

bonjour

je voudrais simuler l'équation de Fermi-Pasta-Ulam.

on a une série 1D de N atomes (de masse unitaire) dont l'Hamiltonien s'écrit:

$$H = \sum_{i=0}^{N-1} p_i^2 + \frac{K}{2} \sum_{i=0}^{N-1} (u_{i+1} - u_i)^2 + K \frac{\alpha}{3} \sum_{i=0}^{N-1} (u_{i+1} - u_i)^3 \quad (1)$$

avec $\alpha \ll 1$

qu'on peut remettre sous la forme:

$$\ddot{u}_i = K(u_{i+1} - u_{i-1} - 2u_i) + \alpha K((u_{i+1} - u_i)^2 + (u_{i-1} - u_i)^2) \quad (2)$$

d'abord j'étudie les modes normaux, donc je reprend la formule (2) sans les termes non-linéaires:

$$\ddot{u}_i = K(u_{i+1} + u_{i-1} - 2u_i) \quad (3)$$

je définis la TF

$$u_i \rightarrow U_\xi$$

avec

$$U_\xi = \frac{2}{N} \sum_{i=0}^{N-1} u_i e^{-j \frac{\pi}{N} \xi i}$$

que j'étend

$$U_\xi = \frac{2}{N} \sum_{-\infty}^{\infty} u_i e^{-j \frac{\pi}{N} \xi i}$$

ainsi

$$\begin{aligned} \ddot{u}_i &\rightarrow \ddot{U}_\xi \\ u_{i+1} &\rightarrow e^{j \frac{\pi}{N} \xi} U_\xi \\ u_{i-1} &\rightarrow e^{-j \frac{\pi}{N} \xi} U_\xi \end{aligned}$$

en injectant dans (3)

$$\begin{aligned} \ddot{U}_\xi &= K(e^{j \frac{\pi}{N} \xi} + e^{-j \frac{\pi}{N} \xi} - 2)U_\xi \\ \ddot{U}_\xi &= 2K(\cos\left(\frac{\pi}{N} \xi\right) - 1)U_\xi \\ \ddot{U}_\xi &= -4K \sin^2\left(\frac{\pi}{2N} \xi\right)U_\xi \end{aligned}$$

en posant

$$\omega_{\xi}^2 = 4K \sin^2\left(\frac{\pi}{2N}\xi\right)$$

ainsi

$$\ddot{U}_{\xi} = -\omega_{\xi}^2 U_{\xi}$$

donc:

$$U_{\xi} = A e^{j\omega_{\xi}t} + B e^{-j\omega_{\xi}t}$$

en reprenant la TF

$$u_i = \sum_{\xi=0}^{\infty} U_{\xi} e^{j\frac{\pi}{N}\xi i}$$

et là je bloque