

Nouveaux schémas numériques d'intégration de la Dynamique des Particules Dissipatives

Ahmed-Amine HOMMAN, CEA/DAM Île-de-France, 91297 Arpajon

Julien ROUSSEL, ENPC, 77455 Marne-la-Vallée

Gabriel STOLTZ, CERMICS, 77455 Marne-la-Vallée

Jean-Bernard MAILLET, CEA/DAM Île-de-France, 91297 Arpajon

Les méthodes multi-échelles dites de *coarse-graining* sont à ce jour la seule option réaliste pour modéliser des systèmes de tailles mésoscopique avec une résolution atomistique. La *Dynamique des Particules Dissipatives* (DPD), et sa variante la DPDE, utilisée pour modéliser des systèmes hors-équilibre sont de telles méthodes. La DPDE est une EDS de grande dimension, composée d'une partie hamiltonienne et d'une perturbation aléatoire avec un bruit dégénéré. Nous cherchons à développer un schéma numérique qui conserve les invariants de la dynamique et qui soit efficacement parallélisable.

La plupart des schémas connus à ce jour sont basés sur une décomposition du générateur infinitésimal de l'EDS en plusieurs opérateurs. À ce jour, le schéma pour lequel l'erreur sur la mesure invariante est la plus petite est appelé *schéma de Shardlow* [1]. Il consiste à décomposer le générateur en un opérateur correspondant à la partie hamiltonienne et plusieurs opérateurs correspondants à des EDS élémentaires issues de la perturbation aléatoire que l'on sait intégrer analytiquement. La partie hamiltonienne est intégrée avec un schéma de Velocity-Verlet et l'intégration globale est faite en utilisant une formule de Trotter. Cependant, la parallélisation de ce schéma est compliquée à mettre en œuvre [2], et la seule alternative facilement parallélisable repose sur un autre schéma basé sur une décomposition similaire à celle du schéma *Velocity-Verlet*. Néanmoins, ce dernier conserve mal les invariants de la dynamique et donc nécessite de très petits pas de temps pour échantillonner correctement la mesure invariante.

Nous présentons ici trois nouveaux schémas d'intégration de la DPDE, qui sont tous facilement parallélisables. Le premier utilise la décomposition partie hamiltonienne/perturbation aléatoire, intègre la partie Hamiltonienne avec le schéma de Velocity-Verlet et utilise le schéma d'Euler-Maruyama suivi d'une projection afin d'assurer la conservation des invariants pour intégrer la perturbation aléatoire. Le deuxième est une adaptation du schéma de Shardlow dans lequel la matrice de fluctuation-dissipation est rendue plus creuse (ce qui rend le calcul moins onéreux) tout en renormalisant de manière appropriée les éléments non-nuls de ladite matrice pour assurer la consistance de la dynamique. Le troisième schéma est simplement un mélange des deux précédents.

Nous commençons par tester ces trois schémas sur des systèmes à l'équilibre en évaluant leurs erreurs sur la mesure invariante pour des propriétés d'équilibre et de transport. Nous montrons que nos trois schémas présentent des biais moins importants que l'algorithme issu du Velocity-Verlet, et nous étudions l'influence des paramètres de l'EDS sur ces biais. Nous estimons ensuite les erreurs liées aux pas de temps sur les propriétés dynamiques et sur les trajectoires d'un système fortement hors-équilibre.

Références

- [1] T. SHARDLOW, *Splitting for Dissipative Particle Dynamics*, SIAM Journal of Scientific Computing, 2003.
- [2] J. P. LARENTZOS, J. K. BRENNAN, J. D. MOORE, M. LISAL AND W. D. MATTSON, *Parallel implementation of isothermal and isoenergetic Dissipative Particle Dynamics using Shardlow-like splitting algorithms*, Computer Physics Communication, 2014.

Ahmed-Amine HOMMAN, CEA/DAM Île-de-France, 91297 Arpajon Cedex

ahmed-amine.homman@cea.fr

Julien ROUSSEL, École Nationale des Ponts et Chaussées, 6-8 avenue Blaise Pascal, Cité Descartes, Champs-sur-Marne, 77455 Marne-la-Vallée Cedex 2

julien.rousseau@eleves.enpc.fr

Gabriel STOLTZ, CERMICS, École Nationale des Ponts et Chaussées, 6-8 avenue Blaise Pascal, Cité Descartes, Champs-sur-Marne, 77455 Marne-la-Vallée Cedex 2

gabriel.stoltz@cermics.enpc.fr

Jean-Bernard MAILLET, CEA/DAM Île-de-France, 91297 Arpajon Cedex

jean-bernard.maillet@cea.fr