

# TP : Dynamique hamiltonienne

Frédéric Legoll

22 mars 2016

L'objectif de ce TP est de programmer et de comparer différents schémas numériques pour l'intégration d'une dynamique hamiltonienne. On s'intéresse aussi à la notion d'hamiltonien modifié. Ce TP se fait sous Linux (ou bien sous Windows ou Mac si c'est votre OS préféré).

L'ensemble des codes se trouve à l'adresse

`http://cermics.enpc.fr/~legoll/TP\_edo.tar.gz`

La commande `tar xzf TP_edo.tar.gz` permet d'extraire le répertoire `~/TP_edo/`, dans lequel se trouvent les répertoires suivants :

- (a) le répertoire `lj_1D/` contient le code C++ pour la simulation d'une particule mono-dimensionnelle soumise à un potentiel de type Lennard-Jones ;
- (b) le répertoire `kepler_1part/` contient le code C++ pour la simulation d'une particule soumise à un potentiel central de type gravitationnel ;
- (c) le répertoire `pendule_1D/` contient le code C++ pour la simulation d'une particule mono-dimensionnelle modélisant un pendule ;
- (d) le répertoire `fluide_lj/` contient le code C++ pour la simulation d'un système de particules (en 2D ou 3D) interagissant deux à deux.

Pour compiler le code contenu dans chaque répertoire (par exemple `lj_1D/`), il suffit de taper la commande `make`. Le nom du fichier exécutable se termine par `++` (par exemple, `lj++`), et se lance par la commande `./lj++` ou similaire.

Certains codes font appel à une classe de vecteurs et de matrices, qui sont définies dans les fichiers `matrice.hpp` et `matrice.cpp`. Le TP ne demande aucune modification de ces deux fichiers.

Vous pourrez avoir besoin de la fonction valeur absolue. L'instruction `abs(x)` ne fonctionne PAS. Il faut écrire `fabs(x)`, pour `x` qui est de type `real`, `double` ou `int`.

# 1 Une particule 1D dans un potentiel de Lennard-Jones.

Codes pour cette section : dans 1j\_1D/.

On s'intéresse à la dynamique de hamiltonien

$$H(q, p) = \frac{p^2}{2} + V(q), \quad q \in \mathbb{R}, \quad p \in \mathbb{R},$$

avec  $V(q) = W(q) + W(10 - q)$  et

$$W(q) = \frac{1}{q^{12}} - \frac{2}{q^6}.$$

On choisit pour conditions initiales  $0 < q_0 < 10$  et  $p_0 < 0$ . Le problème représente donc une particule entre deux murs, l'un à la position 0, l'autre à la position 10, et qui interagit avec ces murs.

**Question 1.** Pour les différents schémas proposés (Euler explicite, Symplectic Euler et Velocity Verlet), étudier l'erreur maximale en énergie (sur un intervalle de temps assez grand), en fonction du pas de temps. Comparer qualitativement les schémas.

Il s'agit donc d'étudier l'erreur maximale en énergie, sur un intervalle de temps donné (et bien choisi!), lorsque le pas de temps varie. Penser à alors faire varier le nombre de pas de temps, pour que la longueur simulée soit toujours la même.

On demande de faire ce travail pour plusieurs pas de temps. Il est délicat d'implémenter dans le code fourni une boucle sur les pas de temps (nombreuses erreurs possibles). Comme on ne souhaite les résultats que pour quelques valeurs de pas de temps, une procédure plus manuelle est plus adaptée.

**Question 2.** Lorsqu'on utilise le schéma de Velocity Verlet, le hamiltonien modifié (avec les deux premières corrections) s'écrit

$$H_4(q, p) = H(q, p) + \frac{\Delta t^2}{24} \text{Corr\_H}_2(q, p) + \frac{\Delta t^4}{720} \text{Corr\_H}_4(q, p) + o(\Delta t^4), \quad (1)$$

avec

$$\text{Corr\_H}_2(q, p) = 2p^2 V''(q) - (V'(q))^2$$

et

$$\text{Corr\_H}_4(q, p) = -p^4 V^{(4)}(q) - 3V''(q) (V'(q))^2 + 12p^2 (V''(q))^2 + 6p^2 V'''(q) V'(q).$$

Le calcul de  $\text{Corr\_H}_2$  et de  $H_2 = H(q, p) + \frac{\Delta t^2}{24} \text{Corr\_H}_2(q, p)$  est déjà implémenté. Finir l'implémentation du calcul de  $\text{Corr\_H}_4$  et du hamiltonien modifié (1).

A quel ordre en temps les quantités  $H_2 = H(q, p) + \frac{\Delta t^2}{24} \text{Corr\_H}_2(q, p)$  et (1) sont-elles préservées au cours de la trajectoire? On étudiera donc la variation maximale de ces quantités, sur un intervalle de temps assez grand, en fonction du pas de temps.

## 2 Schéma conservant exactement l'énergie

Codes pour cette section : dans `kepler_1part/`.

On s'intéresse à une particule tridimensionnelle dans un potentiel de type gravitationnel :

$$H(q, p) = \sum_{a=1}^3 \frac{p_a^2}{2} - \frac{1}{\|q\|},$$

avec  $\|q\|^2 = \sum_{a=1}^3 q_a^2$ . Le schéma Symplectic Euler est implémenté. Observer la quasi-conservation de l'énergie, et tracer la trajectoire numérique obtenue. Etudier l'influence qualitative du pas de temps sur la trajectoire.

On s'intéresse maintenant à un schéma qui conserve exactement l'énergie. On considère

$$\tilde{x}_1 = \Phi_{\Delta t}(x_0), \quad x_1 = P_E(\tilde{x}_1),$$

où  $\Phi_{\Delta t}$  est le flot numérique associé à Symplectic Euler, tandis que  $P_E$  est la projection orthogonale sur la surface  $H(q, p) = E$ . Ce schéma est déjà implémenté. Simuler l'évolution du système suivant ce schéma, vérifier que l'énergie est conservée exactement. Comparer la trajectoire à celle obtenue via Symplectic Euler. Conclure sur l'utilité de projeter sur la surface  $H(q, p) = E$ .

## 3 Méthodes non symplectiques

Codes pour cette section : dans `pendule_1D/`.

On s'intéresse au problème unidimensionnel

$$H(q, p) = \frac{p^2}{2} - \cos(q) + 0.2 \sin(2q),$$

qui représente un pendule (modifié par le terme  $0.2 \sin(2q)$ ), la quantité  $q$  s'identifiant à l'angle entre la verticale et le pendule. On intègre ce problème avec une méthode de Runge-Kutta à 3 étapes internes, déterminée par le tableau

$$\begin{array}{ccc|ccc} & & & 1/6 & -1/6 & 0 \\ & & & 1/6 & 1/3 & 0 \\ & & & 1/6 & 5/6 & 0 \\ \hline & & & 1/6 & 2/3 & 1/6 \end{array}$$

Cette méthode est dite méthode de Lobatto III B, elle est d'ordre 4, symétrique mais non symplectique. Finir l'implémentation de cette méthode dans `Particule Lobatto(Particule X)`. On rappelle qu'une méthode de Runge Kutta sur

$\dot{x} = \Gamma(x)$  avec  $x = (q, p) \in \mathbb{R}^2$  s'écrit

$$k_i = \Gamma \left( x_0 + \Delta t \sum_{j=1}^s a_{ij} k_j \right) \in \mathbb{R}^2, \quad i = 1, \dots, s, \quad (2)$$

$$x_1 = \Phi_{\Delta t}(x_0) = x_0 + \Delta t \sum_{i=1}^s b_i k_i. \quad (3)$$

Les coefficients sont ainsi rangés :

$$\begin{array}{c|ccc} & a_{11} & \dots & a_{1s} \\ & \vdots & & \vdots \\ & a_{s1} & \dots & a_{ss} \\ \hline & b_1 & \dots & b_s \end{array}$$

Calculer l'évolution du système avec la condition initiale  $(q_0, p_0) = (0; 1.8)$ , puis avec la condition initiale  $(q_0, p_0) = (0; 2.2)$ . Comparer l'évolution de l'énergie dans les deux cas, et avec une trajectoire calculée par Velocity Verlet. Qu'observe-t-on ?

Essayer plusieurs conditions initiales avec la méthode de Lobatto. Quelles sont les valeurs de  $p$  échantillonnées ? Dans quel cas l'énergie est-elle conservée ? Proposer un critère reliant les valeurs de  $p$  échantillonnées et le fait que l'énergie se conserve bien.

## 4 Système à $N$ corps

Codes pour cette section : dans `fluide_lj/`

On considère ici un système composé de  $N = 36$  particules en 2D, soumis au hamiltonien

$$H(q, p) = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^T p_i}{2} + V(q),$$

avec  $q \in \mathbb{R}^{2N}$  et  $p \in \mathbb{R}^{2N}$ , et

$$V(q) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \|q_i\|^2 + \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N V_{LJ}(\|q_i - q_j\|),$$

où  $\|\cdot\|$  est la norme euclidienne et

$$V_{LJ}(x) = \frac{1}{x^{12}} - \frac{2}{x^6}.$$

Donner explicitement l'expression des forces. Implémenter le calcul des forces dans le code, simuler la dynamique par l'algorithme de velocity-Verlet, et vérifier que l'énergie est conservée à l'ordre attendu, pour le hamiltonien et le hamiltonien modifié implémenté.