

(public 2012)

Résumé : On étudie des systèmes d'équations différentielles ordinaires du premier ordre issus de la mécanique ayant une structure bien précise. On s'intéresse en particulier au comportement qualitatif des méthodes numériques pour ces systèmes.

Mots clés : Mécanique. Equations différentielles ordinaires. Aspects numériques du problème de Cauchy.

- *Il est rappelé que le jury n'exige pas une compréhension exhaustive du texte. Vous êtes laissé(e) libre d'organiser votre discussion comme vous l'entendez. Des suggestions de développement, largement indépendantes les unes des autres, vous sont proposées en fin de texte. Vous n'êtes pas tenu(e) de les suivre. Il vous est conseillé de mettre en lumière vos connaissances à partir du fil conducteur constitué par le texte. Le jury appréciera que la discussion soit accompagnée d'exemples traités sur ordinateur.*

1. Systèmes dynamiques hamiltoniens

Le but de ce texte est l'étude des systèmes différentiels ordinaires de dimension $2n$ qui s'écrivent sous la forme particulière suivante :

$$(1) \quad \begin{cases} \frac{dq_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_i}(\mathbf{q}, \mathbf{p}), \forall i \in \{1, \dots, n\}, \\ \frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q_i}(\mathbf{q}, \mathbf{p}), \forall i \in \{1, \dots, n\}, \end{cases}$$

où on note $\mathbf{q} = (q_1, \dots, q_n)$ et $\mathbf{p} = (p_1, \dots, p_n)$ et où H est une fonction régulière donnée des $2n$ variables $q_1, \dots, q_n, p_1, \dots, p_n$ appelée le hamiltonien du système. Comme on le verra dans la suite, de nombreux exemples de problèmes issus de la mécanique rentrent dans ce cadre. De façon condensée, un tel système s'écrit de la manière suivante

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \mathbf{q} \\ \mathbf{p} \end{pmatrix} = J \cdot \nabla H(\mathbf{q}, \mathbf{p}),$$

où J est la matrice de taille $2n$ définie par blocs par

$$J = \begin{pmatrix} 0 & \text{Id} \\ -\text{Id} & 0 \end{pmatrix}.$$

La solution à l'instant t de (1) pour les données initiales \mathbf{q}_0 et \mathbf{p}_0 est notée $(\mathbf{q}(t), \mathbf{p}(t)) = \varphi_t^H(\mathbf{q}_0, \mathbf{p}_0)$. L'application φ_t^H est appelée le flot à l'instant t du système. La forme particulière de ces systèmes induit des propriétés qualitatives auxquelles on va s'intéresser dans la suite :

(P₁) Le hamiltonien H est conservé au cours du temps, c'est-à-dire

$$\forall t \geq 0, \forall (\mathbf{q}_0, \mathbf{p}_0) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n, \quad H(\varphi_t^H(\mathbf{q}_0, \mathbf{p}_0)) = H(\mathbf{q}_0, \mathbf{p}_0).$$

(P₂) Le flot φ_t^H préserve les volumes orientés dans l'espace des phases $\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n$. D'après le théorème de changement de variable, ceci équivaut à

$$\forall t \geq 0, \det(\text{Jac}(\varphi_t^H)) \equiv 1,$$

où $\text{Jac}(\varphi_t^H)$ désigne la matrice Jacobienne de l'application φ_t^H en tout point.

(P₃) Le flot φ_t^H est *symplectique* ce qui signifie, par définition, que

$$\forall t \geq 0, \quad {}^t(\text{Jac}(\varphi_t^H)) \cdot J \cdot (\text{Jac}(\varphi_t^H)) = J.$$

Toutes ces propriétés sont cruciales dans l'étude qualitative des systèmes hamiltoniens. Remarquons qu'en réalité, la propriété (P₃) implique la propriété (P₂). Quand $n = 1$, les deux propriétés sont même équivalentes, mais dès que $n > 1$, (P₃) est une propriété strictement plus forte que (P₂).

Après avoir présenté quelques exemples de tels systèmes, nous nous intéresserons à la question de savoir si les propriétés ci-dessus sont préservées lors de la résolution numérique des systèmes de type (1).

2. Premier exemple : le pendule rigide

On considère ici le mouvement dans un plan vertical d'un pendule simple constitué d'une tige rigide sans masse de longueur l fixée à une extrémité, l'autre extrémité étant occupée par un point matériel de masse m (voir Figure 1). On note $\mathbf{g} = {}^t(0, -g)$ l'accélération de la gravité. Le point matériel étant soumis à son poids $\mathbf{P} = m\mathbf{g}$ et à la force de réaction (ou de rappel) \mathbf{R} exercée par la tige à tout instant. En utilisant le principe fondamental de la dynamique, on trouve l'équation du pendule simple satisfaite par l'angle θ entre la tige et la verticale :

$$(2) \quad \frac{d^2\theta}{dt^2} + \frac{g}{l} \sin \theta = 0.$$

Introduisons maintenant la quantité $p = ml^2 \frac{d\theta}{dt}$ (appelée le moment cinétique du système) et considérons le hamiltonien suivant

$$H(\theta, p) = \frac{1}{2ml^2} p^2 + mgl(1 - \cos \theta),$$

qui n'est autre que l'énergie totale (cinétique+potentielle) du pendule à tout instant. On constate alors que l'équation du second ordre (2) est équivalente au système différentiel d'ordre 1 suivant

$$(3) \quad \begin{cases} \frac{d\theta}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p}(\theta, p), \\ \frac{dp}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial \theta}(\theta, p), \end{cases}$$

qui est bien de la forme (1) pour $n = 1$.

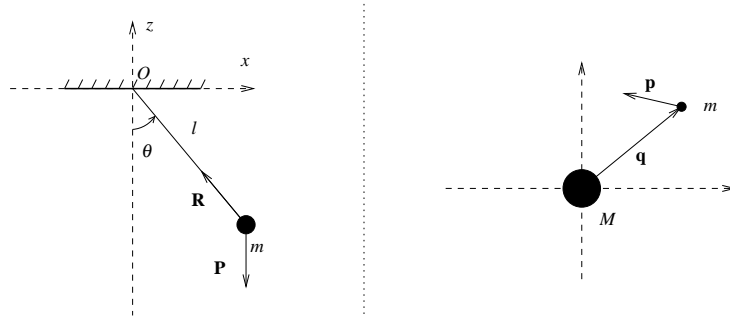


FIG. 1. Le pendule (à gauche) et le système Soleil/Planète (à droite)

Dans le cas où l'on s'intéresse seulement au comportement du pendule au voisinage de l'équilibre, c'est-à-dire quand l'angle θ est voisin de 0 on peut alors linéariser les équations. Une façon de le faire est de considérer le système hamiltonien (3) en remplaçant le hamiltonien initial H par le hamiltonien linéarisé au voisinage de l'équilibre défini par

$$H_{lin}(\theta, p) = \frac{1}{2ml^2}p^2 + mgl\frac{\theta^2}{2}.$$

Le système ainsi obtenu s'écrit

$$(4) \quad \begin{cases} \frac{d\theta}{dt} = \frac{\partial H_{lin}}{\partial p} = \frac{1}{ml^2}p, \\ \frac{dp}{dt} = -\frac{\partial H_{lin}}{\partial \theta} = -mgl\theta. \end{cases}$$

Il est bien entendu équivalent à l'équation de l'oscillateur harmonique $\frac{d^2\theta}{dt^2} + \frac{g}{l}\theta = 0$ dont la solution exacte est bien connue.

3. Schémas numériques

Les modèles présentés précédemment sont des systèmes différentiels du premier ordre pour lesquels de très nombreuses méthodes numériques classiques sont disponibles. La question naturelle que l'on se propose d'aborder ici est : est-ce que ces méthodes préservent les propriétés qualitatives (\mathbf{P}_1) , (\mathbf{P}_2) , (\mathbf{P}_3) du système (1) présentées dans la première partie ?

Donnons-nous un schéma numérique à un pas pour le problème (1) défini par une application $\Psi_{\Delta t}^H : (\mathbf{q}^k, \mathbf{p}^k) \mapsto (\mathbf{q}^{k+1}, \mathbf{p}^{k+1})$. Les équivalents discrets des propriétés en question sont

(\mathbf{P}'_1) $H(\mathbf{q}^{k+1}, \mathbf{p}^{k+1}) = H(\mathbf{q}^k, \mathbf{p}^k)$ pour tout k , ou encore $H \circ \Psi_{\Delta t}^H = H$ pour tout $\Delta t > 0$ petit.

(\mathbf{P}'_2) Pour tout Δt assez petit on a $\det(\text{Jac } \Psi_{\Delta t}^H) \equiv 1$.

(\mathbf{P}'_3) La relation ${}^t(\text{Jac } \Psi_{\Delta t}^H) \cdot J \cdot (\text{Jac } \Psi_{\Delta t}^H) \equiv J$ est vérifiée pour tout Δt assez petit.

Comme dans le cas continu, on peut constater que la propriété (\mathbf{P}'_2) est une conséquence de la propriété (\mathbf{P}'_3) .

3.1. Le cas linéaire

Commençons par regarder ce qui se passe sur le système linéaire (4). Sur ce système simple, on peut effectuer tous les calculs à la main et le comportement des méthodes est résumé dans le tableau 1.

TAB. 1. Comportement de différentes méthodes sur le pendule simple linéaire

Méthode	Volumes dans le plan des phases	Hamiltonien
Euler explicite	Augmentation	Croît vers $+\infty$
Euler implicite	Diminution	Décroit vers 0
Runge-Kutta explicite d'ordre 2	Augmentation	Croît vers $+\infty$

Même si on peut observer une situation numériquement meilleure pour la méthode de Runge-Kutta, il apparaît que le fait de considérer une méthode d'ordre 2 ne règle pas pour autant les problèmes qualitatifs et qu'aucune des trois méthodes considérées ne possède un comportement satisfaisant.

On propose donc ici une nouvelle méthode semi-implicite appelée *méthode d'Euler symplectique* et qui s'écrit

$$(5) \quad \begin{cases} q_i^{k+1} = q_i^k + \Delta t \frac{\partial H}{\partial p_i}(\mathbf{q}^{k+1}, \mathbf{p}^k), \quad \forall i \in \{1, \dots, n\} \\ p_i^{k+1} = p_i^k - \Delta t \frac{\partial H}{\partial q_i}(\mathbf{q}^{k+1}, \mathbf{p}^k), \quad \forall i \in \{1, \dots, n\}. \end{cases}$$

Cette méthode est implicite d'ordre 1 mais devient explicite dès que le hamiltonien est séparé c'est-à-dire de la forme $H(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = H_1(\mathbf{q}) + H_2(\mathbf{p})$, ce qui est le cas des modèles présentés ici (mais aussi de nombreux autres modèles issus de la physique). Pour le système du pendule linéaire on constate à nouveau que les propriétés équivalentes (\mathbf{P}'_2) et (\mathbf{P}'_3) sont satisfaites.

Par un calcul de dérivation de fonctions implicites, on peut voir que la méthode (5) est symplectique (c'est-à-dire vérifie (\mathbf{P}'_3) et donc (\mathbf{P}'_2)) pour tout hamiltonien régulier et tout $n \geq 1$. On peut également vérifier que ce n'est pas le cas pour les méthodes présentées dans le tableau 1. Notez que la propriété (\mathbf{P}'_2) (bien que plus faible dès que $n > 1$) n'est pas nécessairement plus simple à établir directement que (\mathbf{P}'_3) pour les méthodes numériques envisagées dans ce texte.

Concernant la propriété (\mathbf{P}'_1) , on observe numériquement que le hamiltonien n'est pas conservé au cours des itérations en temps par le nouveau schéma proposé. Cependant, la situation est nettement meilleure qu'avec les méthodes d'Euler usuelles considérées plus haut. En effet, on constate numériquement que le hamiltonien $H(\theta^k, p^k)$ reste proche du hamiltonien initial même en temps long alors que pour les autres méthodes, celui-ci explose ou tend vers 0.

Ce bon comportement est intimement lié au fait que la méthode est symplectique. De façon plus concrète, on observe qu'il existe un *hamiltonien approché*

$$(6) \quad H_{app}(\theta, p) = H(\theta, p) + \frac{1}{2}\Delta t \times \frac{\partial H}{\partial p}(\theta, p) \times \frac{\partial H}{\partial \theta}(\theta, p),$$

qui, lui, est **conservé** par la méthode d'Euler symplectique appliqué au problème du pendule linéaire. Ceci explique le bon comportement de la méthode de ce point de vue.

3.2. Le cas non-linéaire

La méthode d'Euler symplectique a le même type de comportement que précédemment sur le problème (3) et possède l'avantage d'être encore explicite. Dans ce cadre, le hamiltonien approché défini par (6), n'est plus exactement conservé mais on peut voir que

$$|H_{app}(\theta^k, p^k) - H_{app}(\theta^0, p^0)| \leq C(\Delta t)^2, \quad \forall k \geq 1,$$

ce qui reste satisfaisant.

4. Second exemple : le problème de Kepler

On s'intéresse ici au mouvement d'un corps céleste léger (une planète de masse $m = 1$) autour d'un corps lourd (le soleil de masse $M \gg 1$) supposé immobile. On se place dans un repère dont le soleil est le centre et on note $\mathbf{q} \in \mathbb{R}^3$ la position de la planète dans ce repère (voir la figure 1). D'après la loi de la gravitation universelle on sait que la force (attractive) exercée par le soleil sur la planète est dirigée suivant la droite qui joint les deux corps et que son intensité est proportionnelle au produit de leurs masses et inversement proportionnelle au carré de la distance qui les sépare.

Dans ces conditions, les équations du mouvement s'écrivent

$$(7) \quad \frac{d^2 \mathbf{q}}{dt^2} = -\frac{\mu \mathbf{q}}{|\mathbf{q}|^3},$$

où $\mu = GM$, G étant la constante de la gravitation universelle et $|\cdot|$ désignant la norme euclidienne usuelle. Ceci s'écrit également sous la forme hamiltonienne (1) avec $n = 3$, si on définit le hamiltonien

$$(8) \quad H(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = \frac{1}{2} |\mathbf{p}|^2 - \frac{\mu}{|\mathbf{q}|}.$$

En plus des propriétés (\mathbf{P}_1) , (\mathbf{P}_2) et (\mathbf{P}_3) , communes à tous les systèmes hamiltoniens, le système de Kepler possède d'autres invariants (indépendants de H). En effet, on constate que la quantité vectorielle $\mathbf{A}(t) = \mathbf{q}(t) \wedge \mathbf{p}(t)$ (appelée *moment cinétique*) est conservée au cours du temps. Ceci implique en particulier que toute trajectoire du système de Kepler est entièrement contenue dans un plan. On est donc ramené à l'étude du système (1) pour $n = 2$ en restreignant le hamiltonien H défini par (8) aux vecteurs bidimensionnels $\mathbf{q}, \mathbf{p} \in \mathbb{R}^2$. L'invariant \mathbf{A} peut alors être vu comme un invariant scalaire.

Le problème (7) a la propriété agréable de pouvoir être résolu explicitement (ou presque). On peut en effet montrer que toute trajectoire est contenue dans une conique déterminée par les données initiales et que si cette conique est une ellipse, alors le mouvement est périodique.

Sur ce système (7), les résultats obtenus par les méthodes numériques traditionnelles peuvent être catastrophiques, notamment si on s'intéresse à un temps de calcul assez long (auquel cas

il peut être pénalisant de prendre un pas de temps Δt trop petit). On peut ainsi obtenir des trajectoires *supposément* elliptiques qui finissent par s'écraser sur le Soleil ou au contraire qui échappent à la force d'attraction de celui-ci et fuient à l'infini.

La méthode d'Euler symplectique a le bon goût de présenter des trajectoires proches des trajectoires auxquelles on s'attend, c'est-à-dire typiquement des ellipses pour un bon choix des données initiales. De plus, on peut vérifier que cette méthode numérique préserve exactement le moment cinétique $\mathbf{A} = \mathbf{q} \wedge \mathbf{p}$ du système, ce qui est un nouveau gage de qualité de la méthode.

Suggestions pour le développement

► *Soulignons qu'il s'agit d'un menu à la carte et que vous pouvez choisir d'étudier certains points, pas tous, pas nécessairement dans l'ordre, et de façon plus ou moins fouillée. Vous pouvez aussi vous poser d'autres questions que celles indiquées plus bas. Il est très vivement souhaité que vos investigations comportent une partie traitée sur ordinateur et, si possible, des représentations graphiques de vos résultats.*

- Montrer que les propriétés (\mathbf{P}_1) , (\mathbf{P}_2) et (\mathbf{P}_3) sont bien vérifiées pour tout système de la forme (1). On pourra vérifier que (\mathbf{P}_2) peut effectivement se déduire de (\mathbf{P}_3) .
- Dans les exemples proposés, on pourra détailler la mise en équations du problème. Dans chacun des cas, que peut-on dire de la théorie d'existence et unicité des solutions ? Les solutions sont-elles globales ?
- On pourra établir analytiquement et/ou numériquement les résultats donnés dans le tableau 1 concernant le problème du pendule linéarisé.
- On pourra comparer numériquement le comportement des méthodes dont il est question dans le texte sur les problèmes non-linéaires (pendule et Kepler).

Un choix judicieux des paramètres du calcul (données initiales, pas de temps, temps final) permettra de bien mettre en lumière les points traités dans le texte, par exemple en traçant les trajectoires (dans le plan des phases pour le pendule / dans le plan physique pour le problème de Kepler) ou encore l'évolution en temps des diverses quantités conservées par les modèles considérés.

- On pourra démontrer tout ou partie des affirmations du texte concernant les propriétés de la méthode d'Euler symplectique, d'abord dans le cas $n = 1$ puis dans le cas général.
- La méthode (5) consiste à discrétiser la variable \mathbf{q} de façon implicite et la variable \mathbf{p} de façon explicite. Que se passe-t-il si on fait l'inverse ? Existe-t-il un hamiltonien approché pour cette nouvelle méthode ?
- On pourra vérifier que les trajectoires du système de Kepler sont bien portées par des coniques. Pour cela, on pourra constater que le vecteur $\mathbf{e}(t) = \frac{1}{\mu} \mathbf{p}(t) \wedge \mathbf{A} - \frac{\mathbf{q}(t)}{|\mathbf{q}(t)|}$ ne dépend pas du temps et appartient au plan du mouvement. La conclusion vient alors de la formule $\mathbf{e} \cdot \mathbf{q}(t) + |\mathbf{q}(t)| = \frac{|\mathbf{A}|^2}{\mu}$.