Sujet 2 Analyse Numérique

Les différentes parties du sujet sont indépendantes

Dans le sujet, d est un entier naturel non nul et p, q des vecteurs de $\mathbb{R}^d$. On note $\mathcal{C}_b^k$ l'ensemble des fonctions de $\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d$ à valeur dans $\mathbb{R}$ de classe $\mathcal{C}^k$ et dont toutes les dérivées partielles d'ordre inférieur ou égal à k sont bornées. On désigne par $H : \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ une fonction de $\mathcal{C}_b^k, k \geq 2$. On définit également la matrice

$$\mathbb{J} = \begin{pmatrix} 0 & \mathrm{Id} \\ -\mathrm{Id} & 0 \end{pmatrix},$$

où 0 et Id désignent respectivement la matrice nulle et la matrice identité de $M_d(\mathbb{R})$. On a $\mathbb{J}^{-1} = -\mathbb{J}$. On note $\|.\|$ la norme euclidienne sur $\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d$.

Un système différentiel est dit hamiltonien s'il est de la forme

$$(1) \qquad \dot{q}_j = \frac{\partial H}{\partial p_j}(q,p), \quad \dot{p}_j = -\frac{\partial H}{\partial q_j}(q,p), \quad j = 1, \ldots, d.$$

En introduisant $x = \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{2d}$, le système (1) admet une écriture plus compacte : $\dot{x} = J\nabla H(x)$. Enfin, pour une fonction $\Phi : \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}^{2d}$ de classe $\mathcal{C}^1$, on notera $\nabla_{q,p}\Phi$ la matrice jacobienne

$$(\nabla_{q,p}\Phi)_{i,j} = \frac{\partial \Phi_i}{\partial q_j}, \; j = 1, \cdots, d, \quad (\nabla_{q,p}\Phi)_{i,j+d} = \frac{\partial \Phi_i}{\partial p_j}, \; j = 1, \cdots, d, \quad i = 1, \cdots, 2d.$$

L'objet de ce sujet est d'étudier d'une part les propriétés mathématiques des solutions de systèmes différentiels hamiltoniens et d'autre part une classe de schémas numériques adaptés. Pour l'étude des schémas, on introduit les notations suivantes : on notera $\delta t > 0$ le pas de discrétisation en temps et q_j^n, p_j^n les valeurs approchées de $(q_j(n\delta t), p_j(n\delta t))$ où (q_j, p_j) est une solution exacte de (1). Ainsi, le schéma d'Euler explicite pour (1) s'écrira :

$$q_j^{n+1} = q_j^n + \delta t \frac{\partial H}{\partial p_j}(q^n, p^n), \quad p_j^{n+1} = p_j^n - \delta t \frac{\partial H}{\partial q_j}(q^n, p^n).$$

On introduit aussi le schéma d'Euler implicite :

$$q_j^{n+1} = q_j^n + \delta t \frac{\partial H}{\partial p_j}(q^{n+1}, p^{n+1}), \quad p_j^{n+1} = p_j^n - \delta t \frac{\partial H}{\partial q_j}(q^{n+1}, p^{n+1}).$$

On rappelle la notion de consistance d'un schéma numérique. Etant donné $x : [0,T[\to \mathbb{R}^{2d}$ une solution de $\dot{x} = J\nabla H(x)$ et $x^{n+1} = x^n + \delta t \Psi(x^n, x^{n+1}, \delta t)$ (où $\Psi : \mathbb{R}^{2d} \times \mathbb{R}^{2d} \times \mathbb{R}_+^* \to \mathbb{R}^{2d}$) un schéma numérique associé à ce système. L'erreur de consistance e est définie par

$$e(t) = \left\| \frac{x(t+\delta t) - x(t)}{\delta t} - \Psi(x(t), x(t+\delta t), \delta t) \right\|, \quad t \in [0, T - \delta t[.$$

Un schéma est consistant d'ordre $k \in \mathbb{N}^*$ si $e(t) = O(\delta t^k)$.

Partie I : l'exemple du pendule linéaire

1. Soit $\omega > 0$. Considérons l'équation du pendule linéaire :

$$\ddot{x}(t) + \omega^2 x(t) = 0, \quad (E)$$

   a) Montrer que toutes les solutions de (E) sont périodiques (on donnera une base de solutions de (E)).
   b) Soient $(x_0, v_0) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}$. Montrer que (E) possède une solution unique et globale telle que $x(0) = x_0$ et $\dot{x}(0) = v_0$.
   c) Trouver $H_e : \mathbb{R} \times \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ tel qu'on puisse écrire (E) sous la forme d'un système différentiel hamiltonien. Montrer que

$$H_e(x(t), v(t)) = H_e(x_0, v_0), \quad (P_0)$$

   pour tout $t \geq 0$ et où $v(t) = \dot{x}(t)$.
2. On étudie le comportement des schémas d'Euler explicite et implicite vis à vis de la propriété (P_0). On notera (x^n, v^n) les valeurs approchées de $x(n\delta t)$ et $v(n\delta t)$.
   a) Écrire le schéma d'Euler explicite pour (E). Montrer qu'il existe $r(\delta t) > 1$ tel que $H_e(x^{n+1}, v^{n+1}) = r(\delta t)\, H_e(x^n, v^n)$. En déduire que $\lim_{n\to\infty} \|(x^n, v^n)\| = +\infty$.
   b) Écrire le schéma d'Euler implicite pour (E). Montrer qu'il existe $s(\delta t) < 1$ tel que $H_e(x^{n+1}, v^{n+1}) = s(\delta t)\, H_e(x^n, v^n)$. En déduire que $\lim_{n\to\infty} \|(x^n, v^n)\| = 0$.

   Dans les deux cas, les schémas numériques considérés ne reproduisent pas correctement le comportement qualitatif des solutions exactes de (E) : en particulier la propriété (P_0) n'est pas vérifiée. Dans ce qui suit, nous allons considérer deux schémas qui préservent H_e.
3. Dans cette question, on supposera que la fonction H est de classe $\mathcal{C}^k, k \geq 3$. Considérons le schéma suivant, associé à la simulation numérique de (1) :

$$(2) \qquad \begin{aligned} q_j^{n+1} &= q_j^n + \frac{\delta t}{2}\left(\frac{\partial H}{\partial p_j}(q^n, p^n) + \frac{\partial H}{\partial p_j}(q^{n+1}, p^{n+1})\right), \\ p_j^{n+1} &= p_j^n - \frac{\delta t}{2}\left(\frac{\partial H}{\partial q_j}(q^n, p^n) + \frac{\partial H}{\partial q_j}(q^{n+1}, p^{n+1})\right). \end{aligned}$$

a) Montrer que pour un système hamiltonien général, c'est un schéma d'ordre au moins égal à 2.

b) Écrire le schéma (2) pour l'équation (E) et montrer que

$$H_e(x^{n+1}, v^{n+1}) = H_e(x^n, v^n).$$

4. Considérons enfin le schéma d'Euler "symplectique"

$$(3) \qquad q_j^{n+1} = q_j^n + \delta t \frac{\partial H}{\partial p_j}(q^{n+1}, p^n), \quad p_j^{n+1} = p_j^n - \delta t \frac{\partial H}{\partial q_j}(q^{n+1}, p^n).$$

a) On suppose dans cette question que $H(p, q) = K(p) + V(q)$ pour tout $(q, p) \in \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d$. Montrer que le schéma (3) est explicite.

b) Montrer que pour un système hamiltonien général, le schéma (3) est au moins d'ordre 1.

c) Écrire le schéma d'Euler symplectique pour (E) et montrer qu'il est explicite. Montrer ensuite que H_e n'est pas préservé.

d) On introduit une modification, notée H_{app}, de H_e associée à (E), et définie par

$$H_{app}(x, v) = H_e(x, v) + \frac{\delta t}{2} \frac{\partial H_e}{\partial x} \frac{\partial H_e}{\partial v}.$$

Montrer que $H_{app}(x^{n+1}, v^{n+1}) = H_{app}(x^n, v^n)$.

Ainsi, dans le cas du pendule linéaire, nous avons deux schémas qui préservent soit l'hamiltonien H_e soit une valeur approchée de H_e, notée H_{app}. Dans la suite du problème, nous allons considérer des systèmes différentiels hamiltoniens plus généraux et étudier le schéma d'Euler symplectique (3).

Partie II : Systèmes différentiels Hamiltoniens

Préliminaires sur les systèmes différentiels linéaires

Soit m un entier naturel non nul.

1. Montrer que la fonction déterminant det : $M_m(\mathbb{R}) \to \mathbb{R}$ est une fonction $\mathcal{C}^\infty$.
2. Calculer $\dfrac{\partial \det}{\partial A_{i,j}}$ pour $i, j \in [1, m]$.
3. En déduire que la différentielle du déterminant en $A \in M_d(\mathbb{R})$ est donnée par :

$$d_A \det(H) = Tr(^T\mathrm{com}(A) H).$$

4. Soit $A : \mathbb{R} \to M_m(\mathbb{R})$ une fonction continue.

(a) Soit $1 \leq j \leq m$. Montrer qu'il existe une solution maximale et globale unique, qu'on notera X_j, de $X'(t) = A(t)X(t)$ telle $X(0) = e_j$, e_j étant le j-ième vecteur de la base canonique de $\mathbb{R}^m$.

(b) On note $R(t)$ la matrice formée des m vecteurs colonnes $(X_j(t))_{j=1,m}$. Écrire le problème de Cauchy satisfait par R. Montrer que $r : t \mapsto \det(R(t))$ vérifie une équation différentielle linéaire du 1er ordre.

(c) Déduire des questions précédentes que $r(t) = \exp\left(\int_0^t \operatorname{Tr}(A(s))ds\right)$.

Quelques propriétés des systèmes différentiels hamiltonien

1. Enoncer le théorème de Cauchy Lipschitz pour le système (1) en précisant bien les hypothèses faites sur H.
2. Dans la suite, on notera, quand elle est définie, $(q(t), p(t)) = \Phi_t^H(q_0, p_0)$ l'unique solution maximale de (1) avec la condition initiale (q_0, p_0). On notera $[0, T_0[$ son domaine de définition.

   a) Montrer que pour tout $t \in [0, T_0[$, $H(\Phi_t^H(q_0, p_0)) = H(q_0, p_0) \quad (P_1)$.

   b) Si $\lim_{\|(q,p)\| \to \infty} H(q, p) = +\infty$, montrer que $t \mapsto \Phi_t(q_0, q_0)$ est définie sur $[0, +\infty[$ pour tout (q_0, p_0).

   c) On suppose H est de classe $\mathcal{C}^k$ $(k \geq 2)$: donner sans justifier la régularité de $\Phi_t^H : \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d$?
3. On note $\mathcal{J}_t^H = \nabla_{q_0,p_0} \Phi_t^H \in M_{2d}(\mathbb{R})$ la matrice jacobienne de Φ_t^H.

   a) Que vaut $\mathcal{J}_0^H$? Montrer que $\mathcal{J}_t^H$ vérifie le système différentiel $\frac{d\mathcal{J}_t^H}{dt} = \mathcal{A}(t)\mathcal{J}_t^H$ où $\mathcal{A}(t)$ désigne la matrice

   $$\mathcal{A}_{i,j}(t) = \frac{\partial^2 H}{\partial p_i \partial q_j}(q(t), p(t)), \quad \mathcal{A}_{i,j+d}(t) = \frac{\partial^2 H}{\partial p_i \partial p_j}(q(t), p(t)),$$
   $$\mathcal{A}_{i+d,j}(t) = -\frac{\partial^2 H}{\partial q_i \partial q_j}(q(t), p(t)), \quad \mathcal{A}_{i+d,j+d}(t) = -\frac{\partial^2 H}{\partial q_i \partial p_j}(q(t), p(t)),$$

   où $i, j = 1, \cdots, d$.

   b) Montrer que $\det(\mathcal{J}_t^H)$ vérifie une équation différentielle linéaire.

   c) En déduire que pour tout $t \in \mathbb{R}$, $\det(\mathcal{J}_t^H) = 1, \quad (P_2)$.
4. L'objectif de cette question est de montrer la propriété :

   $$\text{pour tout } \ t \in \mathbb{R}, \quad (\mathcal{J}_t^H)^T \, \mathbb{J} \, \mathcal{J}_t^H = \mathbb{J}, \quad (P_3).$$

   a) On définit, pour $t \in \mathbb{R}$, la matrice $G(t) = (\mathcal{J}_t^H)^T \mathbb{J} \mathcal{J}_t^H \in M_{2d}(\mathbb{R})$. Que vaut $G(0)$?

   b) Montrer que $\dot{G}(t) = 0$ pour tout $t \in \mathbb{R}$ et conclure.

   c) Montrer que la propriété (P_3) implique (P_2).

Partie III : Etude du schéma d'Euler symplectique

On rappelle que H est de classe $\mathcal{C}^k, k \geq 2$ et que ses dérivées jusqu'à l'ordre k sont bornées.

Supposons donné un schéma numérique à un pas de (1) : $(q^{n+1}, p^{n+1}) = \Psi_{\delta t}^H(q^n, p^n)$ où $\Psi_{\delta t}^H : \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d$ est une fonction de classe $\mathcal{C}^r$ $(r \geq 1)$ en ses variables $q \in \mathbb{R}^d, p \in \mathbb{R}^d$ et $\delta t > 0$. On souhaite que $\Psi_{\delta t}^H$ vérifie au niveau discret les propriétés $(P_i), i = 1, 2, 3$ démontrées dans la partie II. Celles ci s'écrivent :

- $(\tilde{P}_1)$ $\quad \forall n \in \mathbb{N}, \quad H(q^{n+1}, p^{n+1}) = H(q^n, p^n)$ ou encore $H \circ \Psi_{\delta t}^H = H$
- $(\tilde{P}_2)$ $\quad \det(\nabla_{q,p}\Psi_{\delta t}^H) = 1$ pour tout δt assez petit.
- $(\tilde{P}_3)$ $\quad (\nabla_{q,p}\Psi_{\delta t}^H)^T \mathbb{J}(\nabla_{q,p}\Psi_{\delta t}^H) = \mathbb{J}$ pour tout $\delta t > 0$ assez petit.

L'objectif de cette section est d'examiner le comportement du schéma d'Euler symplectique vis à vis des propriétés $(P_i), i = 1, 2, 3$. On rappelle que ce dernier s'écrit :

$$q_j^{n+1} = q_j^n + \delta t \frac{\partial H}{\partial p_j}(q_j^{n+1}, p_j^n), \quad p_j^{n+1} = p_j^n - \delta t \frac{\partial H}{\partial q_j}(q_j^{n+1}, p_j^n). \tag{4}$$

1. Montrer, à l'aide du théorème du point fixe, qu'il existe $\eta > 0$ et une application $\Psi_{\delta t}^H : \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d$ telle que le schéma (4) soit équivalent à $(q^{n+1}, p^{n+1}) = \Psi_{\delta t}^H(q^n, p^n)$ pour tout $\delta t \in [0, \eta]$.
2. Monter que $(\delta t, q, p) \mapsto \Psi_\delta t^H(q, p)$ est de classe $\mathcal{C}^1$.
3. Montrer ensuite que le schéma (4) est au moins d'ordre 1.
4. On se propose de montrer la propriété $(\tilde{P}_2)$
   a) Identifier Ψ_0^H et calculer $\nabla_{q,p}\Psi_0^H$.
   b) En déduire que la propriété $(\tilde{P}_3)$ implique la propriété $(\tilde{P}_2)$.

5. On se propose de montrer $(\tilde{P}_3)$ pour $d = 1$: on note $p_1 = p$, $q_1 = q$ et $\Psi_{\delta t}^H = (\psi_1, \psi_2)$.
   a) En utilisant les équations implicites satisfaites par $\psi_i, i = 1, 2$, exprimer les dérivées partielles $\dfrac{\partial \psi_i}{\partial q}$ et $\dfrac{\partial \psi_i}{\partial p}$ en fonction de ψ^1 et des dérivées secondes de H.
   b) Montrer la propriété $(\tilde{P}_3)$.

6. On examine maintenant la propriété $(\tilde{P}_1)$ pour $d \geq 1$.
   a) Donner un exemple de système hamiltonien pour lequel $(\tilde{P}_1)$ n'est pas vérifié.
   b) Montrer que H est lipschitzienne sur toute partie compacte $K \subset \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d$
   c) Soit $T > 0$, $N \in \mathbb{N}^*$ et $\delta t = T/N$. On note $(q(t), p(t)), t \in [0, T]$ l'unique solution de (1) telle que $(q, p)|_{t=0} = (q_0, p_0)$ et on note $(q^n, p^n) = \left(\Psi_{\delta t}^H\right)^n (q_0, p_0)$ où $n \in [0, N]$. Montrer qu'il existe $C_1(T) > 0$ tel que
   $$\|(q^n, p^n) - (q(n\delta t), p(n\delta t))\| \leq C_1(T)\, \delta t, \quad \forall n \in [0, N].$$

d) On suppose qu'il existe $K \subset \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d$, compact, pour tout $s \in [0,t]$ $(q(s), p(s)) \in K$ et pour tout $k \in [0,n]$, $(q^k, p^k) \in K$. Montrer qu'il existe $C_2(T)$ telle que $|H(q^n,p^n) - H(q^0,p^0)| \leq C_2(T)\,\delta t$, $\forall n \in [0,N]$.

7. On va améliorer le résultat de la question précédente en introduisant un hamiltonien $\tilde{H}$ modifié et rendre la constante $C_2(T)$ uniforme par rapport à T. On supposera que $d=1$ et les dérivées partielles de H à l'ordre 3 sont bornées sur $\mathbb{R}\times\mathbb{R}$. On introduit l'hamiltonien modifié $\tilde{H}$:

$$\tilde{H} = H + \frac{\delta t}{2}\frac{\partial H}{\partial q}\frac{\partial H}{\partial p}.$$

et le système différentiel hamiltonien associé $\dot{\tilde{y}} = J\nabla\tilde{H}(\tilde{y})$ où $\tilde{y} = \begin{pmatrix} \tilde{q} \\ \tilde{p} \end{pmatrix}$.

a) Montrer qu'il existe une solution maximale globale unique de $\dot{\tilde{y}} = J\nabla\tilde{H}(\tilde{y})$ et $\tilde{y}(0) = y_0$.

b) Montrer que pour tout $t \geq 0$, on a $\tilde{H}(\tilde{y}(t)) = \tilde{H}(y_0)$.

c) Calculer $\ddot{\tilde{y}}(t)$ et en déduire un développement limité de $\tilde{y}(t+\delta t)$ à l'ordre 2 par rapport à $\delta t > 0$.

d) Donner un développement limité de $\Psi_{\delta t}^{\tilde{H}}(\tilde{y})$ à l'ordre 2 par rapport à $\delta t > 0$.

e) Montrer alors que $\tilde{y}(t+\delta t) = \Psi_{\delta t}^{\tilde{H}}(\tilde{y}(t)) + \mathcal{O}(\delta t^3)$.

f) On suppose qu'il existe $K \subset \mathbb{R}\times\mathbb{R}$, compact, tel que $\forall t \geq 0, \tilde{y}(t) \in K$ et pour tout $n \geq 0$, $(q^n, p^n) \in K$. Montrer qu'il existe $C_3 > 0$ tel que

$$|\tilde{H}(q^n,p^n) - \tilde{H}(q^0,p^0)| \leq C_3 \delta t^2.$$

FIN DU SUJET 2