

ROBERT POULIN

**INTÉGRATION SYMPLECTIQUE ET ÉTUDE DYNAMIQUE
DE SYSTÈMES HAMILTONIENS**
CANALISATION D'UNE PARTICULE CHARGÉE TRAVERSANT UN CRISTAL

Thèse
présentée
à la Faculté des études supérieures
de l'Université Laval
pour l'obtention
du grade de Philosophiae Doctor (Ph.D.)

Département de physique
FACULTÉ DES SCIENCES ET DE GÉNIE
UNIVERSITÉ LAVAL
QUÉBEC

Décembre 1997

Résumé

Le problème de canalisation d'une particule chargée traversant un cristal est examiné dans un contexte de dynamique hamiltonienne. Nous désirons étudier la stabilité de l'espace des phases engendré par des systèmes hamiltoniens à 2 degrés de liberté issus d'un modèle simple appliqué à différentes configurations de canalisation. Pour ce faire, certains outils doivent être élaborés. Des intégrateurs adaptifs et *symplectiques*, particulièrement bien adaptés aux systèmes hamiltoniens sont d'abord développés. En plus d'être performants, ils permettent la conservation des constantes du mouvement à la précision voulue. De nouvelles méthodes quantitatives, basées sur l'intégration symplectique et des simulations de type Monte-Carlo, sont ensuite développées pour déterminer de façon fiable la stabilité des trajectoires. Les résultats montrent que pour les systèmes cristallins considérés, s'il y a transition stochastique (espace des phases passant de stable à instable), elle s'effectue de façon graduelle et non abrupte.

Robert Poulin

prof. Louis J. Dubé

Résumé

Le problème de canalisation d'une particule chargée traversant un cristal est examiné dans un contexte de dynamique hamiltonienne. Nous désirons étudier la stabilité de l'espace des phases engendré par des systèmes hamiltoniens à 2 degrés de liberté. Ils sont issus d'un modèle simple, mais réaliste, appliqué à différentes configurations de canalisation. Afin de réaliser cette analyse de stabilité, certains outils doivent être élaborés.

Des intégrateurs adaptifs et *symplectiques*, particulièrement bien adaptés aux systèmes hamiltoniens sont d'abord développés. En plus d'être performants, ils permettent la conservation des constantes du mouvement à la précision voulue. De plus, ils ont été conçus pour bénéficier directement, sans aucune modification, des derniers développements dans le domaine de l'intégration symplectique.

De nouvelles méthodes quantitatives, basées sur l'intégration symplectique et des simulations de type Monte-Carlo, sont ensuite développées pour déterminer de façon fiable la stabilité des trajectoires.

Les résultats montrent que pour les systèmes cristallins considérés, s'il y a transition stochastique (espace des phases passe de stable à instable), elle s'effectue de façon graduelle et non abrupte. De plus, une nouvelle forme de représentation graphique permet d'examiner avec précision et flexibilité la stabilité de n'importe quel espace des phases.

Avant-propos

L'achèvement d'un travail de la nature d'une thèse de doctorat demande patience, persévérance, savoir faire et confiance en soi. Toutes ces qualités se développent par la formation que l'on reçoit et par les gens que l'on côtoie. C'est pourquoi je prends quelques lignes pour exprimer la profonde gratitude que j'éprouve envers plusieurs personnes.

Je remercie tout d'abord le professeur Louis Dubé pour la confiance, le dévouement et la compréhension qu'il a montré à mon égard tout au long de mes études graduées. Son enthousiasme a toujours été pour moi une grande source de motivation. Sa vaste culture scientifique, son expérience de la vie et la solidarité qu'il démontre envers ses étudiants en font un directeur de recherche et un mentor de grande valeur.

Je remercie aussi tout spécialement les professeurs Reinhold Blümel, Pierre Amiot et Gabriel Bédard d'avoir eu la gentillesse d'examiner ma thèse avec grand soin malgré des délais restreints. La pertinence de leurs commentaires ne manque pas de compléter la version finale que vous lisez présentement.

Je dois aussi signaler la collaboration des docteurs Marie-Claude Boily et Benoît Mâsse qui m'ont permis avec latitude de terminer cette thèse tout au cours de l'évolution d'un projet de recherche en épidémiologie.

D'un coté plus personnel, je ne peux passer sous silence le support moral apporté par mes parents, Lise Auclair et Wilbrod Poulin, mes amis du groupe de recherche en épidémiologie, Marie-Claude Boily, Benoît Mâsse, Kamal Desai et autres camarades de travail, tous mes amis de longue date en physique et particulièrement Nicolas Varfalvy à qui je souhaite la meilleure des chances dans sa nouvelle carrière en physique médicale.

Je me dois de terminer en remerciant mon épouse, Anne Claire Jacob, qui vogue à mes côtés et à mon grand bonheur, sur les flots parfois tumultueux de la vie.

Robert Poulin, décembre 1997

Table des matières

Avant-propos	i
Table des matières	ii
Liste des tableaux	iv
Liste des figures	v
Introduction	1
1 Dynamique d'une particule canalisée par un cristal	6
1.1 Canalisation dans l'approximation des chaînes continues	7
1.1.1 Potentiels atomiques de Thomas-Fermi	7
1.1.2 Mécanique classique et approximation continue	10
1.1.3 Potentiels cristallins bidimensionnels	11
1.2 Configurations de canalisation étudiées	12
1.2.1 Types de projectiles	14
1.2.2 Types de potentiels cristallins	14
1.2.3 Cristal et axes de canalisation	15
1.2.4 Unités réduites	15
1.2.5 Potentiels cristallins étudiés	17
1.2.6 Potentiels à dynamique non-linéaire	21
1.3 Etude dynamique et stabilité de l'espace des phases	26
1.3.1 Analyse de stabilité locale et courbure gaussienne	26
1.3.2 Section de Poincaré et stabilité globale des trajectoires	30
1.4 Récapitulatif	33
2 Intégration numérique des systèmes hamiltoniens	43
2.1 Intégration symplectique	44
2.2 Intégrateurs symplectiques à pas fixe	47
2.2.1 Intégrateurs explicites pour hamiltoniens de type potentiel	48
2.2.2 Potentiels quartiques vallonné et escarpé	51
2.2.3 Tests sur 17 intégrateurs trouvés en littérature	51
2.3 Intégrateurs symplectiques à pas variable	61
2.3.1 Relation d'échelle pour l'erreur relative en énergie	62

2.3.2	Critère de tolérance	62
2.3.3	Estimation du prochain pas	64
2.3.4	Estimation à extrapolation d'ordre zéro	67
2.3.5	Estimation à extrapolation d'ordre un	68
2.3.6	Intégration symplectique à pas variable : version initiale	69
2.3.7	Stabilisation de l'erreur en énergie	71
2.3.8	Intégration symplectique à pas variable : version finale	73
2.3.9	Test de l'intégration symplectique à pas variable	80
2.4	Analyses de performance	82
2.4.1	Performances théoriques	82
2.4.2	Performances réelles	91
2.5	Quelques notes supplémentaires	95
2.6	Récapitulatif	97
3	Intégration numérique et intégrales du mouvement	99
3.1	Potentiel de Toda	100
3.1.1	Intégration symplectique à pas fixe	101
3.1.2	Intégration symplectique à pas variable	105
3.2	Intégrateur symplectique à pas variable et à intégrales multiples	105
3.3	Problème de Kepler	108
3.3.1	Restriction dans le plan et choix des orbites	109
3.3.2	Intégrateurs symplectiques et conservation des intégrales du mouvement	111
3.4	Récapitulatif	115
4	Transition stochastique des systèmes hamiltoniens	117
4.1	Stabilité globale et exposant de Lyapunov	118
4.1.1	Taux moyen de divergence exponentielle	118
4.1.2	Exposant de Lyapunov et intégration à pas variable	120
4.2	Transition stochastique : potentiel $V_{\text{Si}<100>}$	124
4.2.1	Simulation Monte-Carlo et distribution de Lyapunov	125
4.2.2	Densité de Lyapunov	125
4.2.3	Critère de stabilité globale	127
4.2.4	Courbe de transition stochastique	132
4.3	Transition stochastique : potentiel $V_{\text{Si}<111>}$	135
4.4	Transition stochastique : potentiel $V_{\text{Si}<110>}$	135
4.5	Récapitulatif	142
	Conclusion	145
	Appendice A : Atome d'hydrogène en champ externe	150
	Références bibliographiques	151

Liste des tableaux

1.1	Validité de la mécanique classique et de l'approximation des chaînes continues.	11
1.2	Système d'unités adopté pour les systèmes cristallins.	17
1.3	Paramètres définissant les potentiels cristallins.	18
2.1	Algorithmes permettant d'accomplir un pas d'intégration symplectique.	48
2.2	Comparaison entre deux intégrateurs symplectiques de second ordre. . .	50
2.3	Sommaire des performances de 17 intégrateurs symplectiques.	56
2.4	Les meilleures solutions parmi les coefficients à utiliser avec ISPQ et/ou ISQP.	59
3.1	Conditions initiales pour le problème de Kepler.	110

Liste des figures

1.1	Représentation schématique d'une particule canalisée par un cristal. . .	7
1.2	Comparaison entre trois potentiels pour décrire la même interaction. . .	9
1.3	Potentiel cristallin bidimensionnel obtenu par l'approximation des chaînes continues.	13
1.4	Structure du cristal de silicium et configurations de canalisation.	16
1.5	Potentiel cristallin pour la configuration $Q^+ + \text{Si}\langle 100 \rangle$	19
1.6	Illustration d'un point de selle.	20
1.7	Potentiel cristallin pour la configuration $Q^+ + \text{Si}\langle 111 \rangle$	22
1.8	Potentiel cristallin pour la configuration $Q^- + \text{Si}\langle 110 \rangle$	23
1.9	Potentils non-linéaires de Hénon-Heiles et quartique.	25
1.10	Trajectoires stables et chaotiques dans les potentiels cristallins.	27
1.11	Trajectoire interceptant une section de Poincaré.	31
1.12	Détails d'une section de Poincaré pour $Q^+ + \text{Si}\langle 100 \rangle$	32
1.13	Sections de Poincaré pour $Q^+ + \text{Si}\langle 100 \rangle$	34
1.14	Contours de sections de Poincaré pour $Q^+ + \text{Si}\langle 100 \rangle$	35
1.15	Contours de sections de Poincaré pour $Q^+ + \text{Si}\langle 111 \rangle$	36
1.16	Sections de Poincaré pour $Q^+ + \text{Si}\langle 111 \rangle$	37
1.17	Contours de sections de Poincaré pour $Q^- + \text{Si}\langle 110 \rangle$	38
1.18	Sections de Poincaré pour $Q^- + \text{Si}\langle 110 \rangle$	39
1.19	Sections de Poincaré pour $Q^- + \text{Si}\langle 110 \rangle$ (suite).	40
2.1	Comparaison entre intégrateurs symplectique et non-symplectique. . . .	46
2.2	Les potentiels vallonné et escarpé servant aux tests.	52
2.3	Sections de Poincaré correspondant aux potentiels vallonné et escarpé. .	53
2.4	Performances de 17 intégrateurs symplectiques à pas fixe.	55
2.5	Performances des meilleurs intégrateurs symplectiques à pas fixe.	57
2.6	Relation d'échelle entre erreur et pas d'intégration.	63
2.7	Evolution de l'erreur normalisée f en fonction du temps.	65
2.8	Fonction d'erreur normalisée et pas variable.	66
2.9	Mécanisme de stabilisation par favoritisme ou défavoritisme.	72
2.10	Réalisation en langage C de l'intégrateur symplectique à pas variable d'ordre 0 par la fonction <code>PasISVar0()</code>	75
2.11	Réalisation en langage C de l'intégrateur symplectique à pas variable d'ordre 1 par la fonction <code>PasISVar1()</code>	76

2.12	Programme en langage C démontrant l'utilisation des fonctions <code>PasISVar0()</code> et <code>PasISVar1()</code>	78
2.13	Test de l'intégration symplectique à pas variable.	81
2.14	Performances théoriques des intégrateurs ISPF-4, ISPV0-4 et ISPV1-4.	84
2.15	Performances théoriques des intégrateurs ISPF-5, ISPV0-5 et ISPV1-5.	85
2.16	Performances théoriques des intégrateurs ISPF-8, ISPV0-8 et ISPV1-8.	86
2.17	Efficacité de ISPV0-5 et ISPV1-5 en fonction de l'erreur maximale.	89
2.18	Comparaison entre ISPF-5 et ISPV1-5 à nombre d'évaluations de force égal.	90
2.19	Les coûts relatifs aux algorithmes d'intégration ISPF-5, ISPV0-5 et ISPV1-5.	92
2.20	Performances réelles des intégrateurs ISPF-5, ISPV0-5 et ISPV1-5.	94
3.1	Le potentiel de Toda et ses limites de sections pour $x = 0$	102
3.2	Quelques sections de Poincaré pour le potentiel de Toda.	103
3.3	Conservation des intégrales H et I par ISPF-5.	104
3.4	Conservation des intégrales H et I par ISPV0-5.	106
3.5	Réalisation en langage C de l'intégrateur symplectique à pas variable d'ordre 0 à intégrales multiples par la fonction <code>PasISVar0IM()</code>	107
3.6	Orbites de Kepler utilisées pour les tests.	110
3.7	Conservation des intégrales par un intégrateur à pas fixe.	112
3.8	Conservation des intégrales par un intégrateur à pas variable adaptif selon H	113
3.9	Conservation des intégrales par un intégrateur à pas variable adaptif selon A_x	114
3.10	Conservation des intégrales par un intégrateur à pas variable adaptif selon H et A_x	116
4.1	Stabilité globale et exposant de Lyapunov à temps fini.	121
4.2	Dépendance en d_0 de l'exposant de Lyapunov à différentes tolérances.	123
4.3	Histogramme de Lyapunov.	126
4.4	Densité de Lyapunov.	128
4.5	Evolution de la densité de Lyapunov en fonction du temps.	129
4.6	Densité de Lyapunov à différentes énergies pour $V_{Si<100>}$	130
4.7	Probabilité cumulative de Lyapunov pour $V_{Si<100>}$	131
4.8	Critère de stabilité globale pour $V_{Si<100>}$	133
4.9	Courbes de transition stochastique pour le potentiel $V_{Si<100>}$	134
4.10	Densité de Lyapunov à différentes énergies pour $V_{Si<111>}$	136
4.11	Critère de stabilité globale pour $V_{Si<111>}$	137
4.12	Courbes de transition stochastique pour le potentiel $V_{Si<111>}$	138
4.13	Densité de Lyapunov à différentes énergies pour $V_{Si<110>}$	139
4.14	Densité de Lyapunov à différentes énergies pour $V_{Si<110>}$ (suite).	140
4.15	Critère de stabilité globale pour $V_{Si<110>}$	141
4.16	Courbes de transition stochastique pour le potentiel $V_{Si<110>}$	143

Introduction

Depuis un peu plus de trois décennies, une science nouvelle secoue le monde scientifique. Pressentie par le français Henri Poincaré à la fin du siècle dernier, la science des systèmes non-linéaires et du chaos est en plein essor depuis l'avènement des ordinateurs et révolutionne la façon dont on aborde maintenant certains phénomènes naturels. Ce qui était alors dû à la complexité du système étudié est maintenant perçu comme une manifestation de processus souvent simples amenant un comportement chaotique, spectaculairement compliqué. Toutes les sciences physiques, mais aussi les sciences de la vie, l'économie, voire même les sciences sociales sont affectées par ce renouveau idéologique. Voyons donc un peu de quelle façon s'insère cet intrus dans notre compréhension du monde où nous vivons.

L'illustre mathématicien français Pierre Simon de Laplace, au début du 19^{ième} siècle, croyait que la mécanique classique d'Isaac Newton suffisait à décrire l'évolution de l'Univers à la simple condition de connaître la position et la vitesse de chacune des particules qui le compose. Le monde était donc purement déterministe, et le passé complètement garant de l'avenir. Il a fallu l'apparition de la mécanique quantique, formulée par Schrödinger dans les années 20, et de façon plus éloquente le principe d'incertitude d'Heisenberg pour abandonner complètement tout espoir de décrire l'Univers par des théories uniquement déterministes. Selon ce principe, il est impossible de connaître avec certitude, à la fois la position et la vitesse d'une particule. On ne dispose en fait que de probabilités, conférant à la mécanique quantique un caractère fortement statistique.

Les physiciens croyaient néanmoins disposer d'un outil leur permettant de construire une théorie assez robuste, décrivant raisonnablement bien les processus atomiques et subatomiques. Elle pourrait servir de fondation à l'élaboration de théories de plus en plus complexes, reflétant des phénomènes de plus en plus évolués pour éventuellement en arriver à une théorie globale de l'Univers : une théorie suffisante, permettant de tout expliquer. En est-on enfin parvenu au point où il est possible de prévoir, de manière statistiquement significative, le comportement des systèmes qui nous entourent ou qui nous constituent ?

La réponse à cette question est non, du moins pour les prédictions à longue échéance. Elle nous est apparue clairement, et un peu par hasard, vers 1963 grâce à un météorologue de Boston, Edward Lorenz. Il étudie alors un modèle simple représentant un système météorologique qu'il solutionne par des simulations sur ordinateurs. Il note un fait curieux, les mêmes simulations ne donnent pas toujours les mêmes résultats. Ils sont complètement différents, voire même contradictoires. Ceci était plutôt fâcheux si on considère le but de l'exercice (prévisions météorologiques). Le fait est que ses simulations étaient justes. Elles ne différaient légèrement que par les données permettant de lancer les calculs. Une imprécision à la quatrième décimale sur un paramètre (par exemple 3.831 plutôt que 3.8312) avait été suffisante pour briser tout espoir de prédiction qu'offrait son modèle aussi simple soit-il.

L'expérience de Lorenz illustre ce qui est maintenant convenu d'appeler la *sensibilité aux conditions initiales*. Elle est commune à tout système dynamique adoptant des comportements chaotiques et se retrouve dans une gamme sans cesse grandissante de systèmes physiques, biologiques ou autres. Mentionnons par exemple les réactions chimiques, comme celle de Belousov-Zhabotnisky qui fait passer du bleu au rouge une solution à des cadences imprévisibles. Les cotes de la bourse dont les fluctuations rendent très risquées toutes spéculations. Les hauts et les bas d'une personne dépressive que l'on tente de stabiliser à l'aide de médicaments. La météo, bien sûr, que l'on ne peut pour l'instant prévoir à plus de 4 ou 5 jours à l'avance. L'orbite de la Terre que l'on croit aujourd'hui (légèrement) chaotique et pour laquelle une erreur de 15 mètres,

dans l'évaluation de sa position actuelle, rend impossible la prédiction de sa position dans 100 millions d'années, soit plusieurs milliards d'années avant l'extinction du Soleil.

Le problème que nous voulons traiter dans cette thèse s'inscrit donc dans cette lignée de systèmes adoptant (potentiellement) un comportement chaotique et imprévisible. Considérons une particule chargée traversant un cristal à grande vitesse. Dans certaines conditions expérimentales, la particule est *canalisée* et le type de trajectoire qu'elle adopte peut être plus ou moins régulier (stable) influençant ainsi ses éventuelles interactions avec le cristal. Par exemple, dans une expérience de canalisation réalisée à Oak Ridge au Tennessee, Krause *et al.* [1994] utilisent des cristaux de silicium d'une épaisseur inférieure à 0.2 micromètre qu'ils bombardent d'un faisceau d'ions de carbone ou d'hydrogène. Ils s'intéressent à la distribution angulaire des ions transmis et il va sans dire que le type de trajectoire (e.g. stable ou instable) adopté par ceux-ci à l'intérieur du cristal affecte les observations tirées d'une telle expérience.

Ce que nous sommes intéressés à faire ici n'est pas l'étude de la canalisation dans un contexte de physique atomique ou de physique de l'état solide. Nous voulons plutôt étudier la canalisation à partir d'un modèle simple, néanmoins réaliste, pour en faire l'analyse en tant que système dynamique. Plus particulièrement, pour différentes configurations de canalisation, nous désirons savoir s'il existe une *transition* dite *stochastique* telle qu'au delà d'un certain seuil en énergie, la majorité des particules constituant le faisceau se comporte de façon instable ou chaotique.

Dans le **premier chapitre**, le modèle décrivant le problème de canalisation est établi. Il se présente comme un système hamiltonien à 2 degrés de liberté pour lequel la particule chargée est considérée comme étant soumise à un potentiel bidimensionnel défini dans le plan transverse à l'axe de canalisation, *i.e.* là où la dynamique est intéressante. Trois (3) configurations de canalisation sont considérées pour définir les trois (3) potentiels cristallins qui engendrent les systèmes hamiltoniens étudiés. En guise d'examen préliminaire, une méthode d'analyse de stabilité locale (à court terme, ponctuelle) est présentée. Une trajectoire n'est toutefois chaotique

que si elle est globalement instable (*i.e.* à long terme). Une méthode graphique, reposant sur l'intégration numérique de trajectoires, est donc présentée pour obtenir quelques résultats permettant d'établir la stabilité globale d'un ensemble de trajectoires. Avant de définir des méthodes plus quantitatives, reposant toujours sur l'intégration numérique, nous présentons et développons des algorithmes particulièrement bien adaptées à l'intégration de systèmes hamiltoniens.

Dans le **chapitre 2**, quelques méthodes relativement récentes d'intégration *symplectique* sont présentées et des tests sont effectués pour déterminer les intégrateurs les plus performants parmi ceux trouvés en littérature. De nouveaux algorithmes sont ensuite développés. Ils permettent l'intégration symplectique par des méthodes adaptatives où le pas d'intégration est maintenant variable plutôt que fixe. Une analyse de performance est finalement réalisée pour voir comment se comparent entre eux les différents mécanismes d'intégration présentés dans le chapitre. Un fait remarquable peut être observé chez les intégrateurs symplectiques. Bien qu'ils ne soient pas conçus pour conserver l'énergie de façon exacte, on constate une stabilité à très long terme de l'erreur sur celle-ci.

Dans le **chapitre 3**, nous considérons deux (2) systèmes hamiltoniens pour lesquels, en plus de l'énergie, d'autres invariants (intégrales ou constantes du mouvement) sont connus. Nous examinons de façon empirique, la préservation de tous les invariants lorsque les systèmes sont intégrés par les différents mécanismes d'intégration introduits dans le chapitre 2. Un nouvel algorithme est développé qui permet l'intégration symplectique où le pas est adapté en fonction de plusieurs constantes du mouvement. Les méthodes permettant de bien intégrer les systèmes hamiltoniens étant bien maîtrisées, nous complétons enfin l'analyse de stabilité entreprise dans le premier chapitre.

Dans le **chapitre 4**, des méthodes d'analyse quantitatives, reposant sur l'intégration numérique de trajectoires sont développées. Des simulations de type Monte-Carlo sont réalisées afin de permettre de déterminer de façon fiable la stabilité ou l'instabilité des trajectoires. Ce critère de stabilité globale étant bien établi, nous présentons fi-

nalement les courbes de transition stochastique correspondant à chacune des trois (3) configurations de canalisation introduites dans le premier chapitre.

A la fin de chacun des quatre chapitres, un bref récapitulatif est présenté. Certains de ces éléments sont ensuite repris, et dans certains cas élaborés avec un peu plus de détails, dans une conclusion générale qui présente aussi quelques perspectives futures au travail présenté.

La terminologie utilisée tout au long de la thèse a été choisie, en principe, pour qu'une connaissance approfondie de la théorie des systèmes dynamiques ne soit pas nécessaire. Néanmoins, le lecteur voulant se familiariser avec le chaos peut consulter par exemple un ouvrage édité par Hall [1993]. Guckenheimer et Holmes [1986] ou Hale et Koçak [1991] par exemple, permettent quant à eux une solide introduction à la théorie des systèmes dynamiques.

Chapitre 1

Dynamique d'une particule canalisée par un cristal

Le mouvement d'une particule chargée traversant un cristal peut être restreint le long d'un axe cristallin privilégié dans une configuration dite de canalisation. La particule adopte alors un comportement radicalement différent de celui d'une particule traversant un milieu amorphe.

Dans ce chapitre nous établissons le modèle physique à partir duquel seront dérivés les principaux systèmes dynamiques étudiés dans cette thèse. Nous donnons d'abord une description du modèle utilisé pour décrire l'interaction entre une particule chargée et la matière. Des conditions sont posées sur la validité des approximations utilisées et un potentiel bidimensionnel est obtenu, permettant de décrire le mouvement du projectile à l'aide d'un système hamiltonien d'équations différentielles. Trois cas sont présentés et l'étude dynamique qu'on veut en faire est brièvement mise en relief dans un contexte plus général sur l'étude des systèmes hamiltoniens. Le problème de la transition stochastique est abordé d'abord par une approche analytique, et ensuite par une approche plutôt graphique qui repose sur l'intégration numérique des trajectoires.

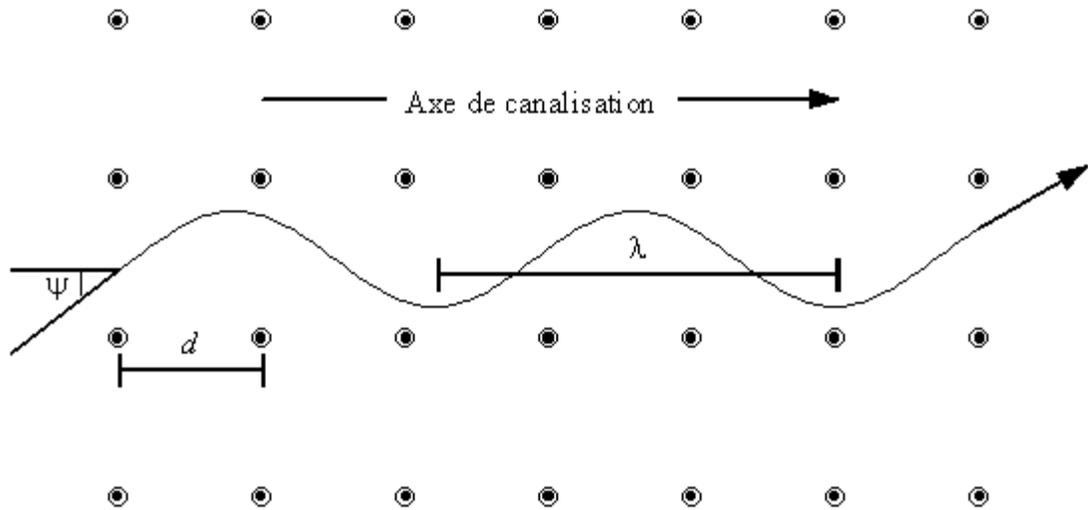


Figure 1.1: Représentation schématique d'une particule canalisée par un cristal. L'angle d'approche ψ et la distance interatomique dans l'axe de canalisation d sont nettement exagérés par rapport à λ , la longueur d'onde d'oscillation.

1.1 Canalisation dans l'approximation des chaînes continues

Imaginons donc une particule chargée (de nombre atomique Z_1) traversant un cristal sous des conditions de canalisation appropriées¹ (fig. 1.1). La particule incidente approche d'abord le cristal avec un angle ψ suffisamment faible pour être ensuite canalisée par une succession de légères déflexions provoquées par les atomes du monocristal (chacun de nombre atomique Z_2) avec lesquels elle interagit.

1.1.1 Potentiels atomiques de Thomas-Fermi

Pour simplifier, on décrit l'interaction entre le projectile et chacun des atomes du cristal par une fonction potentiel à deux corps. Un modèle statistique de type Thomas-Fermi permet alors d'obtenir une forme simple incorporant les effets d'écrantage apportés par

¹Ces conditions de canalisation seront précisées plus tard.

le nuage électronique de chaque atome mis en jeu. Ce potentiel s'écrit [Gemmell, 1974]

$$U(r) = \pm \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \varphi\left(\frac{r}{a}\right), \quad (1.1)$$

où $\varphi(r/a)$ est une *fonction d'écrantage* de type Thomas-Fermi et a est la *longueur d'écrantage*. Notons la simplicité de la fonction potentiel qui ne dépend essentiellement que de la distance r entre les particules entrant en collision et des charges nucléaires $Z_1 e$ et $Z_2 e$. La charge positive ou négative du projectile détermine le signe de l'interaction.

Il n'y a pas de forme explicite à la fonction d'écrantage de Thomas-Fermi [Gemmell, 1974] et elle ne peut être exprimée que sous forme d'équation différentielle. Une bonne approximation analytique provient de Molière [1947] :

$$\varphi\left(\frac{r}{a}\right) = \sum_{s=1}^3 \alpha_s \exp\left(-\beta_s \frac{r}{a}\right) \quad (1.2)$$

avec $\{\alpha_s\} = \{0.1, 0.55, 0.35\}$ et $\{\beta_s\} = \{6.0, 1.2, 0.3\}$. Une autre bonne approximation, plus appropriée à des calculs numériques intenses, a été définie par Lindhard [1965] de la façon suivante :

$$\varphi\left(\frac{r}{a}\right) = 1 - \left[1 + 3\left(\frac{a}{r}\right)^2\right]^{-\frac{1}{2}} \quad (1.3)$$

Dans une théorie statistique de type Thomas-Fermi, l'expression

$$a = \left(\frac{9\pi^2}{128Z_2}\right)^{\frac{1}{3}} \frac{\hbar^2}{m_e e^2} = 0.8853a_0 Z_2^{-\frac{1}{3}} \quad (1.4)$$

où m_e est la masse de l'électron au repos et a_0 est le rayon de Bohr, peut être utilisée pour obtenir la distance d'écrantage lorsque la particule est complètement ionisée [Gemmell, 1974]. Lorsque tel n'est pas le cas, Firsov [1957] a démontré qu'il était possible d'utiliser l'équation (1.1) pour décrire l'interaction entre deux atomes neutres à condition d'utiliser la distance d'écrantage

$$a = 0.8853a_0 \left(\sqrt{Z_1} + \sqrt{Z_2}\right)^{-\frac{2}{3}}. \quad (1.5)$$

En fait, cette dernière expression est utilisée couramment, même lorsque l'ion Z_1 est partiellement ionisé.

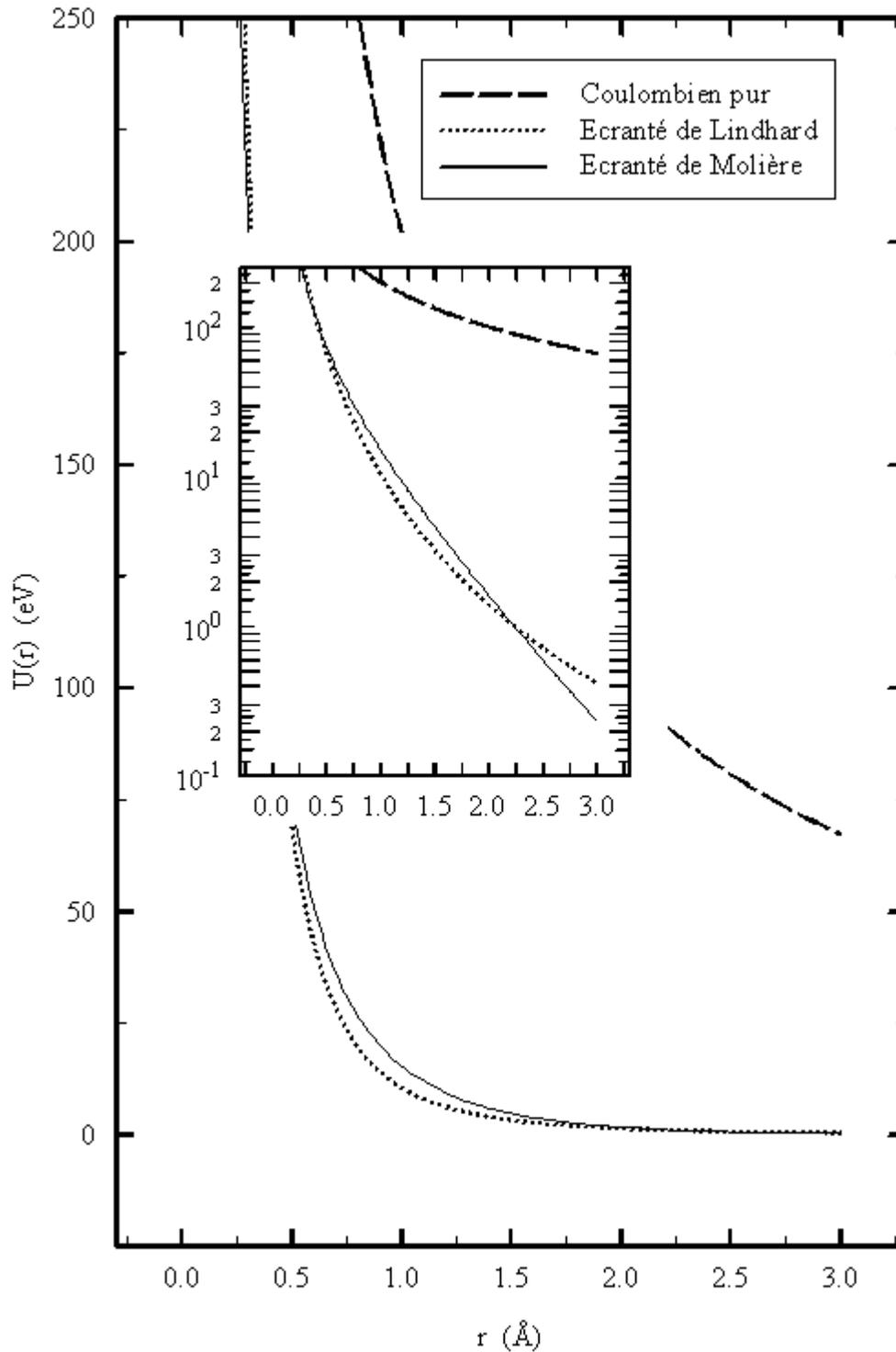


Figure 1.2: Comparaison entre trois potentiels pour décrire la même interaction. Les potentiels de Lindhard et de Molière sont des versions écrantées du potentiel coulombien pur. L'interaction se fait entre un proton ($Z_1 = 1$) et un atome de silicium ($Z_2 = 14$).

La figure 1.2 montre la même interaction décrite par un potentiel coulombien pur, un potentiel de Molière et un potentiel de Lindhard pour un proton entrant en collision avec un atome de silicium.

1.1.2 Mécanique classique et approximation continue

Dans le contexte qui nous intéresse, nous allons décrire le mouvement du projectile à l'aide de la mécanique classique. De façon générale, pour des processus collisionnels à des énergies et des angles typiques pour des expériences de canalisation ($\sim 0.05\text{--}10$ MeV, $\sim 0.02\text{--}2$ degrés), la mécanique classique n'est pas applicable [Gemmell, 1974]. Toutefois, lorsqu'il s'agit de canalisation, où une succession de légères collisions a lieu, Lindhard [1965] a démontré que la mécanique classique pouvait être applicable.

Si l'énergie E et l'angle d'incidence ψ du projectile sont tels que

$$\psi < \psi_1 = \sqrt{\frac{2Z_1Z_2e^2}{dE}}, \quad (1.6)$$

où d est la distance interatomique dans l'axe de canalisation (fig. 1.1), une approximation continue est valide pour décrire *l'ensemble* des processus collisionnels menant à la canalisation. La mécanique classique est alors applicable si l'inégalité

$$\kappa_{AC} \equiv 2\sqrt{Z_1Z_2^{1/3}\frac{M_1}{m_e}\frac{a_0}{d}} \gg 1 \quad (1.7)$$

est vérifiée [Gemmell, 1974, éq. (2.13)], ce qui est le cas lorsque la masse du projectile est grande en comparaison de celle d'un électron. Sans trop aller dans les détails, disons brièvement que la relation (1.7) provient d'une adaptation de la condition de Bohr faite par Lindhard [1965] qui s'applique au problème de canalisation. Cette condition met en jeu la diffraction de l'onde de deBroglie associée au projectile et l'incertitude sur la position de ce dernier.

Pour fixer les idées sur les ordres de grandeur qui sont en jeu, nous présentons dans le tableau 1.1 les paramètres correspondant à une expérience de canalisation réalisée par Krause *et al.* [1994]. La divergence angulaire de leurs faisceaux de particules chargées

E (MeV)	ψ_1 (degré)	κ_{AC}
$p + \text{Si}<100>$		
2	0.35	41.52
4	0.25	41.52
9	0.16	41.52
$C^{6+} + \text{Si}<100>$		
6	0.49	352.3
12	0.35	352.3
30	0.22	352.3

Tableau 1.1: Validité de la mécanique classique et de l'approximation des chaînes continues. Les paramètres expérimentaux correspondent aux travaux de Krause *et al.* [1994]. On a pour les relations (1.6) et (1.7) : $Z_1 = 1(p), 6(C^{6+})$; $Z_2 = 14$; $d = 5.431 \text{ \AA}$; $M_1/m_e \sim 1(p), 12(C^{6+}) \times 1836$; $e^2 = 14.4 \text{ eV-\AA}$; $a_0 = 0.529 \text{ \AA}$.

(protons ou ions de carbone) est inférieure à 0.005 degré. Il est donc réaliste de se placer dans des conditions expérimentales où les relations (1.6) et (1.7) sont vérifiées.

Un traitement mathématiquement rigoureux de la canalisation a été présenté par Dumas, Ellison et Saenz [1991]. Ils utilisent une version améliorée de la méthode classique de moyennisation (“averaging”) des systèmes d'équations différentielles ordinaires. Ils appliquent la méthode à l'ordre un, deux et trois pour obtenir successivement de meilleures approximations du mouvement de la particule dans le cristal. A l'ordre un, leur modèle correspond à l'approximation des chaînes continues développée par Lindhard, i.e. le modèle considéré ici. Les effets de la périodicité du réseau apparaissent à l'ordre deux, et des corrections relativistes non-triviales, à l'ordre trois.

1.1.3 Potentiels cristallins bidimensionnels

Dans l'approximation continue dont on vient de parler, la particule traverse le cristal avec un angle et une vitesse tels que le mouvement se fait essentiellement le long de l'axe cristallin de canalisation que l'on suppose dans la direction z . Le projectile perçoit les rangées d'atomes comme des tiges uniformément chargées et la contribution de chaque atome au potentiel associé à une rangée est sommée de façon continue par l'intégrale

$$V_R(\rho) = \frac{1}{d} \int_{-\infty}^{\infty} U \left(\sqrt{\rho^2 + z^2} \right) dz, \quad (1.8)$$

où ρ est la distance entre une tige (rangée d'atomes) et le projectile, d est la distance interatomique le long de l'axe de canalisation et U est un potentiel atomique de type Thomas-Fermi comme ceux définis précédemment.

Pour les potentiels atomiques de Molière et de Lindhard (éq. 1.1 avec 1.2 et 1.3) le potentiel attribué à une rangée prend la forme

$$V_R(\rho) = \pm 2 \frac{Z_1 Z_2 e^2}{d} f\left(\frac{\rho}{a}\right) \quad (1.9)$$

avec

$$f\left(\frac{\rho}{a}\right) = f_{\text{MOL}}\left(\frac{\rho}{a}\right) = \sum_{s=1}^3 \alpha_s K_0\left(\beta_s \frac{\rho}{a}\right) \quad (1.10)$$

et

$$f\left(\frac{\rho}{a}\right) = f_{\text{LIN}}\left(\frac{\rho}{a}\right) = \ln \sqrt{1 + 3 \left(\frac{a}{\rho}\right)^2} \quad (1.11)$$

pour Molière et Lindhard respectivement. La fonction K_0 est la fonction de Bessel modifiée de deuxième espèce d'ordre 0 et demande un effort numérique assez intense. Le potentiel obtenu à partir du potentiel atomique de Lindhard est plus simple à calculer.

Bien entendu, la contribution totale des atomes du cristal au potentiel se fait par la somme des potentiels attribués à chaque rangée, *i.e.*

$$V(x, y) = \sum_i V_R(\rho_i(x, y)) + V_0 \quad (1.12)$$

où $\rho_i(x, y) = \sqrt{(x - x_i)^2 + (y - y_i)^2}$ est la distance entre le projectile et la rangée i , et V_0 est une constante qui permet de fixer le zéro d'énergie potentielle. La figure 1.3 montre le graphe de contour d'un potentiel cristallin bidimensionnel obtenu par la méthode décrite ici.

1.2 Configurations de canalisation étudiées

Dans le type d'approximation traité précédemment, la vitesse du projectile selon l'axe de canalisation (direction z) est considérée comme constante, et la dynamique intéressante se situe dans le plan transverse (directions x et y). La canalisation d'une particule

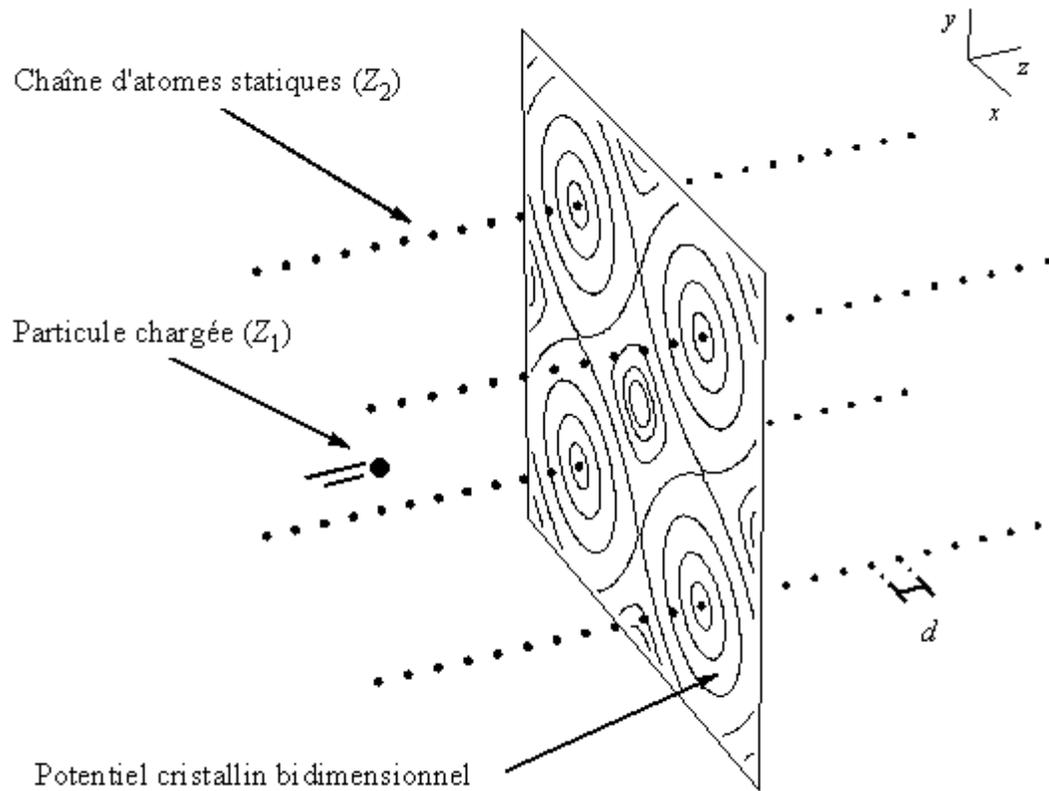


Figure 1.3: Potentiel cristallin bidimensionnel obtenu par l'approximation des chaînes continues. L'effet sur le projectile des rangées d'atomes le long d'un axe cristallin est semblable à celui de tiges chargées uniformément.

chargée (de masse M_1) est alors décrite de façon satisfaisante par l'hamiltonien,

$$H(x, y, p_x, p_y) = \frac{1}{2M_1} (p_x^2 + p_y^2) \pm 2 \frac{Z_1 Z_2 e^2}{d} \sum_i f \left(\frac{\rho_i(x, y)}{a} \right) + V_0. \quad (1.13)$$

Le mouvement dépend donc de la nature du projectile (M_1, Z_1), de la nature du cristal ($Z_2, d, \{x_i, y_i\}$), et de la distance d'écrantage $a = a(Z_1, Z_2)$ donnée par (1.4) ou (1.5).

1.2.1 Types de projectiles

Nous choisissons de traiter le cas des projectiles complètement ionisés. La distance d'écrantage est alors donnée par l'expression (1.4) et ne dépend que de la charge des atomes cristallins, *i.e.* $a = a(Z_2)$. En examinant l'hamiltonien (1.13) on constate que dans ce cas il est possible de définir un système d'unités tel que *la dynamique du projectile ne dépend ni de sa masse ni de sa charge*.

Dans ce contexte, et d'un point de vue d'analyse dynamique, nous allons considérer deux types de projectiles. Tous deux de masse et de charge unitaire, les projectiles Q^+ et Q^- ne se différencient que par le signe de leur interaction avec les atomes du cristal, *i.e.* que $Z_1 e = \pm 1e$ pour Q^\pm dans (1.13). Puisque la mécanique classique ne peut décrire correctement le cas d'un électron canalisé par un cristal, on peut considérer que Q^- représente une particule plus lourde, comme un muon par exemple.

Aux unités près, la dynamique de n'importe quelle particule chargée est ici équivalente soit à la dynamique de Q^+ , soit à la dynamique de Q^- . Autrement dit, il suffit d'étudier la dynamique de Q^+ et Q^- pour comprendre la dynamique de toute particule chargée canalisée par un cristal.

1.2.2 Types de potentiels cristallins

L'objectif de cette thèse est de procéder à l'analyse dynamique du système hamiltonien

$$\begin{aligned} \dot{x} &= \frac{\partial H}{\partial p_x} = p_x & \dot{p}_x &= -\frac{\partial H}{\partial x} = -\frac{\partial V}{\partial x} \\ \dot{y} &= \frac{\partial H}{\partial p_y} = p_y & \dot{p}_y &= -\frac{\partial H}{\partial y} = -\frac{\partial V}{\partial y} \end{aligned} \quad (1.14)$$

pour différents types d'interaction particule chargée–cristal. Par exemple, dans le cas du potentiel cristallin de Molière (éq. 1.12 avec 1.9 et 1.10) on a pour la direction x (et similairement pour y)

$$\frac{\partial V}{\partial x} = \pm 2 \frac{Z_1 Z_2 e^2}{d} \sum_i \frac{x_i - x}{\rho_i(x, y)} \sum_{s=1}^3 \frac{\alpha_s \beta_s}{a} K_1 \left(\beta_s \frac{\rho_i(x, y)}{a} \right)$$

où K_1 est la fonction de Bessel modifiée de deuxième espèce d'ordre 1. Les analyses effectuées dans cette thèse sont principalement de nature numérique et passent par l'intégration numérique du système d'équations différentielles (1.14). C'est pourquoi nous préférons utiliser le potentiel cristallin de Lindhard (éq. 1.12 avec 1.9 et 1.11) pour lequel les dérivées sont plus simples à évaluer. Par exemple, dans la direction x on obtient

$$\frac{\partial V}{\partial x} = \pm 2 \frac{Z_1 Z_2 e^2}{d} \sum_i \frac{x_i - x}{\rho_i(x, y)} \frac{3a^2}{\rho_i(x, y) (\rho_i^2(x, y) + 3a^2)}.$$

1.2.3 Cristal et axes de canalisation

Nous avons choisi d'étudier la canalisation dans le cristal de silicium. D'abord parce que dans la littérature, on retrouve ce cristal dans divers types d'expériences de canalisation, mais aussi parce que sa configuration est simple. Le haut de la figure 1.4 montre la structure élémentaire du cristal de silicium. De part la forme des potentiels qu'elles engendrent, nous allons nous intéresser à trois combinaisons charge–direction de canalisation soit : $Q^+ + \text{Si}\langle 100 \rangle$, $Q^- + \text{Si}\langle 110 \rangle$ et $Q^+ + \text{Si}\langle 111 \rangle$. Le bas de la figure 1.4 illustre la disposition des chaînes atomiques dans chacune des 3 situations telle que perçue par la particule incidente.

1.2.4 Unités réduites

Afin de simplifier au maximum le traitement numérique des systèmes cristallins, tout en conservant un certain degré d'interprétation physique, nous nous proposons d'adopter la convention suivante concernant les unités physiques utilisées : les longueurs sont en Angström, l'unité de masse est telle que la masse du projectile est 1, l'énergie s'exprime

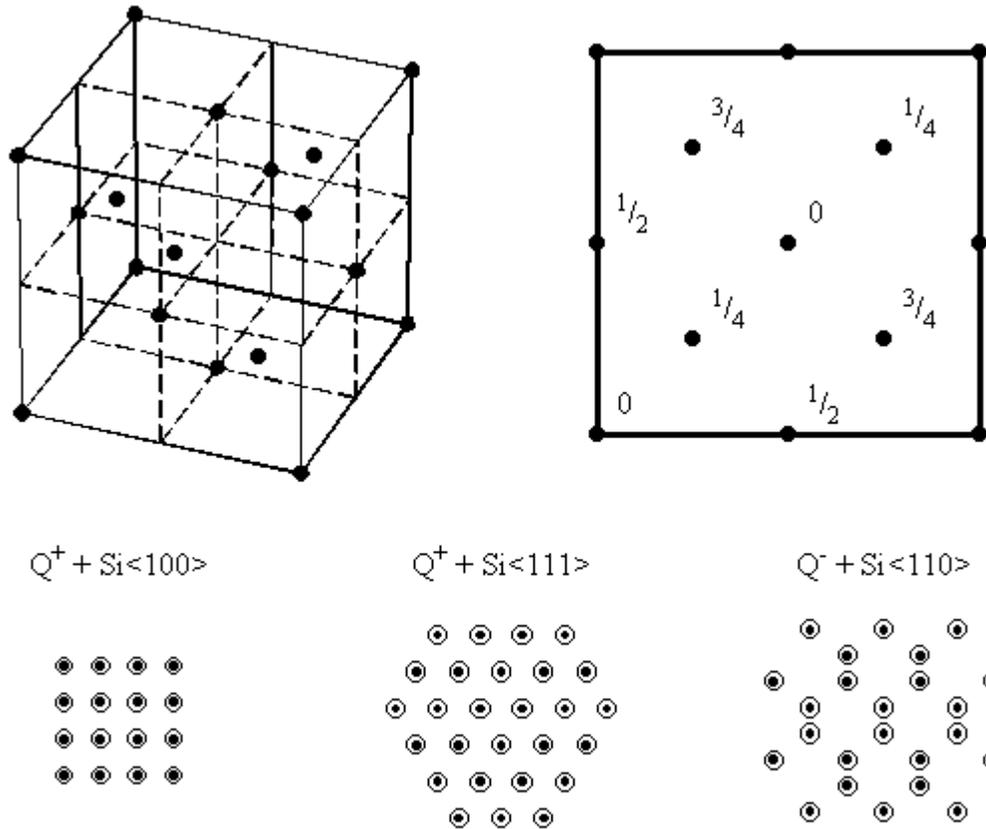


Figure 1.4: En haut : Structure cubique face centrée (diamant) du cristal de silicium. En bas : Position (x_i, y_i) des chaînes atomiques perçue par le projectile pour les 3 configurations de canalisation étudiées.

Unité	Symbole	Définition
Longueur	u_l	1 $u_l = 1 \text{ \AA}$
Masse	u_m	telle que la masse du projectile est 1
Energie	u_E	1 $u_E = 1 \text{ eV}/ Z_1 Z_2 $
Temps	u_t	unité dérivée
Moment	u_p	unité dérivée

Tableau 1.2: Système d'unités adopté pour les systèmes cristallins. On fait un compromis entre les unités atomiques et des unités sans dimension adaptées au traitement numérique intense.

en électron-volt mais par nombre atomique au carré et les unités de moment cinétique et de temps sont dérivées des trois premières par la relation classique

$$E \propto mv^2$$

entre l'énergie, la masse et la vitesse. Le tableau 1.2 résume la convention choisie. On la considère comme un compromis entre les unités atomiques et un système d'unités sans dimension optimisé pour les traitements numériques.

1.2.5 Potentiels cristallins étudiés

Dans l'optique de ce qui a été discuté, l'hamiltonien du problème de canalisation que l'on veut analyser prend la forme simple

$$H(x, y, p_x, p_y) = \frac{1}{2} (p_x^2 + p_y^2) + V(x, y)$$

où le potentiel cristallin s'écrit

$$V(x, y) = \pm \frac{e^2}{d} \sum_i \ln \left(1 + \frac{3a^2}{\rho_i^2(x, y)} \right) + V_0.$$

Le tableau 1.3 résume les configurations de canalisation étudiées et donne les distances interatomiques et d'écrantage nécessaires à la définition des potentiels.

Dans chacune des situations nous allons nous limiter au cas où le projectile n'a pas l'énergie transverse² E_\perp suffisante pour passer d'un canal à un autre. Dans cette

²Dans l'approximation des chaînes continues, le mouvement dans l'axe de canalisation (direction z) est découplé du mouvement dans le plan transverse (directions x et y). C'est pourquoi nous nous permettons de définir une énergie transverse pour le projectile.

Configuration	Distance interatomique d (Å)	Distance d'écrantage a (Å)
$Q^+ + \text{Si}\langle 100 \rangle$	5.431	0.194
$Q^+ + \text{Si}\langle 111 \rangle$	4.703	0.194
$Q^- + \text{Si}\langle 110 \rangle$	3.840	0.194

Tableau 1.3: Paramètres définissant les potentiels cristallins pour chaque configuration de canalisation.

situation, la particule est dite *hypercanalisée*. Puisque tous les canaux sont identiques, il est suffisant de se concentrer sur un canal pour étudier le comportement dynamique de tout projectile hypercanalisé.

La figure 1.5 montre le graphe de contour du potentiel cristallin bidimensionnel de Lindhard associé à la configuration $Q^+ + \text{Si}\langle 100 \rangle$. En haut, le potentiel est formé de la contribution de 332 chaînes atomiques contre 12 pour celui du bas. L'encadré et la région ombrée montrent le canal dans lequel le projectile est confiné. Ce dernier est donc hypercanalisé si

$$E_{\perp} < V_S$$

où V_S est l'énergie de selle du potentiel cristallin. Nous expliquerons à la section 1.3 ce que signifie la courbe pointillée que l'on trouve sur l'agrandissement.

La figure 1.6 illustre différemment le potentiel correspondant à la configuration $Q^+ + \text{Si}\langle 100 \rangle$ et suggère une explication à la dénomination "énergie de selle". Dans la situation qui nous préoccupe, cette énergie fixe une condition à la possibilité du passage d'un canal à un autre. Supposons que l'énergie transverse du projectile soit tout juste suffisante pour lui permettre de quitter un canal. Sur la figure 1.6, une flèche montre un point par où la particule pourrait se faufiler pour passer au canal voisin. Parce que la forme du potentiel autour d'un tel point rappelle une selle de cheval, on le dénomme *point de selle* et le potentiel que l'on y observe est appelé énergie de selle.

L'énergie de selle fixe une borne supérieure à l'énergie totale de chaque projectile. Il est aussi possible de définir une borne inférieure, fixée par le minimum de potentiel V_{\min} observé au centre du canal. Comme on peut fixer le zéro d'énergie potentiel V_0 de

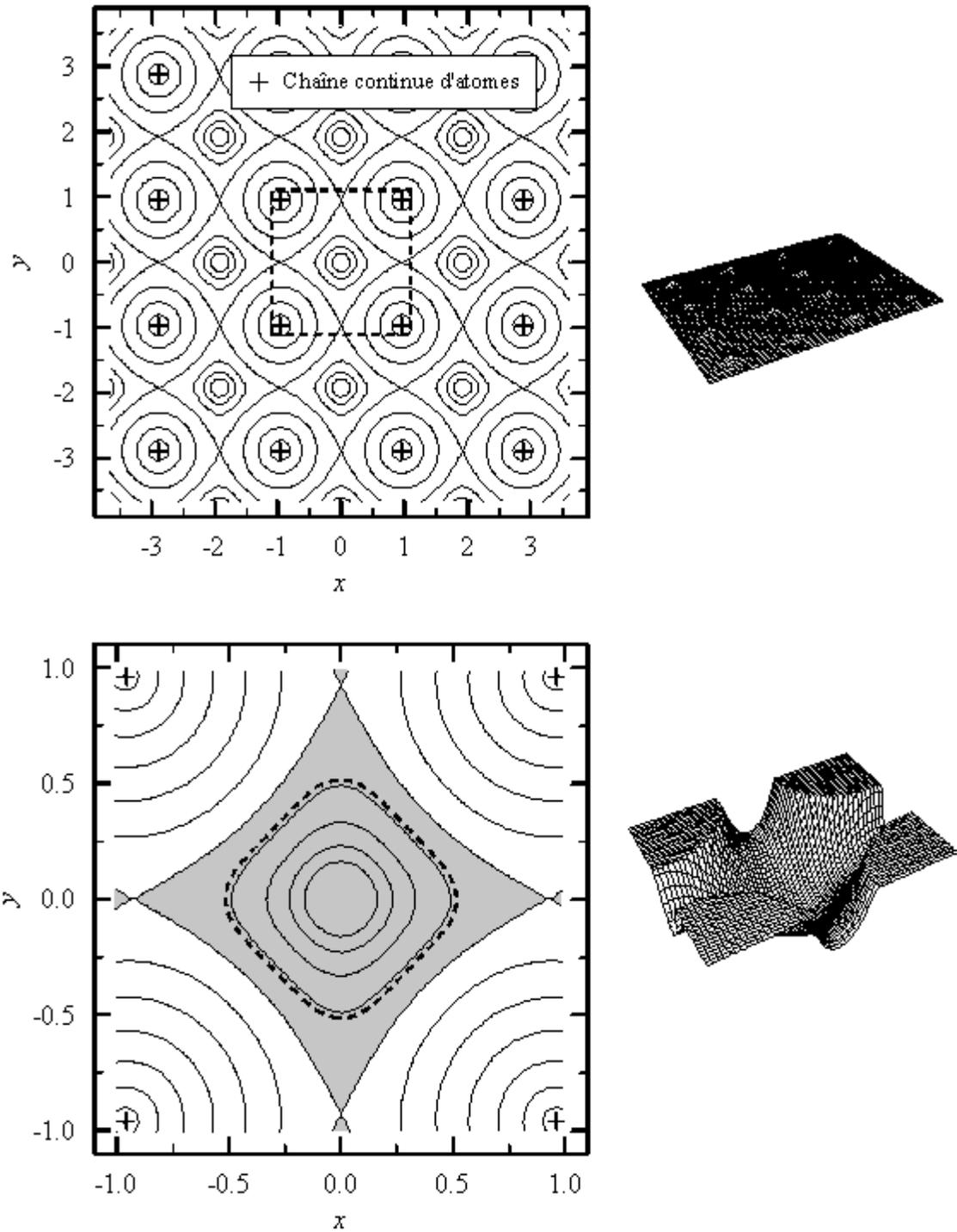


Figure 1.5: En haut : Graphe de contours du potentiel cristallin pour la configuration $Q^+ + \text{Si}\langle 100 \rangle$. En bas : Le graphe est agrandi et les 12 chaînes les plus près contribuent au potentiel. La région ombrée est celle où le projectile évolue lorsqu'il est hypercanalisé, *i.e.* lorsque $E_{\perp} \leq V_S$.

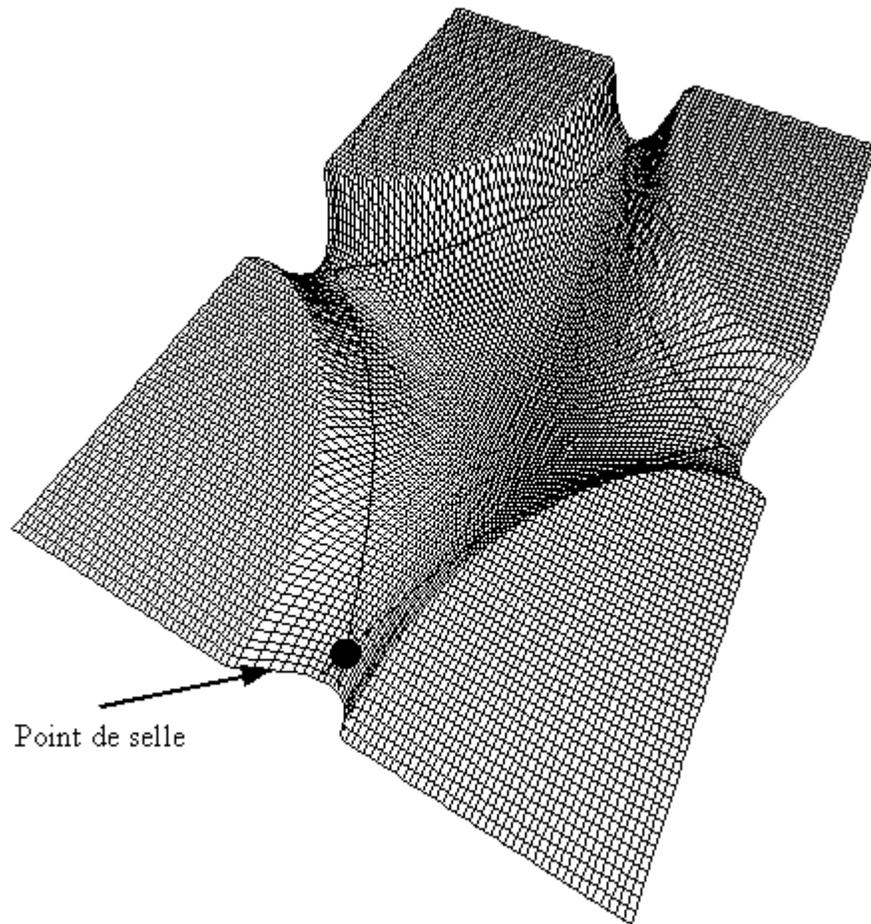


Figure 1.6: Illustration d'un point de selle autour duquel la forme du potentiel rappelle une selle à cheval. Si l'énergie transverse est suffisante, le projectile peut passer à un canal voisin.

façon arbitraire, on choisit

$$V_0 = -V_{\min}$$

de sorte que

$$0 \leq E_{\perp} \leq V_S.$$

Pour le potentiel agrandi de la figure 1.5 on a $V_S = 0.14138 \text{ eV}/|Z_1 Z_2|$, soit e.g. 1.98 eV pour $p + \text{Si}\langle 100 \rangle$. Les contours tracés sont $V/V_S = \{\frac{1}{16}, \frac{1}{8}, \frac{1}{4}, \frac{1}{2}, 1, 2, 4, \dots\}$.

La figure 1.7 montre le graphe de contour correspondant au potentiel cristallin pour la configurations $Q^+ + \text{Si}\langle 111 \rangle$. L'intervalle d'énergie permettant l'hypercanalisation est défini de façon similaire à ce qui vient d'être fait pour le cas $Q^+ + \text{Si}\langle 100 \rangle$. Cette fois, $V_S = 0.03963 \text{ eV}/|Z_1 Z_2|$, soit e.g. 0.55 eV pour $p + \text{Si}\langle 111 \rangle$. Les contours tracés sur l'agrandissement sont $V/V_S = \{\frac{1}{32}, \dots, \frac{1}{2}, 1, 2, 4, \dots\}$.

Pour la configuration $Q^- + \text{Si}\langle 110 \rangle$ toutefois, il y a présence de singularités à l'intérieur même de la région d'hypercanalisation. Elles sont illustrées sur la figure 1.8 où on note les puits infinis formés par l'attraction des chaînes atomiques. Il n'y a donc pas de borne inférieure, mais on fixe toutefois le zéro d'énergie afin qu'il corresponde au potentiel V_S^* observé à la jonction des deux puits (un autre point de selle). Pour la configuration $Q^- + \text{Si}\langle 110 \rangle$ on a

$$V_0 = -V_S^*$$

et

$$-\infty < E_{\perp} \leq V_S$$

avec $V_S = 1.0842 \text{ eV}/|Z_1 Z_2|$, soit e.g. 15.18 eV pour $\mu^- + \text{Si}\langle 110 \rangle$. Les contours tracés sur l'agrandissement sont $V/V_S = \{-16, \dots, -2, -1, 0, \frac{1}{4}, \frac{1}{2}, \frac{3}{4}, 1, \frac{5}{4}\}$.

1.2.6 Potentiels à dynamique non-linéaire

L'étude de systèmes de ce type ne se retrouve pas qu'en canalisation. Des potentiels bidimensionnels du même genre que les potentiels cristallins définis ici se retrouvent

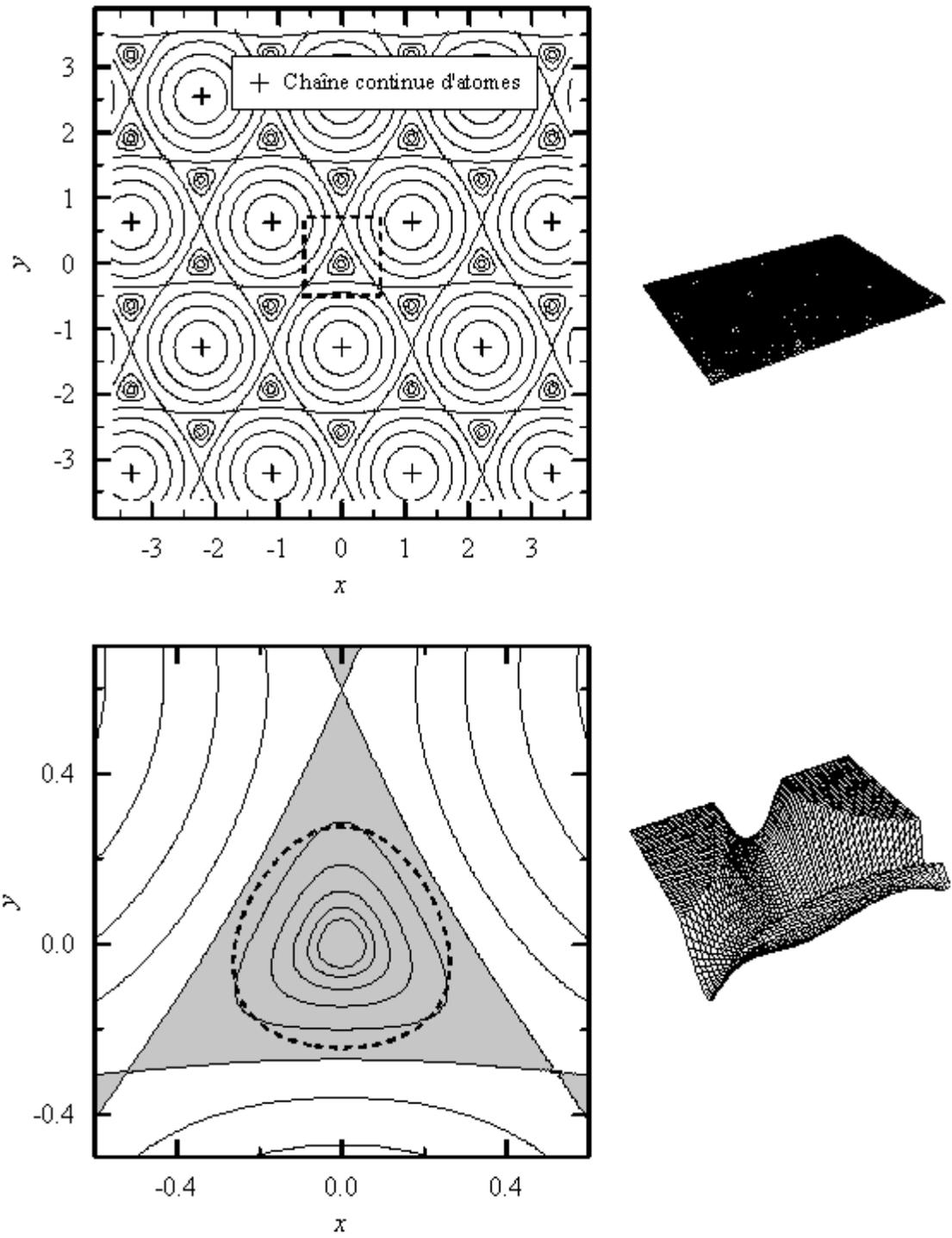


Figure 1.7: Idem que la figure 1.5 pour $Q^+ + \text{Si}\langle 111 \rangle$.

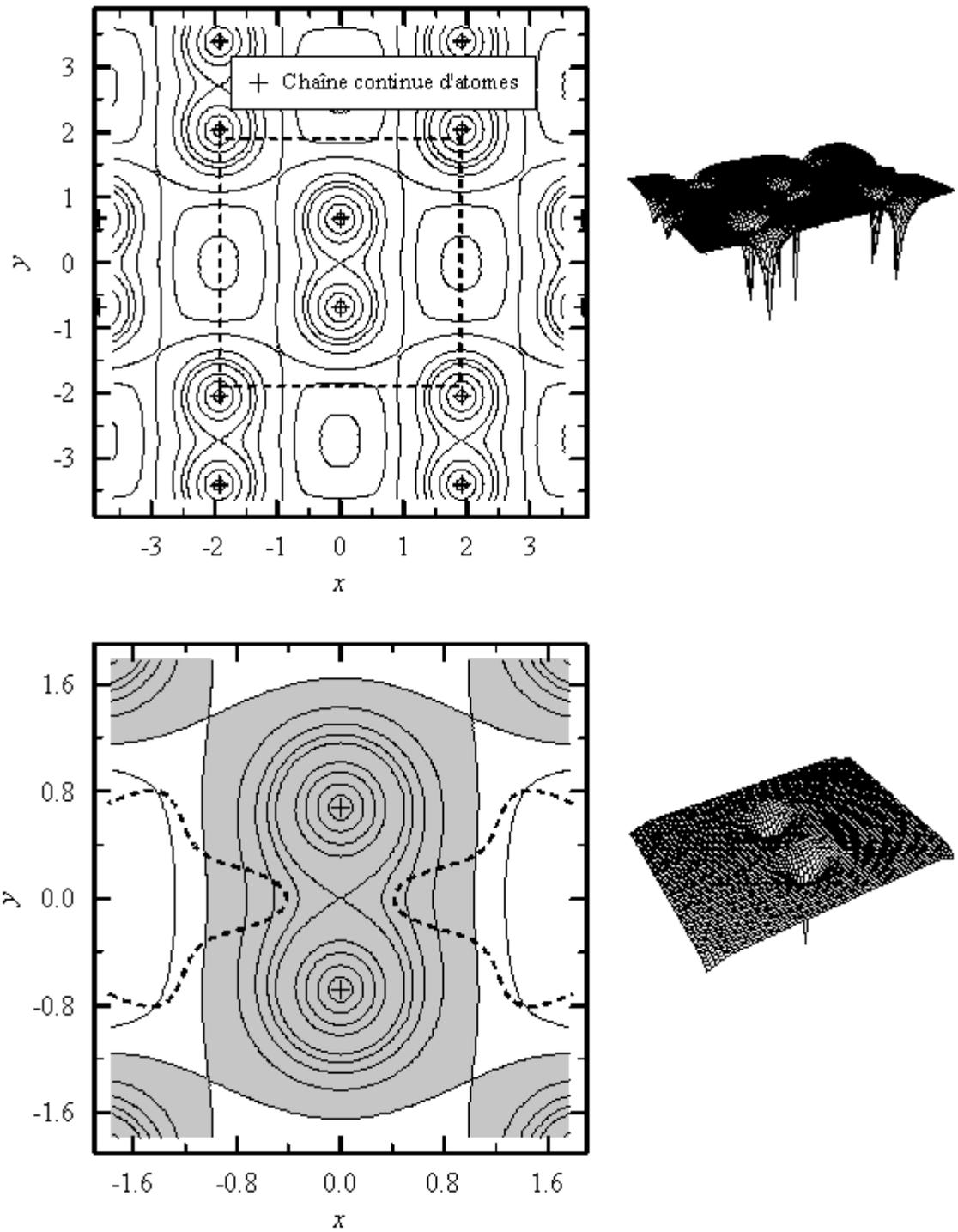


Figure 1.8: Idem que la figure 1.5 pour $Q^- + \text{Si}\langle 110 \rangle$. En plus du contour $V = V_S$, on note le contour $V = V_S^*$ qui forme un huit (8) et qui ne possède qu'un point de selle en $(0, 0)$.

en littérature pour modéliser d'autres phénomènes physiques. Par exemple, Hénon et Heiles [1964] ont présenté un modèle décrivant le mouvement d'une étoile dans une galaxie. Comme nous, ils étaient intéressés à étudier un tel système d'un point de vue d'analyse dynamique. L'hamiltonien de leur système s'écrit

$$H(x, y, p_x, p_y) = \frac{1}{2} (p_x^2 + p_y^2) + \frac{1}{2} (x^2 + y^2) + x^2y - \frac{1}{3}y^3$$

et un graphe de contour du potentiel de Hénon-Heiles est présenté dans le haut de la figure 1.9. On note la flagrante ressemblance entre ce potentiel et le potentiel associé à la configuration de canalisation $Q^+ + \text{Si}\langle 111 \rangle$ (voir fig. 1.7). En fait, un développement en série du potentiel cristallin, tronqué au troisième ordre autour de l'origine, nous amènerait au potentiel de Hénon-Heiles. Pour ce potentiel on a $V_S = 1/6$ et les contours tracés sont $V/V_S = \{\frac{1}{32}, \dots, \frac{1}{4}, \frac{1}{2}, \frac{3}{4}, 1, 2, 4, \dots\}$.

Les potentiels associés aux configurations $Q^+ + \text{Si}\langle 100 \rangle$ et $Q^- + \text{Si}\langle 110 \rangle$ aussi rappellent certains potentiels que l'on retrouve souvent en littérature spécialisée dans l'étude des systèmes non-linéaires. Le potentiel cristallin associé à $Q^+ + \text{Si}\langle 100 \rangle$ se rapproche du potentiel quartique

$$V(x, y) = \frac{1}{2}x^2y^2$$

dont on a longtemps cru qu'il engendrait un système-K, *i.e.* un système dont l'entropie de Kolmogorov (voir par ex. Cerjan et Reinhardt, 1979) est positive et telle que toute les trajectoires sont chaotiques. Dahlqvist et Russberg [1990] ont pu démontrer la présence d'au moins une famille d'orbites périodiques stables pour ce système, réfutant ainsi une conjecture vieille de 10 ans. Le potentiel quartique est illustré dans le bas de la figure 1.9. Quant au potentiel associé à $Q^- + \text{Si}\langle 110 \rangle$, il constitue un bon exemple de potentiel à double puits, bien connu pour générer une dynamique non-linéaire et souvent chaotique.

L'étude des systèmes cristallins que l'on veut développer dans cette thèse se déplace donc du contexte de la canalisation pour se retrouver plutôt comme partie intégrante de l'étude de la dynamique des systèmes hamiltoniens non-linéaires.

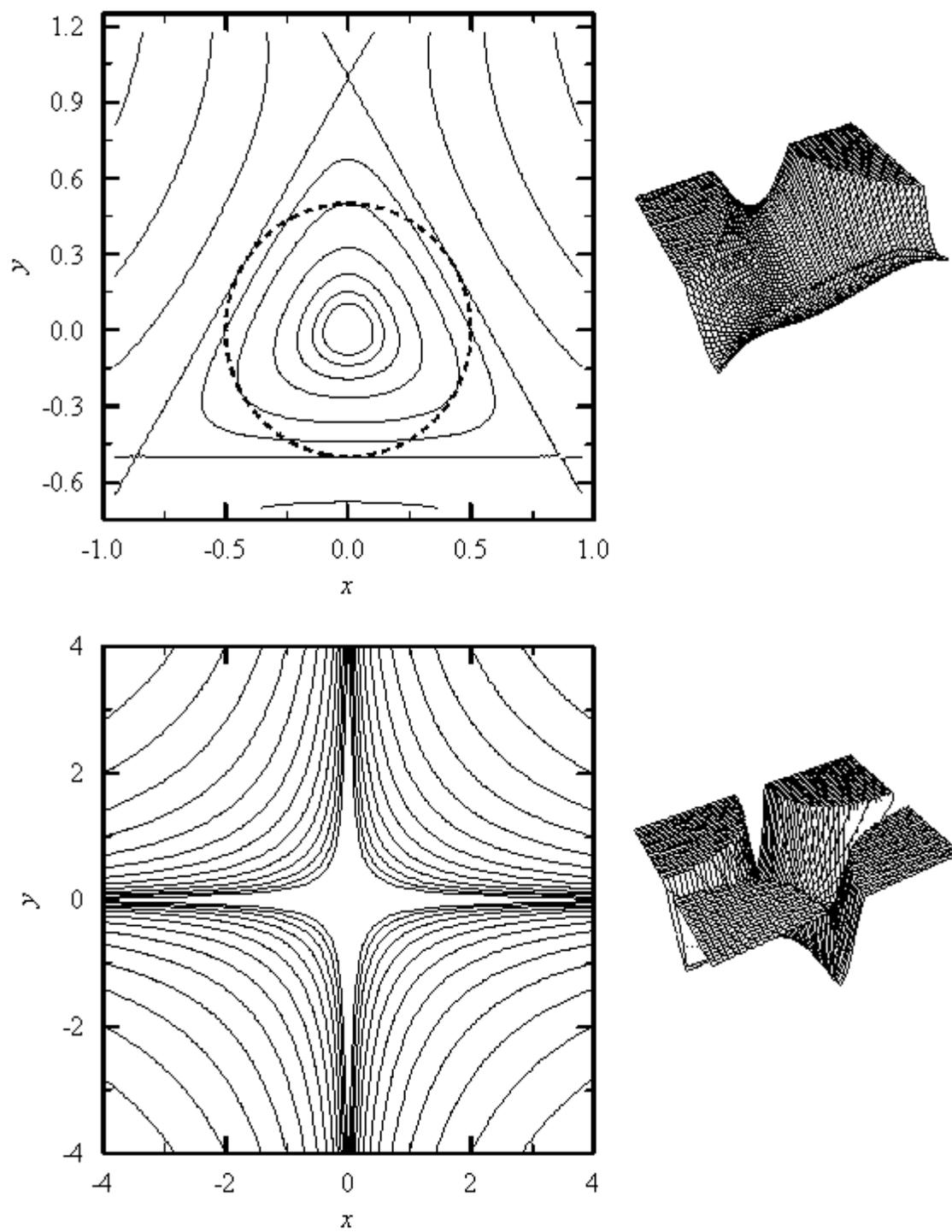


Figure 1.9: Potentiels non-linéaires connus. En haut : Potentiel de Hénon-Heiles. En bas : Potentiel quartique.

1.3 Etude dynamique et stabilité de l'espace des phases

Nous sommes intéressés par le mouvement du projectile dans l'espace des phases, *i.e.* dans l'espace (x, y, p_x, p_y) , engendré par les potentiels cristallins définis à la section précédente. La figure 1.10 donne une trajectoire typique d'un projectile canalisé par chacun des potentiels. Le caractère stable ou chaotique du mouvement devrait avoir des conséquences sur l'interaction entre la particule chargée et le cristal (e.g. émission de radiation cohérente). L'analyse que l'on veut faire de la dynamique des systèmes cristallins porte donc essentiellement sur la stabilité des trajectoires.

1.3.1 Analyse de stabilité locale et courbure gaussienne

Il est possible d'obtenir de l'information sur la stabilité des trajectoires sans avoir recours à l'intégration (numérique). D'après Akhiezer, Truten' et Shul'ga [1991], qui font eux même référence à Arnol'd [1978], *un mécanisme pour l'apparition du régime chaotique dans les systèmes déterministes est l'instabilité locale dans le mouvement*. Cette hypothèse est à la base des travaux de quelques auteurs qui ont discuté de méthodes permettant une analyse de stabilité *locale* [Toda, 1974; Brumer et Duff, 1976; Cerjan et Reinhardt, 1979]. Voici dans une notation et une terminologie plus moderne une adaptation de l'essentiel de l'analyse faite par Brumer-Duff-Toda.

Soit la divergence exponentielle de deux trajectoires initialement rapprochées dans l'espace des phases

$$d(t) = d(0)e^{\lambda t}$$

où d est la distance entre les points correspondant aux trajectoires et λ est le taux de divergence en $t = 0$. Ce taux est positif dans le cas de deux trajectoires divergentes.

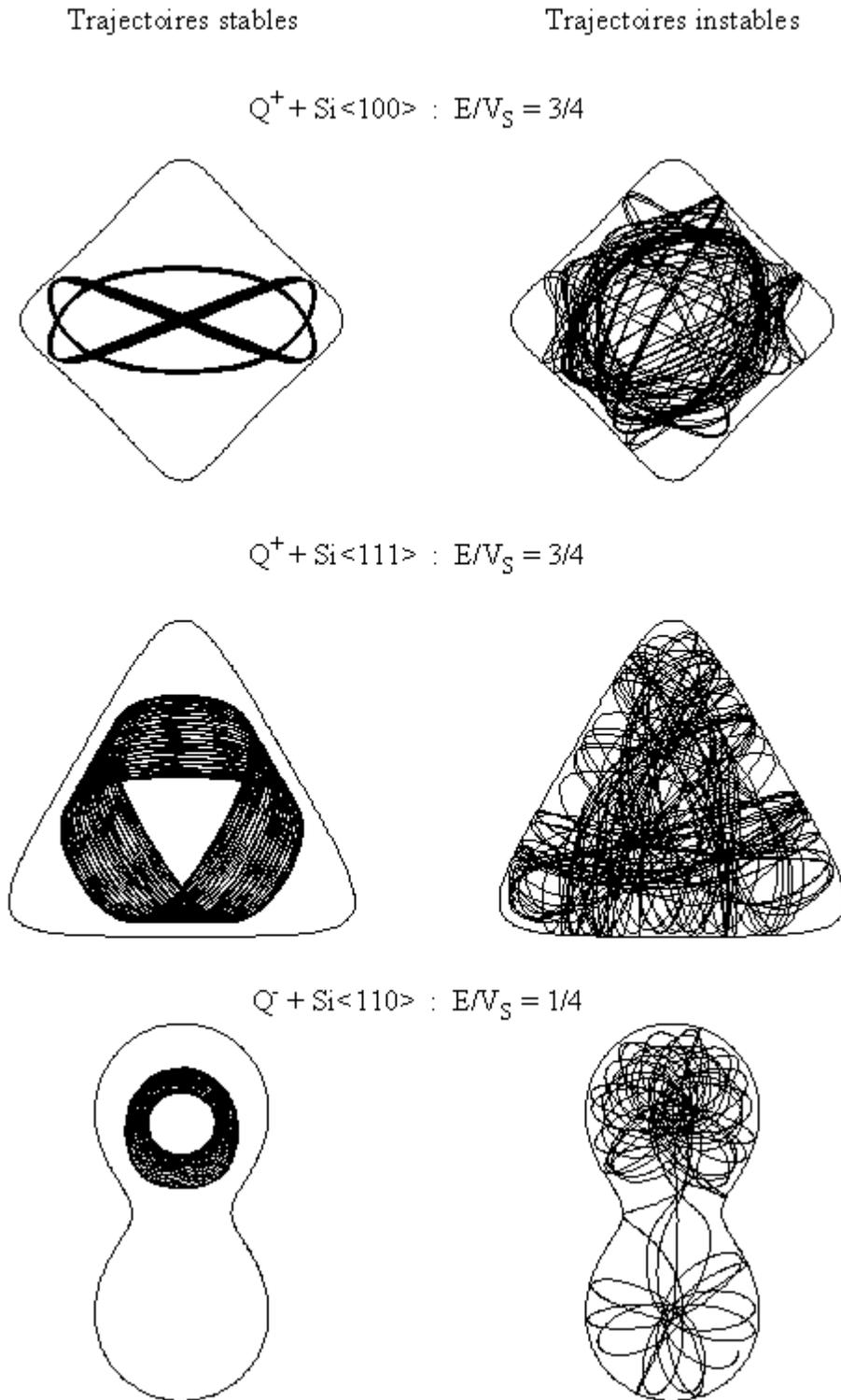


Figure 1.10: Trajectoires typiques évoluant dans les potentiels cristallins.

Considérons maintenant deux trajectoires dont la déviation est donnée par

$$\begin{pmatrix} \delta x \\ \delta y \\ \delta p_x \\ \delta p_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x^2 \\ y^2 \\ p_x^2 \\ p_y^2 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} x^1 \\ y^1 \\ p_x^1 \\ p_y^1 \end{pmatrix}.$$

Si $(x^1, y^1, p_x^1, p_y^1)^T$ est perçu comme étant une trajectoire de référence dont on veut connaître la stabilité locale, $(\delta x^1, \delta y^1, \delta p_x^1, \delta p_y^1)^T$ est une perturbation dont l'évolution peut être obtenue de la linéarisation des équations du mouvement, *i.e.*

$$\begin{pmatrix} \delta \dot{x} \\ \delta \dot{y} \\ \delta \dot{p}_x \\ \delta \dot{p}_y \end{pmatrix} \sim \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ -\partial^2 V / \partial x^2 & -\partial^2 V / \partial x \partial y & 0 & 0 \\ -\partial^2 V / \partial x \partial y & -\partial^2 V / \partial y^2 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta x \\ \delta y \\ \delta p_x \\ \delta p_y \end{pmatrix}$$

où le jacobien est mesuré en $(x^1, y^1, p_x^1, p_y^1)^T$.

La diagonalisation de la matrice de linéarisation amène des valeurs propres qui prennent la forme

$$\lambda_{1,2,3,4} = \pm \left(\frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4c}}{2} \right)^{1/2}$$

où

$$b = \frac{\partial^2 V}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 V}{\partial y^2}, \quad c = \frac{\partial^2 V}{\partial x^2} \frac{\partial^2 V}{\partial y^2} - \left(\frac{\partial^2 V}{\partial x \partial y} \right)^2.$$

Pour qu'une trajectoire soit localement instable, il suffit qu'une seule de ces valeurs propres soit réelle et positive. Quand on fait l'examen de toutes les possibilités, il s'avère que

$$c < 0$$

évalué le long de la trajectoire de référence, est une condition nécessaire et suffisante pour que celle-ci soit localement instable.

Nous pouvons maintenant revenir aux courbes pointillées apparaissant sur les figures 1.5, 1.7, 1.8 et 1.9. Elles tracent le contour $K = 0$ de la courbure gaussienne

$$K(x, y) = \frac{(\partial^2 V / \partial x^2)(\partial^2 V / \partial y^2) - (\partial^2 V / \partial x \partial y)^2}{[1 + (\partial V / \partial x)^2 + (\partial V / \partial y)^2]^2}$$

pour chacun des potentiels. On constate que le signe de K correspond à celui de c . La courbure gaussienne renseigne donc sur la stabilité locale d'une trajectoire. En clair,

une trajectoire est localement instable lorsqu'elle évolue dans une région où la courbure du potentiel est négative.

Sur les figures 1.5, 1.7 et 1.9, la région se trouvant à l'intérieur de la ligne pointillée est localement stable. Pour la figure 1.8, la majeure partie du canal (incluant e.g. le point $(0,0)$) est localement instable. Notons que pour le potentiel de Hénon-Heiles le contour $K = 0$ est le cercle $x^2 + y^2 = 1/4$. Pour le potentiel quartique, la courbure est négative partout sauf en $(0,0)$. Nous avons déjà dit que l'on avait longtemps cru que toute trajectoire soumise à ce potentiel était chaotique, on comprend maintenant un peu mieux pourquoi.

S'il est vrai que l'apparition du chaos, passe (entre autre) par l'instabilité locale, la courbure gaussienne du potentiel devrait nous renseigner sur le caractère stable ou instable de l'espace des phases. Ainsi, pour qu'il y ait présence de chaos, l'énergie transverse devrait être suffisante pour que la particule atteigne des régions localement instable. Dans cette optique, un critère nécessaire et suffisant pour l'apparition du chaos pourrait s'écrire

$$E_{\perp} > V_C \tag{1.15}$$

où V_C est l'énergie critique à partir de laquelle des trajectoires peuvent évoluer dans les parties instables de l'espace des phases. Pour les potentiels correspondant aux figures 1.5, 1.7 et 1.9, cette énergie critique est respectivement $0.538V_S$, $0.474V_S$ et $1/2V_S = 1/12$. Pour la figure 1.8, le critère (1.15) est inversé et délimite plutôt l'énergie nécessaire pour que certaines trajectoires visitent les régions *stables* du potentiel.

L'approche de Cerjan et Reinhardt [1979] est essentiellement équivalente à celle de Brumer-Duff-Toda. Ils proposent toutefois que l'instabilité locale soit une condition nécessaire (mais non suffisante) à l'apparition du chaos. Leur conclusion concernant l'énergie critique dans le cas du potentiel de Hénon-Heiles est toutefois identique à celle obtenue par Brumer-Duff-Toda.

Un article de Benettin, Brambilla et Galgani [1977] démontre par 2 contre-exemples que le critère de Brumer-Duff-Toda ne peut constituer une condition suffisante à l'instabilité

des trajectoires. Ils suggèrent même qu'en général il ne devrait pas y avoir de relation simple entre stabilité locale et globale. Afin de mettre en meilleure perspective toute cette question de stabilité des trajectoires en fonction d'un paramètre comme l'énergie, voyons maintenant une méthode très répandue permettant d'examiner de façon très précise la structure de l'espace des phases.

1.3.2 Section de Poincaré et stabilité globale des trajectoires

Pour les systèmes hamiltoniens à 2 degrés de liberté comme ceux qui nous intéressent ici, il existe une façon simple mais très efficace de résumer le comportement dynamique de tout l'espace des phases.

Lorsque l'énergie transverse E_{\perp} est fixée, la contrainte

$$p_x^2 = 2[E_{\perp} - V(x, y)] - p_y^2$$

permet de réduire l'espace des phases de $(x, y, p_x, p_y)^T$ à $(x, y, p_y)^T$, donc de 4 à 3 dimensions. De plus, de part la symétrie de nos potentiels, toute trajectoire doit éventuellement passer par le plan $x = 0$. En intégrant numériquement un ensemble de conditions initiales choisies dans le plan $(x = 0, y, p_y)$, et en récoltant les points qui l'interceptent, on construit petit à petit ce qui est maintenant convenu d'appeler une *section de Poincaré*.

La figure 1.11 illustre le procédé que l'on vient de décrire. On y voit qu'une trajectoire cyclique dans l'espace (x, y, p_y) correspond à une orbite périodique sur la section de Poincaré. Autour des points formant cette orbite on note la présence de courbes fermées formant des tores dans l'espace tri-dimensionnel. Ces tores invariants ou courbes de KAM (Kolmogorov-Arnol'd-Moser) sont le portrait même de la stabilité des trajectoires hamiltoniennes. On note aussi que les courbes de KAM forment des îlots de stabilité au milieu d'une mer stochastique. La figure 1.12 montre avec plus de détails cette même section de Poincaré prise en $E_{\perp} = 3/4V_S$ pour $Q^+ + \text{Si} < 100 >$. On y voit très clairement, géométriquement et graphiquement, qu'une grande partie de l'espace des phases est instable.

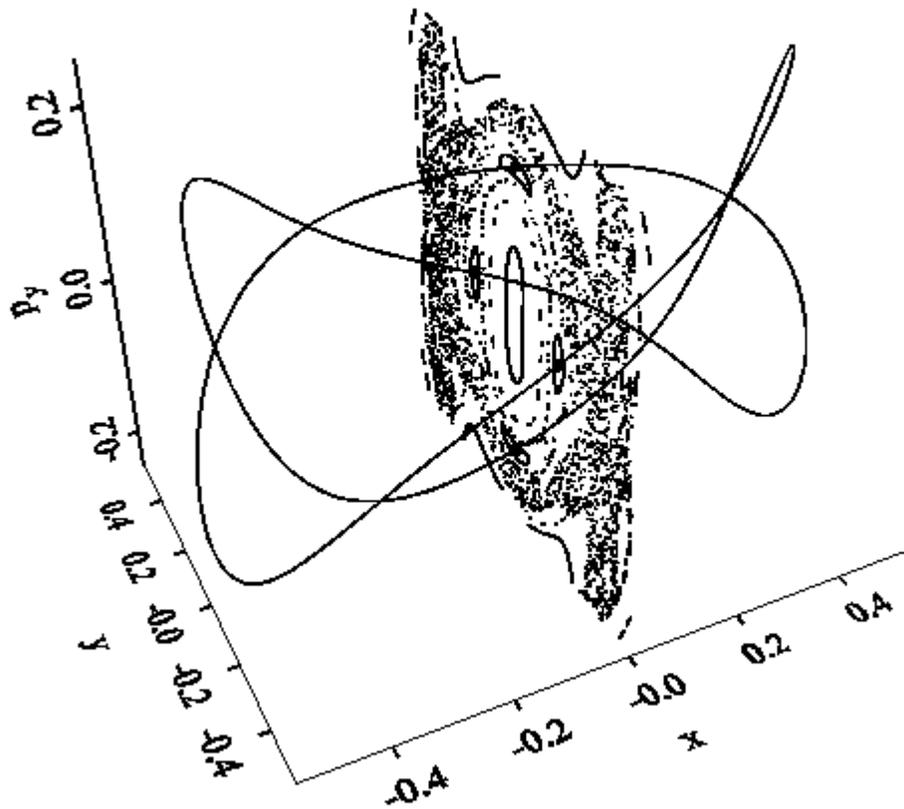


Figure 1.11: Construction d'une section de Poincaré. Etant donné la symétrie du potentiel et la conservation de l'énergie, l'interception de plusieurs trajectoires avec le plan $x = 0$ permet de résumer la dynamique de tout l'espace des phases.

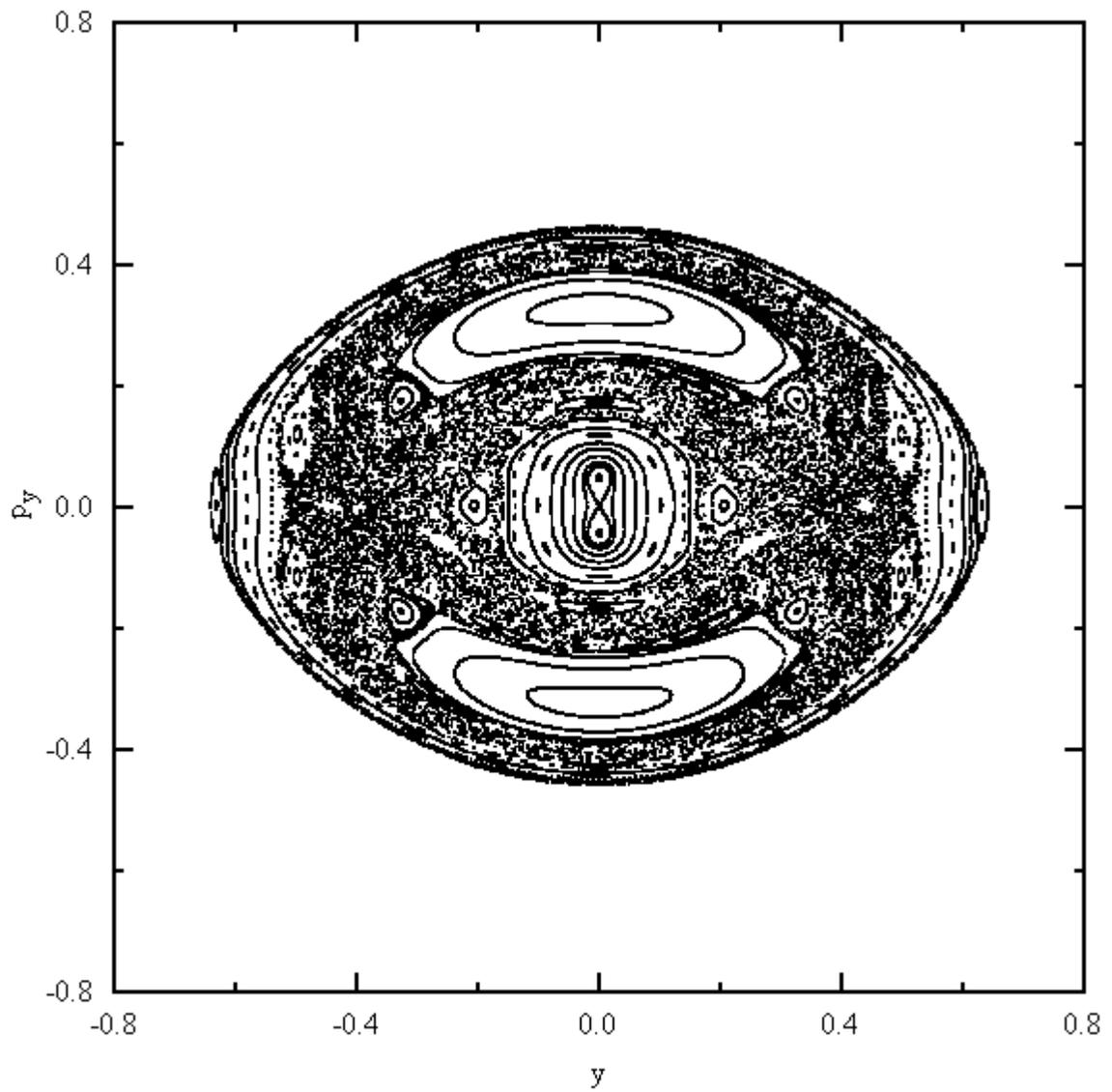


Figure 1.12: Détails de la section de Poincaré $x = 0$; $E_{\perp} = 3/4V_S$ pour $Q^+ + \text{Si}\langle 100 \rangle$.

Pour ce potentiel, le critère de Brumer-Duff-Toda indique une énergie critique $V_C = 0.538V_S$. On se trouve alors bien au dessus de cette valeur avec $E_\perp = 0.75V_S$ et il semble alors acceptable, dans l'esprit d'un critère basé sur l'instabilité locale, qu'une portion considérable de l'espace des phases soit chaotique.

La figure 1.13 montre des sections de Poincaré prises à différentes valeurs d'énergie. Afin d'apprécier les différences d'échelle, la figure 1.14 montre les contours de section $E_\perp/V_S = \{\frac{1}{16}, \frac{1}{8}, \frac{1}{4}, \frac{1}{2}, 1, 2, 4\}$. Ces contours délimitent les régions définies par

$$p_x^2 = 2[E_\perp - V(0, y)] - p_y^2 \geq 0$$

ou encore

$$\frac{1}{2}p_y^2 + V(0, y) \leq E_\perp.$$

Sur la section $E_\perp/V_S = 1/2$, on note l'émergence de la bande stochastique devenant une mer stochastique en $E_\perp/V_S = 3/4$. Cette observation constitue un contre-exemple clair à la conjecture reliant stabilité locale et globale puisqu'à $E_\perp/V_S = 1/2 (< 0.538)$ toutes les trajectoires sont localement stables et qu'il y a malgré cela présence de trajectoires chaotiques. Les figures 1.15 et 1.16 montrent respectivement les contours de section et les sections pour $Q^+ + \text{Si}\langle 111 \rangle$. Ici, on a $V_C/V_S = 0.474$ et la bande stochastique observée en $E_\perp/V_S = 1/2$ ne vient pas contredire le critère de Brumer-Duff-Toda.

Dans le cas $Q^- + \text{Si}\langle 110 \rangle$, les figures 1.17 – 1.19 montrent des espaces de phases principalement stables pour des énergies $E_\perp/V_S < 0$ alors que dans ce cas les trajectoires sont toujours localement instables. La transition stochastique semble ici se produire lorsque les trajectoires ont accès aux 2 puits, *i.e.* lorsque $E_\perp = 0$ (voir fig. 1.17). Pour $E_\perp \geq 0$, l'espace des phases est essentiellement chaotique.

1.4 Récapitulatif

Nous avons développé dans ce chapitre un modèle simple décrivant le mouvement d'une particule chargée canalisée par un cristal. Trois configurations de canalisation ont été

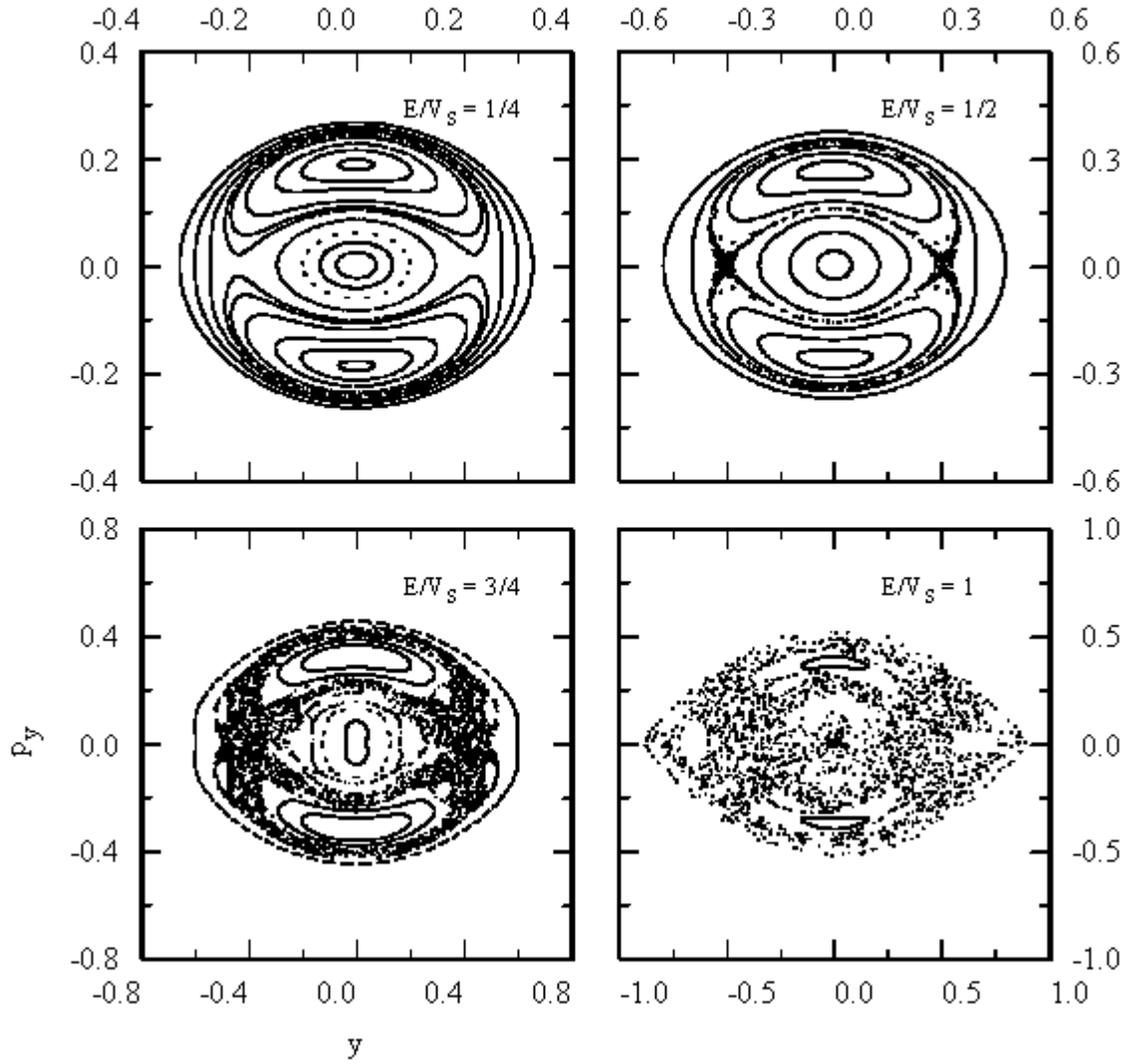


Figure 1.13: Sections de Poincaré $x = 0$ pour $Q^+ + \text{Si}\langle 100 \rangle$.

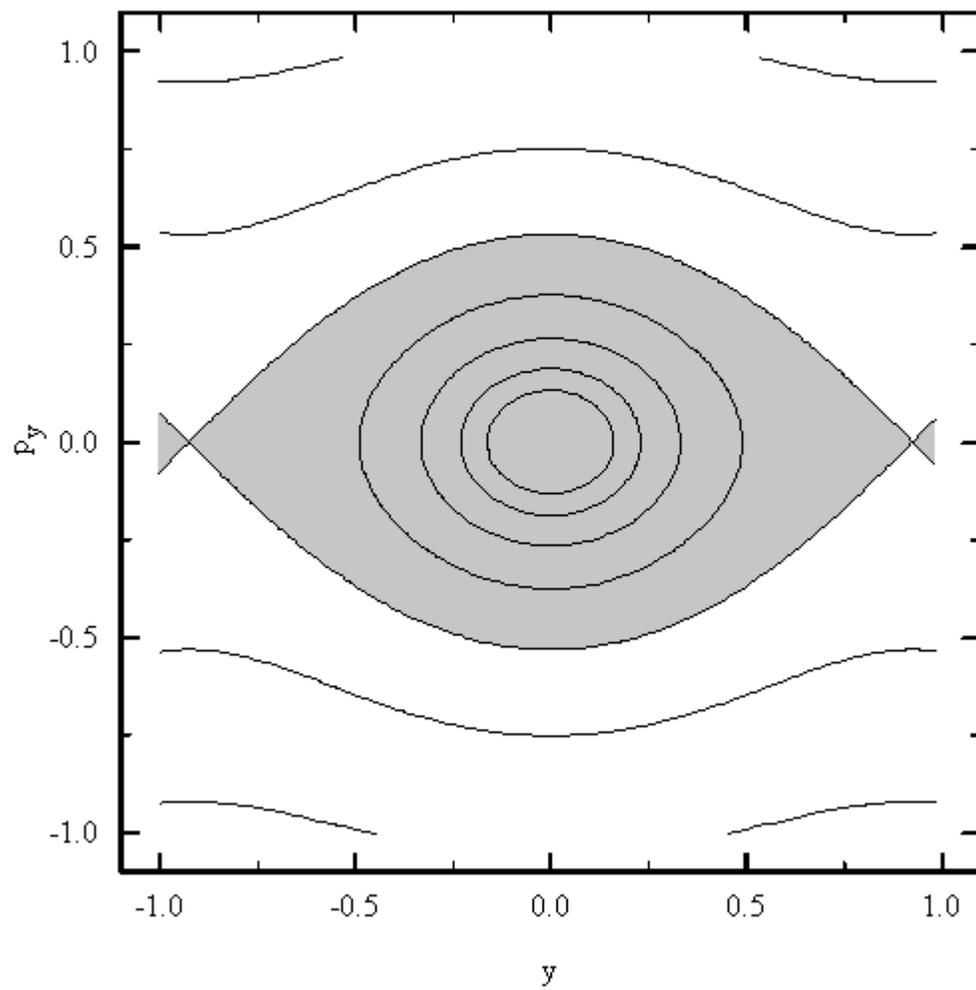


Figure 1.14: Contours de sections de Poincaré $x = 0$ pour $Q^+ + \text{Si}\langle 100 \rangle$ à différentes énergies $E_{\perp}/V_S = \{\frac{1}{16}, \frac{1}{8}, \frac{1}{4}, \frac{1}{2}, 1, 2, 4\}$.

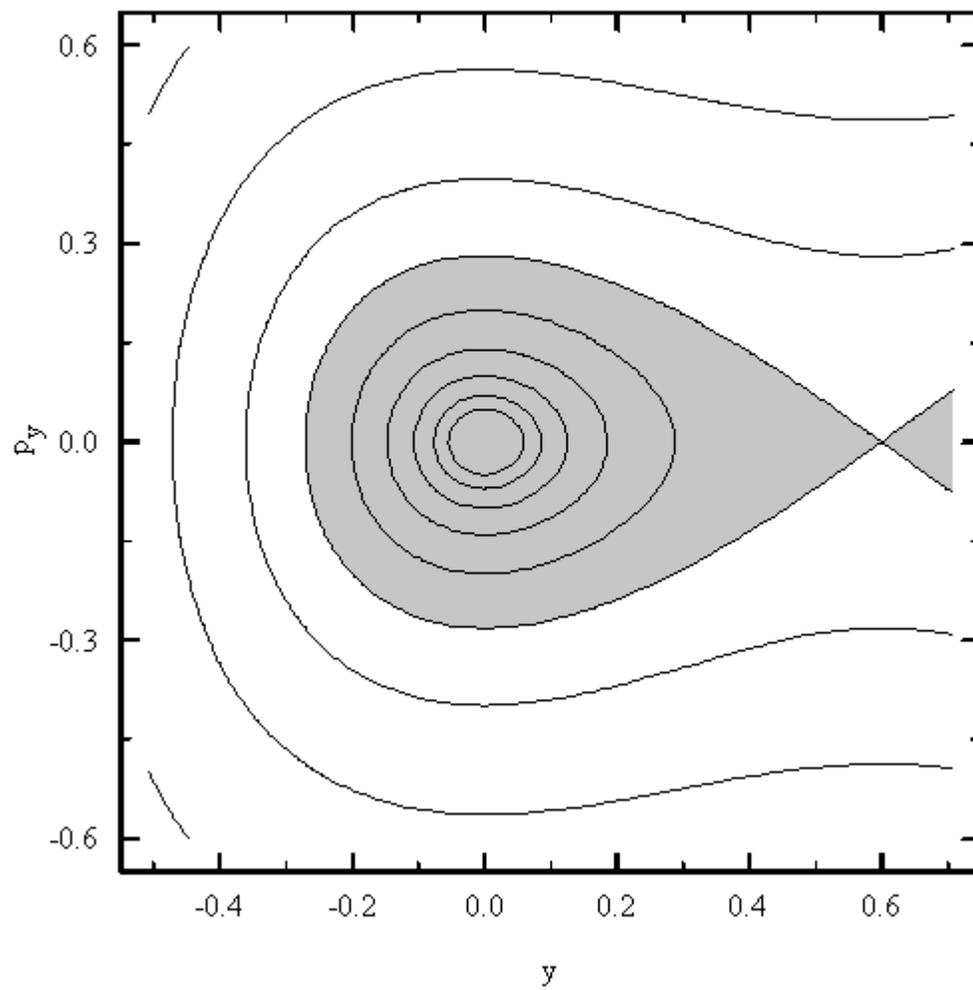


Figure 1.15: Contours de sections de Poincaré $x = 0$ pour $Q^+ + \text{Si}\langle 111 \rangle$ à différentes énergies $E_{\perp}/V_S = \{\frac{1}{32}, \frac{1}{16}, \frac{1}{8}, \frac{1}{4}, \frac{1}{2}, 1, 2, 4, 8\}$.

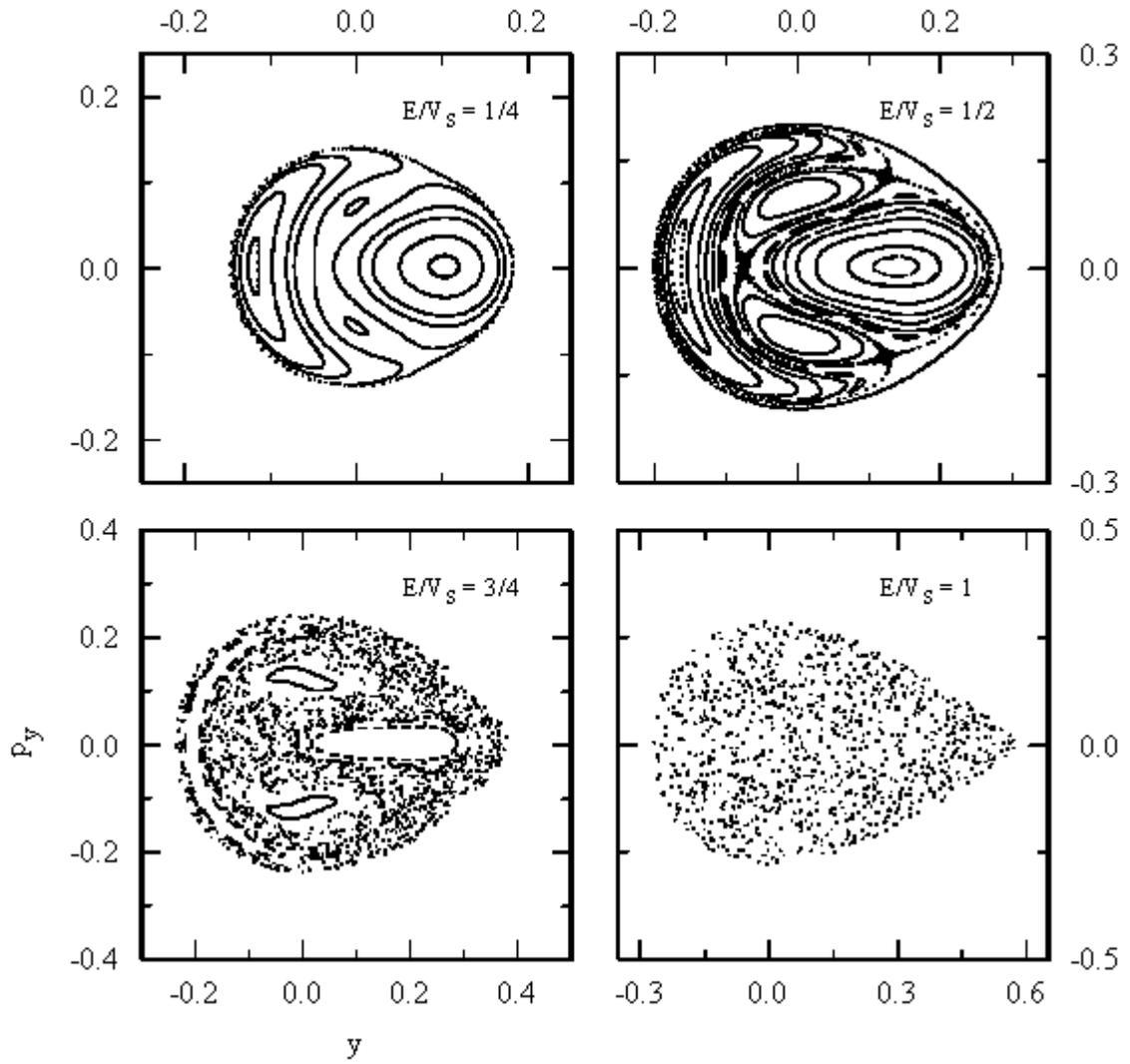


Figure 1.16: Sections de Poincaré $x = 0$ pour $Q^+ + \text{Si}\langle 111 \rangle$.

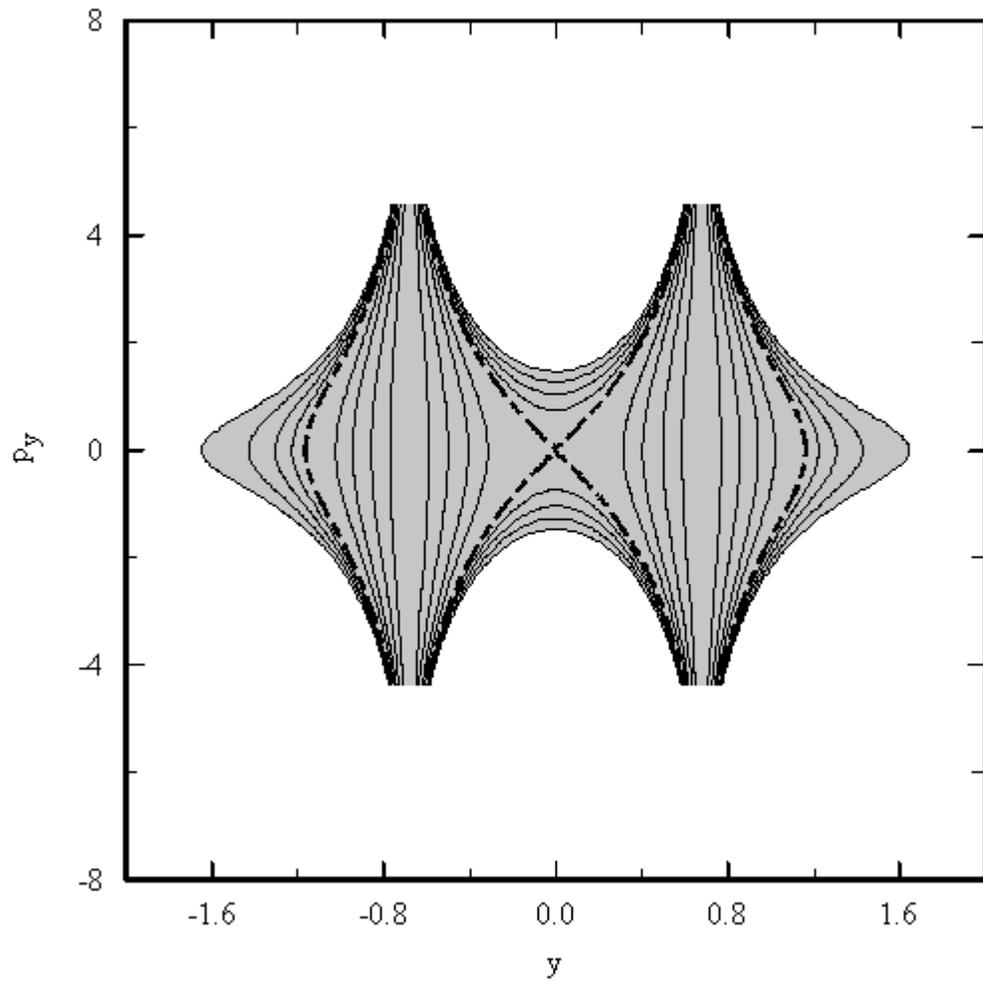


Figure 1.17: Contours de sections de Poincaré $x = 0$ pour $Q^- + \text{Si}\langle 110 \rangle$ à différentes énergies $E_{\perp}/V_S = \{-8, -4, -2, -1, 0, \frac{1}{4}, \frac{1}{2}, \frac{3}{4}, 1\}$.

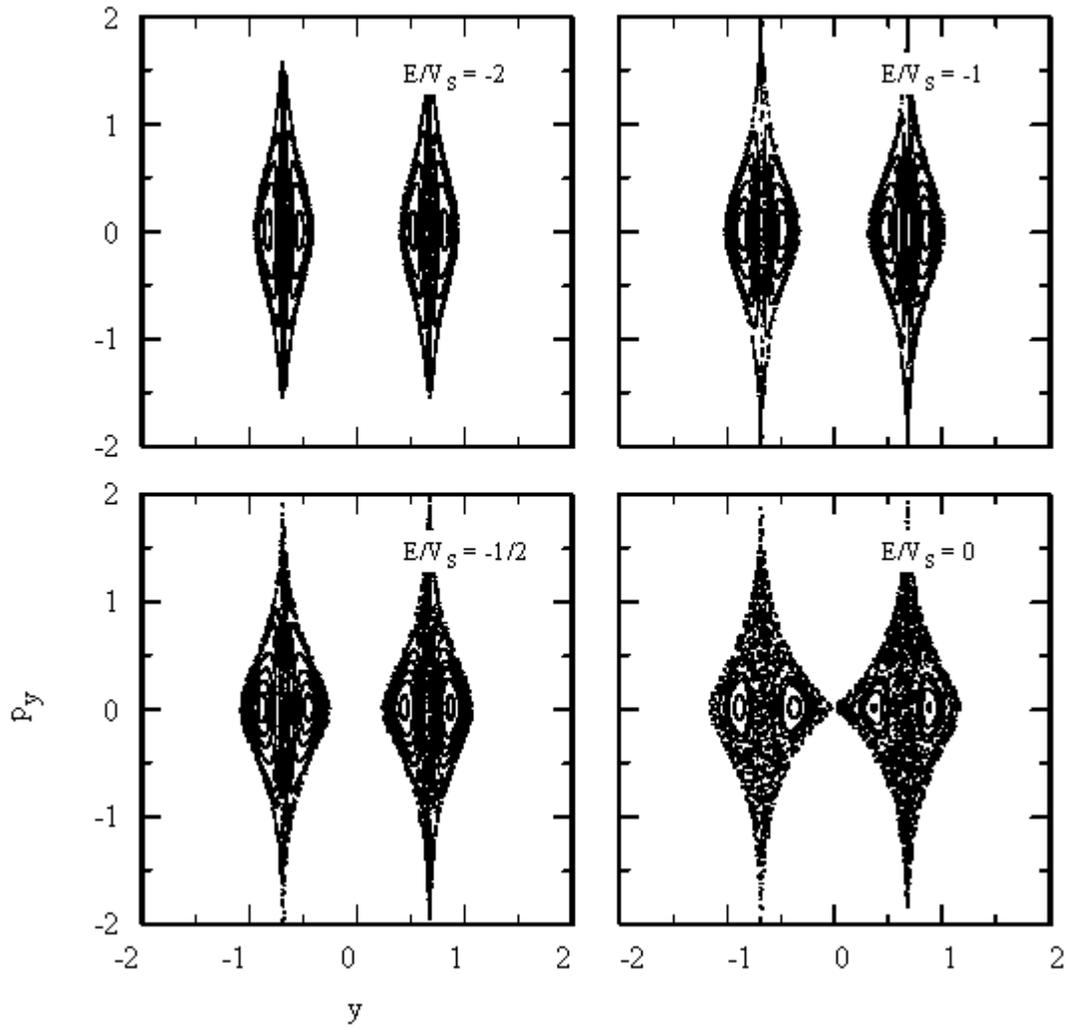


Figure 1.18: Sections de Poincaré $x = 0$ pour $Q^- + \text{Si}\langle 110 \rangle$.

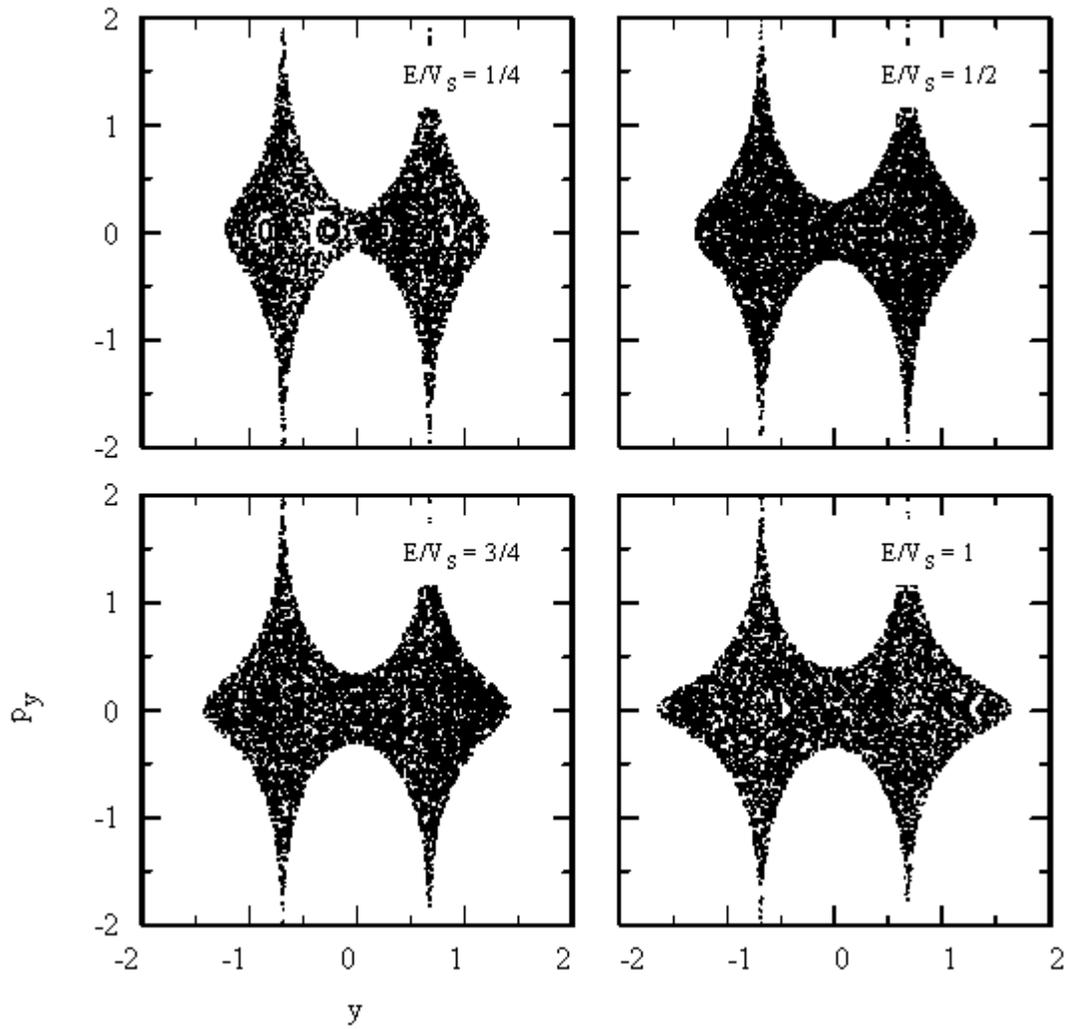


Figure 1.19: Sections de Poincaré $x = 0$ pour $Q^- + \text{Si}\langle 110 \rangle$ (suite).

définies et il s'avère que le traitement que l'on veut en faire relève de l'étude dynamique du système hamiltonien

$$\begin{aligned} \dot{x} &= p_x & \dot{p}_x &= -\frac{\partial V}{\partial x} \\ \dot{y} &= p_y & \dot{p}_y &= -\frac{\partial V}{\partial y} \end{aligned}$$

avec

$$V(x, y) = \pm \frac{e^2}{d} \sum_i \ln \left(1 + \frac{3a^2}{\rho_i^2(x, y)} \right)$$

où d est la distance interatomique le long d'une chaîne, a est la distance d'écrantage définie par l'expression (1.4) et $\rho_i(x, y) = \sqrt{(x - x_i)^2 + (y - y_i)^2}$ est la distance entre le projectile et la chaîne continue i .

Connaissant les systèmes hamiltoniens à étudier, nous avons considéré le problème de la transition stochastique. D'abord par une approche analytique, reposant sur un critère de stabilité locale, nous avons pu être en mesure de définir la valeur de l'énergie critique qui devrait être nécessaire à l'apparition de trajectoires globalement instables donc chaotiques. Ensuite par une approche numérique, nous avons introduit le concept de section de Poincaré permettant de jauger la stabilité de tout l'espace des phases. À l'aide de cet outil, nous avons montré un contre-exemple invalidant le critère basé sur l'instabilité locale. Il s'avère toutefois que ce critère donne dans certains cas (e.g. Toda [1974]), une bonne approximation de l'énergie critique à laquelle se produit la transition stochastique. Dans le cas de notre potentiel à double puits ($Q^- + \text{Si}\langle 110 \rangle$), il n'a toutefois été constaté aucun lien entre stabilité locale et globale. Nous avons même observé des sections de Poincaré démontrant un espace des phases presque complètement stable alors que la dynamique y est localement instable. La stabilité locale n'est donc pas une condition nécessaire et suffisante [Toda, 1974] ni une condition nécessaire [Cerjan et Reinhardt, 1979] à l'apparition de trajectoires instables ou chaotiques.

Nous reportons au dernier chapitre de la thèse une approche plus quantitative pour étudier le problème de la transition stochastique chez nos potentiels cristallins. Les outils que nous allons y développer (tout comme la section de Poincaré) reposent sur l'intégration numérique de trajectoires. De part la nature des potentiels considérés

(plus ou moins escarpés selon le cas), de bons intégrateurs à pas variable (ou adaptatif) sont désirables. Ces intégrateurs existent mais n'ont pas été conçus pour intégrer les systèmes hamiltoniens. Entre autres, ils sont incapables de produire des trajectoires qui préservent l'énergie de façon satisfaisante.

Les intégrateurs dits symplectiques [e.g. Channel et Scovel, 1990; McLachlan et Atela, 1992; Gray, Noid et Sumpter, 1994; Casetti, 1995] par contre, possèdent cette remarquable propriété (et bien d'autres d'ailleurs). Ils ont toutefois un inconvénient : celui de ne bien fonctionner que pour des méthodes d'intégration à pas fixe, et des efforts pour développer des intégrateurs symplectiques à pas adaptatif se sont auparavant montrés infructueux [Calvo et Sanz-Serna, 1993].

Le chapitre suivant traite donc de l'intégration symplectique. Il en démontre les performances et décrit une méthode simple que nous avons développée, permettant l'intégration symplectique à pas adaptatif.

Chapitre 2

Intégration numérique des systèmes hamiltoniens

L'analyse dynamique que l'on veut faire du problème de canalisation introduit dans le chapitre précédent passe principalement par l'intégration numérique d'un système hamiltonien. L'utilisation de méthodes conventionnelles comme les intégrateurs de type Runge-Kutta à pas fixe ou même adaptif peut conduire à une mauvaise évaluation des trajectoires. Typiquement, l'hamiltonien $H(\mathbf{q}(t), \mathbf{p}(t))$ n'est pas conservé et certains aspects qualitatifs du mouvement peuvent en être grandement affectés. C'est pourquoi les développements récents d'intégrateurs symplectiques (IS), conçus spécialement pour les systèmes hamiltoniens, ont suscité beaucoup d'intérêt. En plus d'offrir une plus grande stabilité quant à la conservation de l'énergie, les IS préservent certaines propriétés intrinsèques aux trajectoires exactes du système hamiltonien. Toutefois, il n'est généralement pas possible de construire un IS conservant l'énergie exactement et seule une stabilité à long terme de l'erreur sur l'énergie est assurée. Par ailleurs, une précédente tentative de construction d'un intégrateur symplectique à pas adaptif s'est avérée un échec. Les auteurs ayant développé un tel algorithme durent constater que leur mécanisme adaptif détruisait la stabilité propre aux intégrateurs symplectiques.

L'objectif de ce chapitre est donc de présenter une approche différente qui nous a permis de développer de nouveaux intégrateurs symplectiques à pas adaptif. Ils sont stables et conservent l'énergie avec une précision aussi grande que désirée.

Nous présentons d’abord l’intégration symplectique de façon sommaire dans le but de nous concentrer sur les aspects propres à notre problème de canalisation. L’intégration symplectique à pas fixe est ensuite introduite de même qu’un système hamiltonien simple servant aux tests réalisés tout au long du chapitre. Une synthèse de 17 intégrateurs symplectiques à pas fixe (ISPF), présents en littérature, est présentée et leurs performances sont évaluées et comparées entre elles. Sur la base des ISPF, nous développons enfin nos intégrateurs symplectiques à pas variable (ISPV), d’abord à extrapolation d’ordre 0 (ISPV0) et ensuite à extrapolation d’ordre 1 (ISPV1). Des tests sont réalisés afin de montrer de quelle façon les performances et l’efficacité de ISPV0 et ISPV1 se comparent à ISPF. Quelques notes et un bref récapitulatif viennent finalement clore le chapitre.

2.1 Intégration symplectique

Il n’est pas dans notre intention de faire ici une présentation exhaustive de la théorie des intégrateurs symplectiques (IS). Nous nous contentons de faire une brève synthèse de quelques publications récentes permettant de comprendre d’où ils proviennent et quel est l’intérêt de l’utilisation de telles méthodes dans le contexte qui nous intéresse. Une alternative à la présentation donnée ici est de consulter Casetti [1995], Gray, Noid et Sumpter [1994], Okunbor [1992] ou encore Sanz-Serna [1992]. Un aperçu efficace de l’intégration symplectique a été fait par Cartwright and Piro [1992].

Les IS sont construits de telle sorte qu’ils préservent les invariants de Poincaré [Arnol’d, 1989]

$$\int \int \sum_i dq_i dp_i, \quad \int \int \int \int \sum_{i \neq k} dq_i dp_i dq_k dp_k, \quad \dots$$

aussi conservés par l’évolution exacte du système décrit par l’hamiltonien $H(\mathbf{q}(t), \mathbf{p}(t))$. Cette propriété impose de fortes contraintes géométriques aux trajectoires obtenues et est encore plus rigoureuse que le théorème de Liouville qui stipule que le volume de l’espace des phases (le dernier invariant de Poincaré) est préservé [Goldstein, 1980]. En

fait, un IS donne l'évolution exacte d'un système dont l'hamiltonien est suffisamment près de l'hamiltonien d'intérêt [Channel et Scovel, 1990].

Bien qu'il ne leur soit en général pas possible de conserver l'énergie de façon exacte [Zhong et Marsden, 1988 ou Estep et Stuart, 1995], les IS offrent à cet égard une stabilité qu'aucun autre intégrateur non conservatif ne peut offrir. Dans un certain sens ils satisfont "presque" la condition de conservation de l'énergie puisque l'erreur sur celle-ci oscille autour de zéro sur de très longues périodes. De plus amples détails concernant la stabilité des IS peuvent être trouvés dans Estep et Stuart [1995] ou Calvo et Sanz-Serna [1993].

Afin de donner un aperçu de l'efficacité des IS, la figure 2.1 montre l'évolution de l'erreur relative sur l'énergie

$$e(t) = \frac{H(t) - H(0)}{H(0)} \quad (2.1)$$

lors de l'intégration numérique d'une même trajectoire utilisant des intégrateurs d'ordre 4, d'une part de type symplectique (IS4) [McLachlan et Atela, 1992] et d'autre part de type Runge-Kutta (RK4) [Press et al., 1992]. La trajectoire intégrée est soumise à un potentiel semblable à celui correspondant à la configuration de canalisation $Q^+ + \text{Si} < 100 >$ (voir chapitre 1). En fait, il s'agit du potentiel quartique escarpé qui sera défini un peu plus tard dans le chapitre. Même avec un pas d'intégration plus grand, IS4 conserve mieux l'énergie que son confrère non-symplectique. L'erreur sur l'énergie n'est pas nulle mais peut osciller de façon stable autour d'une valeur constante très longtemps. Ce comportement est typique des IS. La très évidente dérive en énergie observée pour RK4 est inexistante ou négligeable pour IS4.

Introduisons maintenant de manière un peu plus précise ce qu'on entend par intégration symplectique tout en faisant une synthèse des méthodes que l'on peut trouver en littérature.

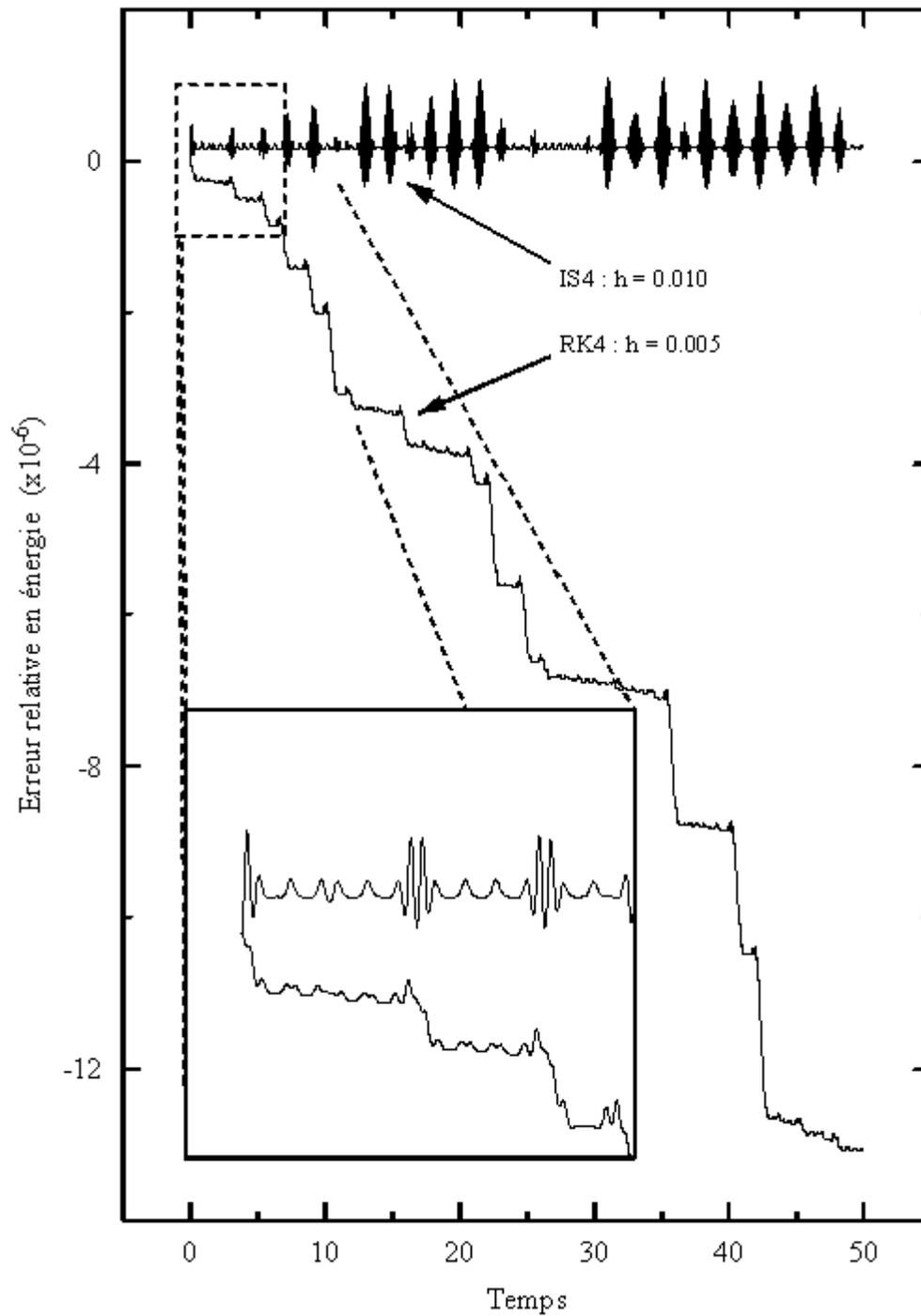


Figure 2.1: Comparaison entre intégrateurs symplectique (IS4) et non-symplectique (RK4) d'ordre 4. On remarque la grande stabilité de IS4 et la dérive apportée par l'utilisation de RK4 quant à l'évolution de l'erreur relative en énergie.

2.2 Intégrateurs symplectiques à pas fixe

Soit un système hamiltonien à N degrés de liberté et son espace des phases de dimension $2N$. Une application (ou transformation) $\psi(\mathbf{q}, \mathbf{p})$ est dite symplectique si elle vérifie

$$M_\psi^T \circ \mathbf{J} \circ M_\psi = \mathbf{J}, \quad (2.2)$$

où M_ψ est le jacobien de la transformation (matrice $2N \times 2N$), et

$$\mathbf{J} = \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{I} \\ -\mathbf{I} & 0 \end{pmatrix},$$

où \mathbf{I} représente la matrice unité de dimension $N \times N$. On vérifie aisément que ceci implique que

$$\det M_\psi = 1$$

et que la transformation préserve les aires.

Pour obtenir un intégrateur symplectique à pas fixe (ISPF), il s'agit essentiellement de remplacer le flot (l'évolution dans l'espace des phases) défini par

$$\frac{d\mathbf{q}}{dt} = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}}, \quad \frac{d\mathbf{p}}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{q}} \quad (2.3)$$

par une application symplectique

$$\psi_h(\mathbf{q}, \mathbf{p}) : (\mathbf{q}(t), \mathbf{p}(t))^T \mapsto (\mathbf{q}(t+h), \mathbf{p}(t+h))^T \quad (2.4)$$

où h représente le pas d'intégration que l'on veut accomplir. On construit alors facilement une trajectoire complète par itérations successives de ψ_h appliquée à une certaine condition initiale :

$$(\mathbf{q}(t_0), \mathbf{p}(t_0))^T \mapsto (\mathbf{q}(t_0+h), \mathbf{p}(t_0+h))^T \mapsto (\mathbf{q}(t_0+2h), \mathbf{p}(t_0+2h))^T \mapsto \dots \quad (2.5)$$

Puisque la composition de transformations symplectiques est aussi une transformation symplectique, les invariants de Poincaré sont préservés et la trajectoire obtenue est qualitativement équivalente à la solution exacte du système hamiltonien considéré.

ISPQ	ISQP
$\mathbf{q}^0 = \mathbf{q}(t), \mathbf{p}^0 = \mathbf{p}(t)$	$\mathbf{q}^0 = \mathbf{q}(t), \mathbf{p}^0 = \mathbf{p}(t)$
DO $k = 1, \dots, M$	DO $k = 1, \dots, M$
$\mathbf{p}^k = \mathbf{p}^{k-1} - b_k h \frac{\partial V}{\partial \mathbf{q}}(\mathbf{q}^{k-1})$	$\mathbf{q}^k = \mathbf{q}^{k-1} + a_k h \mathbf{p}^{k-1}$
$\mathbf{q}^k = \mathbf{q}^{k-1} + a_k h \mathbf{p}^k$	$\mathbf{p}^k = \mathbf{p}^{k-1} - b_k h \frac{\partial V}{\partial \mathbf{q}}(\mathbf{q}^k)$
ENDDO	ENDDO
$\mathbf{q}(t+h) = \mathbf{q}^M, \mathbf{p}(t+h) = \mathbf{p}^M$	$\mathbf{q}(t+h) = \mathbf{q}^M, \mathbf{p}(t+h) = \mathbf{p}^M$

Tableau 2.1: Algorithmes permettant d'accomplir un pas d'intégration symplectique.

Par convention, on dit qu'une méthode d'intégration numérique est d'ordre n si l'erreur sur chaque pas d'intégration h est d'ordre h^{n+1} . Donc, pour obtenir un IS d'ordre n , l'application ψ_h doit vérifier la condition de symplecticité (2.2) et décrire le système hamiltonien (2.3) à une précision d'ordre n dans la variable h .

2.2.1 Intégrateurs explicites pour hamiltoniens de type potentiel

Il existe plusieurs façons de construire des IS. Pour les besoins qui nous concernent, on choisit de se restreindre au cas de ceux qui sont explicites¹ et pouvant être appliqués aux hamiltoniens que nous dénommons ici *de type potentiel* et qui ont la forme

$$H(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = \frac{1}{2} \mathbf{p}^2 + V(\mathbf{q}). \quad (2.6)$$

De tels intégrateurs se retrouvent dans les articles de Ruth [1983], Channel et Scovel [1990], Yoshida [1990], Forest et Ruth [1990] et McLachlan et Atela [1992]. Nous avons fait une synthèse de ces algorithmes, et il s'avère qu'ils peuvent s'exprimer de l'une ou l'autre des façons illustrées par le tableau 2.1.

¹Les méthodes explicites permettent d'exprimer explicitement la solution d'un pas d'intégration en fonction de la solution apportée par le(s) pas précédent(s). On évite ainsi le problème encouru par les méthodes implicites pour lesquelles on doit résoudre numériquement la solution permettant d'accomplir un pas d'intégration.

Après avoir été initialisées, les variables temporaires \mathbf{q}^k et \mathbf{p}^k sont successivement transformées M fois. On transforme \mathbf{p}^k et ensuite \mathbf{q}^k pour ISPQ, \mathbf{q}^k et ensuite \mathbf{p}^k pour ISQP. Le pas d'intégration accompli est le résultat de la M -ième transformation.

De ce point de vue, on obtient un IS d'ordre n en trouvant un ensemble de paramètres $\{M, a_i, b_i\}$ satisfaisant la condition de symplecticité (2.2) et décrivant le système hamiltonien (2.3) jusqu'à l'ordre n désiré. Pour un nombre d'étapes M donné, les coefficients a_i et b_i sont obtenus par la résolution d'un système d'équations algébriques.

En guise d'exemple, mentionnons l'approche en 2 étapes ($M = 2$) de McLachlan et Atela [1992] pour obtenir un IS d'ordre 2. Elle nous amène à définir l'hamiltonien transformé

$$\Delta H(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = [1 - a_1 - a_2]T(\mathbf{p}) + [1 - b_1 - b_2]V(\mathbf{q}) - \frac{\partial V}{\partial \mathbf{q}} \frac{\partial T}{\partial \mathbf{p}} [2a_1b_2 - 1]t + O(t^2),$$

où $T(\mathbf{p}) = \frac{1}{2}\mathbf{p}^2$ dans notre cas.

En fait $\Delta H = H - \hat{H}$, et \hat{H} est un hamiltonien pour lequel l'IS que l'on cherche à obtenir décrit l'évolution *exacte* de l'espace des phases. Le but est évidemment de faire en sorte que H et \hat{H} soient identiques jusqu'à l'ordre désiré. Il faut donc résoudre terme à terme $\Delta H = 0 + O(t^2)$, soit ici le système à 3 équations et 4 inconnues

$$1 - a_1 - a_2 = 0 \quad 1 - b_1 - b_2 = 0 \quad 2a_1b_2 - 1 = 0$$

dont la solution est la famille à 1 paramètre

$$a_1 = 1 - a_2 \quad b_1 = 1 - \frac{1}{2(1 - a_2)} \quad b_2 = \frac{1}{2(1 - a_2)}.$$

Une méthode très répandue, dite "leapfrog", correspond au cas $a_2 = \frac{1}{2}$. On remarque alors que $b_1 = 0$ et que de ce fait on économise une évaluation du gradient du potentiel, ou évaluation de force, pour chaque pas d'intégration (cf. tableau 2.1). Il s'avère toutefois que cette méthode ne constitue pas l'IS d'ordre 2 le plus efficace.

Voici comment s'écrit, après substitution de a_1 , b_1 et b_2 , le coefficient du terme d'erreur $O(t^2)$ du développement en t de H_0 [McLachlan et Atela, 1992] :

$$-\frac{\partial^2 V}{\partial \mathbf{q}^2} \left(\frac{\partial T}{\partial \mathbf{p}} \right)^2 \frac{1 - 3a_2}{4} + \left(\frac{\partial V}{\partial \mathbf{q}} \right)^2 \frac{\partial^2 T}{\partial \mathbf{p}^2} \frac{1 - 4a_2}{8(1 - a_2)}.$$

IS ($n = 2$)	a_2	constante d'erreur	s	constante d'erreur effective
Leapfrog	$\frac{1}{2}$	0.280	1	0.070
Optimal	$1 - \frac{1}{2}\sqrt{2}$	0.043	2	0.043

Tableau 2.2: Comparaison entre deux intégrateurs symplectiques de second ordre que l'on trouve dans MacLachlan et Atela [1992]. L'IS dit optimal est celui ayant la constante d'erreur effective la plus faible et devrait donc être le plus efficace.

Ce coefficient est lui même formé de 2 termes qui sont des fonctions de \mathbf{q} , \mathbf{p} et a_2 . En toute généralité on ne peut rien dire sur les valeurs prises par $-\frac{\partial^2 V}{\partial \mathbf{q}^2} \left(\frac{\partial T}{\partial \mathbf{p}}\right)^2$ et $\left(\frac{\partial V}{\partial \mathbf{q}}\right)^2 \frac{\partial^2 T}{\partial \mathbf{p}^2}$ lorsque \mathbf{q} et \mathbf{p} évoluent. On choisit donc de minimiser ce que McLachlan et Atela appellent la *constante d'erreur* et qui prend ici la forme

$$\left[\left(\frac{1 - 3a_2}{4} \right)^2 + \left(\frac{1 - 4a_2}{8(1 - a_2)} \right)^2 \right]^{1/2}$$

soit la norme des coefficients retrouvés dans le terme d'erreur. Des deux minima $a_2 = 1 \pm \frac{1}{2}\sqrt{2}$, le plus petit est celui qui donne la plus petite erreur.

La méthode optimale est donc définie par le choix de a_2 minimisant la constante d'erreur. Toutefois, la méthode “leapfrog” requiert une plutôt que deux évaluations de force par pas d'intégration puisque $b_1 = 0$. On peut tenir compte de ce fait et corriger la constante d'erreur par le facteur

$$\left(\frac{s}{n} \right)^n = \left(\frac{1}{2} \right)^2 = \frac{1}{4}$$

où n est l'ordre de l'intégrateur et s est le nombre d'évaluations de force par pas d'intégration. Le tableau 2.2 résume la comparaison pouvant être faite entre la méthode “leapfrog” classique et la méthode dite optimale de MacLachlan et Atela.

On vient de donner les grandes lignes du développement d'un IS d'ordre 2 à deux étapes ($M = 2$). En utilisant la même approche, McLachlan et Atela ont aussi pu obtenir des IS optimaux d'ordre 3, 4 et 5 avec $M = 3, 4$ et 6 respectivement. Yoshida [1990] a quant à lui élaboré une méthode utilisant une approche différente et qui permet d'obtenir des IS d'ordre pair. En particulier, il a pu résoudre les ensembles $\{M, a_i, b_i\}$ pour des IS d'ordre aussi élevé que 6 et 8. Tous ces IS sont venus s'ajouter à la collection

d’IS classiques ou “canoniques” d’ordre 1, 2, 3, et 4 décrits pour certains d’entre eux dans Ruth [1983], Channel et Scovel [1990] ou Forest et Ruth [1990]. Afin de voir quels IS conviennent le mieux à notre problème de canalisation, nous introduisons maintenant des potentiels qui serviront lors de tous les tests effectués dans ce chapitre.

2.2.2 Potentiels quartiques vallonné et escarpé

Considérons le potentiel

$$V(x, y) = x^2 + y^2 + Ax^2y^2. \quad (2.7)$$

Des comportements très variés peuvent être obtenus simplement en changeant la valeur donnée à A . La figure 2.2 montre le graphe de contour $V = 1$ de même qu’une trajectoire typique d’énergie $E = 1$ pour chacun des cas $A = 4$ et $A = 512$. On peut constater que ce potentiel rappelle celui introduit dans le chapitre 1 servant à décrire le processus de canalisation $Q^+ + \text{Si} < 100 >$. La section de Poincaré $x = 0$ est tracée sur la figure 2.3 pour donner une idée de la dynamique engendrée par chacun des potentiels.

Plus tard dans ce chapitre, la version escarpée ($A = 512$) du potentiel (2.7) servira à bien mettre en évidence les avantages des IS à pas adaptif que nous allons bientôt développer. Mais d’abord, nous utilisons le potentiel vallonné ($A = 4$) pour établir comment les IS à pas fixe trouvés en littérature se comparent entre eux.

2.2.3 Tests sur 17 intégrateurs trouvés en littérature

Nous nous intéressons aux performances des différents IS à pas fixe que l’on peut trouver dans les articles de Ruth [1983], Chanel et Scovel [1990], Forest et Ruth [1990], Yoshida [1990] et McLachlan et Atela [1992] cités plus haut. Quelques IS plus récents existent mais ils ne sont pas tous aussi simples à implanter [e.g. Lopez-Marcos *et al.*, 1997]. De plus, nous doutons qu’ils soient plus performants que les IS présentés ici.

Pour évaluer ces performances, la façon usuelle est de mesurer le nombre d’évaluations de force (gradient du potentiel) nécessaire à l’intégration d’une trajectoire avec une pré-

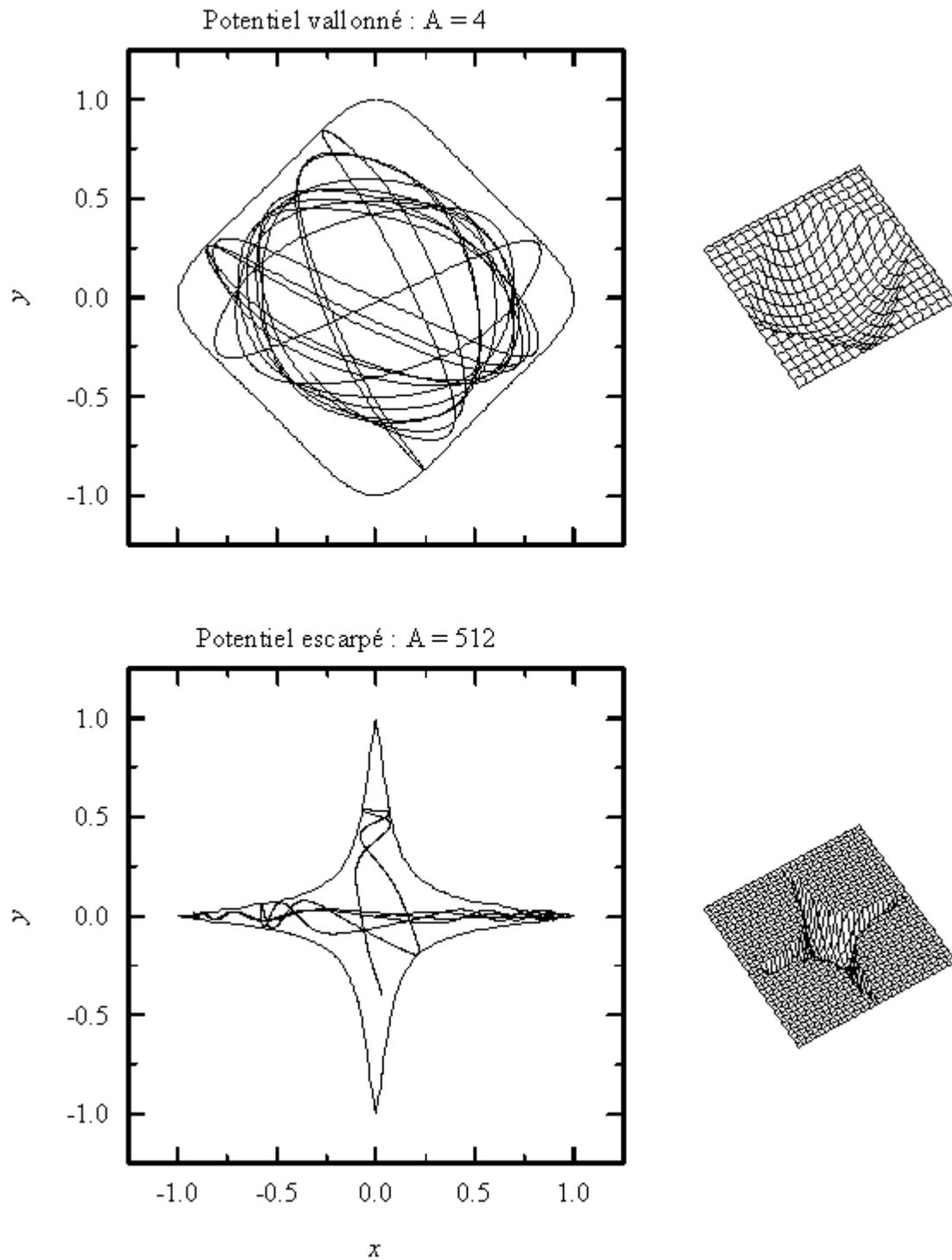


Figure 2.2: Les potentiels vallonné et escarpé servant aux tests. Le potentiel escarpé est utile pour bien mettre en évidence les avantages de l'intégration symplectique à pas adaptif.

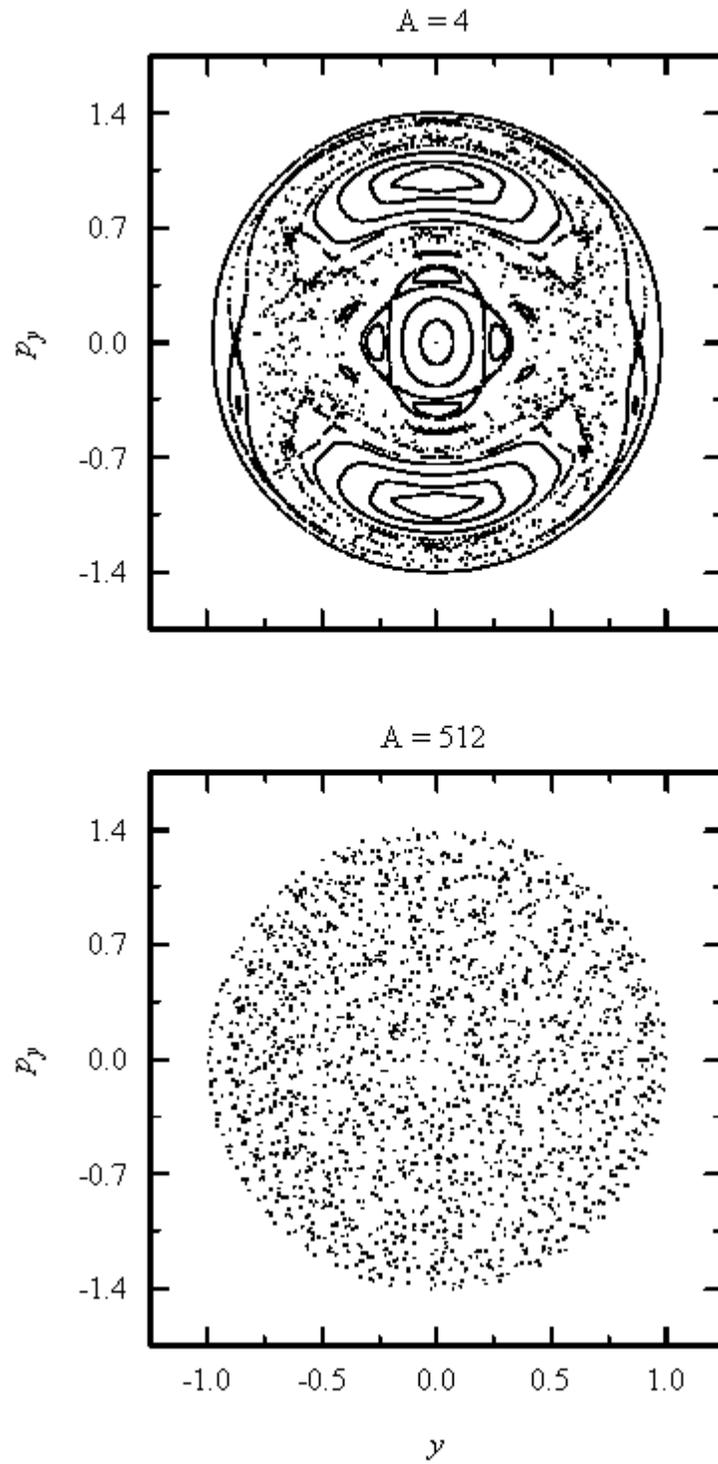


Figure 2.3: Sections de Poincaré $x = 0$ correspondant aux potentiels vallonné ($A = 4$) et escarpé ($A = 512$) pour $E = 1$.

cision donnée. Les performances à différents ordres des IS “canoniques” (IS n -CAN), optimaux (IS n -OPT), et de Yoshida (IS n -YOSH X) sont illustrées sur la figure 2.4. La valeur RMS de l’erreur relative en énergie

$$e_{\text{RMS}} = \left[\frac{1}{Nh} \sum_{i=1}^N e^2(t_i) \right]^{\frac{1}{2}}$$

est tracée en fonction du nombre d’évaluations de force nécessaire pour intégrer la même trajectoire. Le cas IS6-YOSHSYM correspond à une version des transformations symétriques (reversibles en temps) de Yoshida dont les coefficients sont obtenus analytiquement et non numériquement.

La condition initiale choisie est

$$\left[x^0 = 0, y^0 = 0.5, p_x^0 = p_x(x^0, y^0, p_y^0; E = 1), p_y^0 = 0 \right]^T.$$

Elle provient de la bande stochastique observée sur la section de Poincaré correspondant au potentiel vallonné (voir fig. 2.3). Elle évolue donc de façon chaotique explorant ainsi une grande région de l’espace des phases. Les trajectoires obtenues avec différents IS ou avec différents pas d’intégration sont similaires mais ne sont pas identiques. On s’assure donc d’intégrer suffisamment longtemps pour qu’en moyenne, les trajectoires explorent la même région de l’espace des phases. Cette procédure permet une comparaison juste de la qualité des IS. Dans notre cas, il s’est avéré que l’intégration sur une période $T = Nh = 100$ était grandement suffisante. L’opération est répétée pour différents pas d’intégration h ce qui permet d’obtenir des résultats correspondant à différents nombres d’évaluations de force pour une même période d’intégration T . Le tableau 2.3 rassemble un sommaire des résultats tracés sur la figure 2.4.

A ordre égal, on constate la supériorité des IS optimaux sur les IS canoniques. Par exemple, on peut lire sur l’échelle logarithmique de la figure 2.4, qu’à nombre d’évaluations de force égal, IS4-OPT est de 50 à 60 fois plus précis que IS4-CAN. Chez les IS de Yoshida, ce sont IS6-YOSHA et IS8-YOSHD qui sont les plus performants. On peut aisément comparer les IS de même ordre entre eux et retenir le plus efficace à chaque ordre.

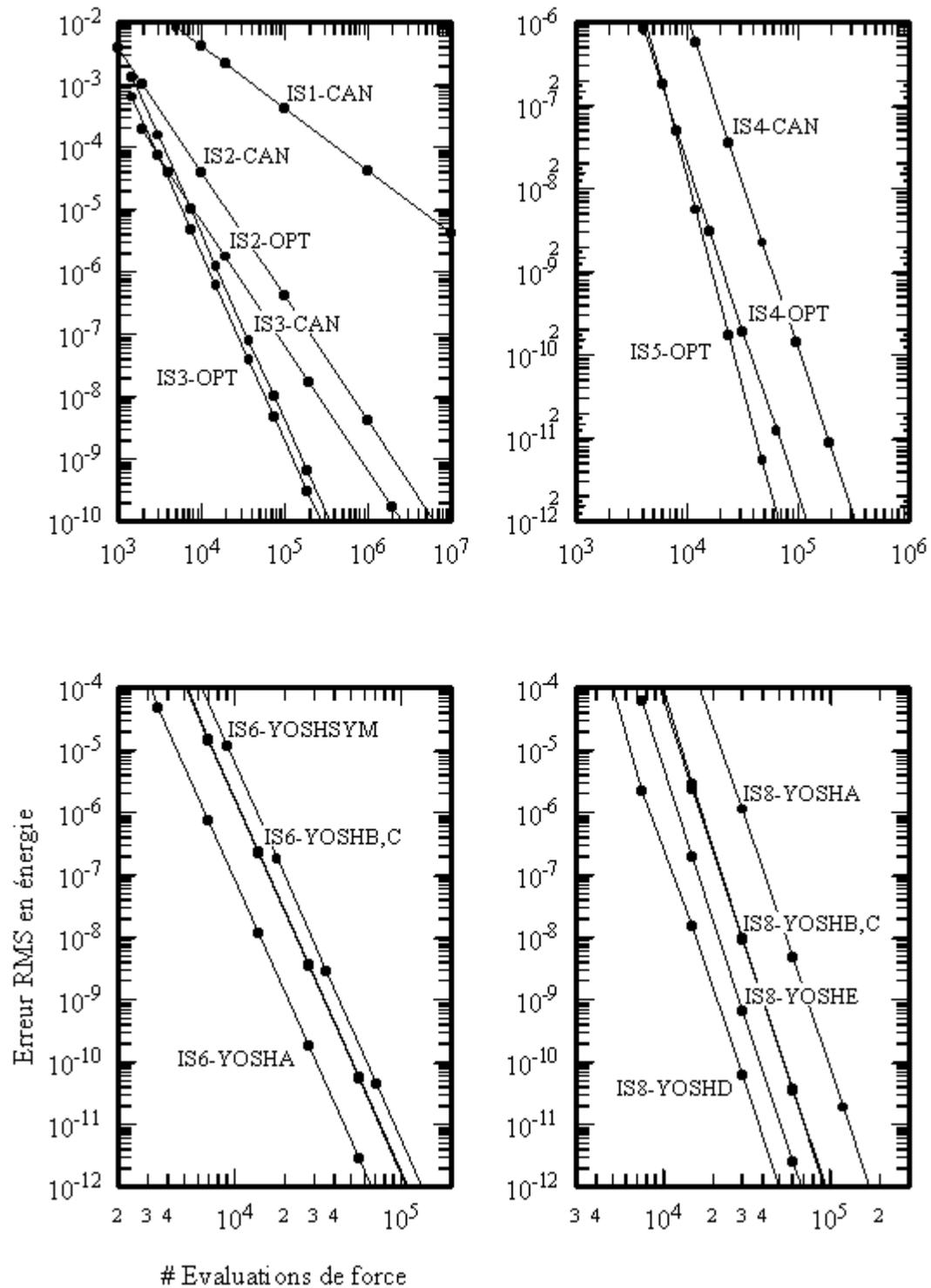


Figure 2.4: Performances de 17 intégrateurs symplectiques à pas fixe mesurées en termes d'évaluation de force. Une trajectoire chaotique évoluant dans le potentiel vallonné est utilisée pour les tests.

Méthode	s	h	N	# éval. force	e_{RMS}
IS1-CAN	1	0.02–0.00001	5000–10000000	5000–10000000	8.5e-3–4.2e-6
IS2-CAN	1	0.1–0.00001	1000–10000000	5000–10000000	3.9e-3–4.0e-11
IS2-OPT	2	0.1–0.00001	1000–10000000	2000–20000000	4.9e-4–1.7e-12
IS3-CAN	3	0.2–0.00016	500–625000	1500–1875000	1.3e-3–6.4e-13
IS3-OPT	3	0.2–0.00016	500–625000	1500–1875000	6.2e-4–3.1e-13
IS4-CAN	3	0.2–0.00078125	500–128000	1500–384000	2.8e-3–5.6e-13
IS4-OPT	4	0.2–0.0015625	500–64000	1500–192000	1.3e-5–4.5e-14
IS5-OPT	6	0.4–0.00625	250–16000	1500–96000	4.1e-4–1.7e-13
IS6-YOSHSYM	9	0.2–0.00625	500–16000	4500–144000	8.9e-4–6.9e-13
IS6-YOSHA	7	0.4–0.00625	250–16000	1750–112000	5.1e-3–4.4e-14
IS6-YOSHB	7	0.2–0.00625	500–16000	3500–112000	1.2e-3–8.3e-13
IS6-YOSHC	7	0.2–0.00625	500–16000	3500–112000	1.6e-3–8.9e-13
IS8-YOSHA	15	0.2–0.00625	500–16000	7500–240000	3.3e-2–8.0e-14
IS8-YOSHB	15	0.2–0.0125	500–8000	7500–120000	1.4e-3–1.4e-13
IS8-YOSHC	15	0.2–0.0125	500–8000	7500–120000	6.9e-4–1.3e-13
IS8-YOSHD	15	0.4–0.0125	250–8000	3750–120000	1.4e-3–1.1e-14
IS8-YOSHE	15	0.2–0.0125	500–8000	7500–120000	6.2e-5–1.2e-14

Tableau 2.3: Sommaire des performances de 17 intégrateurs symplectiques à pas fixe mesurées en termes d'évaluation de force (cf. fig. 2.4).

Pour intégrer une trajectoire à une précision donnée toutefois, les IS d'ordre plus élevé ne sont pas nécessairement les plus efficaces. Pour accomplir un pas d'intégration, les IS d'ordre plus élevé requièrent en général un nombre d'étapes M plus élevé, donc plus d'évaluations de force, que les IS d'ordre moins élevé. Par contre leur précision est aussi plus élevée.

Afin de bien illustrer ce compromis, la figure 2.5 rassemble sur un même graphique les performances du meilleur IS correspondant à chacun des ordres. Puisque chacun d'eux ne se distingue des autres que par son ordre n , ils ont été rebaptisés $\text{IS}n$. On remarque que le spectre (assez large) de précision se divise en trois parties. Celle du centre est hachurée et l'erreur RMS en énergie s'y étend de 6×10^{-11} à 2×10^{-7} environ. Pour une faible précision, *i.e.* $e_{\text{RMS}} > 2 \times 10^{-7}$, soit en haut de la région hachurée, IS4 est l'intégrateur le plus précis à nombre égal d'évaluations de force. Pour de hautes précisions, *i.e.* $e_{\text{RMS}} < 6 \times 10^{-11}$, soit en bas de la région hachurée, IS8 est le plus performant. Aux précisions intermédiaires, *i.e.* $6 \times 10^{-11} < e_{\text{RMS}} < 2 \times 10^{-7}$, soit dans la région hachurée, IS5 est le plus performant. A la limite, pour de très basses précisions de l'ordre de 2×10^{-3} , IS2 devient plus performant que IS4. Dans le contexte

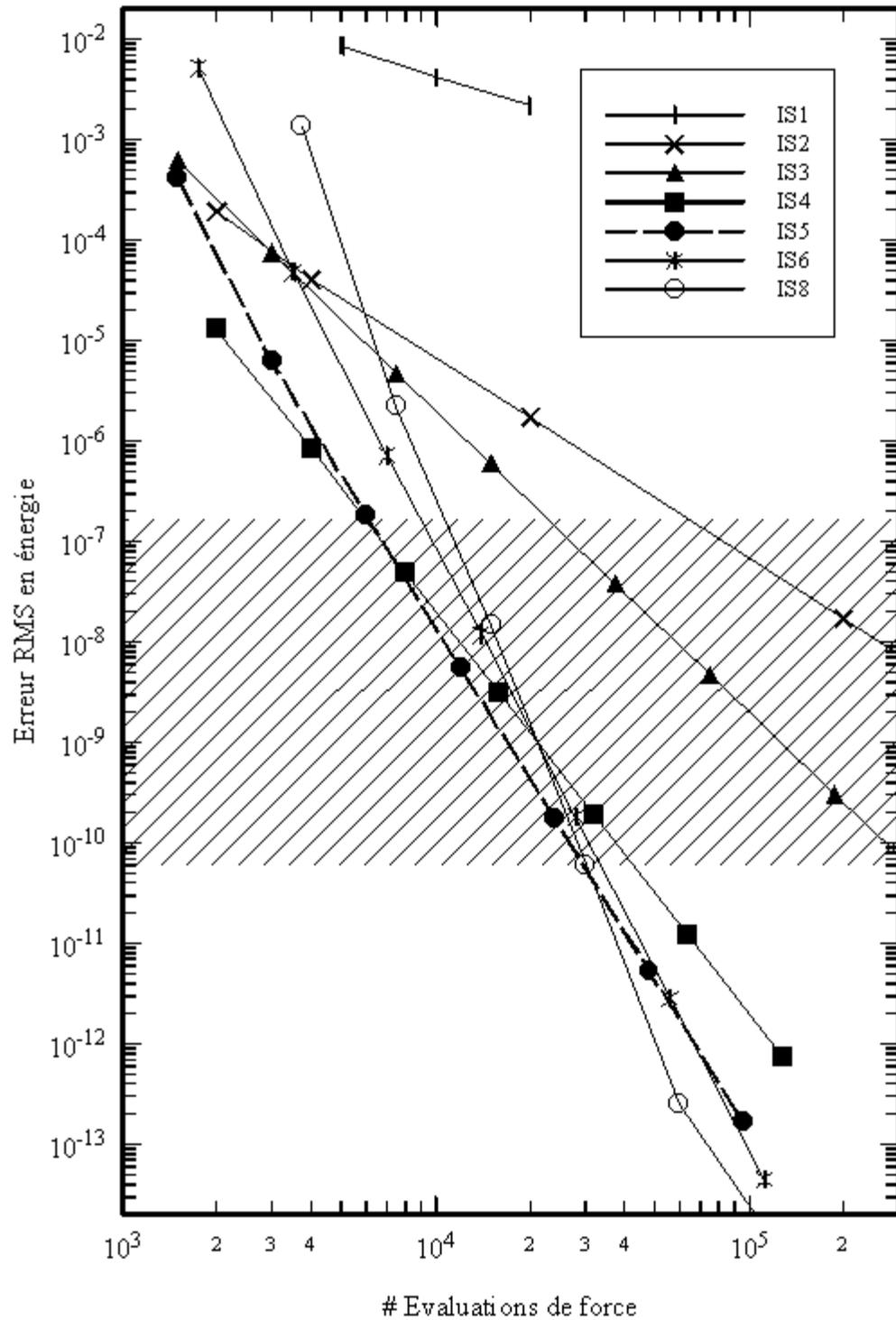


Figure 2.5: Performances des meilleurs intégrateurs symplectiques à pas fixe mesurées en termes d'évaluation de force. On note que le dessus, l'intérieur et le dessous de la région hachurée constituent les intervalles de précision où respectivement les algorithmes IS4, IS5, et IS8 sont les plus performants (cf. fig. 2.4).

de l'étude des systèmes non-linéaires et chaotiques toutefois, l'intégration numérique à de si faibles précisions est généralement inacceptable.

Notons que la même expérience réalisée pour un potentiel autre que le potentiel vallonné amènerait des courbes de performances disposées de façons légèrement différentes, déplaçant ainsi les intervalles de précision où les différents IS sont susceptibles d'être les plus performants. On a vu précédemment que le terme d'erreur est fonction des paramètres a_i et b_i mais aussi du gradient du potentiel. On peut concevoir que IS4, IS5 et IS8, tels que définis ici, ne soient pas les IS les plus efficaces pour certains potentiels très particuliers. Par exemple, IS6 pourrait devenir intéressant dans une certaine tranche de précision.

Nous retenons dans ce chapitre les IS susceptibles d'être les meilleurs à résoudre des systèmes hamiltoniens du type de ceux que l'on a dérivés des potentiels cristallins présentés dans le chapitre 1. Mentionnons par ailleurs, et par souci de simplicité, que l'usage de IS5 à toute précision devrait, en général, donner de très bonnes performances pour un très large éventail de potentiels.

Afin de compléter la description de quelques ISPF, les coefficients des intégrateurs IS2, IS4, IS5 et IS8 sont présentés dans le tableau 2.4. Utilisés de pair avec les algorithmes ISQP et/ou ISPQ présentés dans le tableau 2.1, ils permettent la construction d'IS performants et simples à implanter. On peut même ajouter que IS4, IS5 et IS8 constitueront la base des IS à pas adaptatif que nous allons développer dans la prochaine section.

Notons en passant que dans le cas de IS8, bien que le nombre d'étapes M soit égal à 16, le nombre d'évaluations de force par pas d'intégration est 15, simplement parce que $b_{16} = 0$. Nous avons déjà discuté dans la présente section des performances de IS2 (IS2-OPT). Elles sont supérieures à celles de la méthode "leapfrog" (IS2-CAN), pour laquelle on a pourtant $b_1 = 0$, donc une plutôt que deux évaluations de force par pas d'intégration. De la même manière, il est probable que l'on puisse obtenir un IS d'ordre 8 optimal en relaxant la restriction $b_{16} = 0$. Le degré de liberté supplé-

Méthode	M	s	Coefficients	Notes
IS2	2	2	$a_1 = 1/\sqrt{2} = 1 - a_2$ $b_2 = 1/\sqrt{2} = 1 - b_1$	Méthode optimale de second ordre tirée de McLachlan et Atela [1992]. Utiliser avec ISPQ ou ISQP.
IS4	4	4	$a_1 = 0.515\ 352\ 837\ 431\ 122\ 936\ 4$ $a_2 = -0.085\ 782\ 019\ 412\ 973\ 646$ $a_3 = 0.441\ 583\ 023\ 616\ 466\ 524\ 2$ $a_4 = 0.128\ 846\ 158\ 365\ 384\ 185\ 4$ $b_1 = 0.134\ 496\ 199\ 277\ 431\ 089\ 2$ $b_2 = -0.224\ 819\ 803\ 079\ 420\ 805\ 8$ $b_3 = 0.756\ 320\ 000\ 515\ 668\ 291\ 1$ $b_4 = 0.334\ 003\ 603\ 286\ 321\ 425\ 5$	Méthode optimale de quatrième ordre tirée de McLachlan et Atela [1992]. Utiliser avec ISPQ seulement.
IS5	6	6	$a_1 = 0.339\ 839\ 625\ 839\ 110\ 000$ $a_2 = -0.088\ 601\ 336\ 903\ 027\ 329$ $a_3 = 0.585\ 856\ 476\ 825\ 962\ 118\ 8$ $a_4 = -0.603\ 039\ 356\ 536\ 491\ 888$ $a_5 = 0.323\ 580\ 796\ 554\ 697\ 639\ 4$ $a_6 = 0.442\ 363\ 794\ 219\ 749\ 458\ 7$ $b_1 = 0.119\ 390\ 029\ 287\ 567\ 275\ 8$ $b_2 = 0.698\ 927\ 370\ 382\ 475\ 230\ 8$ $b_3 = -0.171\ 312\ 358\ 271\ 600\ 775\ 4$ $b_4 = 0.401\ 269\ 502\ 251\ 353\ 448\ 0$ $b_5 = 0.010\ 705\ 081\ 848\ 235\ 984\ 0$ $b_6 = -0.058\ 979\ 625\ 498\ 031\ 163\ 2$	Méthode optimale de cinquième ordre tirée de McLachlan et Atela [1992]. Utiliser avec ISPQ seulement.
IS8	16	15	$a_1 = a_{16} = \frac{1}{2} w_7$ $b_1 = b_{15} = w_7$ $a_2 = a_{15} = \frac{1}{2} (w_7 + w_6)$ $b_2 = b_{14} = w_6$ $a_3 = a_{14} = \frac{1}{2} (w_6 + w_5)$ $b_3 = b_{13} = w_5$ $a_4 = a_{13} = \frac{1}{2} (w_5 + w_4)$ $b_4 = b_{12} = w_4$ $a_5 = a_{12} = \frac{1}{2} (w_4 + w_3)$ $b_5 = b_{11} = w_3$ $a_6 = a_{11} = \frac{1}{2} (w_3 + w_2)$ $b_6 = b_{10} = w_2$ $a_7 = a_{10} = \frac{1}{2} (w_2 + w_1)$ $b_7 = b_9 = w_1$ $a_8 = a_9 = \frac{1}{2} (w_1 + w_0)$ $b_8 = w_0, b_{16} = 0$ $w_0 = 1 - 2(w_1 + \dots + w_7)$ $w_1 = 0.102\ 799\ 849\ 391\ 985$ $w_2 = -1.960\ 610\ 232\ 975\ 49$ $w_3 = 1.938\ 139\ 137\ 622\ 76$ $w_4 = -0.158\ 240\ 635\ 368\ 243$ $w_5 = -1.444\ 852\ 236\ 860\ 48$ $w_6 = 0.253\ 693\ 336\ 566\ 229$ $w_7 = 0.914\ 844\ 246\ 229\ 740$	Solution D de la méthode de huitième ordre tirée de Yoshida [1990]. Utiliser avec ISQP seulement.

Tableau 2.4: Les meilleures solutions parmi les coefficients à utiliser avec ISPQ et/ou ISQP (cf. Tab. 2.1).

mentaire ainsi acquis permettrait probablement de minimiser le terme d'erreur, comme l'ont fait McLachlan et Atela [1992] lorsqu'ils ont obtenu leurs IS optimaux. Le système d'équation algébrique régissant $\{M = 16, a_i, b_i\}$ est toutefois passablement complexe avec ses 32 paramètres inconnus. Une solution optimale requiert des méthodes numériques assez sophistiquées dont le développement ne s'inscrit pas dans le cadre de ce que nous désirons présenter ici. Emettons toutefois l'hypothèse qu'un IS d'ordre 8 optimal existe et qu'il est plus performant que IS8.

Les IS à pas fixe qui ont été discutés jusqu'à maintenant ne permettent évidemment pas de faire varier le pas d'intégration comme cela pourrait être désirable dans certaines situations. Par exemple, il est clair que dans le cas du potentiel escarpé de la figure 2.2, le pas d'intégration devrait être plus petit dans les pointes que dans la région centrale, en vue de garantir la précision. Inversement, il devrait être plus grand dans la région centrale que dans les pointes, en vue de diminuer le nombre de pas et améliorer les performances.

Calvo et Sanz-Serna [1993] ont déjà tenté de construire un intégrateur à la fois symplectique et adaptif. De façon assez standard, leur méthode repose sur l'évaluation d'une erreur locale. Elle est estimée à partir de la comparaison entre deux versions d'un même pas d'intégration obtenues au moyen de deux IS d'ordre différent, l'IS d'ordre supérieur étant présumé fournir une solution "plus exacte". Cette erreur étant connue, il suffit alors de faire varier le pas en fonction d'une tolérance prescrite. Par exemple, on peut imposer la restriction suivante : chaque pas d'intégration doit être tel que l'erreur (relative) locale soit inférieure à 10^{-8} . La méthode promettait d'être assez efficace, surtout qu'il fut possible pour Calvo et Sanz-Serna d'obtenir deux IS d'ordre différent utilisant les mêmes évaluations de force pour accomplir un pas. Ils appliquèrent donc leur nouvel intégrateur au problème à deux corps. Leurs résultats furent décevants. L'intégrateur, alors à pas variable, avait perdu une propriété fondamentale aux IS : la stabilité de l'erreur sur l'énergie.

A la manière de l'intégrateur RK4, l'IS à pas variable de Calvo et Sanz-Serna amène

une dissipation rapide de l'énergie (cf. fig. 2.1). Il n'y a donc que peu ou pas d'intérêt à utiliser leur IS plutôt que n'importe quelle autre méthode adaptative non-symplectique.

Skeel et Biesiadecki [1994] introduisent quant à eux une méthode qui décompose une interaction en deux parties, soit une à courte et l'autre à longue portée. La partie interaction-douce-à-longue-portée requiert moins de pas d'intégration que la partie à courte portée et dans certains cas (e.g. problème de Kepler) cette méthode peut être plus efficace que l'intégration symplectique à pas fixe. Dans notre cas toutefois, il est peut probable qu'il soit avantageux de décomposer nos potentiels cristallins en sommes de deux potentiels. De plus cette méthode ne constitue pas vraiment un intégrateur à pas variable (adaptif) et n'en donne pas les avantages.

Un intégrateur à pas variable (adaptif mais non symplectique) a été développé par Stoffer [1995]. La méthode repose sur l'évaluation d'une erreur locale qui dépend de l'énergie. Les résultats sont, d'après l'auteur, meilleurs que ceux obtenus par Calvo et Sanz-Serna [1993] mais il persiste encore une forte dérive en énergie.

Nous discuterons plus en détails à la fin du chapitre de certaines réserves faites par quelques auteurs à l'égard des IS utilisés dans un contexte de mécanisme à pas variable. Voyons maintenant comment, par une approche différente, *nous avons réussi à développer des intégrateurs qui soient à la fois symplectiques, adaptatifs, stables et aussi conservatifs que désiré.*

2.3 Intégrateurs symplectiques à pas variable

L'objectif des algorithmes présentés dans cette section est de remplacer l'intégrateur symplectique à pas fixe (ISPF)

$$\psi_h \circ \dots \circ \psi_h \circ \psi_h \circ \psi_h(\mathbf{q}(t_0), \mathbf{p}(t_0))$$

de la section précédente par des intégrateurs symplectiques à pas variable (ISPV)

$$\psi_{h_N} \circ \dots \circ \psi_{h_3} \circ \psi_{h_2} \circ \psi_{h_1}(\mathbf{q}(t_0), \mathbf{p}(t_0)).$$

La séquence $\{h_1, h_2, h_3, \dots\}$ devrait être telle que chaque pas d'intégration respecte un certain critère de tolérance. Nous nous proposons de construire un tel algorithme au moyen des IS introduits précédemment, chaque pas d'intégration ψ_{h_i} étant accompli par IS4, IS5 ou IS8. En fait, chaque pas d'intégration pourrait être accompli par n'importe quel IS.

Les divers éléments menant au développement de nos ISPV sont d'abord élaborés après quoi un résumé présente les algorithmes de façon plus concise.

2.3.1 Relation d'échelle pour l'erreur relative en énergie

Lorsqu'on considère le développement en t de l'erreur sur l'énergie pour un IS d'ordre m , on constate que l'erreur relative en énergie $e(t)$ introduite en (2.1) peut être reliée au pas d'intégration h par

$$e(t; h) \sim f(t)h^m. \quad (2.8)$$

On peut considérer h^m comme un facteur d'échelle et la fonction $f(t)$ comme une erreur normalisée qui reflète le comportement de $e(t; h)$ mais qui ne dépend pas du pas d'intégration h .

Cette relation d'échelle est illustrée sur la figure 2.6 où on trace $e_i \equiv e(t_i)$ et $f_i \equiv f(t_i)$ avec $t_i = t_{i-1} + h$ pour une trajectoire non-chaotique évoluant dans le potentiel vallonné et obtenue par IS4. Comme l'IS est d'ordre 4, l'erreur est 16 fois plus petite pour $h = 0.01$ que pour $h = 0.02$. L'erreur normalisée f reflète bien le comportement de l'erreur relative e mais ne dépend pas de h . Cette observation est au coeur du développement des ISPV que l'on va concevoir.

2.3.2 Critère de tolérance

L'idée derrière l'intégration adaptative est de faire varier h de telle sorte que chaque pas d'intégration amène une erreur qui respecte un certain critère de tolérance. On utilise

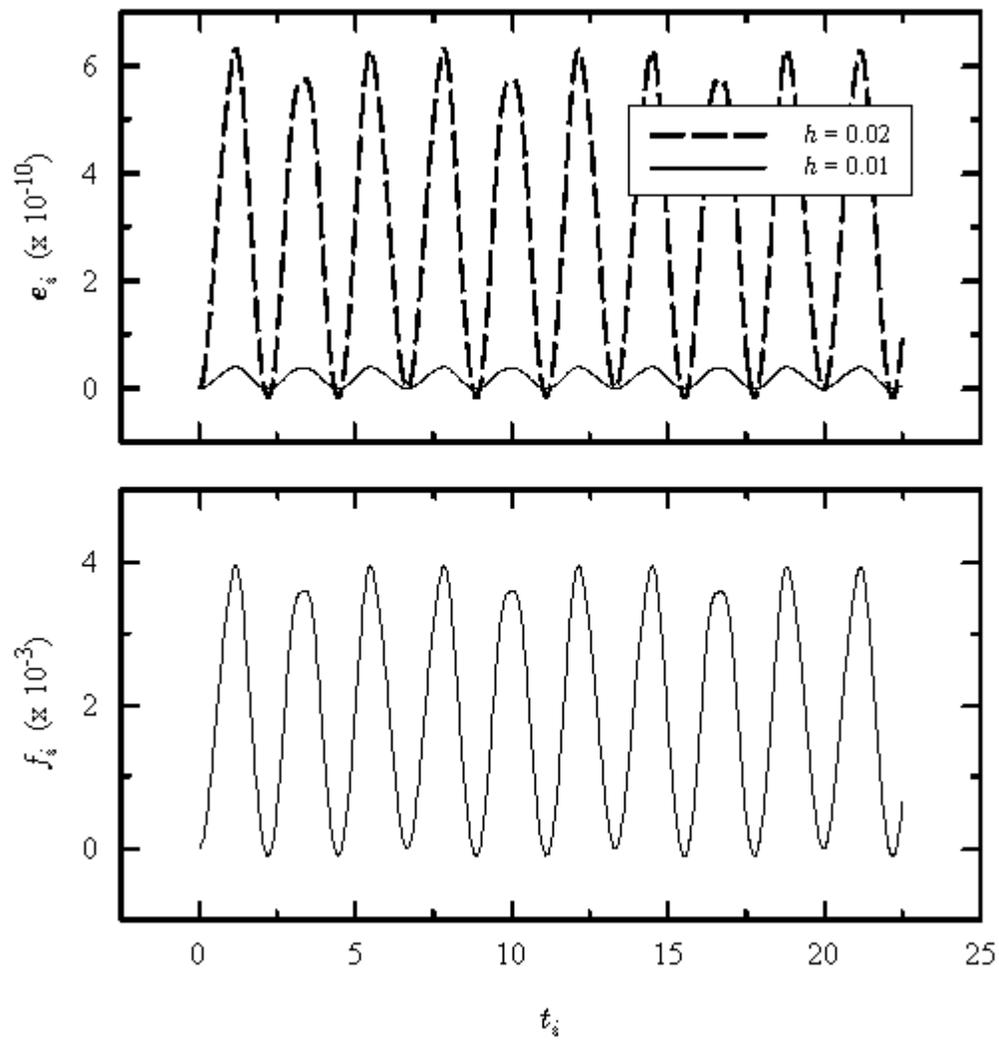


Figure 2.6: Relation d'échelle entre l'erreur sur l'énergie et le pas d'intégration. La séquence f_i correspond à une version "normalisée" de la séquence e_i et ne dépend pas du pas d'intégration h .

désormais la notation

$$\begin{aligned}\Delta e_n &\equiv e_n - e_{n-1} \equiv e(t_n) - e(t_{n-1}), \\ \Delta f_n &\equiv f_n - f_{n-1} \equiv f(t_n) - f(t_{n-1}), \\ h_n &\equiv t_n - t_{n-1}.\end{aligned}$$

Supposons que dans le processus d'intégration d'une trajectoire on se trouve au temps $t = t_i$. On choisit d'accepter le pas d'intégration h_i nous ayant mené de t_{i-1} à t_i à la condition que

$$|\Delta e_i| \leq \epsilon \quad (2.9)$$

où ϵ est une petite quantité positive correspondant à la magnitude de l'erreur que l'on tolère à chaque pas d'intégration.

De plus, il semble naturel de faire en sorte que le prochain pas d'intégration h_{i+1} nous menant de t_i à t_{i+1} soit déterminé de façon telle que

$$|\Delta e_{i+1}| \sim \epsilon. \quad (2.10)$$

Voici comment on peut y parvenir.

2.3.3 Estimation du prochain pas

Si on dérive (2.8) par rapport au temps on obtient

$$e'(t; h) \sim f'(t)h^m. \quad (2.11)$$

Cette relation est tout ce dont nous avons besoin pour construire des ISPV performants. Considérons la discrétisation de (2.11). Pour le pas ψ_{h_n} on peut écrire

$$\frac{\Delta e_n}{h_n} \sim \frac{\Delta f_n}{h_n} h_n^m. \quad (2.12)$$

La figure 2.7 montre schématiquement l'évolution de l'erreur normalisée $f(t)$ dans le voisinage de t_i . Rappelons que l'erreur normalisée décrit l'évolution de l'erreur relative

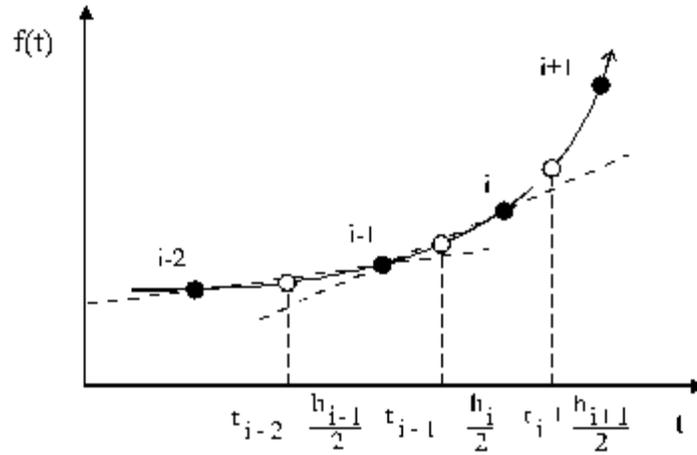


Figure 2.7: Evolution de l'erreur normalisée f en fonction du temps. La dérivée de cette fonction sert à aiguiller efficacement la séquence adaptative des pas d'intégration.

en énergie, modulo le facteur d'échelle associé au pas d'intégration. La figure 2.8 illustre cette propriété. On y trace les séquences e_i et f_i^* où $f_i^* = f_{i-1}^* + \Delta f_i$ avec $f_0^* \equiv 0$ et Δf_i donné par (2.12). On remarque qu'à l'intérieur de l'intervalle $15 < t < 30$, le pas d'intégration est divisé par deux. Comme l'IS est d'ordre 4, l'erreur y oscille avec une amplitude 16 fois plus petite.

Si suffisamment d'information est conservée, *i.e.* que la séquence (même partielle)

$$\{(\Delta e_i, h_i), (\Delta e_{i-1}, h_{i-1}), \dots\}$$

est connue, et que l'on tire profit de la relation (2.12), il est tout à fait possible d'écrire $f'_{t_i}(t)$, une approximation satisfaisante pour $f'(t)$ dans le voisinage de t_i .

Juste avant de voir deux façons de l'obtenir, supposons qu'une telle approximation soit disponible. Il suffit alors d'extrapoler $f'_{t_i}(t)$ en $t = t_i + h_{i+1}/2$ pour écrire

$$\left[\frac{\Delta f_{i+1}}{h_{i+1}} \right] \sim f'_{t_i} \left(t_i + \frac{h_{i+1}}{2} \right) \quad (2.13)$$

où les crochets nous indiquent que l'entité $\Delta f_{i+1}/h_{i+1}$ est connue (obtenue de l'extrapolation), et avec (2.12) on a finalement

$$\Delta e_{i+1} \sim \left[\frac{\Delta f_{i+1}}{h_{i+1}} \right] h_{i+1}^{m+1} \quad (2.14)$$

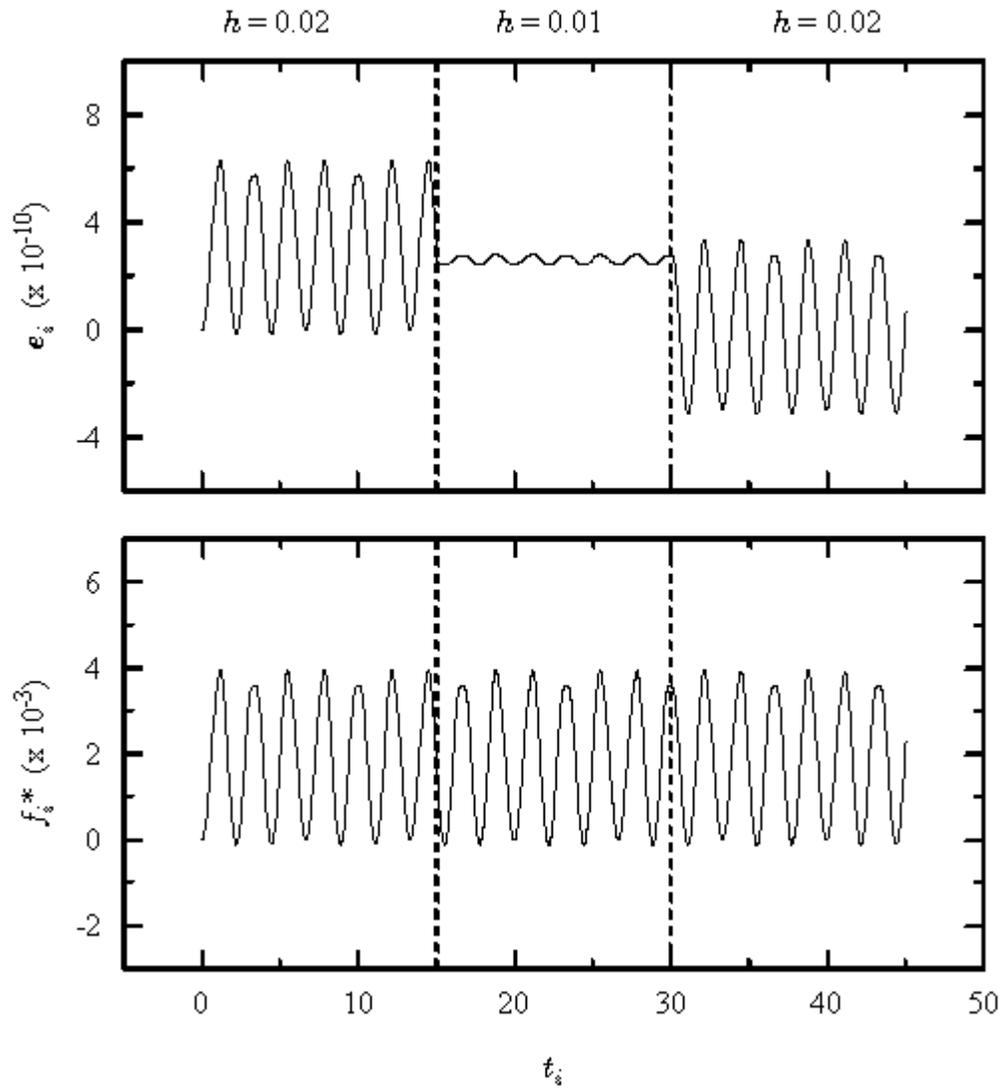


Figure 2.8: Fonction d'erreur normalisée et pas variable. La séquence f_i^* correspond à une version “normalisée” de la séquence e_i et ne dépend pas du pas d'intégration variable h_i (voir fig. 2.6).

reliant Δe_{i+1} et h_{i+1} de façon explicite. Il ne reste alors qu'à inverser (2.14) et résoudre le prochain pas d'intégration h_{i+1} tel que (2.10) soit vérifié et on obtient l'estimé recherché

$$h_{i+1} \sim \left| \frac{\epsilon}{[\Delta f_{i+1}/h_{i+1}]} \right|^{\frac{1}{m+1}}. \quad (2.15)$$

Considérant la relation (2.15) comme un estimé, on s'attend bien à ce que le pas d'intégration qu'elle suggère soit, ou un peu trop petit, ou un peu trop grand. Si il est trop petit il n'y a pas de conséquence. Si il est trop grand, le critère de tolérance

$$|\Delta e_{i+1}| \leq \epsilon$$

n'est pas vérifié. Le pas devrait alors être refusé et recommencé avec un pas d'intégration corrigé. Tout ceci est plutôt coûteux et devrait être évité autant que possible.

On suggère donc d'utiliser

$$h_{i+1} \equiv S \times \left| \frac{\epsilon}{[\Delta f_{i+1}/h_{i+1}]} \right|^{\frac{1}{m+1}} \quad (2.16)$$

où S est un paramètre de sécurité dont la valeur est comprise entre 0 et 1. Bien sûr il faut chercher à optimiser S pour que le nombre de pas nécessaires à l'intégration d'une trajectoire sur un intervalle de temps soit minimal. Si S est très grand, *i.e.* très près de 1, il sera fréquent qu'un pas d'intégration soit refusé et recommencé, peut-être même plusieurs fois. A l'opposé, si S est très petit, il est possible que tous les pas soient acceptés, mais beaucoup de pas seront nécessaires afin de parcourir l'intervalle de temps sur lequel on doit intégrer. La valeur optimale de S dépend de la qualité de l'estimé, mais peut être obtenue de manière empirique comme on le verra un peu plus loin. Typiquement, *e.g.* pour les ISPV que l'on va bientôt définir, elle se situe entre 0.80 et 0.95.

2.3.4 Estimation à extrapolation d'ordre zéro

Dans le cas où le minimum d'information est conservé à chaque pas d'intégration, seuls Δe_i et h_i sont disponibles. La relation (2.12) permet toutefois d'exprimer $\Delta f_i/h_i$ et

$$f'_{t_i}(t_{i-1} + \frac{h_i}{2}) \sim \frac{\Delta f_i}{h_i} \quad (2.17)$$

constitue toute l'information dont on dispose pour écrire $f'_{t_i}(t)$. L'approximation de $f'(t)$ dans le voisinage de t_i prend alors la forme triviale

$$f'_{t_i}(t) \equiv a$$

et (2.17) permet de solutionner pour a et d'obtenir

$$f'_{t_i}(t) \equiv \frac{\Delta f_i}{h_i}.$$

L'approximation (2.13) devient alors

$$\left[\frac{\Delta f_{i+1}}{h_{i+1}} \right] \sim f'_{t_i} \left(t_i + \frac{h_{i+1}}{2} \right) \sim \frac{\Delta f_i}{h_i} \quad (2.18)$$

et (2.16) s'écrit maintenant

$$h_{i+1} \equiv S_0 \times \left| \frac{\epsilon}{[\Delta f_i/h_i]} \right|^{\frac{1}{m+1}}$$

où S_0 est le paramètre de sécurité pour l'estimé d'ordre 0. Si on utilise (2.12), on obtient l'expression dépendant de Δe_i et h_i

$$h_{i+1} \equiv S_0 \times h_i \left| \frac{\epsilon}{\Delta e_i} \right|^{\frac{1}{m+1}}. \quad (2.19)$$

2.3.5 Estimation à extrapolation d'ordre un

De façon tout à fait similaire mais si on dispose cette fois d'information supplémentaire, *i.e.* que la séquence $\{(\Delta e_i, h_i), (\Delta e_{i-1}, h_{i-1})\}$ est connue, on peut ajouter à (2.17) que

$$f'_{t_i}(t_{i-2} + \frac{h_{i-1}}{2}) \sim \frac{\Delta f_{i-1}}{h_{i-1}}$$

et résoudre

$$f'_{t_i}(t) \equiv at + b$$

pour obtenir, après quelques manipulations,

$$\left[\frac{\Delta f_{i+1}}{h_{i+1}} \right] \sim f'(t_i + \frac{h_{i+1}}{2}) \sim \frac{\Delta f_i}{h_i} + \left[\frac{\Delta f_i}{h_i} - \frac{\Delta f_{i-1}}{h_{i-1}} \right] \frac{h_{i+1} + h_i}{h_i + h_{i-1}}.$$

L'estimé (2.16) devient alors

$$h_{i+1} \equiv S_1 \times \left[\epsilon \times \left| \frac{\Delta f_i}{h_i} + \left[\frac{\Delta f_i}{h_i} - \frac{\Delta f_{i-1}}{h_{i-1}} \right] \frac{h_{i+1} + h_i}{h_i + h_{i-1}} \right|^{-1} \right]^{\frac{1}{m+1}} \quad (2.20)$$

où S_1 est le paramètre de sécurité pour l'estimé d'ordre 1.

Notons la présence de h_{i+1} du côté droit de la relation (2.20). Plutôt que de solutionner de façon implicite on choisit d'utiliser l'approximation

$$\frac{h_{i+1} + h_i}{h_i + h_{i-1}} \sim \frac{2h_i}{h_i + h_{i-1}}.$$

Ce qui permet d'obtenir la relation explicite

$$h_{i+1} \equiv S_1 \times \left[\epsilon \times \left| \frac{\Delta f_i}{h_i} + \left[\frac{\Delta f_i}{h_i} - \frac{\Delta f_{i-1}}{h_{i-1}} \right] \frac{2h_i}{h_i + h_{i-1}} \right|^{-1} \right]^{\frac{1}{m+1}}$$

ou encore, si on utilise (2.12), l'expression dépendant de $\{(\Delta e_i, h_i), (\Delta e_{i-1}, h_{i-1})\}$

$$h_{i+1} \equiv S_1 \times \left[\epsilon \times \left| \frac{\Delta e_i}{h_i^{m+1}} + \left[\frac{\Delta e_i}{h_i^{m+1}} - \frac{\Delta e_{i-1}}{h_{i-1}^{m+1}} \right] \frac{2h_i}{h_i + h_{i-1}} \right|^{-1} \right]^{\frac{1}{m+1}}. \quad (2.21)$$

2.3.6 Intégration symplectique à pas variable : version initiale

Nous disposons maintenant de tous les outils nous permettant de construire des ISPV.

Un mécanisme adaptatif simple consiste à :

1. accomplir un pas d'intégration au moyen d'un IS;
2. mesurer l'erreur locale encourue;
3. vérifier que le critère de tolérance sur l'erreur locale soit respecté;
 - s'il est respecté : accepter le pas et estimer l'amplitude du pas suivant, passer au pas suivant à partir de l'étape 1.
 - s'il n'est pas respecté : refuser le pas et corriger l'amplitude du pas courant, recommencer le pas courant à partir de l'étape 1.

Les algorithmes IS2, IS4, IS5 et IS8 de la section 2.2, de même que tout IS trouvé en littérature, permettent d'accomplir le pas d'intégration symplectique de l'étape 1 en définissant l'application

$$\psi_{h_i}(\mathbf{q}, \mathbf{p}) : (\mathbf{q}(t_{i-1}), \mathbf{p}(t_{i-1}))^T \mapsto (\mathbf{q}(t_i), \mathbf{p}(t_i))^T$$

où $t_i = t_{i-1} + h_i$.

L'hamiltonien $H(\mathbf{q}, \mathbf{p})$ du système intégré évalué en $t = t_i$ et la relation (2.1) donnant l'erreur relative en énergie permettent d'obtenir une mesure de l'erreur locale encourue par ψ_{h_i} avec

$$\Delta e_i \equiv e_i - e_{i-1} \equiv e(t_i) - e(t_{i-1}), \quad e_0 = 0.$$

Cette erreur locale est immédiatement soumise au critère de tolérance (2.9). En conséquence de quoi, si le pas est accepté, l'estimé à extrapolation d'ordre 0 (2.19) ou à extrapolation d'ordre 1 (2.21) est utilisé pour déterminer le prochain pas d'intégration. Si le pas n'est pas accepté, on suggère d'utiliser

$$h_i^* \equiv S_C \times h_i \left| \frac{\epsilon}{\Delta e_i} \right|^{\frac{1}{m+1}} \quad (2.22)$$

où h_i^* est le pas corrigé utilisé pour recommencer l'opération à partir de l'étape 1 et S_C est le paramètre de sécurité associé à la correction. Notons que S_C peut être plus près de 1 que S_0 ou S_1 dans la mesure où (2.22) est déjà une correction à l'estimé apporté par (2.19) ou (2.21). Les extrapolations faites pour en arriver aux estimés (2.19) et (2.21) sont remplacées par une interpolation, plus sécuritaire, dans le cas du correctif (2.22) (cf fig. 2.7). Nous donnerons bientôt quelques précisions sur les valeurs empiriques données à S_0 , S_1 et S_C lorsque nous aurons présenté la version finale de nos ISPV. En effet, il est nécessaire d'apporter quelques modifications à ce mécanisme adaptatif car il mène à des résultats aussi décevants que ceux obtenus par Calvo et Sanz-Serna [1993] dont on a déjà parlé à la fin de la section 2.2.

Notre méthode et la leur, toutes deux basées sur l'évaluation d'une erreur locale pour faire varier le pas d'intégration, brisent cette remarquable propriété qui est propre aux

intégrateurs symplectiques à pas fixe : la stabilité de l'erreur en énergie. C'est d'ailleurs suite aux travaux de Calvo et Sanz-Serna que certains auteurs (Skeel et Gear [1992], Gear [1992]) en sont arrivés à suggérer que *les intégrateurs symplectiques construits pour être utilisés dans un contexte de mécanisme à pas fixe, ne soient pas utilisés dans un contexte de mécanisme à pas variables.*

Contrairement à Calvo et Sanz-Serna toutefois, notre mesure de l'erreur locale est faite à partir d'une erreur globale, l'erreur relative en énergie définie en (2.1). Voyons donc maintenant comment il nous est possible de tirer profit de ce fait pour intégrer de façon adaptative tout en conservant la stabilité de l'erreur en énergie.

2.3.7 Stabilisation de l'erreur en énergie

Considérons l'évolution de l'erreur en énergie pour une trajectoire calculée à l'aide d'un intégrateur symplectique à pas fixe, comme pour le cas IS4 de la figure 2.1. On peut y remarquer, en particulier dans l'agrandissement, la grande symétrie des oscillations de l'erreur en énergie. Cette remarquable propriété de stabilité à court terme est au coeur même de l'excellente stabilité à long terme des IS. Elle suggère aussi une façon simple de stabiliser l'évolution de l'erreur en énergie.

Il suffit de pénaliser, en diminuant le pas d'intégration, l'évolution de l'erreur qui va vers une amplitude croissante. Inversement, on favorise, en augmentant le pas d'intégration, l'évolution de l'erreur qui va vers une amplitude décroissante. Le haut de la figure 2.9 montre l'évolution de l'erreur relative e_i (en unité de ϵ) en fonction du temps t_i pour une trajectoire obtenue avec IS4 et $h_i = h = 0.01$. Lorsque l'amplitude de l'erreur est croissante, on a $e_i \Delta e_i \geq 0$. Lorsqu'elle est décroissante on a $e_i \Delta e_i < 0$.

Le mécanisme adaptatif que nous avons élaboré à la sous-section précédente est basé sur le critère de tolérance. On choisit donc d'exercer cette contrainte variable sur le pas d'intégration, au moyen du critère de tolérance qui sera désormais plus ou moins sévère, au gré de l'évolution de l'erreur en énergie. Pour ce faire, nous proposons de

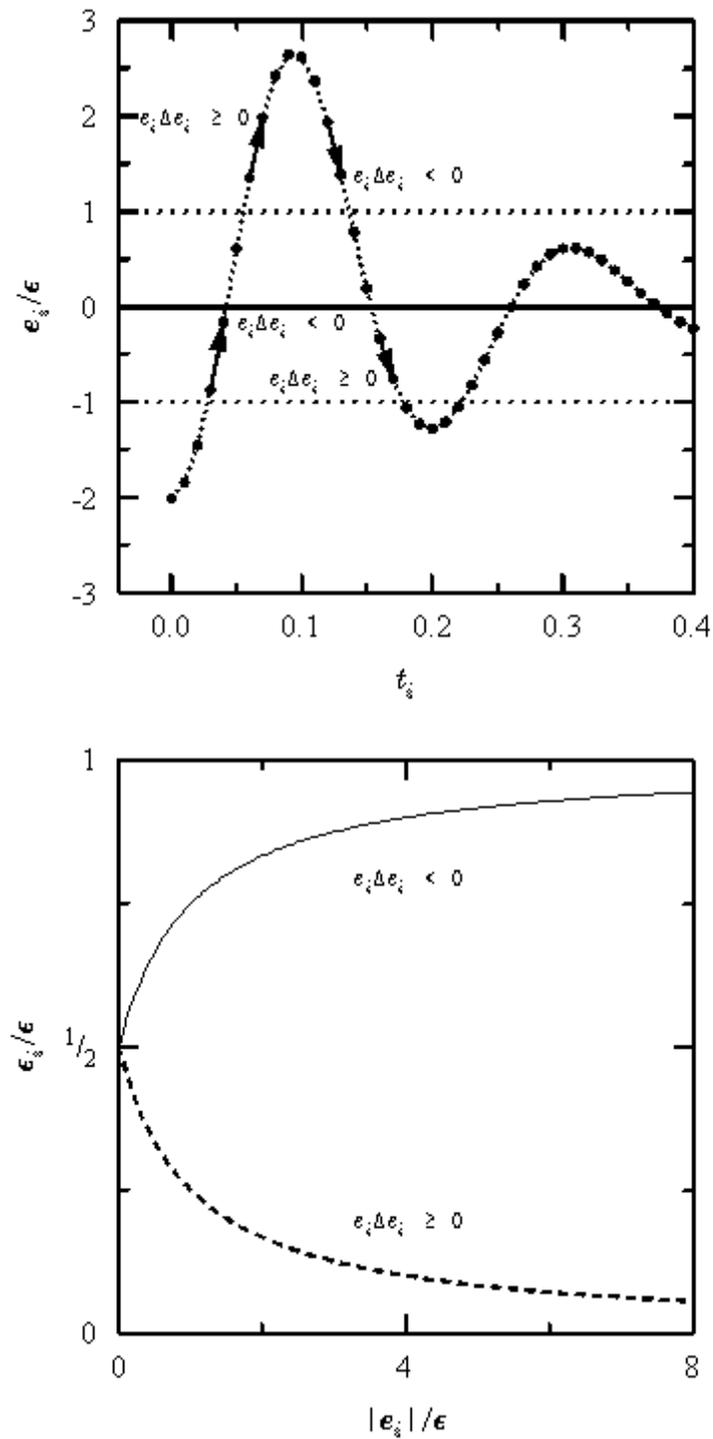


Figure 2.9: Mécanisme de stabilisation par favoritisme ou défavoritisme. Lorsque l'erreur croît en amplitude, on a $e_i \Delta e_i > 0$. Le critère de tolérance devient alors plus sévère et le facteur de tolérance ϵ_i diminue pour tendre vers 0. Inversement, lorsque l'erreur décroît en amplitude, on a $e_i \Delta e_i < 0$. Le critère de tolérance devient alors moins sévère et le facteur de tolérance ϵ_i augmente pour tendre vers ϵ .

remplacer le facteur de tolérance (constant) ϵ par le facteur de tolérance (variable) ϵ_i défini par

$$\epsilon_i = \begin{cases} \epsilon \times \left[1 - \frac{1}{2(|e_i|/\epsilon + 1)} \right] & \text{si } e_i \Delta e_i < 0 \\ \epsilon \times \frac{1}{2(|e_i|/\epsilon + 1)} & \text{si } e_i \Delta e_i \geq 0 \end{cases} . \quad (2.23)$$

Le bas de la figure 2.9 montre la dépendance en $|e_i|/\epsilon$ correspondant à chacun des 2 cas. Le facteur de tolérance ϵ_i tend vers ϵ lorsque le pas doit être favorisé ($e_i \Delta e_i < 0$) et vers zéro lorsqu'il doit être défavorisé ($e_i \Delta e_i > 0$). Bien sûr, un facteur de tolérance qui tend vers zéro entraîne un pas d'intégration tendant aussi vers zéro. En pratique, on impose donc une valeur minimale au pas d'intégration, au cas où la situation l'exige. Par exemple, pour un intégrateur d'ordre 4, un pas d'intégration $h = 0.001$ amène une erreur globale de l'ordre de $1e-12$. La valeur $h_{\min} = 1e-6$ constitue un bon choix dans la plupart des cas.

2.3.8 Intégration symplectique à pas variable : version finale

Afin d'obtenir la version finale de nos ISPV, on introduit le mécanisme de stabilisation que l'on vient de développer. Les étapes permettant d'accomplir un pas d'intégration adaptatif sont maintenant :

1. accomplir un pas d'intégration au moyen d'un IS;
2. mesurer l'erreur locale encourue;
3. déterminer le facteur de tolérance stabilisateur;
4. vérifier que le critère de tolérance sur l'erreur locale soit respecté;
 - s'il est respecté : accepter le pas et estimer l'amplitude du pas suivant, passer au pas suivant à partir de l'étape 1.
 - s'il n'est pas respecté : refuser le pas et corriger l'amplitude du pas courant, recommencer le pas courant à partir de l'étape 1.

Le facteur de tolérance étant désormais donné par l'expression (2.23), le critère de tolérance (2.9), les estimés à extrapolation d'ordre 0 et 1 (2.19) et (2.21), de même que le correctif à interpolation d'ordre 0 (2.22) deviennent respectivement

$$|\Delta e_i| \leq \epsilon_i, \quad (2.24)$$

$$h_{i+1} \equiv S_0 \times h_i \left| \frac{\epsilon_i}{\Delta e_i} \right|^{\frac{1}{m+1}}, \quad (2.25)$$

$$h_{i+1} \equiv S_1 \times \left[\epsilon_i \times \left| \frac{\Delta e_i}{h_i^{m+1}} + \left[\frac{\Delta e_i}{h_i^{m+1}} - \frac{\Delta e_{i-1}}{h_{i-1}^{m+1}} \right] \frac{2h_i}{h_i + h_{i-1}} \right|^{-1} \right]^{\frac{1}{m+1}}, \quad (2.26)$$

$$h_i^* \equiv S_C \times h_i \left| \frac{\epsilon_i}{\Delta e_i} \right|^{\frac{1}{m+1}}. \quad (2.27)$$

Les figures 2.10 et 2.11 présentent la réalisation en langage C des intégrateurs symplectiques à pas variable pour lesquels le prochain pas est estimé par extrapolation d'ordre 0 et 1 respectivement. Ces ISPV sont désormais dénotés ISPV0- m et ISPV1- m où m est l'ordre de l'IS utilisé pour accomplir le pas de base, l'un des intégrateurs symplectiques à pas fixe IS m étudiés à la section 2.2 et qui sont rebaptisés ISPF- m par souci de cohérence.

La structure des algorithmes est pratiquement identique pour ISPV0- m et ISPV1- m . Seules l'information à conserver pour le prochain pas et la façon d'estimer son amplitude sont différentes. L'objectif de chacune des fonctions² `PasISVar0()` et `PasISVar1()` est d'accomplir un pas d'intégration symplectique adaptatif pour transformer le vecteur $\mathbf{v1} \mapsto \mathbf{v2}$, *i.e.* $[\mathbf{q}(t_{i-1}), \mathbf{p}(t_{i-1})]^T \mapsto [\mathbf{q}(t_i), \mathbf{p}(t_i)]^T$ et le temps $\mathbf{t1} \mapsto \mathbf{t2}$, *i.e.* $t_i = t_{i-1} + h_i$. Les fonctions retournent la valeur 1 si le pas est accompli avec succès et la variable globale `h` contient la valeur de l'amplitude du prochain pas d'intégration, *i.e.* h_{i+1} . Si le pas n'est pas accompli avec succès, les fonctions retournent la valeur 0.

Les fonctions `ISm()`, `H()` et `ErreurRelative()` (lignes 6 et 7 chez `PasISVar0()` et `PasISVar1()`) sont supposées définies et calculent respectivement : le pas d'intégration

²En langage C, les routines ou procédures sont nommées "fonction" parce qu'elles retournent habituellement une valeur et acceptent un ou plusieurs paramètres (arguments). Il y a des fonctions qui ne retournent aucune valeur et/ou ne requièrent aucun paramètre.

```

1 double PasISVar0 (double v1[], double t1, double v2[], double *t2)
  /* Accomplit un pas d'intégration adaptif à extrapolation d'ordre 0. */
  {
2   unsigned long nsteps;
3   double err, del_err, tol_cible, facteur;

4   nsteps = 0;
5   while ( nsteps++ < nstepsmax ) {
      /* Pas d'int. symplectique d'ordre m; mesure de l'erreur locale */
6   ISm (v1, t1, h, v2, t2);
7   err = ErreurRelative (H (v2), H0);
8   del_err = err - err_precedent;

      /* On détermine le facteur de tolérance (variable) */
9   if ( err*del_err < 0.0 )
10      tol_cible = tol * (1.0 - 0.5 / (1.0 + fabs (err)));
11   else
12      tol_cible = tol * 0.5 / (1.0 + fabs (err));

      /* Critère de tolérance respecté ? */
13   if ( fabs (del_err) < tol_cible ) {
      /* Oui; on accepte le pas; que devrait être le prochain ? */
14   if ( fabs (del_err) > 0.0 ) {
15      facteur = S0 * pow (tol_cible / fabs (del_err), 1.0/(m + 1));
16      if ( facteur > 2.0 )
17          facteur = 2.0;
18      h = h * facteur;
      }
      /* On conserve l'information pour le prochain pas */
19   err_precedent = err;
20   return (1); /* Le pas est accompli correctement ! */
      }
21   else {
      /* Non; on refuse le pas; on le corrige pour un autre essai */
22   facteur = SC * pow (tol_cible / fabs (del_err), 1.0/(m + 1));
23   if ( facteur < 0.5 )
24      facteur = 0.5;
25   h = h * facteur;
      }
  } /* while */

26   printf ("ERREUR : Nombre maximal de pas atteint dans 'PasISVar0'.\n");
28   return (0); /* Le pas n'est pas accompli correctement ! */

  } /* PasISVar0 */

```

Figure 2.10: Réalisation en langage C de l'intégrateur symplectique à pas variable d'ordre 0 par la fonction `PasISVar0()`.

```

1 double PasISVar1 (double v1[], double t1, double v2[], double *t2)
  /* Accomplit un pas d'intégration adaptif à extrapolation d'ordre 1. */
  {
2   unsigned long nsteps;
3   double err, del_err, tol_cible, del_err_norm, abs_denom, h_tmp, facteur;

4   nsteps = 0;
5   while ( nsteps++ < nstepsmax ) {
      /* Pas d'int. symplectique d'ordre m; mesure de l'erreur locale */
6   ISm (v1, t1, h, v2, t2);
7   err = ErreurRelative (H (v2), H0);
8   del_err = err - err_precedent;

      /* On détermine le facteur de tolérance (variable) */
9   if ( err*del_err < 0.0 )
10    tol_cible = tol * (1.0 - 0.5 / (1.0 + fabs (err)));
11   else
12    tol_cible = tol * 0.5 / (1.0 + fabs (err));

      /* Critère de tolérance respecté ? */
13   if ( fabs (del_err) < tol_cible ) {
      /* Oui; on accepte le pas; que devrait être le prochain ? */
14   del_err_norm = del_err / pow (h, m + 1);
15   abs_denom = fabs ( del_err_norm +
16                    (del_err_norm - del_err_norm_precedent) *
17                    2.0*h / (h + h_precedent) );
18   if ( abs_denom > 0.0 ) {
19     h_tmp = S1 * pow (tol_cible / abs_denom, 1.0/(m + 1));
20     if ( (h_tmp / h) > 2.0 )
21       h_tmp = h * 2.0;
      }
22   else
23     h_tmp = h;
      /* On conserve l'information pour le prochain pas */
24   err_precedent = err; del_err_norm_precedent = del_err_norm;
25   h_precedent = h; h = h_tmp;
26   return (1); /* Le pas est accompli correctement ! */
      }
27   else {
      /* Non; on refuse le pas; on le corrige pour un autre essai */
28   facteur = SC * pow (tol_cible / fabs (del_err), 1.0/(m + 1));
29   if ( facteur < 0.5 )
30     facteur = 0.5;
31   h = h * facteur;
      }
    } /* while */

32   printf ("ERREUR : Nombre maximal de pas atteint dans 'PasISVar1'.\n");
33   return (0); /* Le pas n'est pas accompli correctement ! */

  } /* PasISVar1 */

```

Figure 2.11: Réalisation en langage C de l'intégrateur symplectique à pas variable d'ordre 1 par la fonction PasISVar1().

de base ψ_{h_i} accompli par un des ISm , l'hamiltonien du système intégré $H_i \equiv H(\mathbf{q}(t_i), \mathbf{p}(t_i))$ et l'erreur relative $e(H_i, H_0)$. Les autres fonctions utilisées font partie de la librairie standard du langage C. On a `fabs (x) ⇒ |x|` et `pow (x, y) ⇒ xy`.

Les fonctions `PasISVar0()` et `PasISVar1()` essaient de corriger le pas d'intégration un certain nombre de fois avant de conclure à l'échec, d'où la boucle formée du `while` à la ligne 5 de chaque fonction. Une "trappe" empêche l'éventuelle division par zéro dans le cas `del_err = 0` pour `PasISVar0()` (voir ligne 14). En effet, si $\Delta e_i = 0$ on peut supposer qu'il est sage de ne pas changer le pas d'intégration, *i.e.* $h_{i+1} = h_i$. Un raisonnement similaire s'applique à `PasISVar1()` (voir ligne 18). De plus, il y a des portions de code qui empêchent une variation trop brusque du pas d'intégration en vue d'assurer une certaine stabilité numérique lorsque les potentiels sont très escarpés. Pour chacune des fonctions, le pas d'intégration ne peut pas être multiplié ou divisé par un facteur supérieur à 2 (cf lignes 16–17, 23–24 pour `PasISVar0()` et 20–21, 29–30 pour `PasISVar1()`).

Ajoutons finalement que ces fonctions peuvent être optimisées en modifiant légèrement la structure et en utilisant judicieusement des variables temporaires. Elles sont présentées ici de cette façon par souci de lisibilité. Les versions de `PasISVar0()` et `PasISVar1()` utilisées pour obtenir les résultats présentés dans cette thèse sont quant à elles optimisées et contiennent en plus des portions de code assurant leur stabilité lorsque le facteur de tolérance approche les limites de précision numérique.

La figure 2.12 nous montre le programme `testIS` écrit en langage C. Il fait un usage simple des fonctions `PasISVar0()` et `PasISVar1()`. On remarque les variables globales déclarées au début du programme (lignes 2–4). Elles sont déclarées comme `tel` pour être accessibles (visibles) de toutes fonctions, en particulier de `main()`³, `PasISVar0()` et `PasISVar1()`. On considère dans cet exemple l'intégration d'un système à 2 degrés de liberté qui pourrait être formé du potentiel `test` (vallonné ou escarpé) défini plus tôt dans le chapitre. L'espace de phase étant de dimension 4, les vecteurs `v_initial`

³En langage C, il est nécessaire de définir la fonction `main()` puisque c'est toujours cette fonction qui est exécutée lorsqu'un programme est lancé.

```

/* Programme testIS.c */

1 #include<math.h>    /* Librairie mathématique */

/* Variables globales nécessaires à PasISVar0() et PasISVar1() */
2 double nstepsmax, h, H0, err_precedent, tol, m;
3 double S0, S1, SC;
4 double del_err_norm_precedent, h_precedent;    /* PasISVar1() seulement */

5 void main (void) {
6     double t_initial, t_final, t, v_initial[4], v[4], h_initial;

7     nstepsmax = 1000; S0 = 0.85; S1 = 0.95; SC = 0.9;

8     t_initial = 0.0; t_final = 10.0;
9     v_initial[0] = 0.1; v_initial[1] = 0.1;    /* (x, y) */
10    v_initial[2] = 0.0; v_initial[3] = 0.0;    /* (px, py) */
11    H0 = H (v_initial);

12    m = 5;    /* ISm() est IS5() */
13    tol = 1e-9;
14    h_initial = 0.01;

    /* Intégration avec PasISVar0() */
15    t = t_initial;
16    for (i = 0; i < 4; i++)
17        v[i] = v_initial[i];
18    h = h_initial; err_precedent = 0.0;
19    while ( t < t_final )
20        PasISVar0 (v, t, v, &t);
    /* C'est tout ! Le résultat est dans le vecteur v. */

    /* Intégration avec PasISVar1() */
21    t = t_initial;
22    for (i = 0; i < 4; i++)
23        v[i] = v_initial[i];
24    h = h_initial; err_precedent = 0.0;
25    h_precedent = h_initial; del_err_norm_precedent = 0.0;
26    while ( t < t_final )
27        PasISVar1 (v, t, v, &t);
    /* C'est tout ! Le résultat est dans le vecteur v. */

} /* main */

```

Figure 2.12: Programme en langage C démontrant l'utilisation des fonctions PasISVar0() et PasISVar1().

et \mathbf{v} sont déclarés à la ligne 6 de la fonction `main()` pour être en mesure de contenir les 4 nombres représentant les variables de phase x , y , p_x et p_y .

Les paramètres propres aux mécanismes adaptifs des fonctions `PasISVar0()` et `PasISVar1()` sont d'abord définis à la ligne 7. L'intervalle de temps et les conditions initiales sont spécifiés aux lignes 8-10 et la valeur initiale de l'hamiltonien est calculée à la ligne 11. On fixe ensuite l'ordre, le facteur de tolérance et l'amplitude du pas initial des intégrateurs. La trajectoire est d'abord obtenue au moyen de `PasISVar0()` (lignes 15-20), et l'opération est répétée avec `PasISVar1()` (lignes 21-27). En plus des variables `t` et `v`, il est nécessaire dans chaque cas d'initialiser les variables globales `h` et `err_precedent` (lignes 18 et 24).

Dans le cas où l'intégration est faite par l'itération de `PasISVar1()`, il est aussi nécessaire d'initialiser les variables globales `h_precedent` et `del_err_norm_precedent`. La variable `h_precedent` correspond initialement à h_0 , le pas d'intégration menant de t_{-1} à t_0 . De la même façon, la variable `del_err_norm_precedent` correspond initialement à une version redimensionnée de $\Delta e_0 \equiv e_0 - e_{-1}$, l'erreur locale encourue lors de la réalisation du pas d'intégration menant de t_{-1} à t_0 . La valeur de ces variables ne peut donc pas être définie directement puisqu'au temps initial t_0 , aucun pas n'a encore été réalisé. Il serait envisageable d'accomplir un pas d'intégration en sens inverse menant de t_0 à t_{-1} et de recueillir l'information nécessaire pour déterminer la valeur initiale de `h_precedent` et `del_err_norm_precedent`. Il est toutefois suffisant d'utiliser `h_precedent` \equiv `h_initial` et `del_err_norm_precedent` \equiv 0. Au pire, si l'estimé est mauvais, le second pas est refusé, corrigé (par interpolation d'ordre 0) et recommencé. Après le second pas, toute l'information nécessaire à `ISPV1` pour estimer le prochain pas est disponible.

Notons qu'à la fin de chaque boucle d'intégration, dans cet exemple aux fins pédagogiques, le vecteur `v` contient la solution au temps $t = t_f \geq \mathbf{t_final}$ avec $t_f - h_f < \mathbf{t_final}$ et non nécessairement la solution au temps $t = \mathbf{t_final}$. Il est très simple de modifier le programme pour que la solution finale soit celle au temps $t = \mathbf{t_final}$, ce

que nous ne ferons pas ici.

Afin de terminer la présentation de la version finale de nos intégrateurs adaptatifs ISPV0- m et ISPV1- m revenons sur les valeurs attribuées aux paramètres de sécurité S_0 , S_1 et S_C . Pour le potentiel vallonné défini au début de ce chapitre, nous avons déterminé empiriquement la valeur optimale de S_0 minimisant le nombre total de pas (acceptés + refusés) à accomplir pour intégrer une trajectoire typique à l'aide de ISPV0- m . La courbe “nombre de pas” versus S_0 comportant une région relativement plane entre $S_0 \sim 0.80$ et $S_0 \sim 0.87$ environ, le choix $S_0 = 0.85$ devrait être raisonnablement efficace dans la plupart des situations. La même stratégie a été utilisée pour ISPV1- m pour lequel la région plane s'étend de $S_1 \sim 0.92$ à $S_1 \sim 0.97$ environ. Nous avons choisi de retenir $S_1 = 0.95$. Pour ce qui est de S_C la situation est légèrement différente. La correction se fait par interpolation plutôt que par extrapolation et le risque d'erreur est plus faible. Dans bien des cas, une valeur aussi élevée que $S_C = 0.99$ serait acceptable. Toutefois, les estimés apportés par ISPV0 ou ISPV1 sont suffisamment bons et une correction à un pas d'intégration n'est pas souvent nécessaire. Il est donc beaucoup moins important de maximiser un pas corrigé qu'un pas estimé et on choisit de retenir $S_C = 0.9$. Comparé au cas hypothétique où $S_C = 1.0$, chaque pas corrigé est plus petit d'un facteur $0.9/1.0 = 0.9$. Mais l'erreur, e.g. pour un IS d'ordre 4, est alors plus petite d'un facteur $0.9^4/1.0^4 \sim 0.66$ ce qui nous assure qu'un pas corrigé soit presque toujours accepté dès le premier essai.

2.3.9 Test de l'intégration symplectique à pas variable

Nous avons maintenant entre les mains des intégrateurs symplectiques à pas variable (ISPV0- m et ISPV1- m) qui sont en mesure de conserver la stabilité de l'erreur en énergie, une caractéristique qui était jusqu'à maintenant propre aux intégrateurs symplectiques à pas fixe (ISPF- m). La figure 2.13 illustre le bon fonctionnement des intégrateurs adaptatifs développés dans cette section. La séquence $e_i \equiv e(t_i)$, représentant l'erreur relative en énergie, y est tracée en fonction de t_i pour une trajectoire évoluant

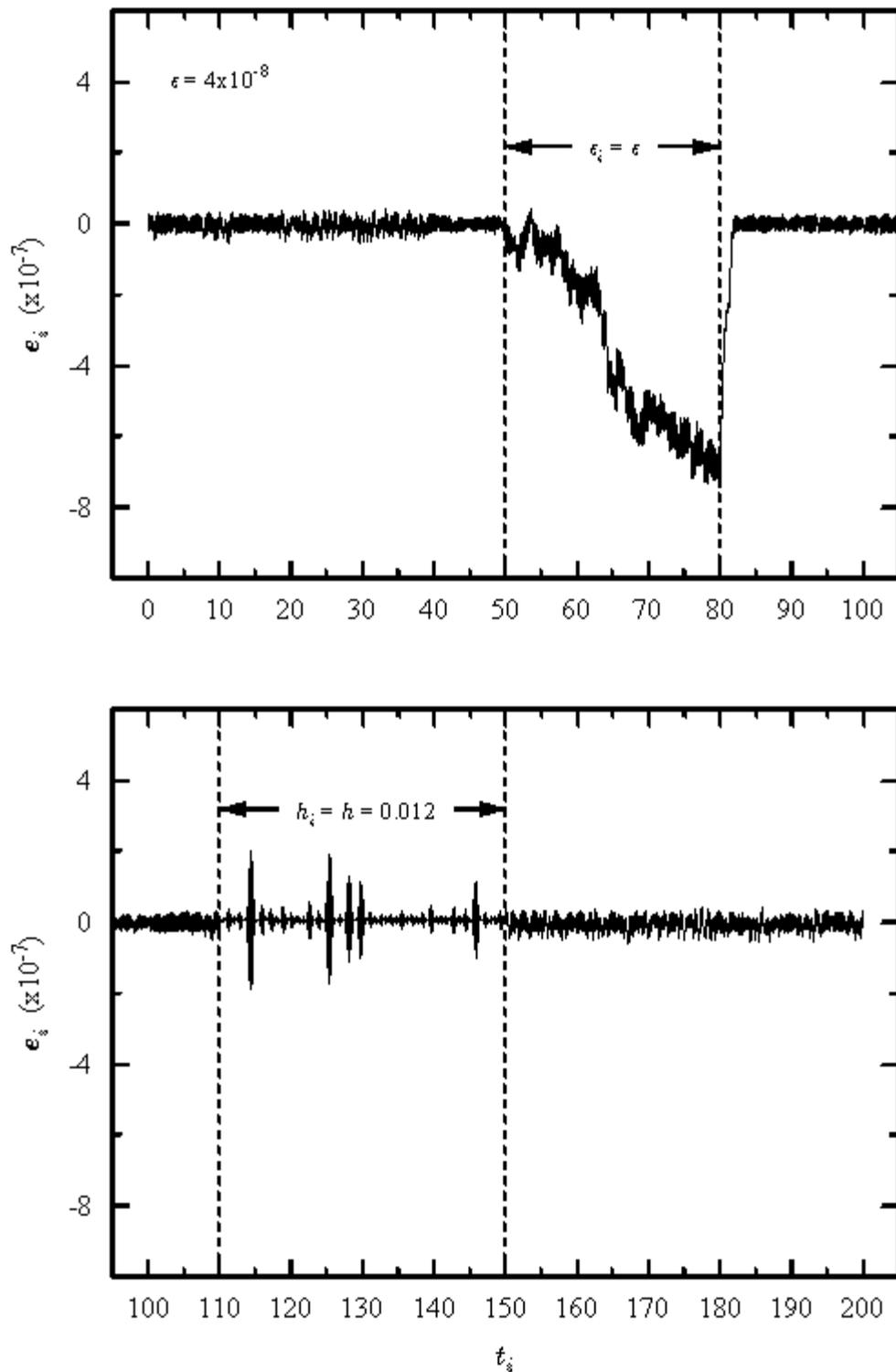


Figure 2.13: Test de l'intégration symplectique à pas variable. Ici, ISPV0-5 est utilisé pour intégrer une trajectoire dans le potentiel escarpé. Pour $50 < t_i < 80$, le mécanisme de stabilisation n'est pas utilisé. Pour $110 < t_i < 150$, ISPF-5 est utilisé avec un pas correspondant au pas moyen accompli par ISPV0-5.

dans le potentiel escarpé et obtenue par ISPV0-5.

On remarque la stabilité de e_i autour de zéro. Au temps $t_i = 50$, le mécanisme de stabilisation est interrompu et $\epsilon_i = \epsilon$. On remarque alors une rapide dérive en énergie. Cette observation est similaire à ce qu'ont pu observer Calvo et Sanz-Serna [1993] dans leur tentative de développer un ISPV mentionnée plus tôt dans le chapitre. Au temps $t_i = 80$, le mécanisme de stabilisation est rétabli et on observe un rapide retour à l'énergie nominale. En $t_i = 110$, c'est le mécanisme adaptif qui est interrompu et $h_i = h = 0.012$, l'amplitude moyenne des pas utilisés pour accomplir tout l'intervalle au moyen de ISPV0-5 à la tolérance prescrite. L'erreur en énergie est stable—ce qui est normal puisque ISPF-5 intègre la trajectoire—mais l'importante amplitude de certaines oscillations pourrait ne pas être acceptable. A partir de $t_i = 150$ le mécanisme adaptif est rétabli.

2.4 Analyses de performance

Nous présentons maintenant quelques résultats permettant de caractériser et de comparer les performances des intégrateurs ISPF- m , ISPV0- m et ISPV1- m .

2.4.1 Performances théoriques

Comme on l'a déjà fait lors des tests de la section 2.2 servant à déterminer les meilleurs ISPF- m (alors dénotés IS m), on choisit de mesurer les performances des différents intégrateurs ISPF- m , ISPV0- m et ISPV1- m en termes de nombre d'évaluations de force (gradient du potentiel). Toujours à la section 2.2, il a déjà été établi que ISPF- m était optimal pour $m = 4, 5$ et 8 , dépendant de la tranche de précision requise. Puisque ISPF- m est à la base du fonctionnement de ISPV0- m et ISPV1- m , on considère donc ici les ISPV optimaux à savoir ISPV0- m et ISPV1- m avec $m = 4, 5$ et 8 .

Pour chacun des potentiels vallonné et escarpé de la figure 2.2 on intègre une tra-

jectoire dont la condition initiale

$$\left[x^0 = 0, y^0 = 0.5, p_x^0 = p_x(x^0, y^0, p_y^0; E = 1), p_y^0 = 0 \right]^T$$

se retrouve dans la région stochastique de l'espace de phase (voir sections de Poincaré sur la figure 2.3). On obtient les courbes en intégrant avec divers facteurs de tolérance (ISPV) ou divers pas d'intégration (ISPF). L'opération est répétée pour chaque combinaison des intégrateurs ISPF- m , ISPV0- m et ISPV1- m avec $m = 4, 5$ et 8 . Puisque la trajectoire exacte correspondant à chacun des deux potentiels est chaotique, les trajectoires numériques fournies par les différentes combinaisons d'intégrateurs ne sont pas a priori comparables. Il est toutefois possible de permettre une comparaison équitable des performances en s'assurant d'intégrer suffisamment longtemps pour qu'une grande portion du même espace de phase soit visitée par chacune des trajectoires.

Considérons l'erreur maximale en énergie, soit

$$e_{\max} = \max_i \{|e_i|\} \quad (2.28)$$

où e_i est toujours l'erreur relative en énergie (2.1). Pour comparer les performances des différentes méthodes ISPF- m , ISPV0- m et ISPV1- m , on trace pour $m = 4, 5$ et 8 sur les figures 2.14, 2.15 et 2.16 respectivement, l'erreur maximale (2.28) de chaque trajectoire en fonction de l'effort numérique mesuré en nombre d'évaluations de force. La région hachurée de chaque tracé est la même que celle de la figure 2.5 et permet de délimiter les intervalles de précisions où l'IS d'ordre 4, 5, ou 8 est le plus performant.

Notons que trois lignes forment le tracé correspondant aux ISPV0- m et ISPV1- m . Elles permettent de rendre compte du fait que les méthodes adaptives requièrent une (1) évaluation de l'hamiltonien par pas d'intégration. Lorsque lues de gauche à droite, les trois lignes permettent de considérer l'effort supplémentaire comme équivalant à 0, 1 et 2 évaluations de force respectivement. Rappelons aussi que ISPF-4, ISPF-5 et ISPF-8 (IS4, IS5 et IS8) requièrent respectivement 4, 6 et 15 évaluations de forces par pas d'intégration. (voir tableau 2.4, $b_{16} = 0$ pour ISPF-8). L'effort supplémentaire dont on tient compte se situe donc environ entre zéro et

$$(4 + 1)/4 = 1.25, \quad (6 + 1)/6 \sim 1.17 \quad \text{et} \quad (15 + 1)/15 \sim 1.07$$

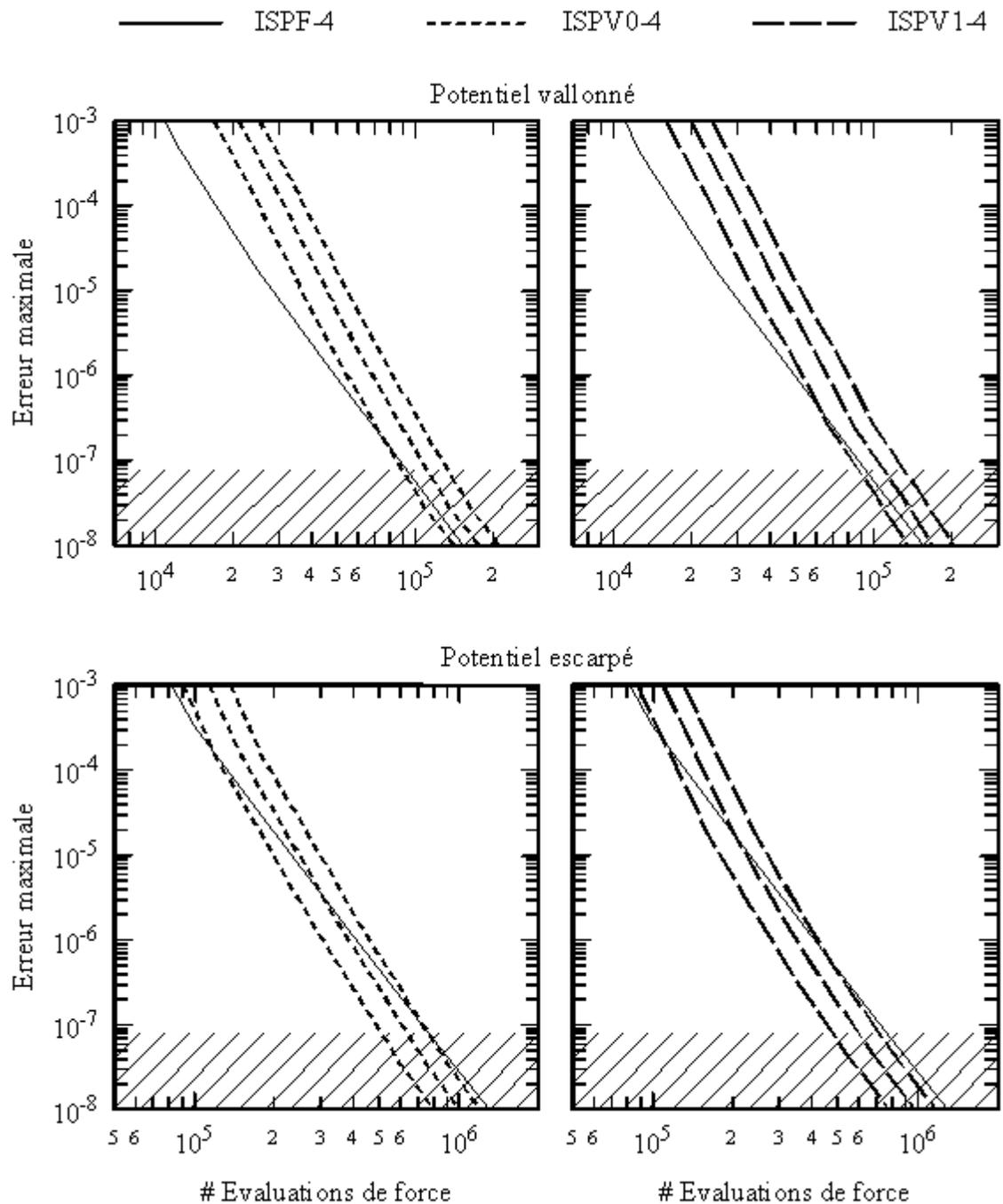


Figure 2.14: Performances théoriques des intégrateurs ISPF-4, ISPV0-4 et ISPV1-4. Les trois courbes pour ISPV0-4 ou ISPV1-4 dénotent respectivement un apport supplémentaire de zéro, une et deux évaluations de force par pas d'intégration, nécessaire à l'évaluation de l'hamiltonien. La largeur combinée des trois courbes correspond à $(4 + 2)/4 = 1.5$.

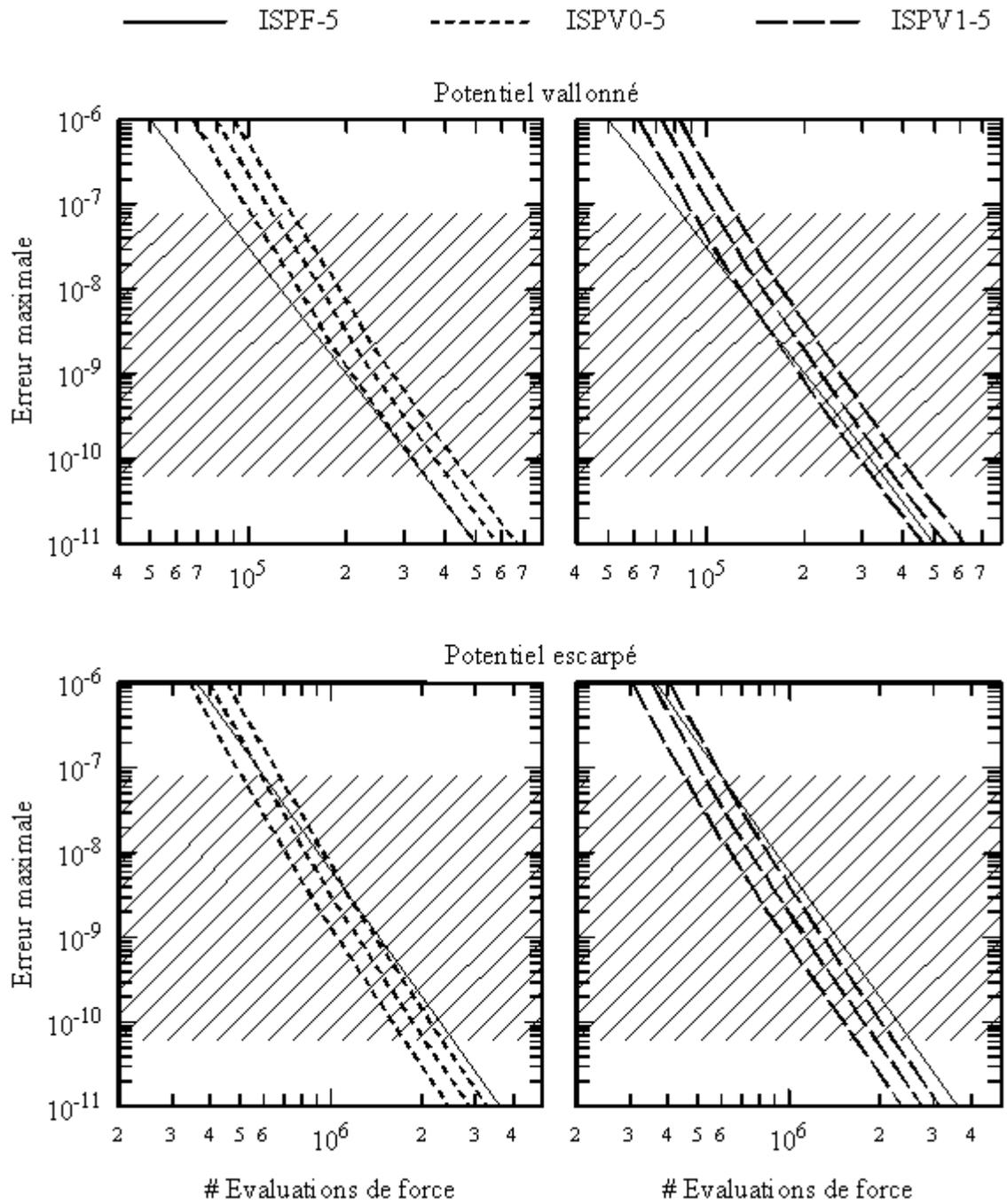


Figure 2.15: Performances théoriques des intégrateurs ISPF-5, ISPV0-5 et ISPV1-5. Voir fig. 2.14. La largeur combinée des trois courbes correspond à $(6 + 2)/6 \sim 1.33$.

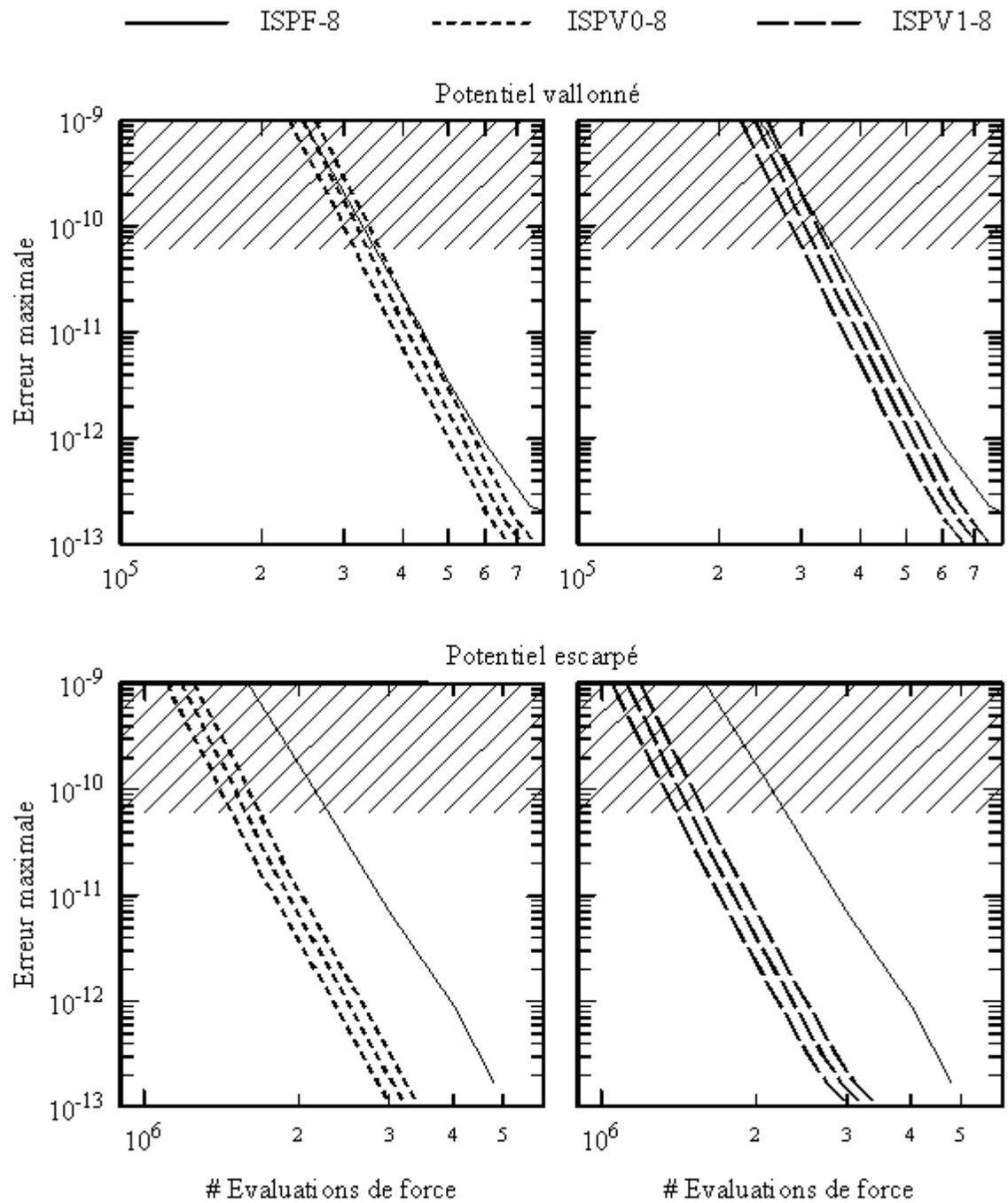


Figure 2.16: Performances théoriques des intégrateurs ISPF-8, ISPV0-8 et ISPV1-8. Voir fig. 2.14 et fig. 2.15. La largeur combinée des trois courbes correspond à $(15 + 2)/15 \sim 1.13$.

ou

$$(4 + 2)/4 = 1.5, \quad (6 + 2)/6 \sim 1.33 \quad \text{et} \quad (15 + 2)/15 \sim 1.13.$$

On constate que l'effort supplémentaire devient négligeable au fur et à mesure que le nombre d'évaluations de force nécessaire pour accomplir le pas de base augmente.

Pour le cas de nos potentiels vallonné et escarpé, les opérations arithmétiques (addition, soustraction, multiplication et division) nécessaires au calcul de l'hamiltonien et du gradient du potentiel sont à peu près de 13 pour 12 respectivement. L'effort supplémentaire est donc estimé à un peu plus d'une évaluation de force par pas d'intégration. Cet estimé est toutefois donné à titre indicatif. Il ne tient pas compte de l'optimisation faite par l'utilisation de variables temporaires ou des différences pouvant exister entre les ressources (compilateur, système d'exploitation, microprocesseur, etc.) utilisées pour accomplir les calculs.

Les résultats pour l'ordre 4 illustrés sur la figure 2.14 montrent que dans le cas du potentiel vallonné, les ISPV-4 sont moins performants que ISPF-4 sur presque tout l'intervalle de précision. Pour le potentiel escarpé par contre, les ISPV-4 deviennent les plus performants lorsque la précision atteint 10^{-5} – 10^{-6} environ. La figure 2.15 montre aussi des ISPV-5 moins performants que ISPF-5 pour le potentiel vallonné. L'effort supplémentaire apporté par l'utilisation des ISPV est toutefois moins important pour l'ordre 5 que l'ordre pour 4. Pour le potentiel escarpé cette fois, le gain en performance apporté par l'utilisation des ISPV-5 est assez clair. Enfin, pour les intégrateurs d'ordre 8, la figure 2.16 montre que les ISPV-8 sont plus performants que ISPF-8. Pour le potentiel escarpé, ISPV1-8 surpasse même ISPF-8 d'un facteur de l'ordre de $5/3 \sim 1.66$ en performance (*i.e.* nombre d'évaluations de force pour une précision donnée).

Le but n'est pas ici de quantifier de façon exacte les performances des ISPV. Il s'agit plutôt de montrer que s'ils ne sont pas toujours plus performants que peut l'être ISPF, les coûts associés à leur utilisation sont loin d'être exorbitants. On peut être intéressé par la commodité — on fixe un pas d'intégration initial et un facteur de tolérance —, et la robustesse — l'erreur est sous contrôle — des méthodes à pas adaptifs tel ISPV0

ou ISPV1. Par exemple, supposons que ISPV1-4 intègre la trajectoire évoluant dans le potentiel vallonné et que l'évaluation de l'hamiltonien corresponde à une évaluation de force par pas d'intégration. La ligne du centre pour le tracé ISPV1-4 du haut de la figure 2.14 nous indique qu'à une précision de 10^{-6} , l'effort requis par ISPV1-4 est supérieur à celui requis par ISPF-4 d'un facteur $4/3 \sim 1.33$ environ. Le coût supplémentaire est faible. Ce que l'on peut retenir par ailleurs, c'est que les ISPV sont les plus performants lorsque la précision requise augmente.

Les figures 2.14–2.16 montrent aussi que ISPV1 est toujours légèrement plus performant que ISPV0. Ceci vient confirmer le fait que l'estimé par extrapolation d'ordre 1 utilisé par ISPV1 est meilleur que l'estimé par extrapolation d'ordre 0 utilisé par ISPV0. A un facteur de tolérance donné, l'erreur est comparable pour une trajectoire obtenue par ISPV0 ou ISPV1 et le nombre de pas *acceptés* servant à parcourir l'intervalle d'intégration est aussi comparable. Si ISPV0 demande plus d'effort que ISPV1, c'est donc que le nombre de pas refusés et recommencés est supérieur pour ISPV0. Autrement dit, ISPV1 est plus efficace que ISPV0.

La figure 2.17 nous montre l'efficacité des intégrateurs ISPV0-5 et ISPV1-5. Notons que l'efficacité minimale est de plus de 75%. Ces courbes sont obtenues en intégrant une même condition initiale dans le potentiel escarpé pour différentes valeurs du facteur de tolérance. Le ratio du nombre de pas acceptés sur le nombre total de pas (acceptés + refusés) est tracé en fonction de l'erreur maximale observée. La supériorité de ISPV1 sur ISPV0 est évidente.

Pour terminer avec les comparaisons basées sur les évaluations de force, la figure 2.18 montre l'évolution de l'erreur pour deux trajectoires chaotiques semblables (cf discussion de la section 2.2 concernant le choix d'une condition initiale pour les tests) obtenues par ISPF-5 et ISPV1-5. Les trajectoires évoluent dans le potentiel escarpé. Le facteur de tolérance est fixé à $\epsilon = 10^{-9}$ pour ISPV1-5. Basé sur les statistiques recueillies lors de l'intégration de la trajectoire par ISPV1-5, on détermine le pas d'intégration pour ISPF-5 de telle sorte que le nombre d'évaluations de force soit le même dans

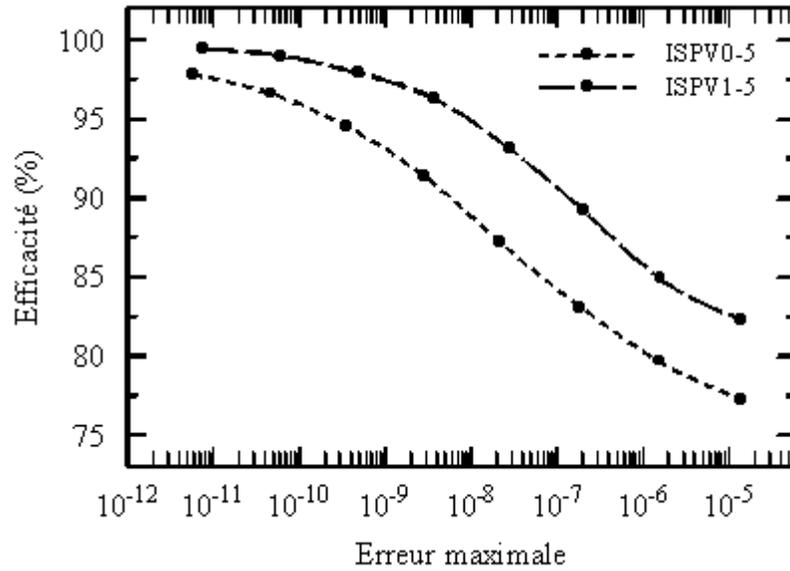


Figure 2.17: Efficacité de ISPV0-5 et ISPV1-5 en fonction de l'erreur maximale. On varie la tolérance sur l'intégration d'une même trajectoire évoluant dans le potentiel escarpé et on trace le ratio (nombre de pas d'intégration acceptés) / (nombre total de pas) en fonction de l'erreur maximale observée.

les deux cas. Pour ce faire, on considère l'évaluation de l'hamiltonien nécessaire à ISPV1-5 comme étant équivalente à une (1) évaluation de force (ce qui correspond à la réalité pour le potentiel escarpé). L'erreur RMS et l'erreur maximale sont toutes deux plus faibles pour ISPV1-5 que pour ISPF-5. On note que pour ISPV1-5, l'erreur est uniformément distribuée dans un intervalle bien défini et de taille comparable à la tolérance requise.

La situation serait la même pour un potentiel encore plus escarpé. Prenons par exemple, le potentiel cristallin présenté au chapitre 1 régissant l'interaction $Q^- + \text{Si} \langle 110 \rangle$. Ce potentiel comporte deux singularités autour desquelles l'utilisation de ISPF-5 amène des erreurs intolérables. Pour ce type de potentiel, des trajectoires acceptables ne peuvent être obtenues qu'avec des intégrateurs adaptifs. Encore mieux, elles devraient être obtenues avec des intégrateurs symplectiques à pas variable qui préservent l'énergie comme le font ISPV0 et ISPV1.

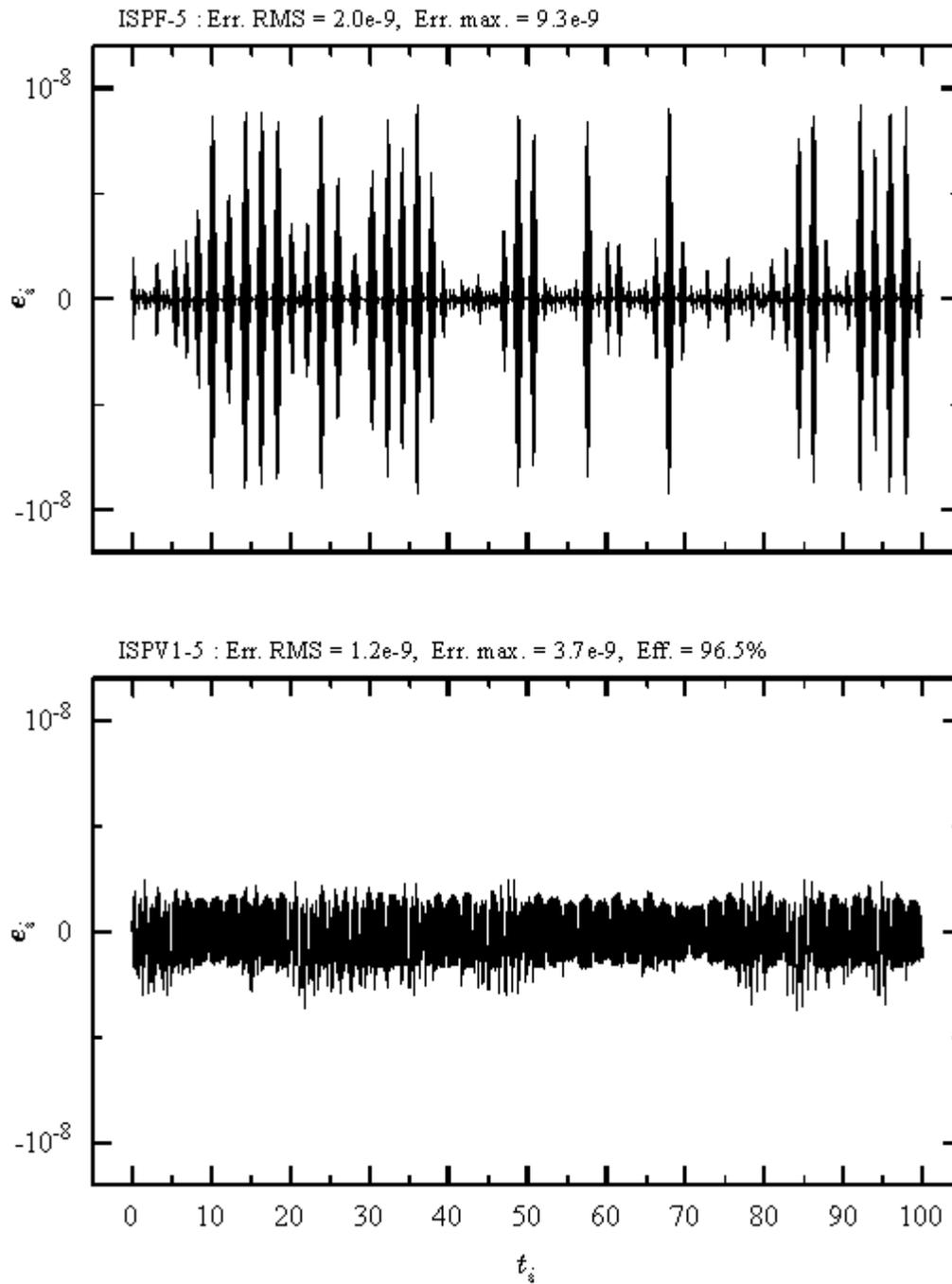


Figure 2.18: Comparaison entre ISPF-5 et ISPV1-5 à nombre d'évaluations de force égal. La trajectoire intégrée évolue dans le potentiel escarpé. Le facteur de tolérance est $\epsilon = 10^{-9}$ pour ISPV1-5 et le pas d'intégration pour ISPF-5 est choisi de telle sorte que le nombre d'évaluations de force soit identique dans les deux cas. L'évaluation de l'hamiltonien pour ISPV1-5 est considérée comme étant équivalente à une (1) évaluation de force.

2.4.2 Performances réelles

Jusqu'à maintenant nous avons comparé les performances des divers intégrateurs sur la base du nombre d'évaluations de force. Très souvent toutefois, comme c'est le cas pour le potentiel (2.7) considéré dans ce chapitre, l'évaluation des forces n'est pas la partie la plus coûteuse en temps réel de calcul. Nous ne présentons pas tout de suite les résultats comparant les performances réelles des différents intégrateurs. Nous présentons d'abord les résultats d'une expérience permettant de mesurer dans quelles proportions contribuent au temps de calcul les deux éléments qui le composent : l'algorithme d'intégration et la complexité du système intégré. Nous allons nous limiter cette fois aux intégrateurs ISPF-5, ISPV0-5 et ISPV1-5.

Le haut de la figure 2.19 montre le coût relatif attribué à l'algorithme d'intégration en fonction de ce que nous appelons la *surcharge*. La surcharge est tout simplement le nombre de répétitions fait lors de chaque évaluation des forces et de chaque évaluation de l'hamiltonien (dans les cas ISPV0 et ISPV1). Une surcharge de un (1) implique que les évaluations ne sont faites qu'une fois, comme dans une situation normale. Une surcharge de deux (2) implique que chaque évaluation est faite deux (2) fois. Dans les deux cas, l'intégration d'une même condition initiale donne *exactement* les mêmes résultats. De cette façon, nous contrôlons la charge de temps associée à la complexité du système dynamique (calcul des forces et de l'hamiltonien) tout en obtenant des trajectoires *exactement* comparable.

Il s'agit donc, ici au moyen de ISPF-5, ISPV0-5 et ISPV1-5, d'intégrer une trajectoire et de mesurer le temps CPU requis par le calcul. Pour ISPF-5, le pas d'intégration est $h = 0.0125$ et pour les ISPV-5 le facteur de tolérance est $\epsilon = 10^{-9}$. La trajectoire est la même que précédemment et évolue chaotiquement dans le potentiel escarpé. Cette fois, la période d'intégration est allongé pour améliorer la résolution sur les temps de calcul CPU mesurés. L'expérience est réalisé sur une station de travail Silicon Graphics dont le système d'exploitation (Unix) permet d'obtenir avec précision les différents temps de calcul (par la commande `time`). Pour que les résultats correspondent de plus

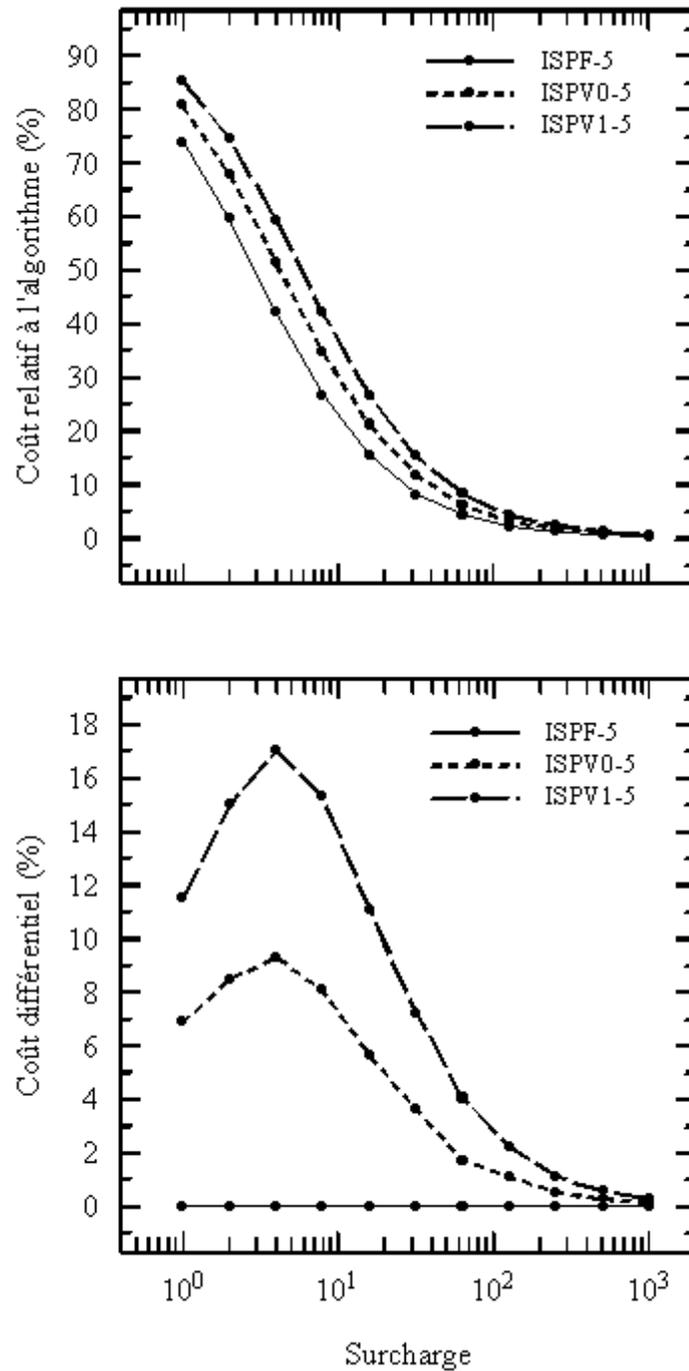


Figure 2.19: Les coûts relatifs aux algorithmes d'intégration ISPF-5, ISPV0-5 et ISPV1-5. En haut : Portion du temps de calcul non attribuable à la complexité du système intégré mais à l'algorithme d'intégration utilisé (voir texte). En bas : Portion différentielle à ISPF-5.

près aux divers algorithmes intervenant dans les calculs, aucune option d'optimisation n'est activée lors de la compilation des programmes utilisés. L'opération est répétée dans les mêmes conditions pour les valeurs de surcharge $N_{\text{SUR}} = 1, 2, \dots, 1024$. Bien que la valeur de surcharge change, le nombre de pas d'intégration demeure constant de même que le temps de calcul attribué à l'algorithme d'intégration.

Dans ce contexte, on relie donc les temps de calcul CPU par

$$T_{\text{CPU}} = T_{\text{SYST}} \times N_{\text{SUR}} + T_{\text{ALGO}} \quad (2.29)$$

où T_{CPU} , T_{SYST} et T_{ALGO} sont respectivement les temps de calcul CPU total, associé au système par unité de surcharge et associé à l'algorithme d'intégration. Une régression linéaire faite sur les données (les lissages sont presque parfaits) permet d'extraire T_{SYST} et T_{ALGO} et de définir le coût relatif à l'algorithme d'intégration, à savoir

$$\frac{T_{\text{ALGO}}}{T_{\text{CPU}}}$$

qui est tracé en haut de la figure 2.19 pour chaque intégrateur.

Pour de faible valeur de surcharge, on constate que la majeure partie du temps de calcul est passée à accomplir des tâches relatives aux algorithmes d'intégration. Même pour ISPF-5, l'intégrateur le plus simple, on observe un coût de presque 75%. Au fur et à mesure que la surcharge augmente, le coût relatif à l'algorithme diminue comme le temps requis par l'évaluation des forces et de l'hamiltonien augmente. Comme on doit s'y attendre, lorsque la surcharge tend vers l'infini, le coût relatif à l'algorithme tend vers zéro. Le bas de la figure 2.19 montre le coût différentiel associé à chaque IS par rapport à ISPF-5. On y constate que les coûts supplémentaires apportés par les ISPV-5, qui sont équivalents à ISPF-5 plus quelques opérations indépendantes de la surcharge, sont assez modestes et diminuent lorsque la complexité du système devient importante.

Nous montrons enfin sur la figure 2.20, les résultats permettant de comparer directement les performances réelles des intégrateurs ISPF-5, ISPV0-5 et ISPV1-5. Ici

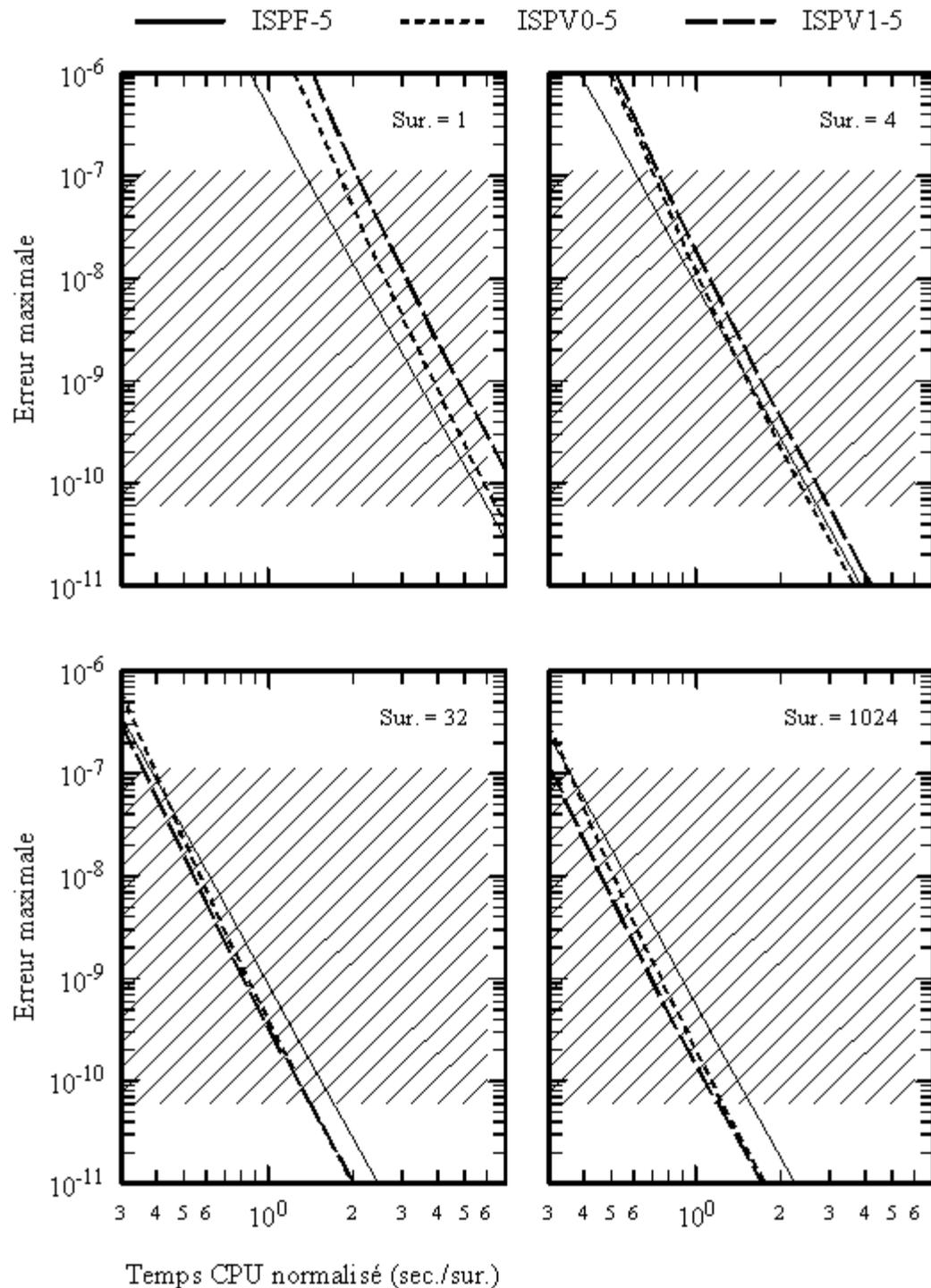


Figure 2.20: Performances réelles des intégrateurs ISPF-5, ISPV0-5 et ISPV1-5. Pour une trajectoire soumise au potentiel escarpé, l'erreur maximale observée est tracée en fonction du temps CPU requis pour le calcul. Ce temps est divisé par la surcharge afin de permettre une comparaison entre les résultats obtenus pour différentes valeurs de surcharge.

encore, la trajectoire intégrée évolue de façon chaotique dans le potentiel escarpé. On fait varier le facteur de tolérance (ISPV-5) ou le pas d'intégration (ISPF-5) pour obtenir différents points sur les courbes. Toute l'opération doit toutefois être accomplie deux (2) fois. La première fois, on doit activer les portions de code permettant de compiler les statistiques nécessaires à déterminer les erreurs maximales. La seconde fois, ces portions de code sont désactivés et on peut mesurer les temps de calcul non biaisés.

Ce qui est tracé sur la figure 2.20 est le temps CPU normalisé

$$T_{\text{CPU}}^* \equiv \frac{T_{\text{CPU}}}{N_{\text{SUR}}}$$

pour les valeurs de surcharge $N_{\text{SUR}} = 1, 4, 32$ et 1024 . Cette normalisation permet de comparer les résultats pour différentes valeur de surcharge. On observe que les ISPV-5 ne deviennent plus performant que ISPF-5 qu'à partir de $N_{\text{SUR}} = 4$ environ. Comme nous l'avons déjà mentionné, on peut être intéressé par la commodité et la robustesse des ISPV plus que par leurs performances. Par exemple, pour $N_{\text{SUR}} = 1$, le coût supplémentaire associé à l'utilisation de ISPV0-5 par rapport à ISPF-5 est d'un facteur $8/7 \sim 1.14$ (lu de l'échelle logarithmique) lorsque l'erreur maximale est 10^{-9} . Tel qu'attendu, lorsque la complexité du système est grande ($N_{\text{SUR}} = 32$ ou 1024), les ISPV-5 sont plus performants que ISPF-5, et ISPV1-5 l'est plus que ISPV0-5.

2.5 Quelques notes supplémentaires

Avant de conclure, voici quelques notes ajoutées en complément à celles trouvées tout au long du chapitre.

Nous avons déjà mentionné les réticences de quelques auteurs [Skeel et Gear, 1992; Gear, 1992] quant à l'utilisation de pas variables avec les intégrateurs symplectiques. D'après eux, il n'est pas exclu qu'il soit possible d'élaborer des intégrateurs à la fois symplectiques et adaptifs, mais de tels intégrateurs ne pourraient être construits sur la base d'intégrateurs symplectiques à pas fixe dont on ferait varier le pas. En effet, comme l'ont observé Calvo et Sanz-Serna [1993] et comme nous l'avons nous même remarqué,

la stabilité de l'erreur en énergie est perdue lorsque l'on fait varier le pas. Avec le temps l'erreur croît, et l'hamiltonien fictif pour lequel l'intégrateur symplectique correspond à l'évolution exacte, n'est éventuellement plus suffisamment équivalent à l'hamiltonien que l'on intègre. Notre mécanisme de stabilisation remédie à la situation et s'assure que l'erreur demeure suffisamment faible pour que l'intégration symplectique soit possible. Il est donc possible d'utiliser des intégrateurs symplectiques conçus pour être utilisés dans un contexte de mécanisme à pas fixe, de faire varier le pas, et d'obtenir des intégrateurs symplectiques adaptifs.

Il a été démontré [Estep et Stuart, 1995; Cartwright et Piro, 1992; Zhong et Marsden, 1988] qu'un intégrateur ne peut à la fois être symplectique et conserver l'énergie. Les intégrateurs que nous avons développés sont symplectiques et permettent de conserver l'énergie avec une précision aussi grande que désirée. Dans l'espace des phases, une trajectoire exacte est restreinte à une surface d'énergie. Nos intégrateurs adaptifs permettent de confiner la trajectoire à une coquille d'énergie dont l'épaisseur peut être faite aussi petite que voulue.

La grande stabilité des intégrateurs symplectiques vient du fait que l'erreur en énergie croît globalement de façon linéaire et très lentement. C'est pourquoi ces intégrateurs constituent des méthodes de choix lorsque la résolution d'un problème requiert une intégration à long terme. Notre mécanisme adaptif pousse encore plus loin cette grande stabilité pour éliminer complètement cette faible dérive en énergie. Pour les intégrateurs non-symplectiques, la dérive est beaucoup plus importante et même exponentielle dans certains cas. Nous avons appliqué notre mécanisme adaptif à un intégrateur non-symplectique de type Runge-Kutta d'ordre 4. Le mécanisme réussit à préserver l'énergie, mais il le fait de façon beaucoup plus laborieuse que lorsqu'un intégrateur symplectique est utilisé pour accomplir le pas de base. Pour un même facteur de tolérance, l'erreur en énergie est plus importante et s'étend disymétriquement dans la direction de la dérive naturelle de l'intégrateur.

Nos intégrateurs adaptifs ISPV0 et ISPV1 requièrent un intégrateur symplectique

pour accomplir le pas de base. Quelques uns d'entre eux ont été présentés dans ce chapitre et les plus performants ont été retenus pour les démonstrations. Il est toutefois important de rappeler que n'importe quel intégrateur symplectique peut être utilisé pour accomplir le pas de base. Par exemple, les intégrateurs symplectiques bilatéraux de Casetti [1995] transforment symétriquement les coordonnées \mathbf{q} et les moments \mathbf{p} à chaque étape d'un pas d'intégration, contrairement aux intégrateurs ISPQ et ISQP du tableau 2.1. L'idée est bonne mais les algorithmes de Casetti ne se montrent généralement pas plus efficaces que ISPQ ou ISQP. Autre exemple, pour des problèmes dont les évaluations de force sont très exigeantes en temps de calcul, les algorithmes de type Adams-Bashforth peuvent être plus efficaces que ISPQ et ISQP [Channel et Scovel, 1990]. Ces algorithmes ne requièrent qu'une seule nouvelle évaluation de force par pas d'intégration. Ils peuvent être utilisés lorsque le système est de taille modérée ou lorsqu'une intégration d'ordre modeste est suffisante.

2.6 Récapitulatif

Dans ce chapitre, nous avons d'abord introduit l'intégration symplectique des systèmes hamiltoniens. Le principal avantage de l'utilisation de telles méthodes est la préservation des invariants de Poincaré qui impose de très fortes contraintes sur les trajectoires numériques obtenues. Un autre avantage, tout aussi remarquable, est la très grande stabilité de l'erreur en énergie. Bien qu'en général les intégrateurs symplectiques ne conservent pas l'énergie de façon exacte, les intégrateurs symplectiques à pas variable (ISPV) que nous avons développés préservent l'énergie dans un intervalle de précision qui peut être rendu aussi petit que désiré. Nous avons démontré que les ISPV sont efficaces et qu'ils peuvent même être plus performants que les intégrateurs symplectiques à pas fixe (ISPF) dans certains cas. Lorsque les ISPV sont moins performants que les ISPF, le coût associé à leur utilisation reste néanmoins minime et permet de profiter de la commodité des intégrateurs adaptatifs. Les ISPV sont simples à implanter et à utiliser. Ils sont conçus pour être d'usage général, sans avoir recours à aucune personnalisation

pour quelque système particulier. Puisqu'ils se basent sur les méthodes à pas fixe pour accomplir le pas de base, ils profitent directement de toute amélioration ou innovation éventuellement apportée par de nouveaux ISPF.

L'intégration symplectique des systèmes hamiltoniens assure donc une certaine préservation de l'énergie. Mais certains hamiltoniens possèdent aussi d'autres invariants. Les intégrateurs symplectiques assurent-ils aussi la préservation de ces invariants? Nos intégrateurs symplectiques à pas variables, qu'il a fallu stabiliser afin de conserver l'énergie, préservent-ils de surcroît ces invariants? Le chapitre suivant apporte quelques éléments de réponse à ces questions.

Chapitre 3

Intégration numérique et intégrales du mouvement

D'après le fameux théorème de Liouville-Arnold, un système hamiltonien à n degrés de liberté est intégrable s'il possède $n - 1$ intégrales du mouvement I_i en involution (en sus de l'hamiltonien) telles que

$$\{H, I_i\} = 0 \quad \{I_i, I_j\} = 0 \quad i, j = 1, n - 1$$

où $\{ \}$ sont les crochets de Poisson tels que

$$\{f, g\} = \sum_k \left[\frac{\partial f}{\partial p_k} \frac{\partial g}{\partial q_k} - \frac{\partial f}{\partial q_k} \frac{\partial g}{\partial p_k} \right].$$

Nous avons vu dans le chapitre précédent que les intégrateurs symplectiques (à pas fixe) avaient cette remarquable propriété de stabilité sur l'erreur en énergie. Il n'y a pas de dérive en énergie due à l'effet cumulatif des erreurs qui sont proportionnelles à h^{m+1} , où h est le pas d'intégration et m l'ordre de l'intégrateur symplectique utilisé. Une question intéressante se pose alors d'elle-même : pour les systèmes pour lesquels il existe plusieurs intégrales du mouvement (en plus de l'énergie), l'utilisation d'intégrateur symplectique (IS) assure-t-elle la stabilité de ces autres invariants ?

Pour les systèmes hamiltoniens que nous avons étudiés jusqu'à maintenant, seul l'hamiltonien lui-même est une intégrale du mouvement. Nous considérons dans ce

chapitre, deux cas pour lesquels plusieurs intégrales du mouvement sont connues. Il s'agit encore ici de systèmes à 2 degrés de liberté comme ceux étudiés jusqu'à présent.

On examine tout d'abord le potentiel de Toda, pour lequel le potentiel de Hénon-Heiles est une approximation et qui rappelle le potentiel correspondant à la configuration de canalisation $Q^+ + \text{Si}\langle 111 \rangle$ (voir chapitre 1). Le système engendré par le potentiel de Toda possède, en plus de l'énergie, une seconde intégrale du mouvement et la conservation de ces invariants est examinée pour différents mécanismes d'intégration symplectique. Un nouvel algorithme est ensuite introduit et testé sur le système de Toda. Il permet d'adapter le pas d'intégration selon plusieurs intégrales du mouvement. Le même type d'analyse est répété pour le problème de Kepler restreint au plan. Cette fois, 4 intégrales du mouvement indépendantes sont connues.

3.1 Potentiel de Toda

Considérons un réseau unidimensionnel de N masses unitaires interagissant entre elles par des forces non-linéaires et dont l'hamiltonien

$$H = \sum_{i=1}^N \left(\frac{1}{2} P_i^2 + e^{-(Q_i - Q_{i-1})} \right) \quad (3.1)$$

permet d'obtenir les équations du mouvement. Les conditions aux limites périodiques suivantes

$$Q_{i+N} = Q_i \quad (3.2)$$

s'appliquent. Pour ce système introduit par Toda [1970], des simulations numériques réalisées par Ford *et al.* [1973] quelques années plus tard, laissent suggérer qu'il est intégrable. Cette hypothèse a pu être confirmée par Hénon [1974] et Flaschka [1974], lorsqu'ils ont obtenu de 2 façons différentes l'expression de toutes les intégrales du mouvement.

Lorsque $N = 3$, le système (3.1) est équivalent à un système hamiltonien à 2 degrés de liberté dont le potentiel bidimensionnel s'écrit [e.g. Lichtenberg et Lieberman, 1992]

$$V_{\text{TODA}}(x, y) = \frac{1}{24} \left[e^{2y-2\sqrt{3}x} + e^{-4y} + e^{2y+2\sqrt{3}x} \right] - \frac{1}{8} \quad (3.3)$$

et on retrouve un système hamiltonien comparable à ceux qui nous avons jusqu'à maintenant étudiés.

Les figures 3.1 et 3.2 montrent le potentiel de Toda, de même que quelques limites de section et quelques sections de Poincaré prises en $x = 0$. On constate la ressemblance entre le potentiel de Toda et le potentiel de Hénon-Heiles (fig. 1.9) ou encore avec le potentiel cristallin représentant la configuration de canalisation $Q^+ + \text{Si}\langle 111 \rangle$ (fig. 1.7). En fait, si on développe V_{TODA} autour de l'origine jusqu'aux termes cubiques en x et y , on obtient

$$V_{\text{HH}}(x, y) = \frac{1}{2}(x^2 + y^2) + x^2y - \frac{1}{3}y^3 \quad (3.4)$$

ce qui est précisément le potentiel de Hénon-Heiles. L'intégrabilité du système de Toda est bien mise en évidence par l'absence de toute bande stochastique, peu importe l'énergie du système. Toutes les trajectoires évoluent sur un tore invariant qui leur est propre (sauf pour les trajectoires cycliques dans l'espace des phases ou périodiques sur la section de Poincaré).

L'autre intégrale du mouvement pour le potentiel de Toda s'écrit [e.g. Lichtenberg et Lieberman, 1992]

$$I_{\text{TODA}}(x, y, p_x, p_y) = 8p_x(p_x^2 - 3p_y^2) + \quad (3.5)$$

$$(p_x + \sqrt{3}p_y)e^{2y-2\sqrt{3}x} - 2p_xe^{-4y} + (p_x - \sqrt{3}p_y)e^{2y+2\sqrt{3}x}.$$

Vérifions maintenant si les algorithmes d'intégration élaborés dans le chapitre précédent conservent cette quantité aussi bien qu'ils ne le font pour l'énergie.

3.1.1 Intégration symplectique à pas fixe

La figure 3.3 montre un résultat typique lors de l'intégration d'une trajectoire dans le potentiel de Toda au moyen d'un intégrateur symplectique à pas fixe. Ici, ISPF-5 est utilisé (voir chapitre 2). L'erreur relative sur les 2 intégrales du mouvements est tracée en fonction du temps. On note la grande stabilité de l'erreur sur H , mais aussi celle sur I . Les oscillations de l'erreur sur I sont encore typiques des intégrateurs symplectiques.

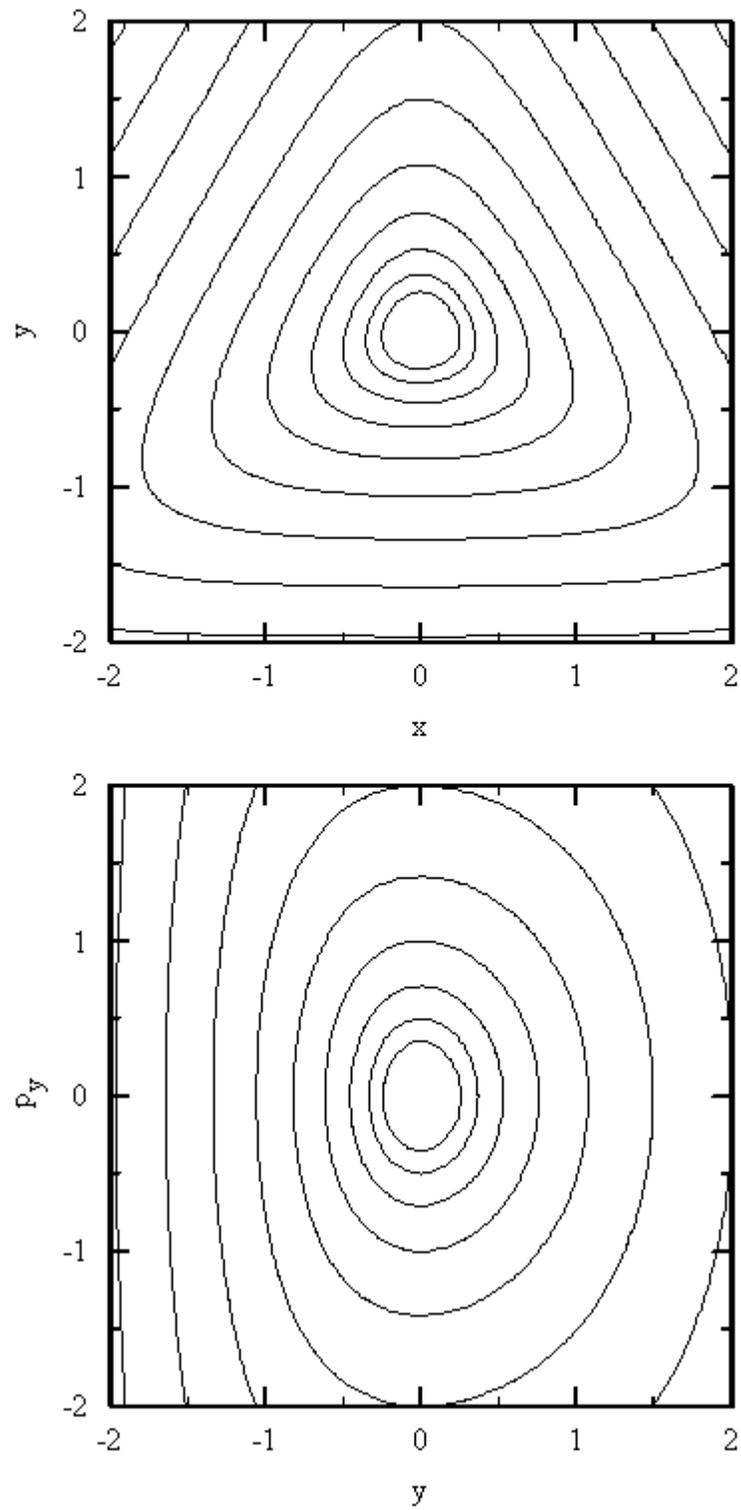


Figure 3.1: Le potentiel de Toda (en haut) et ses limites de section pour $x = 0$ (en bas). Selon le cas on a $V, E = \{\frac{1}{16}, \dots, \frac{1}{2}, 1, 2, 4, \dots\}$.

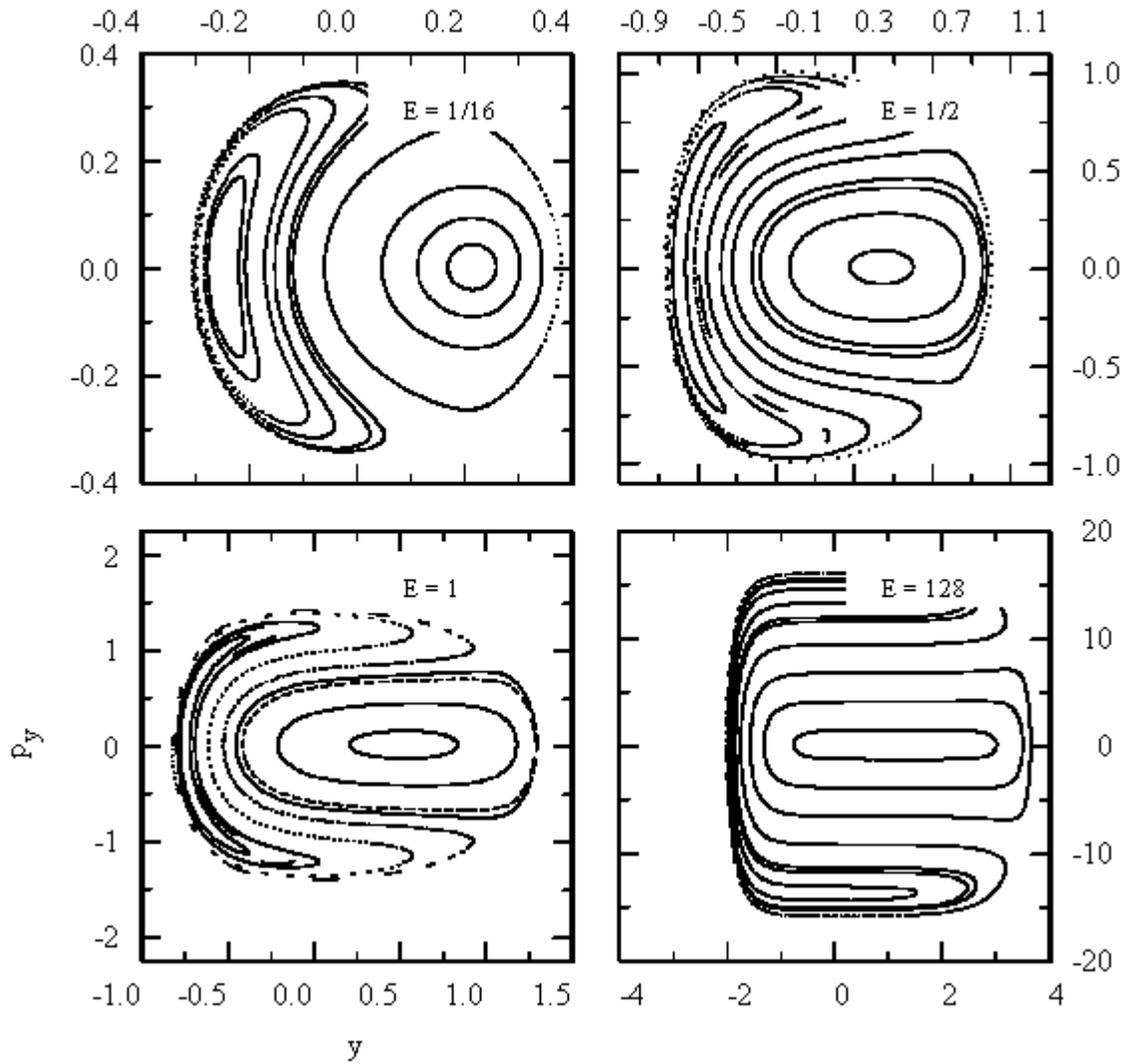


Figure 3.2: Quelques sections de Poincaré pour le potentiel de Toda dans le plan $x = 0$.

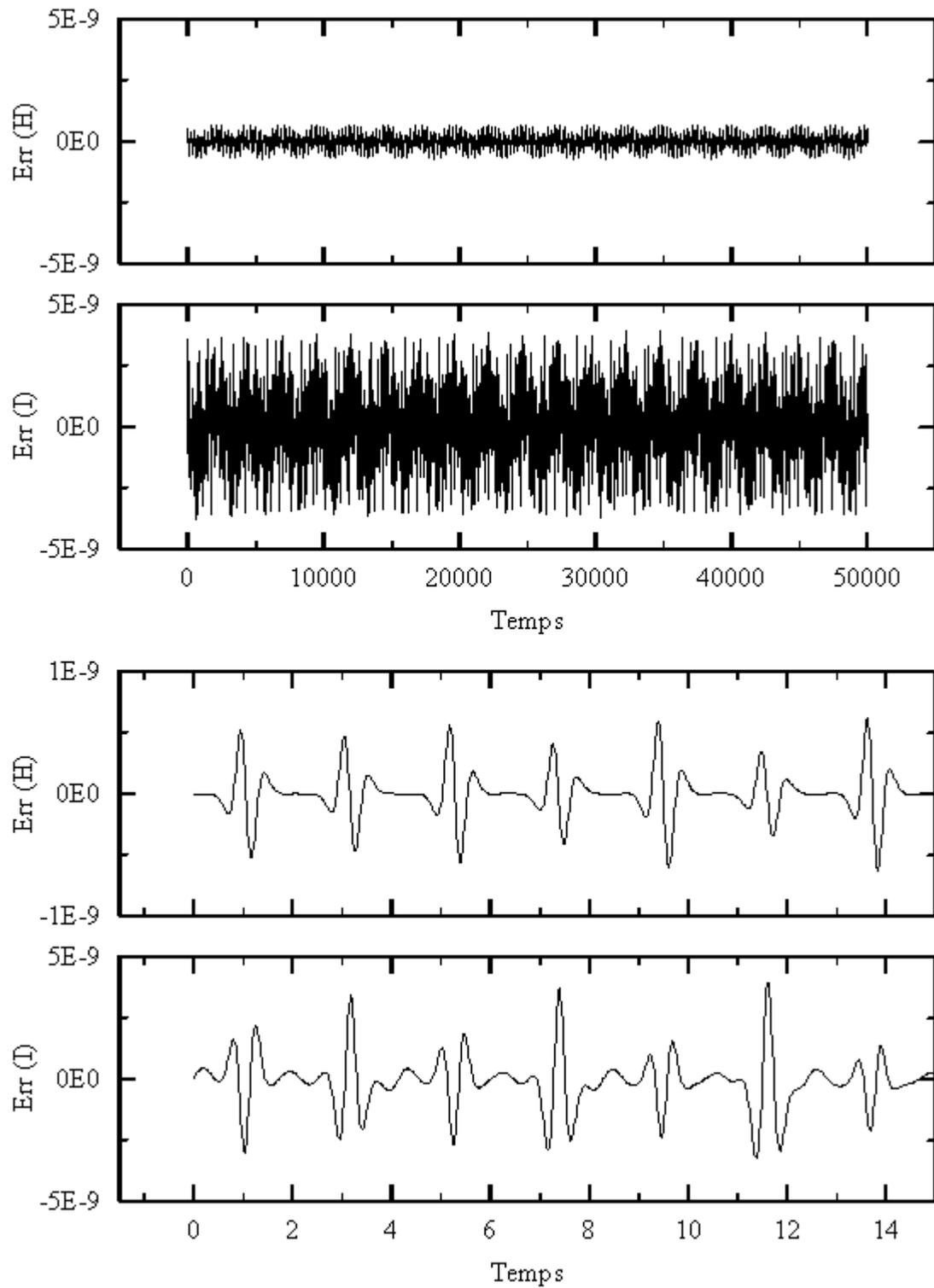


Figure 3.3: Conservation des intégrales H et I par ISPF-5 à très long terme. L'erreur relative sur $I(t)$ se comporte de façon similaire à celle sur l'énergie mais son amplitude est plus grande.

3.1.2 Intégration symplectique à pas variable

Dans le chapitre 2, nous avons développé un intégrateur symplectique à pas variable (ISPV). Un mécanisme de stabilisation a été ajouté à l'algorithme pour compenser la perte de stabilité amenée par la variation du pas d'intégration. La partie supérieure de la figure 3.4 montre l'évolution de l'erreur relative pour chacune des intégrales du mouvement H et I . Tout en haut, la stabilisation se fait sur l'erreur en énergie où ISPV0-5 (voir chapitre 2) est utilisé pour l'intégration. Il est clair que la stabilité de l'erreur en I est perdue. Juste en dessous, la stabilisation se fait plutôt sur I , et c'est la stabilité de H qui est perdue.

L'implication de tout ceci est que le fait de restreindre le mouvement à une couche très mince en énergie (ou toute autre intégrale) n'assure pas nécessairement l'exactitude des trajectoires obtenues, puisqu'alors toutes les intégrales seraient nécessairement conservées.

3.2 Intégrateur symplectique à pas variable et à intégrales multiples

Afin de remédier à cette nouvelle perte de stabilité, il est possible de modifier l'algorithme d'intégration pour qu'il cherche à stabiliser les 2 intégrales du mouvement à la fois. Une façon simple de le faire, est de laisser à chaque intégrale le soin de proposer un pas d'intégration. En prenant le plus petit, on s'assure que le critère de tolérance (voir chap. 2) est satisfait pour toutes les intégrales. La figure 3.5 montre la fonction `PasISVar0IM`, une version à intégrales multiples de la fonction présentée sur la figure 2.10 du chapitre précédent.

On distingue au bas de la figure 3.4, l'effet sur l'évolution de l'erreur en énergie, de la sévérité imposé par la conservation de I . La sous-structure révèle des intervalles de temps où le pas d'intégration est petit par rapport à celui qui serait imposé par l'énergie seule.

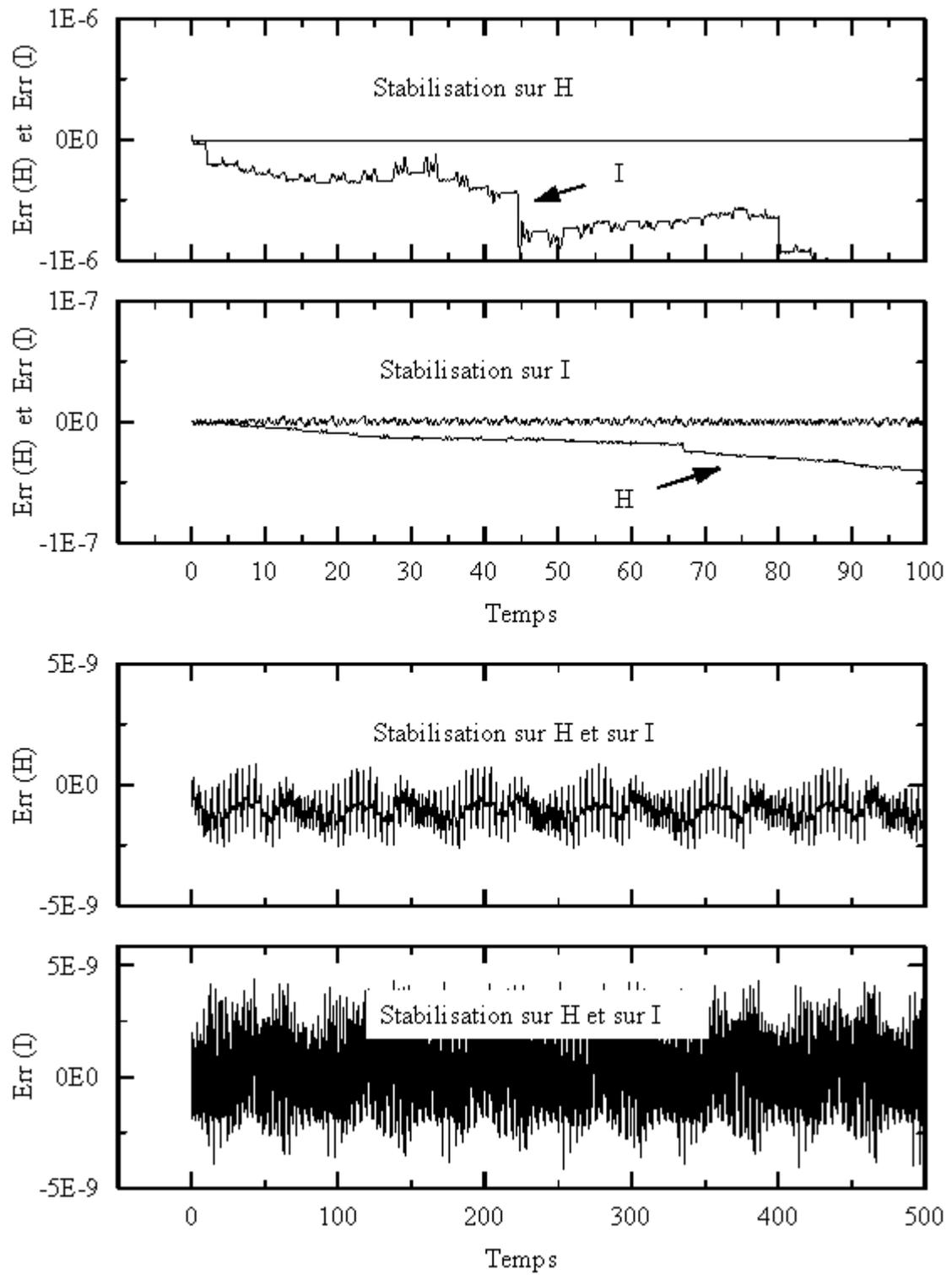


Figure 3.4: Conservation des intégrales H et I par ISPV0-5. La stabilisation de l'erreur est faite en fonction de H ou I en haut et en fonction de H et I en bas.

```

1 double PasISVarOIM (double v1[], double t1, double v2[], double *t2)
  /* Accomplit un pas d'intégration adaptif à extrapolation d'ordre 0. */
  {
2 double ErrTmp, Stepsize, Facteur, FacteurMin, DelErr, AbsDelErr, TolCible;
3 unsigned long NumSteps = 0; int Accepte, i;

4 while (NumSteps++ < NSTEPMAX) {
5   step (v1, t1, Stepsize, v2, t2); constante_mvt_multi (*t2, v2, IntMvt);

6   Accepte = 1; FacteurMin = FACTEURMAX;
7   for (i = 0; i < NUMINTMVT; i++) {
8     ErrTmp = relative_err (IntMvt[i], IntMvt0[i]) / tol;
9     ErrIntMvtTmp[i] = ErrTmp;
10    DelErr = ErrTmp - ErrIntMvt[i];
11    AbsDelErr = fabs(DelErr);

12    if (ErrTmp*DelErr < 0.0) TolCible = 1.0 - 0.5/(1.0 + fabs(ErrTmp)) + tolmin;
13    else TolCible = 0.5/(1.0 + fabs(ErrTmp)) + tolmin;

14    if (AbsDelErr < TolCible) { /* On accepte le pas et on prepare le suivant */
15      if (AbsDelErr > delmin) {
16        Facteur = S0*pow(TolCible/AbsDelErr, inv_ordre_p1);
17        if (Facteur > FACTEURMAX) Facteur = FACTEURMAX;
18      }
19      else Facteur = 1.1;
20    } /* Le pas a ete accepte. */

21    else { /* On refuse le pas et on prepare un autre essai. */
22      Accepte = 0; Facteur = S0*pow(TolCible/AbsDelErr, inv_ordre_p1);
23      if (Facteur < FACTEURMIN) Facteur = FACTEURMIN;
24    } /* Le pas a ete refuse. */

25    /* On retient le plus petit des pas proposes */
26    if (Facteur < FacteurMin) FacteurMin = Facteur;
27  } /* for (i = 0; i < NUMINTMVT; i++) */

29  Stepsize = Stepsize*FacteurMin;
29  if (Accepte) { /* On conserve quelques resultats pour un pas subsequent. */
30    for (i = 0; i < NUMINTMVT; i++)
31      ErrIntMvt[i] = ErrIntMvtTmp[i];
32    return (1);
33  }

34 } /* while */

35 printf_log ("ERREUR: Nombre maximal de pas atteint dans 'asISVarOIM'.\n");
36 return (0);

  } /* PasISVarOIM */

```

Figure 3.5: Réalisation en langage C de l'intégrateur symplectique à pas variable d'ordre 0 à intégrales multiples par la fonction PasISVarOIM().

La trajectoire évoluant dans le potentiel de Toda est maintenant intégrée numériquement de telle sorte qu'elle préserve tous les invariants. Toutes ces contraintes devraient confiner la trajectoire numérique à demeurer très près de la trajectoire exacte. Afin d'éclaircir tout ceci, nous considérons maintenant le problème de Kepler, plus simple, mais pour lequel un plus grand nombre d'intégrales du mouvement est disponible.

3.3 Problème de Kepler

Soit l'hamiltonien

$$H(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = \frac{1}{2}\mathbf{p}^2 - \frac{1}{r}.$$

Pour ce système, mise à part l'énergie $E = H$, les quantités suivantes sont conservées :

- Moment angulaire : $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$,
- Vecteur de Runge-Lenz-Pauli : $\mathbf{A} = \mathbf{p} \times \mathbf{L} - \mathbf{r}/r$.

On se rappellera aussi de l'expression de l'excentricité, ϵ , qui peut s'écrire en termes des variables conservées, à savoir

$$\epsilon = \sqrt{1 + 2EL^2} \quad . \quad (3.6)$$

Parmi les 7 quantités conservées $\{E, \mathbf{L}, \mathbf{A}\}$, seulement 5 d'entre elles sont indépendantes puisque deux contraintes s'appliquent

$$\mathbf{L} \cdot \mathbf{A} = 0, \quad A^2 = 1 + 2EL^2 = \epsilon^2 \quad . \quad (3.7)$$

Cinq paramètres sont ainsi nécessaires pour spécifier complètement la grandeur, l'orientation et l'excentricité d'une orbite.

3.3.1 Restriction dans le plan et choix des orbites

Pour ce que nous sommes intéressés à faire, il nous suffit de considérer uniquement le mouvement dans le plan xy . On a alors $l_x = l_y = A_z = 0$ et les quantités conservées sont

- E ,
- $l_z = xp_y - yp_x$,
- $A_x = p_y l_z - x/r$,
- $A_y = -p_x l_z - y/r$.

avec $\epsilon = \sqrt{1 + 2El_z^2}$. La grande symétrie du problème de Kepler permet encore de simplifier le choix des conditions initiales. A une énergie $H = E$ donnée (dans cette étude, nous considérons exclusivement des orbites fermées, donc d'énergie négative) si on choisit de faire en sorte que l'orbite soit alignée selon l'axe des y , il suffit alors d'imposer

$$x_0 = 0, \quad p_{0y} = 0 \quad (3.8)$$

puisqu'alors

$$A_{0x} = p_{0y} l_{0z} - x_0/r_0 = 0. \quad (3.9)$$

Il ne reste qu'à choisir y_0 qui est contraint par

$$p_{0x}^2 = 2 \left[E + \frac{1}{|y_0|} \right] \geq 0 \quad (3.10)$$

ou encore

$$|y_0| \leq -\frac{1}{E}. \quad (3.11)$$

Notons que l'excentricité de l'orbite est fixée par E et y_0 puisque

$$\epsilon = \sqrt{1 + 2El_{0z}^2} = \sqrt{1 + 4E^2 y_0^2 + 4E|y_0|} \quad . \quad (3.12)$$

Notre choix se porte sur les conditions initiales résumées dans le tableau 3.1 et les

	E_0	τ_0	y_0	l_{0z}	ϵ_0	A_{0x}	A_{0y}
Orbite 1	-1	$\pi/\sqrt{2} \sim 2.22$	-0.3	0.648	0.4	0	-0.4
Orbite 2	-1	$\pi/\sqrt{2} \sim 2.22$	-0.05	0.308	0.9	0	-0.9

Tableau 3.1: Conditions initiales pour l'intégration des orbites de Kepler.

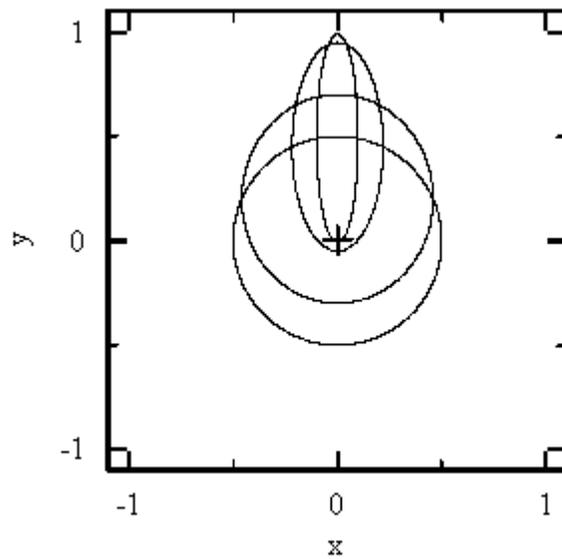


Figure 3.6: Les orbites de Kepler utilisées pour les tests sont tracées en gras.

orbites associées sont illustrées en gras sur la figure 3.6. La période des orbites ne dépend que de l'énergie avec $\tau = 2\pi \left(\frac{1}{2|E|} \right)^{3/2}$.

3.3.2 Intégrateurs symplectiques et conservation des intégrales du mouvement

Pour donner suite à ce que nous avons fait dans les sections précédentes pour le potentiel de Toda, nous présentons ici les résultats démontrant les performances de différents intégrateurs symplectiques pour conserver les intégrales du mouvement.

Le premier intégrateur testé est l'intégrateur symplectique à pas fixe d'ordre 5 (ISPF-5) introduit au chapitre 2. La figure 3.7 montre l'évolution des intégrales du mouvement H, A_x et A_y pour les deux orbites définies dans le tableau 3.1. Notons que dans tous les tests réalisés pour le problème de Kepler, le moment angulaire l_z est parfaitement conservé et l'erreur correspondante n'est par conséquent jamais tracé sur les figures. Ceci peut provenir du fait que le terme d'erreur pour le moment angulaire est trop petit pour être numériquement significatif ou encore qu'il existe une relation entre le moment angulaire et les invariants de Poincaré préservés par tout intégrateur symplectique (voir début chapitre 2).

Les résultats sont néanmoins assez surprenants. Contrairement au cas du potentiel de Toda, les intégrales autres que l'énergie E et le moment angulaire l_z ne sont pas du tout conservées. En fait, la non-préservation des quantités A_x et A_y indique une précession des orbites puisque A^2 est conservé ($A^2 = \epsilon^2$, $\epsilon^2 = 1 + 2El_z^2$, E et l_z sont conservés). La dérive la plus forte concerne l'orbite la plus excentrique dans tous les cas.

Les figures 3.8 et 3.9 montrent les résultats pour la même expérience accomplie cette fois à l'aide d'un intégrateur symplectique à pas variables d'ordre 5 (ISPV0-5 du chapitre 2). Le pas est adapté en fonction de la conservation des intégrales E et A_x respectivement. Le fait de confiner une seule intégrale du mouvement ne semble pas suffir à préserver toutes les autres.

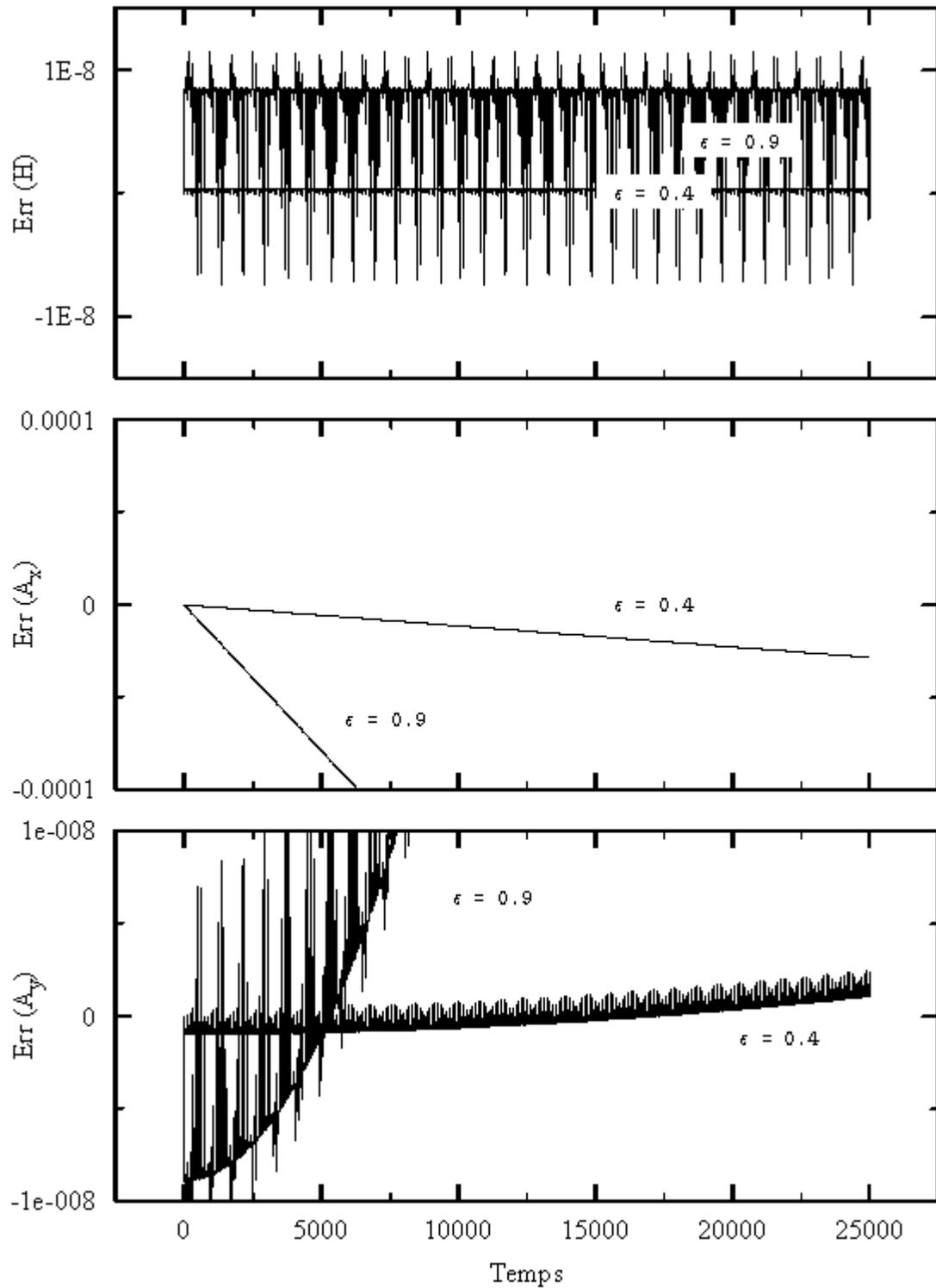


Figure 3.7: Conservation des intégrales par un intégrateur symplectique à pas fixe.

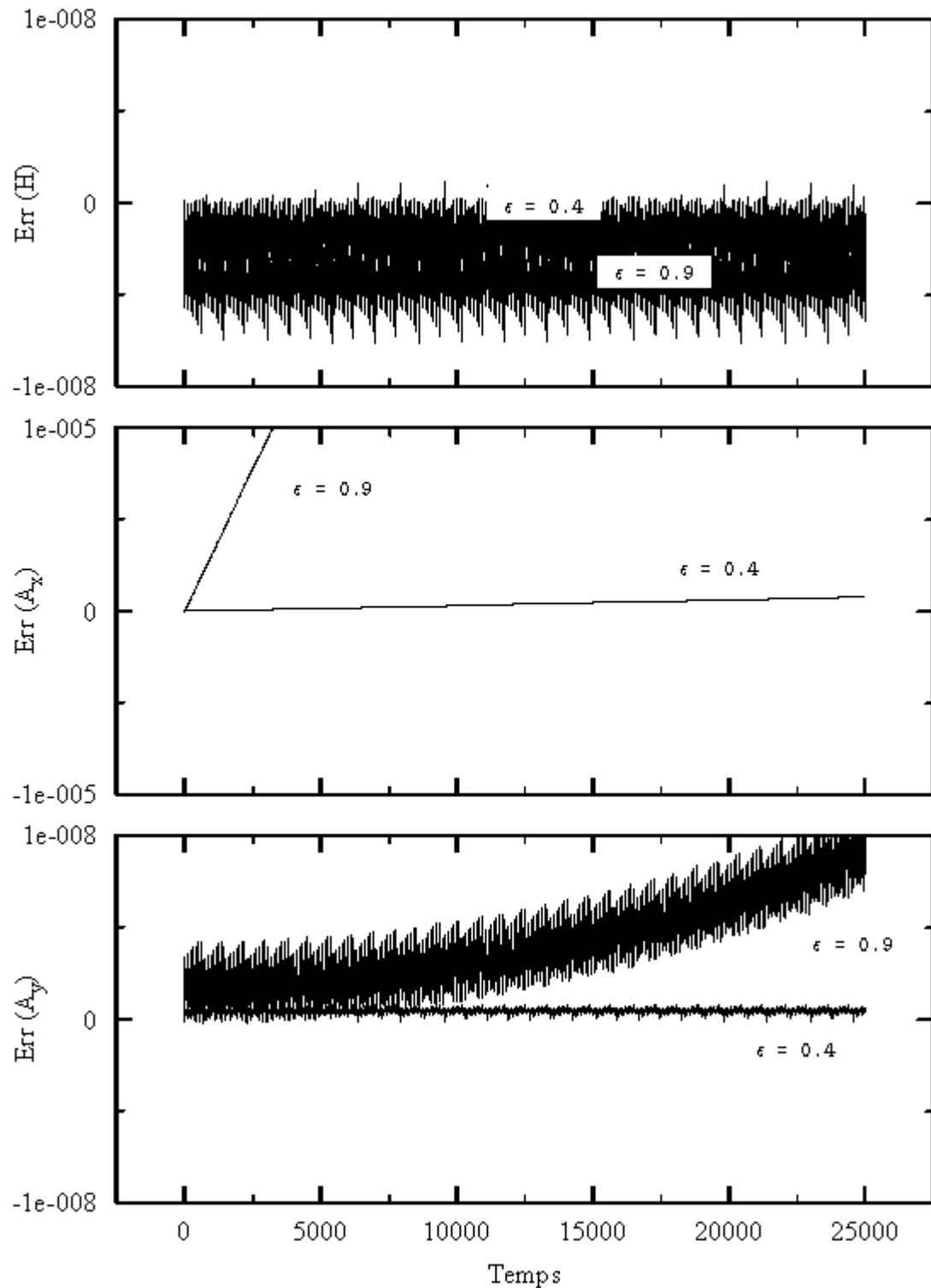


Figure 3.8: Conservation des intégrales par un intégrateur symplectique à pas variable d'ordre 5. La tolérance est fixée à 10^{-9} et l'intégrale du mouvement H est utilisée pour faire varier le pas d'intégration.

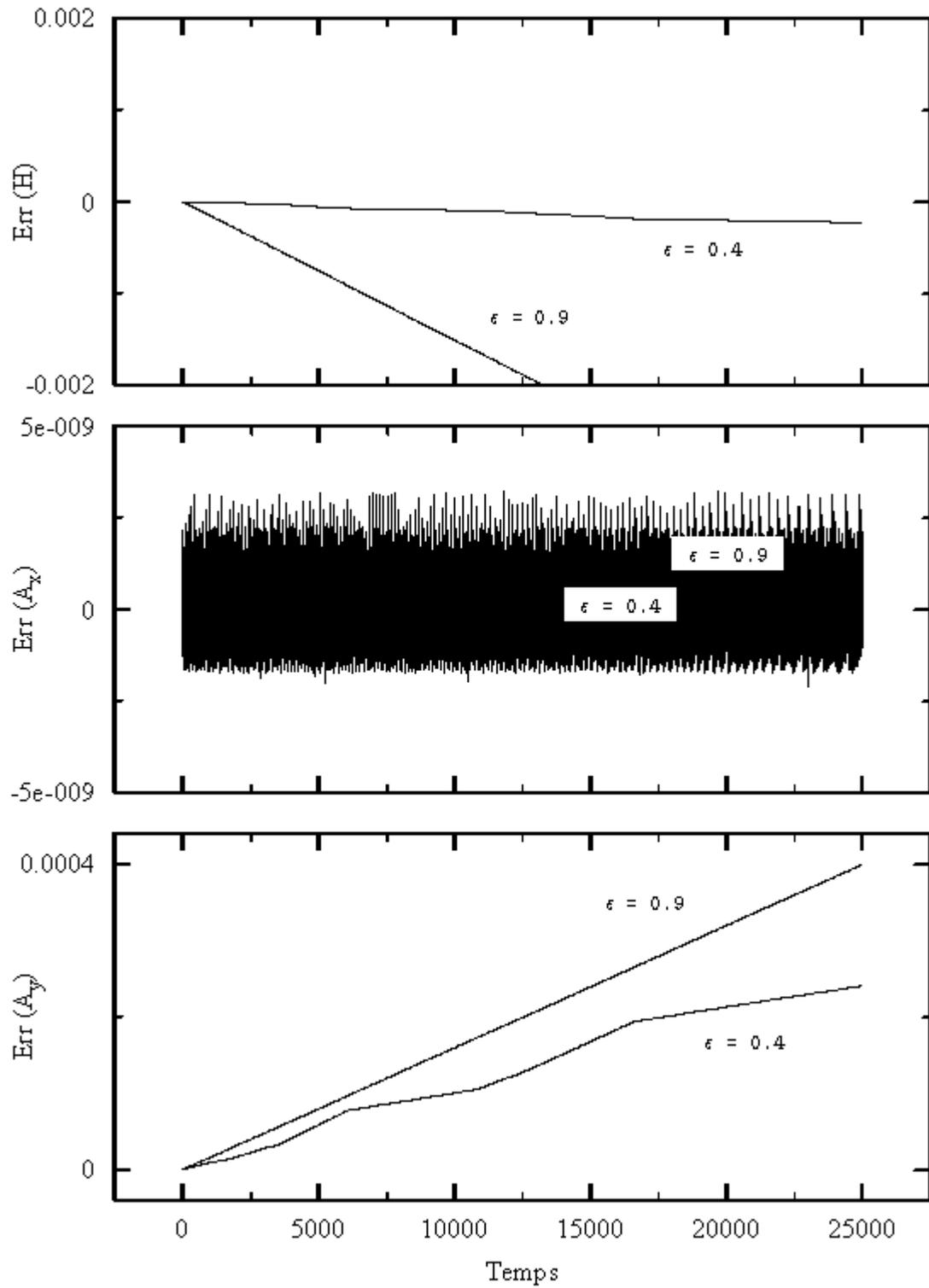


Figure 3.9: Idem que la figure 3.8 mais le pas d'intégration est adapté en fonction de l'intégrale du mouvement A_x .

La figure 3.10 montre toujours la même expérience, mais ici, 2 *intégrales du mouvement* sont prises en compte par l'intégrateur adaptif. Toutes les intégrales sont préservées et donc, à la précision imposée, la trajectoire numérique correspond à la trajectoire exacte.

3.4 Récapitulatif

Dans ce chapitre, nous avons examiné empiriquement la préservation des intégrales du mouvement par les mécanismes d'intégrations symplectiques développés dans le chapitre précédent. Le système hamiltonien de Toda et le problème de Kepler ont été considérés pour les simulations numériques.

Il s'avère que pour Toda, l'intégration symplectique à pas fixe (ISPF) suffit à assurer la préservation de la 2^{ème} intégrale du mouvement. Dans le cas du problème de Kepler toutefois, l'ISPF ne suffit pas et un intégrateur symplectique adaptif qui préserve 2 intégrales du mouvement doit être utilisé pour assurer la conservation de toutes les intégrales du mouvement.

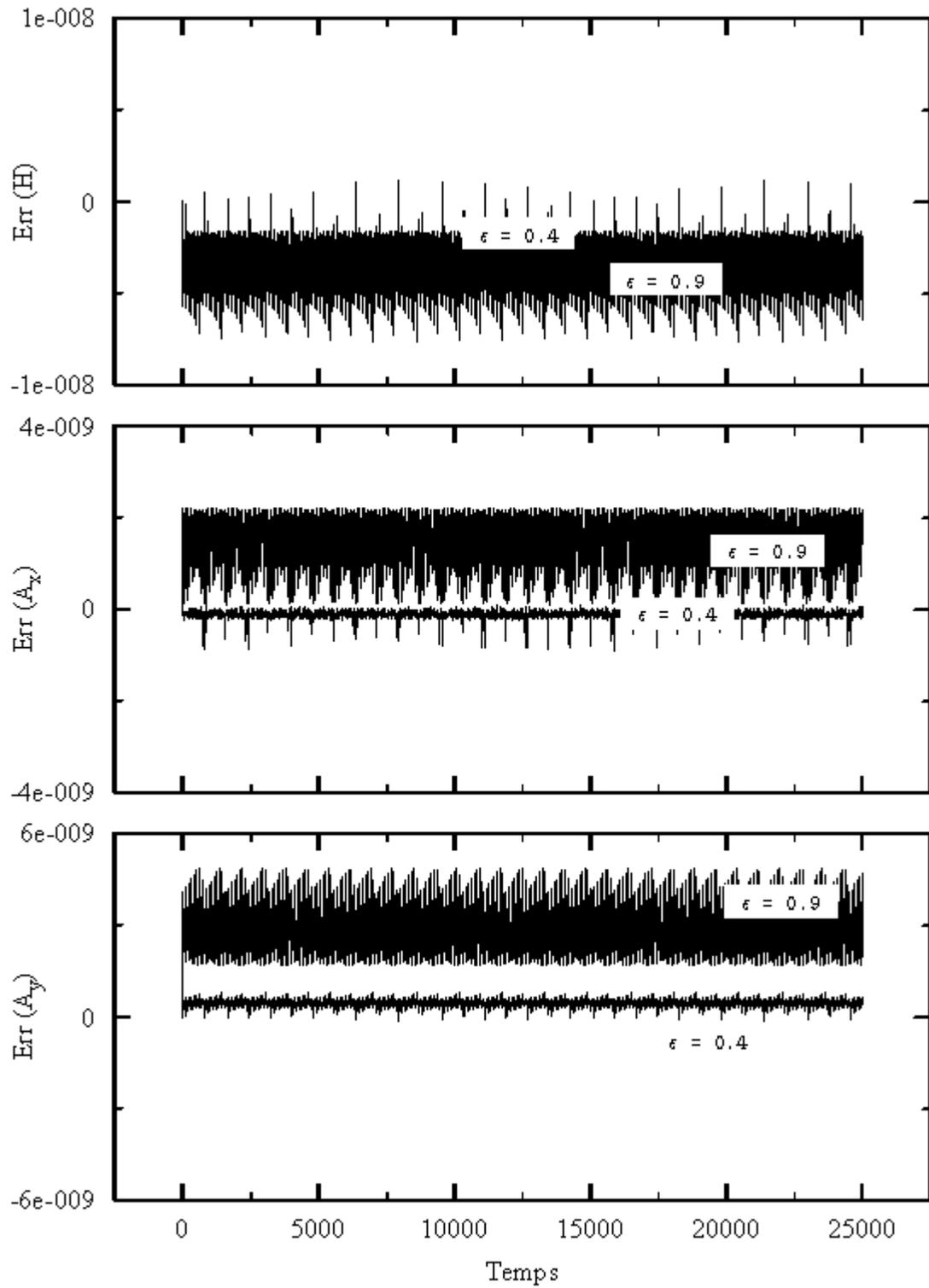


Figure 3.10: Idem que la figure 3.8 mais le pas d'intégration est adapté en fonction des intégrales du mouvement H et A_x .

Chapitre 4

Transition stochastique des systèmes hamiltoniens

Nous revenons maintenant à l'étude de la stabilité de l'espace des phases entreprise au chapitre 1. Un critère de stabilité locale y avait été développé pour tenter de prévoir le seuil d'énergie transverse nécessaire à ce qu'une partie de l'espace des phases soit chaotique. Ici, nous étudions cette transition stochastique de façon plus systématique, en nous basant sur un critère de stabilité non plus local mais plutôt global. Ce critère considère la moyenne temporelle de la divergence exponentielle entre une trajectoire de référence et une perturbation de celle-ci. Il permet une discrimination claire entre trajectoires stables et chaotiques.

Nous établissons d'abord le lien entre les exposants de Lyapunov, bien reconnus pour quantifier de façon fiable la stabilité des systèmes déterministes, et la moyenne temporelle de la divergence exponentielle, plus utile dans un contexte de simulations numériques. Pour le cas du potentiel correspondant à la configuration de canalisation $Q^+ + \text{Si}\langle 100 \rangle$, les étapes menant au tracé de la courbe de transition stochastique sont élaborées. Nous introduisons d'abord une façon commode de visualiser la stabilité de l'espace des phases sous forme de densité de probabilité et définissons ensuite un critère fiable sur la stabilité globale des trajectoires. Les résultats pour les configurations de canalisation $Q^+ + \text{Si}\langle 111 \rangle$ et $Q^- + \text{Si}\langle 110 \rangle$ sont finalement présentés. Quelques commentaires sont faits sur le lien entre les densités de probabilité et l'ergodicité probable

de certaines trajectoires chaotiques.

4.1 Stabilité globale et exposant de Lyapunov

Une bonne évaluation de la stabilité globale d'un système dynamique passe par l'évaluation des exposants de Lyapunov. Ces nombres donnent la dilatation moyenne de chacun des axes propres à une hyper-sphère définie dans l'espace des phases. Une bonne introduction aux exposants de Lyapunov se trouve dans Eckmann et Ruelle [1985] ou Wolf *et al.* [1985]. Les travaux originaux de Casartelli *et al.* [1976] et Benettin *et al.* [1976] sont aussi très accessibles. Une revision plus rigoureuse des méthodes utilisées pour les calculer numériquement est présentée dans un article de Geist *et al.* [1990]. Récemment, on a aussi développé une méthode spécifiquement conçue pour les systèmes hamiltoniens en particulier [Habib et Ryne, 1995].

4.1.1 Taux moyen de divergence exponentielle

Pour qu'une trajectoire soit chaotique ou instable, il faut qu'au moins un de ses exposants de Lyapunov soit positif. En fait, dans le cas qui nous intéresse, il suffit de considérer l'exposant le plus grand pour conclure de la stabilité d'une trajectoire. Voici une adaptation de la méthode développée par Casartelli *et al.* [1976] pour obtenir ce qu'ils ont nommé le *paramètre stochastique*, une quantité que Benettin *et al.* [1976] ont pu identifier à l'exposant de Lyapunov le plus élevé. D'ailleurs, la dénomination, exposant de Lyapunov (au singulier), sert généralement à identifier l'exposant le plus élevé.

Nous avons déjà considéré dans le premier chapitre la divergence exponentielle entre 2 trajectoires

$$d(t) = d(0)e^{\lambda t}$$

où $d(t)$ est la distance entre une trajectoire de référence $x(t)$ et une trajectoire perturbée

$y(t)$, i.e.

$$d(t) = |y(t) - x(t)|.$$

Notons que les variables x et y représentent des vecteurs dans l'espace des phases, soit des quadri-vecteurs dans le cas qui nous préoccupe. Contrairement au chapitre 1 nous considérons ici cette divergence d'un point de vue global plutôt que local.

Oseledec [1968] a démontré que la limite

$$\lambda = \lim_{\substack{t \rightarrow \infty \\ d(0) \rightarrow 0}} \frac{1}{t} \ln \left(\frac{d(t)}{d(0)} \right)$$

existe et tend vers le nombre appelé depuis, *exposant de Lyapunov*. Toutefois, cette définition ne se prête guère aux simulations numériques pour lesquelles il n'est pas possible de laisser tendre à la fois le temps vers l'infini et la distance $d(0)$ vers zéro. Puisque l'exposant de Lyapunov mesure le taux moyen de divergence exponentielle, Casartelli *et al.* [1976] ont donc proposé de le mesurer par

$$\lambda \simeq \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{1}{\tau} \ln \frac{d(t_i)}{d(0)} \quad (4.1)$$

où τ est le pas d'intégration et $t_{i+1} = t_i + \tau$. Pour que le processus converge, il faut que $y(t_i)$ soit ajusté pour que le vecteur $y(t_i) - x(t_i)$ soit normé à $d(0)$ avant chaque pas d'intégration $x(t_i) \mapsto x(t_{i+1})$ et $y(t_i) \mapsto y(t_{i+1})$. Il faut aussi bien sur que τ et $d(0)$ soient suffisamment petits. Le vecteur initial $y(0) - x(0)$ peut être choisi de façon aléatoire puisqu'il s'alignera rapidement dans la direction instable s'il y en a une. Ici encore, dans un contexte de simulation numérique, il n'est pas possible de laisser tendre N vers l'infini mais la convergence est assez rapide dans la plupart des cas pour que la prescription de Benettin

$$\lambda_T^{\text{BEN}} \equiv \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{1}{\tau} \ln \frac{d(t_i)}{d(0)}, \quad T = N\tau \quad (4.2)$$

définissant l'exposant de Lyapunov à temps fini soit utile.

4.1.2 Exposant de Lyapunov et intégration à pas variable

Nous sommes intéressés par la stabilité des trajectoires évoluant dans les potentiels cristallins définis dans le chapitre 1. En particulier, nous désirons connaître l'influence d'un paramètre comme l'énergie transverse sur la stabilité de tout l'espace des phases. Pour alléger le texte, nous adoptons désormais la notation suivante pour identifier les potentiels correspondant à chaque configuration de canalisation :

- $V_{\text{Si}<100>}$: Configuration $Q^+ + \text{Si}<100>$,
- $V_{\text{Si}<111>}$: Configuration $Q^+ + \text{Si}<111>$,
- $V_{\text{Si}<110>}$: Configuration $Q^- + \text{Si}<110>$.

Puisque nous ne sommes intéressés que par le mouvement dans le plan transverse nous définissons désormais

$$E \equiv E_{\perp}.$$

Un potentiel très escarpé comme $V_{\text{Si}<110>}$ (voir figure 1.8) requiert que l'on utilise un intégrateur adaptif pour évaluer les trajectoires. Pour tout le traitement numérique qui suit, l'intégrateur symplectique d'ordre 5 à pas variable d'ordre 0 (ISPV0-5) développé dans le chapitre 2 est utilisé avec un facteur de tolérance $\epsilon = 10^{-9}$.

Puisque l'intégration numérique est faite par pas d'intégration variable, nous modifions légèrement la façon d'obtenir le taux moyen de divergence exponentielle. Le poids statistique attribué à chaque pas d'intégration est maintenant variable et la prescription (4.2) pour l'exposant de Lyapunov à temps fini devient

$$\begin{aligned} \lambda_T &\equiv \sum_i \frac{\tau_i}{T} \frac{1}{\tau_i} \ln \left(\frac{d_i}{d_0} \right), & T &= \sum_i \tau_i \\ &= \frac{1}{T} \sum_i \ln \left(\frac{d_i}{d_0} \right) \end{aligned} \quad (4.3)$$

où τ_i est tel que $t_i = t_{i-1} + \tau_i$ et $d_i \equiv d(t_i)$.

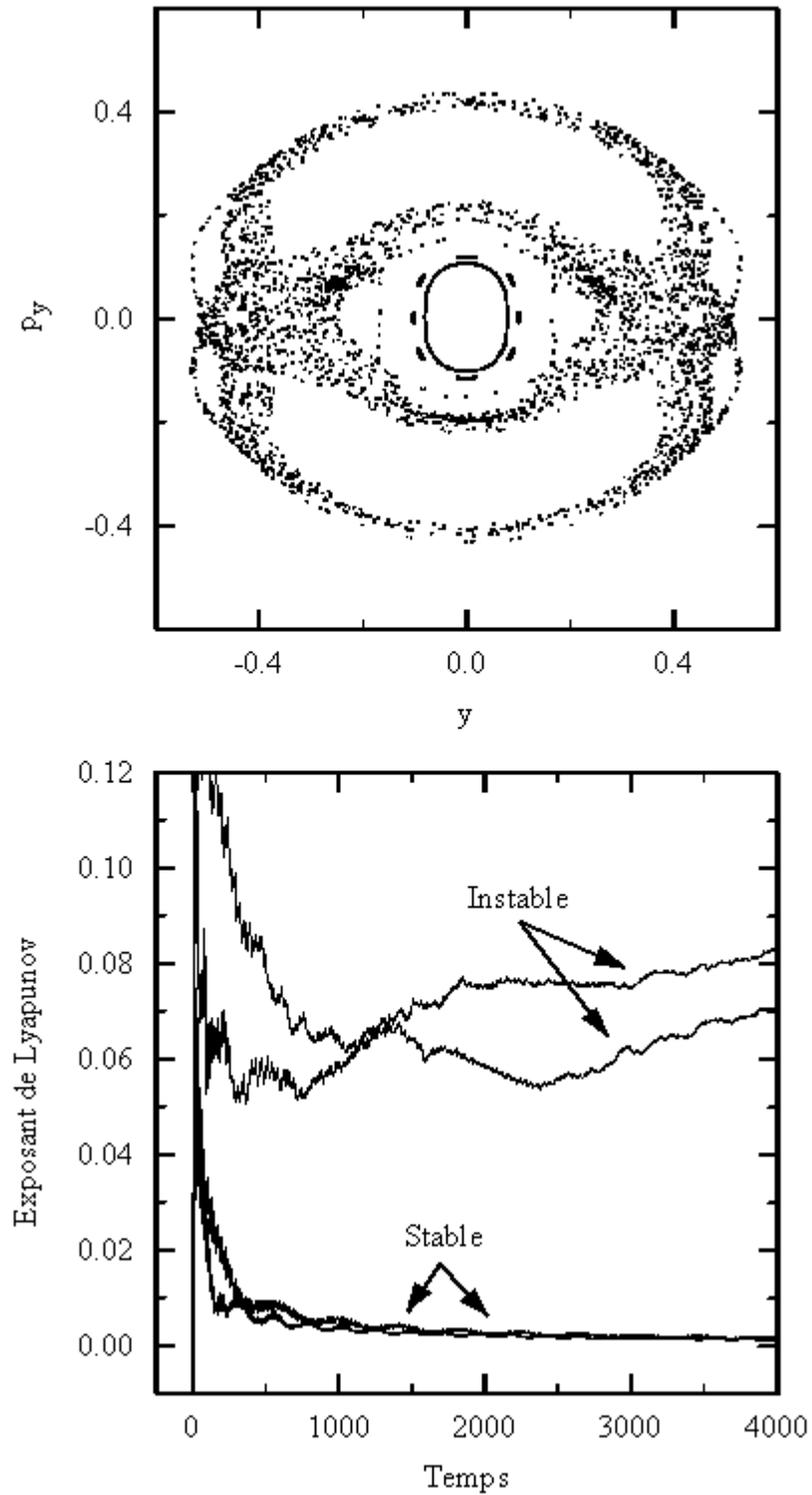


Figure 4.1: Stabilité globale pour 2 trajectoires stables et 2 trajectoires instables évoluant dans le potentiel $V_{S_i < 100 \rangle}$ à $E = 3/4V_S$. En haut : Intersection entre les trajectoires et la section $x = 0$. En bas : Evolution de l'exposant de Lyapunov à temps fini.

La figure 4.1 montre l'efficacité avec laquelle λ_T discrimine 2 trajectoires chaotiques de 2 trajectoires stables. Les conditions initiales pour les trajectoires chaotiques sont prises dans la bande stochastique de la section de Poincaré $x = 0$ pour le potentiel $V_{\text{Si}<100>}$ à $E = 3/4V_S$ (voir figure 1.12). On y remarque aussi que l'exposant correspondant aux 2 trajectoires stables converge vers 0 en $1/t$. On pourrait donc être tenté d'accélérer la convergence en extrapolant la fonction $\lambda_T(1/t)$ en $1/t = 0$ pour obtenir $\lambda_T(t \rightarrow \infty)$. Toutefois, les imprécisions numériques et l'arbitraire dans la façon d'estimer l'extrapolation, font en sorte qu'il est préférable et plus simple de considérer directement λ_T à un temps fini donné, pour établir la stabilité ou l'instabilité d'une trajectoire.

Comme nous l'avons déjà mentionné, il faut que les paramètres τ (τ_i) et d_0 soient suffisamment petits pour que le processus permettant le calcul du taux moyen de divergence converge. Dans le cas de τ_i , le paramètre est ajusté par l'intégrateur adaptatif qui s'assure que chaque pas d'intégration soit assez petit pour que le critère de tolérance sur l'intégration soit respecté. Il est raisonnable de supposer que chaque pas soit alors être assez petit pour que l'hypothèse de divergence exponentielle soit valide. Pour la distance d_0 , il s'agit qu'elle permette l'évaluation du rapport d_i/d_0 avec un maximum de résolution numérique, tant en contraction ($d_i < d_0$) qu'en dilatation ($d_i > d_0$). Sur la plupart des ordinateurs, une précision d'environ 10^{-12} permet des calculs robustes et nous suggérons donc la valeur mitoyenne $d_0 = 10^{-6}$.

La figure 4.2 montre la moyenne des exposants de Lyapunov associés à 100 trajectoires pour différentes valeurs de tolérance et de d_0 . Les trajectoires sont soumises au potentiel

$$V_{\text{QUASI-K}} = \frac{1}{2}x^2y^2 + \frac{1}{100}(x^2 + y^2)$$

qui est une version perturbée du potentiel quartique $\frac{1}{2}x^2y^2$ (voir figure 1.9). On a longtemps cru que ce dernier engendrait un espace des phases complètement chaotique. La composante harmonique $1/100(x^2 + y^2)$ est en fait ajoutée au potentiel quartique pour le refermer et assurer des temps d'intégration numérique raisonnables. Les conditions initiales sont uniformément échantillonnées sur la section $x = 0$ pour $E = 1$ avec

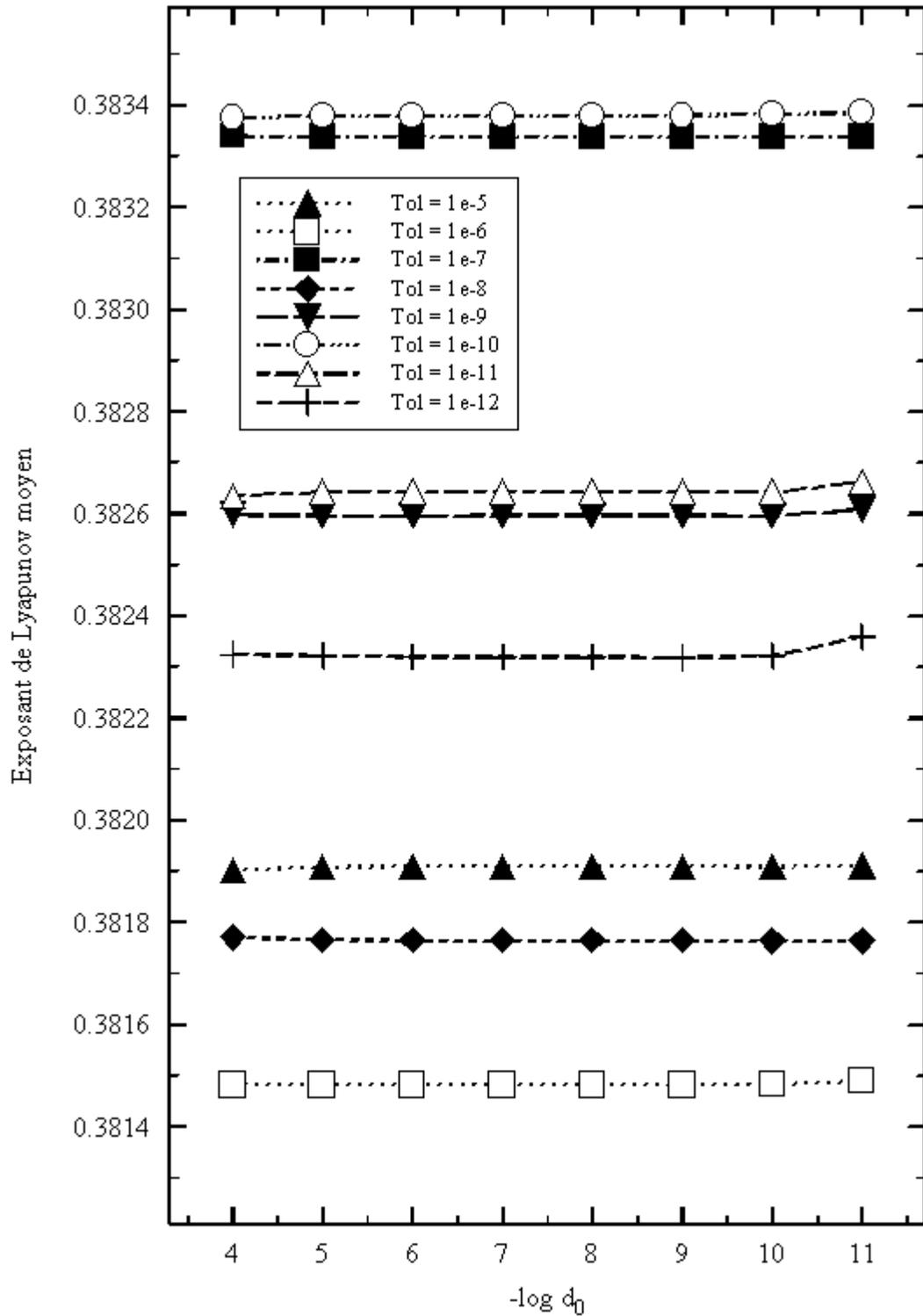


Figure 4.2: Dépendance en d_0 de l'exposant de Lyapunov moyenné pour 100 trajectoires chaotiques évoluant dans le potentiel $V_{\text{QUASI-K}}$. L'intégrateur ISPV0-5 est utilisé à différents facteurs de tolérance pour chacune des 100 trajectoires.

$p_x = \pm\sqrt{2(E - V(0, y)) - p_y^2}$. On constate que les exposants ne dépendent pas du tout de d_0 . La valeur précise de λ_T associée à chacune des trajectoires chaotiques dépend toutefois de l'historique de celles-ci. Cette sensibilité des trajectoires chaotiques se reflète alors par le fait que la tolérance influence la moyenne des exposants. La dépendance n'est toutefois pas fonctionnelle mais plutôt stochastique, et chaque valeur de tolérance implique un historique (exponentiellement) différent pour chaque trajectoire. L'écart type pour les distributions est de l'ordre de $\sigma = 0.008$ dans tous les cas. Si on considère que les différentes tolérances génèrent en fait différentes trajectoires pour les mêmes conditions initiales, on a une distribution assez compacte de 800 exposants de Lyapunov entre 0.37 et 0.39 environ.

4.2 Transition stochastique : potentiel $V_{\text{Si}<100>}$

La discussion précédente ouvre la porte au type d'analyse dynamique que nous désirons faire de nos systèmes cristallins. Nous voulons voir comment évolue la stabilité de l'espace des phases en fonction de l'énergie. Dans cette section, nous montrons la démarche prise pour en arriver aux courbes de transition stochastique pour le cas du potentiel $V_{\text{Si}<100>}$. Pour les autres potentiels, la même démarche est utilisée et les résultats sont présentés dans les prochaines sections. Nous procédons essentiellement de la manière suivante :

1. à diverses valeurs d'énergie, un grand ensemble de conditions initiales dans l'espace des phases est échantillonné.
2. chacune de ces conditions initiales est intégrée pour obtenir l'exposant de Lyapunov à temps fini λ_T lui correspondant.
3. à l'aide d'une courbe de probabilité cumulative $P(\lambda_T < \lambda)$ regroupant les résultats pour les diverses valeurs d'énergie, on détermine le seuil de stabilité $\lambda_{T,C}$ à partir duquel les trajectoires sont catégorisées comme étant chaotiques.

4. on trace la probabilité $P(\lambda_T < \lambda_{T,C})$ en fonction de l'énergie.

4.2.1 Simulation Monte-Carlo et distribution de Lyapunov

La première étape est donc d'échantillonner l'espace des phases. Une approche naturelle est de considérer un échantillonnage simple dans le plan $x = 0$,

$p_x = \pm \sqrt{2(E - V(0, y)) - p_y^2}$ pour différentes valeurs en énergie. Ceci nous permet de directement comparer les résultats avec les sections de Poincaré du chapitre 1 (voir figure 1.13). La figure 4.3 présente un histogramme montrant la distribution $\lambda_{T=4000}$ pour 1000 trajectoires évoluant dans le potentiel $V_{\text{Si}<100>}$ avec $E = 3/4V_S$. Nous constatons qu'environ $107 \times 0.005 \sim 53\%$ des trajectoires se retrouvent dans l'intervalle $[0, 0.005]$ et on peut supposer qu'elles sont stables.

4.2.2 Densité de Lyapunov

Bien qu'étant facile à interpréter, l'histogramme de la figure 4.3 ne permet pas de caractériser parfaitement l'allure de cette distribution. En effet, il ne montre pas avec précision la valeur de λ_T correspondant aux trajectoires stables. De plus, pour le construire, il faut spécifier une largeur caractéristique Δ et la position de la première colonne. Aussi nous avons développé une autre approche permettant une bonne visualisation de la valeur de λ_T prise par les trajectoires stables, demandant seulement une spécification de la largeur caractéristique Δ .

Considérons la distribution triangulaire

$$\rho_{\text{TRI}}(x) = \begin{cases} \frac{1}{\Delta} \left(1 - \frac{|x|}{\Delta}\right) & \text{si } |x| < \Delta \\ 0 & \text{autrement} \end{cases} \quad (4.4)$$

dont la largeur à mi-hauteur est Δ et pour laquelle on a

$$\int_{-\infty}^{\infty} \rho_{\text{TRI}}(x) dx \equiv 1.$$

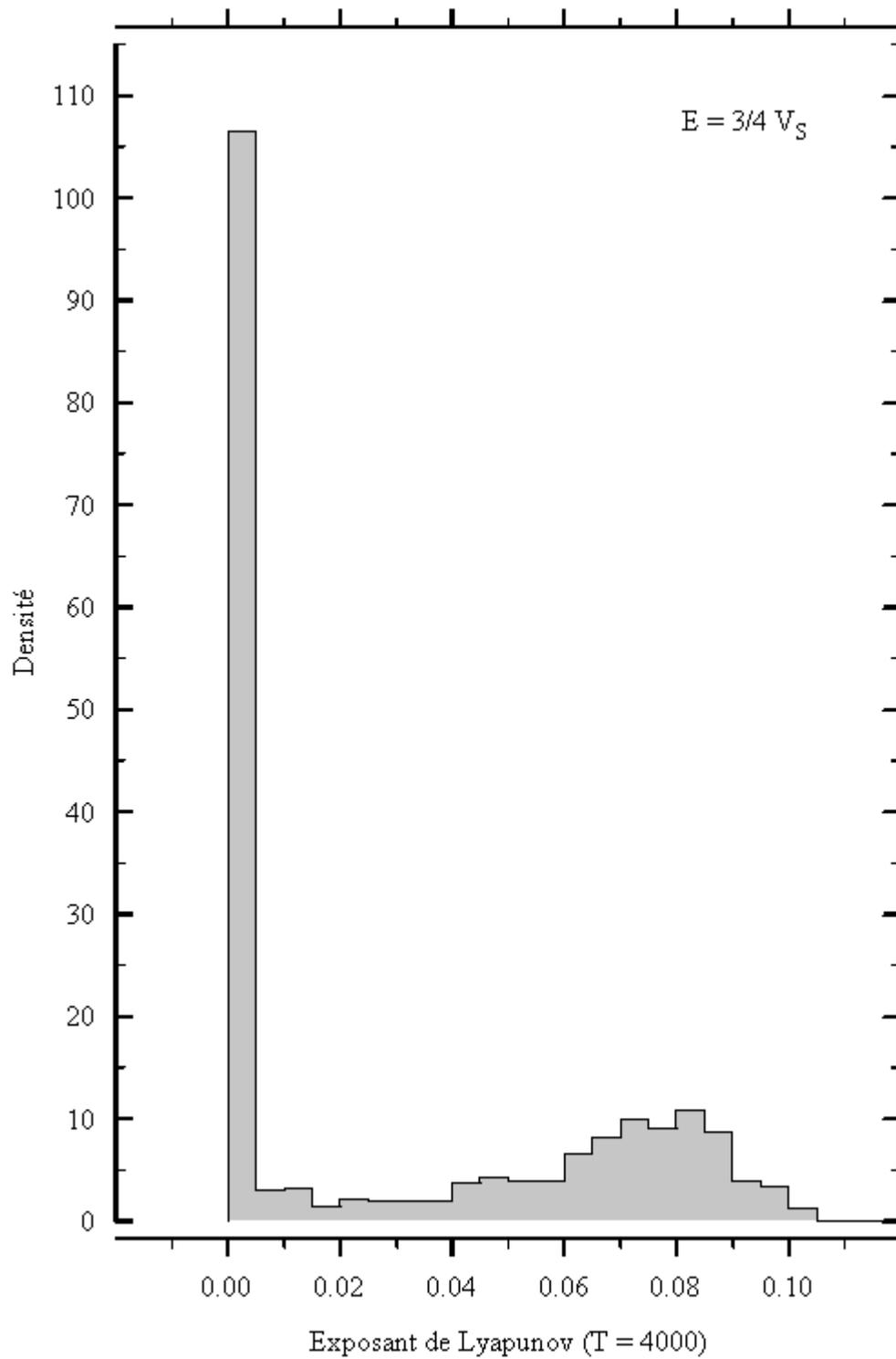


Figure 4.3: Histogramme montrant la distribution des exposants de Lyapunov pour 1000 trajectoires évoluant dans le potentiel $V_{Si<100>}$. Les conditions initiales sont échantillonnées uniformément sur la section $x = 0$. La largeur des colonnes est $\Delta = 0.005$.

Une courbe de densité peut alors être estimée de l'ensemble de N valeurs λ_T^i par

$$\rho_T(\lambda) \equiv \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \rho_{\text{TRI}}(\lambda_T^i - \lambda).$$

La figure 4.4 présente la courbe de densité correspondant à l'histogramme de la figure 4.3. Le pic principal est essentiellement un triangle dont la surface peut être obtenue par le produit de la largeur à mi-hauteur avec la hauteur, soit environ 50%. De plus, le début et la fin de la courbe nous indiquent que la première et la dernière observation se retrouvent respectivement à $\lambda_{\min} + 0.005$ et $\lambda_{\max} - 0.005$ exactement. Plus important toutefois, la position du pic indique précisément la valeur de λ_T prise par de la majorité des trajectoires stables. La figure 4.5 montre l'évolution de la même courbe de densité en fonction de T . On y constate la convergence de la distribution des λ_T en fonction du temps.

La densité de Lyapunov peut donc être utile pour résumer la stabilité de l'espace des phases et permet entre autre une bonne appréciation de la portion stable de ce dernier. La figure 4.6 montre la densité de Lyapunov à différentes énergies pour $T = 5000$. On y constate aisément la diminution de la stabilité avec l'augmentation de l'énergie. Ces courbes de densité peuvent être directement comparées aux sections de Poincaré tracées sur la figure 1.13. On remarque par ailleurs, que la valeur de λ_T associée aux trajectoires chaotiques dépend de l'énergie mais ceci ne semble pas être le cas pour les trajectoires stables. Un critère de stabilité indépendant de l'énergie peut donc être défini.

4.2.3 Critère de stabilité globale

Considérons la probabilité cumulative

$$P_T(\lambda) \equiv P(\lambda_T < \lambda)$$

où $P(\lambda_T < \lambda)$ est simplement le rapport entre le nombre de valeurs $\lambda_T < \lambda$ et le nombre total de valeurs λ_T . La figure 4.7 montre $P_T(\lambda)$ en fonction de λ à différentes

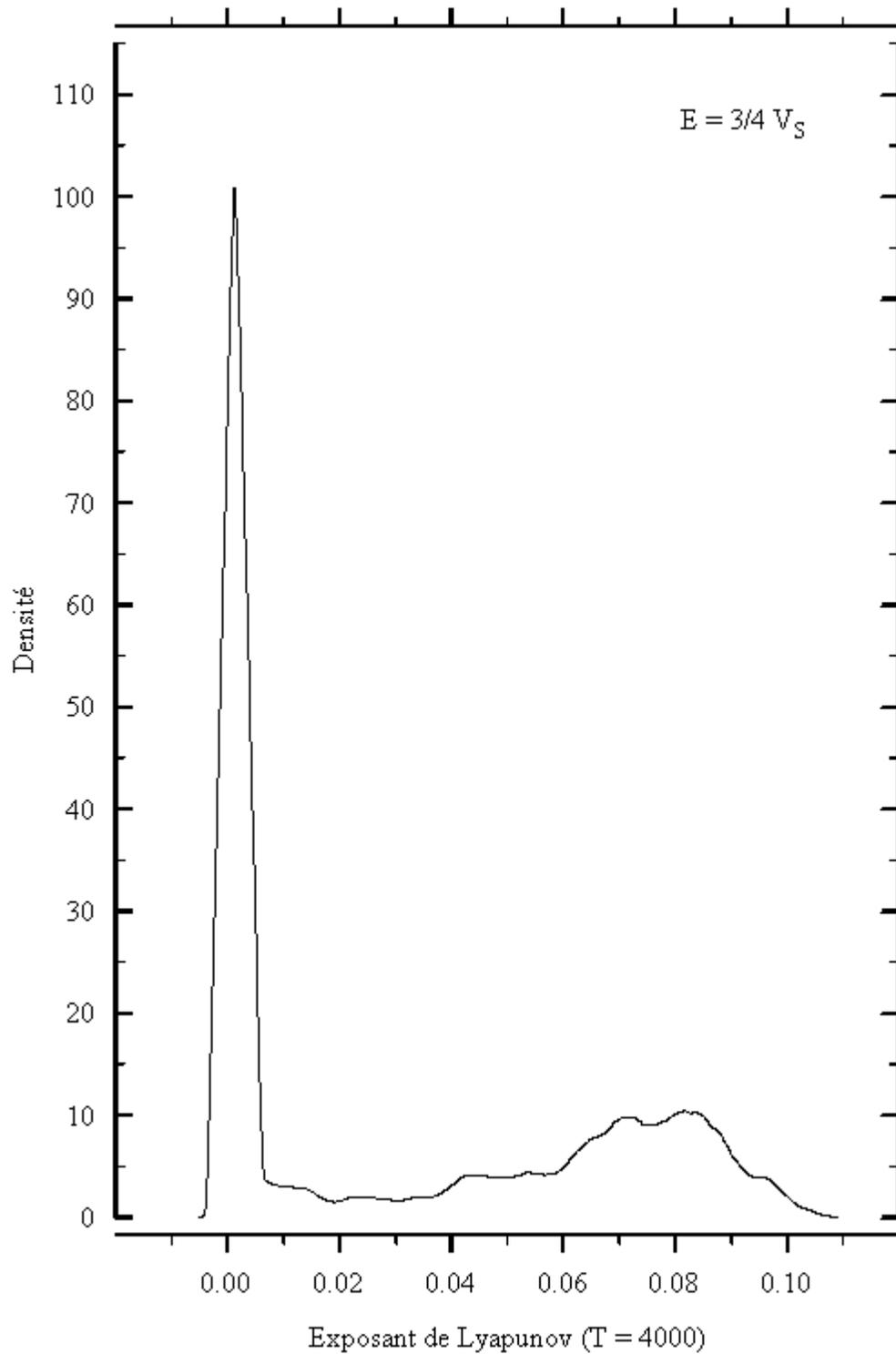


Figure 4.4: Courbe de densité de Lyapunov correspondant à l'histogramme de la figure 4.3. L'estimé utilise la distribution triangulaire avec une largeur caractéristique $\Delta = 0.005$.

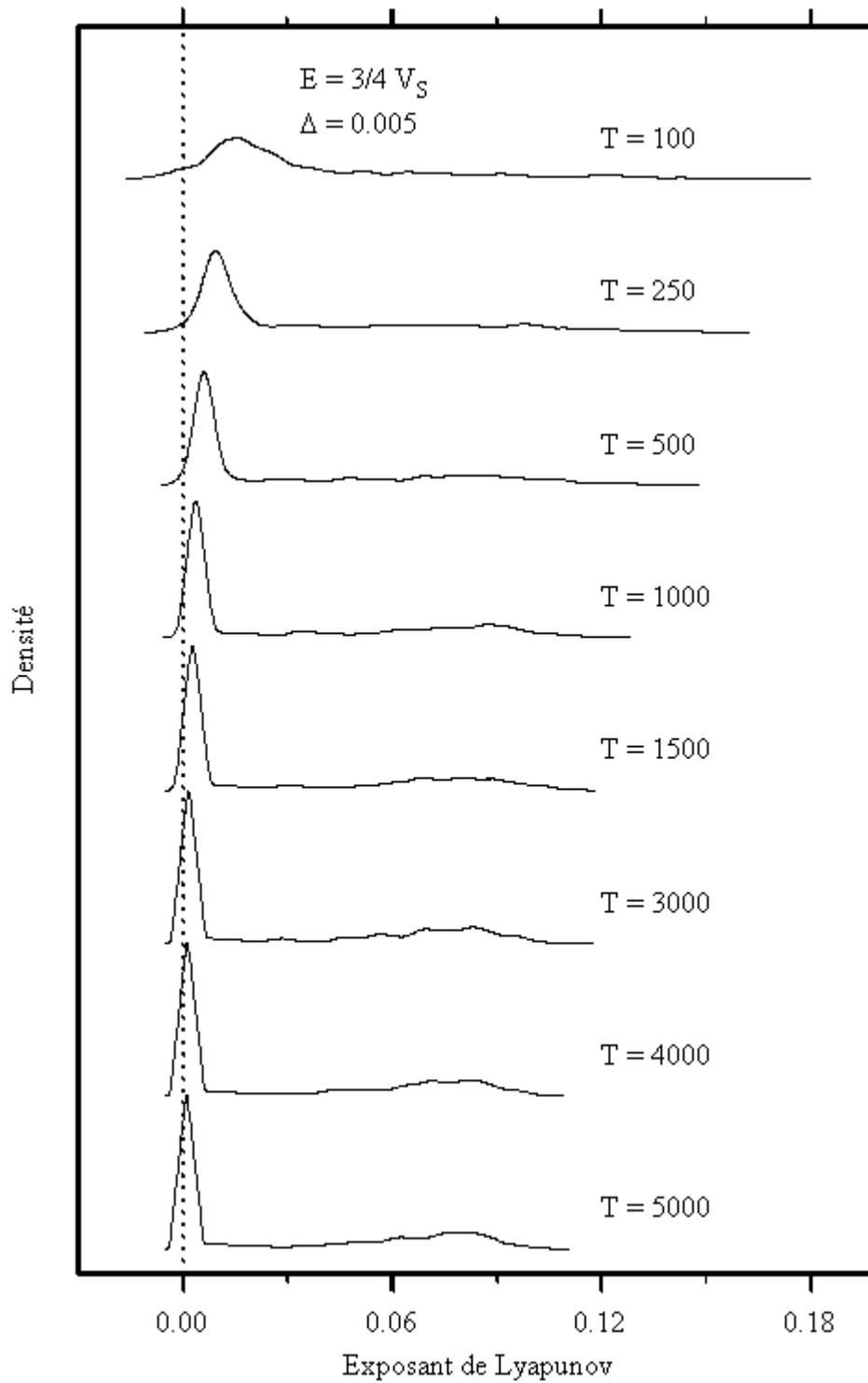


Figure 4.5: Evolution de la densité de Lyapunov en fonction du temps pour 1000 trajectoires évoluant dans le potentiel $V_{Si<100>}$. Les conditions initiales sont échantillonnées uniformément sur la section $x = 0$.

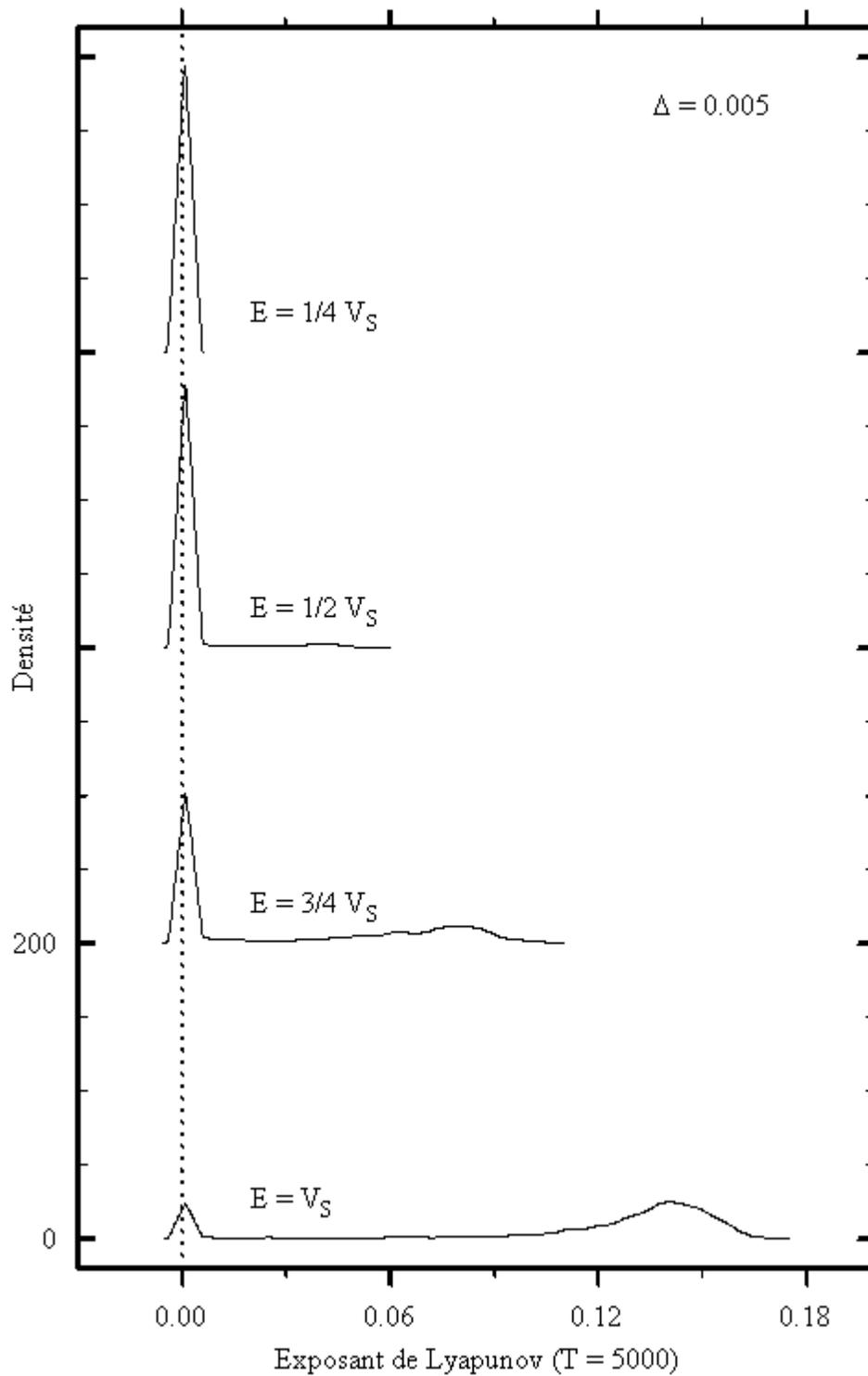


Figure 4.6: Densité de Lyapunov à différentes énergies. Pour chaque cas, 1000 conditions initiales échantillonnées uniformément sur la section $x = 0$ évoluent dans le potentiel $V_{Si < 100 >}$.

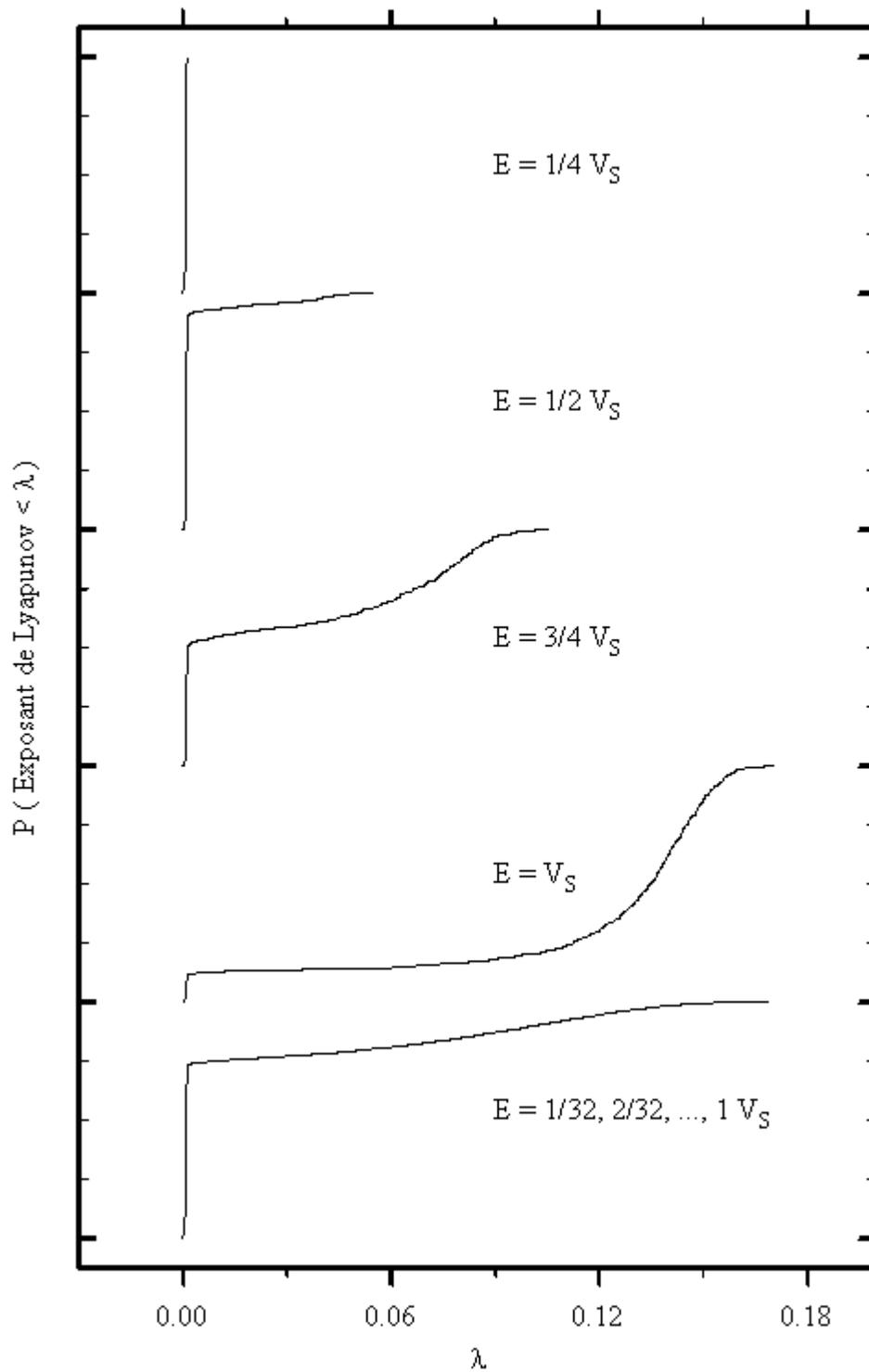


Figure 4.7: Probabilité cumulative de Lyapunov pour $V_{Si<100>}$. Pour chaque valeur de l'énergie, il y a 1000 trajectoires dont l'exposant de Lyapunov est obtenu avec $T = 5000$. La courbe du bas correspond au cumulatif de 32000 conditions initiales.

énergies. La probabilité cumulative croissant entre 0 et 1, nous pouvons lire directement sur les courbes la portion de l'espace des phases qui est stable dans chaque cas. La courbe du bas rassemble les observations sur λ_T pour l'ensemble des différentes énergies $E = 1/32, 2/32, \dots, 31/32, 1$. Ces courbes suggèrent une façon naturelle de définir un critère de stabilité globale.

La figure 4.8 montre les mêmes courbes de probabilité cumulative agrandies autour de $\lambda = 0$. On peut aisément localiser en $\lambda = \lambda_C = 0.00124$ un point de courbure maximale en deçà duquel l'essentiel des valeurs de λ_T correspondant aux trajectoires stables se trouve. Le critère de stabilité globale peut donc se résumer à ce qui suit : Une trajectoire i est

- stable si $\lambda_T^i < \lambda_{T,C}$,
- probablement stable si $\lambda_T^i < 2\lambda_{T,C}$.

4.2.4 Courbe de transition stochastique

Il suffit maintenant d'appliquer le critère de stabilité globale à toutes les trajectoires des échantillons correspondant à chaque énergie pour tracer la courbe de transition stochastique retrouvée sur la figure 4.9 pour $T = 5000$. On note tout d'abord que la transition stochastique (s'il y a transition) n'est pas excessivement brusque et semble se produire à une énergie inférieure à l'énergie critique prédite par une analyse de stabilité locale. De plus, la courbe ne tend pas de façon monotone jusqu'à zéro. Un regain de stabilité semble apparaître autour de $E/V_S = 0.8$. L'effet, par ailleurs, est réel et non pas un artéfact numérique. L'énergie seule ne détermine donc pas entièrement la stabilité de l'espace des phases.

La même analyse est maintenant faite pour les autres potentiels cristallins.

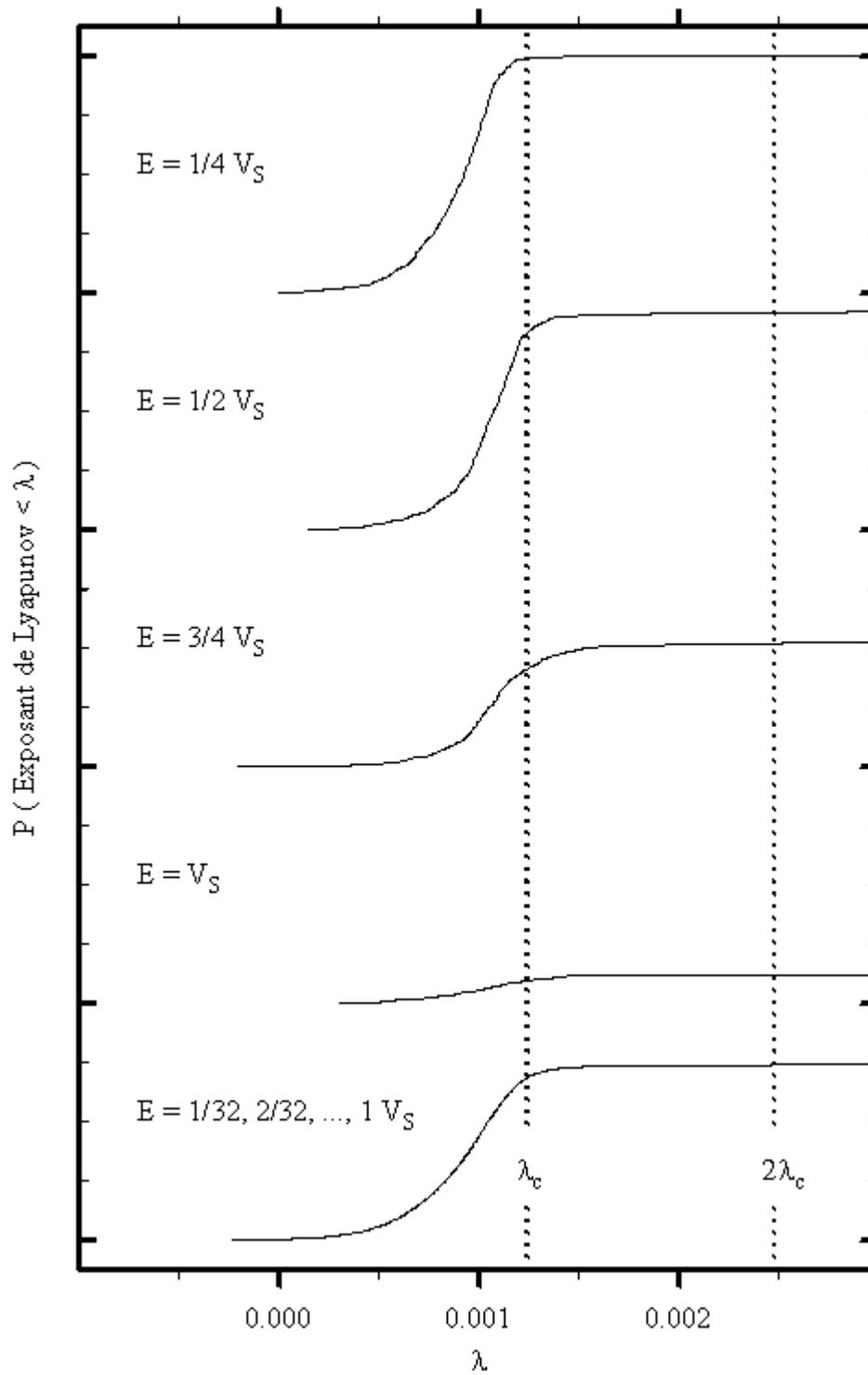


Figure 4.8: Idem que la figure 4.7 mais agrandie autour de $\lambda = 0$. Le point de courbure maximale de la courbe cumulative permet de définir un critère de stabilité locale.

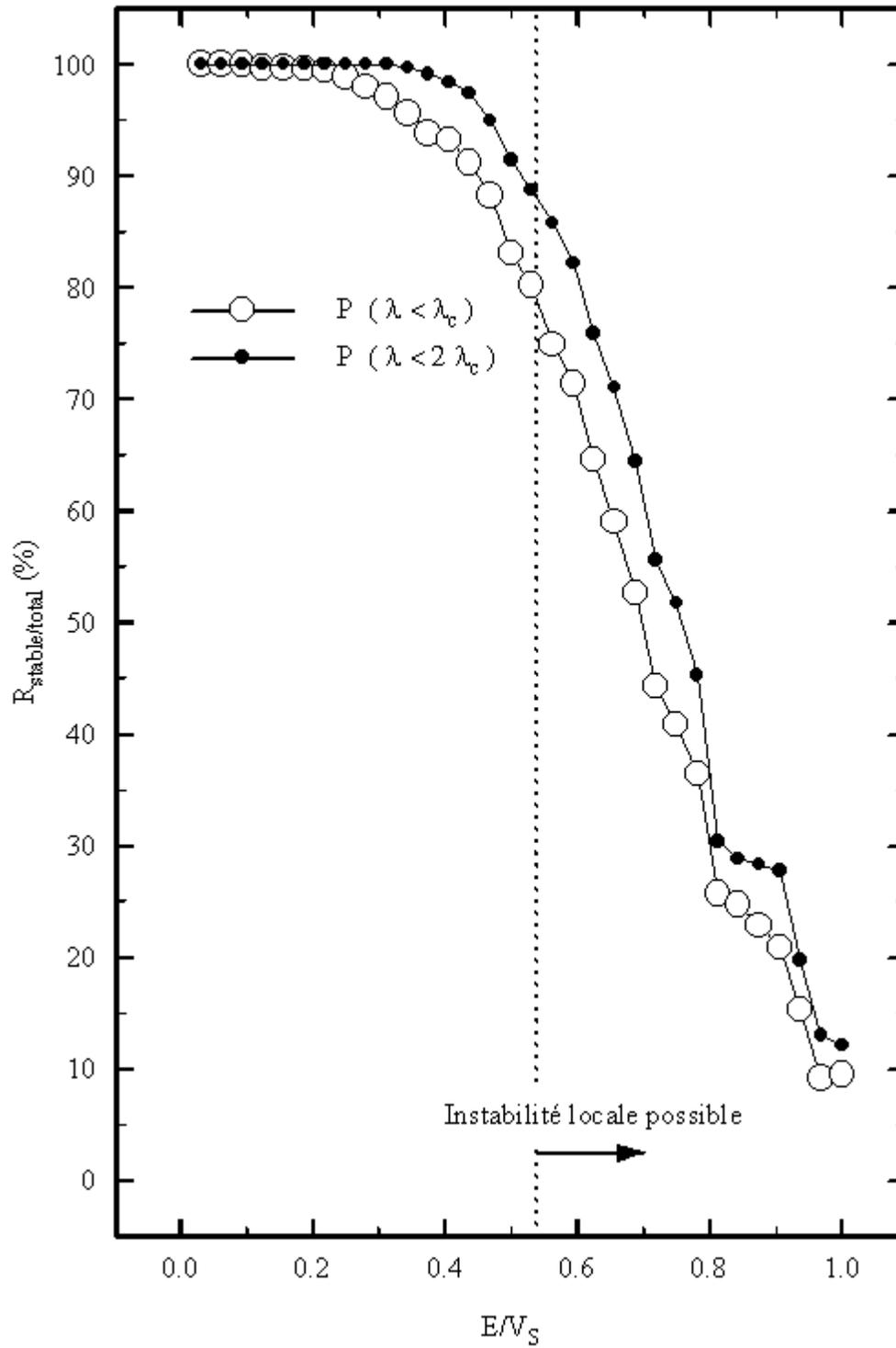


Figure 4.9: Courbes de transition stochastique pour le potentiel $V_{Si < 100 >}$.

4.3 Transition stochastique : potentiel $V_{\text{Si}<111>}$

Dans le cas du potentiel $V_{\text{Si}<111>}$ maintenant, on note sur la figure 4.10 une meilleure discrimination de la stabilité des trajectoires. Par ailleurs, pour $E = V_S$ on constate que la quasi-totalité des trajectoires appartient à la classe chaotique, *i.e.* que seul le pic instable est présent. La forme presque normale (gaussienne) du pic instable suggère une grande ergodicité des trajectoires chaotiques, chaque partie accessible de l'espace des phases étant visitée de façon presque équiprobable pour chacune d'elles. Cette figure permet une comparaison directe avec les sections de Poincaré tracées sur la figure 1.16.

La figure 4.11 montre la courbe complète de la probabilité cumulative de Lyapunov ainsi qu'un agrandissement autour de zéro permettant de définir le critère de stabilité globale avec $\lambda_C = 0.00153$. La figure 4.12 montre la courbe de transition stochastique. Sa forme est semblable à celle de la figure 4.9 mais le critère de stabilité locale semble donner un meilleur estimé du seuil de la transition. Le regain de stabilité, observé cette fois autour de $E/V_S = 0.9$ est plus évident, et ici aussi la courbe de transition montre qu'il y a présence de trajectoires stables pour toute énergie.

4.4 Transition stochastique : potentiel $V_{\text{Si}<110>}$

Pour le potentiel $V_{\text{Si}<110>}$ maintenant, les figures 4.13 et 4.14 montrent les courbes de densité de Lyapunov pour $T = 500$. Ce potentiel cristallin étant plus abrupte que les deux autres (voir fig. 1.8), la dynamique sous-jacente s'y manifeste plus rapidement, et les temps caractéristiques d'oscillations sont plus courts. On remarque que pour $E = 1/2V_S$, la distribution des exposants de Lyapunov obéit à une loi presque normale. Ceci indique une grande ergodicité de l'espace des phases à cette énergie. Ces figures se comparent directement avec les sections de Poincaré tracées sur les figures 1.18 et 1.19 et on constate que pour les énergies $E/V_S = 1/2, 3/4$ et 1, les courbes de densité permettent une meilleure appréciation de la stabilité de l'espace des phases.

La figure 4.15 montre comment se définit le critère de stabilité globale. On a ici

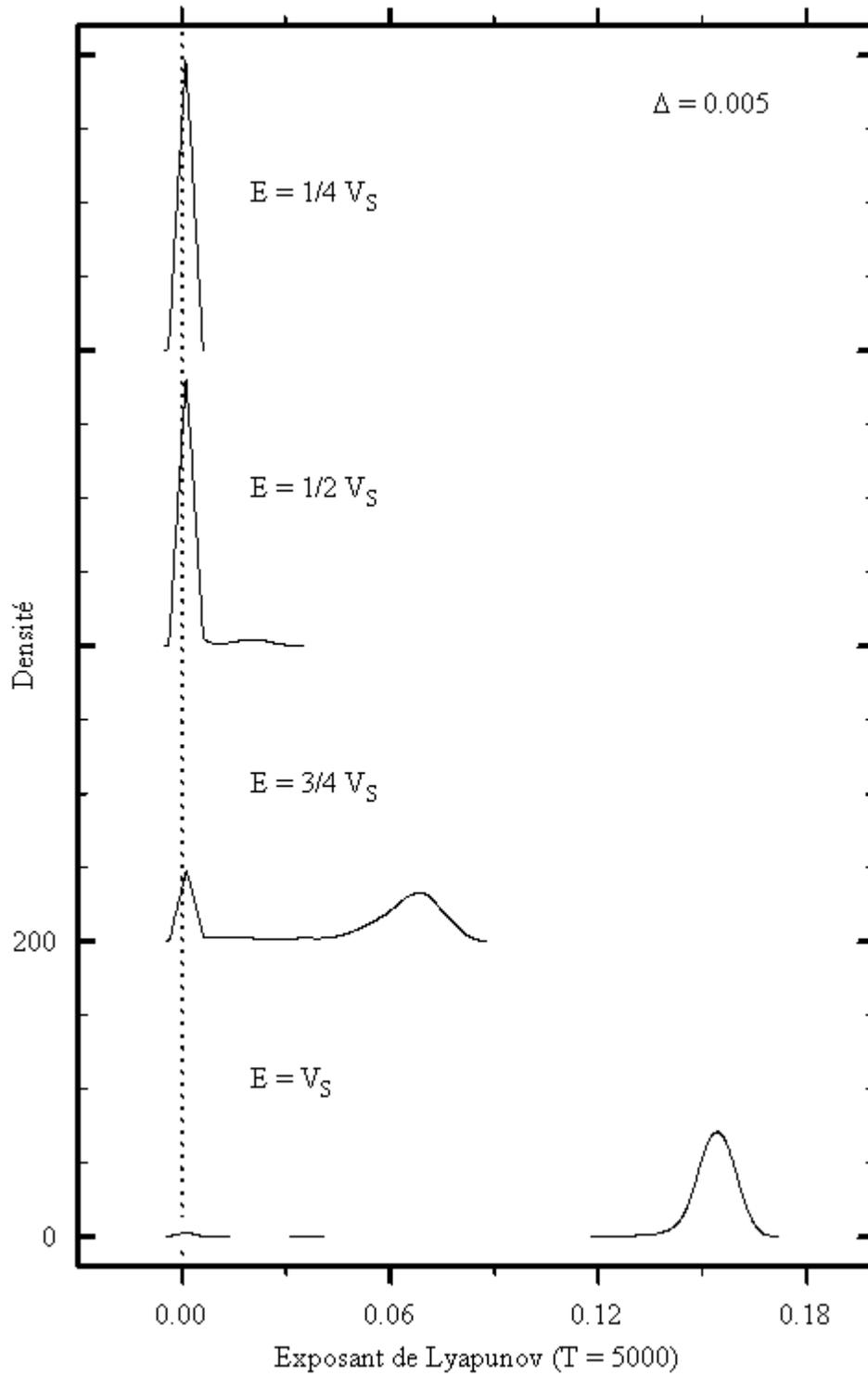


Figure 4.10: Densité de Lyapunov à différentes énergies pour $V_{\text{Si}\langle 111 \rangle}$. Voir la figure 4.6.

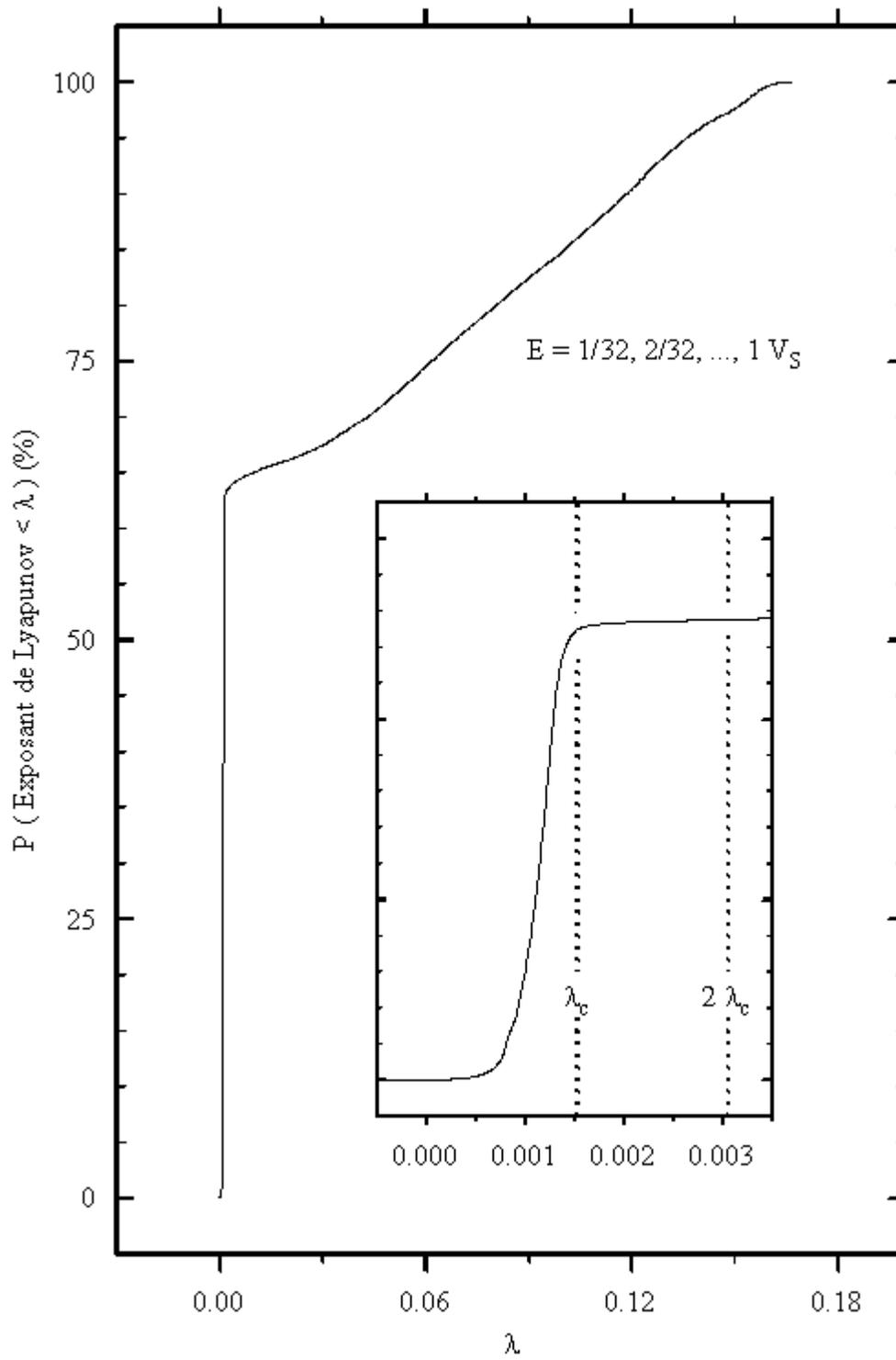


Figure 4.11: Critère de stabilité globale pour $V_{Si<111>}$. Voir les figures 4.7 et 4.8.

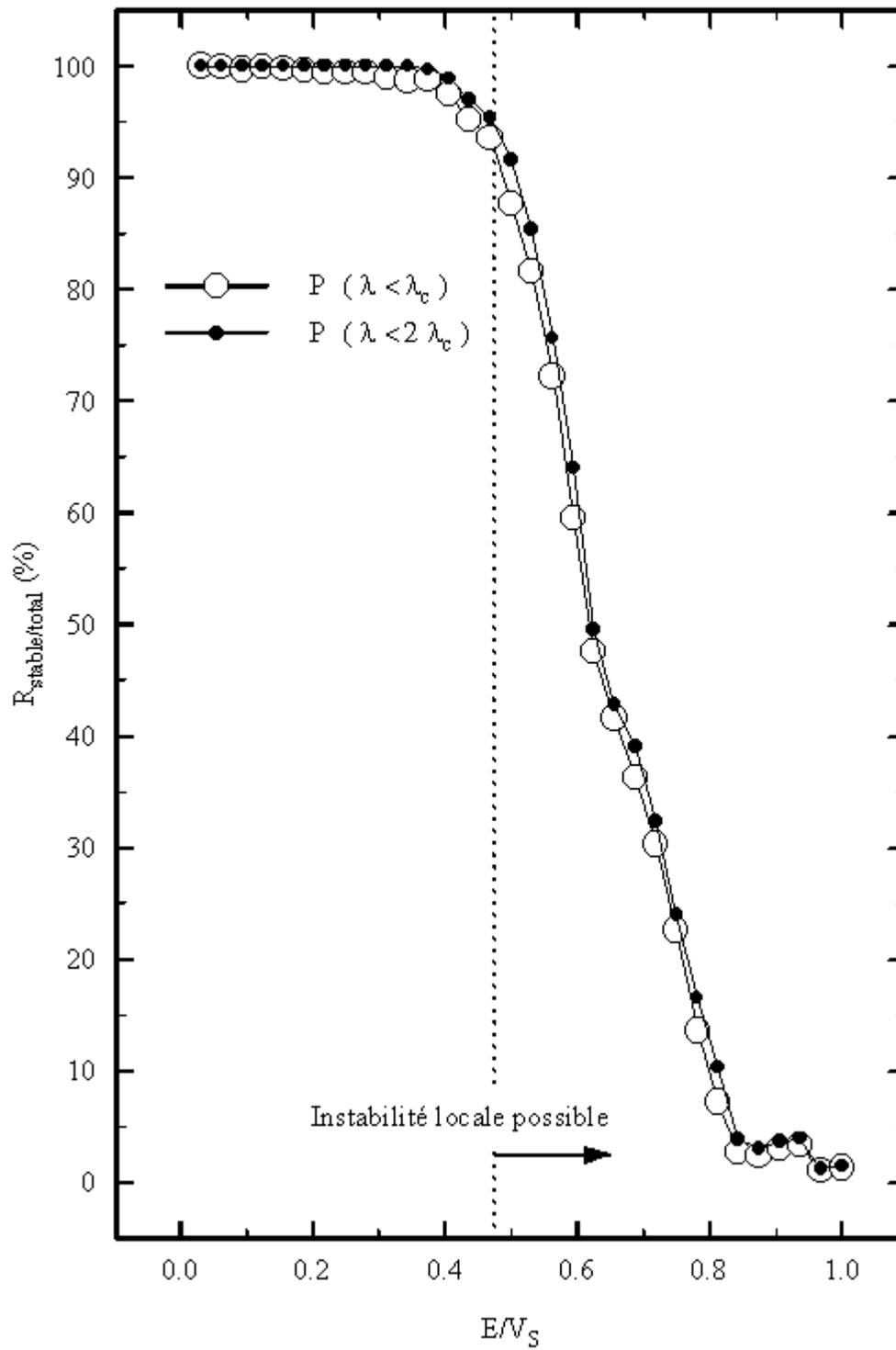


Figure 4.12: Courbes de transition stochastique pour le potentiel $V_{\text{Si}<111>}$.

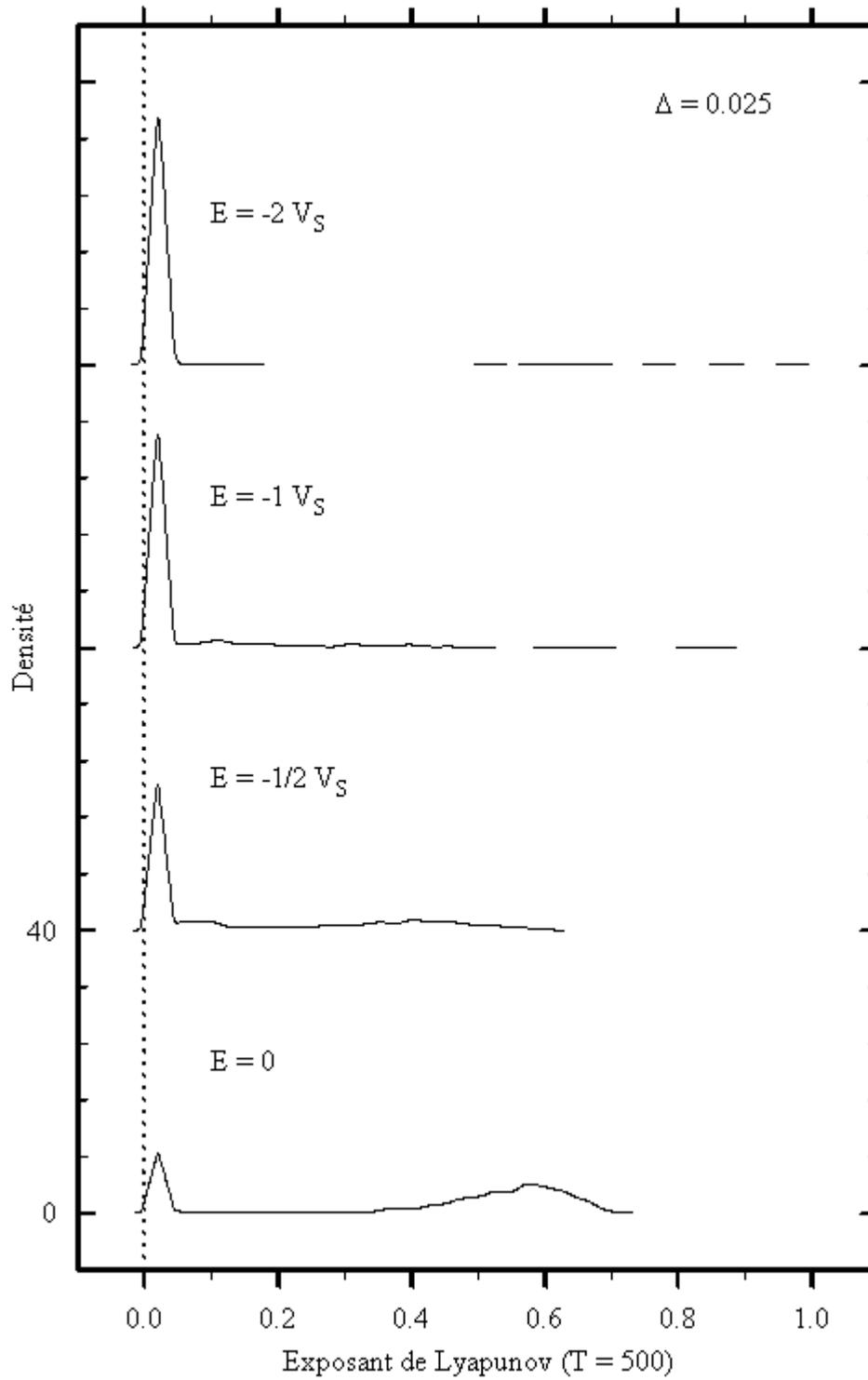


Figure 4.13: Densité de Lyapunov à différentes énergies pour $V_{Si\langle 110 \rangle}$. Voir la figure 4.6.

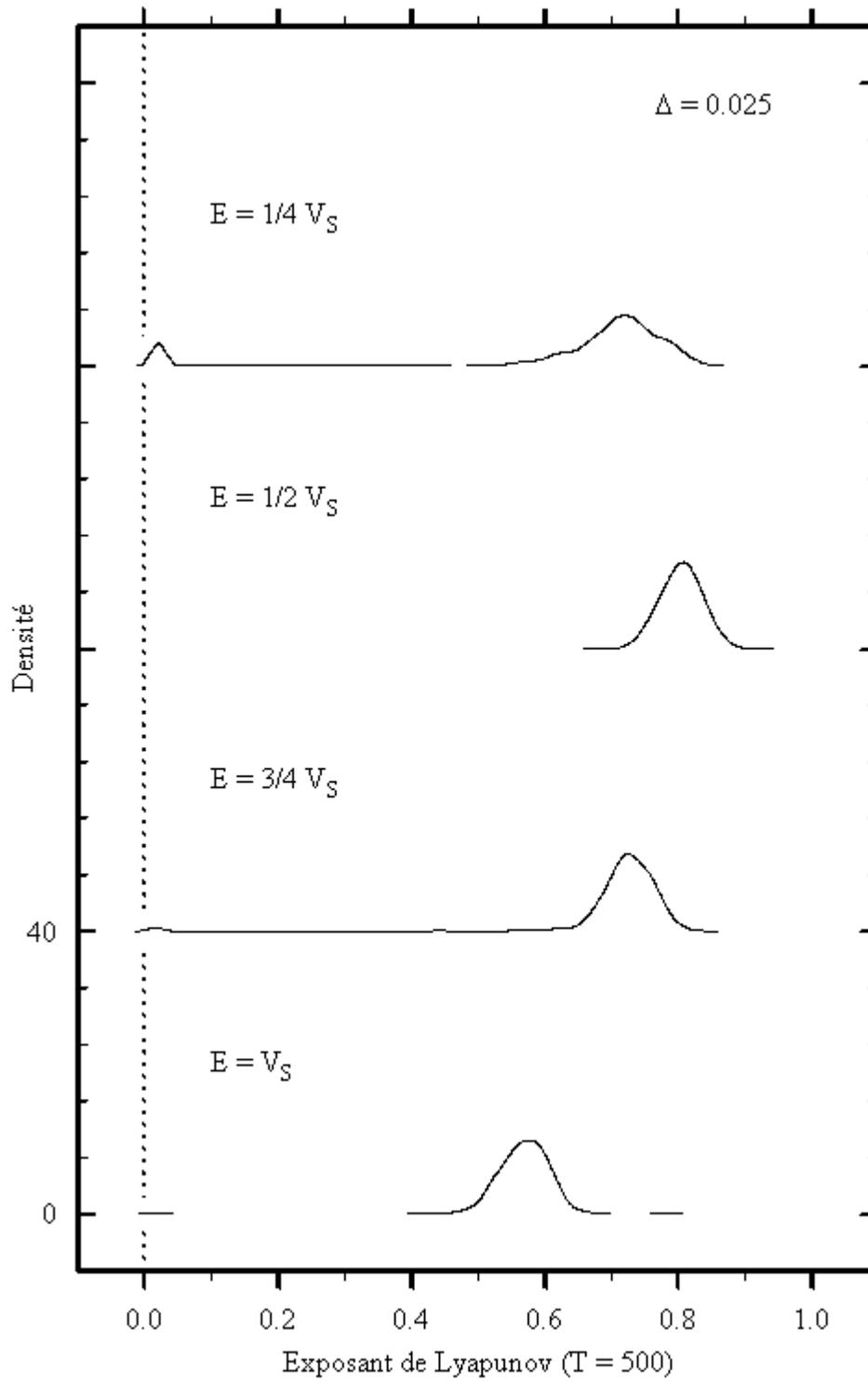
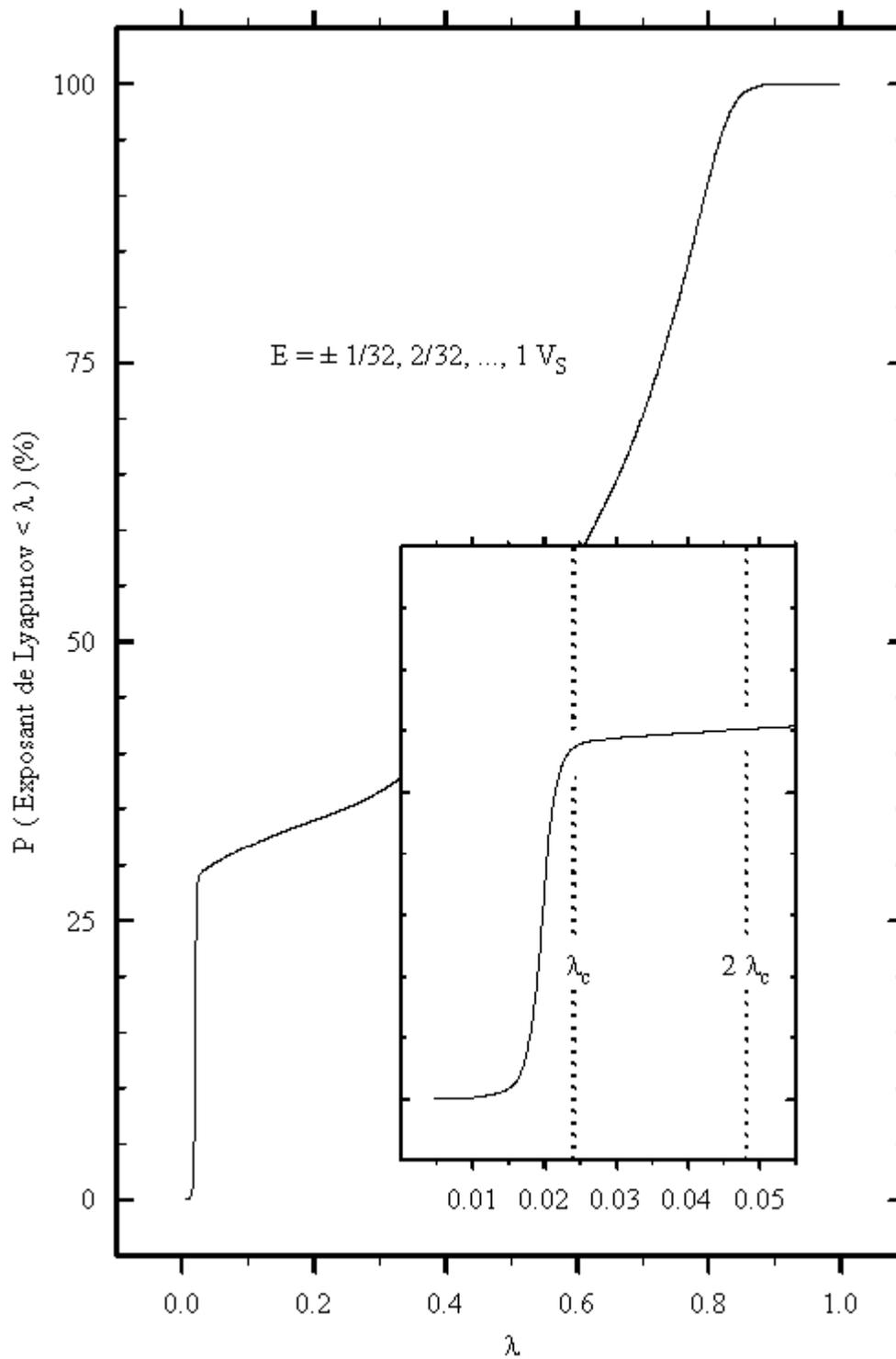


Figure 4.14: Suite de la figure 4.13.

Figure 4.15: Critère de stabilité globale pour $V_{Si<110>}$. Voir les figures 4.7 et 4.8.

$\lambda_{T,C} = 0.0241$. Remarquons que cette valeur est environ 20 fois plus élevée que dans le cas des potentiels $V_{\text{Si}<111>}$ et $V_{\text{Si}<110>}$. La courbe de transition stochastique (figure 4.16) semble démontrer que l'espace des phases devient complètement stable lorsque $E \rightarrow -\infty$. Ceci est cohérent avec le fait que dans cette limite, le système devient intégrable puisque la particule est soumise à un potentiel central (intégrable) perturbé de façon négligeable. Fait remarquable toutefois, l'espace des phases semble devenir *complètement instable* lorsque la *stabilité locale* devient possible.

La taille d'échantillon ($N = 1000$) ne permet peut-être pas de tirer de trop fortes conclusions, mais la courbe de transition suggère la présence éventuelle d'une famille de systèmes-K (dont la dynamique est toujours chaotique), à l'intérieur de l'intervalle $E/V_S \in [0.4, 0.6]$.

4.5 Récapitulatif

Une méthode a été développée permettant d'obtenir la courbe de transition stochastique pour les systèmes hamiltoniens issus des potentiels cristallins introduits dans le premier chapitre. Un critère de stabilité globale fiable a été défini. Il est obtenu à partir de l'évaluation de l'exposant de Lyapunov à temps fini pour un ensemble de conditions initiales échantillonnées sur la section $x = 0$ à différentes énergies. Une méthode a aussi été développée pour permettre de bien visualiser la distribution des exposants de Lyapunov. La courbe de densité de Lyapunov ainsi obtenue facilite alors l'appréciation de la stabilité des espaces de phases.

Cette analyse de stabilité a été appliquée aux potentiels cristallins $V_{\text{Si}<100>}$, $V_{\text{Si}<111>}$ et $V_{\text{Si}<110>}$. Il a été démontré que si une transition s'effectue, c'est de manière graduelle et non abrupte. Il a aussi été constaté que les courbes de transitions ne sont pas des fonctions monotones en énergie. De plus, dans certains cas, la stabilité augmente avec l'énergie. Nous avons par ailleurs bien établi qu'il n'y a aucun lien direct entre stabilité locale et stabilité globale. Finalement, mentionnons que la courbe de transition stochastique, et surtout la densité de Lyapunov, se révèlent être des outils efficaces

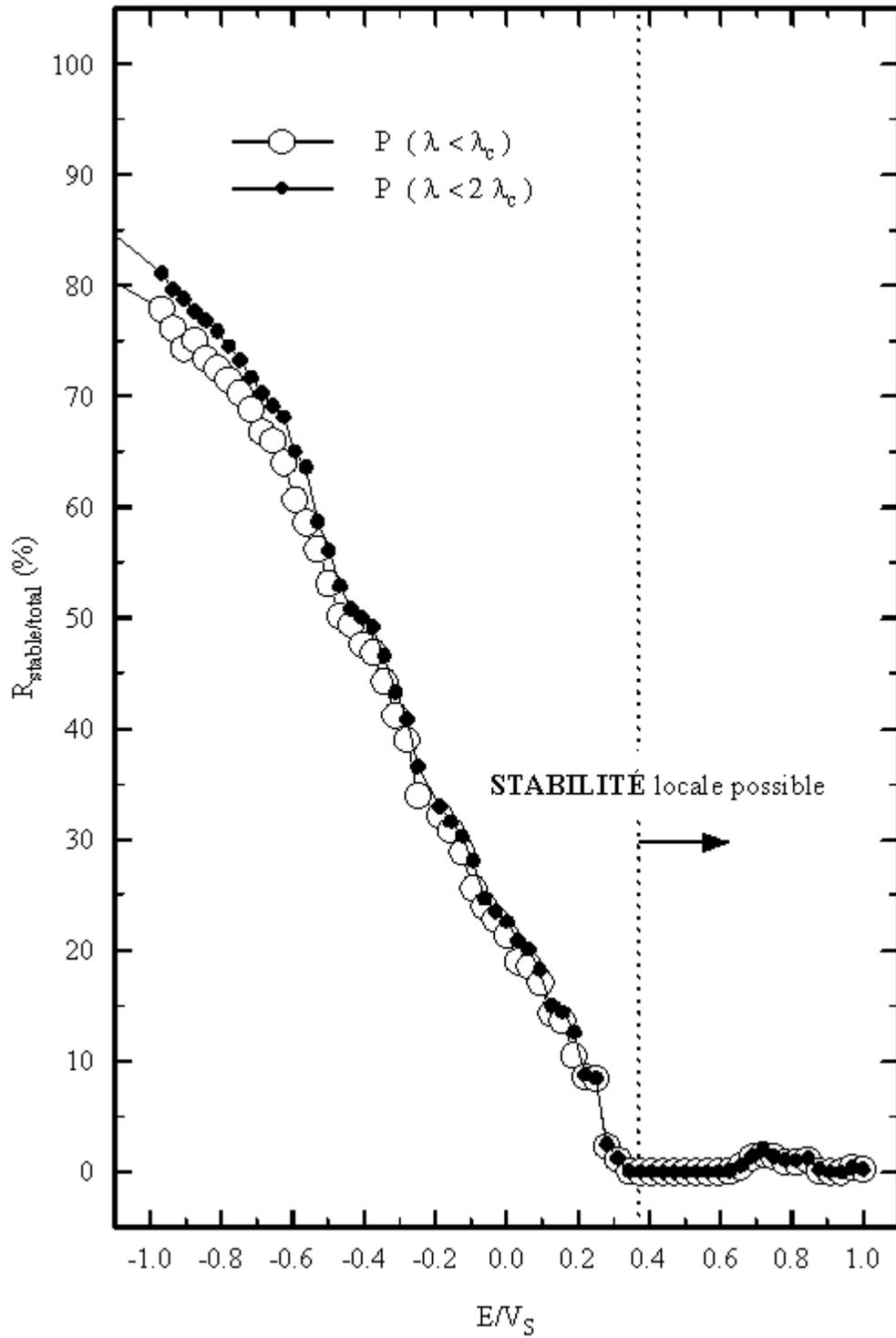


Figure 4.16: Courbes de transition stochastique pour le potentiel $V_{\text{Si}\langle 110 \rangle}$.

permettant d'identifier les cas de grande ergodicité. Ils peuvent aussi s'avérer utiles dans la recherche de systèmes dynamiques complètement chaotiques.

Conclusion

L'objectif de cette thèse était l'étude dynamique de la canalisation de particules chargées traversant un cristal. Plus précisément, nous nous sommes intéressés à la stabilité de l'espace des phases engendré par un système hamiltonien à deux (2) degrés de liberté issu d'un modèle simple appliqué à différentes configurations de canalisation. Pour arriver à nos fins, nous avons développé et étudié des algorithmes particulièrement bien adaptés à l'intégration numérique des systèmes hamiltoniens. Nous avons aussi développé des méthodes, basées sur des simulations de type Monte-Carlo, permettant de déterminer de façon fiable la stabilité des trajectoires adoptées par les particules à l'intérieur du cristal.

Dans le **premier chapitre**, nous avons présenté le modèle utilisé pour étudier la dynamique d'une particule canalisée par un cristal. Il s'agit d'un modèle simple, physiquement valide sous certaines conditions expérimentales, où la mécanique classique est utilisée pour décrire le mouvement des particules. Comme la dynamique intéressante se situe dans le plan perpendiculaire à l'axe de canalisation, le mouvement selon l'axe est découplé et le problème se résume à l'analyse d'un système hamiltonien à deux (2) degrés de liberté. Nous avons ensuite déterminé trois (3) configurations de canalisation déterminant du même coup les trois (3) potentiels cristallins définissant les systèmes hamiltoniens étudiés. La stabilité de l'espace des phases engendré par ces systèmes a été examinée. Tout d'abord, l'examen a été fait par une analyse de stabilité locale, où tous les calculs sont purement analytiques et ensuite par une analyse de stabilité globale, où la section de Poincaré a été utilisée pour tracer un portrait qualitatif de l'espace des phases. Ces quelques résultats préliminaires nous ont amené à constater

qu'il ne semble pas y avoir de lien direct entre stabilité locale et stabilité globale pour les systèmes que nous avons considérés.

Avant d'aborder au chapitre 4 des méthodes d'analyse de stabilité plus quantitatives, nous avons d'abord dû développer des algorithmes d'intégrations plus robustes et mieux adaptés à la structure hamiltonienne.

Dans le **chapitre 2**, nous avons d'abord introduit l'intégration symplectique des systèmes hamiltoniens. Le principal avantage de l'utilisation de telles méthodes est la préservation des invariants de Poincaré qui impose de très fortes contraintes sur les trajectoires numériques obtenues. Un autre avantage, tout aussi remarquable, est la très grande stabilité de l'erreur en énergie. Bien qu'en général les intégrateurs symplectiques ne conservent pas l'énergie de façon exacte, les intégrateurs symplectiques à pas variable (ISPV) que nous avons développés dans ce chapitre préservent l'énergie dans un intervalle de précision qui peut être rendu aussi petit que désiré. Nous avons démontré que les ISPV sont efficaces et qu'ils peuvent même être plus performants que les intégrateurs symplectiques à pas fixe (ISPF) dans certains cas. Lorsque les ISPV sont moins performants que les ISPF, le coût associé à leur utilisation reste néanmoins minime et permet de profiter de la commodité des intégrateurs adaptatifs. *Les ISPV sont simples à implanter et à utiliser. Ils sont conçus pour être d'usage général, sans avoir recours à aucune personnalisation pour quelque système particulier. Puisqu'ils se basent sur les méthodes à pas fixe pour accomplir le pas de base, ils profitent directement de toute amélioration ou innovation éventuellement apportée par de nouveaux ISPF.*

L'intégration symplectique des systèmes hamiltoniens assure donc une certaine préservation de l'énergie. Mais certains hamiltoniens possèdent aussi d'autres invariants (ou constantes du mouvement). Nous avons donc ensuite étudié le comportement de différents mécanismes d'intégration symplectique quant à la conservation de tous les invariants.

Dans le **chapitre 3**, nous avons examiné empiriquement la préservation des intégrales du mouvement par les mécanismes d'intégrations symplectiques développés dans

le chapitre 2. Le système hamiltonien de Toda et le problème de Kepler ont été considérés pour les simulations numériques. Il s'avère que pour Toda, l'utilisation d'un intégrateur symplectique à pas fixe (ISPF) suffit à assurer la préservation de la 2^{ème} intégrale du mouvement. Dans le cas du problème de Kepler toutefois, l'ISPF ne suffit pas et on constate une lente précession des orbites. Par ailleurs, lorsqu'un intégrateur symplectique à pas variable (ISPV) est utilisé, la stabilité de la seconde intégrale du mouvement semble brisée pour Toda. L'inverse se produit pour Kepler, où les composantes du vecteur de Runge-Lenz semblent mieux préservées quand l'ISPV est utilisé avec l'énergie pour adapter le pas d'intégration (voir fig. 3.8). L'ISPV a donc été modifié pour tenir compte de plusieurs constantes du mouvement à la fois. Lorsque ce nouvel algorithme est utilisé, *toutes les intégrales sont numériquement bien conservées.*

Ayant bien en main les outils numériques permettant d'intégrer les systèmes hamiltoniens représentant les différentes configurations de canalisation, nous avons finalement développé les méthodes permettant de compléter l'étude de stabilité amorcée dans le premier chapitre.

Dans le **chapitre 4**, une méthode a été développée permettant d'obtenir la courbe de transition stochastique pour les systèmes hamiltoniens issus des potentiels cristallins. Un critère de stabilité globale statistiquement fiable, basé sur des simulations de type Monte-Carlo, a été défini. Il est obtenu à partir de l'évaluation de l'exposant de Lyapunov à temps fini pour un ensemble de conditions initiales échantillonnées sur la section $x = 0$ à différentes énergies. Une méthode a aussi été développée pour permettre de bien visualiser la distribution des exposants de Lyapunov. La courbe de densité de Lyapunov ainsi obtenue facilite alors l'appréciation de la stabilité des espaces de phases. Cette analyse de stabilité a été appliquée aux potentiels cristallins $V_{\text{Si}<100>}$, $V_{\text{Si}<111>}$ et $V_{\text{Si}<110>}$. *Il a été démontré que si une transition s'effectue, c'est de manière graduelle et non abrupte.* Il a aussi été constaté que les courbes de transitions ne sont pas des fonctions monotones en énergie. De plus, dans certains cas, la stabilité augmente avec l'énergie. Nous avons par ailleurs bien établi qu'il n'y a aucun lien direct entre stabilité locale et stabilité globale. Finalement, mentionnons que la courbe de transition

stochastique, et surtout la densité de Lyapunov, se révèlent être des outils efficaces permettant d'identifier les cas de grande ergodicité. Ils peuvent aussi s'avérer utiles dans la recherche de candidats pouvant venir s'ajouter à la courte liste des systèmes dynamiques complètement chaotiques. De plus, les résultats obtenus pour $V_{S_i < 110 \rangle}$ avec $E/V_S = 1/2$ (cf. figs. 4.14) tendent à démontrer, de part la forme gaussienne de la distribution, qu'il est possible d'obtenir une bonne approximation de l'exposant de Lyapunov exact ($t \rightarrow \infty$, cf. sous-section 4.1.1) pour une trajectoire obéissant à un système complètement ergodique. Autrement dit, *il semble que la moyenne temporelle (1 trajectoire, temps infini) soit identique à la moyenne sur l'ensemble (plusieurs trajectoires, temps fini) lors du calcul de l'exposant de Lyapunov correspondant à un système complètement ergodique.*

Avant de terminer, introduisons un nouvel hamiltonien intégrable, H_{RC} , découvert récemment et étudié dans une série d'articles publiés par Rakovic et Chu [1997, 1995a, 1995b, 1994]. Il décrit avec bonne approximation l'atome d'hydrogène soumis à un champ polarisé circulairement. Les détails se retrouvent dans l'appendice A. On constate immédiatement la complexité des intégrales du mouvement I et J pour le système défini par l'hamiltonien H_{RC} . Etant donné la présence de couplage entre l'espace des moments et des configurations ($l_z = xp_y - yp_x$), les intégrateurs développés dans le chapitre 2 ne peuvent pas être utilisés directement pour intégrer le système hamiltonien engendré par H_{RC} . Rappelons que ces intégrateurs requièrent des hamiltoniens de forme $H(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = T(\mathbf{p}) + V(\mathbf{q})$. Même en se restreignant au plan xy où $z = p_z = 0$, l'hamiltonien

$$H'_{RC} = \mathbf{p}^2/2 - 1/r - \omega l_z + fx + \omega^2(x^2 + y^2)/18$$

contient encore l_z qui empêche l'utilisation des intégrateurs symplectiques dont nous disposons. Le type d'analyse effectué dans le chapitre 3 ne peut donc, pour l'instant, être appliqué à ce système. Il existe toutefois des méthodes d'intégration symplectique qui ne requièrent pas un hamiltonien de forme $H(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = T(\mathbf{p}) + V(\mathbf{q})$, mais ces méthodes sont en général *implicites*, moins bien développées et plus difficiles d'utilisation. Par ailleurs, étant donnée la forme de l'hamiltonien H_{RC} (ou H'_{RC}) où on note la

présence d'un terme en $1/r$, il est plus que probable qu'un intégrateur adaptif soit nécessaire. Heureusement, les intégrateurs symplectiques à pas variable que nous avons développés dans le chapitre 2 permettent l'utilisation directe de nouveaux algorithmes utilisés pour accomplir le pas de base. Dans un travail ultérieur, il serait donc intéressant d'examiner plus en détails ce problème aux intégrales du mouvement moins que triviales.

Le chaos ne nous apparaît plus aujourd'hui comme une curiosité. Les systèmes non-linéaires constituent maintenant la généralité et non plus la particularité. Cet état de fait est bien illustré par une éloquente citation :

“Defining nonlinear science to be the study of systems that are not linear is like defining a new field of zoology to be the study of animals that are not elephants.”

STANISLAW ULAM

Quoi qu'il en soit, la science du chaos s'est révélée à nous et le message qu'elle nous livre est clair : nous devons nous résigner, parfois, à composer avec l'imprévisible.

Appendice A : Atome d'hydrogène en champ externe

Soit $H_{\text{cir}} = \mathbf{p}^2/2 - 1/r + f(x \cos \omega t + y \sin \omega t)$, l'hamiltonien dépendant du temps d'un atome d'hydrogène soumis à un champ polarisé circulairement. Dans le référentiel tournant ($x \rightarrow x \cos \omega t - y \sin \omega t, y \rightarrow x \sin \omega t + y \cos \omega t$) il prend la forme autonome

$$H_{\text{cir}} = \frac{\mathbf{p}^2}{2} - \frac{1}{r} - \omega l_z + fx \quad (\text{A.1})$$

où $l_z = xp_y - yp_x$ et f et ω sont, respectivement, l'amplitude et la fréquence du champ.

Lorsque la fréquence du champ n'est pas trop élevée, e.g. dans le cas des micro-ondes, H_{cir} peut être approximé par l'hamiltonien *complètement intégrable*

$$H_{\text{RC}} = \left[\frac{\mathbf{p}^2}{2} - \frac{1}{r} - \omega l_z + fx \right] + \frac{\omega^2}{18}(r^2 + 3z^2). \quad (\text{A.2})$$

En plus de la fonction H_{RC} , ce système hamiltonien à 3 degrés de liberté possède les 2 intégrales du mouvement

$$\begin{aligned} I &= \frac{4}{3}\omega l_z(H_{\text{RC}} - fx) + \frac{8}{9}\omega^2 l_z^2 + f \left[l_y p_z - l_z p_y + \frac{x}{r} \right] \\ &+ \frac{f^2}{2}(y^2 + z^2) + \frac{1}{3}\omega f(3x l_z - p_y r^2 + z l_x) - \frac{1}{9}\omega^2 f x(r^2 + z^2) \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

et

$$J = \omega \left[l_x p_y - l_y p_x + \frac{z}{r} \right] + \frac{1}{9}\omega^3 z(x^2 + y^2) - \frac{3}{2}f l_x - \frac{1}{2}\omega f x z \quad (\text{A.4})$$

telles que les crochets de Poisson $\{H, I\} = \{H, J\} = \{I, J\} = 0$, i.e. que les 3 intégrales sont en involution.

Références bibliographiques

- [1] AKHIEZER A.I., TRUTEN' V.I. ET SHUL'GA N.F., Dynamic chaos in the motion of charged particles through a crystal, *Phys. Rep.*, **203**, 289 (1991)
- [2] ARNOL'D V.I., 1978 et 1989, *Mathematical Methods of Classical Mechanics*, 1ère et 2ième ed. (Springer Verlag, New-York)
- [3] BENETTIN G., BRAMBILLA R. ET GALGANI L., A comment on the reliability of the Toda criterion for the existence of a stochastic transition, *Physica A*, **87**, 381 (1977)
- [4] BENETTIN G., GALGANI L. ET STRELCYN J.-M., Kolmogorov entropy and numerical experiments, *Phys. Rev. A*, **14**, 2338 (1976)
- [5] BENETTIN G., GALGANI L., GIORGILLI A. ET STRELCYN J.-M., Lyapunov Characteristic Exponents for Smooth Dynamical Systems and for Hamiltonian Systems: A Method for Computing All of Them, *Meccanica*, **15**, 9 (1980)
- [6] BRUMER P. ET DUFF J.W., A variational equations approach to the onset of statistical intramolecular energy transfer, *J. Chem. Phys.*, **65**, 3566 (1976)
- [7] CALVO M. P. ET SANZ-SERNA J. M., The development of variable-step symplectic integrators, with application to the two-body problem, *SIAM J. Sci. Comput.*, **14**, 936 (1993)
- [8] CANDY J. ET ROZMUS W., A symplectic integration algorithm for separable Hamiltonian functions, *J. Comput. Phys.*, **92**, 230 (1991)

- [9] CARTWRIGHT J. H. E. ET PIRO O., The Dynamics of Runge-Kutta Methods, *Int. J. Bif. Chaos*, **2**, 427 (1992)
- [10] CASARTELLI M., DIANA E., GALGANI L. ET SCOTTI A., Numerical computations of a stochastic parameter related to the Kolmogorov entropy, *Phys. Rev. A*, **13**, 1921 (1976)
- [11] CASETTI L., Efficient Symplectic Algorithms for Numerical Simulations of Hamiltonian Flows, *Physica Scripta*, **51**, 29 (1995)
- [12] CERJAN C. ET REINHARDT W.P., Critical point analysis of instabilities in Hamiltonian systems: Classical mechanics of stochastic intramolecular energy transfer, *J. Chem. Phys.*, **71**, 1819 (1979)
- [13] CHANNELL P.J. ET SCOVEL C., Symplectic integration of Hamiltonian systems, *Nonlinearity*, **3**, 231 (1990)
- [14] DAHLQVIST P. ET RUSSBERG G., Existence of Stable Orbits in the x^2y^2 Potential, *Phys. Rev. Lett.*, **65**, 2837 (1990)
- [15] DUMAS H.S., ELLISON J.A. ET SAENZ A.W., Axial Channeling in Perfect Crystals, the Continuum Model, and the Method of Averaging, *Annals of Physics*, **209**, 97 (1991)
- [16] ECKMANN J.-P. ET RUELLE D., Ergodic Theory of Chaos and Strange Attractors, *Rev. Mod. Phys.*, **57**, 617 (1985)
- [17] ESTEP. D. J. ET STUART A. M., The rate of error growth in Hamiltonian-conserving integrators, *ZAMP*, **46**, 407 (1995)
- [18] FIRSOV O.B., *Zh. Eksp. Teor. Fiz.*, **33**, 696 (1957) [*Sov. Phys.-JETP*, **6**, 534 (1958)]
- [19] FLASCHKA H., The Toda lattice. II. Existence of integrals, *Phys. Rev. B*, **9**, 1924 (1974)

- [20] FORD J., STODDARD S.D. ET TURNER J.S., On the Integrability of the Toda Lattice, *Prog. Theor.Phys.*, **50**, 1547 (1973)
- [21] FOREST E. ET RUTH R. D., Fourth-order symplectic integration, *Physica D*, **43**, 105 (1990)
- [22] GEAR C.W., Invariants and numerical methods for ODEs, *Physica D*, **60**, 303 (1992)
- [23] GEIST K., PARLITZ U. ET LAUTERBORN W., Comparison of different methods for computing Lyapunov exponents, *Prog. Theor. Phys.*, **83**, 875 (1990)
- [24] GEMMELL D.S., Channeling and related effects in the motion of charged particles through crystals, *Rev. Mod. Phys.*, **46**, 129 (1974)
- [25] GOLDSTEIN H., 1980, *Classical Mechanics*, 2ième ed. (Addison-Wesley, New-York)
- [26] GRAY S. K., NOID D. W. ET SUMPTER B. G., Symplectic integrators for large scale molecular dynamics simulations: A comparison of several explicit methods, *J. Chem. Phys.*, **101**, 4062 (1994)
- [27] GUCKENHEIMER J. ET HOLMES P., 1986, *Nonlinear oscillations, Dynamical Systems, and Bifurcations of Vector Fields*, (Springer Verlag, New York)
- [28] GURZADYAN V.G. ET KOCHARYAN A.A., Instability of N-body systems: can computers solve the problem?, *J. Phys. A: Math. Gen.*, **27**, 2879 (1994)
- [29] GUSTAVSON F., On Constructing formal integrals of a Hamiltonian system near an equilibrium point, *Astron. J.*, **71**, 670 (1966)
- [30] HABIB S. ET RYNE R.D., Symplectic calculation of Lyapunov exponents, *Phys. Rev. Lett.*, **74**, 70 (1995)
- [31] HALE J.K. ET KOÇAK H., 1991, *Dynamics and Bifurcations*, (Springer-Verlag, New-York)

- [32] HALL L.S., A theory of exact and approximate configurational invariants, *Physica D*, **8**, 90 (1983)
- [33] HALL N., éditeur, 1993, *Exploring Chaos : A Guide to the New Science of Disorder*, (Norton, New-York)
- [34] HÉNON M., Integrals of the Toda lattice, *Phys. Rev. B*, **9**, 1921 (1974)
- [35] HÉNON M. ET HEILES C., The Applicability of the Third Integral Of Motion : Some Numerical Experiments, *Astron. J.*, **69**, 73 (1964)
- [36] HOOVER W.G., KUM O. ET OWENS N.E., Accurate symplectic integrators via random sampling, *J. Chem. Phys.*, **103**, 1530 (1995)
- [37] KRAUSE H.F., BARRETT J.H., DATZ S., DITTNER P.F., JONES N.L., GOMEZ DEL CAMPO J. ET VANE C.R., Angular distribution of ions axially channeled in a very thin crystal: Experimental and theoretical results, *Phys. Rev. A*, **49**, 283 (1994)
- [38] LASAGNI F.M., Canonical Runge-Kutta methods, *ZAMP*, **39**, 952 (1988)
- [39] LINDHARD J.K., Influence of crystal lattice on motion of energetic charged particles, *Dan. Vidensk. Selsk. Mat.-Fys. Medd.*, **34**, (1965)
- [40] LICHTENBERG A. ET LIEBERMAN M., 1992, *Regular and Chaotic Dynamics*, 2ième ed. (Springer Verlag, Berlin)
- [41] LOPEZ-MARCOS M.A., SANZ-SERNA J.M. ET SKEEL R.D., Explicit symplectic integrators using hessian-vector products, *SIAM J. Sci. Comput.*, **18**, 223 (1997)
- [42] LUNSFORD G.H. ET FORD J., On the Stability of Periodic Orbits for Nonlinear Oscillator Systems in Regions Exhibiting Stochastic Behavior, *J. Math. Phys.*, **13**, 3566 (1972)
- [43] MCLACHLAN R.I. ET ATELA P., The accuracy of symplectic integrators, *Nonlinearity*, **5**, 541 (1992)

- [44] MOLIÈRE G.Z., Theorie der Streuung schneller geladener Teilchen. I. Einzelstreuung am abgeschirmten Coulomb-Feld, *Z. Naturforsch. A*, **2**, 133 (1947)
- [45] OKUNBOR D., Canonical methods for Hamiltonian systems: numerical experiments, *Physica D*, **60**, 314 (1992)
- [46] OKUNBOR D. I., Energy Conserving, Liouville, and Symplectic Integrators, *J. Comp. Phys.*, **120**, 375 (1995)
- [47] OSELEDEC V.I., A Multiplicative Ergodic Theorem: Lyapunov Characteristic Numbers for Dynamical Systems, *Trans. Mosc. Math. Soc.*, **19**, 197 (1968)
- [48] POINCARÉ H., 1892, *Les méthodes nouvelles de la mécanique céleste*, Vol I. (Gauthier-Villars, Paris)
- [49] PRESS W.H., TEUKOLSKY S.A., VETTERLING W.T. ET FLANNERY B.P., 1992, *Numerical Recipes in C*, 2nd ed. (Cambridge University Press)
- [50] RAKOVIC M.J. ET CHU S.I., Approximate dynamical symmetry of hydrogen atoms in circularly polarized microwave fields, *Phys. Rev. A*, **50**, 5077 (1994)
- [51] RAKOVIC M.J. ET CHU S.I., Hydrogen atoms in circularly polarized microwave fields: Near-integrability and ionization, *Phys. Rev. A*, **52**, 1358 (1995a)
- [52] RAKOVIC M.J. ET CHU S.I., New integrable systems: hydrogen atom in external fields, *Physica D*, **81**, 271 (1995b)
- [53] RAKOVIC M.J. ET CHU S.I., Phase-space structure of a new integrable system related to hydrogen atoms in external fields, *J. Phys. A : Math. Gen.*, **30**, 733 (1997)
- [54] RUTH R. D., A canonical integration technique, *IEEE Trans. on Nuclear Science*, **30**, 2669 (1983)
- [55] SANZ-SERNA J. M., Symplectic Runge-Kutta and related methods: recent results, *Physica D*, **60**, 293 (1992)

- [56] SHIMADA M. ET YOSHIDA H., Long-term conservation of adiabatic invariants by using symplectic integrators, *Publ. Astron. Soc. Japan*, **48**, 147 (1996)
- [57] SKEEL R. D. ET BIESIADECKI J. J., Symplectic Integration with Variable Step-size, *Ann. Num. Math.*, **1**, 191 (1994)
- [58] SKEEL R. D. ET GEAR C. W., Does variable step size ruin a symplectic integrator?, *Physica D*, **60**, 311 (1992)
- [59] STOFFER D., Variable steps for reversible integration methods, *Computing*, **55**, 1 (1995)
- [60] TABOR M., The Onset of Chaos in Dynamical Systems, *Adv. Chem. Phys.*, **46**, 73 (1981)
- [61] TODA M., Waves in Nonlinear Lattice, *Prog. Theor. Phys. Suppl.*, **45**, 174 (1970)
- [62] TODA M., Instability of trajectories of the lattice with cubic nonlinearity, *Phys. Lett. A*, **48**, 335 (1974)
- [63] WOLF A., SWIFT J.B., SWINNEY L. ET VASTANO J.A., Determining Lyapunov exponents from a time series, *Physica D*, **16**, 285 (1985)
- [64] WRIGHT J., Method for Calculating a Lyapunov Exponent, *Phys. Rev. A*, **29**, 2923 (1984)
- [65] YOSHIDA H., Construction of higher order symplectic integrators, *Phys. Lett. A*, **150**, 262 (1990)
- [66] ZHONG G. ET MARSDEN J., Lie-Poisson Hamilton-Jacobi theory and Lie-Poisson integrators, *Phys. Lett. A*, **133**, 134 (1988)