

Modéliser les interactions physiques entre un grand nombre de constituants mène à l'écriture de systèmes différentiels pour lesquels, en dehors de quelques situations particulières, il n'existe aucune solution analytique. Les problèmes de dynamique gravitationnelle et de dynamique moléculaire en sont deux exemples. Afin d'analyser le comportement temporel de tels systèmes, l'informatique peut apporter une aide substantielle en permettant leur simulation numérique. L'objet de ce TP, inspiré d'un sujet de CENTRALE, est l'étude de solutions algorithmiques en vue de simuler une dynamique gravitationnelle afin, par exemple, de prédire une éclipse ou le passage d'une comète.

Soit y une fonction de classe \mathcal{C}^2 sur \mathbb{R} et t_{\min} et t_{\max} deux réels tels que $t_{\min} < t_{\max}$. On note I l'intervalle $[t_{\min}, t_{\max}]$. On s'intéresse à une équation différentielle du second ordre de la forme :

$$\forall t \in I \quad y''(t) = f(y(t)) \quad (1)$$

où f est une fonction donnée, continue sur \mathbb{R} . De nombreux systèmes physiques peuvent être décrits par une équation de ce type.

On suppose connues les valeurs $y_0 = y(t_{\min})$ et $z_0 = y'(t_{\min})$. On suppose également que le système physique étudié est conservatif. Ce qui entraîne l'existence d'une quantité indépendante du temps (énergie, quantité de mouvement,...), notée E , qui vérifie l'équation (2) où $g' = -f$:

$$\forall t \in I \quad \frac{1}{2}y'(t)^2 + g(y(t)) = E \quad (2)$$

Mise en forme du problème

Pour résoudre numériquement l'équation différentielle (1), on introduit la fonction $z : I \rightarrow \mathbb{R}$ définie par $\forall t \in I, z(t) = y'(t)$.

1. Montrer que l'équation (1) peut se mettre sous la forme d'un système différentiel du premier ordre en $z(t)$ et $y(t)$, noté (S).
2. Soit n un entier naturel strictement supérieur à 1 et $J_n = \llbracket 0, n-1 \rrbracket$.
On pose $h = \frac{t_{\max} - t_{\min}}{n-1}$ et $\forall i \in J_n, t_i = t_{\min} + ih$. Montrer que, pour tout entier $i \in \llbracket 0, n-2 \rrbracket$,

$$y(t_{i+1}) = y(t_i) + \int_{t_i}^{t_{i+1}} z(t) dt \quad \text{et} \quad z(t_{i+1}) = z(t_i) + \int_{t_i}^{t_{i+1}} f(y(t)) dt \quad (3)$$

La suite du problème exploite les notations introduites dans cette partie et présente deux méthodes numériques dans lesquelles les intégrales précédentes sont remplacées par une valeur approchée.

Schéma d'Euler explicite

Dans le schéma d'Euler explicite, chaque terme sous le signe intégral est remplacé par sa valeur prise en la borne inférieure.

3. Dans ce schéma, montrer que les équations (3) permettent de définir deux suites $(y_i)_{i \in J_n}$ et $(z_i)_{i \in J_n}$, où y_i et z_i sont des valeurs approchées de $y(t_i)$ et de $z(t_i)$. Donner les relations de récurrence permettant de déterminer les valeurs de y_i et z_i connaissant y_0 et z_0 .
4. Pour illustrer cette méthode, on considère l'équation différentielle

$$\forall t \in I, y''(t) = -\omega^2 y(t) \quad (4)$$

dans laquelle ω est un nombre réel.

Ecrire l'équation de conservation (2) correspondante à l'équation différentielle (4).

En portant les valeurs de y_i et z_i sur l'axe des abscisses et l'axe des ordonnées respectivement, quelle serait l'allure du graphe qui respecte la conservation de E ?

La mise en œuvre de la méthode d'Euler explicite génère le résultat graphique donné **Figure 1** à gauche.

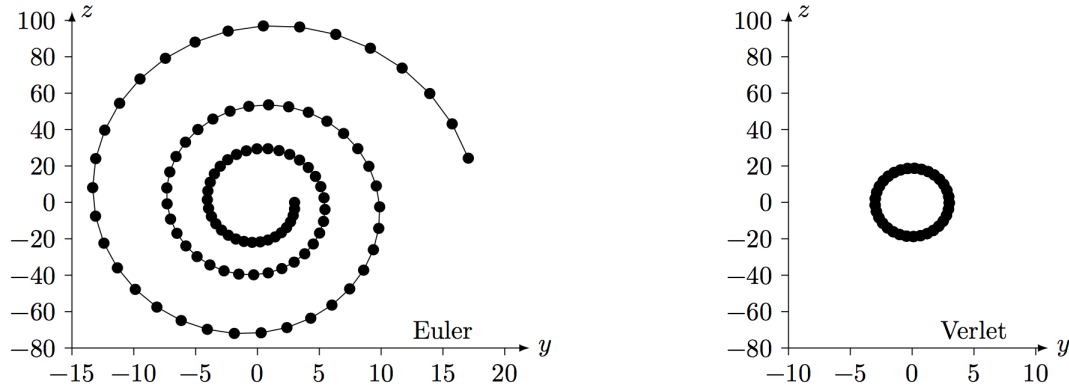


Figure 1

En quoi ce graphe confirme-t-il que le schéma numérique ne conserve pas E ? Pouvez-vous justifier son allure?

- Déterminer les suites $(y_i)_{i \in J_n}$ et $(z_i)_{i \in J_n}$ obtenues à la question 3. qui correspondent à l'équation différentielle (4).

Ecrire alors une fonction `euler` qui reçoit en arguments les paramètres qui vous semblent pertinents et qui renvoie deux listes de nombres correspondant aux valeurs associées aux suites $(y_i)_{i \in J_n}$ et $(z_i)_{i \in J_n}$.

Pour illustrer cette méthode, on choisit les valeurs numériques suivantes :

$$y_0 = 3, z_0 = 0, t_{\min} = 0, t_{\max} = 3, \omega = 2\pi \text{ et } n = 100$$

La courbe pourra être obtenue par :

```
import matplotlib.pyplot as plt
import numpy as np
plt.close()
Y=euler(3,0,2*np.pi,0,3,100)[0]
Z=euler(3,0,2*np.pi,0,3,100)[1]
plt.plot(Y,Z,'ko',linestyle='--')
ax = plt.gca()
ax.spines['right'].set_color('none')
ax.spines['top'].set_color('none')
plt.xlim(-15, 20)
plt.ylim(-80,120)
plt.show()
```

Schéma de Verlet

Le physicien français Loup Verlet a proposé en 1967 un schéma numérique d'intégration d'une équation de la forme (5) dans lequel, en notant $f_i = f(y_i)$ et $f_{i+1} = f(y_{i+1})$, les relations de récurrence s'écrivent

$$y_{i+1} = y_i + h z_i + \frac{h^2}{2} f_i \quad \text{et} \quad z_{i+1} = z_i + \frac{h}{2} (f_i + f_{i+1}) \quad (5)$$

On reprend l'exemple de l'oscillateur harmonique de la question 4. et on compare les résultats obtenus à l'aide des schémas d'Euler et de Verlet.

- Ecrire une fonction `verlet` qui reçoit en arguments les paramètres qui vous semblent pertinents et qui renvoie deux listes de nombres correspondant aux valeurs associées aux suites $(y_i)_{i \in J_n}$ et $(z_i)_{i \in J_n}$.
- La mise en œuvre du schéma de Verlet avec les mêmes paramètres que ceux utilisés au 5. donne le résultat de la **Figure 1** à droite. Interpréter l'allure de ce graphe. Que peut-on en conclure sur le schéma de Verlet?