

Résumé : On s'intéresse à un système différentiel pouvant modéliser une chaîne d'ADN comme un ensemble de pendules oscillants. On discute de la possibilité d'avoir des solutions périodiques et de trouver un schéma numérique adapté pour le système hamiltonien.

Mots clefs : Équations différentielles ordinaires. Aspects numériques du problème de Cauchy.

- *Il est rappelé que le jury n'exige pas une compréhension exhaustive du texte. La présentation, bien que totalement libre, doit être organisée et le jury apprécie qu'un plan soit annoncé en préliminaire. L'exposé doit être construit en évitant la paraphrase et mettant en lumière les connaissances, à partir des éléments du texte. Il doit contenir des illustrations informatiques réalisées sur ordinateur, ou, à défaut, des propositions de telles illustrations. Des pistes de réflexion, indicatives et largement indépendantes les unes des autres, vous sont proposées en fin de texte.*

1. Chaînes d'oscillateurs couplés : un modèle pour l'ADN

Dans ce texte, nous modélisons une chaîne d'ADN à l'aide d'un système d'équations différentielles. L'ADN est une double hélice dont les deux brins sont composés par un squelette sucre-phosphate auquel les bases (A : Adénine, T : Thymine, G : Guanine, C : Cytosine) sont attachées comme les barreaux d'une échelle. Les deux brins sont liés par des liaisons hydrogènes entre bases *appariées* : (A) avec (T) et (G) avec (C).

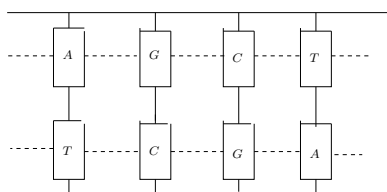


FIGURE 1. Modèle simplifié d'une chaîne d'ADN.

Si on désigne par u_n l'écart entre les deux branches d'ADN à la position $n \in \mathbb{Z}$, le modèle s'écrit

$$(1) \quad \ddot{u}_n + V'(u_n) = k(u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1}), \quad \forall n \in \mathbb{Z},$$

où $V(u) = \frac{u^2}{2} - \frac{u^3}{3}$ et $k \in \mathbb{Z}$. Le potentiel V traduit le comportement d'une paire de bases appariées tandis que k est une constante de couplage au plus proche voisins. On s'intéresse dans ce texte à la possibilité d'avoir un phénomène dit de *localisation spatiale*: ceci se traduit par le fait qu'un ou plusieurs oscillateurs ont un mouvement de grande amplitude tandis que les autres ont un mouvement de petite amplitude. En effet, une des phases importantes de la dynamique de la chaîne d'ADN concerne les phases de réplication au cours desquelles les deux brins de l'ADN se séparent en un endroit précis. Pour le modèle en question, cela signifie qu'un petit nombre de paires de bases oscillent avec une grande amplitude (elles sont donc quasiment détachées) pendant un temps suffisamment "long" (au regard de la période caractéristique de vibration de la chaîne d'ADN). Il peut alors y avoir rupture de la liaison entre deux bases complémentaires.

En changeant le potentiel V , ce type de système permet de modéliser un système de N pendules oscillants de longueur l , soumis à la force de gravité et couplés par des ressorts de constante de raideur k exerçant un couplage linéaire. En notant θ_n l'angle que forme le n -ième pendule avec la verticale, on obtient

$$(2) \quad \ddot{\theta}_n + \omega^2 \sin(\theta_n) = k(\theta_{n+1} - 2\theta_n + \theta_{n-1}),$$

où $\omega^2 = g/l$ et g désigne la constante de gravité. Ici, on peut choisir $V(\theta) = \omega^2 (1 - \cos(\theta))$.

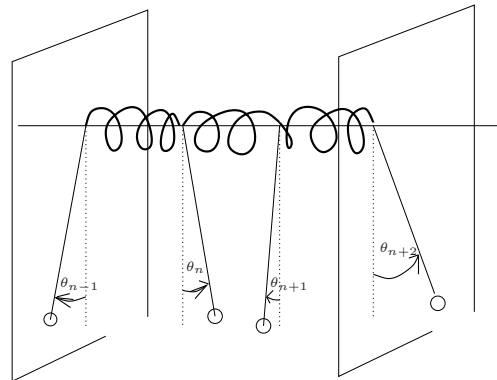


FIGURE 2. Chaîne de pendules couplés par des ressorts.

Nous nous pencherons ici sur le cas plus simple de deux pendules oscillants couplés pour lequel nous étudierons l'existence de solution périodique.

2. Le système de deux pendules couplés

On considère un système de deux pendules identiques couplés par un ressort de constante de raideur $k \in \mathbb{R}$. Physiquement, k est un nombre positif, mais le cas où $k < 0$ est aussi mathématiquement intéressant, bien que modélisant une situation un peu différente.

Si on note θ_1 (respectivement θ_2) l'angle mesuré à partir de la verticale pour l'oscillateur 1 (resp. l'oscillateur 2), les équations du mouvement sont données par

$$(3) \quad \ddot{\theta}_1 + \sin(\theta_1) = k(\theta_2 - \theta_1), \quad \ddot{\theta}_2 + \sin(\theta_2) = k(\theta_1 - \theta_2).$$

On cherche à construire des solutions périodiques, par exemple en considérant des oscillations en phase $\theta_1 = \theta_2$ ou des oscillations en opposition de phase $\theta_1 = -\theta_2$. Dans le cas d'oscillations en phase, le problème revient à trouver les solutions périodiques de l'équation

$$(4) \quad \ddot{\theta} + \sin(\theta) = 0.$$

L'énergie mécanique associée à (4), $E = \frac{\dot{\theta}^2}{2} + 1 - \cos(\theta)$, est une constante du mouvement. Cette propriété permet de dresser le portrait de phase de (4) et de paramétrer les solutions périodiques par leur amplitude maximale θ_m , atteinte lorsque la vitesse $\dot{\theta}$ est nulle. En par-

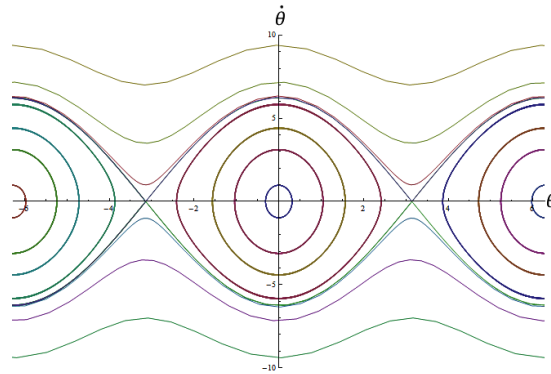


FIGURE 3. Allure du portrait de phase pour le pendule simple.

ticulier, on a une formule explicite pour la période d'oscillation $T(\theta_m)$. La conservation de l'énergie implique

$$(5) \quad \dot{\theta}^2 = 2(\cos(\theta) - \cos(\theta_m)).$$

Pour le pendule, le temps écoulé pour passer de la position $\theta = \theta_m$ à $\theta = 0$ correspond à un quart de la période. Pendant cet intervalle de temps, θ est strictement décroissante. De plus θ est de classe \mathcal{C}^1 (c'est une conséquence du théorème de Cauchy-Lipschitz). En appliquant le théorème du changement de variable, on montre que la période $T(\theta_m)$ est donnée par

$$(6) \quad \frac{T(\theta_m)}{4} = \int_0^{T(\theta_m)/4} dt = - \int_0^{T(\theta_m)/4} \frac{\dot{\theta} dt}{\sqrt{2(\cos(\theta) - \cos(\theta_m))}} = \int_0^{\theta_m} \frac{d\theta}{\sqrt{2(\cos\theta - \cos\theta_m)}}.$$

La fonction $T : \theta_m \mapsto T(\theta_m)$ est strictement croissante et vérifie

$$(7) \quad \lim_{\theta_m \rightarrow 0} T(\theta_m) = 2\pi, \quad \lim_{\theta_m \rightarrow \pi} T(\theta_m) = +\infty.$$

Dans le cas des pendules en opposition de phase, on cherche les solutions périodiques de

$$(8) \quad \ddot{\theta} + \sin(\theta) + 2k\theta = 0.$$

L'énergie $E_k = \frac{\dot{\theta}^2}{2} + 1 - \cos(\theta) + k\theta^2$ est conservée. Une étude du portrait de phase montre qu'il ne peut plus exister de solutions périodiques autour de l'équilibre lorsque le couplage est en dessous d'un seuil critique $k < k_c < 0$.

Dans les exemples que nous venons d'étudier, les oscillateurs ont des oscillations *de même amplitude*. La question est de savoir s'il peut exister des solutions périodiques *dissymétriques*, les pendules ayant des amplitudes très différentes.

3. Simulations numériques

Le système d'oscillateurs couplés étant difficile à étudier complètement, on souhaite analyser la dynamique de ce système au moyen de simulations numériques. Si on considère le système (3), on peut remarquer que la quantité – dite hamiltonien du système –

$$(9) \quad H = \frac{\dot{\theta}_1^2}{2} + \frac{\dot{\theta}_2^2}{2} + (1 - \cos(\theta_1)) + (1 - \cos(\theta_2)) + k \frac{(\theta_1 - \theta_2)^2}{2}$$

est conservée au cours du temps; on souhaiterait utiliser des schémas numériques préservant autant que possible cette propriété.

Commençons par étudier le cas d'un pendule simple et linéaire décrit par

$$(10) \quad \ddot{\theta} + \theta = 0.$$

Ici, la quantité conservée est donnée par $E(\theta, \dot{\theta}) = \frac{1}{2}\dot{\theta}^2 + \frac{1}{2}\theta^2$. En posant $X = {}^t(\theta, \dot{\theta})$, on peut écrire (10) sous la forme $\dot{X} = AX$. On remarque que les schémas d'Euler, explicite ou implicite, ne conservent pas E . Pour le schéma d'Euler explicite, l'énergie croît exponentiellement au cours du temps et le pendule tourne de plus en plus vite autour de son axe! Pour le schéma d'Euler implicite, l'énergie décroît exponentiellement et le pendule retourne à sa position d'équilibre. Dans les deux cas, la simulation numérique ne rend pas bien compte du comportement qualitatif du système.

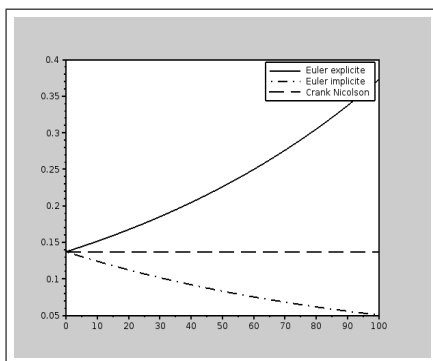


FIGURE 4. Comparaison pour (10).

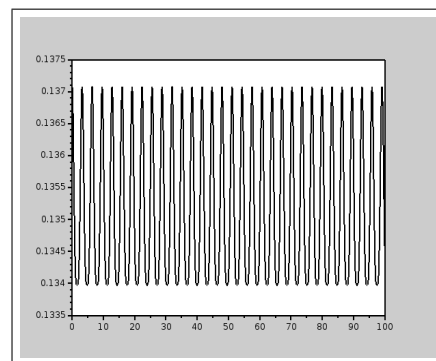


FIGURE 5. Énergie pour (4).

Une stratégie intermédiaire consiste à prendre une “moyenne” de ces deux schémas : c’est le schéma de Crank-Nicolson défini par

$$(11) \quad X_{n+1} = X_n + \frac{h}{2}(AX_n + AX_{n+1}),$$

où $h > 0$ est un pas de temps fixé, vérifie $E(\theta_{n+1}, \dot{\theta}_{n+1}) = E(\theta_n, \dot{\theta}_n)$. Ces résultats sont illustrés par la figure 4 où on a choisi un pas de temps $h = 0.01$ pour les méthodes d’Euler et $h = 0.1$ pour la méthode de Crank-Nicolson. Les conditions initiales sont $\theta(0) = \frac{\pi}{6}$ et $\dot{\theta}(0) = 0$.

La situation est un peu plus compliquée dans les cas non linéaires (4) : l’énergie croît au cours du temps avec Euler explicite et décroît avec Euler implicite mais avec Crank-Nicolson, elle oscille autour d’une valeur moyenne, voir figure 5. Qualitativement, ce comportement est meilleur et on peut adopter le schéma de Crank-Nicolson pour simuler le système (3). Les figures 6-7 décrivent le comportement des pendules pour les données $\theta_1^0 = \theta_m = \pi/6$ et $\theta_2^0 = 0$ et un couplage faible $k = -0.001$. On voit que les pendules oscillent avec des amplitudes très différentes : le phénomène de localisation est bien mis en évidence même si les oscillations obtenues ne sont pas exactement périodiques en temps.

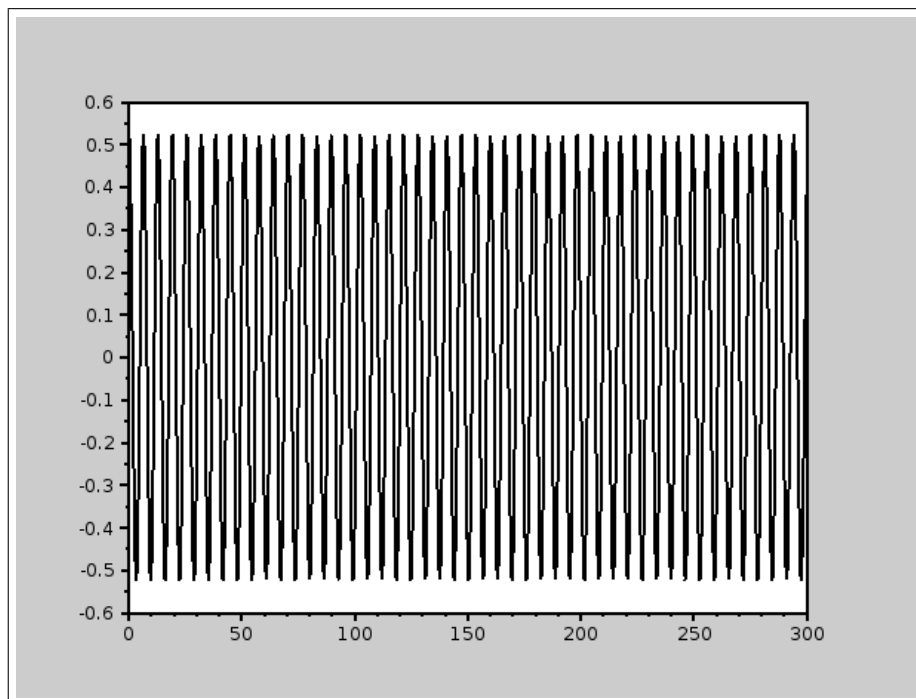


FIGURE 6. Pendule 1.

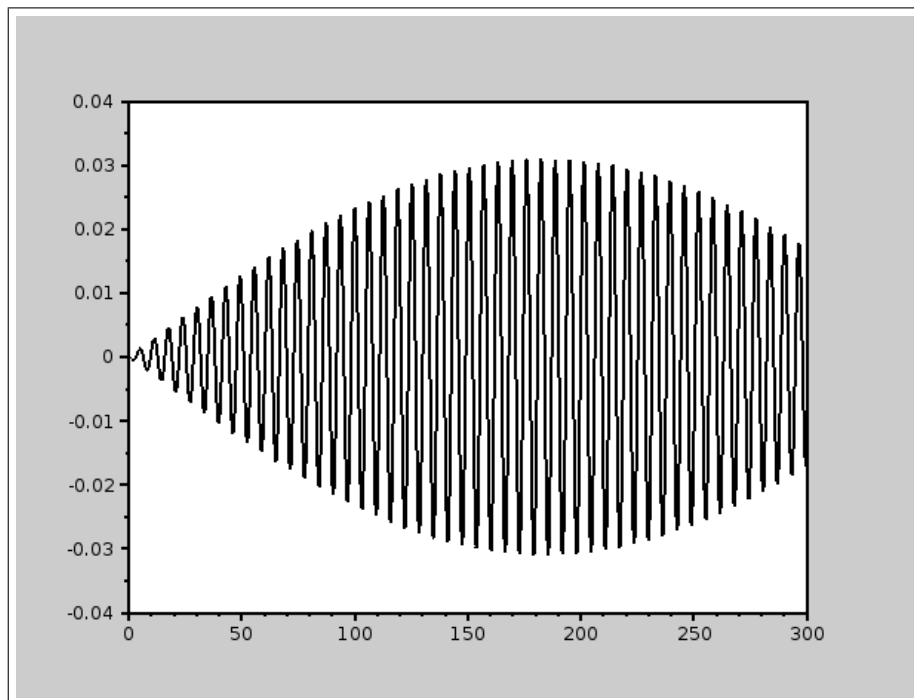


FIGURE 7. Pendule 2.

Suggestions et pistes de réflexion

- *Les pistes de réflexion suivantes ne sont qu'indicatives et il n'est pas obligatoire de les suivre. Vous pouvez choisir d'étudier, ou non, certains des points proposés, de façon plus ou moins approfondie, mais aussi toute autre question à votre initiative. Vos investigations comporteront une partie traitée sur ordinateur et, si possible, des représentations graphiques de vos résultats. À défaut, si vos illustrations informatiques n'ont pas abouti, il est conseillé d'expliquer ce que vous auriez souhaité mettre en œuvre.*
 - Détailler l'obtention des équations du mouvement de deux pendules couplés.
 - Dresser le portrait de phase de l'équation (8).
 - Discuter de l'influence des trois schémas cités sur la simulation numérique de (3).
 - Comparer les résultats obtenus pour les trois schémas sur le cas du pendule linéaire (on doit retrouver les résultats de la figure 4) puis sur le cas du pendule simple non-linéaire.