

MASTER'S DE PHYSIQUE I - PROGRAMMATION & CALCUL NUMÉRIQUE

UNIVERSITÉ DE STRASBOURG

DATE: 14 novembre 2014

Projet de semestre

RESPONSABLES : BOILY / CHABERT

PLAN

Ce sujet de TP comprend un projet de développement et fera l'objet de l'interrogation de décembre 2014.

- Le sujet reprend les notions de la technique numérique des intégrales ajustées (arbalète ou *mid-point matching*) vue en cours ;
- On cherchera à mettre en œuvre cette méthode pour résoudre l'équation de Schrödinger à une dimension (1D) en régime stationnaire ;

MATÉRIEL MIS À DISPOSITION:

On récupèrera l'archive `Arbalete.tar` sur le site ENT du cours : elle comprend un exemple de programmes utilisant la technique à implémenter ici.

- Le script de compilation `./compile` doit permettre de compiler les programmes C en exécutables. Ces codes sont facilement adaptables au standard C++ et vous pourrez leur ajouter des classes et méthodes selon vos besoins.

RÉSULTATS / RAPPORT

Vous devrez sauvegarder vos résultats / programmes sur ENT dans un répertoire intitulé **MI-Projet**. Vous y déposerez une archive de vos programmes sources et résultats ; l'archive compressée ne peut dépasser 5 Mo d'espace mémoire par contre.

Date limite de remise des rapports :

vendredi 8 décembre 2014 18h.

Equation de Schrödinger stationnaire

Résolution d'équations différentielles par méthodes itératives

Objectifs :

Retrouver les valeurs propres et la fonction d'onde dans des potentiels 1D simples.

MASTER'S DE PHYSIQUE I - PROGRAMMATION & CALCUL NUMÉRIQUE

UNIVERSITÉ DE STRASBOURG

DATE: 14 novembre 2014

Projet de semestre

RESPONSABLES : BOILY / CHABERT

EQUATIONS DIFFÉRENTIELLES : EQUATION DE SCHRÖDINGER STATIONNAIRE 1D

a) Formules, définitions

L'équation de Schrödinger appliquée à une fonction d'onde ψ résulte en l'équation différentielle du second degré suivante :

$$\frac{d^2}{dx^2} \Psi(x) + J(x) \Psi(x) = 0$$

Equation (1)

$$J(x) \equiv \frac{2m}{\hbar^2} [E - V(x)] .$$

★ La fonction d'onde ψ satisfait aux conditions limites (le confinement) : $\psi(x_{\min}) = \psi(x_{\max}) = 0$.

★ L'énergie mécanique de la particule de masse m est E ; l'objet se déplace dans une cavité bornée sous l'influence d'un potentiel $V(x) < 0$. Un état lié de l'atome aura $\min(V) < E < 0$.

★ on pourra récrire le système d'équation (1) en deux équations à l'ordre 1 en la dérivée p/r à x .

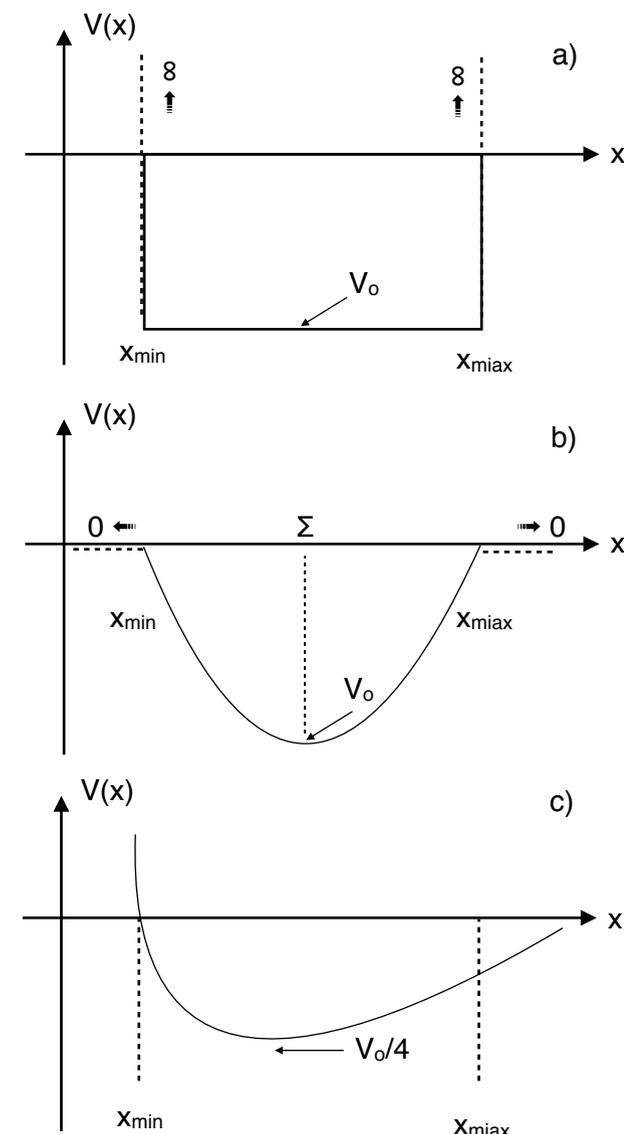
b) Potentiel $V(x)$

Dans ce qui suit on voudra traiter de trois potentiels (voir aussi le graphique sur la droite) :

★ a) Un **potentiel plat** avec $V(x) = V_0 < 0$ pour $x_{\min} < x < x_{\max}$ et $V(x) = \text{infini}$ sinon (la cavité est bornée par des murs solides et isolants) ;

★ b) Le **potentiel quadratique** : avec $\Delta = (x_{\max} - x_{\min}) / 2$ et $\Sigma = (x_{\max} + x_{\min}) / 2$ alors $V(x_{\min} < x < x_{\max}) = V_0 (1 - [x - \Sigma]^2 / \Delta^2)$ et $V(x) = 0$ hors de la cavité ;

★ c) Le **potentiel de Lennard-Jones** : $V(x) = V_0 ([x_{\min} / x]^6 - [x_{\min} / x]^{12})$ qui admet un minimum = $V_0 / 4$ en $x / x_{\min} = 2^{1/6}$.



MASTER'S DE PHYSIQUE I - PROGRAMMATION & CALCUL NUMÉRIQUE

UNIVERSITÉ DE STRASBOURG

DATE: 14 novembre 2014

Projet de semestre

RESPONSABLES : BOILY / CHABERT

TRAVAIL À FAIRE, QUESTIONS À SE POSER

La technique d'intégration consiste à raccorder deux courbes, l'une intégrée depuis la valeur x_{\min} , vers l'extérieur; l'autre intégrée depuis x_{\max} , vers l'intérieur. On doit fixer $E > V_0$ pour une solution physiquement possible. L'état propre du système pour une énergie donnée est obtenue lorsque les deux courbes intégrées se rencontrent en un point intermédiaire $x = x_m$ tel que la fonction d'onde et sa dérivée sont continues en ce point. On satisfait alors aux deux conditions suivantes, où les indices « < » et « > » désignent le sens d'intégration de chaque courbe, en partant de la borne supérieur, vers le plan milieu (<) et inversement, de la borne inférieure vers x_m (>) :

Equations (2)

$$\begin{aligned}\Psi_{<}(x_m) &= \Psi_{>}(x_m) \\ \left. \frac{d}{dx} \Psi_{<}(x) \right|_{x_m} &= \left. \frac{d}{dx} \Psi_{>}(x) \right|_{x_m} .\end{aligned}$$

- ⇒ Une intégration pour E donnée peut ne pas satisfaire à l'une ou l'autre des conditions : est-ce dû au choix de E, à l'imprécision de l'intégrateur, ? ...
- ⇒ Lorsque nous avons obtenu deux solutions (modes propres d'énergie E_1 et E_2) alors les deux fonctions d'onde satisfont à la condition d'orthogonalité

Equation (3)

$$\int_{x_{min}}^{x_{max}} \Psi_{E_1}(x) \Psi_{E_2}(x) dx = 0$$

- ⇒ Montrez que cette condition est satisfaite pour au moins une paire de solutions trouvées.

Modifications, procédure

- Débutez par le cas simple d'un potentiel plat et explorez le comportement de votre intégrateur : pensez à implémenter les Eq. (2) et (3) entre autres ;
- Programmez des modules souples permettant de changer de potentiel facilement (à la compilation, ou par saisie interactive) ;
- Inspectez les équations et choisissez une *jauge* telle que les chiffres sont des l'ordre de l'unité pour minimiser la plage des valeurs obtenues.

PHYSIQUE MASTER'S I - PROGRAMMATION ET CALCUL NUMÉRIQUE

UNIVERSITÉ DE STRASBOURG

DATE: 14 novembre 2014

Projet de semestre

RESPONSABLE: CHRISTIAN BOILY

PLAN

Ce sujet de TP comprend un projet de développement et fera l'objet de l'interrogation de décembre 2014.

- Le sujet reprend les notions théoriques de la transformée de Fourier vue en cours de mathématiques et de physique analytique ;
- On cherchera à mettre en œuvre ces codes dans leur état actuel : résolution de l'équation de Poisson sur une grille à une (1D) ou deux (2D) dimensions, de maillage $= n$ ou $n_x \times n_y$, respectivement.
- Le script de compilation `.compile` doit permettre de compiler les programmes C en exécutables. Ces codes sont facilement adaptable au standard C++ et vous pourrez leur ajouter des classes et méthodes selon vos besoins.

MATÉRIEL MIS À DISPOSITION:

On récupèrera l'archive `FFT.w.tar` sur le site ENT du cours : elle comprend des exemples de programmes utilisant la bibliothèque FFTW version 3.3.3.

RÉSULTATS / RAPPORT

Vous devrez sauvegarder vos résultats / programmes sur ENT dans un répertoire intitulé **MI-Projet**. Vous y déposerez une archive de vos programmes sources et résultats ; l'archive compressée ne peut dépasser 5 Mo d'espace mémoire par contre.

Date limite de remise des rapports :

vendredi 8 décembre 2014 18h.

Résolution d'équations différentielles par méthode spectrale de Fourier

Cas spécifique de l'équation de Poisson, et intégrateur dynamique.

Référence utile : wikipédia

[http://fr.wikipedia.org/wiki/Transformée de Fourier rapide](http://fr.wikipedia.org/wiki/Transformée_de_Fourier_rapide)

[http://fr.wikipedia.org/wiki/Transformée de Fourier discrète](http://fr.wikipedia.org/wiki/Transformée_de_Fourier_discrète)

PHYSIQUE MASTER'S I - PROGRAMMATION ET CALCUL NUMÉRIQUE

UNIVERSITÉ DE STRASBOURG

DATE: 14 novembre 2014

Projet de semestre

RESPONSABLE: CHRISTIAN BOILY

REPRÉSENTATION D'UN SIGNAL PAR MODES SPECTRAUX

a) Formules, définitions: signal continu

★ On imagine une courbe continue dans l'espace, $h(x)$, et on se limitera au cas à une dimension pour simplifier. Dans un premier temps, on remarquera que l'intégrale I ci-dessous du produit de deux cosinus, couvrant tout l'espace, ...

$$\begin{aligned} I &\equiv \lim_{\Delta X \rightarrow \infty} \frac{1}{2\Delta X} \int_{-\Delta X}^{+\Delta X} \cos(kx) \cos(k'x) dx \\ &= \lim_{\Delta X \rightarrow \infty} \frac{1}{2\Delta X} \times \left[\frac{\cos(k+k')x}{k+k'} + \frac{\cos(k-k')x}{k-k'} \right]_{-\Delta X}^{+\Delta X} \\ &\leq \lim_{\Delta X \rightarrow \infty} \frac{1}{2\Delta X} \times \left[\frac{2}{k+k'} + \frac{2}{k-k'} \right]_0^{+\Delta X} = 0 \end{aligned}$$

... s'annule ($I = 0$) si $k \neq k'$, et $I = 1$ si $k = k'$. Un résultat semblable vaut aussi pour les fonctions *sinusoïdales*. On dit que les fonctions trigonométriques sont **orthogonales** par rapport à l'intégrale sur le domaine des réels.

En conséquence, les fonctions trigonométriques peuvent servir de **base** (orthogonale) pour la reconstitution de n'importe quelle fonction continue sur tout le domaine x : [- infini, + infini].

★ La transformée de $h(x)$ est une fonction $H(k)$, inscrite dans l'espace des nombres d'onde k ou *espace de Fourier*, telle que

$$h(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} H(k) e^{-ikx} dk \Leftrightarrow H(k) = \int_{-\infty}^{+\infty} h(x) e^{ikx} dx .$$

avec $\exp(ikx)$ la formule d'Euler pour les fonctions trigonométriques ; on rappelle que le nombre d'onde $k = 2\pi/\lambda$ (ce qui explique le facteur $1/2\pi$ devant l'intégrale pour $h(x)$).

★ Convolution: on appelle la *convolution* de deux fonctions h et g l'intégrale : $\text{convolution}(g,h) = \int_{-\infty}^{+\infty} g(u)h(x-u)du \equiv g * h(x)$

PHYSIQUE MASTER'S I - PROGRAMMATION ET CALCUL NUMÉRIQUE

UNIVERSITÉ DE STRASBOURG

DATE: 14 novembre 2014

Projet de semestre

RESPONSABLE: CHRISTIAN BOILY

REPRÉSENTATION D'UN SIGNAL PAR MODES SPECTRAUX - SUITE

b) Théorème de la convolution:

Le théorème de la convolution dit que la convolution de deux fonctions de l'espace est le produit de leur transformée dans l'espace de Fourier

$$g * h(x) \Leftrightarrow G(k)H(k)$$

❖ La convolution d'une paire de fonction (g,h) dans l'espace réel permet de d'exprimer cette intégrale dans la base de Fourier: la solution recherchée s'obtiendra par une **transformée inverse**, de l'espace de Fourier, vers l'espace réel.

c) Application au champ gravitationnel d'un système auto-gravitant

Un exemple qui permet d'illustrer ces idées est celui de l'équation-type des sources (électro-statiques ou gravitationnelles) dont la distribution dans l'espace donne lieu à un potentiel en tout point \mathbf{x} . Si la distribution des sources est notée $S(\mathbf{x})$ et le potentiel $\Phi(\mathbf{x})$, alors la paire doit satisfaire à l'équation de Poisson

$$\nabla^2 \Phi(\mathbf{x}) = S(\mathbf{x})$$

Le problème consiste à résoudre l'équation de Poisson pour une distribution de sources données. Celles-ci sont distribuées sur une grille cartésienne (de pas h constant) et nous nous limiterons au cas à une dimension pour simplifier.

Pour le cas d'une distribution de masse dans l'espace nous aurons (pour une densité ρ)

$$S(\mathbf{x}) = 4\pi G\rho(\mathbf{x}) .$$

Pour les traitements numérique il est conventionnel de fixer la constante de gravitation $G = 1$ (choix de jauge).

PHYSIQUE MASTER'S I - PROGRAMMATION ET CALCUL NUMÉRIQUE

UNIVERSITÉ DE STRASBOURG

DATE: 14 novembre 2014

Projet de semestre

RESPONSABLE: CHRISTIAN BOILY

REPRÉSENTATION D'UN SIGNAL PAR MODES SPECTRAUX - SUITE

d) Fonction de Green

La fonction de Green est une fonction de poids permettant d'appréhender l'intégrale recherchée; en posant

$$G_r(\mathbf{x}) \equiv -\frac{1}{4\pi} \frac{1}{|\mathbf{x}|}$$

on peut montrer que le laplacien, appliqué à cette fonction, mène à la fonction "delta" de Dirac,

$$\nabla^2 G_r(\mathbf{x}) = \delta(\mathbf{x})$$

❖ **Rappel** : la fonction de Dirac permet d'écrire $\int f(x) \delta(x-x_0) dx = f(x_0)$. La fonction de Dirac permet donc d'évaluer l'intégrand en un point du domaine d'intégration.

En recherchant la solution pour $\Phi(\mathbf{x})$ sous la forme d'une convolution $G_r * S(x)$, soit

et cette solution satisfera l'équation de Poisson
$$\Phi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} G_r(x-u)S(u) du$$

$$\nabla^2 \Phi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} \nabla^2 G_r(x-u)S(u) + G_r(x-u)\nabla^2(S[u]) du = S(x) + \int_{surface} G_r \nabla S \cdot d\mathbf{v} = S(x)$$

où la dernière égalité s'obtient par application du théorème de Gauss et en admettant que le gradient des sources, évalué sur la "surface" bornant le volume d'intégration, tend vers zéro. A une dimension, la surface s'interprète comme un point infiniment loin de l'origine. On notera que la fonction de Green décroît comme $1/x$ et tend elle-même vers zéro.

PHYSIQUE MASTER'S I - PROGRAMMATION ET CALCUL NUMÉRIQUE

UNIVERSITÉ DE STRASBOURG

DATE: 14 novembre 2014

Projet de semestre

RESPONSABLE: CHRISTIAN BOILY

REPRÉSENTATION D'UN SIGNAL PAR MODES SPECTRAUX - FIN

e) Convolution et résolution

Le théorème de la convolution permet d'écrire (le sous-scripte k indique l'espace de Fourier)

$$\Phi_k(k) = G_{r,k}(k) \cdot S_k(k)$$

qui sont toutes des quantités complexes en principe. On retrouve alors le potentiel $\Phi(\mathbf{x})$ aux moyens d'une transformée inverse de Fourier.

Dans cette dernière étape, le choix est fait par défaut de normaliser le potentiel tel que

$$\lim_{|\mathbf{x}| \rightarrow \infty} \Phi(\mathbf{x}) = 0.$$

PHYSIQUE MASTER'S I - PROGRAMMATION ET CALCUL NUMÉRIQUE

UNIVERSITÉ DE STRASBOURG

DATE: 14 novembre 2014

Projet de semestre

RESPONSABLE: CHRISTIAN BOILY

La bibliothèque FFTW version 3.3.3 : compilation, lien, exécution

La bibliothèque `fftw3` permet rapidement de mettre en œuvre les transformées de Fourier selon l'algorithme rapide de Tukey et Cooley qui se base sur le parcours d'un arbre binaire. Le site officiel de cette bibliothèque publique est <http://www.fftw.org/> : vous y trouverez des liens vers de la documentation détaillée.

⇒ Utilisez l'un des compilateurs gcc (c++, c++-mp-4.3 ou 4.4) pour compiler les codes-tests de l'archive FFTw.tar.

Travail demandé

① Première phase: acclimatation

Pour vous faire la main, reprenez les codes fournis et reproduisez les données obtenues pour des cas-typés à 1d, 2d (signaux simples) puis pour résoudre l'équation de Poisson sur une grille (code Poisson.c).

⇒ Ne pas oublier de vérifier les liens vers les fichiers .h (patrons de fonctions) dont a besoin le programme: le fichier `fftw3.h` est local, fourni dans l'archive.

⇒ Trois exemples d'utilisation de la bibliothèque (`single.c`, `single2d.c` et `Poisson.c`) ont été compilés et exécutés (voir fichiers ".log" de l'archive).

② Seconde phase: modifications à apporter aux codes, mesure des performances

Pour apprécier les performances de l'algorithme "FFTW", il convient de modifier les paramètres et appels à fonction pour prendre la mesure du temps de calcul en relation avec la taille de la grille (ou *maillage*) utilisé. On travaillera en 2d, soit avec le code `signal2d.c` ou `Poisson.c`

● En utilisant les fonctions de temps des TP précédents, cherchez à démontrez la loi d'échelle du temps de calcul en fonction de la taille nette de la grille ($n_x \times n_y$). Il faudra donc modifier la grille.

● Le code `Poisson.c` doit permettre de calculer le potentiel gravitationnel de N éléments-masses : un algorithme classique de sommation demanderait de l'ordre de $\sim N^2$ opérations. Quel est alors l'avantage de la FFT? En pratique, les points de la grille ne coïncident pas avec la position des N éléments de masse: expliquez comment faire pour reconstruire le profil de densité (on parle du signal S ici) à partir de la position (vectorielle) des N éléments. Cet algorithme est-il une entache à la performance de la transformée FFT? Discutez de la mise à l'échelle avec le nombre de corps, N .

PHYSIQUE MASTER'S I - PROGRAMMATION ET CALCUL NUMÉRIQUE

UNIVERSITÉ DE STRASBOURG

DATE: 14 novembre 2014

Projet de semestre

RESPONSABLE: CHRISTIAN BOILY

Travail demandé - suite

③ Troisième phase: intégrateur dynamique

Lorsque l'on veut intégrer l'orbite d'un corps céleste, il faut intégrer un système de deux équations différentielles dans le temps :

$$\begin{aligned}\dot{\mathbf{x}} &= \mathbf{v} \\ \dot{\mathbf{v}} &= -\nabla\Phi(\mathbf{x}).\end{aligned}$$

Pour calculer le gradient, on peut choisir entre deux possibilités : 1) Calculer le potentiel par FFT puis retrouver le gradient par exemple au moyen d'un schéma aux différences finies partout sur la grille ; 2) chercher à calculer la transformé de Fourier du gradient lui-même.

Discutez de chacune des solutions, puis développez un / des argument/s en faveur de l'une ou l'autre approche.

④ Programmation

En vous inspirant des codes sources mis à disposition, programmez l'une ou l'autre méthode discutée au point (3) pour le cas d'une distribution de matière (S) respectant la symétrie axiale autour de l'origine. Vous pouvez vous limiter à l'intégration d'une orbite (N = 1) mais tout au moins discutez du cas général où N est choisi par l'utilisateur et peut être grand : c'est le cas de source gravitationnelles à l'échelle des galaxies, par exemple.

Que manque-t-il à votre programme pour qu'il soit auto-cohérent ? Indiquez ce qu'il faut ajouter au programme pour le rendre cohérent avec la solution de Poisson. Existe-il une relation entre le nombre d'éléments-masses N et les dimensions de la grille $n_x \times n_y$? Vous préciserez le nombre d'éléments N, les conditions initiales et le temps total d'intégration.

--- oOo ---

1 Simulation du trafic routier

Objectif :

Ce projet consiste à simuler l'évolution du trafic routier en utilisant des méthodes analogues à celles employées en hydrodynamique. Une approche macroscopique permettra de caractériser le trafic routier en terme de densité et de flux de véhicules.

Méthodes ou algorithmes utilisés :

- Méthode des différences finies

Bibliographie et liens utiles :

- <http://www-ljk.imag.fr/membres/Emmanuel.Maitre/lib/exe/fetch.php?media=trafic.pdf>
- http://www.fundacioabertis.org/rcs_pub/premi_abertis_costeseque.pdf
- <http://letraficroutier.olympie.in/modelecontinupart4.html>
- <https://tel.archives-ouvertes.fr/file/index/docid/765410/filename/hdrGoatin.pdf>

Le contexte

La modélisation du trafic routier est un enjeu sociétal important. Les bouchons qui apparaissent quotidiennement dans les grandes villes et sur les grands axes routiers fait non seulement perdre du temps aux automobilistes, mais à également un impact sur le bilan économique de l'État et des entreprises. De nombreuses recherches ont été menées sur ce sujet depuis plusieurs dizaines d'années et de nouveaux modèles sont encore sur le banc d'essai pour tenter d'optimiser l'organisation du trafic et notamment le trafic urbain (optimisation de la longueur des feux dans les villes, etc). Ils existent deux approches pour simuler le trafic routier. Une première approche microscopique consiste à simuler le comportement de chaque automobiliste. Une telle approche permet de rendre compte de la diversité des véhicules et de leur conducteur¹ ainsi que de prendre en compte les interactions entre automobilistes (adaptation de la distance entre véhicule, changement de voie, etc). Toutefois cette approche est limitée en temps de calcul notamment lorsque l'on s'intéresse à un grand nombre de véhicules ou que l'on intègre sur de grands intervalles de temps ou de grandes distances. Une deuxième approche macroscopique consiste à s'intéresser à des grandeurs portant sur de plus grandes échelles en distance. Dans une telle approche, on ne s'intéresse plus qu'au comportement "moyen" et non plus aux comportements individuels. Le trafic routier peut alors être modéliser par des équations qui s'apparentent à des problèmes d'hydrodynamique : le trafic routier se comportant comme un fluide dont la densité varie au cours du temps.

1.1 Modélisation du problème

Il faut alors définir les grandeurs pertinentes pour décrire le trafic routier :

- La densité du trafic définie en tout point du parcours :

$$\rho(x, t) = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{N_{\Delta x}(x, t)}{\Delta x} \quad (1)$$

C'est le nombre moyen de voitures par unité de distance.

1. En ce qui concerne les véhicules, on prendra en compte des caractéristiques telles que la longueur, puissance, la capacité de freinage, ... En ce qui concerne les conducteurs, on s'intéressera à leur temps de réaction, ainsi que leurs comportements : changement de file, utilisation d'itinéraire secondaire, etc ...

- Le flux de voitures, c'est à dire le nombre moyen de voitures par unité de temps :

$$q(x, t) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{N_{\Delta t}(x, t)}{\Delta t} \quad (2)$$

La vitesse moyenne des automobilistes est reliée aux deux variables précédentes par la relation :

$$v(x, t) = \frac{q(x, t)}{\rho(x, t)} \quad (3)$$

Tout comme l'hydrodynamique utilise le principe de conservation de la masse, nous devons ici respecter la conservation du nombre de voitures. Ceci nous conduit à l'équation suivante :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = - \frac{\partial q}{\partial x} \quad (4)$$

Pour résoudre ce problème à deux inconnues, il faut introduire une nouvelle relation permettant d'exprimer q en fonction ρ . On parle de diagramme fondamental, équivalent à une équation d'état en thermodynamique. On pourra ensuite réexprimer l'équation précédente sous la forme :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = - \frac{\partial q}{\partial \rho} \frac{\partial \rho}{\partial x} \quad (5)$$

Il existe plus d'une vingtaine de diagrammes fondamentaux que l'on peut regrouper sous deux grandes catégories :

1. Modèle d'ordre 1 :

Le flux dépend de la densité : $q(x, t) = q(\rho(x, t)) = c\rho(x, t)$

où c n'est pas nécessairement une constante. Il existe plusieurs classe de modèles, en voici quelques-uns :

$$q(\rho) = v_M \rho(x, t) \left(1 - \frac{\rho}{\rho_M}\right) \quad (6)$$

$$q(\rho) = v_M \rho(x, t) e^{-\frac{\rho}{\rho_M}} \quad (7)$$

$$q(\rho) = v_M \rho(x, t) e^{-\frac{1}{\alpha} \left(\frac{\rho}{\rho_M}\right)^\alpha} \quad (8)$$

où v_M est la vitesse maximale et ρ_M la densité maximale. La vitesse maximale correspond au type de route considérée (ville, périphérique, autoroute). La densité maximale correspond à une situation d'embouteillage et dépend donc de la distance moyenne entre véhicules lorsqu'ils sont à l'arrêt. En injectant l'expression de $q(\rho)$ dans l'équation 5, on aboutit à une équation du type transport.

2. Modèles d'ordre 2.

Le flux dépend de la densité et de sa dérivée : $q(x, t) = q(\rho(x, t), \frac{\partial \rho}{\partial x})$.

On aboutit dans ce cas-ci à une équation de transport-diffusion. On peut utiliser la relation

$$q = c\rho - \alpha \frac{\partial \rho}{\partial x} \quad (9)$$

Selon les modèles, α pourra être une constante (vitesse de propagation des perturbations) ou des fonctions de ρ . Pour en savoir plus, vous pouvez vous reporter à la page 25 de la référence ici.

Pour modéliser le trafic routier, il faut donc connaître l'expression de q . Vous pourrez rechercher d'autres modèles plus élaborées dans la littérature si vous le souhaitez.

1.2 Résolution numérique

On discrétise l'espace en N intervalles de longueur Δx comme l'illustre la figure 2. Les échelles de distances considérées pour l'étude du problème doivent être grandes au regard de la taille d'un véhicule, typiquement de quelques dizaines à quelques centaines de mètres. C'est un paramètre configurable.

On s'intéressera à l'évolution du système en discrétisant le temps en intervalle Δt . Le pas en temps Δt doit être inférieur au temps caractéristique que met un véhicule pour parcourir Δx . C'est également un paramètre configurable.

Nous utiliserons le schéma de Godunov pour traiter ce problème. Il faut tout d'abord fixer des conditions initiales, c'est à dire connaître la valeurs de la vitesse moyenne et de la densité en chaque cellule. Le schéma de Godunov permet de faire évoluer le système dans le temps par petit pas Δt . Pour un temps donné, on détermine les valeurs de la vitesse de circulation dans chaque intervalle de la route. On utilisera l'expression suivante :

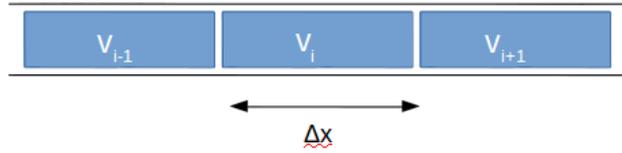


FIGURE 1 – Illustration de la discrétisation d’une portion de route.

$$v_i^{n+1} = v_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (f_{i+1}^n - f_i^n) \quad (10)$$

Cette expression de f dépend du schéma choisi. Dans le cas d’une approche à l’ordre 1 suivant l’équation 6, on obtiendra l’expression :

$$v_i^{n+1} = v_i^n - V_M \times \frac{\Delta t}{\Delta x} (v_i^n - v_{i-1}^n) \quad (11)$$

Dans le cas d’une approche à l’ordre 2 suivant l’équation 9, on obtiendra l’expression :

$$v_i^{n+1} = v_i^n - \alpha \times \frac{\Delta t}{\Delta x^2} (v_{i+1}^n - 2v_i^n + v_{i-1}^n) \quad (12)$$

Une fois la vitesse connue, on pourra remonter à la densité et au flux.

Pour résoudre le problème, il est nécessaire de préciser les conditions aux limites (ρ et q définis aux extrémités de la route considérée) et les conditions initiales (connaissance de ρ et v en à $t=0$ en tout point de la route).

Carte routière et conditions de trafic

On pourra traiter le problème dans plusieurs contextes en commençant par les plus simples. Voici quelques exemples de "route" possible :

- Un circuit automobile (conditions aux limites : $\rho(0, t) = \rho(L, t)$)
- Un tronçon d’autoroute
- ...

En ce qui concerne les conditions aux limites, on pourra s’intéresser aux cas suivantes :

- flux entrant augmentant avec le temps
- flux entrant décroissant avec un trafic congestionné
- ...

Résultats et analyse

Vous pourrez illustrer avec des graphiques le comportement de la méthode numérique en fonction des paramètres choisis et du modèle considéré. Vous pourrez représenter l’évolution des grandeurs caractéristiques du trafic routier en fonction du temps.

Pour aller plus loin

- Vous pourrez traiter différents diagrammes fondamentaux et les comparer.
- Vous pourrez également essayer de traiter des cas non homogènes, c’est à dire lorsqu’il y a des changement de vitesse maximale sur un circuit ou lorsque le nombre de voies évolue. Attention, les cas non homogènes doivent être ne sont pas correctement traités par le schéma de Godunov, nous pourrez ainsi voir ses limites. Si vous le souhaitez, vous pourrez également rechercher des schémas plus évolués dans la bibliographie.
- etc

2 Ajustement de modèles sur des données

Objectif :

Mettre en œuvre les méthodes numériques permettant d'ajuster des modèles théoriques sur des résultats expérimentaux. L'étudiant aura la liberté de choisir des modèles d'intérêt (plusieurs étant proposés). À défaut d'utiliser de vraies données (ce qui n'est pas exclu), l'étude pourra être menée sur des simulations Monte Carlo.

Méthodes ou algorithmes utilisés :

- Méthode des gradients conjugués (et ses dérivées)
- Recuit déterministe

Bibliographie et liens utiles :

- Génération de nombres aléatoires gaussien en C++ : http://www.cplusplus.com/reference/random/normal_distribution/
- Calcul de la probabilité de χ^2 : http://people.sc.fsu.edu/~jburkardt/cpp_src/asa091/asa091.html

Les physiciens sont fréquemment amenés à traiter des résultats expérimentaux qu'ils souhaitent comparer à des modèles théoriques. Cette comparaison permet de valider ou invalider des classes de modèles, d'estimer leurs paramètres, ou bien encore pour prédire les performances de futures expériences (approche Monte-Carlo).

Pour résoudre ce problème, on cherche à minimiser une fonction d'écart calculée entre les points expérimentaux et les points prédits (dépendants de paramètres). Une des méthodes les plus employées est la méthode des moindres carrés où interviennent les incertitudes expérimentales. Pour illustrer notre propos, nous allons décrire le cas à deux variables (x,y).

On s'intéresse au comportement de la variable y en fonction de x et l'on cherche à ajuster une fonction $y = f(x)$. On dispose alors d'un nombre fini de couples de points (x_i, y_i) correspondant aux valeurs mesurées. À chaque valeur mesurée est associée une incertitude sur la variable y_i : σ_{y_i} .

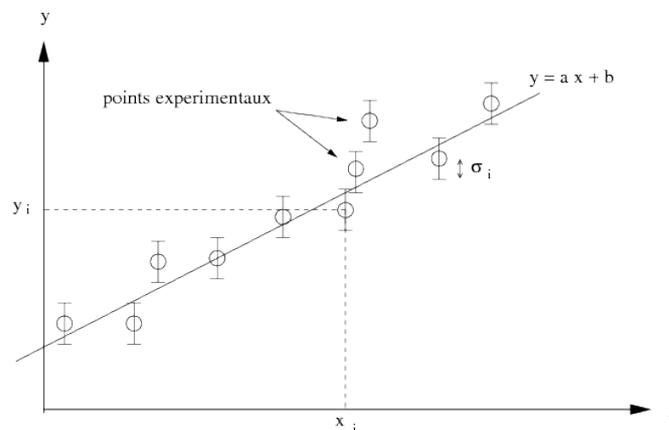


FIGURE 2 – Exemple d'ajustement linéaire.

On définit la variable χ^2 telle que :

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^n \left(\frac{f(x_i) - y_i}{\sigma_i} \right)^2 \quad (13)$$

Ajustement le modèle aux données revient donc à minimiser la fonction de χ^2 par rapport à tous les paramètres du modèle $y = f(x)$.

Prenons un cas particulier d'une fonction linéaire de type $ax + b$, l'expression de χ^2 devient alors :

$$\chi^2(a, b) = \sum_{i=1}^n \left(\frac{ax_i + b - y_i}{\sigma_i} \right)^2 \quad (14)$$

Chercher le minimum de cette fonction revient à chercher les valeurs a et b pour lesquelles les dérivées partielles s'annulent.

$$\frac{\partial \chi^2(a, b)}{\partial a} = 0, \quad (15)$$

$$\frac{\partial \chi^2(a, b)}{\partial b} = 0, \quad (16)$$

Cette méthodes peut être généralisées à toute fonction $y = f(x; \vec{p})$, où correspond à l'ensemble des paramètres du modèle. Attention, le nombre de points expérimentaux doit toujours être supérieur au nombre de paramètres du modèle.

Pour un ajustement donné, on peut vérifier la compatibilité entre modèle et expérience. La variable χ^2 minimisée doit suivre une loi de χ^2 à n degré de liberté où $n = N_{points} - N_{parametres} - 1$. Il existe des méthodes permettant de calculer la probabilité associée (donner ref).

Algorithmes

Il existe de nombreux algorithmes permettant de résoudre des problèmes de minimisation. Nombre d'entre eux sont inclus dans des logiciels ou des packages informatiques (Excell, Matlab, R, GSL, Minuit, etc). L'étudiant aura la liberté de choisir le ou les algorithmes qu'il souhaitera implémenter lui-même pour résoudre ce problème, mais il sera fortement encouragé pour choisir parmi ces deux :

- Méthode des gradients conjugués. Il existe plusieurs variantes de cette méthode dont la version de Fletcher-Reeves. Cette méthode repose sur la connaissances du gradient de la fonction à minimiser.
- Méthode du recuit simulé (Simulated Annealing en anglais). Cette méthode inspirée de la la thermodynamique présente l'originalité d'utiliser de l'aléatoire. Elle est très utilisée dans le cas de résolution de problèmes complexes (existence de minimum locaux, etc).

2.0.1 Méthode des gradients conjugués

Cette méthode utilise non seulement la direction fournie par le gradient de la fonction que l'on cherche à minimiser, mais elle ajuste en plus le pas avec lequel le point \vec{x} va évoluer. Elle utilise dans un deuxième temps la direction conjuguée. On programmera l'algorithme de la façon suivante :

On commence par choisir un point de départ $\vec{x}^{(0)}$ et on calcule son gradient $\nabla f|_{\vec{x}^{(0)}}$ que l'on définit comme la direction $\vec{p}^{(0)}$.

La procédure itérative consiste à répéter les étapes suivantes jusqu'à ce que l'algorithme converge :

1. Dans la direction définie par $\vec{p}^{(k)}$, chercher le coefficient α_k qui minimise $f(x^{(k)} + \alpha_k \vec{p}^{(k)})$.
2. Calculer $x^{(k+1)} \equiv x^{(k)} + \alpha_k \vec{p}^{(k)}$.
3. Calculer le nouveau gradient $\vec{\nabla}^{(k+1)}$.
4. Calculer

$$\beta^{(k+1)} \equiv \frac{\|\vec{\nabla}^{(k+1)}\|^2}{\|\vec{\nabla}^{(k)}\|^2} \quad (17)$$

5. Calculer $p^{(k+1)} \equiv -\vec{\nabla}^{(k+1)} + \beta^{(k+1)} p^{(k)}$.

On utilisera comme condition d'arrêt

$$\frac{\|\vec{\nabla} f|_{\vec{x}^{(i)}}\|}{\sqrt{1 + \|\vec{\nabla} f|_{\vec{x}^{(i)}}\|}} < \delta,$$

avec $\delta = 10^{-8}$.

Pour plus d'informations :

- Cours Dudek
- http://perso.unifr.ch/ales.janka/numeroptim/07_conjgrad.pdf

2.0.2 Recuit déterministe (simulating annealing)

Pour que cette méthode soit compétitive par rapport aux autres méthodes, il faut que la fonction à minimiser soit assez compliquée (plusieurs minimum locaux) et l'espace très large.

Exemple de fonction test :

$$f(x, y) = x^2 + y^2 - \cos(12x) - \cos(18y) \quad (18)$$

Pour plus d'informations :

- Wikipedia : http://en.wikipedia.org/wiki/Simulated_annealing
- www.cs.nott.ac.uk/~gjk/aim/notes/simulatedannealing.doc

2.1 Choix du modèle et points expérimentaux

Vous avez une grande liberté sur les modèles auxquels vous pourrez vous intéresser. Il est toutefois conseillé de commencer par des fonctions simples avant de complexifier le problème. La première des choses à définir sera le nombre de dimensions : fonction d'une ou plusieurs variables. Il est conseillé de commencer par le cas le plus simple avec une loi linéaire car il est possible de calculer la solution analytique. Limitez-vous aux cas à une puis deux variables. Pour choisir le modèle à étudier, vous pouvez vous inspirer de loi physiques ou d'autres modèles scientifiques.

A défaut d'avoir des résultats expérimentaux, vous devrez générer des points expérimentaux. Pour ceci, vous devrez faire appel à des méthodes Monte-Carlo (plus d'info). Vous pourrez considérer les erreurs gaussiennes pour les points de mesures. L'écart-type pourra être considéré comme fixe ou comme dépendant des autres variables, dans tous les cas de figure cette information sera un paramètre ajustable dans votre problème.

2.2 Exemples de modèles

Vous pourrez mettre en œuvre ce projet sur le ou les modèles de votre choix. Commencer par des modèles *ad hoc* (ex : modèle linéaire) permettra de tester dans un premier temps les méthodes numériques. Par la suite, vous êtes invité à choisir un modèle physique de votre choix et de vous intéresser à la mesure de certains de ses paramètres. En voici quelques-uns cités à titre d'exemple.

- Mesure de la masse (M) et de la largeur (Γ) d'une résonance :

$$f(E) = k \times \frac{\Gamma^2/4}{(E - M)^2 + \Gamma^2/4} \quad (19)$$

où E est l'énergie et k un facteur de normalisation.

- Mesure du temps de vie d'un élément radioactif

$$N(t) = N_0 e^{-\frac{t}{\tau}} \quad (20)$$

où N est le nombre de noyaux à l'instant $t = 0$ et $N(t)$ le nombre de noyaux à l'instant t .

- Détermination de la masse d'un trou noir à partir de la mesure de l'évolution de la position d'étoiles orbitant autour.

Exemple : S2 autour de Sagittarius A*

Plus d'information : http://en.wikipedia.org/wiki/Supermassive_black_hole

- Phénomènes oscillatoires avec amortissement.

Exemple : oscillation d'un pendule amorti : mesure du coefficient de frottement et de la masse du pendule.

- etc

2.3 Analyse Monte-Carlo

Il est possible d'inférer l'incertitude obtenue sur les paramètres du modèle étudié en fonction des conditions de l'expérience, qui sont :

- L'incertitude sur les mesures expérimentales
- La plage de valeurs mesurées
- Le nombre de points de mesure

Pour cela il faut procéder de la manière suivante :

- Choisir un modèle ainsi que des conditions d'expériences
- Simuler plusieurs milliers de pseudo-données à partir de tirages Monte-Carlo
- Ajuster le modèle pour chacune de ces pseudo-données, *ie*, minimiser le χ^2 obtenu

- Étudier l'écart-type des distributions de paramètres ajustés obtenus. Ils vous permettront d'estimer l'incertitudes attendues sur les paramètres du modèle.

2.4 Analyse des résultats

Plusieurs niveaux d'analyse des résultats sont possibles :

- Caractérisation de la méthode de minimisation : convergence, précision, etc
- Sensibilité aux conditions initiales
- Comparaison des différentes méthodes
- Estimation de la précision obtenue sur les paramètres du modèle en fonction de l'incertitude expérimental