Construction d'intégrateurs symplectiques pour des mouvements kepleriens

Pierre-Vincent Koseleff
Aleph et Géode
Centre de Mathématiques
École polytechnique

26 avril 1993

[résumé par Stéphane Gaubert]

1. Introduction

On s'intéresse à l'intégration numérique du système hamiltonien:

$$(q,p) \in \mathbb{R}^{2n}, \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}, \qquad \dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} \tag{1}$$

avec $H = H(p,q,t)$. Dans le cas où H ne dépend pas du temps, l'énergie (hamiltonien H) est constante au cours du mouvement, et le flot hamiltonien conserve la *forme symplectique*, c'est-à-dire que l'application $S_H(\tau)$ qui envoie la position (q,p) à $t=0$ sur (q',p') à $t=\tau$ satisfait

$$dp \wedge dq = dp' \wedge dq' \ .$$

Si l'on intègre naïvement le système (1), on perd ces propriétés. Considérons par exemple la méthode d'Euler sur un pas de temps τ, soit

$$q' = q + \tau \frac{\partial H}{\partial p}, \qquad p' = p - \tau \frac{\partial H}{\partial q} \tag{2}$$

Pour l'oscillateur harmonique de dimension 1, $H = \frac{1}{2}(p^2+q^2)$, l'énergie est multipliée par $(1+\tau^2)$ à chaque pas de l'intégration (2), i.e.

$${p'}^2 + {q'}^2 = (1+\tau^2)(p^2+q^2)$$

et de même, la forme symplectique $dp \wedge dq$ (en l'occurrence l'aire infinitésimale dans l'espace des phases $\mathbb{R}^2$) est dilatée d'un facteur $1+\tau^2$. Cette non conservation d'invariants physiques par l'intégrateur devient d'autant plus sensible que l'on intègre sur un grand nombre de pas de temps (par exemple en mécanique céleste). Cela motive la recherche de schémas numériques d'intégration préservant soit l'hamiltonien, soit la forme symplectique. Ce sont ces derniers intégrateurs (dits *symplectiques*) que nous étudions ici.

2. Programme

Considérons le cas d'un hamiltonien du type énergie cinétique + énergie potentielle:

$$H = T(p) + V(q) \ . \tag{3}$$

La remarque essentielle est que la méthode d'Euler donne l'expression exacte des flots hamiltoniens S_T et S_V associés à T et à V, soient

$$S_T(\tau): \qquad q' = q + \tau \frac{\partial T}{\partial p}, \quad p' = p \tag{4}$$

$$S_V(\tau): \quad p' = p - \tau\frac{\partial V}{\partial q}, \quad q' = q \ . \tag{5}$$

Il est donc naturel de chercher un intégrateur pour le système d'hamiltonien H sous la forme

$$S^{(n)}(\tau) = S_T(c_1\tau)S_V(d_1\tau)\cdots S_T(c_n\tau)S_V(d_n\tau) \tag{6}$$

où les c_i, d_i sont des constantes choisies de sorte que $S^{(n)}(\tau)$ coïncide avec le flot hamiltonien $S_H(\tau)$ jusqu'à un ordre k convenable, i.e. $S^{(n)}(\tau) = S_H(\tau) + o(\tau^k)$. Le schéma (6) s'implémentera alors aisément via (4) et (5). Il sera par construction symplectique comme composé de flots hamiltoniens. La détermination des c_i, d_i conduit à des problèmes de calcul formel que nous considérons maintenant.

3. Méthodes de Lie

Introduisons les crochets de Poisson

$$\{f, g\} \stackrel{def}{=} f_q g_p - f_p g_q = \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial f}{\partial q_i}\frac{\partial g}{\partial p_i} - \frac{\partial f}{\partial p_i}\frac{\partial g}{\partial q_i}$$

qui munissent les fonctions lisses sur l'espace des phases (i.e. $\mathbb{R}^{2n}$) d'une structure d'algèbre de Lie. En posant $z = (q, p) \in \mathbb{R}^{2n}$, les équations d'Hamilton (1) se réécrivent

$$\dot{z}_i = \{z_i, H\} \tag{7}$$

soit en introduisant la dérivation de Lie L_H:

$$L_H f \stackrel{def}{=} \{H, f\}$$

$$\dot{z}_i = -L_H z_i \ .$$

Dans le cas où H ne dépend pas du temps, on en déduit l'expression formelle

$$z(t) = \exp(-tL_H)z(0) \ .$$

Considérons à nouveau un Hamiltonien de type $T(p) + V(q)$. On a $L_H = L_T + L_V$. En posant $A \stackrel{def}{=} L_T$, $B \stackrel{def}{=} L_V$, la détermination d'un intégrateur symplectique de la forme (6) se ramène à satisfaire l'identité suivante entre séries formelles

$$\exp(-\tau(A+B)) = \exp(-c_1\tau A)\exp(-d_1\tau B)\cdots\exp(-c_n\tau A)\exp(-d_n\tau B) + o(\tau^k) \ . \tag{8}$$

Un telle identité rappelle la formule de Campbell-Haussdorf (qui affirme que $\ln(\exp(A)\exp(B))$ est une somme de monômes de Lie en A et B), en particulier les premiers termes de cette formule donnent

$$\exp(-\tau A)\exp(-\tau B) = \exp(-\tau(A+B) + \frac{\tau^2}{2}[A,B] + \cdots) = \exp(-\tau(A+B)) + o(\tau) \tag{9}$$

d'où il résulte immédiatement que $S_T(\tau)S_V(\tau) = \exp(-\tau A)\exp(-\tau B)$ est un intégrateur symplectique à l'ordre 1. Plus généralement, on peut obtenir les équations algébriques vérifiées par les c_i, d_i par l'une des trois méthodes suivantes:

Méthode directe. On développe les exponentielles et l'on identifie les termes de part et d'autre de (8).

Méthode de la fonction invariante. Par application répétée de la formule de Campbell-Haussdorf, on trouve une série formelle de Lie K en les indéterminées T et V (à coefficients dans $\mathbb{Q}[\tau, c_i, d_i]$) telle que

(10) $$S_T(c_1\tau)S_V(d_1\tau)\cdots S_T(c_n\tau)S_V(d_n\tau) = \exp(-\tau L_{K(\tau)}) \ .$$

Il reste à choisir les c_i, d_i pour que $K(\tau) = H + o(\tau^{k-1})$. On peut voir $K(\tau)$ comme l'Hamiltonien d'un système ayant pour opérateur d'évolution en temps τ l'intégrateur (6). En particulier, l'intégrateur (6) préserve l'hamiltonien $K(\tau)$ (i.e. $K(\tau, q', p') = K(\tau, q, p)$) proche à $o(\tau^{k-1})$ près de l'énergie du système, d'où le nom de fonction invariante.

Méthode de l'hamiltonien perturbé. Soit $S_u(t)$ une transformation symplectique vérifiant

$$\frac{\partial S_u}{\partial t} = -S_u L_u, \qquad S_u(0) = \mathrm{Id}$$

(c'est l'opérateur d'évolution associé à l'hamiltonien u, qui diffère de $\exp(-tL_u)$ lorsque u dépend du temps, S_u est aussi connu classiquement comme la "transformation de Lie" T_w associée à $w = \int u dt$ [2]). Soit S_v une autre transformation du même type. Il vient

$$\frac{\partial S_u S_v}{\partial t} = -S_u S_v L_{S_v^{-1}u+v} \ ,$$

donc les transformations symplectiques de type S_u sont stables par composition, avec la loi

(11) $$S_u S_v = S_{S_v^{-1}u+v} \ .$$

A partir de là, on obtient $W = W(\tau)$ tel que

(12) $$S_T(c_1\tau)S_V(d_1\tau)\cdots S_T(c_n\tau)S_V(d_n\tau) = S_W(\tau)$$

et l'on choisit les c_i, d_i pour que $W(\tau)$ soit une perturbation à $o(\tau^{k-1})$ près de H.

On montre que les trois méthodes conduisent au même résultat, i.e. fournissent le même idéal annulé par les c_i, d_i. D'un point de vue pratique, la méthode la plus simple est la troisième, qui s'effectue par application répétée de (11) sans recours à des identités exponentielles. L'implémentation de (11),(12) se fait commodément en décomposant le hamiltonien perturbé W sur la *base de Lyndon* [4, 5, 7, 3] de l'algèbre de Lie libre sur T, V.

On retrouve de la sorte l'intégrateur symplectique à l'ordre 2:

(13) $$S_2(\tau) = S_T(\frac{\tau}{2})S_V(\tau)S_T(\frac{\tau}{2})$$

bien connu par ailleurs. La méthode permet d'obtenir par exemple tous les intégrateurs symplectiques d'ordre 4, mais à partir de $k = 6$, le nombre d'équations algébriques déterminant les c_i, d_i devient trop grand pour pouvoir conclure. Cette limitation suggère de se restreindre aux intégrateurs ayant une structure particulière motivée par des considérations physiques.

4. Cas spéciaux

Intégrateurs réversibles. Un intégrateur S est dit *réversible* si $S(-t) = S(t)^{-1}$. Nous chercherons de tels intégrateurs sous la forme

(14) $$S_R^{(n)}(\tau) = S_T(c_n\tau)S_V(d_n\tau)\cdots S_T(c_1\tau)S_V(d_1\tau)S_T(c_0\tau)S_T(d_1\tau)\cdots S_T(d_n\tau)S_T(c_n\tau)$$

ou encore plus particulièrement comme produit réversible d'intégrateurs du second ordre de type (13):

(15) $$S_2(c_nt)\cdots S_2(c_1t)S_2(c_0t)S_2(c_1t)\cdots S_2(c_nt) \ .$$

En raffinant les méthodes de Lie décrites en §3, on obtient un recensement exhaustif des opérateurs symplectiques de ce type d'ordre petit ($k = 6$).

Énergie cinétique quadratique. Supposons maintenant que $T(p)$ soit quadratique (ce qui est en particulier le cas du mouvement keplerien qui motive cette étude). Alors, comme $\{\{T, V\}, V\}$ ne dépend que de q, on a une formule exacte pour le flot associé à $V_1(\alpha, \beta) = \alpha V + \tau^2 \beta \{\{T, V\}, V\}$ (où α, β sont des constantes et τ est fixé), soit

$$S_{\alpha,\beta}(\tau): \quad (q, p) \rightarrow (q, p - \tau \frac{\partial V_1(\alpha, \beta)}{\partial q}) \ .$$

On trouve de manière analogue des intégrateurs symplectiques de la forme

$$S_{c_n,z_n}(\tau) S_T(d_n \tau) \cdots S_{c_1,z_1}(\tau) S_T(d_0 \tau) S_{c_1,z_1}(\tau) \cdots S_T(d_n \tau) S_{c_n,z_n}(\tau)$$

pour un choix convenable des constantes c_i, z_i, d_i. Ces intégrateurs requièrent moins d'opérations élémentaires que les intégrateurs réversibles généraux précédemment décrits.

Bibliographie

[1] Channel (P. J.) et Scovel (J. C.). – Symplectic integration of Hamiltonian systems. *Nonlinearity*, vol. 3, 1990, pp. 231–259.

[2] Deprit (A.). – Canonical tranformations depending on a small parameter. *Celestial Mechanics*, vol. 1, 1969, pp. 12–30.

[3] Koseleff (P. V.). – *Calcul formel pour les méthodes de Lie en mécanique hamiltonienne.* – Thèse de doctorat, École polytechnique, 1993.

[4] Perrin (D.). – Factorization of free monoids. *In: Combinatorics on words*, éd. par Lothaire (M.). – Addison-Wesley, 1983.

[5] Reutenauer (C.). – *Free Lie Algebras.* – Oxford, Clarendon Press, 1993.

[6] Steinberg (S.). – Lie series, Lie transformations and their applications. *In: Lie Methods in Optics. Lecture Notes in Physics*, volume 250. – Springer-Verlag, 1985.

[7] Viennot (G.). – *Algèbres de Lie libres et monoïdes libres.* – Springer-Verlag, 1978, *Lecture Notes in Mathematics*, volume 691.

[8] Yoshida (H.). – Construction of higher order symplectic integrators. *Phisics Letter A*, vol. 150, 1990, pp. 262–268.