

# Chapitre 2

## Équations différentielles et simulations de particules

### 1 Équations différentielles ordinaires

Nous nous intéressons à la solution numérique des équations différentielles ordinaires (EDO), c'est-à-dire aux systèmes d'équations de la forme

$$\frac{dx}{dt} = f(x, t) \quad (1)$$

Où  $x(t)$  est une collection de  $N$  fonctions dépendant d'une variable indépendante  $t$ , et  $f$  est un ensemble des  $N$  fonctions de  $x$  et de  $t$ .

#### Remarques

- La variable  $t$  joue typiquement le rôle du temps en mécanique. Mais elle peut en général avoir une interprétation différente.
- Tout système d'équations différentielles d'ordre plus élevé peut être ramené à un système du type (1) en ajoutant des variables au besoin pour tenir la place des dérivées d'ordre sous-dominant. Par exemple, considérons une équation différentielle du deuxième ordre pour une variable  $y$  :

$$y'' = f(y, y', t) \quad (2)$$

En posant  $x_1 = y$ ,  $x_2 = y'$ , l'équation (2) peut se ramener au système

$$x_2 = f(x_1, x_2, t), \quad x_1' = x_2$$

qui est de la forme (1) où  $f_1(x, t) = x_2$  et  $f_2 = f$ .

- Méthode d'Euler, Runge-Kutta, Richardson et de verlet sont quelques méthodes numériques qu'on peut utiliser pour résoudre (1).

## 2 Simulation de particule

L'une des applications les plus réponsus du calcul scientifique est la *simulation du mouvement* d'un grand nombre de particules sous l'influence de forces mutuelles et externes. L'objective de ces simulations et de comprendre le comportement statistique de la matière, d'où le nom "*dynamique moléculaire*".

### 2.1 Méthode de Verlet

Nous allons présenter l'algorithme de Verlet utilisé pour résoudre les équations du mouvement des particules impliqués. Il s'agit de résoudre un systèmes d'équations différentielles, représentant les équations du mouvement de Newton, mais à un nombre plutôt grand de particules.

#### Remarques

- Il est possible d'utiliser la méthode de Ruge-kutta, mais l'algorithme de Verlet est plus simple. La solution ne sera peut être pas plus précise que celle obtenue par Runge-Kutta mais le calcul sera par contre plus rapide.
- L'intérêt de la simulation ici n'est pas de suivre à la trace chaque particule, mais de dégager le comportement de l'ensemble.

### 2.2 Algorithme de Verlet

Soit un ensemble de  $N$  particules de positions  $r_i$  et de vitesses  $v_i$ , chaque particule ressent une force  $F_i$ . Nous avons à résoudre le systèmes d'equations différentielles suivant pour les  $2N$  vecteurs  $r_i$  et  $v_i$  :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dr_i}{dt}(t) = v_i(t) \\ \frac{dv_i}{dt}(t) = \frac{1}{m_i} F_i(t) \end{array} \right.$$

La méthode de Verlet est basée sur une formule du  $2^{ième}$  ordre pour l'évaluation des dérivées :

$$r_i(t+h) = r_i(t) + h v_i(t) + \frac{h^2}{2m_i} F_i(t) + o(h^3)$$

$$v_i(t+h) = v_i(t) + \frac{h}{m_i} F_i(t) + o(h^2)$$

Si on veut de ne pas faire appel à la vitesse, on utilise les deux développements de Taylor de la position  $r_i(t)$  a 2 instants distincts :

$$\left\{ \begin{array}{l} r_i(t+h) = r_i(t) + h v_i(t) + \frac{h^2}{2m_i} F_i(t) + o(h^3) \\ r_i(t-h) = r_i(t) - h v_i(t) + \frac{h^2}{2m_i} F_i(t) + o(h^3) \end{array} \right. \quad (2)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} r_i(t+h) = r_i(t) + h v_i(t) + \frac{h^2}{2m_i} F_i(t) + o(h^3) \\ r_i(t-h) = r_i(t) - h v_i(t) + \frac{h^2}{2m_i} F_i(t) + o(h^3) \end{array} \right. \quad (3)$$

En ajoutant ces deux équations, on obtient

$$r_i(t+h) = 2r_i(t) - r_i(t-h) + \frac{h^2}{m_i} F_i(t) + o(h^3)$$

et par soustraction(2)-(3), on obtient

$$v_i(t) = \frac{r_i(t+h) - r_i(t-h)}{2h} + o(h^3)$$