

Laurent Dietrich

Résolution approchée de systèmes dynamiques hamiltoniens Examen de TP – durée 2h30

Créer dans votre répertoire `M1_Modélisation` un répertoire `TPexam`, dans lequel seront placés les fichiers relatifs à ce TP. À la fin du TP, il vous sera demandé d'envoyer tout ce dossier par email à Laurent Dietrich (laurent.dietrich@math.univ-toulouse.fr) et Fanny Delebecque (fanny.delebecque@math.univ-toulouse.fr). Vous pouvez compresser tout ce dossier en une seule archive, en vous mettant dans votre dossier `M1_Modélisation` dans un terminal et en tapant la commande

```
tar -zcvf tpname_votrenom.tar.gz /TPexam
```

Sur votre copie, vous pourrez vous référer à vos figures et vos programmes Matlab en écrivant leurs noms de fichiers (vous pouvez sauver vos figures en .png en faisant enregistrer et en choisissant le format .png lors de leur affichage). Une attention particulière sera portée à la clarté des illustrations (titres, axes, positions initiales, légendes, ...)

Merci de ne pas quitter la salle de TP sans avoir eu confirmation que L. Dietrich a bien reçu votre email.

1 Systèmes dynamiques hamiltoniens

Le but de ce texte est l'étude de systèmes différentiels ordinaires de dimension $2n$ qui s'écrivent sous la forme suivante, dite *hamiltonienne* :

$$\begin{cases} \frac{dq_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_i}(\mathbf{q}, \mathbf{p}), \quad \forall i \in \{1, \dots, n\}, \\ \frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q_i}(\mathbf{q}, \mathbf{p}), \quad \forall i \in \{1, \dots, n\} \end{cases} \quad (1)$$

où on note $\mathbf{q} = (q_1, \dots, q_n)$ et $\mathbf{p} = (p_1, \dots, p_n)$ et où H est une fonction régulière donnée des $2n$ variables $q_1, \dots, q_n, p_1, \dots, p_n$ appelée *hamiltonien du système*. On se reportera aux sections 2 et 3 pour avoir des exemples de problèmes issus de la mécanique modélisés par des systèmes hamiltoniens.

Lorsqu'elle existe et qu'elle est unique, la solution à l'instant t de (1) pour les données initiales \mathbf{q}_0 et \mathbf{p}_0 est notée $(\mathbf{q}(t), \mathbf{p}(t)) = \varphi_t^H(\mathbf{q}_0, \mathbf{p}_0)$. L'application φ_t^H est appelée le *flot à l'instant t* du système. La forme particulière de ces systèmes induit des propriétés

de conservation particulières, notamment la conservation du Hamiltonien H au cours du temps, c'est-à-dire :

$$\forall t \geq 0, \forall (\mathbf{q}_0, \mathbf{p}_0) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n, H(\varphi_t^H(\mathbf{q}_0, \mathbf{p}_0)) = H(\mathbf{q}_0, \mathbf{p}_0). \quad (2)$$

2 Premier exemple : le pendule simple

On considère ici le mouvement dans un plan vertical d'un pendule simple constitué d'une tige rigide sans masse de longueur ℓ fixée à une extrémité, l'autre étant occupée par un point matériel de masse m (voir Figure 1). On note $\mathbf{g} = (0, -g)^\top$ l'accélération de la gravité.

Le point matériel est soumis à son poids $\mathbf{P} = m\mathbf{g}$ et à la force de rappel \mathbf{R} exercée par la tige à tout instant. En utilisant le principe fondamental de la dynamique, on trouve l'équation du pendule simple satisfaite par l'angle θ entre la tige et la verticale :

$$\frac{d^2\theta}{dt^2} + \frac{g}{\ell} \sin \theta = 0. \quad (3)$$

Introduisons maintenant la quantité $p = m\ell^2 \frac{d\theta}{dt}$ (appelée *moment cinétique du système*) et considérons le hamiltonien suivant :

$$H(\theta, p) = \frac{1}{2m\ell^2} p^2 + mg\ell(1 - \cos \theta),$$

qui n'est autre que l'énergie totale (cinétique + potentielle) du pendule à tout instant. On constate alors que l'équation du second ordre (3) est équivalente au système différentiel d'ordre 1 suivant :

$$\begin{cases} \frac{d\theta}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p}(\theta, p), \\ \frac{dp}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial \theta}(\theta, p) \end{cases} \quad (4)$$

qui est bien de la forme (1) pour $n = 1$.

Dans le cas où l'on s'intéresse seulement au comportement du pendule au voisinage de l'équilibre, c'est-à-dire quand l'angle θ est voisin de 0 (encore appelée *approximation petits angles*), on peut alors linéariser les équations. Une façon de le faire est de considérer le système hamiltonien (4) en remplaçant le hamiltonien initial H par le hamiltonien linéarisé au voisinage de l'équilibre défini par

$$H_{lin}(\theta, p) = \frac{1}{2m\ell^2} p^2 + mg\ell \frac{\theta^2}{2}.$$

Le système ainsi obtenu s'écrit

$$\begin{cases} \frac{d\theta}{dt} = \frac{\partial H_{lin}}{\partial p} = \frac{1}{m\ell^2} p, \\ \frac{dp}{dt} = -\frac{\partial H_{lin}}{\partial \theta} = -mg\ell\theta. \end{cases} \quad (5)$$

Il est bien entendu équivalent à l'équation de l'oscillateur harmonique $\frac{d^2\theta}{dt^2} + \frac{g}{\ell}\theta = 0$ dont la solution exacte est connue explicitement.

3 Deuxième exemple : le problème de Kepler

On s'intéresse ici au mouvement d'un corps céleste léger (une planète de masse $m = 1$) autour d'un corps lourd (le soleil de masse $M \gg 1$) supposé immobile. On se place dans un repère dont le soleil est le centre et on note $\mathbf{q} \in \mathbb{R}^3$ la position de la planète dans ce repère (voir figure 1). D'après la loi de la gravitation universelle, on sait que la force de gravitation (attractive) exercée par le soleil sur la planète est dirigée suivant la droite qui joint les deux corps et que son intensité est proportionnelle au produit de leurs masses et inversement proportionnelle au carré de la distance qui les sépare.

Dans ces conditions, les équations du mouvement s'écrivent :

$$\frac{d^2 \mathbf{q}}{dt^2} = -\frac{\mu \mathbf{q}}{|\mathbf{q}|^3}, \quad (6)$$

où $\mu = GM$, G étant la constante de la gravitation universelle et $|\cdot|$ désignant la norme euclidienne usuelle. Ceci s'écrit également sous la forme hamiltonienne (1) avec $n = 3$, si on définit le hamiltonien

$$H(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = \frac{1}{2} |\mathbf{p}|^2 - \frac{\mu}{|\mathbf{q}|}. \quad (7)$$

Il est à noter que ce système, appelé *système de Kepler* a un invariant géométrique indépendant de H . En effet, on constate que la quantité vectorielle appelée *moment cinétique* $\mathbf{\Lambda}(t) = \mathbf{q}(t) \wedge \mathbf{p}(t)$ est conservée au cours du temps. Ceci implique en particulier que toute trajectoire du système de Kepler est entièrement contenue dans un plan. On est donc ramené à l'étude du système (1) pour $n = 2$ en restreignant le hamiltonien H défini par (7) aux vecteurs bidimensionnels $\mathbf{p}, \mathbf{q} \in \mathbb{R}^2$. L'invariant Λ peut alors être vu comme un invariant scalaire. Le problème (6) a la propriété agréable de pouvoir être résolu explicitement (ou presque). On peut en effet démontrer que toute trajectoire est contenue dans une conique déterminée par les données initiales et que si cette conique est une ellipse, alors le mouvement est périodique.

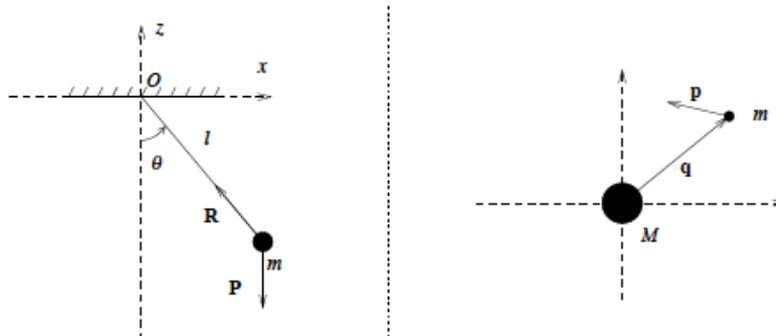


FIG. 1. Le pendule (à gauche) et le système Soleil/Planète (à droite)

4 Méthodes numériques

Les modèles présentés précédemment sont des systèmes différentiels du premier ordre pour lesquels de très nombreuses méthodes numériques classiques sont disponibles. La question naturelle que l'on se pose ici est de savoir si ces méthodes préservent les propriétés de conservation vérifiées par les équations du système (1), notamment la conservation du hamiltonien (2). Considérons un schéma numérique à un pas pour le problème (1) défini par une application $\Psi_{\Delta t}^H : (\mathbf{q}^k, \mathbf{p}^k) \mapsto (\mathbf{q}^{k+1}, \mathbf{p}^{k+1})$. L'équivalent discret de la propriété de conservation (2) s'écrit :

$$\forall k, H(\mathbf{q}^{k+1}, \mathbf{p}^{k+1}) = H(\mathbf{q}^k, \mathbf{p}^k) \text{ ou encore } H \circ \Psi_{\Delta t}^H = H \text{ pour tout } \Delta t > 0 \text{ petit.} \quad (8)$$

On propose de s'intéresser ici aux méthodes classiques suivantes : les méthodes d'Euler explicite, implicite et de Runge-Kutta d'ordre 4. Sur le système linéaire simple (5), on peut effectuer tous les calculs à la main et on peut démontrer le comportement suivant des méthodes vis à vis de la propriété de conservation (2) :

| Méthode | Hamiltonien |
|-----------------------|----------------------|
| Euler explicite | croît vers $+\infty$ |
| Euler implicite | diminue vers 0 |
| Runge Kutta d'ordre 4 | croît vers $+\infty$ |

Même si on peut observer une situation numérique meilleure pour la méthode de Runge-Kutta d'ordre 4, il apparaît que le fait de considérer une méthode d'ordre 4 ne règle pas pour autant le problème qualitatif de croissance vers l'infini du hamiltonien, même si cela se fait à une échelle de temps plus grande. Aucune des trois méthodes proposées ne possède un comportement satisfaisant.

On propose donc ici une nouvelle méthode dite *semi-implicite* appelée *méthode d'Euler symplectique* et qui s'écrit :

$$\begin{cases} q_i^{k+1} = q_i^k + \Delta t \frac{\partial H}{\partial p_i}(\mathbf{q}^{k+1}, \mathbf{p}^k), & \forall i \in \{1, \dots, n\} \\ p_i^{k+1} = p_i^k - \Delta t \frac{\partial H}{\partial q_i}(\mathbf{q}^{k+1}, \mathbf{p}^k), & \forall i \in \{1, \dots, n\} \end{cases} \quad (9)$$

Cette méthode est implicite d'ordre 1 mais devient explicite dès que le hamiltonien est séparé, c'est-à-dire de la forme $H(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = H_1(\mathbf{q}) + H_2(\mathbf{p})$, ce qui est le cas par exemple pour le modèle du pendule (linéaire ou non linéaire). Concernant la conservation du hamiltonien discret, on remarque que, si la propriété (8) n'est pas vérifiée par ce nouveau schéma, la situation est tout de même nettement meilleure qu'avec les méthodes d'Euler usuelles présentées plus haut.

En effet, on constate dans le cas du pendule, que le hamiltonien $H(\theta^k, p^k)$ reste proche du hamiltonien initial même en temps long alors que pour les autres méthodes, celui-ci explose ou tend vers 0. De façon plus concrète, on observe en effet qu'il existe un *hamiltonien approché*

$$H_{app}(\theta, p) = H(\theta, p) + \frac{1}{2} \Delta t \frac{\partial H}{\partial p}(\theta, p) \frac{\partial H}{\partial \theta}(\theta, p) \quad (10)$$

qui, lui, est conservé par la méthode d'Euler symplectique appliquée au problème du pendule linéaire.

Dans le cas du pendule non linéaire (3), la méthode d'Euler symplectique a le même type de comportement vis à vis du hamiltonien, et reste explicite. Cependant, dans ce cadre, le hamiltonien approché défini par (10) n'est plus exactement conservé, mais on peut démontrer que

$$|H_{app}(\theta^k, p^k) - H_{app}(\theta^0, p^0)| \leq C(\Delta t)^2, \quad \forall k \geq 1$$

ce qui reste satisfaisant.

Enfin, dans le cas de la modélisation du problème de Kepler, les résultats obtenus par les méthodes numériques traditionnelles peuvent être catastrophiques, notamment si on s'intéresse à un temps de calcul assez long (auquel cas il peut être pénalisant de prendre un pas de temps Δt trop petit). On peut ainsi obtenir des trajectoires *supposément elliptiques* qui finissent par s'écraser sur le soleil ou au contraire qui échappent à la force d'attraction gravitationnelle et fuient à l'infini. La méthode d'Euler symplectique permet d'obtenir des trajectoires proches des trajectoires elliptiques attendues pour un bon choix de données initiales. On peut vérifier enfin qu'elle préserve exactement le moment cinétique.

5 Questions

Exercice 1. – Décrire sur votre copie un algorithme pour la résolution du système hamiltonien écrit sous forme générale (1) par les méthodes d'Euler explicite et de Runge Kutta d'ordre 4, le hamiltonien H et ses dérivées étant supposés connus. On fera particulièrement attention au fait que \mathbf{p} et \mathbf{q} peuvent avoir une dimension strictement plus grande que 1.

- Définir sur votre copie les fonctions donnant les hamiltoniens pour le modèle du pendule simple H_{pen} , du pendule linéaire H_{lin} et du problème de Kepler H_{kep} ainsi que leurs dérivées.
- En déduire deux fonctions EulerE.m et RK4.m que vous implémenterez en Matlab, permettant la résolution de (1) par les méthodes d'Euler explicite et de Runge Kutta d'ordre 4. On les testera sur les modèles du pendule, du pendule linéaire et de Kepler en définissant les hamiltoniens H_{pen} , H_{lin} et H_{kep} adaptés dans des fonctions Matlab eux aussi. Affichez une trajectoire générique dans chaque cas en choisissant, précisant, et justifiant vos paramètres. Dans le cas Kepler, essayez de vous rapprocher d'une trajectoire elliptique : décrire les défauts de votre trajectoire selon les 2 méthodes et leurs différences.

Exercice 2. Tracer l'évolution au cours du temps du hamiltonien pour chacune des 2 méthodes dans le cas du pendule simple et du pendule linéaire, interprétez vos résultats.

Exercice 3. Proposer une illustration du mouvement du pendule simple au cours du temps.

Exercice 4. Écrire sur votre copie le schéma d'Euler symplectique (9) pour le problème du pendule simple et le problème de Kepler en explicitant à chaque fois les dérivées de H . Que peut-on en conclure sur le caractère explicite ou implicite de la méthode, sous quelles conditions ?

Implémentez alors en Matlab la méthode d'Euler symplectique pour chacun de ces deux problèmes.

Exercice 5. Tracer l'évolution au cours du temps du hamiltonien pour la méthode d'Euler symplectique dans le cas du pendule linéaire et du pendule simple, interprétez, et comparez aux résultats de l'exercice 2.

Exercice 6. Démontrer analytiquement que la méthode d'Euler symplectique conserve le moment cinétique Λ .

Question bonus : dans le cas du modèle de Képler, avec une vitesse initiale orthogonale à la position initiale, décrire l'influence de la norme du vecteur vitesse initiale sur l'excentricité des ellipses obtenues et la précision des résultats. Ce système est-il sensible aux données initiales ? En partant d'une trajectoire assez peu excentrique et bien précise (jouez sur dt et T avec $\mu = 10, q_0 = (1, 0), p_0 = 3 \times (0, 1)$) observer qu'en changeant brusquement μ (ex. : le multiplier de l'ordre de 2, 3, 5, 10 fois) sans changer les paramètres de la méthode, la solution numérique devient chaotique (même avec la méthode d'Euler symplectique).

