

# LES AUTOMATES MOLÉCULAIRES CINÉTIQUE, DIFFUSION ET CHROMATOGRAPHIE

**Jérôme RANDON**

*Laboratoire des Sciences Analytiques, bât. 308, Université Claude Bernard-Lyon I  
43 du boulevard du 11 Novembre 1918, 69622 Villeurbanne Cedex  
randon@univ-lyon1.fr*

La technique de simulation par automates moléculaires est une méthode qui permet de reproduire les caractéristiques macroscopiques d'un ensemble d'objets à partir du comportement microscopique de chaque objet de l'ensemble. L'observation de l'ensemble se faisant à l'échelle macroscopique, un grand nombre d'objets doivent être simulés.

Trois étapes sont nécessaires à la mise en oeuvre de cette technique :

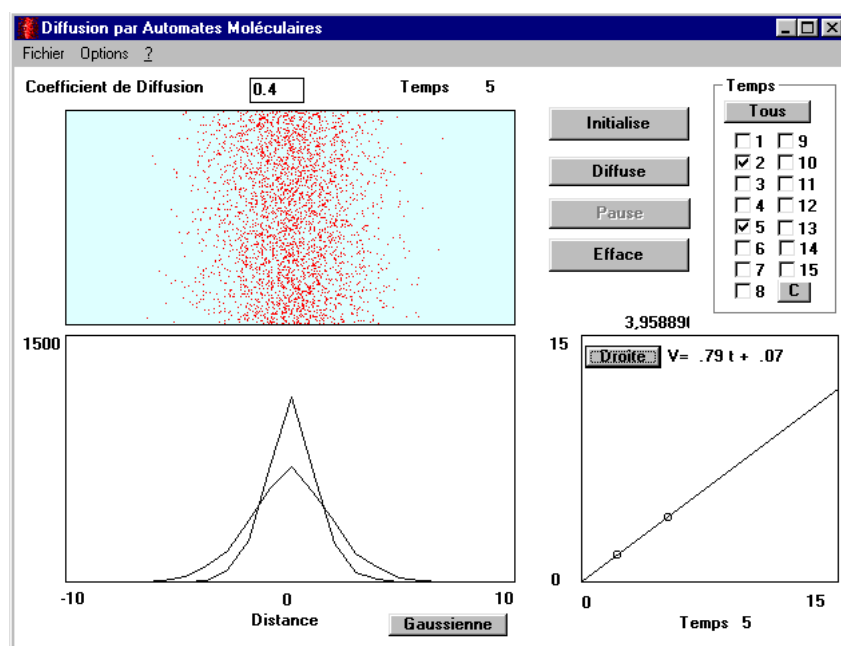
- définir le comportement de chaque objet de l'ensemble,
- appliquer ce comportement de façon itérative à tous les objets de l'ensemble,
- observer les caractéristiques macroscopiques de l'ensemble au cours du temps.

L'ensemble considéré est ici constitué de molécules, toutes identiques les unes aux autres, et un seul type de comportement applicable à toutes les molécules sera élaboré. Ce comportement est de type probabilistique : une molécule caractérisée par un état 1 aura une probabilité  $P_{12}$  de passer dans un état 2 au cours de l'intervalle de temps suivant.

Cette technique est appliqué dans trois situations différentes : la diffusion, la cinétique (texte dans ces actes ) et la chromatographie pour développer des logiciels de présentation.

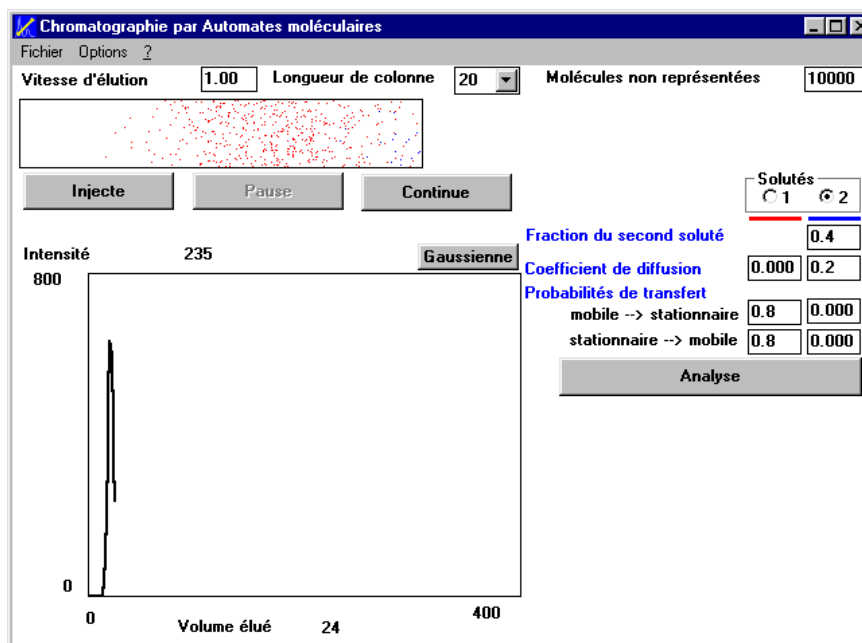
## Diffusion

Dans un espace monodimensionnel, les molécules se déplacent le long d'un axe et à chaque instant elles peuvent bouger dans un des deux sens, chaque sens ayant une probabilité d'occurrence identique. Ainsi, on va reconstruire le diagramme de répartition des molécules dans l'espace, et la variance associée à cette répartition.



## Chromatographie

La diffusion moléculaire et la cinétique des équilibres chimiques sont incorporés dans un modèle de chromatographie d'éluion. Cette simulation permet d'illustrer de façon simple à l'échelle moléculaire les phénomènes de rétention et de dispersion des solutés dans les systèmes chromatographiques.



Dans ces simulations, chaque molécule apparaît ainsi comme un "pixel" avec un code couleur correspondant à son statut (nature du soluté, de la phase dans lequel il est présent, position de la molécule...). Quand le statut de la molécule évolue, la couleur du pixel change et les caractéristiques macroscopiques du système (représentées sur un autre diagramme) sont mises à jour montrant ainsi simultanément l'évolution microscopique et macroscopique du système.

Les phénomènes sont donc illustrés de façon dynamique et visuelle permettant une première approche intuitive avant l'introduction des équations phénoménologiques. Les caractéristiques macroscopiques et leurs "lois" (les relations que l'on utilise de façon pratique) sont retrouvées par cette méthode, mais elles ne sont pas la source de la simulation. Elles réapparaissent naturellement comme une conséquence du comportement microscopique des molécules.

Des versions de démonstration avec des exemples d'utilisation sont disponibles sur le réseau à l'adresse : <http://www.univ-lyon1.fr/nte/soft/jr/Automates/Simulation.html>

## Bibliographie

Randon J., Au hasard de la diffusion, *Bulletin de l'Union des Physiciens*, vol 90, 1996, 95-100.

Randon J., La dispersion en chromatographie : une présentation visuelle à l'échelle moléculaire, *Analisis*, 24, 1996, 168-171