DM - Corrigé

1- Calculons $\frac{d}{dt} H(q(t), p(t))$:

$$\frac{d}{dt} H(q(t),p(t)) = \frac{\partial H}{\partial q}\dot{q}(t) + \frac{\partial H}{\partial p}\dot{p}$$

$$= \frac{\partial H}{\partial q}\cdot\frac{\partial H}{\partial p} - \frac{\partial H}{\partial p}\frac{\partial H}{\partial q}(q(t),p(t)) = 0$$

Donc $H(q(t), p(t)) =$ constante. $\square$

2- Calculons l'aire de $\phi_t(A)$:

$|\phi_t(A)| = \iint_{\phi_t(A)} dx\,dy$. Effectuons un changement de variable :

$$A \longrightarrow \phi_t(A)$$

$$(X,Y) \longmapsto (x,y) = \phi_t(X,Y) = (x(t), y(t))$$

$$|\phi_t(A)| = \iint_A |J_{\phi_t}(X,Y)|\, dX\,dY$$

où $J_{\phi_t}(X,Y) = \begin{vmatrix} \frac{\partial x}{\partial X} & \frac{\partial x}{\partial Y} \\ \frac{\partial y}{\partial X} & \frac{\partial y}{\partial Y} \end{vmatrix} = J(t)$ jacobien de ϕ_t.

Montrons que $J(t) = 1 \quad \forall t$. Pour cela calculons

$$\frac{dJ}{dt}(t) = \frac{d}{dt}\left\{\frac{\partial x}{\partial X}\frac{\partial y}{\partial Y} - \frac{\partial x}{\partial Y}\frac{\partial y}{\partial X}\right\}$$

or $x = x(t) \quad y = y(t)$

en permutant l'ordre de dérivation

$$= \frac{\partial \dot{x}}{\partial X}\frac{\partial y}{\partial Y} + \frac{\partial x}{\partial X}\frac{\partial \dot{y}}{\partial Y} - \frac{\partial \dot{x}}{\partial Y}\frac{\partial y}{\partial X} - \frac{\partial x}{\partial Y}\frac{\partial \dot{y}}{\partial X}.$$

Utilisons que $\dot{x} = \frac{\partial H}{\partial y}(x,y)$ et $\dot{y} = -\frac{\partial H}{\partial x}(x,y)$

Donc $$\frac{dJ}{dt}(t) = \frac{\partial}{\partial X}\left(\frac{\partial H}{\partial y}(x,y)\right)\frac{\partial y}{\partial Y} - \frac{\partial x}{\partial X}\frac{\partial}{\partial Y}\left(\frac{\partial H}{\partial x}(x,y)\right)$$

$$- \frac{\partial}{\partial Y}\left(\frac{\partial H}{\partial y}(x,y)\right)\frac{\partial y}{\partial X} + \frac{\partial x}{\partial Y}\left(\frac{\partial}{\partial X}\frac{\partial H}{\partial x}\right)$$

utilisons la différentiation composée : H est C^2 donc on a :

$$\frac{\partial}{\partial X}\left(\frac{\partial H}{\partial y}(x,y)\right) = \frac{\partial^2 H}{\partial x \partial y}(x,y)\frac{\partial x}{\partial X} + \frac{\partial^2 H}{\partial y^2}\frac{\partial y}{\partial X}$$

$$\frac{\partial}{\partial Y}\left(\frac{\partial H}{\partial x}(x,y)\right) = \frac{\partial^2 H}{\partial x^2}(x,y)\frac{\partial x}{\partial Y} + \frac{\partial^2 H}{\partial x \partial y}\frac{\partial y}{\partial Y}$$

~~de~~ même pour les autres termes donc

$$\frac{dJ}{dt} = \frac{\partial y}{\partial Y}\cdot\left(\frac{\partial^2 H}{\partial x \partial y}\cdot\frac{\partial x}{\partial X} + \frac{\partial^2 H}{\partial y^2}\frac{\partial y}{\partial X}\right) - \frac{\partial x}{\partial X}\cdot\left(\frac{\partial^2 H}{\partial x^2}\frac{\partial x}{\partial Y} + \frac{\partial^2 H}{\partial x \partial y}\frac{\partial y}{\partial Y}\right)$$

$$- \frac{\partial y}{\partial X}\left(\frac{\partial^2 H}{\partial x \partial y}\frac{\partial x}{\partial Y} + \frac{\partial^2 H}{\partial y^2}\frac{\partial y}{\partial Y}\right) + \frac{\partial x}{\partial Y}\cdot\left(\frac{\partial^2 H}{\partial x^2}\frac{\partial x}{\partial X} + \frac{\partial^2 H}{\partial x \partial y}\frac{\partial y}{\partial X}\right)$$

$$= \frac{\partial^2 H}{\partial x^2}\left(\cancel{-\frac{\partial x}{\partial X}\frac{\partial x}{\partial Y}} + \cancel{\frac{\partial x}{\partial Y}\cdot\frac{\partial x}{\partial X}}\right) + \frac{\partial^2 H}{\partial x \partial y}\left(\cancel{\frac{\partial x}{\partial X}\frac{\partial y}{\partial Y}} - \cancel{\frac{\partial x}{\partial X}\frac{\partial y}{\partial Y}} - \cancel{\frac{\partial y}{\partial X}\frac{\partial x}{\partial Y}} + \cancel{\frac{\partial x}{\partial Y}\frac{\partial y}{\partial X}}\right)$$

$$+ \frac{\partial^2 H}{\partial y^2}\left(\cancel{\frac{\partial y}{\partial X}\frac{\partial y}{\partial Y}} - \cancel{\frac{\partial y}{\partial X}\frac{\partial y}{\partial Y}}\right)$$

$= 0$ Tous les termes se simplifient.

Donc $J(t) = \text{constant} = J(0)$

or $\phi_0 : \mathbb{R}^2 \longrightarrow \mathbb{R}^2$ donc $\phi_0 = Id_{\mathbb{R}^2}$

$(q_0, p_0) \longmapsto (q(0), p(0)) = (q_0, p_0)$

Donc $J(0) = J(\phi_0) = \det\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix} = 1$

On a prouvé que $J(t) = 1 \quad \forall t$.

Donc $|\phi_t(A)| = \iint_A 1\, dx dy = |A| \quad \square$

3 — la loi de Newton (loi fondamentale de la mécanique) :

$$m\ddot{x} = F(x) = -\frac{\partial V}{\partial x}$$ (la force dérive du potentiel $V(x)$)

posons $q(t) = x(t)$ et $p(t) = m\dot{x}(t) = mv$

on a
$$\begin{cases} \dot{p} = -\dfrac{\partial V}{\partial q} \\ \dot{q} = \dfrac{p}{m} \end{cases}$$

Posons $H(q,p) = V(q) + \frac{1}{2m}p^2$

$$\frac{\partial H}{\partial q} = \frac{\partial V}{\partial q} \quad \text{et} \quad \frac{\partial H}{\partial p} = \frac{p}{m}$$

Donc la loi de la mécanique s'écrit sous forme

$$\begin{cases} \dot{q} = \dfrac{\partial H}{\partial p} \\ \dot{p} = -\dfrac{\partial H}{\partial q} \end{cases}$$

$H(q,p) = V(q) + \frac{1}{2m}(mv)^2 = V(q) + \frac{1}{2}mv^2$
est la somme de l'énergie potentielle et de l'énergie cinétique, c'est l'énergie mécanique du système.
Le fait que $H(q(t), p(t)) =$ constante traduit la conservation de l'énergie mécanique du système. □

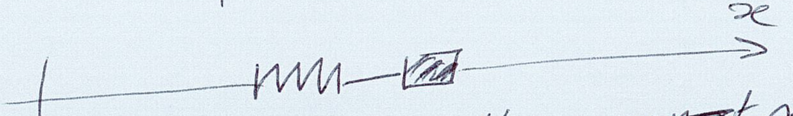
4. On suppose que $H(q,p) = \frac{1}{2}(q^2+p^2)$. Donc

$$\begin{cases} \dot{q} = p \\ \dot{p} = -q \end{cases}$$

Donc $\ddot{q} = -q$
l'équation du 2nd ordre est

$$\boxed{\ddot{x} = -x}$$

$\ddot{x} = -x$ est l'équation d'un oscillateur harmonique



qui décrit les oscillations d'une masse de 1 kg subissant la force de rappel d'un ressort de raideur $1\ N.m^{-1}$.

—

Le schéma d'Euler explicite s'écrit :

$$\begin{pmatrix} q_{n+1} \\ p_{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} q_n \\ p_n \end{pmatrix} + h \begin{pmatrix} \frac{\partial H}{\partial p}(q_n, p_n) \\ -\frac{\partial H}{\partial q}(q_n, p_n) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} q_n \\ p_n \end{pmatrix} + h \begin{pmatrix} p_n \\ -q_n \end{pmatrix}$$

Donc $$\begin{pmatrix} q_{n+1} \\ p_{n+1} \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & h \\ -h & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} q_n \\ p_n \end{bmatrix}$$

Le schéma d'Euler implicite donne :

$$\begin{pmatrix} q_{n+1} \\ p_{n+1} \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} q_n \\ p_n \end{bmatrix} + h \begin{bmatrix} p_{n+1} \\ -q_{n+1} \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} q_{n+1} \\ p_{n+1} \end{bmatrix} - h \begin{bmatrix} p_{n+1} \\ -q_{n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} q_n \\ p_n \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 1 & -h \\ h & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} q_{n+1} \\ p_{n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} q_n \\ p_n \end{bmatrix}$$

en inversant la matrice (son déterminant est $1+h^2 \neq 0$)

$$\begin{bmatrix} q_{n+1} \\ p_{n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & -h \\ h & 1 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} q_n \\ p_n \end{bmatrix}$$

Dans les ~~2~~ cas $\begin{bmatrix} q_{n+1} \\ p_{n+1} \end{bmatrix} = M \begin{bmatrix} q_n \\ p_n \end{bmatrix}$

avec $M = \begin{bmatrix} 1 & h \\ -h & 1 \end{bmatrix}$ pour Euler explicite

$$M = \begin{bmatrix} 1 & -h \\ h & 1 \end{bmatrix}^{-1} = \frac{1}{1+h^2} \begin{bmatrix} 1 & h \\ -h & 1 \end{bmatrix} \text{ pour Euler implicite.}$$

Ainsi par récurrence $\begin{pmatrix} q_n \\ p_n \end{pmatrix} = M^n \begin{pmatrix} q_0 \\ p_0 \end{pmatrix}$

Donc ϕ_n est l'application linéaire de matrice M^n

Donc $|\phi_n(A)| = (\det M)^n |A|$

car le jacobien de $\phi_n = \det(M^n) = (\det M)^n$

- pour Euler explicite $\det M = 1 + h^2$ donc

$|\phi_n(A)| = (1+h^2)^n |A|$ il y a <u>expansion</u> des aires.

- pour Euler implicite $\det M = \frac{1}{1+h^2}$ donc

$|\phi_n(A)| = \frac{1}{(1+h^2)^n} |A|$ il y a <u>contraction</u> des aires

Calculons $H(q_{n+1}, p_{n+1}) = \frac{1}{2} q_{n+1}^2 + p_{n+1}^2 = \frac{1}{2} \langle (q_{n+1}, p_{n+1}), (q_{n+1}, p_{n+1}) \rangle$

où $\langle , \rangle$ désigne le produit scalaire standard de $\mathbb{R}^2$.

$$H(q_{n+1}, p_{n+1}) = \frac{1}{2} \left\langle M \begin{pmatrix} q_n \\ p_n \end{pmatrix}, M \begin{pmatrix} q_n \\ p_n \end{pmatrix} \right\rangle$$

$$= \frac{1}{2} \left\langle M^T M \begin{pmatrix} q_n \\ p_n \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} q_n \\ p_n \end{pmatrix} \right\rangle$$

or $M^T M$ se calcule aisément

$$M^T M = \begin{bmatrix} 1 & -h \\ h & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & h \\ -h & 1 \end{bmatrix} = (1+h^2)\, I \quad \text{pour Euler explicite}$$

$$M^T M = \frac{1}{(1+h^2)^2} \begin{bmatrix} 1 & -h \\ h & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & h \\ -h & 1 \end{bmatrix} = \frac{1}{(1+h^2)} I \quad \text{pour Euler implicite}$$

donc $H(q_{n+1}, p_{n+1}) = (1+h^2)\, H(q_n, p_n)$ pour Euler explicite

$H(q_{n+1}, p_{n+1}) = \dfrac{1}{1+h^2} H(q_n, p_n)$ pour Euler implicite

Pour Euler explicite, l'énergie augmente.
Pour Euler implicite, l'énergie diminue.

5- Considérons le schéma implicite-explicite suivant :

$$\begin{cases} p_{n+1} = p_n - h \dfrac{\partial H}{\partial q}(q_n, p_{n+1}) & (1) \\ q_{n+1} = q_n + h \dfrac{\partial H}{\partial p}(q_n, p_{n+1}) & (2) \end{cases}$$

L'équation (1) définit p_{n+1} implicitement comme solution de l'équation

$$p_{n+1} + h \frac{\partial H}{\partial q}(q_n, p_{n+1}) - p_n = 0$$

Posons $F : (q_n, y, h) \longmapsto y - p_n + h \dfrac{\partial H}{\partial q}(q_n, y)$

Comme H est C^2, F est C^1.
De plus $F(q_n, p_n, 0) = 0$

Calculons $\dfrac{\partial F}{\partial y} = 1 + h \dfrac{\partial^2 H}{\partial p \partial q}(q_n, y)$

~~comme~~ H est C^2 et $\dfrac{\partial^2 H}{\partial p \partial q}$ est borné ~~localement~~ par hypothèse

donc pour h assez petit $\dfrac{\partial F}{\partial y} \neq 0$

D'après le théorème des fonctions implicites, pour h suffisamment petit il existe une solution unique de $F(q_n, p_{n+1}, h) = 0$ au voisinage de $(q_n, p_n, 0)$

Donc p_{n+1} est bien défini par l'equation (1)

Ensuite l'equation (2) est explicite une fois p_{n+1} connu:

$$q_{n+1} = q_n + h\frac{\partial H}{\partial p}(q_n, p_{n+1})$$

Donc pour h assez petit le schéma est bien défini.

~~Calculons $H(q_{n+1})$~~ Montrons que ce schéma conserve les aires:

Pour cela calculons le jacobien de $(q_n, p_n) \longmapsto (q_{n+1}, p_{n+1})$.

c'est à dire $\begin{vmatrix} \frac{\partial q_{n+1}}{\partial q_n} & \frac{\partial q_{n+1}}{\partial p_n} \\ \frac{\partial p_{n+1}}{\partial q_n} & \frac{\partial p_{n+1}}{\partial p_n} \end{vmatrix}$.

Le théorème des fonctions implicites permet de calculer la dérivée, en dérivant $p_{n+1} = p_n - h\frac{\partial H}{\partial q}(q_n, p_{n+1})$

$$\frac{\partial p_{n+1}}{\partial p_n} = 1 - h\frac{\partial^2 H}{\partial p \partial q}(q_n, p_{n+1}) \cdot \frac{\partial p_{n+1}}{\partial p_n}$$

$$\frac{\partial p_{n+1}}{\partial p_n} = \frac{1}{1 + h\frac{\partial^2 H}{\partial p \partial q}(q_n, p_{n+1})}$$

De même en dérivant % q_n :

$$\frac{\partial p_{n+1}}{\partial q_n} = -h\frac{\partial^2 H}{\partial q^2}(q_n, p_{n+1}) - h\frac{\partial^2 H}{\partial p \partial q}(q_n, p_{n+1})\frac{\partial p_{n+1}}{\partial q_n}$$

Donc $$\frac{\partial p_{n+1}}{\partial q_n} = \frac{-h \frac{\partial^2 H}{\partial q^2}(q_n, p_{n+1})}{1 + h \frac{\partial^2 H}{\partial p \partial q}(q_n, p_{n+1})}$$

On procède de même en dérivant :

$$q_{n+1} = q_n + h \frac{\partial H}{\partial p}(q_n, p_{n+1})$$

$$\frac{\partial q_{n+1}}{\partial q_n} = 1 + h \frac{\partial^2 H}{\partial q \partial p}(q_n, p_{n+1}) + h \frac{\partial^2 H}{\partial p^2}(q_n, p_{n+1}) \frac{\partial p_{n+1}}{\partial q_n}$$

En utilisant le calcul précédent on a :

$$\frac{\partial q_{n+1}}{\partial q_n} = 1 + h \frac{\partial^2 H}{\partial q \partial p}(q_n, p_{n+1}) - \frac{h^2 \frac{\partial^2 H}{\partial p^2} \frac{\partial^2 H}{\partial q^2}(\ )}{1 + h \frac{\partial^2 H}{\partial p \partial q}(\ )}$$

Enfin $$\frac{\partial q_{n+1}}{\partial p_n} = h \frac{\partial^2 H}{\partial p^2}(q_n, p_{n+1}) \cdot \frac{\partial p_{n+1}}{\partial p_n}$$

$$= \frac{h \frac{\partial^2 H}{\partial p^2}}{1 + h \frac{\partial^2 H}{\partial p \partial q}}$$

Le Jacobien est donc

$$\begin{vmatrix} 1 + h \frac{\partial^2 H}{\partial q \partial p} - \frac{h^2 \frac{\partial^2 H}{\partial p^2} \frac{\partial^2 H}{\partial q^2}}{1 + h \frac{\partial^2 H}{\partial q \partial p}} & \frac{h \frac{\partial^2 H}{\partial p^2}}{1 + h \frac{\partial^2 H}{\partial q \partial p}} \\ \frac{-h \frac{\partial^2 H}{\partial q^2}}{1 + h \frac{\partial^2 H}{\partial q \partial p}} & \frac{1}{1 + h \frac{\partial^2 H}{\partial q \partial p}} \end{vmatrix}$$

En développant on obtient que le déterminant =

$$1 - \frac{h^2 \frac{\partial^2 H}{\partial p^2}\frac{\partial^2 H}{\partial q^2}}{\left(1+h\frac{\partial^2 H}{\partial q \partial p}\right)^2} + \frac{h^2 \frac{\partial^2 H}{\partial p^2}\frac{\partial^2 H}{\partial q^2}}{\left(1+h\frac{\partial^2 H}{\partial q \partial p}\right)^2} \equiv 1$$

le jacobien vaut 1 donc

$$|\phi_{n+1}(A)| = |\phi_n(A)| = \dots = |\phi_0(A)| = |A|$$

Les aires sont exactement conservées !

Ce schéma étant un schéma d'Euler implicite en p_{n+1}, explicite en q_{n+1} est d'ordre 1.

Pour le prouver, il suffit d'étudier l'erreur de consistance.

pour (1) $\varepsilon(h) = p(t_{n+1}) - p(t_n) + h\frac{\partial H}{\partial q}(q(t_n), p(t_{n+1}))$

$$\varepsilon(h) = h\,\dot p(t_n) + O(h^2) + h\left(\frac{\partial H}{\partial q}(q(t_n), p(t_n)) + (p(t_{n+1}) - p(t_n))\frac{\partial^2 H}{\partial q^2} + O(p(t_{n+1}) - p(t_n))^2\right)$$

Or $p(t_{n+1}) - p(t_n)$ ~~$=$~~ $h\,\dot p(t_n) + O(h^2) = O(h)$

donc $\varepsilon(h) = h\left(\dot p(t_n) + \frac{\partial H}{\partial q}(q(t_n), p(t_n))\right) + O(h^2)$

Comme $\dot p = -\frac{\partial H}{\partial q}$ on a $\varepsilon(h) = O(h^2)$

On démontre de la même façon que

$$\eta(h) = q(t_{n+1}) - q(t_n) - h\frac{\partial H}{\partial p}(q_n, p_{n+1}) = O(h^2$$

L'erreur de consistance étant d'ordre 2, ce schéma à un pas est d'ordre 1.

Ce schéma peut en effet s'écrire sous forme

$$\begin{pmatrix} q_{n+1} \\ p_{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} q_n \\ p_n \end{pmatrix} + h\, \Phi\left(\begin{pmatrix} q_n \\ p_n \end{pmatrix}, h\right) \quad (\text{pour } h \text{ petit})$$

avec Φ C^1 (donc Lipschitz).

6 – la solution exacte de $\ddot{q} = -q$

est $q(t) = A \cos t + B \sin t$

$p(t) = \dot{q}(t) = -A \sin t + B \cos t$

avec les conditions initiales

$q(0) = A \qquad p(0) = B$

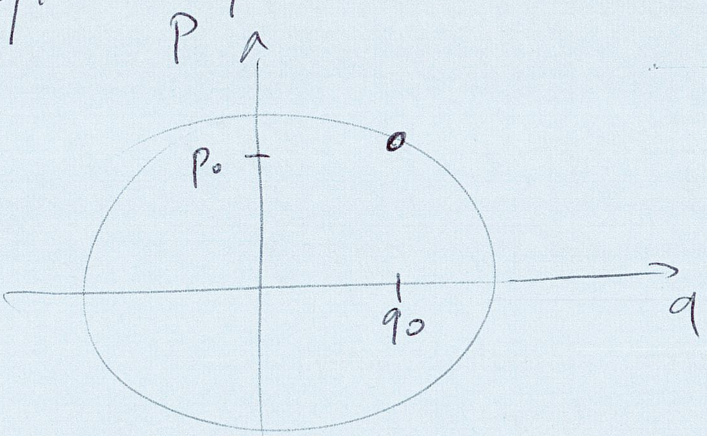
donc $q(t) = q_0 \cos t + p_0 \sin t$

$p(t) = -q_0 \sin t + p_0 \cos t$

$$\begin{pmatrix} q(t) \\ p(t) \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} \cos t & \sin t \\ -\sin t & \cos t \end{bmatrix} \begin{bmatrix} q_0 \\ p_0 \end{bmatrix}$$

Ou encore dans le plan complexe

$$q(t) + i\, p(t) = e^{it} (q_0 + i p_0)$$



la courbe solution est un cercle de centre $(0,0)$ et de rayon $\sqrt{q_0^2 + p_0^2}$

~~c'est~~ $H(q,p) = \frac{1}{2}(q^2+p^2)$ dans ce cas

donc $H(q(t), p(t))$ = constante traduit bien

que $(q(t), p(t))$ est situé sur le cercle de rayon $\sqrt{q_0^2+p_0^2}$.

Le schéma Ode45 ne conserve pas les aires puisque la trajectoire ne se referme pas exactement et que le rayon diminue au cours des itérations. Le schéma perd de l'energie

Le schéma implicite explicite conserve les aires donc même s'il est seulement d'ordre un, l'aire ne diminue pas. La courbe semble également mieux se refermer et l'energie mieux se conserver.

Rq Le schéma implicite-explicite ne conserve pas exactement l'energie cependant. si on veut regarder de plus près :

$$\begin{pmatrix} q_{n+1} \\ p_{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} q_n \\ p_n \end{pmatrix} + h \begin{pmatrix} p_{n+1} \\ -q_n \end{pmatrix}$$

cela donne
$$\begin{cases} q_{n+1} = (1-h^2)q_n + h\, p_n \\ p_{n+1} = -h\, q_n + p_n \end{cases}$$

$$\begin{pmatrix} q_{n+1} \\ p_{n+1} \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{bmatrix} 1-h^2 & h \\ -h & 1 \end{bmatrix}}_{M} \begin{bmatrix} q_n \\ p_n \end{bmatrix}$$

$$M^T M = \begin{bmatrix} 1-h^2 & -h \\ h & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1-h^2 & h \\ -h & 1 \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} (1-h^2)^2+h^2 & -h^3 \\ -h^3 & 1+h^2 \end{bmatrix} = \mathrm{Id} + O(h^2)$$

On a donc $\quad q_{n+1}^2 + p_{n+1}^2 = q_n^2 + p_n^2 + O(h^2)$

L'energie est conservé à l'ordre 2, alors que le schéma est seulement d'ordre 1.

Au bout d'un grand nombre de période, le schéma ode45 va finir par s'arrêter, car l'aire diminue et va finir par s'annuler, en tout cas avec une precision machine finie.

Alors que le schéma implicite-explicite va avoir un bon comportement qualitatif, les oscillations gardent la même amplitude.

Conclusion: La precision n'est pas le seul critère pour définir la qualité d'un schéma. La conservation de propriétés géométriques ou mécanique est également importante