Physique Numérique I semaine 6

- Schémas symplectiques
  - Euler-Cromer «pied gauche d'abord»
  - Euler-Cromer «pied droite d'abord»
  - Verlet et ses variantes ou «comment apprendre à marcher»
- Schéma semi-implicite, conservatif
  - Boris-Buneman
  - Mouvement d'une particule dans un champ magnétique curviligne.
  - Quiz sur la vitesse parallèle

Rappel semaine 5

- **2.3 Oscillations**
  - 2.3.1 Oscillateur harmonique. Schéma d'Euler explicite
  - 2.3.2-2.3.3 **Analyses de stabilité numérique**

Propagation de l'erreur e_n	Oscillation, (dé)croissance?	Propriétés de conservation
Matrice de gain G	$y_{num} = Ae^{i\omega t}$	$E_{mec} = const$
Valeurs propres λ_i	$\omega = \omega_r + i\gamma$ (ω_r: oscillant, γ: exponentiel)	$E_{mec,n+1} = E_{mec,n} + ??$
Stable si $\boxed{\lvert \lambda_i \rvert \leq 1}$	$\boxed{\gamma \geq 0}$	$\boxed{\dfrac{\Delta E_{mec}^{(num)}}{\Delta t} \leq 0}$
Section 2.3.2 – Von Neumann	Section 2.3.3	Section 2.3.4

2.3.3 Stabilité. Oscillations, (dé)croissance exponentielle. Sol. Analytique des Eqs. Discrètes.

$$\boxed{y_n = \Re e\{A e^{i\omega t_n}\} = \Re e\{A e^{i\sqrt{k/m}\,t_n} e^{\left(\frac{k}{m}\frac{\Delta t}{2}\right)t_n}\}}$$

$$\boxed{y_n = \underbrace{e^{\left(\frac{k}{m}\frac{\Delta t}{2}\right)t_n}\,|A|}\,\cos\underbrace{\left(\sqrt{\frac{k}{m}}\,t_n + \varphi\right)}_{\text{Oscillation sinusoidale}}}$$

Amplitude augmentant exponentiellement dans le temps

Taux de croissance proportionnel à Δt

En posant $\boxed{\omega_0 = \sqrt{k/m}}$ = fréquence propre

$$e^{(\omega_0\Delta t)^2\left(\frac{t_n}{\Delta t}\right)/2} = e^{(\omega_0\Delta t)^2 n/2}$$

Paramètre crucial

2.3.1-5 Oscillateur harmonique. Conclusions

- Le schéma d' **Euler explicite** est **toujours instable** lorsqu'il est appliqué à l'oscillateur harmonique. La norme de l'erreur augmente à chaque pas de temps
- L'amplitude des oscillations croît exponentiellement, avec un taux de croissance proportionnel à Δt
- L'énergie mécanique n'est pas conservée, mais croît exponentiellement, avec un taux de croissance proportionnel à Δt
- **Paramètre numérique crucial: $\omega_0 \Delta t$**
  - $\omega_0 \Delta t \ll 1$ veut dire plusieurs pas temporels par période
- **Amélioration des schémas numériques nécessaire!**
  - **Euler – Cromer ~Δt (*)**
  - **Stormer-Verlet ~$(\Delta t)^2$**

    Symplectiques: Emec=const en moyenne
  - **Runge-Kutta ordre 4 ~$(\Delta t)^4$**
- (*) changement apparemment minime, mais… (***demo***)

Euler-Cromer: déjà un grand progrès!

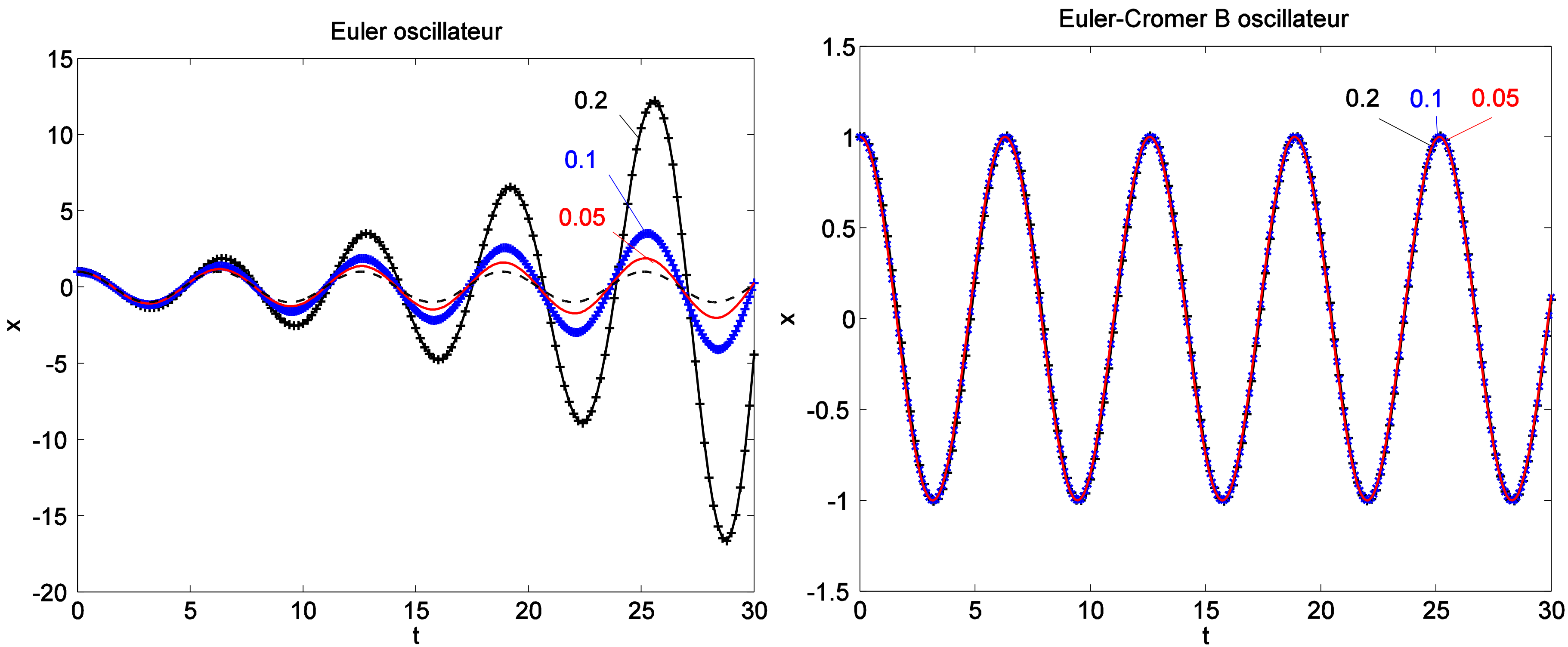
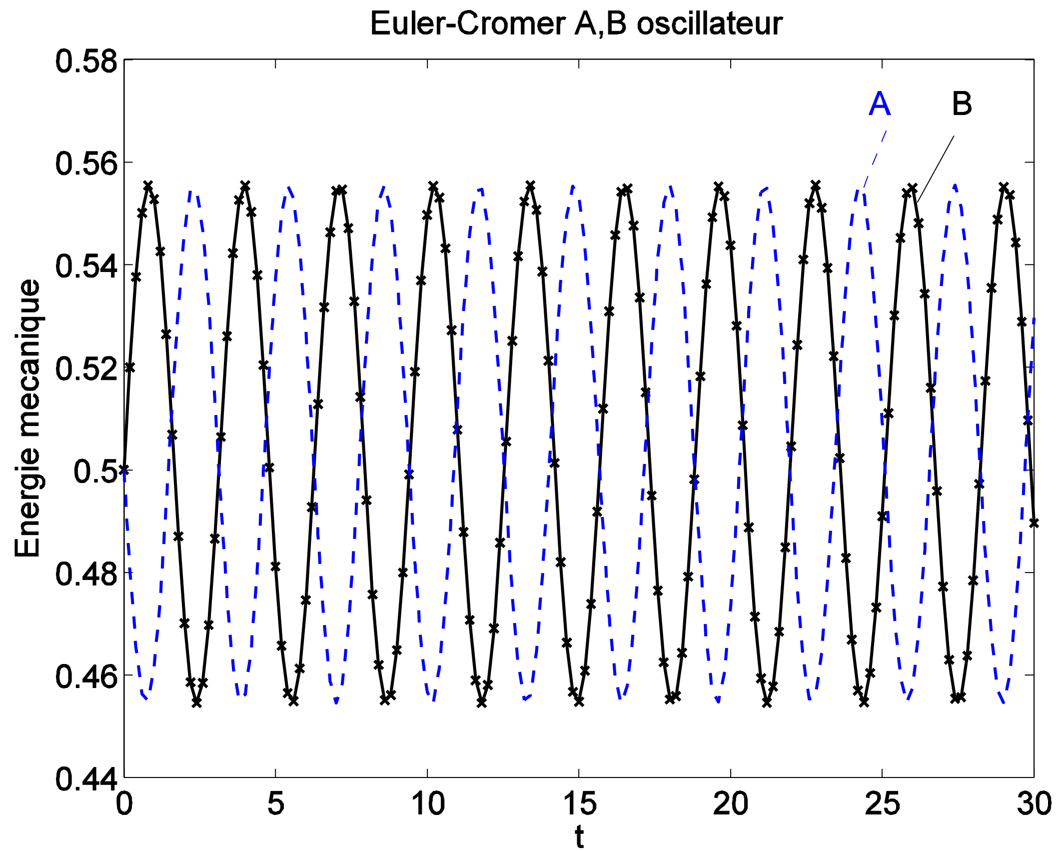


FIG. 2.8 FIG. 2.9

- Les schémas d'Euler-Cromer et de Verlet seront présentés au tableau et seront illustrés par des simulations numériques.

Euler-Cromer: pied gauche ou pied droite d’abord?



- En combinant Euler-Cromer « A » et « B » pour deux demi-pas de temps, on aboutit au schéma de Verlet. La dérivation sera présentée au tableau.

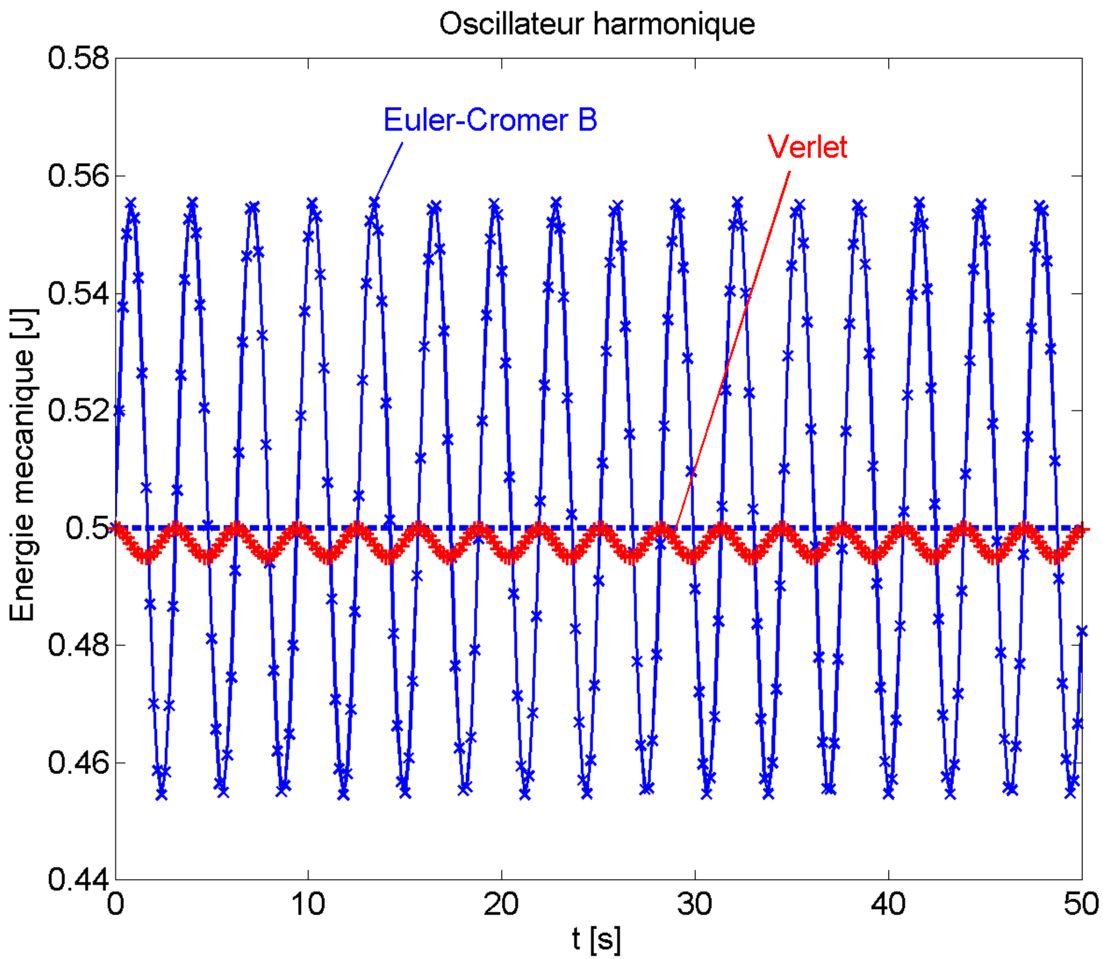
Velocity Verlet

$$x_{j+1} = x_j + v_j \Delta t + \frac{F}{m}(x_j, t_j)\frac{\Delta t^2}{2}$$

$$v_{j+1} = v_j + \left(\frac{F}{m}(x_j, t_j) + \frac{F}{m}(x_{j+1}, t_{j+1})\right)\frac{\Delta t}{2} \qquad (2.98)$$

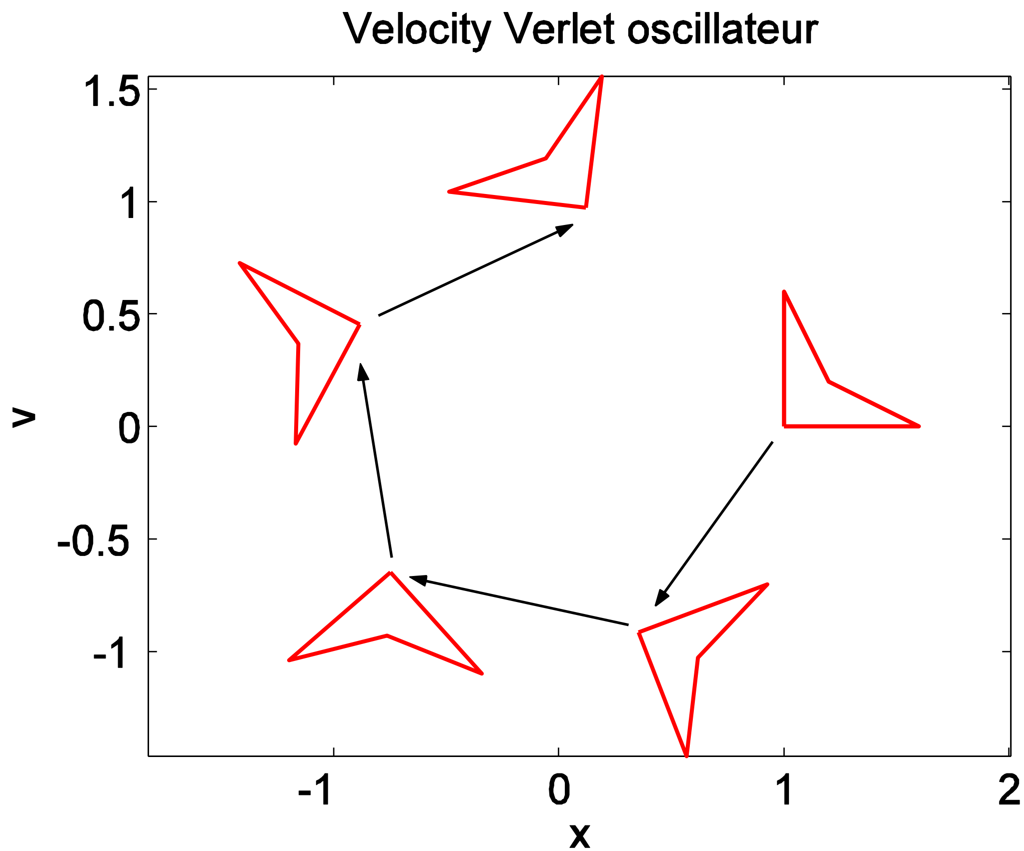
- Généralisé ici à une force dépendant explicitement du temps
- L'algorithme est conditionellement stable pour l'oscillateur harmonique (il y a une limite de stabilité, Δt max, cf plus loin)
- Il est d'ordre 2 en Δt: erreur ~(Δt)^2
- Une seule évaluation de F par pas temporel
- Peut être utilisé pour de longues simulations sans qu'il y ait accumulation systématique d'erreurs sur la conservation de l'énergie
- S'applique en principe bien aux systèmes conservatifs

Velocity Verlet – oscillateur harmonique



- Même $\Delta t=0.2$

Les schémas Euler-Cromer et Verlet sont dits "symplectiques"



Analogie:

Ensemble d'orbites dans l'espace de phase

↕

Ecoulement fluide

Symplectique

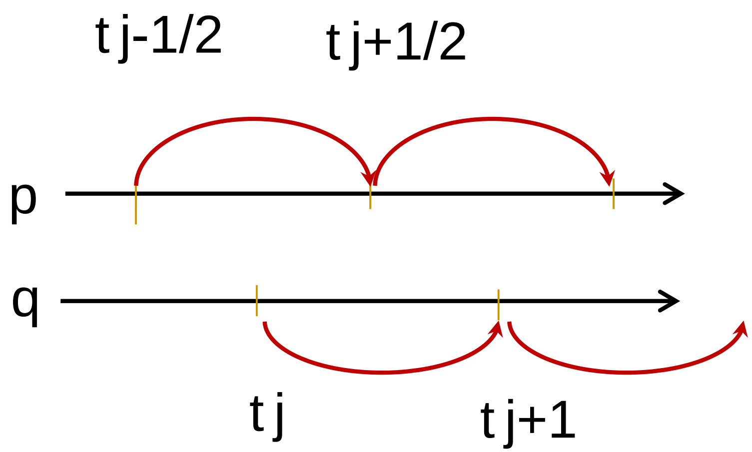
↕

Incompressible

- Conservation du « volume » dans l'espace de phase (x,v)

Formulations alternatives de Verlet 1

- Verlet «leapfrog» (saute-mouton)



$$p_{j+1/2} = p_{j-1/2} + \Delta t\, F(q_j)$$
$$q_{j+1} = q_j + (\Delta t / m)\, p_{j+1/2} \qquad (2.99)$$

Schéma à niveaux décalés («staggered»)
Nécessite un premier «demi-pas» pour être initialisé
Désavantage: on ne connaît pas p et q aux mêmes instants

Formulations alternatives de Verlet 2

- Stormer - Verlet

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\begin{pmatrix} p \\ q \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} F(q) \\ p/m \end{pmatrix} \Leftrightarrow \frac{\mathrm{d}^2 q}{\mathrm{d}t^2} = F(q)/m \qquad (2.100)$$

$$\frac{\mathrm{d}^2 q}{\mathrm{d}t^2}(t_j) = \frac{1}{\Delta t^2}\left(q_{j+1} - 2q_j + q_{j-1}\right) + O(\Delta t^2)$$

$$q_{j+1} = 2q_j - q_{j-1} + (\Delta t^2/m)\,F(q_j) \qquad (2.102)$$

Schéma à 3 niveaux
Nécessite un premier pas «en arrière» (q_{-1}) pour être initialisé
Cet algorithme date de 1907 (Stormer)

Stabilité du schéma de Verlet

- On montre (p.40) que le schéma de Verlet est stable pour le problème de l'oscillateur harmonique, à la condition que:

$$\boxed{\omega_0 \Delta t \leq 2}$$

où ω_0 est la fréquence propre (physique!) du système:

$$\boxed{\omega_0 = \sqrt{k/m}}$$

Il en est de même pour Euler-Cromer.

Boris – Buneman (2.7.2)

- Cas d'une particule dans un champ magnétique

Semi-implicite
$$\frac{\vec{v}_+ - \vec{v}_-}{\Delta t} = \frac{q}{m}\left(\frac{\vec{v}_+ + \vec{v}_-}{2}\right)\times\vec{B} \qquad (2.147)$$

Posons: $\omega_c = qB/m \qquad \vec{e_\|} = \vec{B}/B$

$$\vec{v}_+ = \vec{v}_- + \frac{\omega_c \Delta t}{1 + (\omega_c \Delta t/2)^2}\left(\vec{v}_- \times \vec{e_\|} + \frac{\omega_c \Delta t}{2}(\vec{v}_- \times \vec{e_\|}) \times \vec{e_\|}\right)$$

(2.149)

- Conserve Emec exactement, quel que soit Δt
- Ordre 2 en Δt

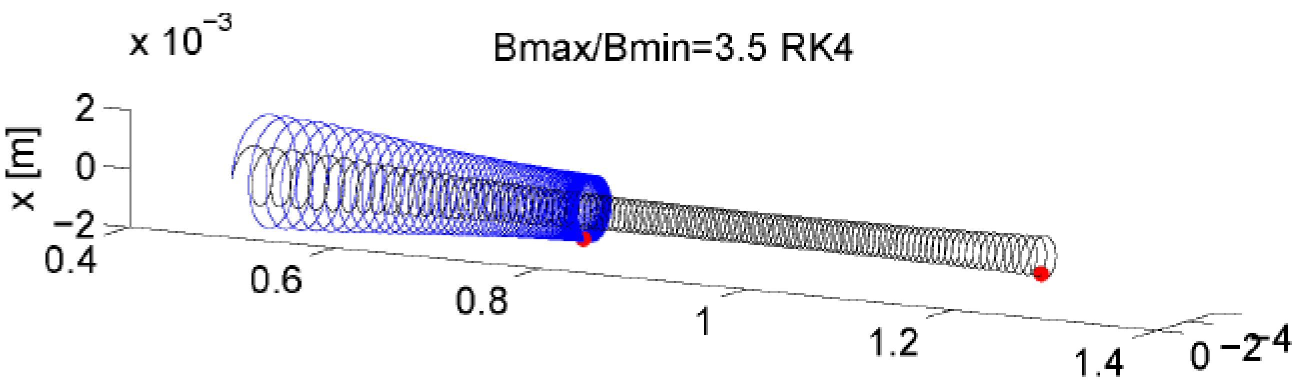
Quiz

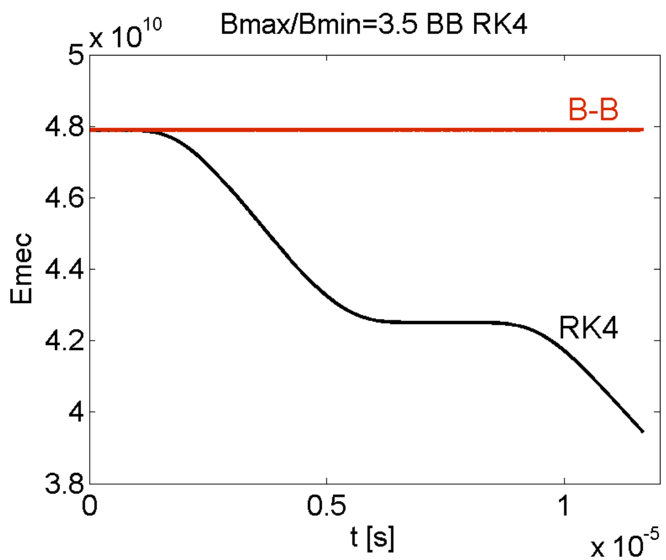
- La force de Lorentz $\vec{F} = q\vec{v} \times \vec{B}$ est toujours perpendiculaire au champ magnétique.
- Donc la composante parallèle au champ magnétique est toujours nulle, $F_{//}=0$
- Donc, la composante de la vitesse parallèle au champ magnétique est constante, puisque:

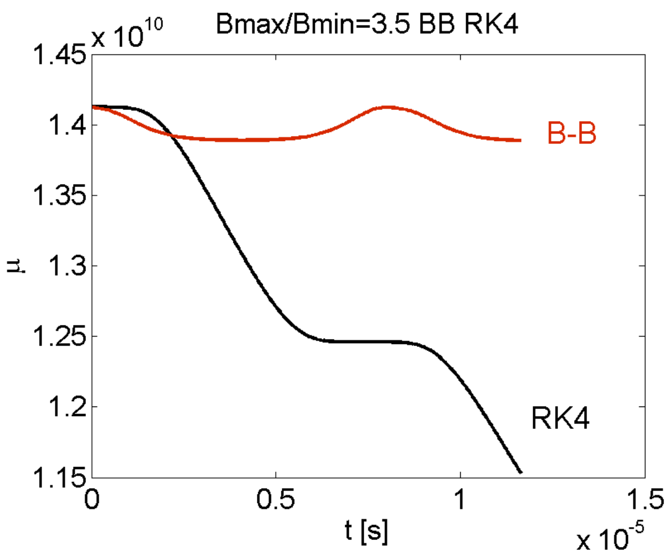
$$m\frac{d}{dt}v_{||} = F_{||} = 0$$

- … Qui est d'accord avec ce raisonnement?
- Si vous n'êtes pas d'accord, où est l'erreur?

Particule dans champ magnétique: Boris - Buneman







- B-B Conserve Emec exactement, (quel que soit Δt !)