



Méthodes pseudo-symplectiques

Anne Aubry

► **To cite this version:**

Anne Aubry. Méthodes pseudo-symplectiques. [Rapport de recherche] RR-2864, INRIA. 1996. <inria-00073827>

HAL Id: inria-00073827

<https://hal.inria.fr/inria-00073827>

Submitted on 24 May 2006

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Méthodes Pseudo-symplectiques

A. Aubry

N° 2864

Avril 1996

————— THÈME 4 —————

 ***Rapport
de recherche***


Méthodes Pseudo-symplectiques

A. Aubry

Thème 4 — Simulation et optimisation
de systèmes complexes
Projet Aladin

Rapport de recherche n° 2864 — Avril 1996 — 21 pages

Résumé : Dans cet article, nous nous proposons de construire des méthodes de Runge-Kutta explicites approchant des méthodes symplectiques et possédant les propriétés remarquables de ces méthodes concernant la croissance linéaire de l'erreur globale (dans le cas de problèmes périodiques où la période ne dépend que de l'énergie : l'Hamiltonien) et la conservation de l'Hamiltonien. Pour cela, une définition affaiblie de la symplecticité : la pseudo-symplecticité, est introduite.

Mots-clé : Systèmes Hamiltoniens, méthodes symplectiques, méthodes de Runge-Kutta, arbres, conditions d'ordre, conditions simplificatrices

(Abstract: pto)

Pseudo-symplectic methods

Abstract: The aim of the presented paper is to construct explicit Runge-Kutta methods that approximate symplectic methods and preserve their interesting properties : the linear error growth (if all solutions of the problem being integrated are periodic with a period only depends on the value of the energy : the Hamiltonian) and the Hamiltonian conservation. For this, a weak definition of symplecticity : the pseudo-symplecticity, is introduced.

Key-words: Hamiltonian systems, symplectic methods, Runge-Kutta methods, trees, order conditions, simplifying assumptions

1 Introduction

Depuis quelques années, la résolution numérique de problèmes Hamiltoniens fait l'objet de nombreuses études ([13],[10]). Les méthodes numériques de résolution de systèmes Hamiltoniens sont généralement classées en deux grandes classes : les méthodes symplectiques et les autres. Parmi les méthodes symplectiques, on distingue les méthodes de Runge-kutta, nécessairement implicites (par exemple les méthodes de Gauss [11], [13]), les méthodes de Runge-Kutta-Nyström, explicites mais ne s'appliquant qu'à des problèmes de la forme $y'' = f(t, y)$ (voir par exemple [13], [10], [12]) et les méthodes de Runge-Kutta partitionnées, qui peuvent admettre une programmation explicite, mais ceci, seulement dans le cas où l'Hamiltonien est séparable (voir par exemple [10] et [13]).

On s'intéresse à un système Hamiltonien (S) non équivalent à une équation différentielle du second ordre en q ou en p (i.e. $q'' = f(q)$ ou $p'' = f(p)$)

$$(S) \begin{cases} q' &= \frac{\partial H}{\partial p}(p, q) \\ p' &= -\frac{\partial H}{\partial q}(p, q) \end{cases}$$

où $(p, q) \in \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d$ et H est une application à valeurs réelles. En fait, on considère des systèmes pour lesquels les méthodes de Runge-Kutta-Nyström ne s'appliquent pas. Donnons quelques exemples de ce type de systèmes.

Exemple 1 Soit l'Hamiltonien $H(p, q) = pq^2$, les équations du mouvement sont alors :

$$p' = -2pq \text{ et } q' = q^2.$$

Exemple 2 Cet exemple donné par E.Hairer ([9]) décrit le mouvement d'une perle sur un fil. L'Hamiltonien est défini par :

$$H(p, q) = \frac{p^2}{2(1+U'(q)^2)} + U(q) \text{ avec } U(q) = 0.1(q(q-2))^2 + 0.008q^3.$$

Les équations du mouvement sont alors :

$$p' = \frac{p^2 U''(q) U'(q)}{(1+U'(q)^2)^2} - U'(q) \text{ et } q' = \frac{p}{(1+U'(q)^2)}.$$

Exemple 3 Soit l'Hamiltonien du pendule modifié (voir [10], section II.16, exemple 16.2)

$$H(p, q) = \frac{p^2}{2} - \cos(q)\left(1 - \frac{p}{6}\right),$$

les équations du mouvement sont alors les suivantes :

$$p' = -\left(1 - \frac{p}{6}\right) \sin(q) \text{ et } q' = p + \frac{1}{6} \cos(q).$$

Dans cet article, nous nous proposons de construire des méthodes de Runge-Kutta explicites approchant des méthodes symplectiques et possédant les propriétés remarquables de ces méthodes concernant la croissance linéaire de l'erreur globale (dans le cas de problèmes périodiques où la période ne dépend que de l'énergie : l'Hamiltonien [5]) et la conservation de l'Hamiltonien ([13], [9]). Pour cela, P. Chartier ([8]) introduit une définition affaiblie de la symplecticité : la pseudo-symplecticité. Dans un environnement parallèle, il propose un procédé simple de construction de méthodes pseudo-symplectiques par itération de méthodes symplectiques. Dans le cadre séquentiel, la construction de telles méthodes pose des difficultés du même type que celles existantes pour la construction de méthodes explicites. De plus, elles apparaissent pour des ordres plus faibles. L'introduction d'une nouvelle condition simplificatrice spécifique permet néanmoins la construction effective de telles méthodes, au moins pour des ordres peu élevés. A ce jour, nous avons construit des méthodes pseudo-symplectiques d'ordre 3 et nous les avons testé sur le problème de Kepler et différents problèmes disponibles dans la littérature.

2 Pseudo-symplecticité

Après avoir rappelé la définition de la symplecticité (voir par exemple [10] et [13]), nous introduisons la pseudo-symplecticité et les conditions sur les coefficients d'une méthode de Runge-Kutta qu'elle implique.

Définition 1 Soit g une application de \mathbb{R}^{2d} dans \mathbb{R}^{2d} différentiable et soit G sa matrice jacobienne. g est dite symplectique si elle vérifie

$$G^T J G = J$$

où, si l'on note I_d la matrice identité de rang d , J est la matrice

$$J = \begin{bmatrix} 0_d & I_d \\ -I_d & 0 \end{bmatrix}.$$

Une méthode numérique à un pas est symplectique si le flux défini par

$$\Psi : \begin{cases} \mathbb{R}^{2d} & \longrightarrow & \mathbb{R}^{2d} \\ y_0 & \longrightarrow & y_1 \end{cases}$$

est une application symplectique. Dans le cas d'une méthode de Runge-Kutta à s étapes internes sans étapes équivalentes, $R = (A, b, c)$, il a été démontré ([10], [12]) que la condition suivante était nécessaire et suffisante :

$$b_i a_{ij} + b_j a_{ji} - b_i b_j = 0 \quad i, j = 1, 2, \dots, s.$$

Il en résulte que ces méthodes sont nécessairement implicites.

2.1 Définition de la pseudo-symplecticité

Définition 2 On dira qu'une méthode à un pas est pseudo-symplectique d'ordre de pseudo-symplecticité q (en abrégé, o.p.s. q) si son flux Ψ vérifie

$$\Psi'^T J \Psi' = J + \mathcal{O}(h^{q+1})$$

où Ψ' est sa matrice jacobienne.

2.2 Conditions de pseudo-symplecticité

Nous utilisons le formalisme des arbres introduit pour l'étude de l'ordre des méthodes de Runge-Kutta (voir, par exemple, [10], section II.2 ou [2], section 304). Les solutions exactes et numériques d'un problème à valeur initiale peuvent s'écrire alors sous forme de "B-série" ([10], section II.12) :

$$\begin{aligned} y(x_1) &= \sum_{t \in T} \frac{h^{\rho(t)}}{\rho(t)!} F(t)(y(x_0)), \\ y_1 &= \sum_{t \in T} \frac{h^{\rho(t)}}{\rho(t)!} a(t) F(t)(y_0), \end{aligned}$$

a étant une fonction sur l'ensemble des arbres T , à valeurs réelles, dépendant des coefficients de la méthode. Dans le cas des méthodes de Runge-Kutta, on a :

$$a(t) = \alpha(t) \gamma(t) b^T \Phi(t),$$

où γ est la densité, α le nombre de façon d'étiqueter un arbre, Φ la fonction d'ordre (ce que J.C. Butcher nomme "elementary weight" [2], section 304, pages 163-164, mais écrit ici sous forme vectorielle), ρ , l'ordre, et $F(t)(y)$ représente l'élément différentiel évalué en y .

M.P. Calvo et J.M. Sanz-Serna [7] ont établi une condition nécessaire et suffisante pour qu’une B-série définisse une méthode symplectique. Dans le cas des méthodes de Runge-Kutta, leur résultat donne les conditions nécessaires et suffisantes de pseudo-symplecticité.

On appelle arbres, les “rooted trees” et nr-arbre, les “trees”. Pour les arbres, la racine est signalée par une croix. Une paire de voisins est une paire d’arbres correspondant au même nr-arbre et telle que leurs racines correspondent à deux nœuds reliés par une branche dans le nr-arbre.

Proposition 1 *Une méthode de Runge-Kutta $R = (A, b, c)$ est o.p.s. q si et seulement si pour tout nr-arbre t d’ordre inférieur ou égal à q , pour toute paire de voisins $(\rho\tau_i, \rho\tau_j)$*

$$b^T \Phi(\rho\tau_i) + b^T \Phi(\rho\tau_j) = b^T \Phi(\rho\tau_I). b^T \Phi(\rho\tau_J)$$

$\rho\tau_I$ et $\rho\tau_J$ étant les arbres obtenus en sectionnant la branche joignant les nœuds i et j , et de racines respectivement ces nœuds.

Exemple 4 Prenons le nr-arbre $t = \bullet\text{---}\bullet\text{---}\bullet$. Il admet deux paires de voisins

$$\left(\begin{array}{c} \bullet \\ \diagup \quad \diagdown \\ \bullet \quad \bullet \\ \diagup \quad \diagdown \\ \text{✕} \quad \text{✕} \end{array} , \begin{array}{c} \bullet \\ \diagdown \quad \diagup \\ \bullet \quad \bullet \\ \diagup \quad \diagdown \\ \text{✕} \quad \text{✕} \end{array} \right) \text{ et } \left(\begin{array}{c} \bullet \\ \diagup \quad \diagdown \\ \bullet \quad \bullet \\ \diagdown \quad \diagup \\ \text{✕} \quad \text{✕} \end{array} , \begin{array}{c} \bullet \\ \diagdown \quad \diagup \\ \bullet \quad \bullet \\ \diagup \quad \diagdown \\ \text{✕} \quad \text{✕} \end{array} \right),$$

correspondants respectivement aux choix suivants des racines i et j :

$$\begin{array}{c} i \quad j \\ \bullet \quad \bullet \\ \diagup \quad \diagdown \\ \text{✕} \quad \text{✕} \end{array} \text{ et } \begin{array}{c} i \quad j \\ \bullet \quad \bullet \\ \diagdown \quad \diagup \\ \text{✕} \quad \text{✕} \end{array}.$$

Pour le premier choix, on a

$$\begin{array}{l} \rho\tau_i = \begin{array}{c} \bullet \\ \diagup \quad \diagdown \\ \bullet \quad \bullet \\ \diagup \quad \diagdown \\ \text{✕} \quad \text{✕} \end{array}, \quad \rho\tau_j = \begin{array}{c} \bullet \\ \diagdown \quad \diagup \\ \bullet \quad \bullet \\ \diagup \quad \diagdown \\ \text{✕} \quad \text{✕} \end{array}, \\ \rho\tau_I = \begin{array}{c} \bullet \\ \diagup \quad \diagdown \\ \text{✕} \quad \text{✕} \end{array}, \quad \rho\tau_J = \begin{array}{c} \bullet \\ \diagdown \quad \diagup \\ \text{✕} \quad \text{✕} \end{array}. \end{array}$$

La condition de pseudo-symplecticité associée à cette paire de voisins est¹ :

$$b^T A^2 c + b^T (c.Ac) = (b^T e)(b^T Ac).$$

2.2.1 Exemple : conditions de pseudo-symplecticité à l’ordre 6

On considère une méthode de Runge-Kutta $R = (A, b, c)$. On suppose que la méthode satisfait la condition simplifcatrice² $C(1)$: $Ae = c$. Les conditions de pseudo-symplecticité à l’ordre six sont alors regroupées dans le tableau 1. Si la condition simplifcatrice

$$D(1) : \forall v \in \mathbb{R}^s, b^T Av = b^T v - b^T (c.v),$$

définie par J.C. Butcher (voir [2], section 342, pages 214-216), est imposée, les conditions de pseudo-symplecticité relatives à des arbres voisins $\rho\tau_i$ et $\rho\tau_j$, tels que $\rho\tau_I = \tau$, sont identiquement satisfaites. Les conditions de pseudo-symplecticité restantes sont alors données dans le tableau 2. Nous verrons à la section 3.3.2 une généralisation de cette condition simplifcatrice.

Remarque 1 *Soit une méthode de Runge-Kutta à s étapes internes. Si les composantes c_i du vecteur c sont deux à deux distinctes et si la méthode satisfait les conditions de pseudo-symplecticité à l’ordre $s - 1$ alors $D(1)$ est satisfaite. En effet, $(e, c, c^2, \dots, c^{s-1})$ forme une base de \mathbb{R}^s et la condition de pseudo-symplecticité correspondant à l’arbre d’ordre k et de hauteur 2, pour $k = 2, \dots, s + 1$ est*

$$b^T Ac^{k-2} + b^T c^{k-1} = b^T c^{k-2}$$

d’où la condition $D(1)$.

Dans la suite une méthode pseudo-symplectique désignera une méthode de Runge-Kutta explicite pseudo-symplectique.

1. Un point $(.)$ représente un produit composantes par composantes

2. e est le vecteur dont toutes les composantes valent 1.

ordre	conditions de pseudo-symplecticité	numéro
1	$b^T e = 1$	(1)
2	$b^T c = \frac{1}{2}$	(2)
3	$b^T Ac + b^T c^2 = b^T c$	(3)
4	$b^T A^2 c + b^T (c.Ac) = b^T Ac$	(4)
	$b^T (c.Ac) = \frac{1}{2}(b^T c)^2$	(5)
	$b^T Ac^2 + b^T c^3 = b^T c^2$	(6)
5	$b^T A^3 c + b^T (c.A^2 c) = b^T A^2 c$	(7)
	$b^T (c.A^2 c) + b^T (Ac)^2 = (b^T c)(b^T Ac)$	(8)
	$b^T A^2 c^2 + b^T (c.Ac^2) = b^T Ac^2$	(9)
	$b^T (c.Ac^2) + b^T (c^2.Ac) = (b^T c^2)(b^T c)$	(10)
	$b^T (c^2.Ac) + b^T A(c.Ac) = b^T (c.Ac)$	(11)
	$b^T Ac^3 + b^T c^4 = b^T c^3$	(12)
6	$b^T A^4 c + b^T (c.A^3 c) = b^T A^3 c$	(13)
	$b^T (c.A^3 c) + b^T (Ac.A^2 c) = (b^T c)(b^T A^2 c)$	(14)
	$b^T (Ac.A^2 c) = \frac{1}{2}(b^T Ac)^2$	(15)
	$b^T A^3 c^2 + b^T (c.A^2 c^2) = b^T A^2 c^2$	(16)
	$b^T (c.A^2 c^2) + b^T (Ac.Ac^2) = (b^T c)(b^T Ac^2)$	(17)
	$b^T (Ac.Ac^2) + b^T (c^2.A^2 c) = (b^T Ac)(b^T c^2)$	(18)
	$b^T (c^2.A^2 c) + b^T A(c.A^2 c) = b^T (c.A^2 c)$	(19)
	$b^T A^2 (c.Ac) + b^T (c.A(c.Ac)) = b^T A(c.Ac)$	(20)
	$b^T (c.A(c.Ac)) + b^T (c.(Ac)^2) = (b^T c)(b^T (c.Ac))$	(21)
	$b^T (c.(Ac)^2) + b^T A(Ac)^2 = b^T (Ac)^2$	(22)
	$b^T A(c.Ac^2) + b^T (c^2.Ac^2) = b^T (c.Ac^2)$	(23)
	$b^T (c^2.Ac^2) = \frac{1}{2}(b^T c^2)^2$	(24)
	$b^T A^2 c^3 + b^T (c.Ac^3) = b^T Ac^3$	(25)
	$b^T (c.Ac^3) + b^T (c^3.Ac) = (b^T c)(b^T c^3)$	(26)
	$b^T (c^3.Ac) + b^T A(c^2.Ac) = b^T (c^2.Ac)$	(27)
	$b^T Ac^4 + b^T c^5 = b^T c^4$	(28)

TAB. 1 – Conditions de pseudo-symplecticité à l'ordre 6

ordre	conditions de pseudo-symplecticité	numéro
1	$b^T e = 1$	(1)
4	$b^T (c.Ac) = \frac{1}{2}(b^T c)^2$	(5)
5	$b^T (c.A^2 c) + b^T (Ac)^2 = (b^T c)(b^T Ac)$	(8)
	$b^T (c.Ac^2) + b^T (c^2.Ac) = (b^T c^2)(b^T c)$	(10)
6	$b^T (c.A^3 c) + b^T (Ac.A^2 c) = (b^T c)(b^T A^2 c)$	(14)
	$b^T (Ac.A^2 c) = \frac{1}{2}(b^T Ac)^2$	(15)
	$b^T (c.A^2 c^2) + b^T (Ac.Ac^2) = (b^T c)(b^T Ac^2)$	(17)
	$b^T (Ac.Ac^2) + b^T (c^2.A^2 c) = (b^T Ac)(b^T c^2)$	(18)
	$b^T (c.A(c.Ac)) + b^T (c.(Ac)^2) = (b^T c)(b^T (c.Ac))$	(21)
	$b^T (c^2.Ac^2) = \frac{1}{2}(b^T c^2)^2$	(24)
	$b^T (c.Ac^3) + b^T (c^3.Ac) = (b^T c)(b^T c^3)$	(26)

TAB. 2 – Conditions de pseudo-symplecticité avec $D(1)$ à l'ordre 6

3 Construction de méthodes de Runge-Kutta pseudo-symplectiques

Nous commençons par donner une borne inférieure du nombre d'étapes séquentielles (voir [10], section II.11) d'une méthode de Runge-Kutta explicite pseudo-symplectique, à partir des conditions de pseudo-symplecticité linéaire sur la fonction de stabilité. Ensuite, un procédé simple de construction de méthodes pseudo-symplectiques, dans un environnement parallèle, est présenté. Finalement, dans le cas séquentiel, la construction de méthodes d'ordre 2 et 3, dont le nombre d'étapes est minimal, est donnée.

Les équations de pseudo-symplecticité et d'ordre donnent un système polynomial sur les coefficients de la méthode. Pour un ordre 3 et un o.p.s 6, il est déjà difficilement soluble. Nous introduisons alors une nouvelle condition simplificatrice, notée $\hat{D}(\mu)$. Le dénombrement des conditions de pseudo-symplecticité montre qu'elle réduit significativement le nombre de ces conditions. Malgré tout, la résolution des équations reste complexe, du moins pour des ordres élevés.

3.1 Une borne inférieure de la dimension de la matrice

Lemme 1 *Si (A, b, c) est une méthode de Runge-Kutta d'ordre de pseudo-symplecticité $2p$ alors sa fonction de stabilité R satisfait la relation suivante :*

$$R(z)R(-z) = 1 + \mathcal{O}(z^{2p+1}).$$

Ce lemme résulte d'une remarque de M.P. Calvo et de J.M. Sanz-Serna (voir [13], pages 75, remarque 6.5).

Proposition 2 *Si (A, b, c) est une méthode de Runge-Kutta explicite à σ étapes séquentielles, d'ordre p et d'ordre de pseudo-symplecticité $2p$, alors*

- Si $p = 2q$, $\sigma \geq 3q$,
- Si $p = 2q + 1$, $\sigma \geq 3q + 2$ où $q \geq 1$.

Preuve Soit $R(z) = \sum_{n \geq 0} a_n z^n$ la fonction de stabilité de la méthode, avec $a_0 = 1$, $a_1 = b^T e$ et $a_n = b^T A^{n-2} c$ pour $n \geq 2$. D'après le Lemme 1, elle satisfait la relation (PSL) :

$$R(z)R(-z) = 1 + \mathcal{O}(z^{2p+1}).$$

On a $R(z)R(-z) = \sum_{n \geq 0} c_n z^n$ avec $c_n = \sum_{k=0}^n (-1)^k a_k a_{n-k}$. Comme la méthode est d'ordre p , $a_n = \frac{1}{n!}$ pour $n \leq p$, on en déduit :

$$\begin{aligned} c_n &= 0, & n &\leq p \\ c_{p+l} &= \sum_{k=0}^{l-1} \frac{(-1)^k}{k!} \left(1 + (-1)^{l+p}\right) \left(a_{p+l-k} - \frac{1}{(p+l-k)!}\right), & l &= 1, \dots, p. \end{aligned}$$

Distinguons le cas où p est pair et celui où il est impair, il vient :

- si $p = 2q$, pour $l = 1, \dots, q$, on a :

$$\begin{aligned} c_{2q+2l} &= 2 \sum_{k=0}^{2l-1} \frac{(-1)^k}{k!} \left(a_{2q+2l-k} - \frac{1}{(2q+2l-k)!}\right), \\ c_{2q+2l-1} &= 0, \end{aligned}$$

- si $p = 2q + 1$, pour $l = 1, \dots, q + 1$, on a :

$$\begin{aligned} c_{2q+2l} &= 2 \sum_{k=0}^{2l-2} \frac{(-1)^k}{k!} \left(a_{2q+2l-k} - \frac{1}{(2q+2l-k)!}\right), \\ c_{2q+2l+1} &= 0. \end{aligned}$$

Commençons par regarder les cas $p = 2$ et $p = 3$.

- $p = 2$: si $A^2 = 0$ alors $a_3 = a_4 = 0$ et $c_4 = 2 \left(\frac{1}{3!} - \frac{1}{4!} \right)$, ce qui contredit (PSL) , donc $\sigma \geq 3$.
- $p = 3$: si $A^4 = 0$ alors $a_5 = a_6 = 0$ et d'après (PSL) , a_4 est solution du système

$$\begin{cases} c_4 &= 2 \left(a_4 - \frac{1}{4!} \right) \\ c_6 &= 2 \left(-\frac{1}{6!} - \frac{1}{5!} + \frac{1}{2} \left(a_4 - \frac{1}{4!} \right) \right) \end{cases}$$

ce qui est impossible d'où $\sigma \geq 5$.

Maintenant, traitons le cas général.

- $p = 2q$: on montre que $A^{3q-1} = 0$ est impossible, alors σ est nécessairement supérieur ou égal à $3q$. Supposons $A^{3q-1} = 0$, alors $a_{3q} = a_{3q+1} = \dots = a_{4q} = 0$ et la condition (PSL) implique que les $q-1$ quantités $a_{2q+1}, a_{2q+2}, \dots, a_{3q-1}$ vérifient le système linéaire (S_{2q}) à q équations³:

$$\begin{cases} \sum_{k=0}^{2l-1} \frac{(-1)^k}{(2l-1-k)!} \left(a_{2q+1+k} - \frac{1}{(2q+1+k)!} \right) = 0, & l = 1, \dots, \left[\frac{q}{2} \right] - 1, \\ \sum_{k=0}^{q-2} \frac{(-1)^k}{(2l-1-k)!} \left(a_{2q+1+k} - \frac{1}{(2q+1+k)!} \right) = \sum_{k=q-1}^{2l-1} \frac{(-1)^k}{(2l-1-k)!} \frac{1}{(2q+1+k)!}, & l = \left[\frac{q}{2} \right], \dots, q. \end{cases}$$

Montrons que ce système est incompatible. Posons

$$\begin{aligned} u_k &= (-1)^k \left(a_{2q+1+k} - \frac{1}{(2q+1+k)!} \right), & k = 0, \dots, q-2, \\ d_l &= \sum_{k=q-1}^{2l-1} \frac{(-1)^k}{(2l-1-k)!} \frac{1}{(2q+1+k)!}, & l = \left[\frac{q}{2} \right], \dots, q. \end{aligned}$$

(S_{2q}) se réécrit alors

$$\begin{cases} \sum_{k=0}^{2l-1} \frac{1}{(2l-1-k)!} u_k = 0, & l = 1, \dots, \left[\frac{q}{2} \right] - 1, \\ \sum_{k=0}^{q-2} \frac{1}{(2l-1-k)!} u_k = d_l, & l = \left[\frac{q}{2} \right], \dots, q. \end{cases}$$

Soit $M_{2q} = (m_{i,j})_{1 \leq i, j \leq q-1}$ la matrice de ce système linéaire privé de la dernière équation. Les éléments de cette matrice sont

$$m_{i,j} = \begin{cases} \frac{1}{(2i-j)!}, & j \leq \min(2i, q-1) \\ 0, & \text{sinon,} \end{cases}$$

et on montre que $\det M_{2q} \neq 0$. Considérons maintenant la matrice \tilde{M}_{2q} dont les $q-1$ premières colonnes sont celles de la matrice du système linéaire (S_{2q}) et la dernière colonne est le second membre de (S_{2q}) . On montre que $\det \tilde{M}_{2q} \neq 0$. Le système (S) est donc incompatible.

- $p = 2q+1$: on veut montrer que $A^{3q+1} = 0$ est impossible, alors σ est nécessairement supérieur ou égal à $3q+2$. Supposons $A^{3q+1} = 0$, alors $a_{3q+2} = a_{3q+3} = \dots = a_{4q+2} = 0$ et la condition (PSL) implique que les q quantités $a_{2q+2}, a_{2q+3}, \dots, a_{3q+1}$ vérifient le système linéaire (S_{2q+1}) à $q+1$ équations:

$$\begin{cases} \sum_{k=0}^{2l-2} \frac{(-1)^k}{(2l-2-k)!} \left(a_{2q+2+k} - \frac{1}{(2q+2+k)!} \right) = 0, & l = 1, \dots, \left[\frac{q+1}{2} \right], \\ \sum_{k=0}^{q-1} \frac{(-1)^k}{(2l-2-k)!} \left(a_{2q+2+k} - \frac{1}{(2q+2+k)!} \right) = \sum_{k=q}^{2l-2} \frac{(-1)^k}{(2l-2-k)!} \frac{1}{(2q+2+k)!}, & l = \left[\frac{q+1}{2} \right] + 1, \dots, q+1. \end{cases}$$

De même que pour $p = 2q$, on vérifie que ce système est incompatible.

3. On note entre crochets la partie entière d'un réel.

3.2 Construction de méthodes pseudo-symplectiques dans un environnement parallèle par itération de méthodes symplectiques

Soit $R = (A, b, c)$ une méthode symplectique d'ordre p . Par itération du point fixe σ fois de cette méthode (σ est le nombre d'étapes séquentielles), on définit une méthode de Runge-Kutta explicite \mathcal{R}_σ de tableau :

$$\begin{array}{c|cccccc} 0 & 0 & & & & & \\ c & A & 0 & & & & \\ c & 0 & A & 0 & & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & & \\ c & 0 & 0 & \cdots & A & 0 & \\ \hline 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & b^T & \end{array}$$

et d'ordre $\text{Min}(p, \sigma)$. De plus, si la fonction du problème à valeur initiale satisfait une condition de Lipschitz, on montre que l'erreur entre les solutions numériques obtenues par la méthode initiale R et par la méthode itérée \mathcal{R}_σ , est égale à $\mathcal{O}(h^{\sigma+1})$ (voir [10], section II.11). Si on choisit $\sigma = 2p$, alors la méthode \mathcal{R}_σ est d'ordre p et d'o.p.s. $2p$.

3.3 Construction des conditions de pseudo-symplecticité

3.3.1 Expression des conditions de pseudo-symplecticité

Considérons l'application bilinéaire suivante :

$$\mathcal{F}_s : \begin{cases} \mathbb{R}^s \times \mathbb{R}^s & \rightarrow \mathbb{R} \\ (u, v) & \rightarrow b^T(u.Av) + b^T(v.Au) - (b^T u)(b^T v) = u^T M v \end{cases}$$

de matrice $M = BA + A^T B - bb^T$ où $B = \text{diag}(b_1, \dots, b_s)$ et l'ensemble $\hat{T}(k)$ des couples d'arbres (t, t') non ordonnés tels que la somme de leurs ordres soit égale à un entier $k \geq 2$ donné :

$$\hat{T}(k) = \{(t, t') \in T \times T, \text{ non ordonné} \mid \rho(t) \leq k - 1, \rho(t') \leq k - 1 \text{ et } \rho(t) + \rho(t') = k\}.$$

T est l'ensemble des "rooted trees" et $\rho(t)$ est l'ordre de l'arbre t (voir par exemple [2], section 14, pages 79-104). La méthode est d'ordre de pseudo-symplecticité $2p$ peut alors s'exprimer de la façon suivante :

$$\begin{cases} b^T e = 1 \\ \forall k \in \{2, 3, \dots, 2p\}, \forall (t, t') \in \hat{T}(k), \mathcal{F}_s(\Phi(t), \Phi(t')) = 0 \end{cases}$$

où Φ est la fonction d'ordre.

3.3.2 Condition simplificatrice $\hat{D}(\mu)$

Définition 3 On définit la condition simplificatrice $\hat{D}(\mu)$ de la manière suivante :

$$\hat{D}(\mu) : \forall l \in \{1, \dots, \mu\}, \forall t \in T \text{ tel que } \rho(t) = l, \forall v \in \mathbb{R}^s, \mathcal{F}_s(\Phi(t), v) = 0,$$

Remarque 2 La condition $\hat{D}(1)$ est équivalente à la condition simplificatrice

$$D(1) : \forall v \in \mathbb{R}^s, b^T Av = b^T v - b^T(c.v).$$

Remarque 3 La condition simplificatrice usuelle $C(2)$ adaptée au cas des méthodes explicites :

$$\begin{cases} b_2 & = 0, \\ \sum_{j=1}^2 a_{ij} c_j & = \frac{1}{2} c_i^2 \quad i = 3, \dots, s, \end{cases}$$

ne semble pas appropriée pour des méthodes pseudo-symplectiques, du moins, pour des ordres peu élevés (où elle n'est pas essentielle pour réduire le nombre de conditions d'ordre).

Dans le cas d'une méthode d'ordre 3 et o.p.s. 6, si on suppose les conditions $D(1)$ et $C(2)$, s ne peut valoir 5, alors qu'avec les conditions $\widehat{D}(2)$ et $C(1)$, nous verrons que $s = 5$ est possible. Nous reprenons la numérotation des équations de pseudo-symplecticité du tableau 2. Si $s = 5$, on montre que nécessairement $b^T A^3 c = 0$, ce qui implique par $D(1)$, $b^T(c.A^3 c) = 0$. Mais ceci est incompatible avec les équations (14) et (15) donnant $b^T(c.A^3 c) = \frac{1}{144}$. Montrons que $b^T A^3 c = 0$.

Soit $(e_i)_{i=1,\dots,5}$ les vecteurs de la base canonique de \mathbb{R}^5 , si $s = 5$, on a $A^3 e_3 = A^3 e_4 = A^3 e_5 = 0$, il reste alors à montrer que $b^T A^3 e_2$ est nul. Sous l'hypothèse $C(2)$, on remarque les relations suivantes entre les équations de pseudo-symplecticité

- (8) et (10) : $(8) - \frac{1}{2}(10) = v_2 b^T(c.Ae_2)$ où v_2 est la deuxième composante du vecteur $Ac - \frac{1}{2}c^2$, ce qui implique $b^T(c.Ae_2) = 0$;
- (15) et (24) : $(15) - \frac{1}{4}(24) = \frac{1}{2}v_2 b^T(c^2.Ae_2)$ ce qui implique $b^T(c.Ae_2) = 0$;
- (14) et (17) : $(14) - \frac{1}{2}(17) = v_2 \left(\frac{1}{2}b^T(c^2.Ae_2) + b^T(c.A^2e_2) - \frac{1}{2}b^T Ae_2 \right)$ ce qui implique $b^T(c.A^2e_2)$, car $D(1)$ et $b_2 = 0$ impliquent $b^T Ae_2 = 0$.

Par $D(1)$, on en déduit $b^T(A^2e_2) = 0$ et $b^T(A^3e_2) = 0$.

En outre, la condition $C(2)$ implique que la méthode est d'ordre 4. En effet, $b^T(c.Ac)$ est égal à $\frac{1}{2}b^T c^3$, donc la condition d'ordre associée au "bushy tree" d'ordre 4 et celle dont la fonction d'ordre Φ vaut $c.Ac$, sont vérifiées et par $D(1)$, les 2 conditions d'ordre restantes le sont aussi.

3.3.3 Dénombrement des conditions de pseudo-symplecticité

On note $\#E$ le cardinal d'un ensemble E . Soit $p(k)$ le nombre de conditions de pseudo-symplecticité pour qu'une méthode soit d'ordre de pseudo-symplecticité k . D'après l'expression des conditions de pseudo-symplecticité établie à la section 3.3.1, on a :

$$p(k) = 1 + \sum_{i=2}^k \#\widehat{T}(i),$$

et le cardinal de $\widehat{T}(i)$ est donné par les formules suivantes avec $l \geq 1$:

$$\begin{aligned} \#\widehat{T}(2l) &= \sum_{j=1}^{l-1} a_j a_{2l-j} + \frac{a_l(a_l+1)}{2}, \\ \#\widehat{T}(2l+1) &= \sum_{j=1}^l a_j a_{2l+1-j}, \end{aligned}$$

où a_j est le nombre d'arbres d'ordre j . J.C. Butcher montre que les a_j satisfont la relation suivante (voir [2], section 145, pages 89-91) :

$$\sum_{j \geq 1} a_j x^{j-1} = \prod_{j \geq 1} (1 - x^j)^{-a_j}.$$

Les premières valeurs sont rappelées dans le tableau 3. Dans le tableau 4, le nombre de conditions de pseudo-symplecticité est calculé pour des ordres de pseudo-symplecticité inférieurs à 11. Introduisons la condition simplificatrice $\widehat{D}(\mu)$. Dans ce cas, le nombre de conditions de pseudo-symplecticité devient :

$$p(k, \mu) = 1 + \sum_{i=2}^k \#\widetilde{T}(i, \mu),$$

où $\widetilde{T}(i, \mu)$ est l'ensemble des couples d'arbres (t, t') de $\widehat{T}(i)$ tels que $\rho(t)$ (respectivement $\rho(t')$) vérifie $\mu + 1 \leq \rho(t) \leq i - 1$ (respectivement $\mu + 1 \leq \rho(t') \leq i - 1$). On a donc :

$$\begin{aligned} \#\widetilde{T}(2l, \mu) &= \sum_{j=1}^{l-1} \tilde{a}_j \tilde{a}_{2l-j} + \frac{\tilde{a}_l(\tilde{a}_l+1)}{2}, \\ \#\widetilde{T}(2l+1, \mu) &= \sum_{j=1}^l \tilde{a}_j \tilde{a}_{2l+1-j}, \end{aligned}$$

ordre j	nombre d'arbres d'ordre j	ordre j	nombre d'arbres d'ordre j
1	1	6	20
2	1	7	48
3	2	8	115
4	4	9	286
5	9	10	719

TAB. 3 – Nombre d'arbres pour différents ordres

k	$\#\hat{T}(k)$	$p(k)$	k	$\#\hat{T}(k)$	$p(k)$
2	1	2	7	37	65
3	1	3	8	96	161
4	3	6	9	239	400
5	6	12	10	522	922
6	16	28	11	1607	2529

TAB. 4 – Nombre de conditions de pseudo-symplecticité pour différents ordres

où \tilde{a}_j est défini par :

$$\tilde{a}_j = \begin{cases} 0 & \text{si } j \leq \mu \\ a_j & \text{sinon.} \end{cases}$$

Les premières valeurs sont calculées dans le tableau 5 pour différentes valeurs de μ .

k	$\#\tilde{T}(k, 1)$	$p(k, 1)$	k	$\#\tilde{T}(k, 1)$	$p(k, 1)$
4	1	2	8	48	76
5	2	4	9	124	200
6	7	11	10	336	536
7	17	28	11	888	1424
k	$\#\tilde{T}(k, 2)$	$p(k, 2)$	k	$\#\tilde{T}(k, 2)$	$p(k, 2)$
6	3	4	9	76	116
7	8	12	10	221	337
8	28	40	11	692	939
k	$\#\tilde{T}(k, 3)$	$p(k, 3)$	k	$\#\tilde{T}(k, 3)$	$p(k, 3)$
8	10	11	10	125	173
9	36	48	11	372	545
k	$\#\tilde{T}(k, 4)$	$p(k, 4)$	k	$\#\tilde{T}(k, 4)$	$p(k, 4)$
10	45	46	11	180	226

TAB. 5 – Nombre de conditions de pseudo-symplecticité pour différents ordres avec la condition $\hat{D}(\mu)$

Remarque 4 Si la méthode est d'ordre p , alors les conditions de pseudo-symplecticité associées aux couples d'arbres de $\hat{T}(k)$ pour $k \leq p$ sont identiquement satisfaites. Le nombre de conditions de pseudo-symplecticité restantes est alors :

$$p_r(2p) = \sum_{i=p+1}^{2p} \#\hat{T}(i),$$

et si on suppose de plus la condition simplificatrice $\widehat{D}(\mu)$:

$$p_r(2p, \mu) = \sum_{i=p+1}^{2p} \#\tilde{T}(i, \mu).$$

Le nombre de ces conditions a été calculé pour $p \leq 5$ et pour différentes valeurs de μ dans le tableau 6.

p	$p_r(2p)$	$p_r(2p, 1)$	$p_r(2p, 2)$	$p_r(2p, 3)$	$p_r(2p, 4)$
2	4	1	0	0	0
3	24	10	3	0	0
4	155	74	39	10	0
5	906	532	336	171	46

TAB. 6 – Nombre de conditions de pseudo-symplecticité restantes pour une méthode d'ordre p

3.4 Construction de méthodes de Runge-Kutta pseudo-symplectiques

3.4.1 Ordre de pseudo-symplecticité 4 et ordre 2

Toute méthode d'o.p.s 4, d'ordre 2 et à 3 étapes séquentielles (2 est impossible d'après la proposition 2) est de la forme suivante :

$$\begin{array}{c|ccc} 0 & 0 & 0 & 0 \\ c_2 & c_2 & 0 & 0 \\ 1 & \frac{4c_2(1-c_2)-1}{c_2(3-4c_2)} & \frac{1-c_2}{c_2(3-4c_2)} & 0 \\ \hline & \frac{4c_2-1}{8c_2} & \frac{1}{8c_2(1-c_2)} & \frac{3-4c_2}{8(1-c_2)} \end{array}$$

La méthode ne peut être d'ordre 3, car d'après l'équation (4), $b^T A c$ vaut $\frac{1}{8}$ et non $\frac{1}{6}$.

3.4.2 Ordre de pseudo-symplecticité 6 et ordre 3

D'après la Proposition 2, le nombre d'étapes internes s vaut au moins 5. On prend $s = 5$ et on suppose que les conditions $\widehat{D}(2)$ et $C(1)$ sont vraies :

$$\begin{aligned} C(1) : & \quad A e = c, \\ \widehat{D}(2) : & \quad \begin{cases} \forall v \in \mathbb{R}^5, b^T A v = b^T v - b^T(c \cdot v), \\ \text{et } \forall v \in \mathbb{R}^5, b^T(c \cdot A v) + b^T(v \cdot A c) = (b^T c)(b^T v). \end{cases} \end{aligned}$$

Lorsque l'on prend pour v , les différents vecteurs de la base canonique, ces conditions simplificatrices donnent un système linéaire sur les coefficients de la matrice A en fonction des coefficients des vecteurs b et c :

$$\left\{ \begin{array}{l} a_{21} = c_2, \\ a_{31} + a_{32} = c_3, \\ a_{41} + a_{42} + a_{43} = c_4, \\ a_{51} + a_{52} + a_{53} + a_{54} = c_5, \\ a_{54}c_4 + a_{53}c_3 + a_{52}c_2 = c_5 - \frac{1}{2}, \\ a_{43}c_3 + a_{42}c_2 = c_4 - \frac{1}{2}, \\ a_{32}c_2 + \frac{a_{43}b_4(c_4-1)}{b_3} = c_3 - \frac{1}{2}, \\ a_{32}b_3(c_3 - 1) + a_{42}b_4(c_4 - 1) = b_2 \left(c_2 - \frac{1}{2} \right), \\ b_5 a_{54} = b_4(1 - c_4), \\ b_5 a_{53} + b_4 a_{43} = b_3(1 - c_3), \\ b_3 a_{32} + b_4 a_{42} + b_5 a_{52} = b_2(1 - c_2) \end{array} \right.$$

et $\hat{D}(1) = D(1)$ implique que nécessairement $c_s = 1$. Ce système linéaire à 10 inconnues et 11 équations donne une “contrainte” (c) sur les vecteurs b et c . On choisit pour (c) la dernière équation du système linéaire. Il reste alors les conditions d’ordre suivantes :

$$\begin{aligned} b^T e &= 1, \\ b^T c^2 &= \frac{1}{3}, \end{aligned}$$

les conditions de pseudo-symplecticité suivantes :

$$b^T (Ac.A^2c) = \frac{1}{2} (b^T Ac)^2, \quad (15)$$

$$b^T (Ac.Ac^2) + b^T (c^2.A^2c) = (b^T Ac)(b^T c^2), \quad (18)$$

$$b^T (c^2.Ac^2) = \frac{1}{2} (b^T c^2)^2 \quad (24)$$

et l’équation (c) pour déterminer le vecteur b et le vecteur c . On dispose donc d’un paramètre libre. Donnons un exemple numérique de méthode définie par le tableau :

c_1	0	0	0	0	0
c_2	a_{21}	0	0	0	0
c_3	a_{31}	a_{32}	0	0	0
c_4	a_{41}	a_{42}	a_{43}	0	0
c_5	a_{51}	a_{52}	a_{53}	a_{54}	0
	b_1	b_2	b_3	b_4	b_5

Exemple 5 On choisit $c_4 = c_3$.

$$\begin{aligned} a_{21} &= 0.13953887556597155387, & a_{31} &= -0.48161245930439632799, \\ a_{32} &= 1.0900044286441097006, & a_{41} &= -0.97733536856355399521, \\ a_{42} &= 1.8264821539523275638, & a_{43} &= -0.24075481604906019254, \\ a_{51} &= 0.28409281537268698063, & a_{52} &= -0.13745844686958673805, \\ a_{53} &= 2.4267107745478589548, & a_{54} &= -1.5733451430509592014, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} b^T &= (0.042949555043210705593, 0.27613016437500337975, 1.0446546374007352506 \\ &\quad -0.48426987496747713453, 0.12053551814852779785), \\ c^T &= (0, 0.13953887556597155387, 0.60839196933971337288, 0.60839196933971337288, 1). \end{aligned}$$

Remarque 5 On peut ajuster le paramètre libre de sorte que la méthode soit d’ordre 4. La méthode obtenue est alors la suivante :

$$\begin{aligned} a_{21} &= 0.34665481625396325020, & a_{31} &= -0.5799245018435525641, \\ a_{32} &= 1.7383279379430207566, & a_{41} &= 1.0203232223681479024, \\ a_{42} &= -0.89741366563915668275, & a_{43} &= -0.41664294367723554157, \\ a_{51} &= -0.24749620349243805505, & a_{52} &= 1.2545271357867273432, \\ a_{53} &= 0.043416643460438113893, & a_{54} &= -0.050447575754727402072, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} b^T &= (0.14691179995133323534, 0.53269769418503692674, -0.20651218757126851422 \\ &\quad -0.021379608214872185412, 0.54828230164977053755), \\ c^T &= (0, 0.34665481625396325020, 1.1584034360994681925, -0.29373338694824432041, 1). \end{aligned}$$

Suite à différents tests numériques, il semble préférable d’ajuster le paramètre de sorte que les conditions d’ordre jusqu’à l’ordre 6 soient minimales.

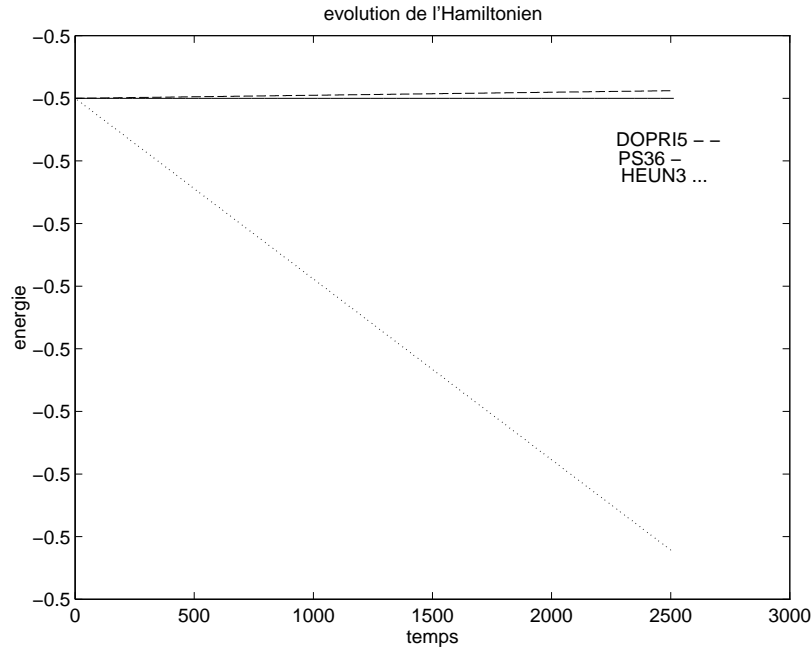


FIG. 1 – Évolution de l'Hamiltonien - problème de Kepler

4 Expériences Numériques

4.1 Le problème de Kepler

Soit un point matériel attiré vers le point origine avec une force centrale inversement proportionnelle à la distance le séparant de l'origine. En considérant les équations adimensionnelles et en utilisant les coordonnées cartésiennes, l'Hamiltonien est défini par :

$$H = T + V, T = \frac{1}{2} (p_1^2 + p_2^2), V = -\frac{1}{\sqrt{q_1^2 + q_2^2}},$$

où T et V représente l'énergie respectivement cinétique et potentielle, et les équations du mouvement sont :

$$p'_i = -\frac{q_i}{(q_1^2 + q_2^2)^{\frac{3}{2}}}, q'_i = p_i, i = 1, 2.$$

L'étude du problème de Kepler est détaillée par exemple dans [13] et [1]. On montre que la solution est périodique de période

$$\tau = \frac{2\pi}{\sqrt[3]{2|H|}}.$$

On prend pour conditions initiales $(p_1(0), p_2(0), q_1(0), q_2(0)) = (1, 0, 0, 1)$. La solution exacte est alors $(\cos t, -\sin t, \sin t, \cos t)$ et la trajectoire est un cercle. On compare l'évolution de l'Hamiltonien et l'évolution de l'erreur sur la composante p_1 de la position pour la méthode pseudo-symplectique d'o.p.s. 6 et d'ordre 3 (PS36) de l'exemple 5, pour la méthode de Dormand et Prince d'ordre 5 (DOPRI5) et pour la méthode de Heun d'ordre 3 (HEUN3). On choisit le pas $h = \frac{2\pi}{256}$ et on intègre le problème sur l'intervalle $[0, 256 \times 400]$ (voir les figures 1 et 2). On observe bien la croissance linéaire de l'erreur pour la méthode pseudo-symplectique et la conservation du Hamiltonien.

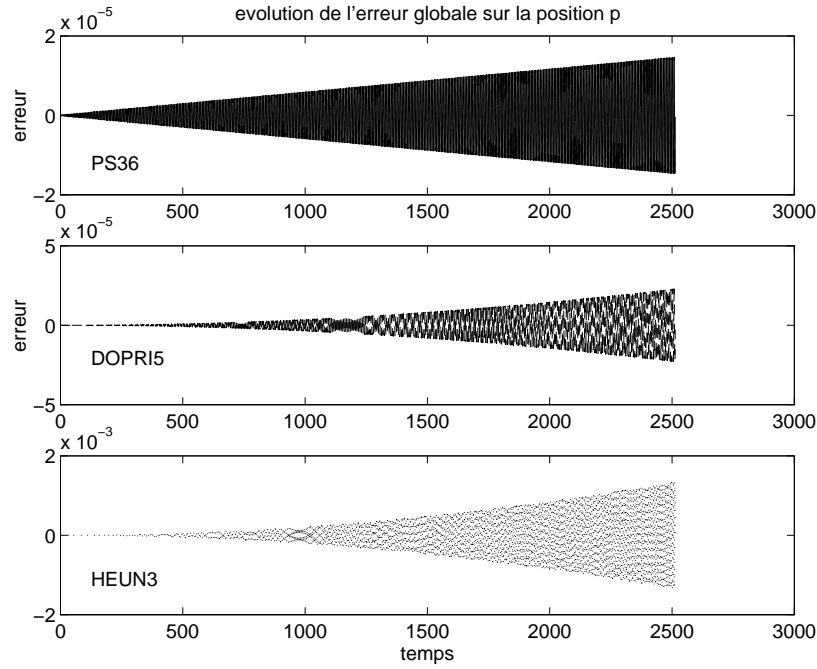


FIG. 2 – Évolution de l'erreur sur la position p - problème de Kepler

4.2 Problème test non séparable et non périodique

On considère le problème monodimensionnel Hamiltonien non séparable et non périodique de l'exemple 1 de l'introduction :

$$p' = -2pq \text{ et } q' = q^2, \quad (P)$$

avec les conditions initiales $(p(2), q(2)) = (1, -1)$. La solution exacte est alors $\left((1-t)^2, \frac{1}{1-t}\right)$. On compare de nouveau l'évolution de l'hamiltonien et de l'erreur sur p pour les méthodes PS36, DOPRI5 et HEUN3 en prenant un pas $h = \frac{1}{2}$ et en intégrant sur l'intervalle $[2, 100]$ (voir les figures 3 et 4). L'erreur ne croît plus linéairement mais l'Hamiltonien est préservé. Ce problème est particulier, avec une forte erreur au départ. Pour des pas plus petits, par exemple $h = \frac{1}{4}$, DOPRI5 se comporte mieux que PS36, qui elle même se comporte mieux que HEUN3.

4.3 Problème de la perle

On considère le problème monodimensionnel de l'exemple 2 de l'introduction :

$$p' = \frac{p^2 U''(q) U'(q)}{(1 + U'(q)^2)^2} - U'(q) \text{ et } q' = \frac{p}{(1 + U'(q)^2)}.$$

avec les conditions initiales $(p(0), q(0)) = (0.49, 0)$. On compare l'évolution de l'Hamiltonien et de la trajectoire pour les trois méthodes PS36, DOPRI5 et HEUN3 en prenant pour pas $h = 1/6$ et en intégrant sur l'intervalle $[0, 1000]$ (voir les figures 5 et 6). L'hamiltonien est à nouveau bien préservé par la méthode pseudo-symplectique.

4.4 Problème du pendule modifié

On considère le problème monodimensionnel de l'exemple 3 de l'introduction :

$$p' = - \left(1 - \frac{p}{6}\right) \sin(q) \text{ et } q' = p + \frac{1}{6} \cos(q).$$

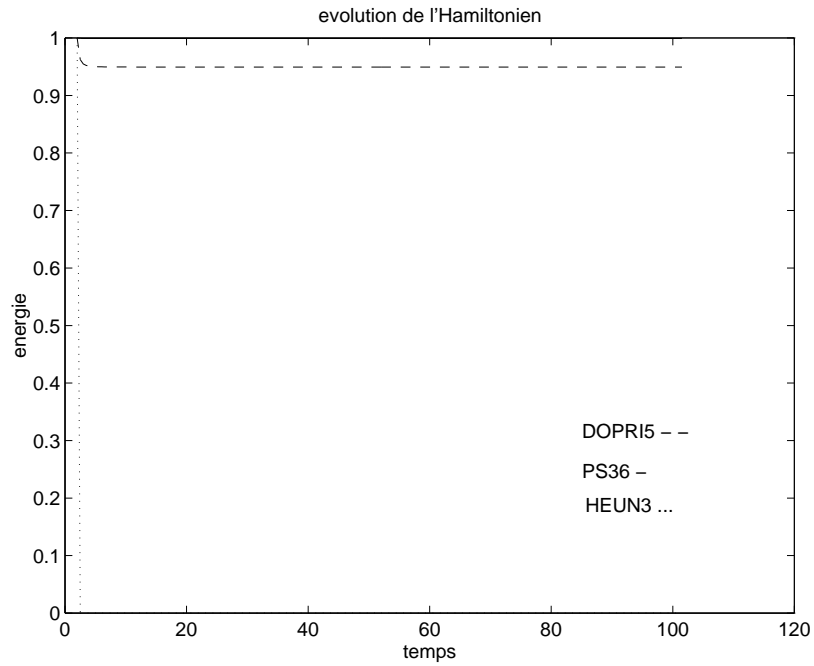


FIG. 3 – Évolution de l'Hamiltonien - problème (P)

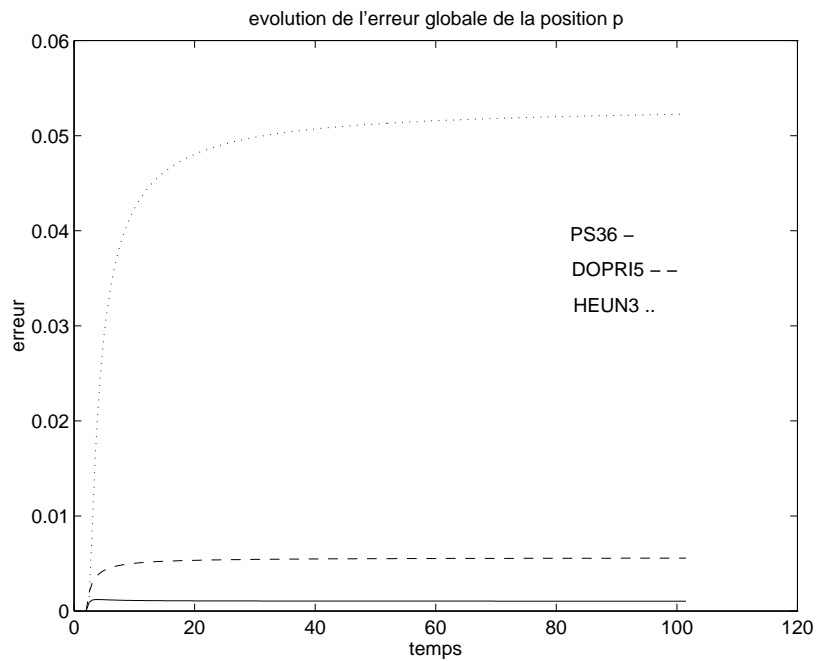


FIG. 4 – Évolution de l'erreur sur p - problème (P)

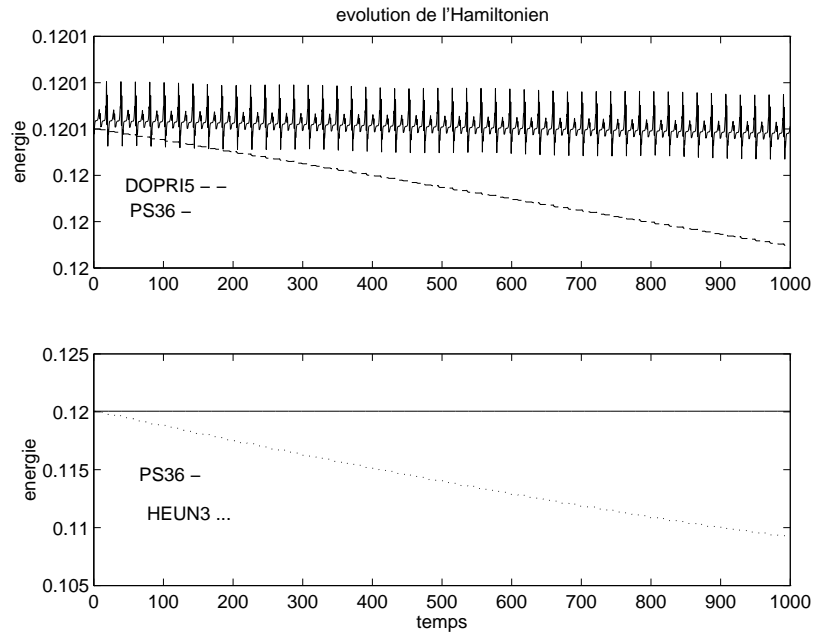


FIG. 5 – Évolution de l'Hamiltonien - problème de la perle

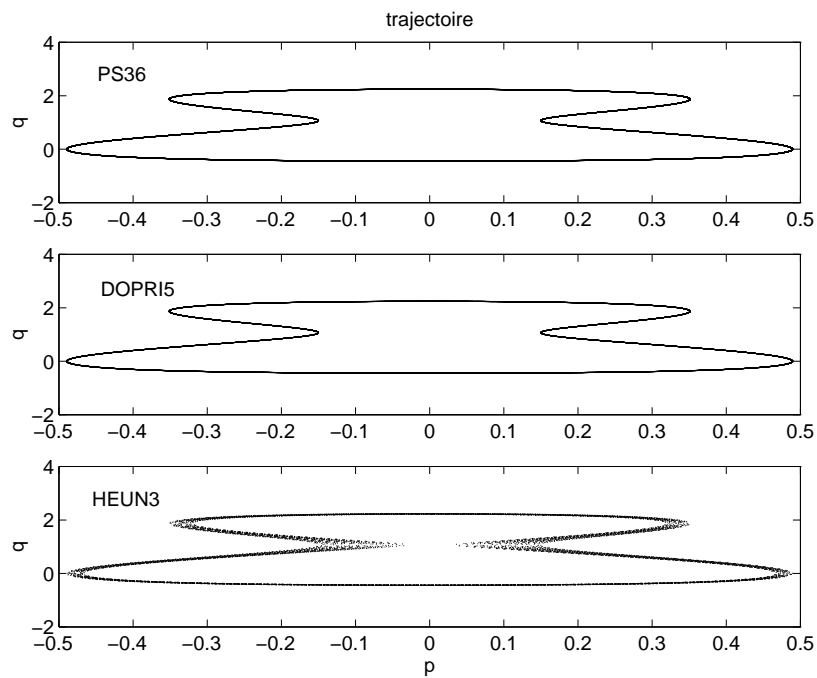


FIG. 6 – Trajectoire - problème de la perle

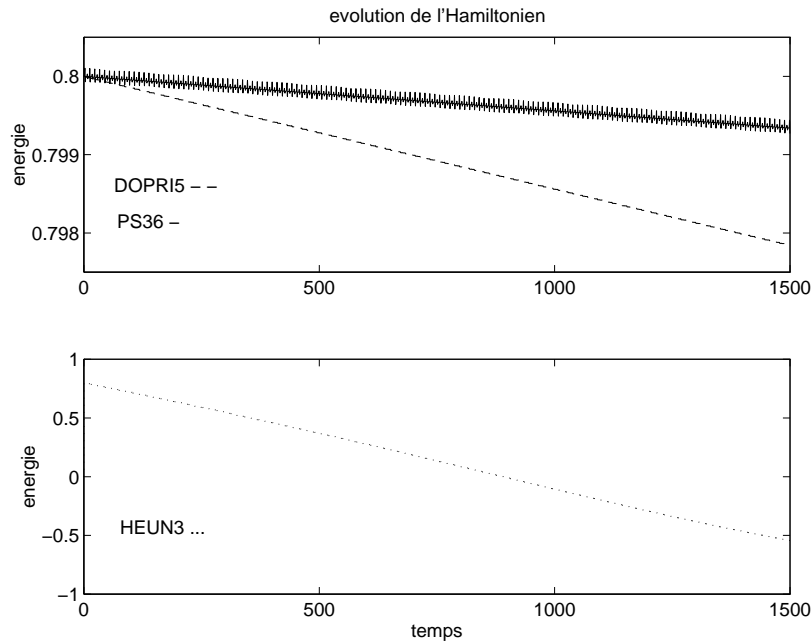


FIG. 7 – *Évolution de l'Hamiltonien - problème du pendule modifié*

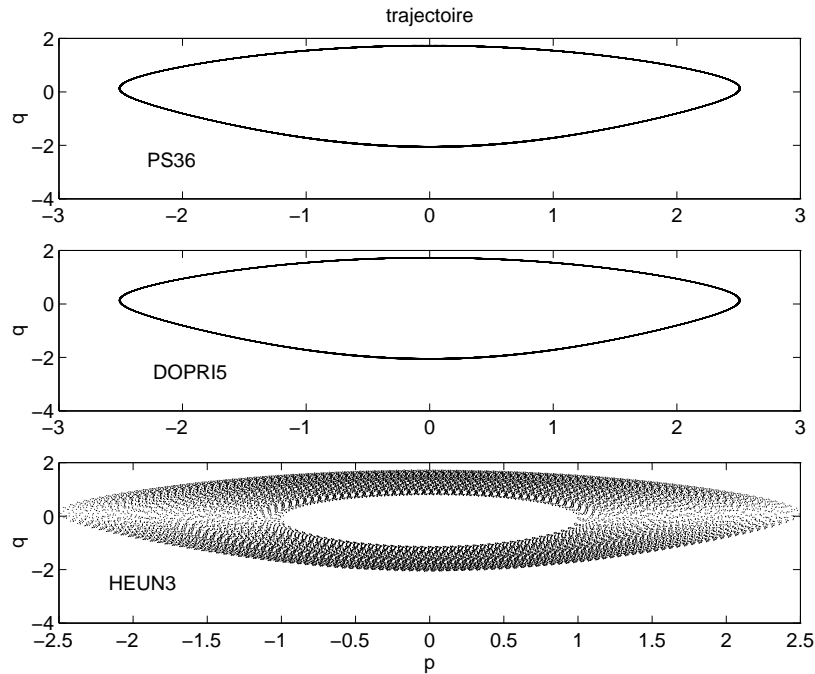


FIG. 8 – *Trajectoire - problème du pendule modifié*

avec les conditions initiales $(p(0), q(0)) = (0, \arccos(-0.8))$. On compare l'évolution de l'Hamiltonien et de la trajectoire pour les trois méthodes PS36, DOPRI5 et HEUN3 en prenant pour pas $h = 0.3$ et en intégrant sur l'intervalle $[0, 1500]$ (voir les figures 7 et 8). L'hamiltonien est aussi bien préservé par la méthode pseudo-symplectique.

5 Conclusion et remerciements

Sur les tests numériques effectués, la méthode pseudo-symplectique se comporte comme attendu : l'erreur croît linéairement pour des problèmes périodiques dont la période ne dépend que de l'Hamiltonien et l'Hamiltonien est préservé. Le principal problème reste la construction de telles méthodes pour des ordres élevés. L'introduction de la condition simplificatrice $\hat{D}(\mu)$ réduit significativement le nombre de conditions, mais pour des ordres supérieurs à quatre, le système à résoudre reste complexe.

Je remercie P. Chartier qui a inspiré ces premiers travaux et m'a conseillé au cours de leur réalisation.

6 Annexe : quelques perspectives

6.1 Pseudo-symplecticité effective

Par analogie avec l'ordre effectif défini par J.C. Butcher [2], on définit la pseudo-symplecticité effective. Ceci peut par exemple permettre de diminuer le nombre de conditions que doit vérifier la méthode tout en conservant les propriétés attendues de la méthode. Elle peut évidemment servir aussi à augmenter l'ordre. Ainsi, pour certains problèmes, il est peut être préférable d'utiliser une méthode d'ordre p et d'ordre de pseudo-symplecticité $2p - 1$ (ou $2p - 2$, etc.), moins coûteuse qu'une méthode d'ordre p et d'ordre de pseudo-symplecticité $2p$.

Définition 4 Une méthode de Runge-Kutta a est dite d'ordre de pseudo-symplecticité effective q (en abrégé, o.p.s.e.) s'il existe une méthode de Runge-Kutta d telle que la méthode $R = dad^{-1}$ soit o.p.s. q .

Remarque 6 Notons $d = (\tilde{A}, \tilde{b}, \tilde{c})$ et $a = (A, b, c)$, alors d^{-1} est définie par $d^{-1} = (\tilde{A} - \tilde{e}\tilde{b}^T, -\tilde{b}, \tilde{c} - \tilde{e})$ et la méthode composée $R = (\mathcal{A}, \mathcal{B}, \mathcal{C})$ est définie par le tableau de Butcher suivant

$$\begin{array}{c|ccc} \tilde{c} & \tilde{A} & 0 & 0 \\ c + e & e\tilde{b}^T & A & 0 \\ \tilde{c} + \tilde{e} & \tilde{e}\tilde{b}^T & \tilde{e}b^T & \tilde{A} - \tilde{e}\tilde{b}^T \\ \hline & \tilde{b}^T & b^T & -b^T \end{array}$$

Les conditions de pseudo-symplecticité de la méthode $R = dad^{-1}$, définie précédemment par $(\mathcal{A}, \mathcal{B}, \mathcal{C})$ se traduisent par des équations dites de compatibilité sur la méthode $a = (A, b, c)$ et des équations dites de définition sur la méthode $d = (\tilde{A}, \tilde{b}, \tilde{c})$. Nous supposons la méthode R d'ordre 1 (i.e. $\mathcal{B}^T \mathcal{E} = 1$), satisfaisant les conditions simplificatrices $D(1)$ et $C(1)$: $\mathcal{A}\mathcal{E} = \mathcal{C}$. Ces hypothèses sur R reviennent à imposer les mêmes hypothèses sur les méthodes d et a , et impliquent que ces méthodes sont au moins

d'ordre deux. Les conditions de pseudo-symplecticité énoncées jusqu'à l'ordre 6 à la section 2.2.1 (voir le tableau 2) se traduisent alors par

– les équations de compatibilités suivantes :

$$\begin{aligned} b^T(c.Ac) &= \frac{1}{2}(b^Tc)^2 \end{aligned} \quad (5)_R$$

$$\begin{aligned} 2 \left\{ b^T(c.A^2c) + b^T(Ac)^2 - \frac{1}{2}(b^TAc) \right\} &= b^T(c.Ac^2) + b^T(c^2.Ac) - \frac{1}{2}(b^Tc^2) \end{aligned} \quad (10)_R$$

$$\begin{aligned} b^T(c.A^3c) + b^T(Ac.A^2c) - \frac{1}{2}(b^TA^2c) &= b^T(Ac.A^2c) - \frac{1}{2}(b^TAc)^2 \end{aligned} \quad (15)_R$$

$$\begin{aligned} b^T(c.A^3c) + b^T(Ac.A^2c) - \frac{1}{2}(b^TA^2c) &= \frac{1}{2} \left\{ b^T(c.A^2c^2) + b^T(Ac.Ac^2) - \frac{1}{2}(b^TAc^2) \right\} \end{aligned} \quad (17)_R$$

$$\begin{aligned} b^T(Ac.Ac^2) + b^T(c^2.A^2c) - (b^TAc)(b^Tc^2) &= \left\{ b^T(c.A^3c) + b^T(Ac.A^2c) - \frac{1}{2}(b^TA^2c) \right\} \\ &+ \left\{ b^T(c.A(c.Ac)) + b^T(c.(Ac)^2) - \frac{1}{2}(b^T(c.Ac)) \right\} \end{aligned} \quad (21)_R$$

$$\begin{aligned} 2 \left\{ b^T(Ac.Ac^2) + b^T(c^2.A^2c) - (b^TAc)(b^Tc^2) \right\} &= 4 \left\{ b^T(c.A^3c) + b^T(Ac.A^2c) - \frac{1}{2}(b^TA^2c) \right\} + \left\{ b^T(c^2.Ac^2) - \frac{1}{2}(b^Tc^2)^2 \right\} \end{aligned} \quad (24)_R$$

$$\begin{aligned} b^T(c.Ac^3) + b^T(c^3.Ac) - \frac{1}{2}(b^Tc^3) &= \frac{3}{2} \left\{ b^T(c^2.Ac^2) - \frac{1}{2}(b^Tc^2)^2 \right\} \end{aligned} \quad (26)_R$$

On remarque qu'il s'agit de combinaisons linéaires des équations de pseudo-symplecticité relatives à la méthode a .

– et les équations de définitions suivantes :

$$\begin{aligned} \tilde{b}^T(\tilde{c}.\tilde{A}\tilde{c}) &= b^T(c.Ac) + \frac{1}{2} \left\{ b^T(c.A^2c) + b^T(Ac)^2 - \frac{1}{2}(b^TAc) \right\} \end{aligned} \quad (8)_R$$

$$\begin{aligned} \tilde{b}^T(\tilde{c}.\tilde{A}^2\tilde{c}) + \tilde{b}^T(\tilde{A}\tilde{c})^2 - (\tilde{b}^T\tilde{c})(\tilde{b}^T\tilde{A}\tilde{c}) &= \frac{1}{2} \left\{ b^T(c.A^2c) + b^T(Ac)^2 - \frac{1}{2}(b^TAc) \right\} + \left\{ b^T(c.A^3c) + b^T(Ac.A^2c) - \frac{1}{2}(b^TA^2c) \right\} \end{aligned} \quad (14)_R$$

$$\begin{aligned} \tilde{b}^T(\tilde{c}.\tilde{A}\tilde{c}^2) + \tilde{b}^T(\tilde{c}^2.\tilde{A}\tilde{c}) - (\tilde{b}^T\tilde{c}^2)(\tilde{b}^T\tilde{c}) &= \left\{ b^T(Ac.Ac^2) + b^T(c^2.A^2c) - (b^TAc)(b^Tc^2) \right\} + \left\{ b^T(c.Ac^2) + b^T(c^2.Ac) - \frac{1}{2}(b^Tc^2) \right\} \\ - 2 \left\{ b^T(c.A^3c) + b^T(Ac.A^2c) - \frac{1}{2}(b^TA^2c) \right\} &- \left\{ b^T(c.A^2c) + b^T(Ac)^2 - \frac{1}{2}(b^TAc) \right\} \end{aligned} \quad (18)_R$$

Elles ne sont utiles à définir que si l'on cherche d explicitement, sinon on est assuré de l'existence d'une méthode d dont les fonctions d'ordre Φ satisfont les relations dites de définition par le théorème 306A [2] de J.C. Butcher. Celui-ci est fondée sur le théorème de Stone-Weierstrass et assure, pour toute fonction θ à valeurs réelles définies sur l'ensemble des arbres, l'existence d'une méthode de Runge-Kutta dont les fonctions d'ordre vérifient pour chaque arbre t , $b^T\Phi(t) = \theta(t)$.

Remarque 7 *Étant donné que la fonction d'ordre associée aux "tall trees"⁴ est la même pour la méthode composée dad^{-1} et la méthode a , les bornes inférieures établies sur le nombre d'étapes séquentielles d'une méthode symplectique à la Proposition 2, sont valables pour la méthode a .*

Pour la pseudo-symplecticité effective, la génération des conditions de pseudo-symplecticité est plus complexe. Il est peut être possible d'utiliser les travaux d'E. Hairer, S.P. Nørsett et G. Wanner sur la composition des B-séries ([10]) et ceux de J.C. Butcher et J.M. Sanz-Serna ([3]).

4. Les "tall trees" sont des arbres dont chaque nœud ne possède qu'un seul fils.

6.2 Méthodes de Runge-Kutta partitionnées

On peut aussi introduire la notion de pseudo-symplecticité pour les méthodes de Runge-Kutta partitionnées. Le théorème 2.1 de l'article [7] de M.P. Calvo et J.M. Sanz-Serna fournit des conditions nécessaires et suffisantes à la pseudo-symplecticité des méthodes de Runge-Kutta, il en est de même du théorème 5 de l'article [9] de E. Hairer, pour les méthodes de Runge-Kutta partitionnées.

Références

- [1] V.I. Arnold. *Méthodes mathématiques pour la mécanique classique*. Éditions MIR, 1967.
- [2] J.C. Butcher. *The Numerical Analysis of Ordinary Differential Equations*. A Wiley-Interscience publication, 1987.
- [3] J.C. Butcher and J.M. Sanz-Serna. The number of conditions for a Runge-Kutta method to have effective order p . Applied Mathematics and Computation reports, Universidad de Valladolid, 1995.
- [4] M.P. Calvo and J.M. Sanz-Serna. Order conditions for canonical Runge-Kutta-Nyström methods. *BIT*, (32):131–142, 1992.
- [5] M.P. Calvo and J.M. Sanz-Serna. The development of variable-step symplectic integrators with application to the two-body problem. *SIAM Journal of Scientific Computing*, 14(4):936–952, July 1993.
- [6] M.P. Calvo and J.M. Sanz-Serna. High-order symplectic Runge-Kutta-Nyström methods. *SIAM Journal of Scientific Computing*, 14(5):1237–1252, September 1993.
- [7] M.P. Calvo and J.M. Sanz-Serna. Canonical B-series. *Numerische Mathematik*, 67:161–175, 1994. Springer-Verlag.
- [8] P. Chartier. Communication privée.
- [9] E. Hairer. Backward analysis of numerical integrators and symplectic methods. *Annals of Numerical Mathematics*, 1:107–132, 1994.
- [10] E. Hairer, S.P. Nørsett, and G. Wanner. *Solving Ordinary Differential Equations*, volume 1. Springer-Verlag, seconde édition, 1991.
- [11] E. Hairer and G. Wanner. *Stiff Problems and Differential Algebraic Problems*, volume 2. Springer-Verlag, seconde édition, 1991.
- [12] J.M. Sanz-Serna and M.P. Calvo. Symplectic numerical methods for Hamiltonian problems. *International Journal of Modern Physics*, 4(2):385–392, 1993.
- [13] J.M. Sanz-Serna and M.P. Calvo. *Numerical Hamiltonian Problems*. Number 7 in Applied Mathematics and Mathematical Computation. Chapman and Hall, 1994.



Unité de recherche INRIA Lorraine, Technopôle de Nancy-Brabois, Campus scientifique,
615 rue du Jardin Botanique, BP 101, 54600 VILLERS LÈS NANCY
Unité de recherche INRIA Rennes, Irisa, Campus universitaire de Beaulieu, 35042 RENNES Cedex
Unité de recherche INRIA Rhône-Alpes, 655 avenue de l'Europe, 38330 MONTBONNOT ST MARTIN
Unité de recherche INRIA Rocquencourt, Domaine de Voluceau, Rocquencourt, BP 105, 78153 LE CHESNAY Cedex
Unité de recherche INRIA Sophia-Antipolis, 2004 route des Lucioles, BP 93, 06902 SOPHIA-ANTIPOLIS Cedex

Éditeur
INRIA, Domaine de Voluceau, Rocquencourt, BP 105, 78153 LE CHESNAY Cedex (France)
ISSN 0249-6399