

# Sur le calcul de moyennes thermodynamiques dans l'ensemble canonique

**Frédéric LEGOLL**, LAMI, ENPC

**Eric CANCÈS**, CERMICS, ENPC

**Mitchell LUSKIN**, University of Minnesota

**Richard MOECKEL**, University of Minnesota

**Gabriel STOLTZ**, CERMICS, ENPC

**Mots-clés** : méthodes d'échantillonnage, ensemble canonique, Nosé-Hoover, tores invariants, théorie KAM.

Beaucoup de propriétés d'un système décrit à l'échelle atomistique (telles que la pression d'un liquide, ou les constantes élastiques d'un solide) sont définies comme une moyenne, dans l'espace des phases, d'une fonction dépendant de l'état du système [2]. Une méthode pour calculer ces moyennes d'ensemble est d'utiliser la dynamique moléculaire et de calculer des moyennes temporelles le long de longues trajectoires. Quand on s'intéresse à un système à température constante, le problème consiste à trouver une dynamique qui soit ergodique pour la mesure canonique (de Gibbs). Plusieurs méthodes ont été proposées dans la littérature, certaines fondées sur une dynamique déterministe, d'autres fondées sur une EDS (comme l'équation de Langevin).

Nous décrivons et comparons brièvement les propriétés théoriques et les qualités numériques de ces méthodes [1]. Puis nous nous intéressons plus particulièrement à l'une de ces méthodes, la dynamique de Nosé-Hoover. Lorsque le système étudié est un oscillateur harmonique, nous prouvons que, pour un certain régime de paramètres, la dynamique obtenue n'est pas ergodique [3]. Ceci explique de nombreuses observations numériques rapportées dans la littérature.

## Références

- [1] E. CANCÈS, F. LEGOLL, G. STOLTZ, *Theoretical and numerical comparison of some sampling methods for molecular dynamics*, preprint de l'IMA #2040 (Avril 2005), soumis à M2AN.
- [2] D. FRENKEL, B. SMIT, *Understanding Molecular Simulation, from algorithms to applications*, 2nd ed., Academic Press, 2002.
- [3] F. LEGOLL, M. LUSKIN, R. MOECKEL, *Non-ergodicity of the Nosé-Hoover thermostatted harmonic oscillator*, preprint Arxiv math.DS/0511178 (Novembre 2005), soumis à Arch. Rat. Mech. Anal.

Frédéric LEGOLL – [legoll@lami.enpc.fr](mailto:legoll@lami.enpc.fr)

LAMI, Ecole Nationale des Ponts et Chaussées, 6 et 8 avenue Blaise Pascal, 77455 Marne la Vallée Cedex 2

Eric CANCÈS – [cances@cermics.enpc.fr](mailto:cances@cermics.enpc.fr)

CERMICS, Ecole Nationale des Ponts et Chaussées, 6 et 8 avenue Blaise Pascal, 77455 Marne la Vallée Cedex 2

Mitchell LUSKIN – [luskin@umn.edu](mailto:luskin@umn.edu)

School of Mathematics, University of Minnesota, 206 Church Street SE, Minneapolis, MN 55455, U.S.A.

Richard MOECKEL – [rick@math.umn.edu](mailto:rick@math.umn.edu)

School of Mathematics, University of Minnesota, 206 Church Street SE, Minneapolis, MN 55455, U.S.A.

Gabriel STOLTZ – [stoltz@cermics.enpc.fr](mailto:stoltz@cermics.enpc.fr)

CERMICS, Ecole Nationale des Ponts et Chaussées, 6 et 8 avenue Blaise Pascal, 77455 Marne la Vallée Cedex 2