

Découpage de l'espace

Le but de cette session est de rendre possible le passage à l'échelle.

Vous allez devoir également réfléchir à une stratégie de vérification et validation de vos développements.

Dans la session précédente, vous avez pu évaluer le nombre maximal de particules qui pouvaient interagir en un temps raisonnable.

Nous souhaitons également utiliser un potentiel d'interaction différent. Dans les séances suivantes, nous allons nous intéresser aux interactions entre particules chargées.

L'interaction entre deux particules peut être décrite, par exemple, par le potentiel de Lennard-Jones

$$\begin{aligned} U(r_{ij}) &= 4 \cdot \varepsilon \left(\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right) \\ &= 4 \cdot \varepsilon \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \cdot \left(\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 - 1 \right) \end{aligned}$$

avec ε correspond à la profondeur du potentiel, i.e. la stabilité, et σ correspond à l'interaction avec l'axe nul du potentiel. On prendra dans un premier temps $\varepsilon = 1$ et $\sigma = 1$.

Question 1.

Représenter le potentiel de Lennard-Jones pour un système à deux particules en fonction de la distance r . À quel comportement peut-on s'attendre entre les particules? Comparer avec la force gravitationnelle.

Pour N particules $x_1, \dots, x_n$, le potentiel global est défini par une double somme

$$\begin{aligned} V(x_1, \dots, x_N) &= \sum_{i=1}^N \sum_{j=i+1}^N U(r_{ij}) \\ &= 4 \cdot \varepsilon \sum_{i=1}^N \sum_{j=i+1}^N \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \cdot \left(\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 - 1 \right) \end{aligned}$$

Ce potentiel global permet de dériver les forces d'interactions qui seront utilisées dans la simulation

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_i &= -\nabla_{x_i} V(x_1, \dots, x_n) \\ &= 24 \cdot \varepsilon \sum_{i=1, i \neq j}^N \frac{1}{r_{ij}^2} \cdot \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \cdot \left(1 - 2 \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right) \mathbf{r}_{ij} \end{aligned}$$

Étant donné la symétrie des termes de forces, il sera préférable de considérer la force comme la décomposition en forces élémentaires.

$$F_i = \sum_{j=1, j \neq i}^N F_{ij}$$

C'est cette force que nous utiliserons dans la bibliothèque (en remplacement ou complément de la force gravitationnelle).

Le potentiel d'interaction tracé dans la première question montre qu'à partir d'une certaine distance, celui peut être négligé. Nous allons utiliser cette propriété pour limiter la complexité du calcul du potentiel.

Soit r_{cut} la distance à partir de laquelle le potentiel est négligé

$$U(r_{ij}) = \begin{cases} 4 \cdot \varepsilon \left(\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right) & r_{ij} \leq r_{cut} \\ 0 & r_{ij} > r_{cut} \end{cases}$$

1 Création d'un *Univers*

Les particules n'évoluent pas librement dans l'espace, mais sont soumises à des contraintes : constantes physiques, dimension (1, 2 ou 3), longueurs caractéristiques par dimension (L_d), un rayon de coupe (r_{cut}).

L'ensemble de ces éléments est géré par la classe `Univers`.

Question 2.

Proposez une manière d'ajouter ces fonctionnalités à la classe `Univers`.

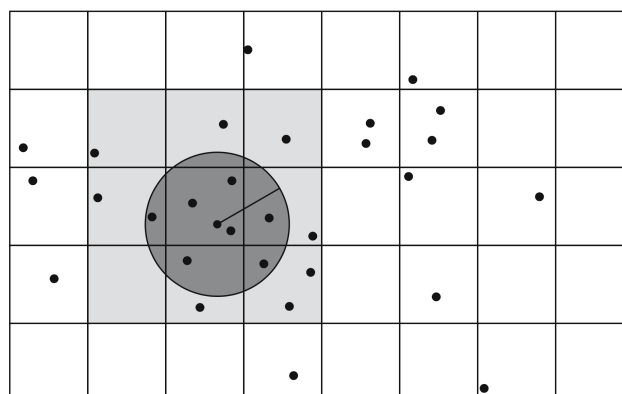
Pour faciliter le repérage des particules dans l'espace, nous allons le mailler par une grille tensorielle de cubes. Le nombre de cube dans chaque direction (nc_d) dépend de la longueur caractéristique de la direction et de la taille de la cellule

$$nc_d = \left\lfloor \frac{L_d}{r_{cut}} \right\rfloor.$$

`Univers` devra donc contenir un ensemble de cellule. Chacune de ces cellules contient des particules et possède des cellules voisines (3 en 1D, 9 en 2D, 27 en 3D).

Question 3.

Ajouter les éléments nécessaires à la classe `Univers`. Initialiser.



2 Calcul des potentiels

Le maillage construit permet de limiter le parcours des particules. Seules les particules qui sont dans la même cellule ou dans une cellule adjacente sont candidates à contribuer à la force d'interaction. Pour ces paires de particules uniquement, on calcule la distance, et si le rayon de coupure n'est pas atteint, on calcule la force d'interaction.

Question 4.

Modifier l'algorithme et l'implémentation du calcul de force pour prendre en compte cette approche.

Avec cette approche, il est important de positionner les particules dans la bonne cellule. A la fin de chaque itération en temps, on mets donc à jour la position logique des particules.

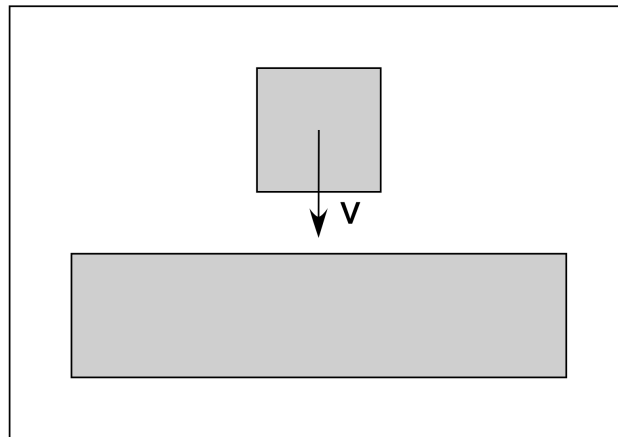
Question 5.

Écrire la fonction de mise à jour des cellules.

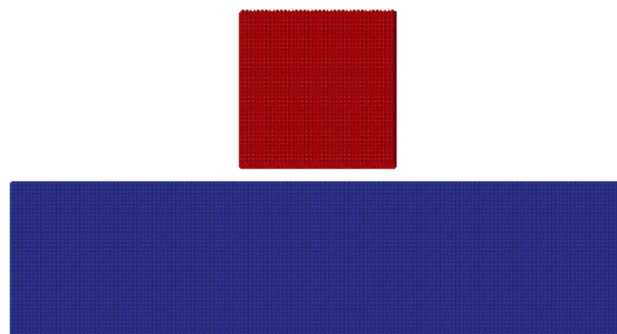
Pour contrôler les résultats, on pourra dans un premier temps conserver la force gravitationnelle des sessions précédentes et vérifier que les orbites sont correctes.

3 Application : collision de deux objets

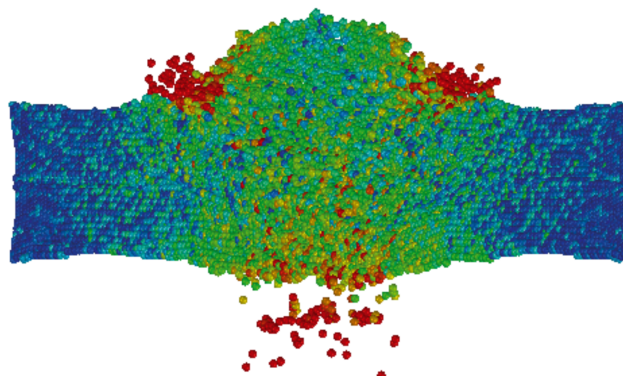
On souhaite simuler la collision entre deux objets comme sur la figure



Ce qui permettra d'obtenir les résultats de simulation suivant, respectivement à $t = 0$



à $t = 3.5$



et à $t = 19.5$.



Afin de réaliser cette simulation, on considère les paramètres suivants :

$$\begin{aligned} L_1 &= 250, & L_2 &= 250, \\ \varepsilon &= 5, & \sigma &= 1, \\ m &= 1, & v &= (0, -10), \\ N_1 &= 1600, & N_2 &= 6400, \\ r_{cut} &= 2.5\sigma, & \delta t &= 0.00005 \end{aligned}$$

avec v la vitesse initiale des particules du carré rouge.

Le carré contient 40×40 particules équiréparties et le rectangle contient 160×40 particules équiréparties. La distance entre les particules est $2^{1/6}\sigma$.

Question 6.

Réaliser la simulation jusqu'à $t = 19.5$.