

Projet de recherche LIULIN (IM/BW/004) sous
les auspices du SSTC

Méthodes d'intégration numérique
des trajectoires de particules
chargées
dans un champ magnétique
constant et dipolaire

J. Vandenberghe

J. Lemaire

Institut d'Aéronomie
Spatiale de Belgique

Mars 1998

Avant-propos

Ce travail a été effectué entre le premier avril 1997 et le 30 mars 1998 dans le cadre d'un projet de collaboration belgo-bulgare, entre l'Institut d'Aéronomie Spatiale de Belgique (IASB) et le Solar Terrestrial Influence Laboratory de l'Académie des Sciences de Bulgarie (STIL-BAS). Parallèlement à l'exploitation des données d'observation du dosimètre LIULIN situé à bord de la station MIR, nous avons fait une étude comparative des méthodes d'intégration numérique des équations de mouvement d'une particule chargée dans un champ magnétique constant et dans un champ magnétique dipolaire.

Ce travail est une première étape dans l'étude des effets des inhomogénéités de faible échelle du champ géomagnétique sur l'altitude des points miroirs et de la précipitation des particules piégées dans les zones de radiation de Van Allen dans l'atmosphère terrestre.

Les auteurs de ce travail remercient le Service des Affaires Scientifiques, Techniques et Culturelles du Ministère Belge de la Politique Scientifique, pour l'attribution de ce projet à l'IASB et pour les moyens qui ont été mis à leur disposition dans le cadre du projet LIULIN.

Nous souhaitons aussi remercier le directeur de l'IASB pour l'appui qu'il nous a accordé, ainsi que Mme Desmeth et Mr J.Bernard du SSTC, Mr D.S.Stern du GSFC-NASA, Mr D.Heynderickx, Mr M.Kruglanski, Mme V.Pierrard et Mr L.Fedullo de l'IASB pour leur aide ou conseil dans la réalisation de cette étude.

Enfin, nous remercions Mr Richard Mairesse et Mr Alain Moussiaux des Facultés Universitaires Notre-Dame de la Paix de Namur pour leur accueil et la présentation de leurs travaux.

Intégration numérique des équations différentielles ordinaires: les différentes méthodes

Introduction

Considérons l'équation différentielle ordinaire (ODE)

$$\frac{dy}{dt} = f(y, t)$$

définie sur l'intervalle $[a, b]$ et considérons la valeur initiale

$$y(a) = y_0.$$

Prenons une fonction f continue en t sur $[a, b]$ et lipschitzienne en y , la condition lipschitzienne signifiant la continuité forte:

$$\exists L \text{ t.q. } \forall t, y, y^* : |f(y, t) - f(y^*, t)| \leq L \cdot |y - y^*|$$

(si f est différentiable, la condition lipschitzienne revient à $|\frac{\partial f}{\partial y}| \leq L$; si f n'est différentiable que par rapport à y , $|\frac{\partial f}{\partial y}| \leq L$ implique cette condition, mais l'inverse n'est pas forcément vraie). Ce type de fonction assure l'existence et l'unicité de la solution du problème posé.

En outre, la condition lipschitzienne assure le caractère *bien posé* du problème (une faible perturbation des données - f et y_0 - provoque une faible perturbation de la solution y).

Seule ombre au tableau: la solution exacte du problème n'est généralement pas accessible, et il faut donc recourir à des méthodes d'approximation numérique.

Méthodes à un pas

Soit $h = \frac{b-a}{n}$ ($n \in \mathbb{N}_0$). Il s'agit d'approximer la solution $y(t)$ de l'ODE aux points

$$t_i = a + i \cdot h$$

($i=1, n$).

La méthode numérique de base, due à Euler, consiste à utiliser la formule de Taylor limitée au premier ordre:

$$y_{i+1} = y_i + h \cdot f(y_i, t_i)$$

($i=0, n-1$), y_i désignant bien sûr l'approximation de $y(t_i)$.

Plus généralement, une méthode à un pas pour approximer la solution de l'ODE est une méthode correspondant à une formule de la forme

$$y_{i+1} = y_i + h \cdot \Psi(y_i, t_i, h),$$

où Ψ est bien sûr lié à f . La *grandeur de pas* h pourrait très bien varier à chaque *pas* de calcul, c'est-à-dire à chaque application de la formule (et donc se noter h_i); le pas unique en question correspond au fait que y_{i+1} se déduit d'une seule approximation précédente de la solution (y_i en l'occurrence).

Cette méthode se doit de *converger* : son *erreur de troncature*

$$e_i = y_i - y(t_i)$$

doit tendre vers 0 pour h tendant vers 0 (pour tout i de 1 à n). Gear [3, p 57-58] a établi que pour un Ψ continu en t (sur $[a, b]$), en h (sur un intervalle $[0, h_0]$) et lipschitzien en y , une condition nécessaire et suffisante à cette convergence est

$$\Psi(y(t), t, 0) = f(y(t), t),$$

cette condition semblant toute naturelle si l'on regarde h comme un infiniment petit dans la formule de la méthode. En particulier, la méthode d'Euler converge puisque $\Psi_{\text{Euler}} = f$!

Reste à évaluer l'efficacité de la convergence, autrement dit l' *ordre* de la méthode. Une méthode à un pas est dite d'ordre r si son erreur de troncature est inférieure en norme à un multiple de h^r pour des h suffisamment petits (on désigne toute fonction possédant cette propriété par $O(h^r)$). Gear [3, p.60] a montré que l'ordre de la méthode est r si son *erreur de troncature locale*, c'est-à-dire l'écart de sa formule numérique à la solution y de l'ODE

$$d_i(h) = [y(t_i) + h \cdot \Psi(y(t_i), t_i, h)] - y(t_{i+1}) \quad (i = 1, n),$$

est $O(h^{r+1})$. En particulier, on peut montrer de cette manière que la méthode d'Euler est d'ordre $r = 1$.

Il va de soi que les erreurs de troncature ne pourront être elles-mêmes qu'estimées!

Méthodes de Runge Kutta

Méthode de Runge Kutta classique

Il s'agit de la méthode à un pas définie par:

$$\begin{aligned} t_i &= a + i \cdot h \\ k_1 &= f(y_i, t_i) \\ k_2 &= f\left(y_i + \frac{h}{2}k_1, t_i + \frac{h}{2}\right) \\ k_3 &= f\left(y_i + \frac{h}{2}k_2, t_i + \frac{h}{2}\right) \\ k_4 &= f(y_i + h \cdot k_3, t_i + h) \\ y_{i+1} &= y_i + \frac{h}{6} \cdot (k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4). \end{aligned}$$

On vérifie facilement que la fonction Ψ qui lui correspond remplit la condition nécessaire et suffisante de convergence. Cette convergence est d'ordre $r = 4$.

L'erreur de troncature liée à un pas du Runge Kutta classique est estimée par la méthode de *step doubling*, qui consiste à refaire le pas de grandeur h en deux pas de grandeur $\frac{h}{2}$ et à faire la différence entre les deux estimations y_{i+1} de $y(t_{i+1})$.

Méthode de Runge Kutta/Fehlberg

Fehlberg a découvert une méthode d'ordre $r = 5$, avec 6 évaluations de f dont une recombinaison donne une méthode d'ordre 4, la différence entre les deux estimations de $y(t_{i+1})$ donnant alors une estimation de l'erreur de troncature. Le schéma de calcul est le suivant:

$$\begin{aligned}
 t_i &= a + i \cdot h \\
 k_1 &= f(y_i, t_i) \\
 k_2 &= f(y_i + b_{21}hk_1, t_i + a_2h) \\
 k_3 &= f(y_i + b_{31}hk_1 + b_{32}hk_2, t_i + a_3h) \\
 k_4 &= f(y_i + b_{41}hk_1 + b_{42}hk_2 + b_{43}hk_3, t_i + a_4h) \\
 k_5 &= f(y_i + b_{51}hk_1 + b_{52}hk_2 + b_{53}hk_3 + b_{54}hk_4, t_i + a_5h) \\
 k_6 &= f(y_i + b_{61}hk_1 + b_{62}hk_2 + b_{63}hk_3 + b_{64}hk_4 + b_{65}hk_5, t_i + a_6h) \\
 y_{i+1} &= y_i + h \cdot (c_1k_1 + c_2k_2 + c_3k_3 + c_4k_4 + c_5k_5 + c_6k_6) \\
 y_{i+1}^* &= y_i + h \cdot (c_1^*k_1 + c_2^*k_2 + c_3^*k_3 + c_4^*k_4 + c_5^*k_5 + c_6^*k_6)
 \end{aligned}$$

où l'indice * désigne la formule d'ordre 4. Les coefficients a_j, b_{jk}, c_j, c_j^* les plus performants de ce schéma ont été établis par Cash Karp [5, p.711].

L'erreur de troncature $\Delta(h)$ liée à un pas de Fehlberg est donc estimée par:

$$y_{i+1} - y_{i+1}^* = \sum_{j=1}^6 h(c_j - c_j^*)k_j.$$

Notons que la somme des coefficients c_j , ainsi que celle des coefficients c_j^* , doivent valoir 1 afin que la condition de convergence soit respectée.

La méthode de Fehlberg fut longtemps contestée, l'erreur y étant estimée sans évaluations supplémentaires de f . Elle finit toutefois par supplanter les méthodes recourant au *step doubling* généralement utilisées par les physiciens.

Intégration numérique d'une ODE par la méthode de Fehlberg/Cash-Karp (avec contrôle des pas)

Considérons une ODE

$$\frac{dy}{dt} = f(y, t)$$

sur un intervalle donné $[a, b]$, avec une valeur initiale $y(a) = y_0$, et intégrons-la le long de cet intervalle par une suite de pas de Fehlberg (associé aux coefficients déterminés par Cash Karp), en veillant à ce que le pas $i+1$, de grandeur variable h_i que doit fournir le pas i (la grandeur h_0 du premier pas devant être fournie par l'utilisateur), respecte un certain critère de qualité, c'est-à-dire engendre une erreur de troncature $\Delta(h_i)$ inférieure en valeur absolue à une borne

$$\Delta_{max}(h_i) = \varepsilon \cdot yscal(h_i),$$

où ε est un facteur d'erreur relative. ε est relatif à une échelle $yscal$ le plus souvent choisie égale à

$$|y_i| + h_i \cdot |f(y_i, t_i)|,$$

mais idéalement indépendante de h_i . Le meilleur choix pour $yscal$ est la borne supérieure de la solution y . Faute d'un cas idéal, seul ε reste constant pour tout l'intervalle d'intégration.

L'erreur de troncature étant proportionnelle à h^5 , la grandeur de pas h_{max} qui aurait donné exactement l'erreur $\Delta_{max}(h_i)$ est

$$h_{max} = h_i \cdot \left| \frac{\Delta_{max}(h_i)}{\Delta(h_i)} \right|^{1/5}.$$

La règle d'intégration est alors la suivante:

- Si $|\Delta(h_i)| \leq \Delta_{max}(h_i)$, le critère de qualité du pas $i+1$ a été respecté et h_{max} , qui est supérieur à h_i , peut servir de grandeur de pas d'essai pour le pas $i+2$ ($h_{i+1} = h_{max}$);
- sinon, il faut recommencer le pas $i+1$ avec h_{max} à la place de h_i .

Il faut évidemment veiller à ne pas déborder l'intervalle d'intégration: le dernier pas sera adapté à l'approximation de $y(b)$.

Notons que plus le facteur constant ε sera petit, et plus l'approximation de la solution y de l'ODE sera *fine* au sens où il y aura plus de points approximés sur l'intervalle de l'ODE.

Méthode d'extrapolation de Bulirsch-Stoer

Introduction

Particularisons l'équation considérée jusqu'ici en prenant $a = 0$ et $b = H$, et fixons-nous pour objectif la valeur de $y(H)$.

On peut approcher $y(H)$ par la *modified midpoint method* (MMM), une méthode de discrétisation dont l'erreur de troncature $\eta(H, h) - y(H)$ est une fonction du carré de la grandeur du pas $h = \frac{H}{n}$:

$$z_0 = y_0$$

$$\begin{aligned}
z_1 &= z_0 + h \cdot f(z_0, 0) \\
z_{m+1} &= z_{m-1} + 2h \cdot f(z_m, mh) \quad [m = 1, n-1] \\
\eta(H, h) &= \frac{1}{2} \cdot [z_n + (z_{n-1} + h \cdot f(z_n, H))]
\end{aligned}$$

avec

$$\eta(H, h) - y(H) = \sum_{i=1}^{\infty} \alpha_i h^{2i} \quad (\alpha_i \in \mathbb{R}).$$

Considérons alors la séquence

$$\{\eta(H, h_j) \mid h_j = \frac{H}{2^j}, j = 1, 2, 3, \dots\}.$$

En la calculant indéfiniment, nous nous rapprochons en principe indéfiniment de $y(H)$.

Mais à chaque nouvelle discrétisation $\eta(H, h_j)$, nous pouvons en principe nous rapprocher encore davantage de $y(H)$ par *extrapolation* de la fonction $\eta(H, h)$ au point $h = 0$. Prenons par exemple l'*extrapolation polynômiale*, avec des polynômes en h^2 puisque $\eta(H, h) = y(H) + f(h^2)$.

Nous obtenons donc une méthode qui permet d'affiner "verticalement" et "horizontalement" (resp., par discrétisations et extrapolations) l'approximation de $y(H)$:

Discrétisations	Extrapolations			
$\eta(H, h_1) = T_{11}$				
	T_{22}			
$\eta(H, h_2) = T_{21}$		T_{33}		
	T_{32}		T_{44}	
$\eta(H, h_3) = T_{31}$		T_{43}		T_{55}
	T_{42}		T_{54}	
$\eta(H, h_4) = T_{41}$		T_{53}		
	T_{52}			
$\eta(H, h_5) = T_{51}$				

Cette méthode, dites de Bulirsch-Stoer, est aisément adaptable à un intervalle $[a, b] = [a, a+H]$ quelconque. Pour une estimation systématique de l'erreur entachant l'approximation T_{kk} , on peut utiliser [2, p.406]:

$$\Delta_k = |T_{kk} - T_{k(k-1)}|.$$

En fait, la procédure d'intégration d'une ODE sur un intervalle $[a, b]$ par la méthode de Bulirsch-Stoer consiste à appliquer cette méthode à une suite de sous-intervalles $[t_i, t_i + H_i]$ ($i = 0, 1, \dots, N - 1$) de $[a, b]$ (avec $t_0 = a$, $t_{i+1} = t_i + H_i$, $t_N = b$). Il est essentiel de remarquer que les grandeurs de pas H_i sont *macroscopiques*, qu'elles ne visent pas l'infiniment petit comme c'était le cas pour la méthode de Cash-Karp (ne pas confondre les pas H_i avec les pas de la MMM $h_{ij} = \frac{H_i}{2^j}$). La question essentielle est de trouver des H_i ni trop petits (sinon la méthode de Bulirsch-Stoer perd tout son intérêt) ni trop grands (sinon la méthode risque de diverger).

Intégration numérique d'une ODE par Bulirsch-Stoer

Considérons une ODE définie sur un intervalle $[a, b]$, avec une valeur initiale $y(a) = y_0$, et envisageons son intégration le long de son intervalle par application de la méthode de Bulirsch-Stoer à une suite de sous-intervalles. Le premier de ces sous-intervalles est $[t_0, t_0 + H_0]$ où $t_0 = a$ et H_0 doit être fourni par l'utilisateur, avec $t_0 + H_0 \leq b$.

Supposons maintenant que nous soyons arrivés à t_i (strictement inférieur à b), et que le pas précédent ait recommandé un pas macroscopique H_i tel que $t_i + H_i \leq b$. On applique alors au sous-intervalle $[t_i, t_i + H_i]$ la MMM et l'extrapolation polynômiale, *en principe* jusqu'au premier k tel que

$$\Delta_k^i = |T_{kk}^i - T_{k(k-1)}^i| \leq \Delta_{max}^i,$$

où Δ_{max}^i est une borne d'erreur analogue à celle de Cash-Karp:

$$\Delta_{max}^i = \varepsilon \cdot yscal(H_i).$$

Nous disons en principe, car l'optimisation du processus impose des réductions de H_i , notamment lorsque le test s'avère négatif pour tous les k inférieurs ou égaux à une borne $kmax$ fonction de ε .

Lorsque la borne d'erreur est respectée, le processus accepte l'évaluation T_{kk}^i de la solution en $t_{i+1} = t_i + H_i$ et il ne reste plus qu'à calculer une grandeur de pas H_{i+1} telle que $t_{i+1} + H_{i+1} \leq b$ pour poursuivre le parcours de l'intervalle $[a, b]$ par celui du sous-intervalle $[t_{i+1}, t_{i+1} + H_{i+1}]$.

Voici une vue d'ensemble de l'algorithme d'une sous-routine fortran, BSSTEP [3, p.722-724], destinée à calculer le pas $i + 1$ de Bulirsch-Stoer:

- (1) Boucle DO de longueur $kmax$ (qui est fonction de ε), destinée à calculer $y(x_i + H_i)$, avec tests de sortie vers (2) ou (3);
- (2) Réduction de H_i et retour à (1);
- (3) Calcul de H_{i+1} .

Comparaison des méthodes de Cash-Karp et Bulirsch-Stoer

Il faut d'abord noter que la méthode de Bulirsch-Stoer, contrairement à celle de Cash-Karp, ne fournit pas en principe une approximation *fine* de la solution de l'ODE, les distances H_i entre les abscisses t_i des points évalués étant relativement grandes.

Il s'ensuit que pour tracer des trajectoires de particules il est plus sûr d'utiliser Cash-Karp.

Lorsque la finesse de parcours de l'intervalle de l'ODE n'a pas d'importance, autrement dit lorsque seule la valeur au point final $y(b)$ compte, la méthode de Bulirsch-Stoer s'avère incontestablement plus intéressante. Un fait que nous allons illustrer ci-après...

Problèmes multidimensionnels

Considérons une ODE de dimension m définie sur l'intervalle $[a, b]$,

$$\frac{dy}{dt} = \mathbf{f}(\mathbf{y}, t),$$

et la valeur initiale de même dimension

$$\mathbf{y}(a) = \mathbf{y}_0.$$

Ce que nous venons de dire sur les ODE unidimensionnelles (sur la condition de Lipschitz et ses conséquences) et sur les méthodes numériques permettant d'approximer leurs solutions est généralisable à ce problème multidimensionnel.

Signalons seulement que pour Cash-Karp, le critère de qualité

$$|\Delta(h_i)| \leq \varepsilon \cdot yscal(h_i)$$

est généralisé par

$$MAX_{l=1,m} \left| \frac{\Delta_l(h_i)}{yscal_l(h_i)} \right| \leq \varepsilon.$$

La même idée vaut pour Bulirsch-Stoer:

$$\Delta_k^i \leq \varepsilon \cdot yscal(H_i)$$

est généralisé par

$$MAX_{l=1,m} \left| \frac{\Delta_{k,l}^i}{yscal_l(H_i)} \right| \leq \varepsilon.$$

Etude comparative des méthodes d'intégration numérique des équations de mouvement d'une particule chargée dans un champ magnétique constant (cas relativiste)

Soit une particule chargée (électron ou ion) de masse au repos m_0 et de charge q , plongée dans un champ magnétique constant \vec{B} . En notant \vec{x} sa position et \vec{v} sa vitesse, les équations de son mouvement sont:

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\vec{x} &= \vec{v} \\ m \cdot \frac{d}{dt}\vec{v} &= q(\vec{v} \times \vec{B})\end{aligned}$$

où $m = m_0 \cdot \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}$ est sa masse propre constante (v étant la norme constante de sa vitesse et c étant la vitesse de la lumière). On a donc l'ODE de dimension $m = 6$:

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \vec{x} \\ \vec{v} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \vec{v} \\ \frac{q}{m}\vec{v} \times \vec{B} \end{pmatrix}.$$

Pour des valeurs initiales (au temps $t = 0$) correspondant à un pitch angle α et une énergie cinétique K , cette dernière étant liée au moment de la particule par

$$p = \frac{\sqrt{(K + m_0c^2)^2 - (m_0c^2)^2}}{c},$$

cette particule décrit une hélice régulière d'angle α et de rayon (de Larmor)

$$r_L = \frac{p \cdot \sin \alpha}{q \cdot B},$$

avec une vitesse de norme

$$v = \sqrt{\frac{1}{\frac{1}{c^2} + \left(\frac{m_0}{p}\right)^2}}.$$

Pour $\alpha = 90$ degrés, l'hélice se réduit au cercle de rayon $r_L = \frac{p}{qB}$.

Pour être tout-à-fait concret, prenons un proton dans un champ de 0.00004 Tesla, avec le pitch angle de 90 degrés et une énergie de 1 MeV.

Prenons un repère dont l'axe z correspond à la direction du champ magnétique et dont les axes x, y correspondent aux valeurs initiales

$$\begin{aligned}y(0) &= r_L \\ \frac{dx}{dt}(0) &= v,\end{aligned}$$

(les autres composantes de position et de vitesse initiales étant nulles). De cette manière, la trajectoire circulaire du proton est centrée à l'origine et située dans le plan Oxy .

Posons-nous alors la question des performances respectives des méthodes de Runge-Kutta classique, de Cash-Karp et de Bulirsch-Stoer pour l'intégration numérique de l'ODE de cette trajectoire. Ces performances concernent:

- la précision sur le rayon du cercle, c'est-à-dire l'erreur relative

$$\frac{\Delta r_L}{r_L} = \frac{|r_L - \sqrt{x^2 + y^2}|}{r_L};$$

- le temps de calcul de l'ordinateur.

Nous avons écrit un programme FORTRAN (de précision REAL*8 pour les réels) permettant de déterminer la méthode la plus performante. Ce programme utilise des unités assurant une égale précision sur les six dimensions (les trois positions et les trois vitesses), à savoir:

- unité de longueur = r_L ;
- unité de temps = $\frac{r_L}{v}$.

Il a été exécuté sur une station de travail ALPHA (OPEN VMS7.1, ALPHA 20164 200 MHZ 128MB.RAM).

La figure 1 donne les valeurs de $\frac{\Delta r_L}{r_L}$ en fonction du nombre de cercles de Larmor, c'est-à-dire de la longueur d'intervalle d'intégration. Les courbes en trait continu ont été obtenues par le Runge-Kutta classique, sans contrôle par step doubling, pour les pas $h_k = \frac{2\pi r_L}{10^k v}$ ($k = 1, 2, 3, 4, 5$; $\frac{r_L}{v} = 1$). Celles en trait interrompu ont été obtenues par Cash-Karp, et celles en trait interrompu/pointillé par Bulirsch-Stoer, pour les facteurs $\varepsilon_k = 10^{-k}$ ($k = 2, 3, 4, 5, 6$). Les performances sont d'autant meilleures que les ordonnées des courbes sont petites. Cash-Karp, franchement pathologique pour ε_1 , rattrape ensuite Bulirsch-Stoer. Leurs faibles exigences de qualité (correspondant à des facteurs ε relativement grands) rendent leurs performances très inférieures à celles de Runge-Kutta.

La figure 2 donne le temps de calcul de l'ordinateur en fonction du nombre de cercles de Larmor, c'est-à-dire de la longueur de l'intervalle temporel d'intégration. Les courbes en trait continu ont été obtenues par le Runge-Kutta classique, pour les pas $h_k = \frac{2\pi r_L}{10^k v}$ ($k = 1, 2, 3, 4, 5$; $\frac{r_L}{v} = 1$). Celles en trait interrompu ont été obtenues par Cash-Karp, et celles en trait interrompu/pointillé par Bulirsch-Stoer, pour les facteurs $\varepsilon_k = 10^{-k}$ ($k = 2, 3, 4, 5, 6$). Les performances de Bulirsch-Stoer et de Cash-Karp ne sont pas significativement différentes, et elles sont cette fois très supérieures à celles de Runge-Kutta.

La figure 3 donne les valeurs de $\frac{\Delta r_L}{r_L}$ en fonction du nombre de cercles de Larmor, c'est-à-dire de la longueur d'intervalle d'intégration. Les courbes en trait continu ont été obtenues par le Runge-Kutta classique, pour les pas $h_k = \frac{2\pi r_L}{10^k v}$ ($k = 1, 2, 3, 4, 5; \frac{r_L}{v} = 1$). Celles en trait interrompu ont été obtenues par Cash-Karp, et celles en trait interrompu/pointillé par Bulirsch-Stoer, pour les facteurs $\varepsilon_k = 10^{-k}$ ($k = 7, 8, 9, 10, 11$). Bulirsch-Stoer est légèrement surpassé par Cash-Karp, avant la quasi-égalisation pour $\varepsilon = 10^{-11}$. Leurs performances se rapprochent un peu de celles de Runge-Kutta.

La figure 4 donne le temps de calcul de l'ordinateur en fonction du nombre de cercles de Larmor, c'est-à-dire de la longueur de l'intervalle temporel d'intégration. Les courbes en trait continu ont été obtenues par le Runge-Kutta classique, pour les pas $h_k = \frac{2\pi r_L}{10^k v}$ ($k = 1, 2, 3, 4, 5; \frac{r_L}{v} = 1$). Celles en trait interrompu ont été obtenues par Cash-Karp, et celles en trait interrompu/pointillé par Bulirsch-Stoer, pour les facteurs $\varepsilon_k = 10^{-k}$ ($k = 7, 8, 9, 10, 11$). La supériorité de Bulirsch-Stoer est cette fois flagrante.

La figure 5 donne les valeurs de $\frac{\Delta r_L}{r_L}$ en fonction du nombre de cercles de Larmor, c'est-à-dire de la longueur d'intervalle d'intégration. Les courbes en trait continu ont été obtenues par le Runge-Kutta classique, pour les pas $h_k = \frac{2\pi r_L}{10^k v}$ ($k = 1, 2, 3, 4, 5; \frac{r_L}{v} = 1$). Celles en trait interrompu ont été obtenues par Cash-Karp, et celles en trait interrompu/pointillé par Bulirsch-Stoer, pour les facteurs $\varepsilon_k = 10^{-k}$ ($k = 12, 13, 14, 15, 16$). Bulirsch-Stoer et Cash-Karp rejoignent les performances de Runge-Kutta. Bulirsch-Stoer semble bien être la meilleure méthode, malgré le dérèglement final.

La figure 6 donne le temps de calcul de l'ordinateur en fonction du nombre de cercles de Larmor, c'est-à-dire de la longueur de l'intervalle temporel d'intégration. Les courbes en trait continu ont été obtenues par le Runge-Kutta classique, pour les pas $h_k = \frac{2\pi r_L}{10^k v}$ ($k = 1, 2, 3, 4, 5; \frac{r_L}{v} = 1$). Celles en trait interrompu ont été obtenues par Cash-Karp, et celles en trait interrompu/pointillé par Bulirsch-Stoer, pour les facteurs $\varepsilon_k = 10^{-k}$ ($k = 12, 13, 14, 15, 16$). La supériorité temporelle de Bulirsch-Stoer se confirme pleinement : pour 10^3 tours, cette méthode prend tout au plus - pour le facteur ε le plus exigeant - 13 secondes, alors que Cash-Karp nécessite 2.7 minutes. Remarquons que pour une performance en précision sur r_L comparable, Runge-Kutta prend 83 minutes !

Les résultats rapportés par ces figures 1-6 plaident en faveur de Bulirsch-Stoer:

- Du point de vue du temps de calcul, la supériorité de cette méthode est incontestable (cfr figures 4 et 6).
- Du point de vue de la précision, cette supériorité est moins frappante. Les figures 3 et 5 suggèrent néanmoins le dépassement de Cash-Karp par Bulirsch-Stoer entre les facteurs $\varepsilon = 10^{-11}$ et $\varepsilon = 10^{-12}$. Ce dépassement semble bien définitif, ce que confirme la figure 7, obtenue avec le même programme transposé en double précision (REAL*16).

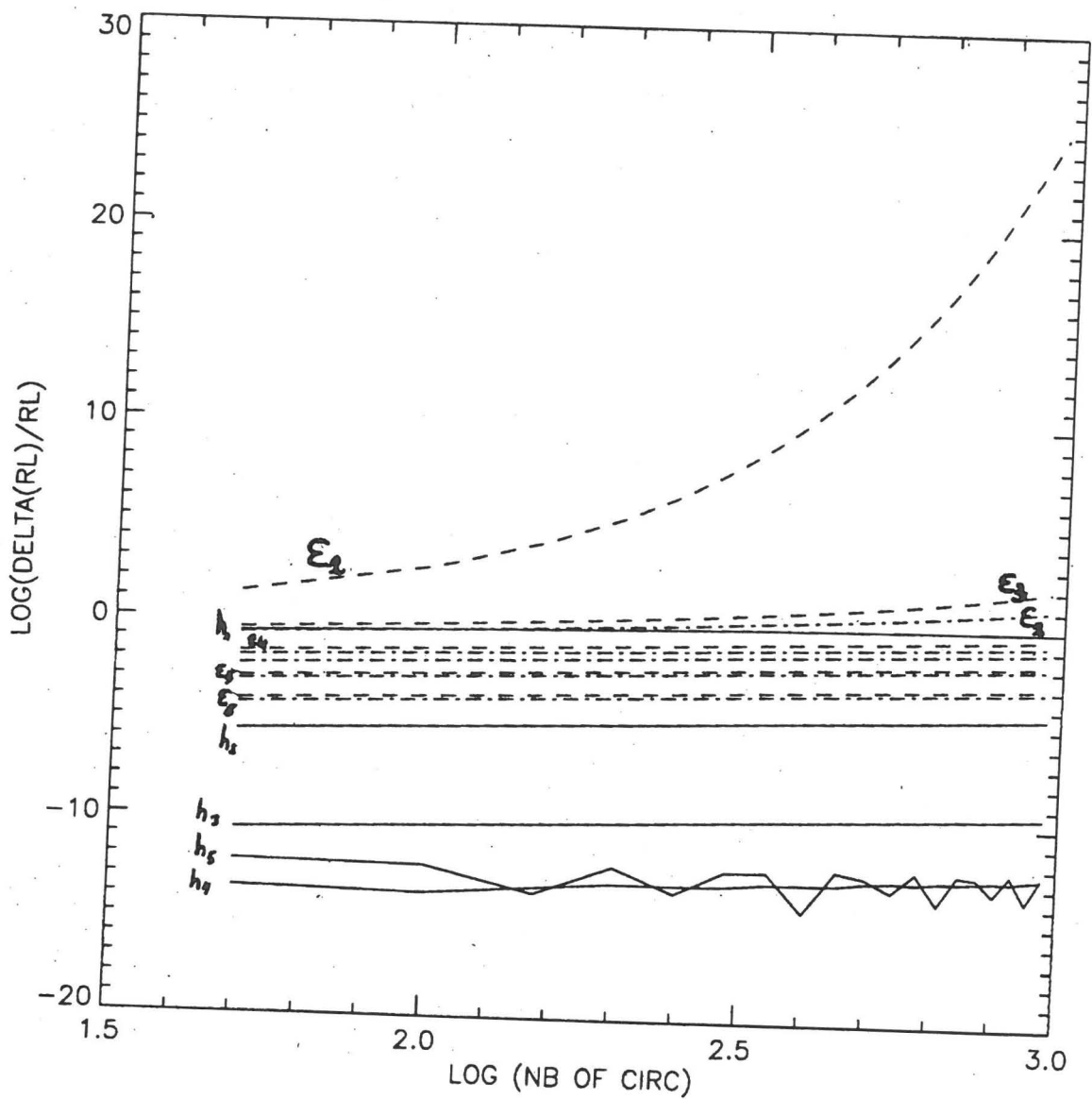


Figure 1: Logarithme en base 10 de $\frac{\Delta r_L}{r_L}$ en fonction du logarithme de NB OF CIRC, le nombre de tours de circonférence effectués (maximum 10^3 tours).

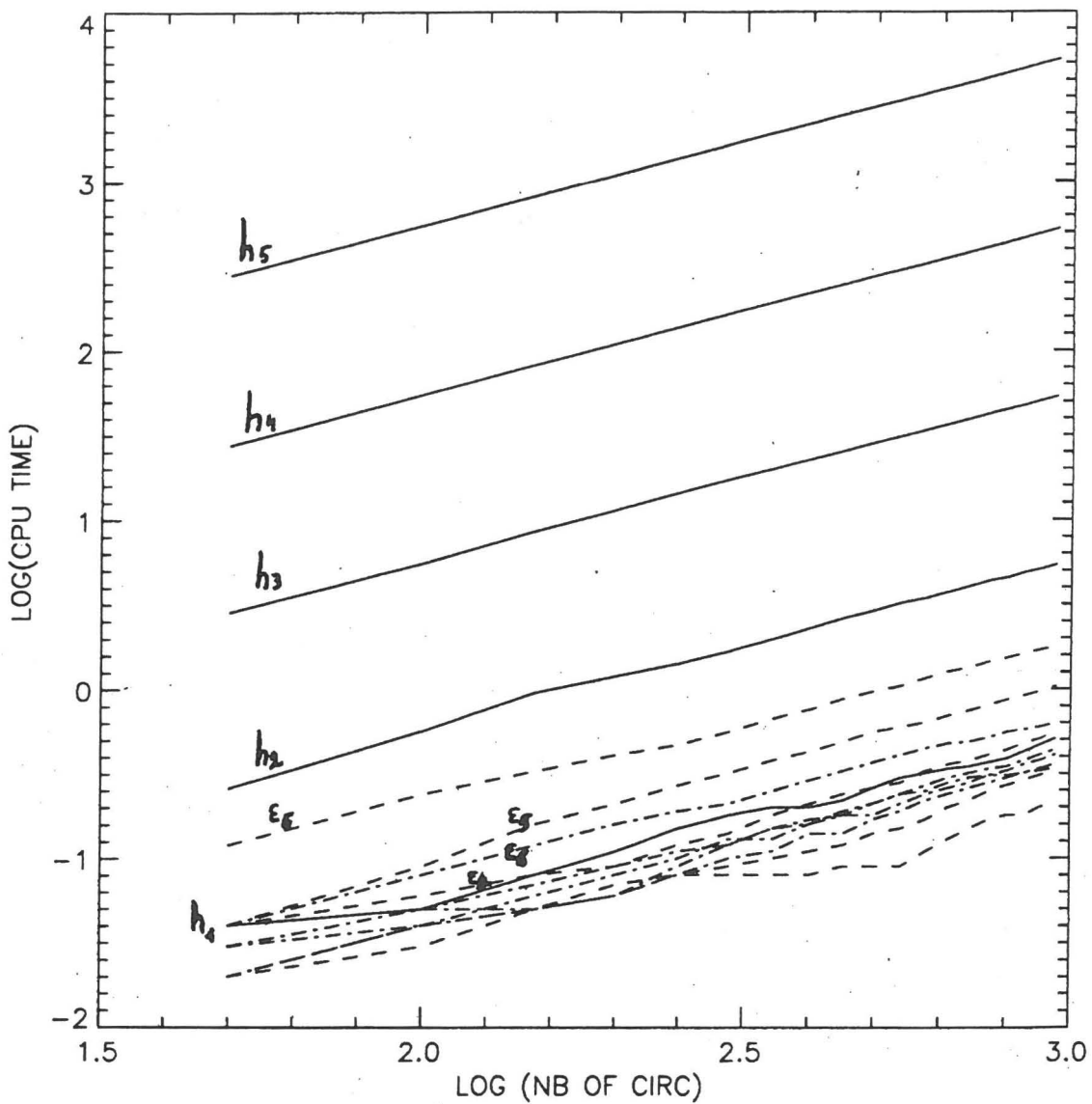


Figure 2: Logarithme du temps de calcul (CPU TIME) sur la station PLASMA (en secondes) en fonction du logarithme du nombre de tours de cercle effectués (NB OF CIRC).

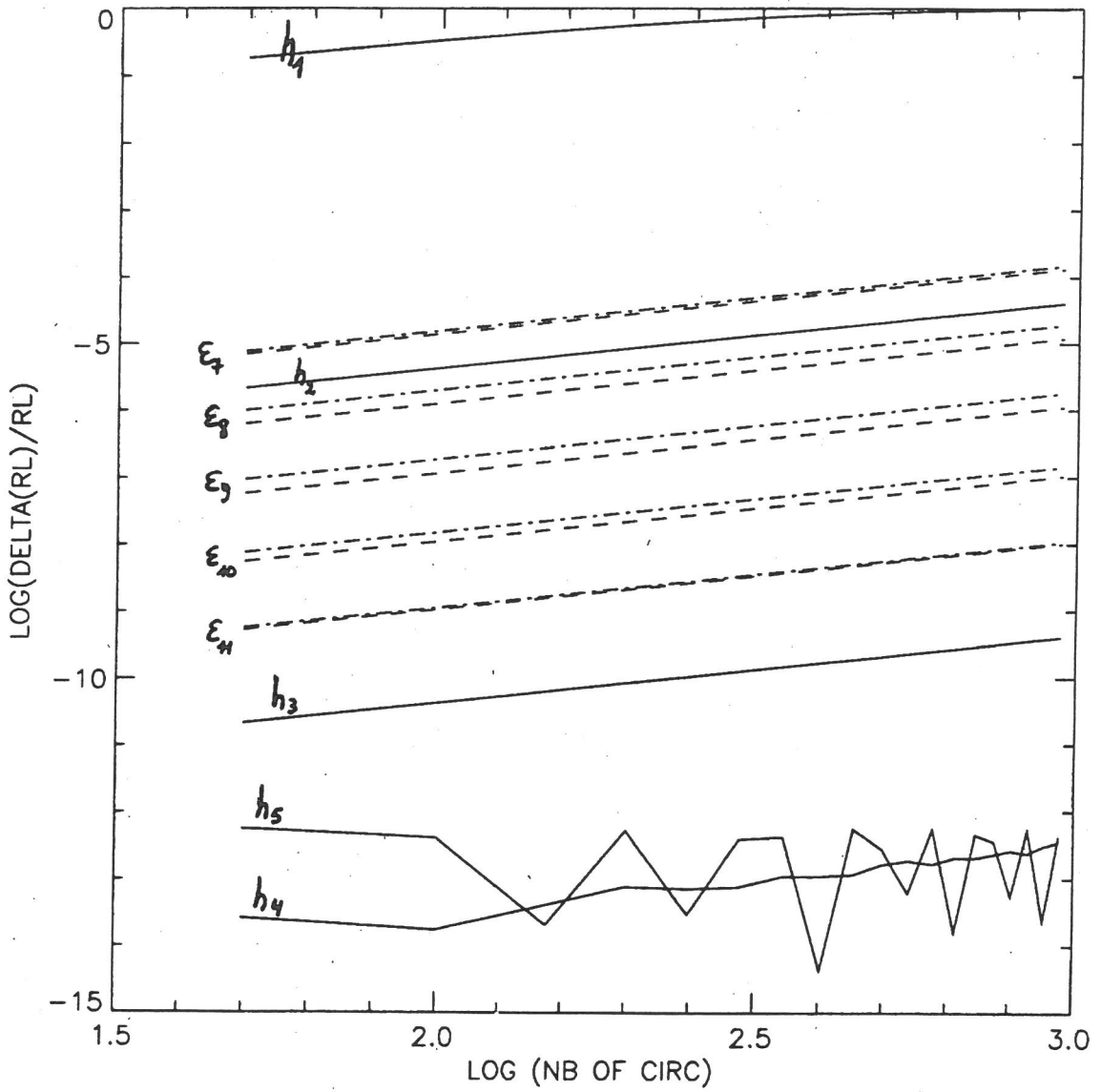


Figure 3: Logarithme de $\frac{\Delta r_L}{r_L}$ en fonction du logarithme du nombre de tours de cercle effectués.

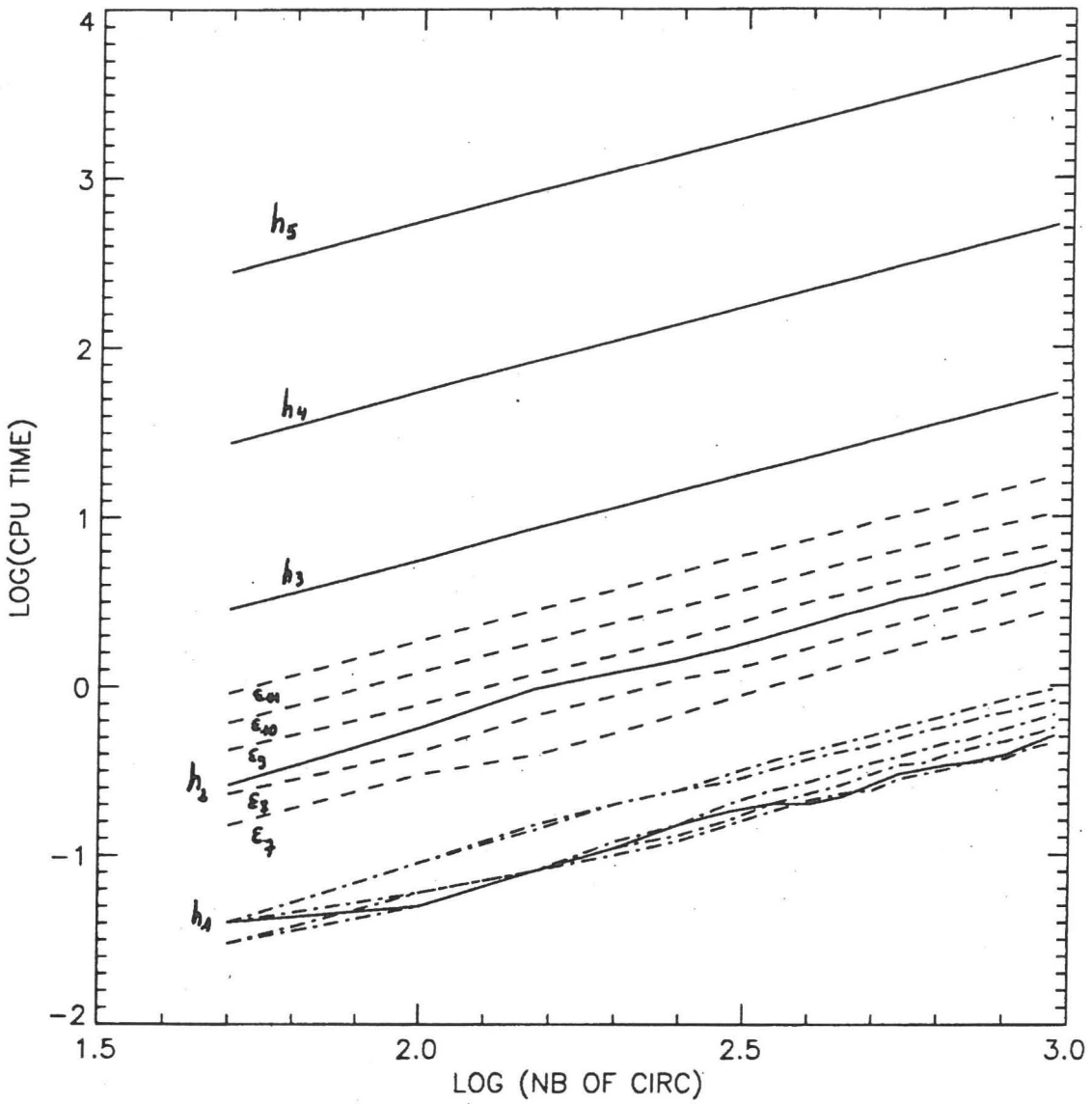


Figure 4: Logarithme du temps de calcul de la station PLASMA (en secondes) en fonction du logarithme du nombre de tours de cercle effectués.

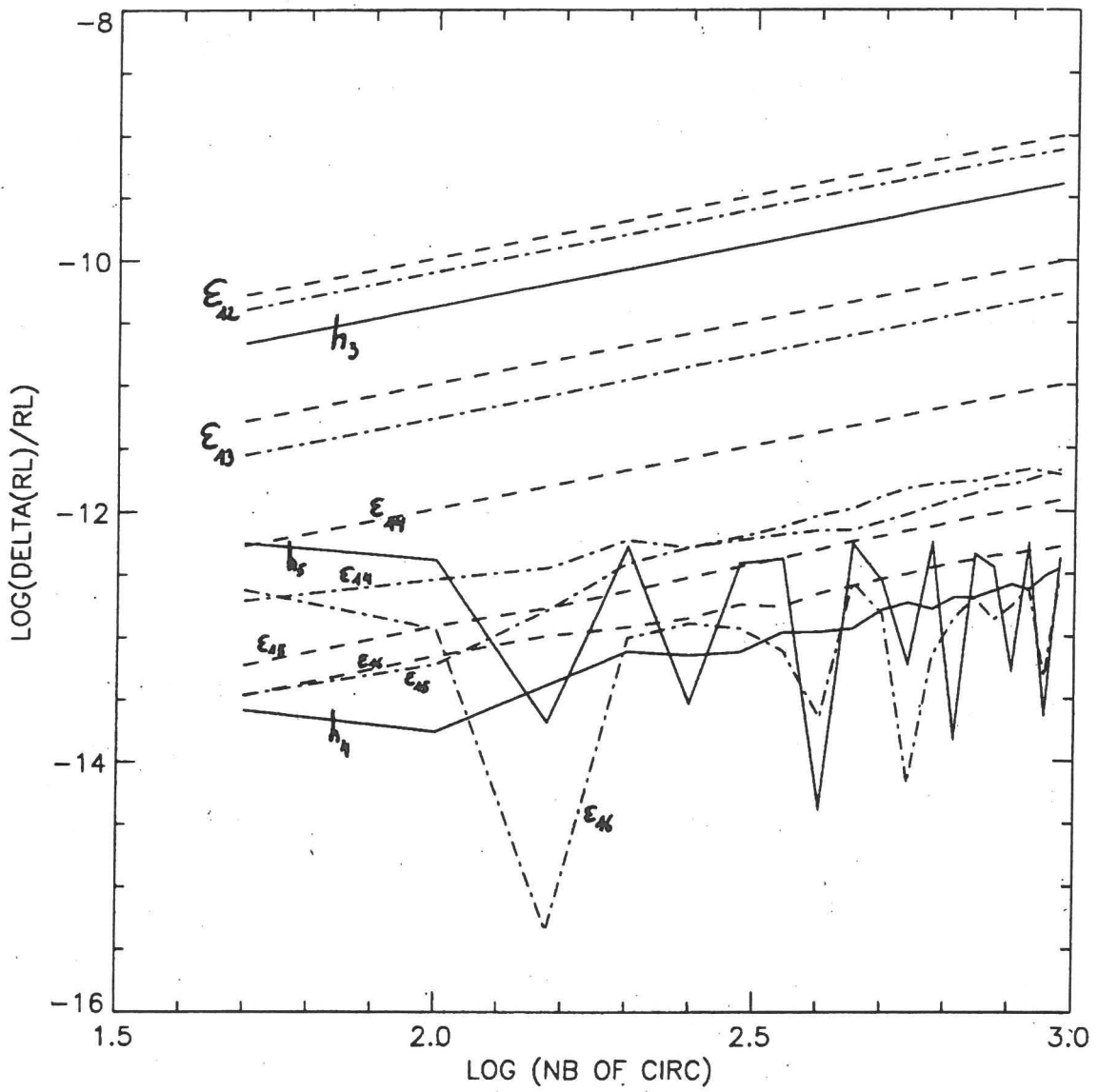


Figure 5: Logarithme de $\frac{\Delta r_L}{r_L}$ en fonction du logarithme du nombre de tours de cercle effectués.

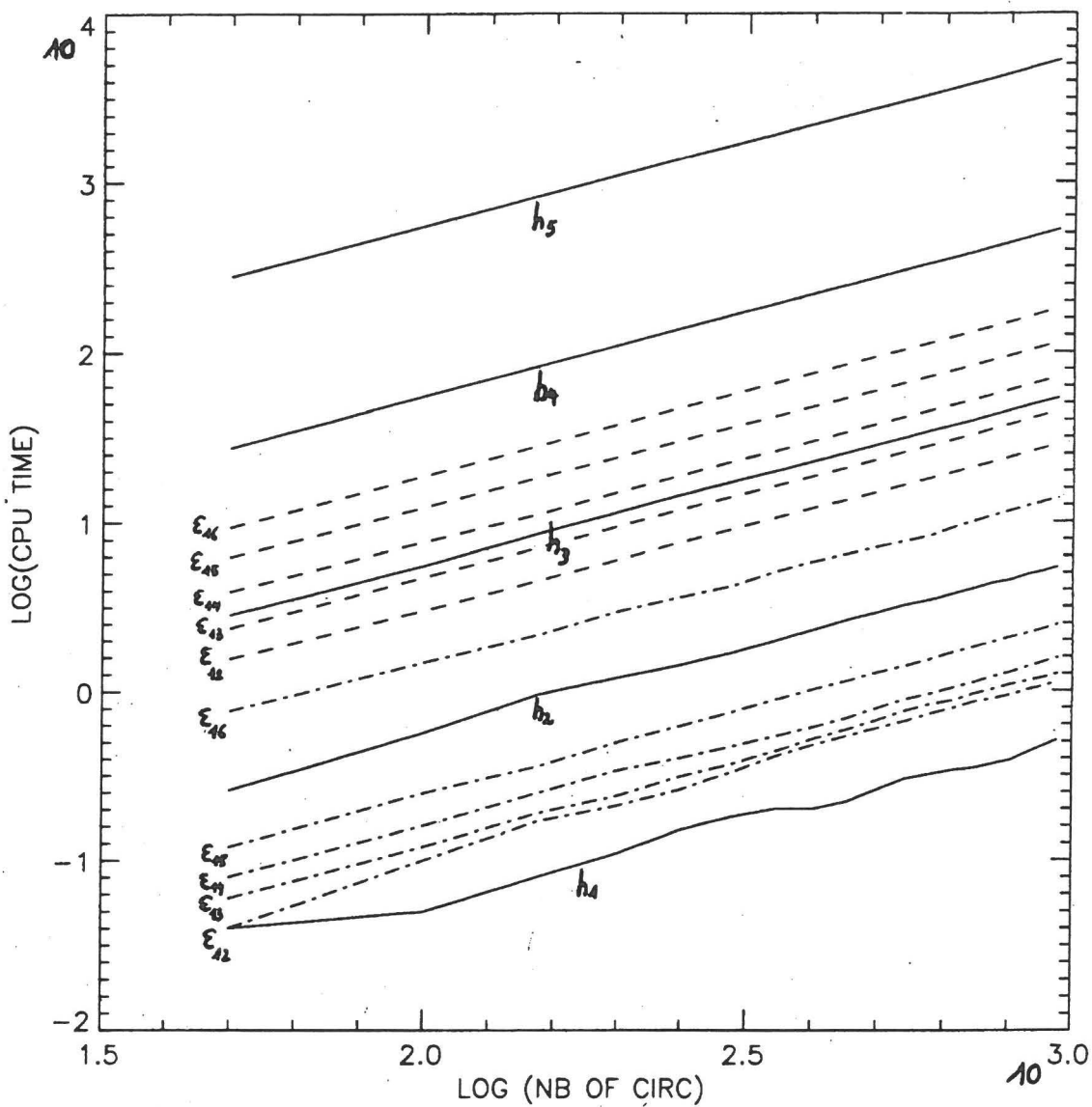


Figure 6: Logarithme du temps de calcul de la station PLASMA (en secondes) en fonction du logarithme du nombre de tours de cercle effectués.

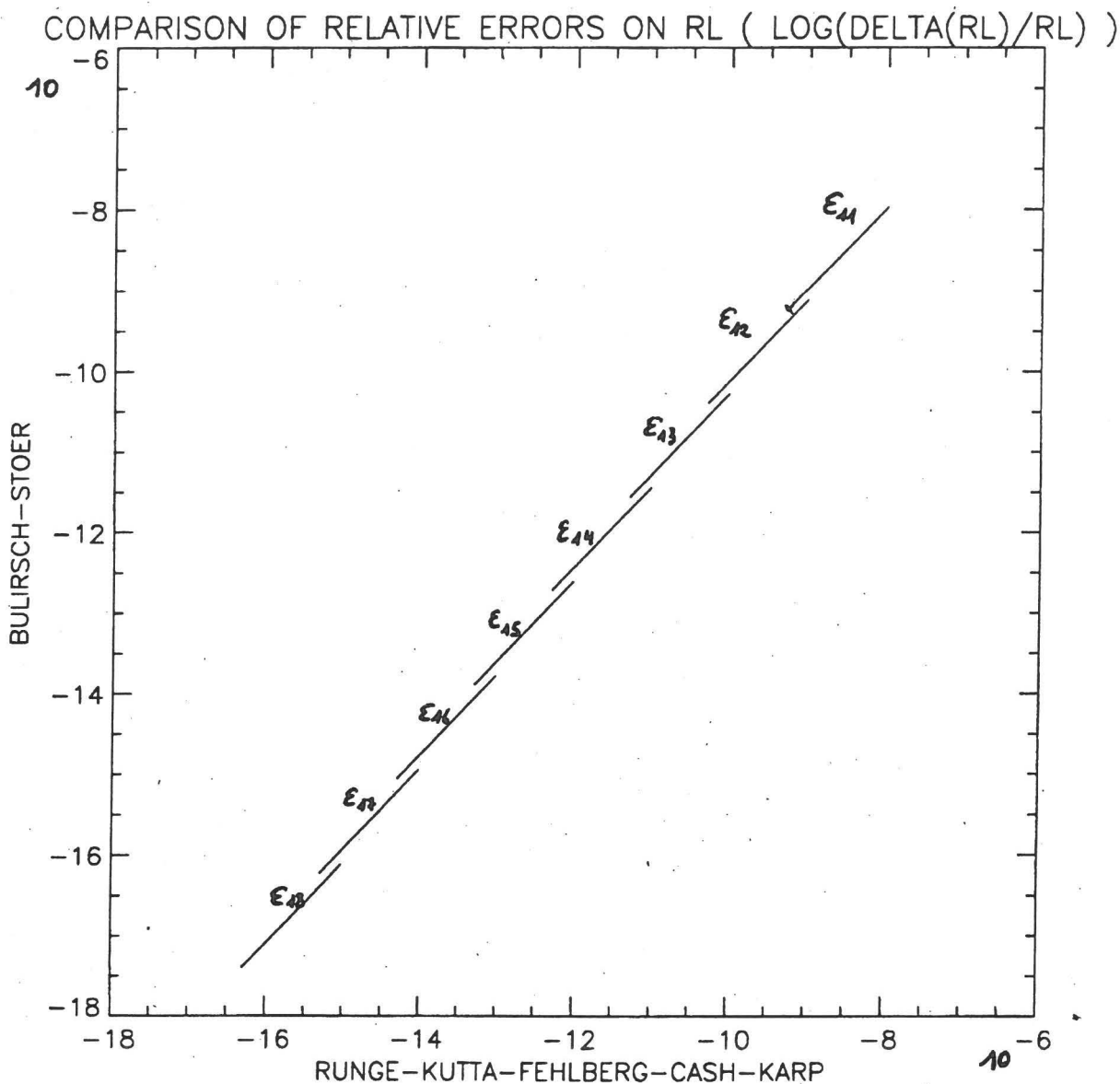


Figure 7: Comparaison des performances en précision (autrement dit des erreurs relatives $\text{Log}(\frac{\Delta r_L}{r_L})$) de Cash-Karp et Bulirsch-Stoer pour les facteurs $\epsilon_k = 10^{-k}$ ($k = 11, \dots, 18$), pour l'intervalle du nombre de tours du cercle $[50, 1000]$ et en utilisant un programme fortran en double précision. Les performances sont quasiment les mêmes pour $\epsilon = 10^{-11}$ (la courbe correspondante se confondant quasiment avec la première bissectrice des axes), Bulirsch-Stoer ne cessant ensuite d'accroître sa supériorité (les courbes étant de plus en plus basses par rapport à la première bissectrice).

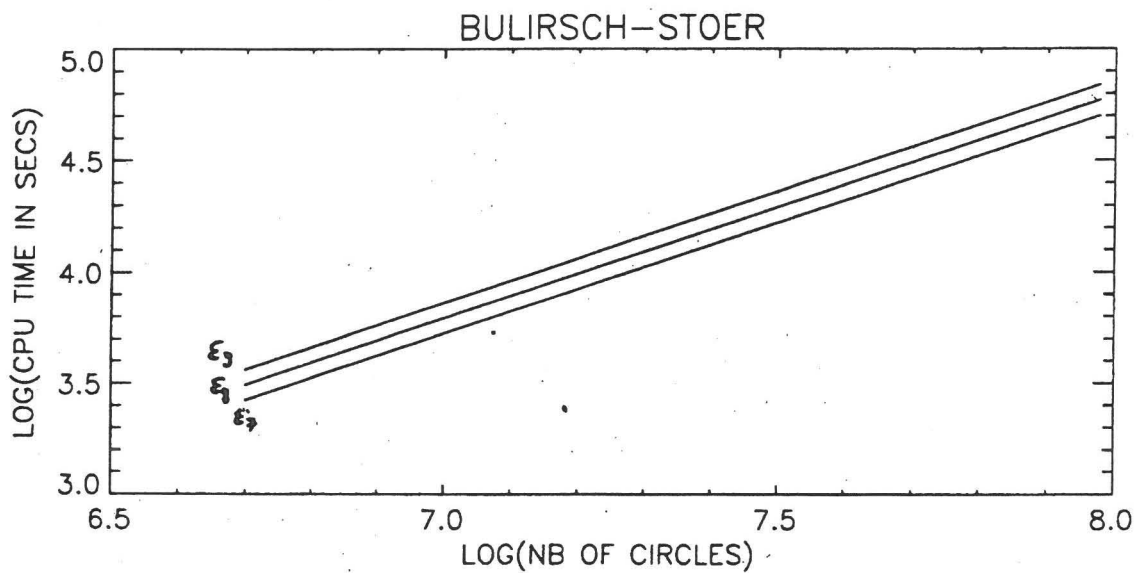
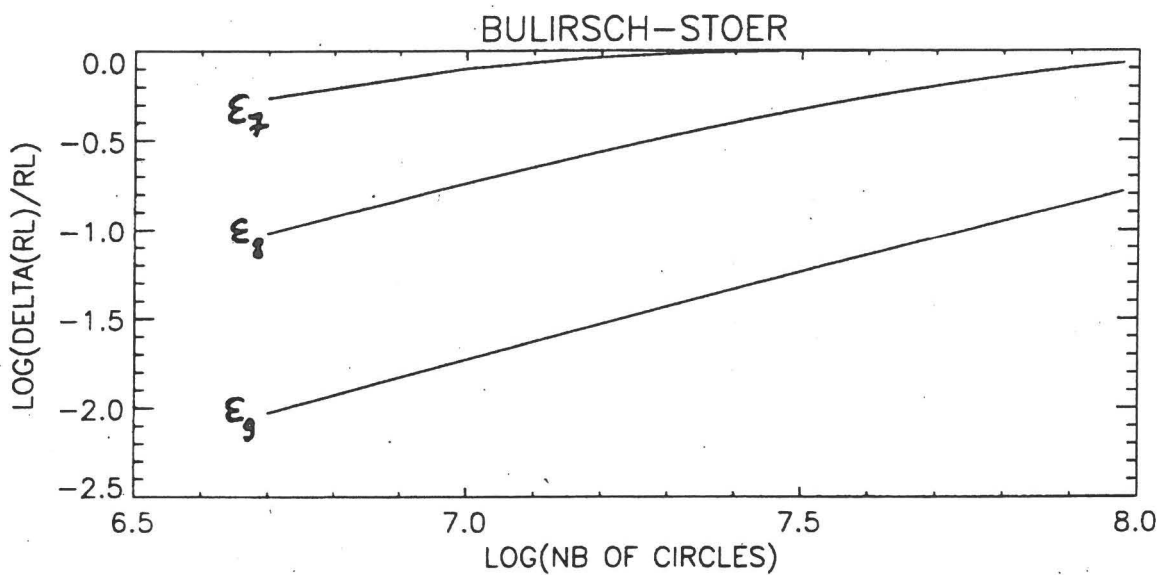


Figure 8: Illustration de la limite de la méthode numérique de Bulirsch-Stoer: pour 100 millions de tours du cercle, on voit que les facteurs $\epsilon_7 = 10^{-7}$ et $\epsilon_8 = 10^{-8}$ donnent des erreurs relatives sur le rayon $\frac{\Delta r_L}{r_L}$ nettement trop élevées.

Problème de Störmer (intégration numérique des équations de mouvement d'une particule chargée dans un dipôle magnétique)

Introduction

Considérons maintenant une particule de charge q , de vitesse constante en norme v et de masse m dans le champ d'un dipôle magnétique de moment M .

Störmer [6] a utilisé la coordonnée curviligne s à la place du temps t ($ds/dt = v$) et introduit la longueur constante $C_{st} = \sqrt{Mq/vm}$, ce qui l'a conduit à une famille d'équations de mouvement de la particule en coordonnées cylindriques (R, ϕ, z) , famille paramétrée par un réel γ sans dimension.

Pour un γ donné, il y a, d'une part, l'unique équation faisant intervenir l'angle polaire ϕ , équation qui régit le mouvement du plan méridien de la particule (c'est-à-dire du plan défini par l'axe du dipôle et la particule); d'autre part les équations régissant le mouvement de la particule dans ce plan méridien:

$$\begin{aligned}\frac{d^2 R}{ds^2} &= \frac{1}{2} \frac{\partial Q}{\partial R} \\ \frac{d^2 z}{ds^2} &= \frac{1}{2} \frac{\partial Q}{\partial z}\end{aligned}$$

où Q est le "potentiel"

$$Q(R, z) = 1 - C_{st}^4 \left(\frac{2\gamma}{C_{st}R} + \frac{R}{r^3} \right)^2$$

(r étant le rayon $\sqrt{R^2 + z^2}$ des coordonnées sphériques) correspondant au carré de la norme de la "vitesse" $(\frac{dR}{ds}, \frac{dz}{ds})$.

Il faut distinguer trois classes pour le paramètre γ . Au-dessous de $\gamma = -1$, il y a deux zones spatiales permises à la particule: une zone intérieure en contact avec le centre du dipôle et une zone extérieure s'ouvrant sur l'infini. Ces deux zones sont illustrées à la figure 9, pour $\gamma = -1.016$. Entre $\gamma = -1$ et $\gamma = 0$, il n'existe qu'une seule zone permise, les deux zones de la classe précédente s'étant rejointe dès $\gamma = -1$. Ceci est illustré à la figure 9, pour $\gamma = -0.97, -0.5$ et -0.05 . Lorsque $\gamma > 0$, il n'existe également qu'une seule zone permise, mais il n'y a plus de trace de la zone intérieure de la première classe, le centre du dipôle n'étant plus accessible. Ceci est illustré à la figure 9 pour $\gamma = 0.03$ et 0.2 .

Pour le cas $\gamma = -1$, le contact entre la zone intérieure et la zone extérieure se fait par le cercle contenu dans le plan équatorial du dipôle, centré sur l'axe du dipôle et de rayon égal à la longueur de Störmer C_{st} . Ce cercle a un statut privilégié: c'est l'unique cercle parallèle au plan équatorial du dipôle et centré sur l'axe du dipôle qui constitue une trajectoire de la particule.

Recherchons en effet une solution des équations de Störmer de la forme

$$\begin{aligned} R &= R_0 \\ z &= z_0 \end{aligned}$$

(R_0, z_0 constants). Cette forme implique l'annulation de Q et de ses dérivées partielles,

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \frac{\partial Q}{\partial R} &= \frac{d^2 R}{ds^2} = 0 \\ \frac{1}{2} \frac{\partial Q}{\partial z} &= \frac{d^2 z}{ds^2} = 0 \\ Q(R, z) &= \left(\frac{dR}{ds}\right)^2 + \left(\frac{dz}{ds}\right)^2 = 0, \end{aligned}$$

qui implique à son tour (si on considère les expressions explicites de Q et de ses dérivées partielles)

$$\begin{aligned} z_0 &= 0 \\ R_0 &= \frac{-C_{st}}{\gamma} \\ \gamma &= -1. \end{aligned}$$

Ce cercle est la plus simple des trajectoires équatoriales, trajectoires qui correspondent à des conditions initiales du mouvement de la particule liées au plan équatorial du dipôle (position initiale dans ce plan, vitesse initiale parallèle à ce plan).

Pour ce type de trajectoires, remarquons d'une part que le rayon sphérique r de la particule est égal au rayon polaire R , et appelons d'autre part ψ l'angle entre le rayon-vecteur et le vecteur vitesse de la particule. Si on se fixe une condition initiale (r_0, ψ_0) et si on pose

$$v_c = \frac{q}{m} \frac{M}{r_0^2}$$

(une vitesse qui correspond à celle de la particule pour $r_0 = C_{st}$, vu la définition de C_{st}), Avrett [1] a établi la relation suivante:

$$r \sin \psi - r_0 \sin \psi_0 - \frac{v_c}{v} \frac{r_0^2}{r} = -\frac{v_c}{v} r_0$$

ou

$$r(\psi) = \frac{2r_0}{\left(1 - \frac{v}{v_c} \sin \psi_0\right) + \sqrt{\left(1 - \frac{v}{v_c} \sin \psi_0\right)^2 + 4\frac{v}{v_c} \sin \psi}},$$

relation qui exprime l'inclusion des trajectoires équatoriales dans une zone annulaire, déterminée par les cercles de rayon

$$r_{min} = r(90) = \frac{2r_0}{\left(1 - \frac{v}{v_c} \sin \psi_0\right) + \sqrt{\left(1 - \frac{v}{v_c} \sin \psi_0\right)^2 + 4\frac{v}{v_c}}}$$

et

$$r_{MAX} = r(-90) = \frac{2r_0}{\left(1 - \frac{v}{v_c} \sin \psi_0\right) + \sqrt{\left(1 - \frac{v}{v_c} \sin \psi_0\right)^2 - 4\frac{v}{v_c}}}$$

Notons que pour le cas $\gamma = -1$, la trajectoire circulaire est donnée par les équations

$$\psi = 90 = \psi_0$$

$$r = r_{min} = r_0$$

pour les charges négatives et par les équations

$$\psi = -90 = \psi_0$$

$$r = r_{MAX} = r_0$$

pour les charges positives. On voit bien que la formule d'Avrett ne donne pas une condition suffisante pour avoir une trajectoire, puisque dans ce cas précis il faut reprendre les équations de mouvement pour trouver $r_0 = C_{st}$.

Nous avons utilisé ces trajectoires particulières pour tester la précision des différentes méthodes d'intégration numérique des équations de mouvement dans le cas d'un dipôle.

Test numérique sur les trajectoires équatoriales

Plus concrètement, considérons un dipôle de moment proche de celui de la composante dipolaire du champ géomagnétique (soit $M = 8.1 * 10^{15} \text{Tm}^3$) et considérons un proton parcourant une trajectoire équatoriale avec les conditions initiales

$$r_0 = 3R_T$$

$$\psi_0 = 90,$$

qui impliquent

$$r_{min} = 3R_T,$$

R_T étant le rayon terrestre moyen (soit 6371.2 km).

Les figures 10, 11, 12 et 13 illustrent cette trajectoire pour un intervalle temporel de 5 secondes et pour deux énergies différentes: 200 MeV, qui correspond

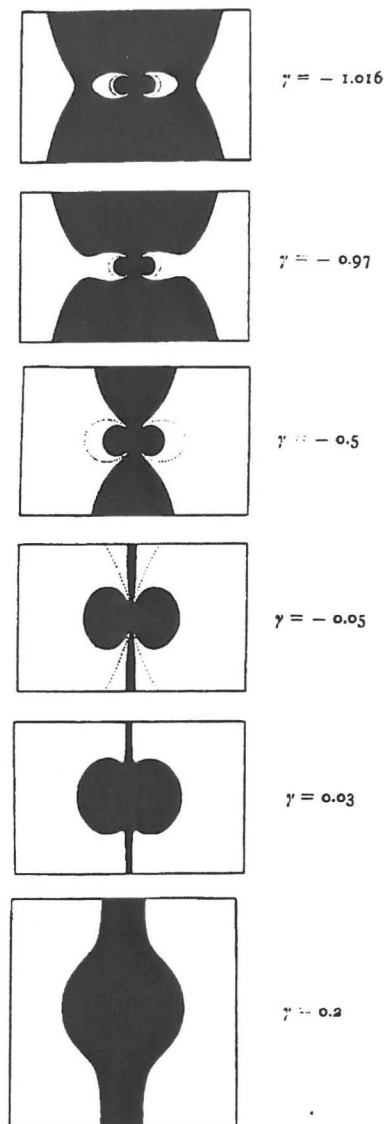


Figure 9: Zones permises (en clair) pour différentes valeurs de γ .

à $\gamma = -1.4501$ (figures 10 et 11), et 500 MeV, qui correspond à $\gamma = -1.03219$ (figures 12 et 13).

Les courbes, obtenues par la méthode de Cash-Karp, approchent médiocrement les trajectoires pour $\varepsilon = 10^{-2}$ (figures 10 et 12, haut) mais s'avèrent excellentes dès $\varepsilon = 10^{-6}$ (figures 11 et 13, haut). Ces niveaux de qualités sont confirmés par un test basé sur la formule d'Avrett. En chaque point obtenu par la méthode de Cash-Karp, on a évalué l'angle ψ , ce qui a permis d'évaluer le rayon d'Avrett $r(\psi)$ et de le comparer avec le rayon calculé par intégration numérique de l'équation de mouvement. Les graphes de ces comparaisons s'écartent sensiblement de la première bissectrice pour $\varepsilon = 10^{-2}$ (figures 10 et 12, bas) et s'y confondent pour $\varepsilon = 10^{-6}$ (figures 11 et 13, bas).

Signalons que les courbes des figures 11(haut) et 13(haut), obtenues par Cash-Karp avec $\varepsilon = 10^{-6}$, sont identiques à celles qu'on obtient par la méthode de Bulirsch-Stoer mais avec $\varepsilon = 10^{-16}$!

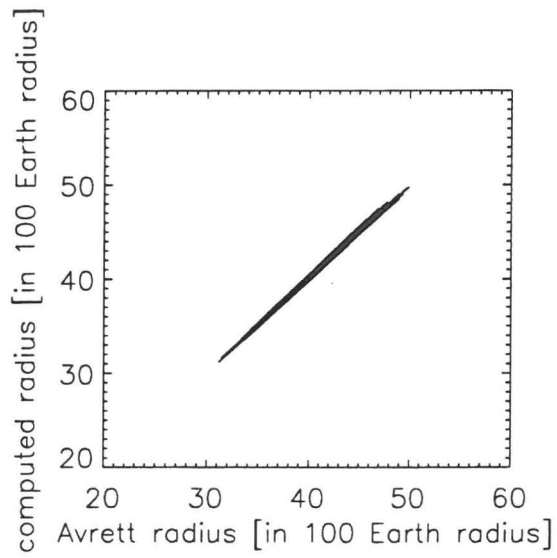
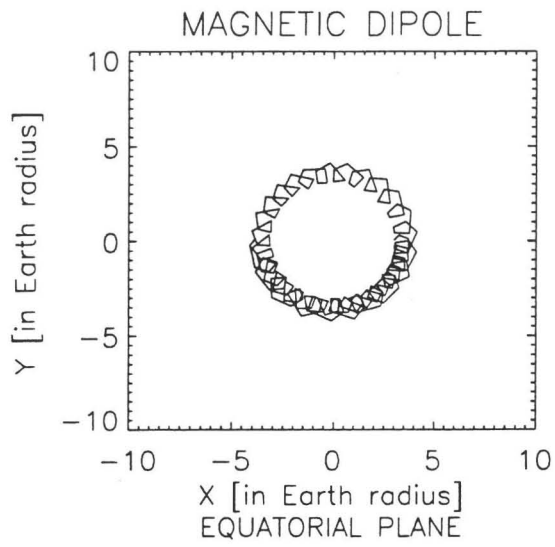


Figure 10: En haut: approximation d'une trajectoire équatoriale d'un proton de 200 MeV obtenue par la méthode de Cash-Karp avec le facteur d'erreur relative $\varepsilon = 10^{-2}$. En bas: comparaison des rayons des points obtenus par cette méthode numérique avec les rayons prévus par la formule d'Avrett.

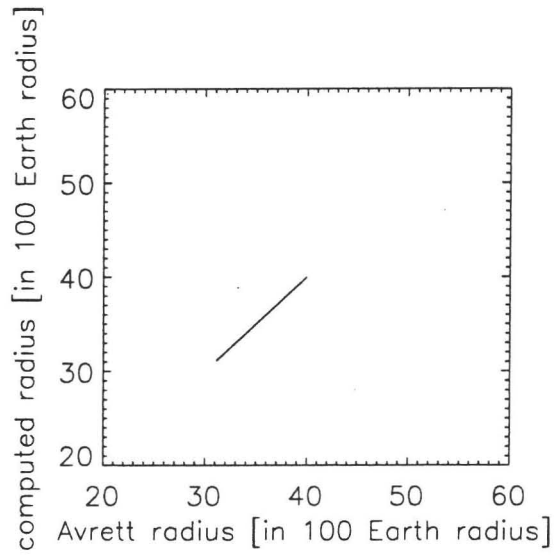
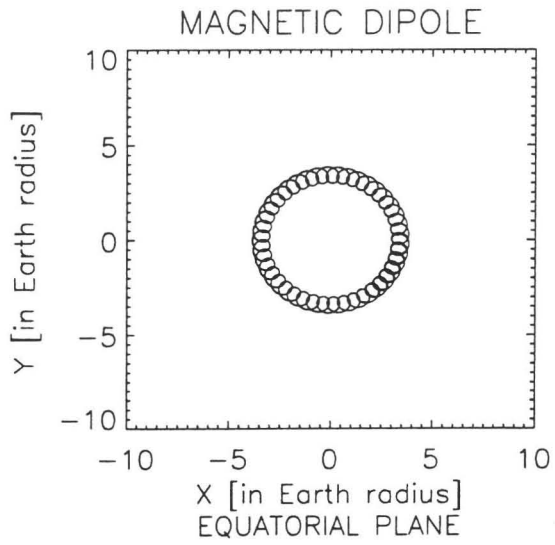


Figure 11: En haut: approximation d'une trajectoire équatoriale d'un proton de 200 MeV obtenue par la méthode de Cash-Karp avec le facteur d'erreur relative $\varepsilon = 10^{-6}$. En bas: comparaison des rayons des points obtenus par cette méthode numérique avec les rayons prévus par la formule d'Avrett.

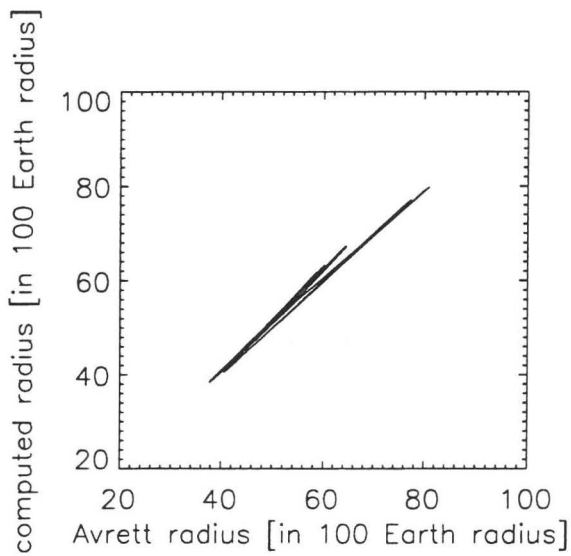
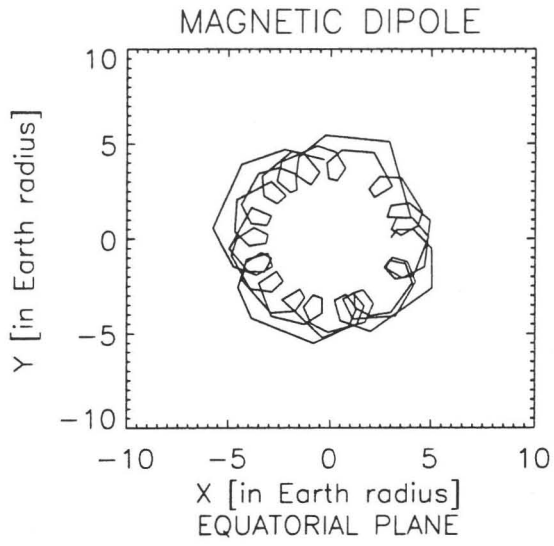


Figure 12: En haut: approximation d'une trajectoire équatoriale d'un proton de 500 MeV obtenue par la méthode de Cash-Karp avec le facteur d'erreur relative $\varepsilon = 10^{-2}$. En bas: comparaison des rayons des points obtenus par cette méthode numérique avec les rayons prévus par la formule d'Avrett.

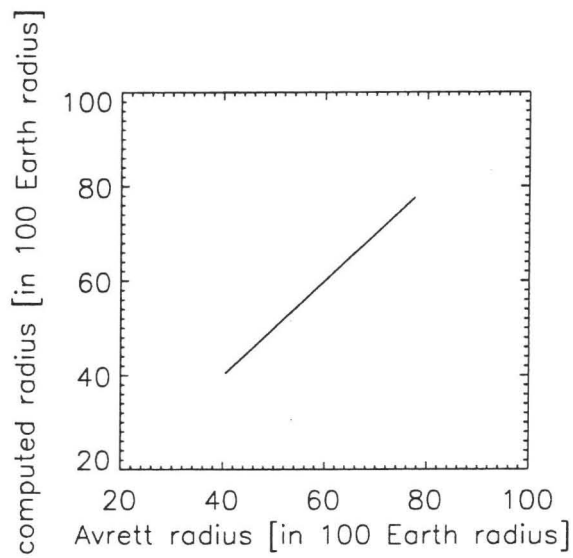
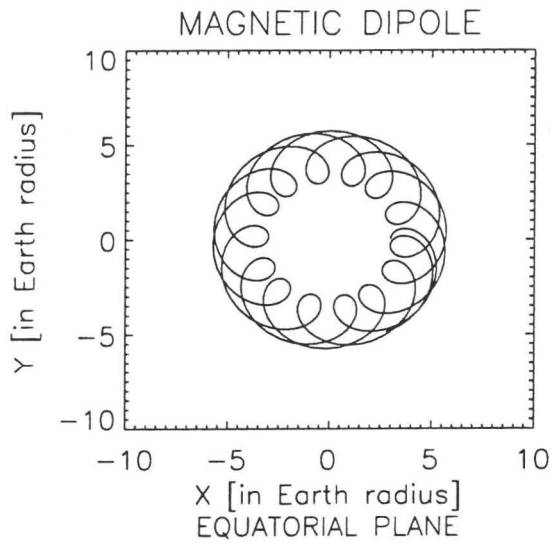


Figure 13: En haut: approximation d'une trajectoire équatoriale d'un proton de 500 MeV obtenue par la méthode de Cash-Karp avec le facteur d'erreur relative $\varepsilon = 10^{-6}$. En bas: comparaison des rayons des points obtenus par cette méthode numérique avec les rayons prévus par la formule d'Avrett.

Test numérique sur le cercle

Nous avons mis les méthodes numériques de Cash-Karp et Bulirsch-Stoer à l'épreuve de la trajectoire circulaire du cas $\gamma = -1$, et ce pour des protons de 10 MeV (correspondant au rayon $r_0 = C_{st} = 132141\text{km} = 20.7R_T$) et 100 MeV ($r_0 = C_{st} = 73448\text{km} = 11.5R_T$), et un intervalle temporel de 100 secondes.

La figure 14 correspond au proton de 10 MeV, dont la trajectoire circulaire a été approchée par la méthode de Cash-Karp pour $\varepsilon = 10^{-6}$. La figure 15 correspond au proton de 100 MeV, dont la trajectoire circulaire a été approchée par la méthode de Bulirsch-Stoer pour $\varepsilon = 10^{-10}$.

Dans les deux cas, les graphes du rayon calculé par intégration numérique et du rayon analytique d'Avrett des points atteints en fonction du temps devraient se réduire à la constante C_{st} (prise comme unité de longueur). Dans les deux cas, il y a d'abord un écart *stable* à cette norme (stabilité qui semble correspondre au fait que la particule se déplace dans la zone intérieure qui lui est permise; ceci est reflété par le synchronisme du rayon numérique et du rayon d'Avrett), puis un écart *instable* (instabilité qui semble correspondre au fait que la particule se perd dans la zone extérieure qui lui est permise, ouverte à l'infini; ceci est reflété par l'asynchronisme des deux rayons).

Un programme pour champs électromagnétiques généraux

Signalons l'intéressant programme de Richard Mairesse et Alain Moussiaux (4) sur les trajectoires de particules dans un champ électromagnétique général, mais exprimé explicitement en fonction du temps et des coordonnées cartésiennes. Il pourrait être appliqué avec fruit au cas d'un dipôle exprimé en coordonnées cartésiennes.

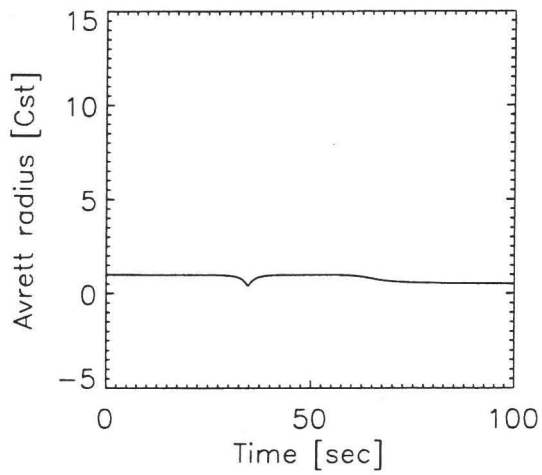
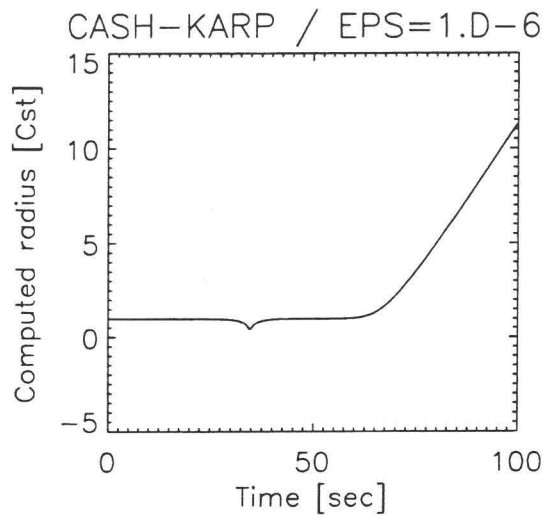


Figure 14: Test du cercle: graphes des rayons (en haut, rayon numérique; en bas, rayon analytique d'Avrett) des points atteints par Cash-Karp en fonction du temps, pour un proton de 10 MeV ($C_{st} = 132141$ km).

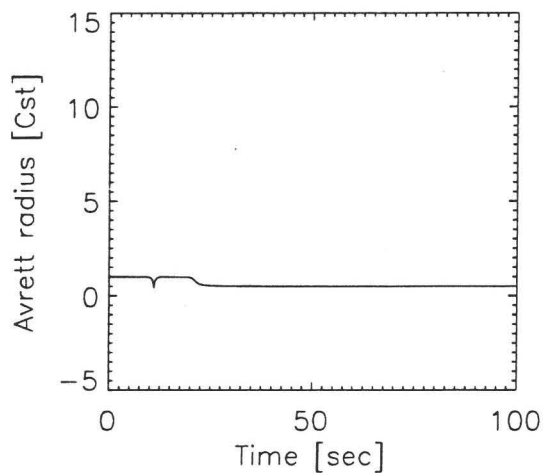
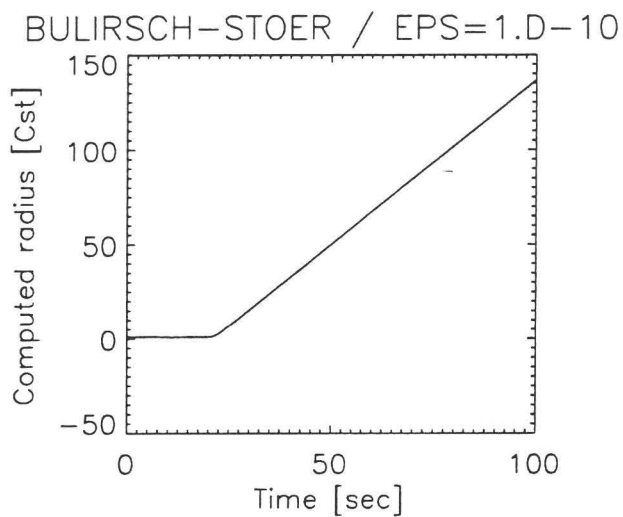


Figure 15: Test du cercle: graphes des rayons (en haut, rayon numérique; en bas, rayon analytique d'Avrett) des points atteints par Bulirsch-Stoer en fonction du temps, pour un proton de 100 MeV ($C_{st} = 73448$ km).

References

- [1] Avrett, E.H., *Particle motion in the equatorial plane of a dipole magnetic field*, Journal of Geophysical Research, **67** (1962), p53–58.
- [2] Deuffhard, P., *Order and stepsize control in extrapolation methods*, Numerische Mathematik, **41** (1983), p399–422.
- [3] Gear, C.W., *Numerical initial value problems in ordinary differential equations*, Prentice-Hall, Inc., Englewood Cliffs, New Jersey, 1971.
- [4] Mairesse, R., Moussiaux A., *Mouvement d'une particule chargée dans un champ électromagnétique général*, Physialia Magazine, **18** (1996), p37–45.
- [5] Press, W.H., Teukolsky, S.A., Vetterling, W.T., Flannery, B.P., *Numerical recipes in fortran*, Cambridge Press University, 1992.
- [6] Störmer, C., *On the trajectories of electric particles in the field of a magnetic dipole with applications to the theory of cosmic radiation*, University observatory, Oslo, publication 10, 1934.