Introduction et notations

Le but de ce problème est d'analyser quelques propriétés de schémas numériques utilisés pour la discrétisation de systèmes hamiltoniens. Dans toute la suite, on note $\mathbb{R}$ le corps des réels et $M_n(\mathbb{R})$ l'espace des matrices réelles carrées de taille n (avec n un entier strictement positif). Si $A \in M_n(\mathbb{R})$, on note A^T sa matrice transposée. Une matrice est dite symétrique si elle satisfait $A^T = A$ et antisymétrique si elle satisfait $A^T = -A$. De même, si $y \in \mathbb{R}^n$ est un vecteur colonne ou ligne, on note y^T le vecteur transposé. On notera $y_1, \ldots, y_n$ les composantes d'un tel vecteur.

On dit qu'une application d'un ouvert U de $\mathbb{R}^n$ dans $\mathbb{R}^m$ est de classe C^p si elle est p fois différentiable avec des dérivées successives continues sur U. Si H est une fonction C^1 de $\mathbb{R}^n$ dans $\mathbb{R}$, on note $\nabla H(y)$ le vecteur colonne de composantes

$$(\nabla H(y))_i = \frac{\partial H}{\partial y_i}(y), \quad \text{pour} \quad i = 1, \ldots n.$$

De même, si H est C^2, on note $\nabla^2 H(y)$ sa matrice hessienne de composantes

$$(\nabla^2 H(y))_{ij} = \frac{\partial^2 H}{\partial y_i \partial y_j}(y), \quad \text{pour} \quad i, j = 1, \ldots n.$$

Si $g : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$ est une application C^1, pour n et m des entiers donnés, on note $(g_i(y))_{i=1,\cdots,m}$ le vecteur colonne correspondant, pour $y \in \mathbb{R}^n$, et $g'(y)$ sa matrice jacobienne à m lignes et n colonnes, de composantes

$$(g'(y))_{ij} = \frac{\partial g_i}{\partial y_j}(y), \quad i = 1, \ldots, m, \quad \text{et} \quad j = 1, \ldots, n.$$

Remarquons que dans le cas où $m = 1$, on a $g'(y) = \nabla g(y)^T$. Si $h : \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}^p$, $z \mapsto h(z)$, est une application C^1, on peut alors écrire la matrice jacobienne de $h \circ g$ sous la forme

$$(h \circ g)'(y) = h'(g(y)) \cdot g'(y), \quad y \in \mathbb{R}^n,$$

où $\cdot$ est le produit matriciel. De façon équivalente, on peut écrire pour $y \in \mathbb{R}^n$

$$\Big((h \circ g)'(y)\Big)_{ij} = \sum_{l=1}^{m} \frac{\partial h_i}{\partial z_l}(g(y)) \frac{\partial g_l}{\partial y_j}(y), \quad i = 1, \ldots, p, \quad \text{et} \quad j = 1, \ldots, n.$$

Si $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ est une application de classe C^1, on rappelle que l'équation différentielle

$$\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}t}(t) = f(y(t)), \quad y(0) = y_0,$$

admet une unique solution locale $y(t)$ définie sur un intervalle I_{y_0}.

Lorsque pour un réel $T > 0$ et pour tout $y_0 \in U$ un ouvert de $\mathbb{R}^n$, $y(t)$ existe pour $t \in [0, T]$, i.e. $[0, T] \subset I_{y_0}$ on note $y(t) = \varphi_t(y_0)$ et on appelle $\varphi_t(\cdot)$ le flot associé. Dans ce cas, pour tout $t \in [0, T]$, l'application $y_0 \mapsto \varphi_t(y_0)$ est de classe C^1 sur U. Si on note

$$X_t(y_0) = \varphi_t'(y_0), \tag{1}$$

alors la matrice $X_t(y_0)$ satisfait l'équation différentielle

$$\frac{\mathrm{d}X_t}{\mathrm{d}t}(y_0) = f'(\varphi_t(y_0))X_t(y_0), \quad X_0(y_0) = I_n, \tag{2}$$

où I_n est la matrice identité de dimension n.

Pour d un entier naturel non nul, on note $J \in M_{2d}(\mathbb{R})$ la matrice antisymétrique

$$J = \begin{pmatrix} 0 & I_d \\ -I_d & 0 \end{pmatrix}$$

où I_d est la matrice identité de dimension d. Une matrice A est dite symplectique si elle satisfait l'équation

$$A^T J A = J.$$

Une fonction $g : U \to \mathbb{R}^{2d}$ de classe C^1, où U est un ouvert de $\mathbb{R}^{2d}$ est dite symplectique si sa matrice jacobienne $g'(y)$ satisfait

$$g'(y)^T J g'(y) = J, \quad \text{pour} \quad \text{tout} \quad y \in U.$$

Enfin, on appelle champ hamiltonien une application de la forme $f(y) = J^{-1}\nabla H(y)$ pour H une fonction de classe C^2 d'un ouvert U de $\mathbb{R}^{2d}$ dans $\mathbb{R}$. On note alors $\varphi_t(y_0) = y(t)$ la solution de l'équation différentielle

$$\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}t}(t) = J^{-1}\nabla H(y(t)), \quad y(0) = y_0 \in \mathbb{R}^{2d}. \tag{3}$$

Partie I : Préliminaires

Dans cette partie, d est un entier naturel non nul fixé.

1. Calculer J^2 et en déduire J^{-1}.
2. Soient f et g deux applications de classe C^1 de $\mathbb{R}^{2d}$ dans $\mathbb{R}^{2d}$. Montrer que si f et g sont symplectiques, alors la composée $f \circ g$ est encore symplectique.

3. Soit un système différentiel

$$\frac{\mathrm{d}^2 q}{\mathrm{d}t^2}(t) = -\nabla V(q(t))$$

où pour tout t, $q(t)$ est un vecteur de $\mathbb{R}^d$, et où V est une application de $\mathbb{R}^d$ dans $\mathbb{R}$ de classe C^2. En introduisant $p = \frac{\mathrm{d}q}{\mathrm{d}t}$ et le vecteur $y \in \mathbb{R}^{2d}$ tel que $y_i = p_i$ pour $i = 1, \ldots, d$, et $y_i = q_{i-d}$ pour $i = d+1, \ldots, 2d$, montrer que ce système peut s'écrire sous forme hamiltonienne (3).

4. Soit H une fonction de classe C^2 de $\mathbb{R}^{2d}$ dans $\mathbb{R}$ et soit $y(t)$ la solution de (3) pour $t \in I_{y_0}$. Montrer que

$$\forall\, t \in I_{y_0}, \quad H(y(t)) = H(y_0).$$

5. On suppose de plus que $H(y)$ satisfait

$$\forall\, y \in \mathbb{R}^{2d}, \quad H(y) \geq \alpha \|y\|^{\beta}$$

où α et β sont deux réels strictement positifs, et où

$$\|y\| = \Big(\sum_{i=1}^{2d} y_i^2\Big)^{1/2} \tag{4}$$

désigne la norme euclidienne sur $\mathbb{R}^{2d}$. Montrer alors que pour tout $y_0 \in \mathbb{R}^{2d}$, $y(t)$ existe pour tout temps $t \geq 0$.

Partie II : Exemples de schémas numériques symplectiques

Dans cette partie, on considère des systèmes hamiltoniens dans $\mathbb{R}^2$, c'est-à-dire avec les notations précédentes, $d = 1$, et on note $y = (p, q)^T$ où p et q sont des réels. On suppose de plus que les fonctions hamiltoniennes considérées sont de la forme

$$H(p, q) = T(p) + V(q),$$

où T et V sont des fonctions de classe C^2 de $\mathbb{R}$ dans $\mathbb{R}$. Le système hamiltonien (3) s'écrit donc

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\begin{pmatrix} p(t) \\ q(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\nabla_q V(q(t)) \\ \nabla_p T(p(t)) \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} p(0) \\ q(0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} p_0 \\ q_0 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^2. \tag{5}$$

où ∇_p et ∇_q désignent les gradients par rapport à p et à q respectivement. Dans cette partie, on note $\varphi_t(y_0)$ le flot associé à (5) où y_0 est le vecteur de $\mathbb{R}^2$ de composantes $(p_0, q_0)^T$. On suppose que $\varphi_t(y_0)$ est bien défini pour tout temps $t > 0$ et tout point $y_0 \in \mathbb{R}^2$.

Pour approcher la solution de (5), on considère un petit pas de temps h, et on approche le flot $\varphi_h(y_0)$ correspondant à (5) par l'application Φ_h définie par

$$\begin{pmatrix} p_1 \\ q_1 \end{pmatrix} = \Phi_h \begin{pmatrix} p_0 \\ q_0 \end{pmatrix} \Leftrightarrow \left\{ \begin{array}{rcl} p_1 & = & p_0 - h\nabla_q V(q_1) \\ q_1 & = & q_0 + h\nabla_p T(p_0) \end{array} \right.$$

Cette méthode est appelée la méthode d'*Euler symplectique*. On considérera aussi la méthode de *Störmer-Verlet* définie par

$$\begin{pmatrix} p_1 \\ q_1 \end{pmatrix} = \Psi_h \begin{pmatrix} p_0 \\ q_0 \end{pmatrix} \Leftrightarrow \begin{cases} p_{1/2} & = & p_0 - \dfrac{h}{2}\nabla_q V(q_0) \\ q_1 & = & q_0 + h\nabla_p T(p_{1/2}) \\ p_1 & = & p_{1/2} - \dfrac{h}{2}\nabla_q V(q_1) \end{cases} \tag{6}$$

Le point $p_{1/2}$ est un intermédiaire de calcul.

1. Montrer que pour tout $h > 0$, l'application Φ_h est symplectique de $\mathbb{R}^2$ dans $\mathbb{R}^2$. Montrer de même que pour tout $h > 0$, l'application Ψ_h est symplectique de $\mathbb{R}^2$ dans $\mathbb{R}^2$ (on pourra utiliser le résultat de la question I.2).
2. Montrer que pour tout $h > 0$, l'application Ψ_h est bijective et satisfait la relation $\Psi_h^{-1} = \Psi_{-h}$.
3. Montrer que pour tout $t > 0$, si $(p(t), q(t))^T$ désigne la solution de (5), alors on a

$$p(t) = p_0 - t\nabla_q V(q_0) - \int_0^t \left(\int_0^s \nabla_q^2 V(q(\sigma))\nabla_p T(p(\sigma))\mathrm{d}\sigma \right) \mathrm{d}s.$$

   Ecrire une formule similaire pour $q(t)$.
4. Montrer que Φ_h est localement d'ordre 2, c'est-à-dire que si h_0 est un réel strictement positif donné, alors pour tout $h \in]0, h_0[$ et pour tout $y_0 \in \mathbb{R}^2$ on a la relation

$$\|\Phi_h(y_0) - \varphi_h(y_0)\| \leq Ch^2$$

   où $\| \cdot \|$ désigne la norme euclidienne (4), et où C ne dépend que de y_0, h_0, et des dérivées premières et secondes de T et V.
5. On suppose que T et V sont des fonctions de classe C^3 sur $\mathbb{R}$. Montrer que Ψ_h est localement d'ordre 3, c'est-à-dire satisfait, pour tout $h \in]0, h_0[$ comme dans la question précédente et pour tout $y_0 \in \mathbb{R}^2$, la relation suivante :

$$\|\Psi_h(y_0) - \varphi_h(y_0)\| \leq Ch^3$$

   où C ne dépend que de y_0, h_0, et des dérivées premières, secondes et troisièmes de T et V.

Partie III : Application à l'oscillateur harmonique.

Dans cette partie et tout le reste du problème, on considère le hamiltonien

$$H(p, q) = \frac{1}{2}p^2 + \frac{\omega^2}{2}q^2 \tag{7}$$

où $p \in \mathbb{R}$, $q \in \mathbb{R}$ et où $\omega \in \mathbb{R}$ est un réel strictement positif fixé. Avec les notations de la partie précédente, on a donc $T(p) = \frac{1}{2}p^2$ et $V(q) = \frac{\omega^2}{2}q^2$.

1. Ecrire la solution exacte $y(t) = (p(t), q(t))^T$ du système hamiltonien (5) correspondant en fonction de $y_0 = (p_0, q_0)^T$.

2. Donner l'expression du schéma de Störmer-Verlet Ψ_h défini en (6) appliqué au système hamiltonien correspondant à (7). Montrer que la relation $y_1 = \Psi_h(y_0)$ peut s'écrire sous la forme $y_1 = B_\omega(h) y_0$ où $y_1 = (p_1, q_1)^T$, $y_0 = (p_0, q_0)^T$ et où $B_\omega(h)$ est une matrice de $M_2(\mathbb{R})$.
3. On suppose que $h\omega < 2$. On définit les réels
$$\tau_\omega(h) = \omega\sqrt{1 - \frac{1}{4}(h\omega)^2} \in \mathbb{R} \quad \text{et} \quad \theta_\omega(h) = \arccos\left(1 - \frac{1}{2}(h\omega)^2\right) \in]0, \pi[,$$
et la matrice
$$M_\omega(h) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \tau_\omega(h)^{-1} \end{pmatrix}.$$
Calculer la matrice $M_\omega(h)^{-1} B_\omega(h) M_\omega(h)$ en fonction de $\theta_\omega(h)$.
Dans toute la suite, on supposera que $h \in]0, h_0[$ où h_0 satisfait $h_0\omega < 2$.
4. On désigne par $(y_n)_{n\in\mathbb{N}}$ la suite de $\mathbb{R}^2$ définie par récurrence par
$$y_0 = (p_0, q_0)^T, \quad \text{et} \quad \forall\, n \geq 0, \quad y_{n+1} = \Psi_h(y_n).$$
On définit ensuite la suite $z_n = M(h)^{-1} y_n$. Calculer z_n puis y_n en fonction de p_0, q_0, $\tau_\omega(h)$ et $\theta_\omega(h)$.
5. Montrer qu'il existe une constante C_1 dépendant de h_0, ω et $y_0 = (p_0, q_0)^T$ et pas de n, telle que pour tout $n \geq 0$,
$$|H(y_n) - H(y_0)| \leq C_1 h^2.$$
6. Montrer qu'il existe une constante C_2 dépendant de h_0, ω et y_0 et pas de n, telle que pour tout $n \geq 0$,
$$\|y_n - y(nh)\| \leq C_2(1 + nh)h^2,$$
où $y(nh)$ désigne la solution exacte au temps $t = nh$ du système hamiltonien associé à (7) avec valeur initiale $y_0 = (p_0, q_0)^T$.

Partie IV : Calculs de moyennes.

Dans cette partie, on considère une fonction $A : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ qui est périodique de période 2π. Pour tout entier $k \in \mathbb{Z}$, on associe à A son k-ième coefficient de Fourier
$$A_k := \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} A(\theta) e^{-ik\theta} \mathrm{d}\theta.$$

1. On suppose que A est de classe C^p. Montrer que pour tout entier $k \in \mathbb{Z}$, $k \neq 0$ on a
$$|A_k| \leq \frac{1}{|k|^p} \sup_{\theta\in[0,2\pi]} |A^{(p)}(\theta)|,$$
où $A^{(p)}$ désigne la dérivée p-ième de A.

2. Soit Ω un réel non nul donné et soit A une fonction périodique de période 2π de classe C^1 de $\mathbb{R}$ dans $\mathbb{R}$. En développant A en série de Fourier, montrer que pour tout temps $T > 0$,
$$\left|\frac{1}{T}\int_0^T A(t\Omega)\mathrm{d}t - A_0\right| \leq \frac{C}{T} \tag{8}$$
où C est une constante ne dépendant que de A et de Ω.
3. On considère maintenant φ_t le flot associé au hamiltonien (7). Soit $K(y)$ une fonction fixée de $\mathbb{R}^2$ dans $\mathbb{R}$ et de classe C^1. Montrer que pour tout $y_0 \in \mathbb{R}^2$, la fonction
$$T \mapsto \frac{1}{T}\int_0^T K(\varphi_t(y_0))\mathrm{d}t \tag{9}$$
admet une limite $L_\omega(y_0)$ qu'on explicitera. Montrer de plus que
$$\left|\frac{1}{T}\int_0^T K(\varphi_t(y_0))\mathrm{d}t - L_\omega(y_0)\right| \leq \frac{C}{T} \tag{10}$$
où C ne dépend que de K, de ω et de y_0.

Partie V : Calculs numériques de moyennes.

On s'intéresse dans cette dernière partie à la discrétisation de l'intégrale (9) par la formule
$$I_N^h(y_0) = \frac{1}{N}\sum_{n=0}^{N-1} K(y_n) \tag{11}$$
où y_n est la solution approchée définie dans la partie III à l'aide de la méthode de Störmer-Verlet Ψ_h. Le nombre N est tel que $T = Nh$, où h est le pas de discrétisation choisi pour calculer les y_n.

1. Montrer que pout tout x réel tel que $x \in]-\pi, \pi[$, on a
$$|1 - e^{ix}| \geq \frac{2}{\pi}|x|.$$
2. Soit Ω un réel non nul donné. Montrer que pour $k \in \mathbb{Z}$, $k \neq 0$, on a
$$|k| < \frac{\pi}{\Omega h} \Longrightarrow \left|\frac{1}{N}\sum_{n=0}^{N-1} e^{ihnk\Omega}\right| \leq \frac{\pi}{T\Omega|k|}$$
et
$$|k| \geq \frac{\pi}{\Omega h} \Longrightarrow \left|\frac{1}{N}\sum_{n=0}^{N-1} e^{ihnk\Omega}\right| \leq 1.$$
3. Soit A une fonction périodique de période 2π de classe C^p, $p \geq 2$, de $\mathbb{R}$ dans $\mathbb{R}$ et Ω un réel non nul donné. Pour calculer l'intégrale de la formule (8), on utilise la formule suivante :
$$I_N = \frac{1}{N}\sum_{n=0}^{N-1} A(nh\Omega)$$

où h est un paramètre de discrétisation en temps tel que $hN = T$. Montrer qu'on a

$$|I_N - A_0| \leq C\left(\frac{1}{T} + h^{p-1}\right)$$

où C est une constante ne dépendant que de A, Ω et p (on pourra développer A en série de Fourier et sommer selon le découpage de la question précédente).

4. On suppose que K est une fonction de classe C^p de $\mathbb{R}^2$ dans $\mathbb{R}$ et on considère l'approximation numérique (11). En utilisant les résultats de la partie III, montrer qu'il existe h_0 tel que pour tout $h \in]0, h_0[$ et pour tout $y_0 \in \mathbb{R}^2$, il existe un réel $L_\omega^h(y_0)$ tel que
$$\left|I_N^h(y_0) - L_\omega^h(y_0)\right| \leq C\left(\frac{1}{T} + h^{p-1}\right)$$
où C est une constante ne dépendant que de K, y_0, h_0, ω et p.

5. Montrer que si $p \geq 3$, on a sous les hypothèses précédentes
$$\left|I_N^h(y_0) - L_\omega(y_0)\right| \leq C\left(\frac{1}{T} + h^2\right).$$
où $L_\omega(y_0)$ est défini en (10) et où C est une constante ne dépendant que de K, y_0, h_0, et ω.

FIN DE L'EPREUVE