales et avec l'utilisation des diagonales lors du déplacement des particules.



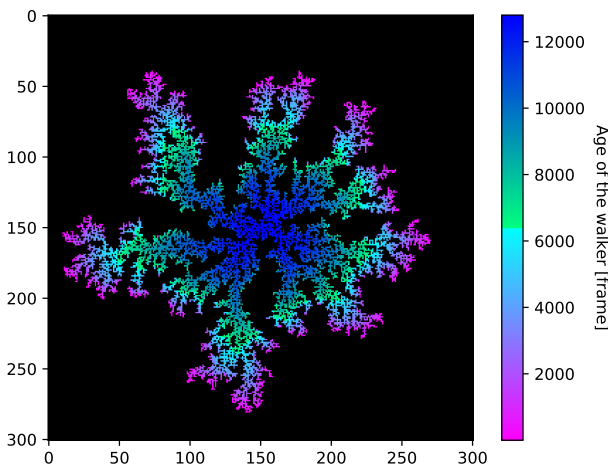
(a) Dimension fractale pour le processus DLA où les particules **ne peuvent pas** se déplacer et s'agréger en diagonal.



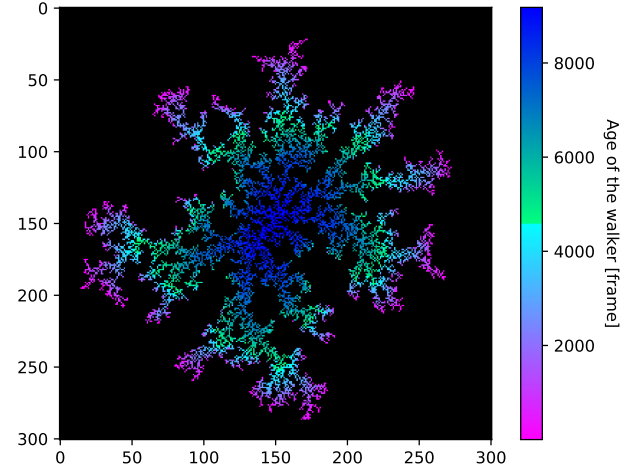
(b) Dimension fractale pour le processus DLA où les particules **peuvent** se déplacer et s'agréger en diagonal.

FIGURE 7 – Courbe du nombre de particules présentes dans l'agrégat en fonction du rayon maximal de cet agrégat. La pente de cette droite correspond à la dimension fractale des agrégats.

Finalement, la figure 8 permet d'observer le processus DLA avec un coefficient d'adhésion $S = 0.1$, soit une probabilité de 10 % de coller aux autres particules plutôt qu'une probabilité de 100 % tel que précédemment.



(a) Les particules **ne peuvent pas** se déplacer et s'agréger en diagonale. Total de 12801 particules placées.



(b) Les particules **peuvent** se déplacer et s'agréger en diagonale. Total de 9179 particules placées.

FIGURE 8 – Agrégation par diffusion limitée avec l'algorithme original sur une grille de 301×301 avec un coefficient d'adhésion $S = 0.1$.

5 Discussion

5.1 Le mouvement brownien

L'algorithme du mouvement brownien permet d'afficher le déplacement d'une particule dans une grille. La figure 3 présente des exemples de l'affichage offert par l'algorithme pour différents nombres de pas réalisés par marche. L'indicateur de couleur montre le temps que passe une particule sur une position. L'algorithme a été exécuté pour 50, 100, 500 et 1000 pas sur une grille de 101x101, la position initiale est donc au point [50, 50]. Les figures montrent que plus le nombre de pas réalisés lors d'une marche aléatoire est grand et plus la particule a tendance à s'éloigner de sa position initiale. Les histogrammes de la figure 2 illustrent les distances mesurées entre les positions initiale et finale de la particule lorsqu'elle répète 10000 fois une marche aléatoire de 50, 100, 500 et 1000 pas. En comparant les quatre histogrammes, il est possible de constater que la distance parcourue par une particule est près de cinq fois plus grande pour une marche de 1000 pas qu'une marche de 50 pas, ce qui se confirme en visualisant le déplacement de la particule sur la figure 3. Les distributions obtenues sur les histogrammes suivent une distribution de Rayleigh tel qu'attendu. Le paramètre σ d'une distribution de Rayleigh représente son mode soit la valeur la plus représentée dans la distribution. Deux barres verticales ont été tracées aux valeurs de RMS théorique et RMS expérimentale qui ont respectivement été déterminées à l'aide de l'équation 4 et à l'aide de la distribution par la racine de la moyenne des distances élevées au carré. Le tableau 1 présente les paramètres σ , RMS, la moyenne, la variance et l'écart-type obtenus à l'aide des équations présentées à la section 2 avec σ théorique et expérimental. Les valeurs expérimentales obtenues sont comparées aux valeurs théoriques correspondantes au tableau 2 à l'aide de l'erreur relative. Pour une marche de 1000 pas, la distribution de Rayleigh a un mode σ expérimental qui correspond exactement à la valeur de σ théorique estimé. Finalement, la figure 4 illustre, également pour des marches de 50, 100, 500 et 1000 pas, la position finale de la particule pour les 10000 marches simulées. Ces figures permettent de visualiser l'étendue du déplacement de la particule et confirment les affichages de la particule obtenus ainsi que les histogrammes. Les simulations effectuées pour un nombre fixe de marches aléatoires et un nombre de pas différents montrent que plus le nombre de pas est élevé, au prix d'un temps de calcul plus grand, et plus la distance parcourue par une particule s'approche des attentes théoriques.

5.2 L'agrégation par diffusion limitée

Dans le cas, l'agrégation par diffusion limitée, plusieurs essais avec plusieurs grandeurs de grilles différentes ont été réalisés. Deux résultats obtenus peuvent être observés à la figure 5. Les structures nommées « arbres browniens » sont observées comme prévu dans les figures résultantes de l'algorithme. De plus, en testant plusieurs grandeurs de grille, il a été observé que l'algorithme prend de plus en plus de temps à compléter les agrégats ce qui est aussi prévisible puisque le nombre de positions où la particule risque de se déplacer augmente avec le carré de la taille de la grille. Par contre, on remarque aussi que plus il y a de particules placées sur la grille, plus la marche aléatoire de la particule est courte. Ce fait est dû au fait que plus de positions sont occupées par des particules et donc plus il est probable que la marche aléatoire entraîne le contact entre une particule ancrée et une particule en marche. Par ailleurs, en comparant les résultats de l'algorithme avec l'utilisation des diagonales et sans l'utilisation des diagonales, il est remarqué que l'atteinte des conditions limites est plus rapide lorsque l'algorithme fait usage des diagonales. Cela était aussi à prévoir puisque l'utilisation des

diagonales augmente l'espace total dans laquelle les particules vont s'agréger si une d'elles y entre. Dans le cas d'une particule seule ancrée, l'utilisation des diagonales permet à une seconde particule de s'y agréger si elle se situe dans les 8 cases directement adjacentes à celle-ci ce qui est le double des 4 cases adjacentes sans l'utilisation des diagonales.

5.3 Version originale de l'agrégation par diffusion limitée

Pour ce qui est de la version originale de l'agrégation par diffusion limitée, les figures 6a et 6b présentent respectivement les agrégats obtenus pour la diffusion avec et sans utilisation des diagonales lors de la marche aléatoire des particules. On remarque que, visuellement, la forme obtenue lorsque les particules peuvent se déplacer en diagonale est plus réaliste, car elle semble plus lisse. En effet, comme les particules peuvent adhérer l'une à l'autre en diagonale, le rendu final possède nécessairement moins de bords tranchants. Par ailleurs, on remarque que le nombre de particules que contient les figures 6a et 6b sont respectivement de 6203 et 5067 particules. L'utilisation de pas diagonaux a donc permis d'atteindre le même rayon pour l'agrégat en utilisant un nombre plus faible de particules. Effectivement, l'utilisation des diagonales augmente l'espace total dans laquelle les particules peuvent s'agréger autour d'elles donc l'expansion de l'agrégat est généralement plus rapide.

Par ailleurs, une analyse de la dimension fractale des agrégats réalisés par le processus DLA a été effectuée et la figure 7 présente les résultats. On obtient une valeur de 1.61 ± 0.08 pour la dimension fractale sans l'utilisation des diagonales alors que la valeur associée dans la littérature est de 1.69 ± 0.02 [3]. Bien que les valeurs sont éloignées, il est important de tenir compte du fait qu'il y a beaucoup de stochasticité dans la méthode utilisée pour calculer la valeur expérimentale. En effet, le nombre de particules que contient un agrégat d'un certain rayon donné varie fortement d'une itération à l'autre. Pour obtenir des résultats plus précis, il aurait été nécessaire de faire la moyenne de la valeur de la masse obtenue pour plusieurs agrégats de même rayon et d'utiliser ces points pour la régression. Le temps de calcul est toutefois le facteur limitant ici puisque la réalisation du calcul de dimension fractal tel que présenté à la figure 7a nécessite déjà environ 15 minutes. La dimension fractale obtenue pour le cas avec l'utilisation des diagonales dans les marches aléatoires est de 1.81 ± 0.05 . La différence avec l'autre cas est significative et témoigne du fait que la manière d'occuper l'espace est différente pour les deux cas, tel que discuté précédemment.

En outre, la figure 8 présente un cas avec un coefficient d'adhésion avec $S = 0.1$, ce qui correspond à une probabilité de seulement 10 % de coller à une particule lorsqu'elle est adjacente. On remarque que les agrégats sont beaucoup plus denses, avec un nombre de particules environ 2 fois plus grands que dans le cas ordinaire avec $S = 1$. Ceci témoigne du fait que les particules ajoutées ont plus de chance de se rendre près du centre et ne collent pas systématiquement aux particules plus près de leur point de départ. Le coefficient d'adhésion semble donc bien représenter la propriété d'adhésion que pourrait avoir un matériau qui réalise une diffusion limitée.

Finalement, il est important de mentionner que l'algorithme DLA implémenté permet de représenter visuellement des phénomènes de diffusion qui se produisent dans la nature. En effet, des phénomènes comme l'électrodéposition, les courants Hele-Shaw, le claquage de diélectriques, ou tout simplement la formation de flocons

de neige produisent des formes similaires à celles présentées. Ces phénomènes ne sont pas décrits ici, mais une simple recherche en ligne vous permettra d’apprécier les similarités avec le processus simulé.

6 Conclusion

Somme toute, des algorithmes permettant de simuler les procédés stochastiques du mouvement brownien ainsi que le modèle de l’agrégation par diffusion limitée ont été réalisés. L’algorithme du mouvement brownien simule le déplacement, en deux dimensions, d’une particule sur une grille de dimensions fixes. Il a été démontré que la distribution des distances parcourues par une particule pour un nombre de marches aléatoires fixé suit une distribution de Rayleigh et que plus le nombre de pas parcourus par marche est élevé et plus la distribution répond aux attentes théoriques liés au mouvement brownien en deux dimensions. Ensuite, un modèle célèbre de la physique numérique, l’agrégation par diffusion limitée a été simulée. Il a été montré que lorsque la particule peut se déplacer sur la grille par mouvement en diagonale en plus des déplacements dans les quatre directions, elle parvient au centre avant une particule qui effectue seulement un mouvement dans les quatre directions de base. De plus, le modèle de l’agrégation par diffusion limitée a été adapté à sa version originale et, tout comme la première version, lorsque la particule effectue des pas dans les directions diagonales également, un nombre largement plus faible de particules est requis pour atteindre le rayon fixé. Il serait intéressant de pousser les essais de la méthode de l’agrégation par diffusion limitée en trois dimensions pour étudier d’autres phénomènes et faire une analyse de la dimension fractale qu’aurait ce modèle tridimensionnel.

Références

- [1] David P. Goldenberg. *Physical Principles in Biology*. https://goldenberg.biology.utah.edu/courses/biol3550/courseMaterial/notes/3550_notes_3randomWalks.pdf 2020.
- [2] Rayleigh Distribution : Definition, Uses, Mean, Variance. Statistics How To. <https://www.statisticshowto.com/rayleigh-distribution/>.
- [3] Johnson, David & Ordonez, Gonzalo. (2011). *Quantum Diffusion-Limited Aggregation*, https://www.researchgate.net/publication/51950401_Quantum_Diffusion-Limited_Aggregation.
- [4] Gaithersburg, MD, (2003). *dla3d*, <http://markjstock.org/dla3d/>.
- [5] Tirthajyoti Sarkar. *Brownian motion with Python*. Towards Data Science. <https://towardsdatascience.com/brownian-motion-with-python-9083ebc46ff0>. 2020.
- [6] W. Ebeling. *Nonlinear Brownian motion – mean square displacement*. Condensed Matter Physics, 2004, Vol. 7, No. 3(39), pp. 539–550. <https://www.icmp.lviv.ua/journal/zbirnyk.39/006/art06.pdf>
- [7] DLA Cluster. Github. <https://github.com/ksenia007/dlaCluster>
- [8] Britanica. *Brownian motion*. <https://www.britannica.com/science/Brownian-motion>