Discrétisation d'EDO conservant une mesure

Application à la dynamique moléculaire

22 Mai 2002

Problème

On se donne un système d'EDO qui conserve une mesure.

$\rightarrow$ Construire un algorithme qui conserve aussi cette mesure.

Plan de l'exposé :

- quelques rappels
- construction d'algorithmes d'intégration
- algorithmes conservant la mesure
- remise en perspective

Dynamique $\dot{x} = \Gamma(x)$, de flot $\Phi(x,t)$, avec $x \in \mathbf{R}^{2M}$.

$\rightarrow$ **Mesure invariante pour Γ :**

$$\text{mesure} \quad d\mu = h(x)\,dx \quad \text{avec} \quad h(x) > 0 \quad \text{et}$$

$$\forall t \in \mathbf{R} \quad \forall \Delta_0 \subset \mathbf{R}^{2M} \qquad \int_{\Delta_0} h(x)\,dx = \int_{\Delta_t} h(x)\,dx$$

avec $\Delta_t = \Phi(\Delta_0, t)$.

Alors

$$h(\Phi(x,t))\ \mathrm{Jac}\,\Phi(x,t) = h(x)$$

$\rightarrow$ **Conservation discrète de la mesure :**

Flot numérique : $\Psi(x, \Delta t)$

$$h(\Psi(x,\Delta t))\ \mathrm{Jac}\,\Psi(x,\Delta t) = h(x)$$

Un exemple : les équations de Nosé-Hoover

$$\dot{r}_i = \frac{p_i}{m_i} \qquad \dot{\xi} = \frac{p_\xi}{Q}$$

$$\dot{p}_i = -\frac{\partial U}{\partial r_i} - \frac{p_\xi}{Q}\, p_i \qquad \dot{p}_\xi = \sum_{i=1}^{N} \frac{p_i^2}{m_i} - d\, N\, k_B\, T$$

$(\xi, p_\xi) \in \mathbf{R}^2$: position et impulsion d'une variable (fictive) additionelle.

Mesure invariante :

$$d\mu = \exp\left(d\, N\, \xi\right)\;\; d^N r\, d^N p\, d\xi\, dp_\xi$$

Intérêt de cette dynamique :

$$\forall A(r,p) \quad \lim_{T\to\infty} \frac{1}{T} \int_0^T A(r(t),p(t))\; dt = \frac{\displaystyle\int A(r,p) e^{-\beta H(r,p)}\; dr\;\, dp}{\displaystyle\int e^{-\beta H(r,p)}\; dr\;\, dp}$$

Opérateur de Liouville :

Soit Γ une dynamique de flot Φ. Soit $\mathcal{F} = \mathcal{F}(\mathbf{R}^{2M}, \mathbf{R})$.

$$\begin{array}{rcl} L \,:\, \mathcal{F} & \rightarrow & \mathcal{F} \\ u & \longmapsto & Lu \quad \text{défini par} \quad (Lu)(x) = \displaystyle\sum_{i=1}^{2M} \Gamma_i(x) \, \frac{\partial u}{\partial x_i}(x) \end{array}$$

Alors

$$\forall u \in \mathcal{F} \quad u\left(\Phi(x,t)\right) = \left[e^{tL} u\right](x)$$

$\rightarrow$ Lien entre le calcul d'un flot et le calcul de l'exponentielle d'un opérateur.

Preuve formelle :

Soit $v(x,t) \;=\; \left[e^{tL}\,u\right](x) \;=\; \sum_{k\geq 0} \frac{t^k}{k!}\,(L^k u)(x)$.

$$\left\{\begin{array}{rcl} \partial_t v - \Gamma(x)\,.\,\nabla_x v & = & 0 \\ v(x,0) & = & u(x) \end{array}\right.$$

Méthodes des caractéristiques :

$\theta(y,t)$ le flot induit par $-\Gamma$ et $g(t) = v(\theta(y,t),t)$.

On a $g'(t) = 0$, donc

$$v\,(\theta(y,t),t) = g(t) = g(0) = v(y,0) = u(y)$$

$$x = \theta(y,t) \quad \Leftrightarrow \quad y = \Phi(x,t) \quad \text{donc} \quad v(x,t) = u(\Phi(x,t)).$$

Théorème de Trotter : si $L = L_1 + L_2$, alors

$$e^{L\Delta t} = e^{L_1 \frac{\Delta t}{2}} \, e^{L_2 \Delta t} \, e^{L_1 \frac{\Delta t}{2}} + O\left(\Delta t^3\right)$$

Deux ordres de décomposition possibles

Algorithme pour intégrer $\dot{x} = \Gamma(x)$:

$$\text{On décompose :} \quad \Gamma = \Gamma_1 + \Gamma_2$$

$$\Phi, \ \Psi_1, \ \Psi_2 \quad \text{flots exacts de} \quad \left\{ \begin{array}{r} \dot{x} = \Gamma(x) \\ \dot{x} = \Gamma_1(x) \\ \dot{x} = \Gamma_2(x) \end{array} \right.$$

Dynamiques Γ_1 et Γ_2 plus simples : on dispose d'une expression analytique pour Ψ_1 et Ψ_2.

$$u\left(\Psi_1(x,t)\right) = \left[e^{tL_1} u\right](x) \quad \text{et} \quad u\left(\Psi_2(x,t)\right) = \left[e^{tL_2} u\right](x)$$

$$\begin{aligned}
u\left(\Phi(x,\Delta t)\right) &= \left[e^{\Delta t L} u\right](x) \\
&= \left[e^{L_1 \frac{\Delta t}{2}}\, e^{L_2 \Delta t}\, e^{L_1 \frac{\Delta t}{2}}\, u\right](x) + O\left(\Delta t^3\right) \\
&= \left[e^{L_1 \frac{\Delta t}{2}}\, e^{L_2 \Delta t}\, u\right]\left(\Psi_1(x, \tfrac{\Delta t}{2})\right) + O\left(\Delta t^3\right) \\
&= u\left[\Psi(x,\Delta t)\right] + O\left(\Delta t^3\right)
\end{aligned}$$

avec

$$x \quad \xrightarrow{\Psi_1(\bullet, \frac{\Delta t}{2})} \quad \Psi_1(x, \frac{\Delta t}{2}) \quad \xrightarrow{\Psi_2(\bullet, \Delta t)} \quad \ldots \quad \xrightarrow{\Psi_1(\bullet, \frac{\Delta t}{2})} \quad \Psi(x, \Delta t)$$

$$\text{Erreur numérique :} \quad \Psi(x,\Delta t) = \Phi(x,\Delta t) + O\left(\Delta t^3\right)$$

Application aux équations de Nosé-Hoover : (1D, 1 particule)

$$\dot{r} = \frac{p}{m} \qquad \dot{\xi} = \frac{p_\xi}{Q}$$

$$\dot{p} = F(r) - \frac{p_\xi}{Q}\,p \qquad \dot{p}_\xi = \frac{p^2}{m} - k_B\,T$$

On décompose

$$L_r = \frac{p}{m}\frac{\partial}{\partial r} \qquad L_\xi = \frac{p_\xi}{Q}\frac{\partial}{\partial \xi}$$

$$L_p = F(r)\frac{\partial}{\partial p} \qquad L_{p_\xi} = \left(\frac{p^2}{m} - k_B\,T\right)\frac{\partial}{\partial p_\xi}$$

$$L_{add} = -\frac{p_\xi}{Q}\,p\,\frac{\partial}{\partial p}$$

Expression analytique de Ψ_r : L_r correspond à

$$\dot{r} = \frac{p}{m} \qquad \dot{\xi} = 0$$

$$\dot{p} = 0 \qquad \dot{p}_\xi = 0$$

$$\text{Donc} \quad \Psi_r\left(r, p, \xi, p_\xi, \Delta t\right) = \left(r + \Delta t \frac{p}{m}, p, \xi, p_\xi\right)$$

Ordre de décomposition possible :

$$e^{\Delta t\, L} = \left(e^{\frac{\Delta t}{2} L_{p_\xi}}\ e^{\frac{\Delta t}{2} L_{add}}\ e^{\frac{\Delta t}{2} L_\xi}\right)\ e^{\frac{\Delta t}{2}\, L_p}\ e^{\Delta t\, L_r}\ e^{\frac{\Delta t}{2}\, L_p}$$

$$\left(e^{\frac{\Delta t}{2} L_\xi}\ e^{\frac{\Delta t}{2} L_{add}}\ e^{\frac{\Delta t}{2} L_{p_\xi}}\right)\ + O\left(\Delta t^3\right)$$

Conservation de la mesure :

$\rightarrow$ Mesure conservée par la dynamique : $d\mu = e^{\xi}\; dr\, dp\, d\xi\, dp_{\xi}$

$\rightarrow$ Conservation discrète de la mesure ? Vérifier si

$$e^{\xi(\Delta t)}\ \mathrm{Jac}\,\Psi(x,\Delta t) = e^{\xi}$$

où $x(0) = (r, p, \xi, p_{\xi})$ et $x(\Delta t) = (r(\Delta t), p(\Delta t), \xi(\Delta t), p_{\xi}(\Delta t))$

- ce n'est pas évident (L_{add})
- cela peut dépendre de l'ordre de la décomposition

$\rightarrow$ Chercher une méthode plus systématique

Cas particulier : $\dot{x} = \Gamma(x)$ où

$$\Gamma(x) = (\Gamma_1(x), \quad \dots \quad , \Gamma_{2M}(x)) \quad \text{avec } \Gamma_i \text{ indépendant de } x_i$$

$$\text{Mesure conservée :} \quad d\mu \ = \ dx_1 \dots dx_{2M}$$

$$\Gamma \ = \ \sum_{i=1}^{2M} \tilde{\Gamma}_i \ = \ \sum_{i=1}^{2M} (0, \quad \dots \quad , \Gamma_i, \quad \dots \quad , 0)$$

$$\tilde{\Gamma}_1 \text{ correspond à } \begin{cases} \dot{x}_1 & = & \Gamma_1(x_2, \dots , x_{2M}) \\ \dot{x}_j & = & 0 \quad \text{pour tout} \quad j \geq 1 \end{cases}$$

Flot $\Psi_i(x, \Delta t)$: translation sur x_i. Donc $\Psi(x, \Delta t)$ est une composition de translations. Donc

$$h(\Psi(x, \Delta t)) \ \mathrm{Jac}\, \Psi(x, \Delta t) \ = \ 1 \ = \ h(x)$$

$\rightarrow$ L'algorithme conserve la mesure.

Méthode "systématique" pour construire des algorithmes qui conservent la mesure :

$$\dot{y} = Y(y) \quad , \text{ mesure conservée } d\mu = h(y)\,dy$$

Changement de variables $\quad y \longrightarrow x \quad$ tel que

$$\begin{cases} \dot{x} = \Gamma(x) \quad \text{avec} \quad \Gamma_i \quad \text{indépendant de} \quad x_i \\ \\ d\mu = dx \end{cases}$$

On sait alors construire un algorithme en x qui conserve $d\mu$.

Application aux équations de Nosé-Hoover :

$$\begin{aligned} \dot{r} &= \frac{p}{m} & \dot{\xi} &= p_\xi/Q \\ \dot{p} &= F(r) - \frac{p_\xi}{Q}\,p & \dot{p}_\xi &= \frac{p^2}{m} - k_B\,T \end{aligned}$$

$$d\mu = e^{\xi}\;dr\,dp\,d\xi\,dp_\xi$$

$\longrightarrow$ Changement de variables : $\tilde{p} = e^{\xi}\,p$

$$\begin{aligned} \dot{r} &= \frac{\tilde{p}}{m}\,e^{-\xi} & \dot{\xi} &= p_\xi/Q \\ \dot{\tilde{p}} &= e^{\xi}\,F(r) & \dot{p}_\xi &= \frac{\tilde{p}^2}{m}\,e^{-2\xi} - k_B T \end{aligned}$$

$$d\mu = dr\,d\tilde{p}\,d\xi\,dp_\xi$$

Résultats numériques sur GGMT :

$$\begin{aligned}
\dot{r} &= \frac{p}{m} & \dot{p} &= F(r) - \frac{p_{\xi_1}}{Q_1}\, p - \frac{p_{\xi_2}}{Q_2} \left((k_B T) p + \frac{p^3}{3m} \right) \\
\dot{\eta}_1 &= \frac{p_{\xi_1}}{Q_1} & \dot{\eta}_2 &= \left(k_B T + \frac{p^2}{m} \right) \frac{p_{\xi_2}}{Q_2} \\
\dot{p}_{\xi_1} &= \frac{p^2}{m} - k_B T & \dot{p}_{\xi_2} &= \frac{p^4}{3m^2} - (k_B T)^2
\end{aligned}$$

Mesure conservée :

$$d\mu = e^{\eta_1 + \eta_2}\ dr\ dp\ dp_{\xi_1}\ dp_{\xi_2}\ d\eta_1\ d\eta_2$$

Changement de variables :

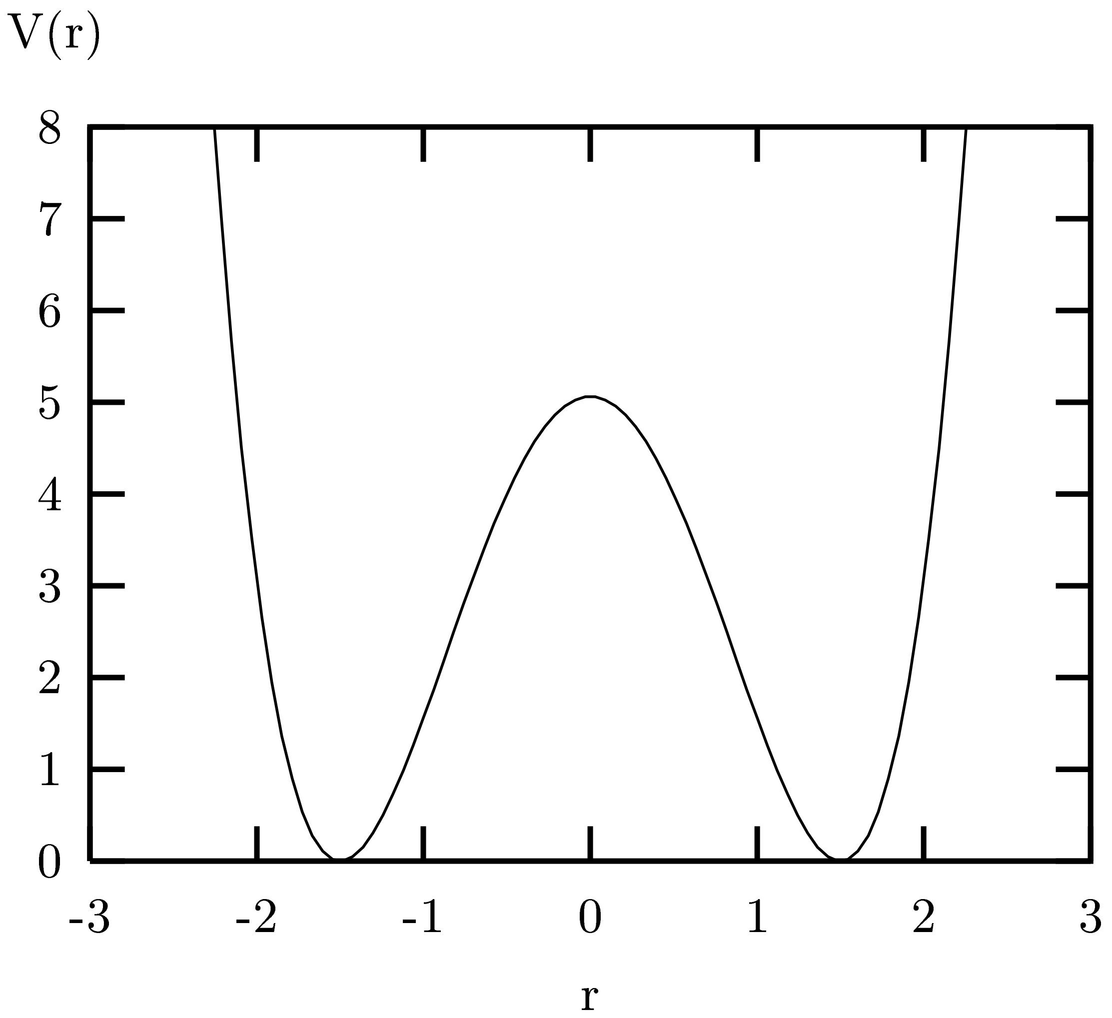
$$\xi_1 = \eta_1 \qquad \xi_2 = \exp\left(2/3\ \eta_2\right) \qquad \tilde{p} = \sqrt{\xi_2}\ e^{\xi_1}\ p$$

$$\begin{array}{rclrcl}
\dot{r} & = & \dfrac{\tilde{p}}{m}\,\dfrac{e^{-\xi_1}}{\sqrt{\xi_2}} & \dot{\tilde{p}} & = & \sqrt{\xi_2}\,e^{\xi_1}\,F(r) \\
\dot{\xi}_1 & = & \dfrac{p_{\xi_1}}{Q_1} + \dfrac{p_{\xi_2}}{Q_2}\,k_B T & \dot{\xi}_2 & = & \dfrac{2}{3}\,e^{-2\xi_1}\,\dfrac{\tilde{p}^2}{m}\,\dfrac{p_{\xi_2}}{Q_2} \\
\dot{p_{\xi_1}} & = & \dfrac{\tilde{p}^2}{m}\,\dfrac{e^{-2\xi_1}}{\xi_2} - k_B T & \dot{p_{\xi_2}} & = & \dfrac{\tilde{p}^4}{3m^2}\,\dfrac{e^{-4\xi_1}}{\xi_2^2} - \left(k_B T\right)^2
\end{array}$$

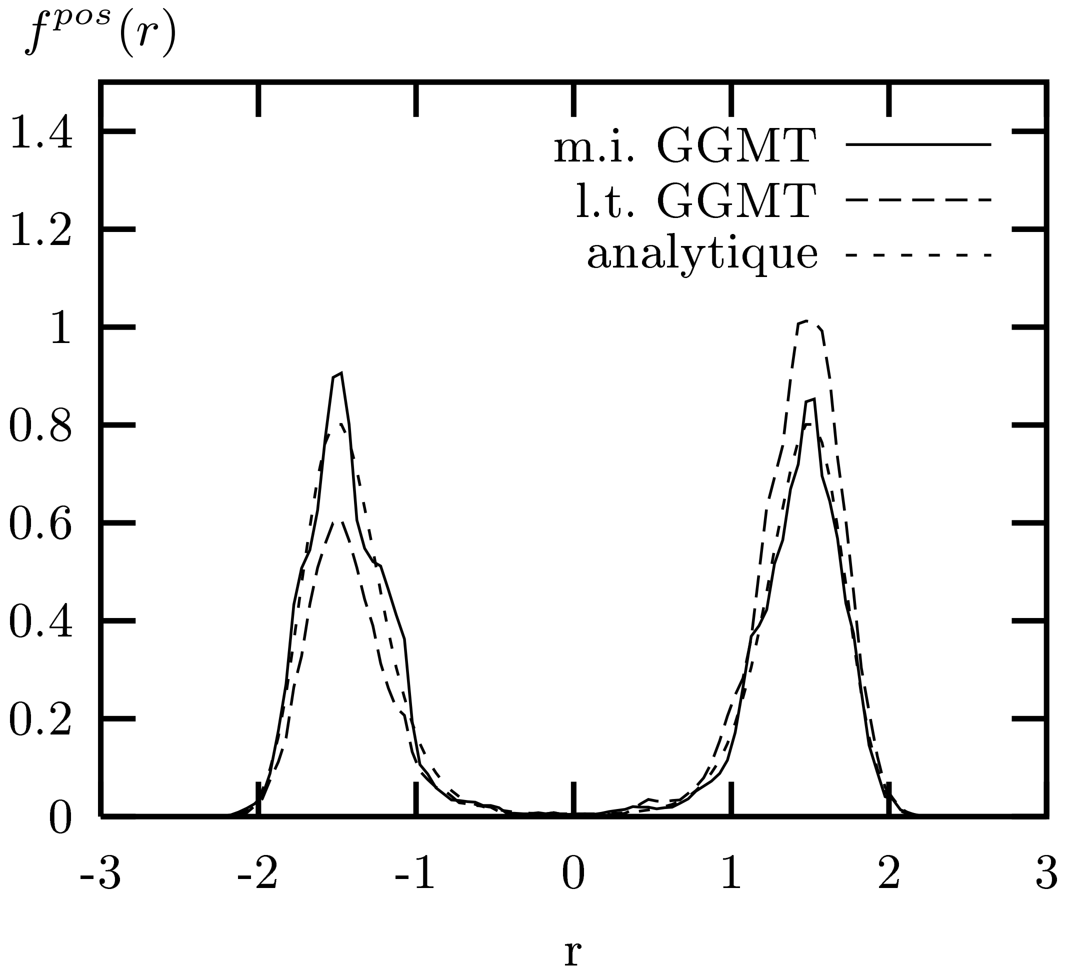
et

$$d\mu = dr\ d\tilde{p}\ dp_{\xi_1}\ dp_{\xi_2}\ d\xi_1\ d\xi_2$$

Potentiel en double puits $\qquad V(r) = D_0\,(a^2 - r^2)^2$

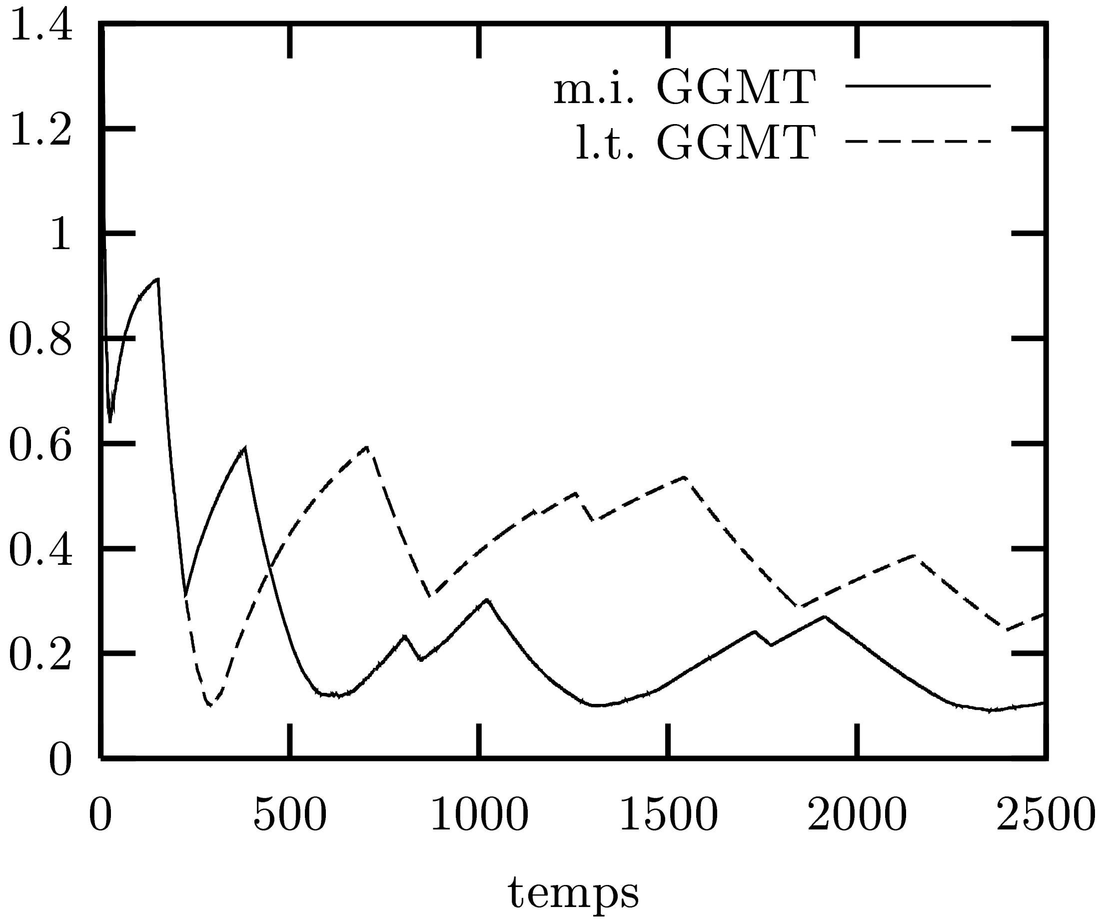


Fonction de distribution en position :

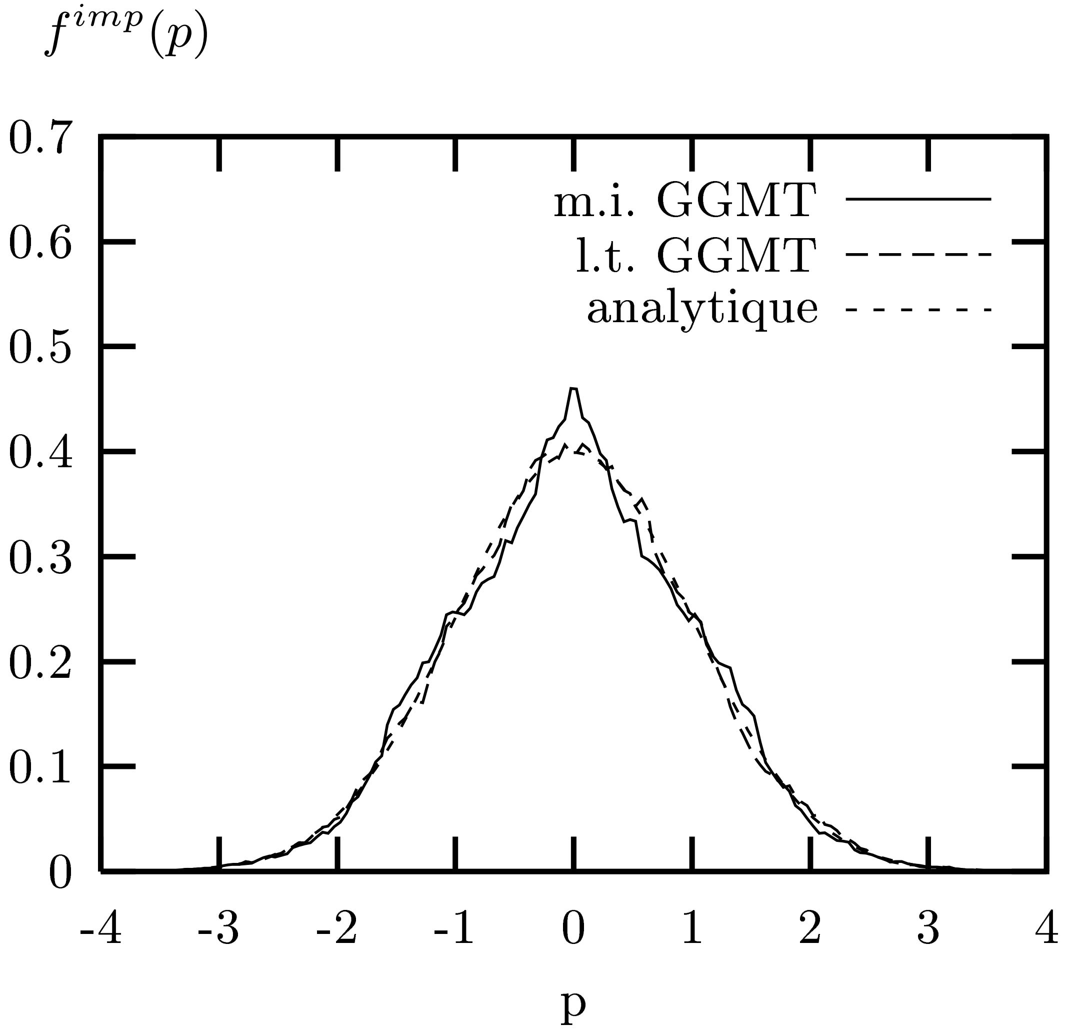


Convergence (en norme L^1) de la fonction de distribution :

$$< f^{pos}(r) - f^{pos}_{exact}(r) >$$

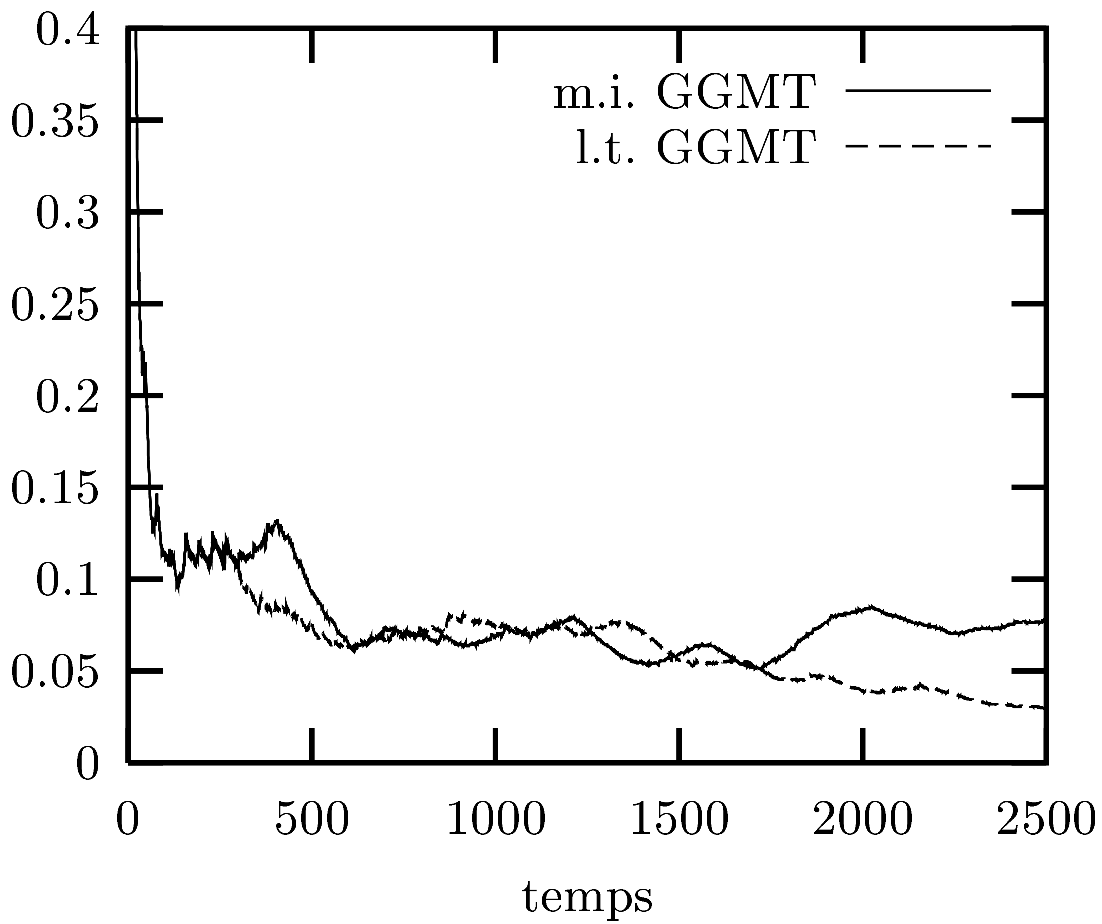


Fonction de distribution en impulsion :

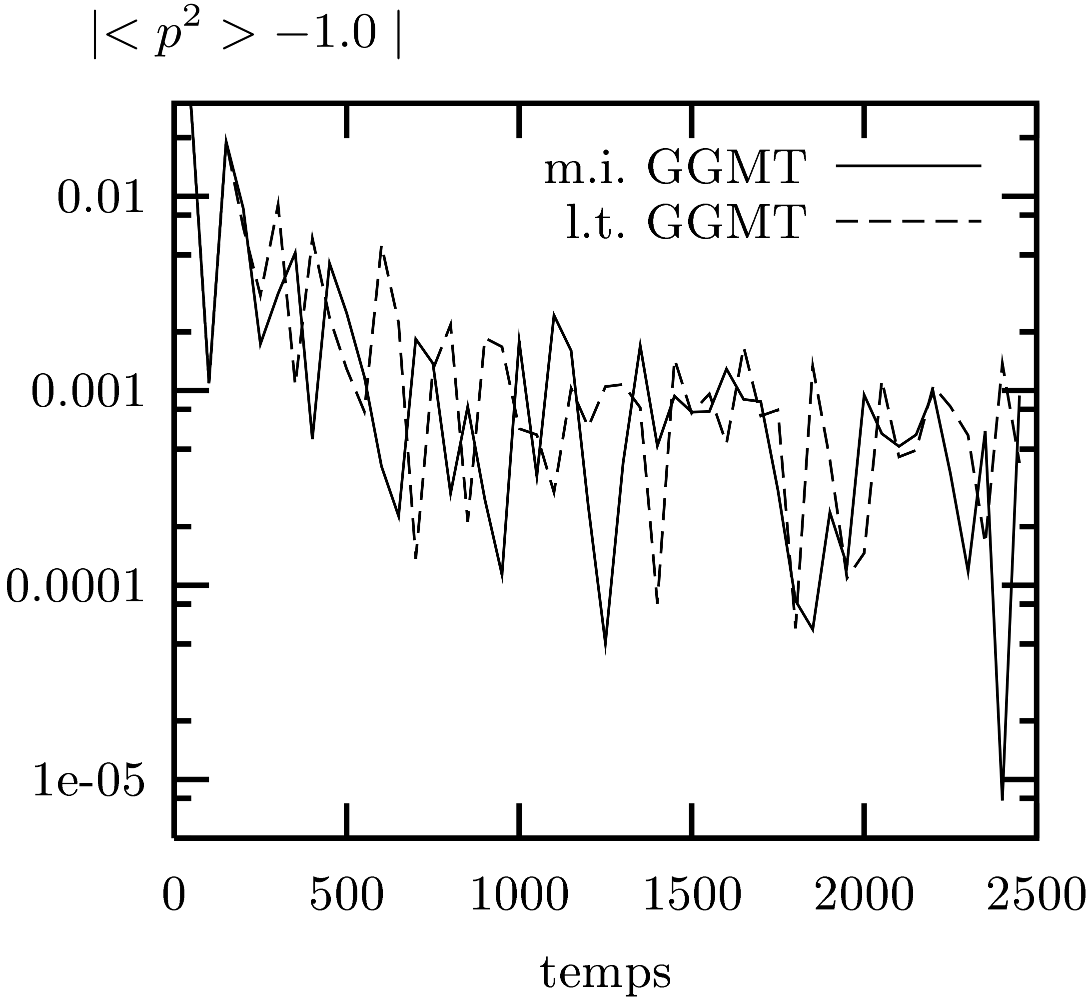


Convergence (en norme L^1) de la fonction de distribution :

$$< f^{imp}(p) - f^{imp}_{exact}(p) >$$



Convergence de $< p^2 >$:



Remise en perspective :

Systèmes hamiltoniens : $\dot{q} = \dfrac{\partial H}{\partial p}$, $\dot{p} = -\dfrac{\partial H}{\partial q}$

– la mesure dx est conservée,

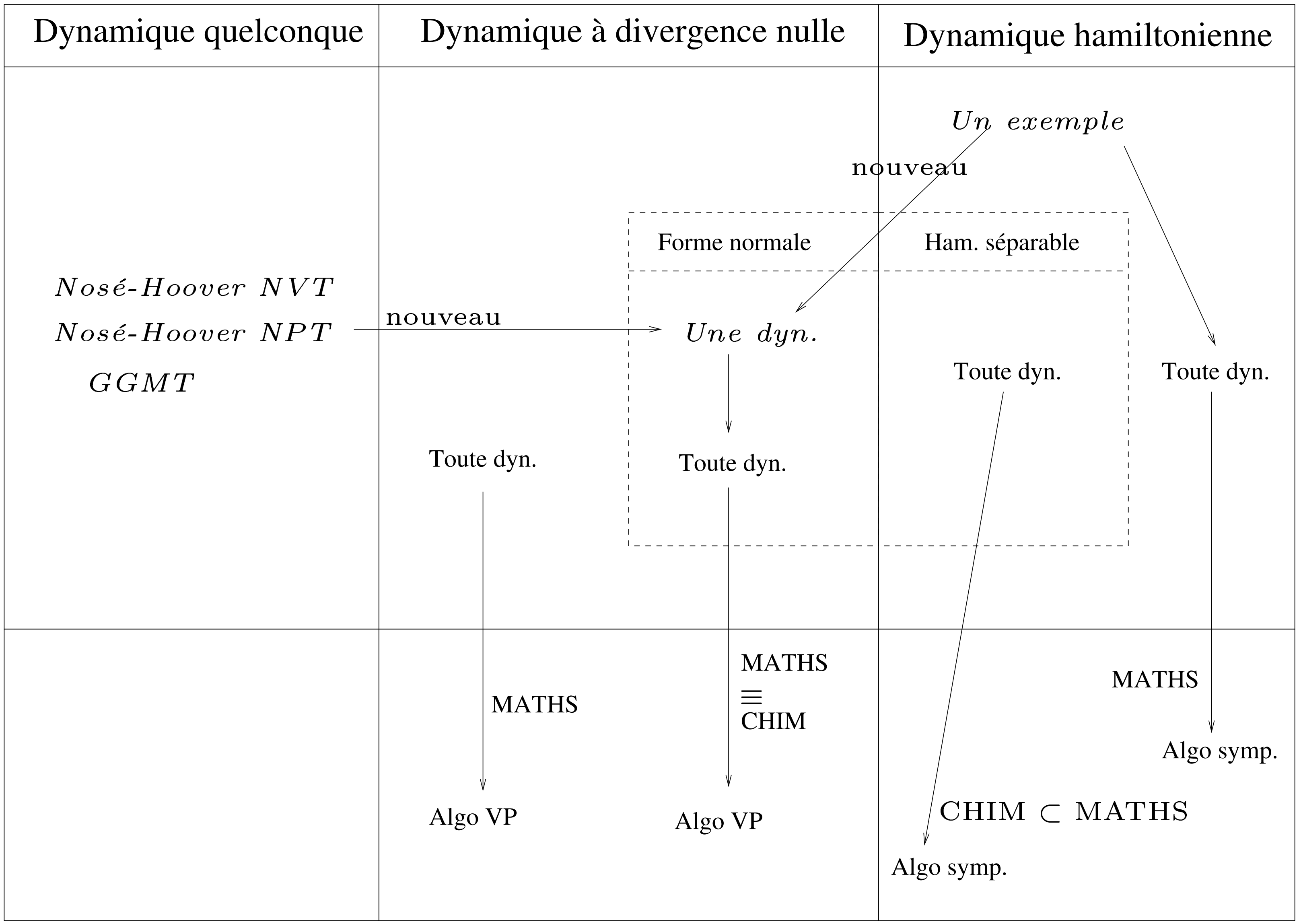
– le flot est symplectique.

On sait construire des algorithmes qui ont ces deux propriétés.

Systèmes à divergence nulle : $\dot{x} = \Gamma(x)$ avec $\operatorname{div} \Gamma = 0$

– la mesure dx est conservée.

On sait construire des algorithmes qui conservent la mesure.



Dynamique quelconque
Dynamique à divergence nulle
Dynamique hamiltonienne
Un exemple
nouveau
Forme normale
Ham. séparable
Nosé-Hoover NVT
Nosé-Hoover NPT
GGMT
nouveau
Une dyn.
Toute dyn.
Toute dyn.
Toute dyn.
Toute dyn.
MATHS
MATHS
≡
CHIM
MATHS
Algo symp.
CHIM ⊂ MATHS
Algo VP
Algo VP
Algo symp.