Algorithme de simulation d'évènements pour un système de sphères dures

La simplicité de l'interaction entre particules dures permet de simuler l'évolution du système sans recourir au calcul différentiel, et donc, sans introduire d'erreurs numériques liées à la discrétisation temporelle.

Les collisions entre particules conservent l'impulsion, et les collisions des particules avec les parois du récipient inversent la composante de la vitesse normale à la paroi. Entre les collisions, les disques se déplacent simplement comme des particules libres. À un instant t_n, la position du disque j est donnée par

$$\boldsymbol{r}_j(t_n) = \boldsymbol{r}_j(t_{n-1}) + (t_n - t_{n-1})\boldsymbol{v}_j, \tag{1}$$

où $\boldsymbol{r}_j(t_{n-1})$ est la position à l'instant précédent et $\boldsymbol{v}_j$ la vitesse. L'évolution du système se fait en trois étapes.

D'abord, on calcule quel est le évènement suivant, c'est-à-dire, parmi toutes les collisions possibles entre deux particules p_i, p_j et entre une particule p_i et l'une des parois P_k, laquelle est la plus proche dans le temps. Le temps de la collision t_{p_i,p_j} entre deux particules est donné par la condition

$$|\Delta\boldsymbol{r}_{ij}(t_{p_i,p_j})|^2 = (2\sigma)^2, \tag{2}$$

où σ est le rayon des disques et $\Delta\boldsymbol{r}_{ij}(t) = \boldsymbol{r}_i(t) - \boldsymbol{r}_j(t)$ avec $\boldsymbol{r}_i$, $\boldsymbol{r}_j$ donnés par l'eq. (1). En prenant les eqs. (1) et (2), on trouve

$$t_{p_i,p_j} = \frac{-\Delta\boldsymbol{r}_{ij}(t_{n-1})\cdot\Delta\boldsymbol{v}_{ij} - \sqrt{[\Delta\boldsymbol{r}_{ij}(t_{n-1})\cdot\Delta\boldsymbol{v}_{ij}]^2 - |\Delta\boldsymbol{v}_{ij}|^2[|\Delta\boldsymbol{r}_{ij}(t_{n-1})|^2 - 4\sigma^2]}}{|\Delta\boldsymbol{v}_{ij}|^2}, \tag{3}$$

où $\Delta\boldsymbol{v}_{ij} = \boldsymbol{v}_i - \boldsymbol{v}_j$. A noter que deux disques n'entrent en collision que si l'argument de la racine carrée est positif et si $\Delta\boldsymbol{r}_{ij}(t_{n-1})\cdot\Delta\boldsymbol{v}_{ij} < 0$ (c.à.d. les disques s'rapprochent).

De la même façon, le temps de collision entre une particule et les parois du récipient perpendiculaires à l'axe x est

$$t_{p_i,P_{x=0}} = \frac{\sigma - x_i(t_{n-1})}{v_i^x} \quad \text{si } v_i^x < 0, \tag{4}$$

$$t_{p_i,P_{x=L}} = \frac{L - \sigma - x_i(t_{n-1})}{v_i^x} \quad \text{si } v_i^x > 0. \tag{5}$$

Pour les autres parois on a

$$t_{p_i,P_{y=0}} = \frac{\sigma - y_i(t_{n-1})}{v_i^y} \quad \text{si } v_i^y < 0, \tag{6}$$

$$t_{p_i,P_{y=L}} = \frac{L - \sigma - y_i(t_{n-1})}{v_i^y} \quad \text{si } v_i^y > 0. \tag{7}$$

Ici L est la diménsion latérale de la boîte et $x_i, y_i, v_i^{x,y}$ répresentent les composantes de la position et de la vitesse du disque i.

Le temps du prochain évènement est $t_n = t_{n-1} + \min\{t_{p_i,p_j}, t_{p_i,P_k}\}_{i,j=1,\ldots,N;\, k\in\text{parois}}$.

Deuxièmement, on fait évoluer toutes les particules selon l'eq. (1).

Finalement, on met à jour la vitesse de la particule ou des particules impliquée(s) dans la collision. Pour une collision entre deux particules, on trouve, en imposant la conservation de l'impulsion

$$\boldsymbol{v}_i' = \boldsymbol{v}_i - \boldsymbol{u}_\perp(\Delta \boldsymbol{v}_{ij} \cdot \boldsymbol{u}_\perp), \tag{8}$$
$$\boldsymbol{v}_j' = \boldsymbol{v}_j + \boldsymbol{u}_\perp(\Delta \boldsymbol{v}_{ij} \cdot \boldsymbol{u}_\perp), \tag{9}$$

où $\boldsymbol{u}_\perp = \frac{\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j}{\Delta \boldsymbol{r}_{ij}}$ au moment de la collision.
Lors d'une collision particule-paroi, $({v'}_i^x, {v'}_i^y) = (-v_i^x, v_i^y)$ si la paroi est perpendiculaire à l'axe x et $({v'}_i^x, {v'}_i^y) = (v_i^x, -v_i^y)$ sinon.

Mesure d'observables

Pour connaître l'évolution du système il faut stocker dans un fichier les positions et les vitesses des particules à des intervalles de temps réguliers. On peut considérer une mesure comme un évènement, mais après lequel les vitesses ne sont pas modifiées.

Le temp de calcul pouvant devenir considérable, on vous conseille vivement de développer deux codes indépendants : l'un qui calcule l'évolution du système et l'autre qui analyse le fichier des positions et des vitesses afin de calculer les observables thermodynamiques. Éventuellement, vous pourrez modifier le code "évolution" pour qu'il lise depuis un fichier la configuration initiale du système, ce qui vous permettra d'interrompre une simulation pour la reprendre plus tard.

Aussi, le calcul d'observables thermodynamiques ne doit pas se faire en prenant la configuration du système à un seul instant, mais en moyennant l'observable sur une période de temps suffisante pour délaver les fluctuations statistiques.

Bibliographie

W. Krauth. *Statistical Mechanics Algorithms and Computations.* Oxford University Press, 2006.