

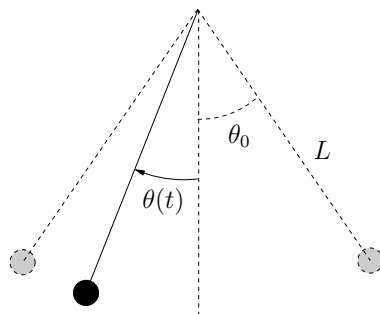
## TP 1 : méthodes numériques pour le calcul de trajectoires périodiques

*où l'on verra que des méthodes d'ordre élevé peuvent être utiles, mais pas sans défaut ...*

---

### 1 Le pendule

On considère un pendule constitué d'une masse  $m$ , suspendue à une tige rigide de longueur  $L$ . Le pendule est écarté de sa position d'équilibre d'un angle  $\theta_0$  et lâché avec une vitesse initiale  $\dot{\theta}_0$  nulle. Si l'on néglige les effets du frottement, la loi de Newton ou la conservation



de l'énergie totale permettent de montrer que le pendule va être animé d'un mouvement périodique oscillant entre  $\theta_0$  et  $-\theta_0$ , et aussi que l'angle  $\theta(t)$  que fait le pendule avec la verticale suit l'équation différentielle

$$\theta''(t) = -\frac{g}{L} \sin \theta(t),$$

où  $g$  est l'accélération gravitationnelle.

Cette équation ne peut être résolue « à la main », c'est-à-dire que la solution ne peut s'exprimer à l'aide des fonctions usuelles. Si l'angle initial  $\theta_0$  est petit, alors  $\theta(t)$  reste petit pour tout temps : on peut alors approcher  $\sin \theta(t)$  par  $\theta(t)$  et ainsi obtenir l'équation linéaire approchée

$$\theta''(t) = -\frac{g}{L} \theta(t),$$

qui a pour solution  $\theta(t) = \theta_0 \cos \sqrt{\frac{g}{L}}t$ . La période des oscillations de petite amplitude peut ainsi être approchée par la période des oscillations linéaires qui vaut  $2\pi\sqrt{L/g}$ . Cette approximation permet de concevoir un pendule qui va « compter les secondes » : en considérant que l'accélération gravitationnelle vaut environ  $10 \text{ m.s}^{-2}$ , et en prenant  $L = 1 \text{ m}$ , la demi période des oscillations linéaires vaut en effet environ 1 s.

Pour résoudre l'équation non linéaire, il faut utiliser une méthode numérique, et nous allons voir que cela pose quelques problèmes.

Tout d'abord, mettons l'équation du pendule sous forme d'un système du premier ordre : en posant  $\phi(t) = \theta'(t)$ , on obtient

$$\begin{aligned}\theta'(t) &= \phi(t) \\ \phi'(t) &= -\frac{g}{L} \sin \theta(t),\end{aligned}\tag{1}$$

avec la donnée initiale  $\theta(0) = \theta_0$  et  $\phi(0) = 0$ .

**Question 1. Mise sous forme générique.** Soit  $X = (\theta, \phi)$  : mettre le système précédent sous la forme  $X'(t) = F(X(t))$ . Autrement dit, écrire sur le papier la définition de la fonction  $F(X)$  en fonction des composantes de  $X$ .

**Question 2. Schéma d'Euler explicite.** Dans le programme `pendule`, programmez la résolution du système par le schéma d'Euler explicite. La fonction  $F(X)$  sera programmée dans un module. Tous les réels seront de type double précision.

Le temps maximum de simulation sera 4 fois la période des oscillations linéaires. L'angle initial sera  $\theta_0 = \pi/10$ . Le pas de temps sera de 0.1 s.

Les résultats peuvent se visualiser sous différentes formes :

- position  $(x(t), y(t)) = (L \sin \theta(t), L(1 - \cos \theta(t)))$  de la masse en fonction du temps (avec une origine au point d'équilibre stable du pendule) : on visualise ainsi la trajectoire réelle du pendule, mais le résultat n'est pas très lisible. Sauvegardez cette position en fonction du temps dans le fichier `trajectoireEE.dat`.
- angle  $\theta(t)$  en fonction du temps : on visualise bien les éventuels problèmes (non périodicité, instabilité, etc.). Sauvegardez cet angle en fonction du temps dans le fichier `angleEE.dat`.
- plan des phases, c'est-à-dire le point d'abscisse  $\theta(t)$  et d'ordonnée  $\phi(t)$  en fonction du temps : la périodicité de la solution se traduit par une courbe fermée. Sauvegardez cette courbe dans le fichier `phaseEE.dat`.
- énergie totale : c'est la somme de l'énergie cinétique  $E_c(t) = \frac{1}{2}m(L\phi(t))^2$  et de l'énergie potentielle  $E_{pot}(t) = mgL(1 - \cos \theta(t))$ . On peut montrer que cette énergie totale est constante. La courbe de cette énergie en fonction du temps est un bon test de la précision du schéma. Sauvegardez cette courbe dans le fichier `energieEE.dat`

Attention, pour les courbes en temps long (voir les questions suivantes), il est inutile de sauvegarder les valeurs à chaque itération en temps. Une solution simple est la suivante :

- définir le temps maximum `tmax` et le pas de temps `dt` ;
- définir le nombre maximum d'itérations `nmax = int(tmax/dt)` ;
- définir le nombre de sorties fichier `nbplot = min(1000, nmax)` de façon à avoir au plus 1000 points dans la courbe ;
- définir la période de sortie fichier `nplot = int(nmax/nbplot)` : on écrira donc dans le fichier toutes les `nplot` itérations.

Testez donc votre programme et commentez vos résultats. Ces résultats s'améliorent-ils quand le pas de temps est plus petit ? On pourra tester pour cela les pas de temps `dt = 0.05` s et `dt = 0.01` s. Pour ne pas écraser vos résultats d'une simulation à l'autre, vous pouvez compléter le nom des fichiers par une chaîne de caractères contenant le nombre de périodes

utilisé pour calculer `tmax` et le pas de temps (exemple : `angleEE_4_0.100000000.dat` pour 4 périodes avec `dt = 0.1`).

### Question 3. Schémas de Runge-Kutta

Rajoutez à votre programme les méthode de RK2 (point milieu) et RK4. Les résultats seront stockés dans des fichiers dont les noms sont les mêmes que ceux obtenus pour Euler explicite, en remplaçant le suffixe EE par RK2 et RK4, respectivement.

Constatez que ces schémas donnent des résultats bien plus précis que le schéma d'Euler explicite : comparez les résultats d'Euler explicite pour `dt=0.01` s, avec ceux obtenus par Runge-Kutta avec `dt=0.1` s.

On peut cependant voir qu'aucun de ces schémas ne permet de calculer une solution correcte quand on augmente le temps de simulation :

- que donne le schéma RK2 avec un temps maximum de 400 périodes (`dt=0.1` s) ?
- que donne RK4 avec un temps maximum de 4000 périodes (`dt=0.1` s) ?

### Question 4. Un schéma symplectique

Les schémas symplectiques sont conçus pour éliminer les problèmes vus précédemment : une de leur propriété est que l'énergie totale du système est bornée, et que la solution numérique reste périodique.

Tous ces schémas sont nécessairement implicites. Le plus simple est le schéma d'Euler symplectique, qui ne nécessite pas d'inversion. Dans le cas du pendule, ce schéma s'écrit :

$$\begin{aligned}\theta^{n+1} &= \theta^n + \Delta t \phi^n, \\ \phi^{n+1} &= \phi^n - \Delta t \frac{g}{L} \sin \theta^{n+1}.\end{aligned}$$

Autrement dit, c'est le schéma d'Euler explicite dans lequel on remplace  $\theta^n$  par sa nouvelle valeur au moment de calculer  $\phi^{n+1}$ .

Rajoutez ce schéma à votre programme, et testez-le de la même façon. Attention, vous ne pouvez pas programmer ce schéma avec la même structure vectorielle que les schémas précédents, car toutes les variables ne peuvent pas être traitées de la même façon. Observez son comportement en temps court (4 périodes) et long (4000 périodes), comparez aux résultats obtenus avec RK4, et commentez vos résultats.

## 2 Orbites planétaires

Le but de ce TP est d'appliquer les schémas précédents pour calculer numériquement les trajectoires autour du soleil de 5 planètes du système solaire : Jupiter, Saturne, Uranus, Neptune, et Pluton. Il est tiré du polycopié *Introduction à l'Analyse Numérique* de Ernst Hairer, disponible sur

<http://www.unige.ch/hairer/polycop.html>

On considère que chacune de ces planètes n'est soumise qu'à l'attraction gravitationnelle exercée par toutes les autres, plus celle du soleil. On rappelle que la force gravitationnelle exercée par un corps  $B$  de masse  $m_B$  situé en  $x_B \in \mathbb{R}^3$  sur un corps  $A$  de masse  $m_A$  situé en  $x_A \in \mathbb{R}^3$  est

$$F_{B \rightarrow A} = -Gm_B m_A \frac{x_A - x_B}{\|x_A - x_B\|^3},$$

où  $G$  est la constante de gravitation universelle. La loi fondamentale de la dynamique nous permet alors d'écrire les équations suivantes :

$$x_i''(t) = -Gm_S \frac{x_i}{\|x_i\|^3} - G \sum_{j=1, \neq i}^5 m_j \frac{x_i - x_j}{\|x_i - x_j\|^3}$$

pour  $i = 1$  à  $5$ , où  $x_i, m_i$  sont les position et masse de Jupiter ( $i = 1$ ), Saturne ( $i = 2$ ), Uranus ( $i = 3$ ), Neptune ( $i = 4$ ), et Pluton ( $i = 5$ ), et  $m_S$  est la masse du soleil. Le mouvement de ces planètes est décrit dans le référentiel dont l'origine fixe est le soleil. Les inconnues du problème sont donc les positions  $x_i(t)$  pour  $i = 1$  à  $5$ .

En notant  $v_i = x_i'$  la vitesse de la planète numéro  $i$ , on peut réécrire les relations précédentes sous forme d'un système d'équations différentielles du premier ordre :

$$\begin{aligned} x_i'(t) &= v_i(t) \\ v_i'(t) &= -Gm_S \frac{x_i}{\|x_i\|^3} - G \sum_{j=1, \neq i}^5 m_j \frac{x_i - x_j}{\|x_i - x_j\|^3} \end{aligned} \quad (2)$$

pour  $i = 1$  à  $5$ .

La masse du soleil est  $m_0 = 1.00000597682$  (modifiée pour tenir compte des planètes proches) et la constante de gravitation universelle est  $G = 2.95912208286e - 4$ . Les unités de masse sont relatives à celle du soleil, les distance sont en unités astronomiques (1 AU = 149 597 870 km), et le temps est compté en jours terrestres. Pour les 5 planètes, les positions et vitesses initiales calculées le 5 septembre 1994 sont données dans la table ci-dessous :

$x_1$	-3.5023653	-3.8169847	-1.5507963
$x_2$	9.0755314	-3.0458353	-1.6483708
$x_3$	8.3101420	-16.2901086	-7.2521278
$x_4$	11.4707666	-25.7294829	-10.8168456
$x_5$	-15.5387357	-25.2225594	-3.1902382
$v_1$	0.00565429	-0.00412490	-0.00190589
$v_2$	0.00168318	0.00483525	0.00192462
$v_3$	0.00354178	0.00137102	0.00055029
$v_4$	0.00288930	0.00114527	0.00039677
$v_5$	0.00276725	-0.00170702	-0.00136504

Les masses sont :

$$\begin{aligned} m_1 &= 0.000954786104043, & m_2 &= 0.000285583733151, & m_3 &= 0.0000437273164546, \\ m_4 &= 0.0000517759138449 & m_5 &= 1/(1.3 \times 10^8). \end{aligned}$$

Le temps maximum de simulation est  $t_{\max}=100\ 000$ , temps au bout duquel toutes les planètes ont fait au moins une révolution complète autour du soleil.

On demande de résoudre numériquement ce système avec les méthodes d'Euler explicite, puis la méthodes RK2 (Heunh) et la méthode RK4 classique, en traçant à chaque fois les trajectoires obtenues (un fichier par planète et par schéma). Le pas de temps utilisé sera  $\Delta t = 300$ . Les trajectoires seront stockées dans les fichiers `jupiter.dat`, `saturne.dat`,

`uranus.dat`, `neptune.dat`, `pluton.dat` : chaque ligne d'un fichier contient les trois coordonnées spatiales de la planète correspondante, à une itération donnée. Les vitesses ne sont pas stockées.

**Question 5. Forme générique du système.** Comme pour le pendule, il faut mettre le système (2) sous la forme  $X'(t) = F(X(t))$ , puis créer un module qui contiendra le calcul de la fonction  $F(X)$ . Ainsi, les positions et les vitesses peuvent être stockées dans un unique tableau `x(i=1:10,j=1:3)` de sorte que les 3 coordonnées de la planète numéro  $i$  soient `x(i,1:3)` et les 3 composantes de sa vitesse soient `x(i+5,1:3)`, avec  $i$  entre 1 et 5.

Pour la visualisation, utilisez un logiciel de visualisation dans l'espace, par exemple `gnuplot`. Vous pouvez utiliser le script `gnuplot_commandes_planetes.txt`, à adapter à vos noms de fichier.

**Question 6. Euler explicite.** Programmez le schéma d'Euler explicite, et constatez qu'il est instable, quel que soit le pas de temps choisi (essayez `dt=300` puis `dt =10`) : toutes les planètes quittent leur orbite (et leur trajectoire part plus ou moins vite vers l'infini). Cela est d'autant plus visible que les planètes font beaucoup de tours autour du soleil (donc celles qui en sont le plus proche, comme Jupiter et Saturne).

**Question 7. Runge-Kutta.** Programmez ensuite schéma RK2, puis RK4, testez ces schémas avec `dt=300` puis `dt =10`, et commentez les résultats.

### 3 Pour aller plus loin ...

Cette section donne quelques éléments de compréhension des phénomènes constatés dans les deux parties précédentes. Elle ne nécessite pas de travail supplémentaire, mais rien ne vous empêche de vérifier les quelques assertions ci-dessous ...

**Euler symplectique pour un système hamiltonien.** Les deux systèmes précédents sont des systèmes *hamiltoniens*, qui peuvent se mettre sous la forme :

$$\begin{aligned}q'(t) &= \frac{\partial H}{\partial p}(q(t), p(t)), \\p'(t) &= -\frac{\partial H}{\partial q}(q(t), p(t)),\end{aligned}$$

où  $q$  et  $p$  sont les variables qui décrivent le système (comme  $x$  et  $v$  ici), et  $H$  est le hamiltonien, ou énergie totale. Par un simple calcul de dérivée d'applications composées, il est facile de montrer que  $\frac{d}{dt}H(p(t), q(t)) = 0$ , et donc que l'énergie totale du système est constante au cours du temps.

De tels systèmes ont aussi des propriétés géométriques et sont dits *symplectiques*. Les schémas symplectiques sont des schémas qui garantissent, au niveau discret, certaines des propriétés des systèmes correspondants, et assurent une certaine stabilité à la solution numérique. Ces schémas sont nécessairement implicites, et le plus simple d'entre eux, le

schéma d'Euler symplectique s'écrit :

$$\begin{aligned} q^{n+1} &= q^n + \Delta t \frac{\partial H}{\partial p}(q^n, p^n), \\ p^{n+1} &= p^n - \Delta t \frac{\partial H}{\partial q}(q^{n+1}, p^n). \end{aligned}$$

L'énergie totale de la solution numérique n'est pas constante, mais elle reste bornée. Vous pouvez appliquer ce schéma au mouvement des planètes de la section 2, et programmer le calcul de l'énergie totale du système, afin de comparer ce schéma aux schémas d'Euler explicite et Runge-Kutta.

**Un exemple simple.** Les comportements des différents schémas étudiés dans ce TP peuvent se comprendre facilement avec le système du pendule linéarisé, avec  $g/L = 1$  :

$$\begin{aligned} \theta'(t) &= \phi(t) \\ \phi'(t) &= -\theta(t). \end{aligned} \tag{3}$$

Il est clair que l'énergie linéarisée  $E(t) = \theta^2 + \phi^2$  est constante au cours du temps. Graphiquement, si l'on trace la solution dans le plan des phases (le point d'abscisse  $\theta(t)$  et d'ordonnée  $\phi(t)$  en fonction du temps), on obtient un cercle centré en l'origine et de rayon 1. En effet, la solution est bien sur  $\theta(t) = \theta_0 \cos t$ ,  $\phi(t) = \theta_0 \sin t$ , et l'énergie totale  $E(t) = \theta(t)^2 + \phi(t)^2$  n'est autre que la distance au cercle.

On peut montrer facilement que le schéma d'Euler explicite est A-instable pour ce système, quel que soit  $\Delta t$  : il suffit de calculer  $E_{n+1} = \theta_{n+1}^2 + \phi_{n+1}^2$  pour trouver  $E_{n+1} = (1 + \Delta t^2)E_n$ , ce qui montre que  $E_n$  est strictement croissante. Graphiquement, la trajectoire dans le plan des phases va être une spirale divergente. Une autre méthode consiste à calculer les valeurs propres du système différentiel (3) qui sont  $\pm i$ . Le schéma d'Euler explicite n'étant conditionnellement A-stable que pour des valeurs propres de partie réelle strictement négative, cela implique l'A-instabilité inconditionnelle du schéma. Autrement dit, le schéma d'Euler explicite, appliqué à  $y'(t) = \lambda y(t)$  avec  $\lambda$  imaginaire pure, est toujours A-instable. On peut montrer le même résultat pour RK2.

Pour RK4 en revanche, on peut montrer que son domaine de stabilité contient une partie de l'axe imaginaire pur. Cela implique qu'il existe une condition sur le pas de temps pour qu'il soit A-stable. Par contre, le défaut de ce schéma est qu'il va faire décroître l'énergie du système : il va induire une dissipation numérique qui va freiner le système (le pendule va finir par s'arrêter). Graphiquement, la trajectoire dans le plan des phases va être une spirale convergente.

Finalement, le schéma d'Euler symplectique est lui parfaitement A-stable, sans dissipation. Quand on trace la solution donnée par Euler symplectique, on observe bien une courbe fermée, mais de forme elliptique (cf partie 1). Pour vérifier cela mathématiquement, cherchons  $a$  et  $b$  tels que  $\theta_{n+1}^2 + a\phi_{n+1}^2 + b\theta_{n+1}\phi_{n+1} = \theta_n^2 + a\phi_n^2 + b\theta_n\phi_n$ . C'est-à-dire qu'on cherche à montrer que le schéma préserve une énergie modifiée, ou encore donne une trajectoire elliptique. Un calcul rapide donne  $a = 1$  et  $b = \Delta t$ .

Résumons : le schéma d'Euler symplectique donne une solution pour laquelle l'énergie modifiée  $\tilde{E}_n = \theta_n^2 + \phi_n^2 + \Delta t \theta_n \phi_n$  est constante. L'énergie exacte  $E_n$  est majorée par  $\tilde{E}_n$  et

est donc bornée. Le schéma est donc inconditionnellement A-stable. Cela implique aussi que dans le plan des phases, la solution numérique se déplace sur une ellipse centrée en l'origine, et qu'elle est donc périodique.

Les schémas symplectiques sont indispensables pour les calculs d'orbite en temps long, ainsi qu'en dynamique moléculaire pour des calculs de chimie. Pour plus d'informations sur ce sujet, vous pouvez consulter le livre de référence

Ernst Hairer, Gerhard Wanner, Christian Lubich  
Geometric Numerical Integration, Structure-Preserving Algorithms for Ordinary Differential Equations  
Springer Series in Computational Mathematics  
Volume 31 2006

Des photocopies, en français, issus de ce livre sont disponibles sur cette page :  
<http://www.unige.ch/hairer/polycop.html>