

COURS 11

## Retour à l'équilibre

- 1) Introduction aux systèmes dynamiques
- 2) Schéma d'Euler explicite
- 3) Stabilité
- 4) Schéma d'Euler rétrograde
- 5) Schéma de Crank-Nicolson
- 6) Schéma de Heun (exercice)

① Introduction aux systèmes dynamiques.

- Nous abordons la troisième articulation de ce cours d'informatique appliquée au calcul scientifique par l'étude et l'approximation de fonctions  $u(t)$  du temps  $t \in \mathbb{R}$  qui sont solutions d'équations différentielles, qualifiées d'"ordinaires" depuis les travaux de Vladimir Arnold à Moscou dans les années soixante. Une telle fonction est solution d'une équation d'évolution de nature différentielle qui s'écrit typiquement

$$(1) \quad \frac{du}{dt} = f(u(t)), \quad t > 0$$

où  $f$  est une fonction donnée, régulière, de  $\mathbb{R}$  dans  $\mathbb{R}$ . A cette équation d'évolution, une condition initiale permet de "démarrer" la dynamique à l'instant  $t = 0$ :

$$(2) \quad u(0) = a, \quad a \in \mathbb{R} \text{ fixé.}$$

- Il n'est pas intuitif qu'un problème tel que (1)(2) définit une unique (?) fonction  $u(t)$  du temps. Nous allons nous en convaincre sur un modèle simple de retour à l'équilibre. Nous introduisons une "constante de temps"  $\tau > 0$  qui est fixée, et nous posons:
- $$(3) \quad f(v) = -\frac{1}{\tau} v, \quad v \in \mathbb{R}.$$

L'équation formée de (1) et de (3) peut alors s'écrire :

$$(4) \quad \frac{du}{dt} + \frac{u(t)}{\tau} = 0, \quad t > 0.$$

- Cette relation signifie qu'à chaque instant  $t > 0$  où  $u(t)$  est connu, on dispose aussi de sa dérivée  $\frac{du}{dt} = -u/\tau$ . La tangente à la courbe  $y = u(t)$  solution admet donc pour équation :

$$(5) \quad y - u(t_0) + \frac{1}{\tau} u(t_0) (t - t_0) = 0, \quad t \in \mathbb{R}.$$

au point d'abscisse  $t_0$ . Dans le cas particulier où  $t_0 = 0$ ,  $u(t_0) = a$  compte tenu de la condition initiale (2).

La relation (5) s'écrit alors

$$(6) \quad y = a \left(1 - \frac{t}{\tau}\right), \quad t \in \mathbb{R}$$

et elle est illustrée à la figure 1. À partir de cette seule information,

on doit reconstruire l'ensemble des valeurs  $u(t)$  pour tout instant  $t \geq 0$ , en imaginant qu'on ne s'intéresse qu'au futur du modèle.

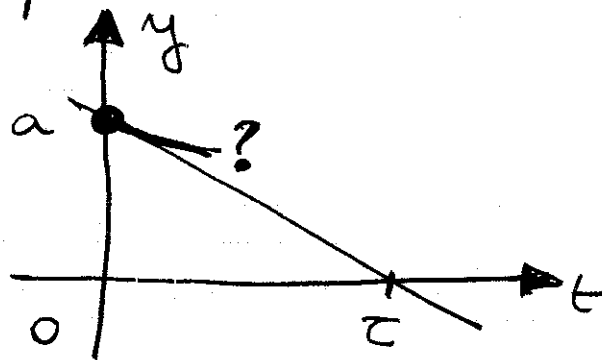


Figure 1. Tangente à l'origine.

- Les méthodes "classiques" du calcul différentiel élémentaire, permet de faire apparaître des "fonctions élémentaires" d'équation (4) est à "variables séparées" et on peut l'écrire

$\frac{du}{u} + \frac{dt}{\tau} = 0$  si  $u \neq 0$  on reconnaît alors la différentielle de  $\log|u|$ , où  $\log$  désigne le logarithme népérien. On a donc

$$(7) \quad d\left(\log|u| + \frac{t}{\tau}\right) = 0$$

et l'expression,  $\log|u| + \frac{t}{\tau}$  est alors constante puis que sa différentielle est nulle. On introduit cette "constante d'intégration" sous la forme  $\log K$ , avec  $K > 0$ ; en effet pour  $K > 0$ ,  $\log K$  définit l'ensemble de tous les nombres réels:

$$(8) \quad \log|u(t)| + \frac{t}{\tau} = \log K, \quad t \in \mathbb{R}.$$

- Un calcul élémentaire conduit alors à écrire  $|u(t)| = K e^{-t/\tau}$  et, en posant  $C = K$  pour  $u(t) > 0$ ,  $C = -K$  pour  $u(t) < 0$ , on en "déduit":

$$(9) \quad u(t) = C e^{-t/\tau}, \quad t \geq 0.$$

La constante  $C$  est déterminée à l'aide de la condition initiale (2) et  $C = a$  sans difficulté. Nous venons de montrer que la fonction  $u(t)$  définie par

$$(10) \quad u(t) = a e^{-t/\tau}, \quad t \geq 0$$

est un "bon candidat" pour résoudre le système dynamique composé de l'équation d'évolution (4) et de la condition initiale (2).

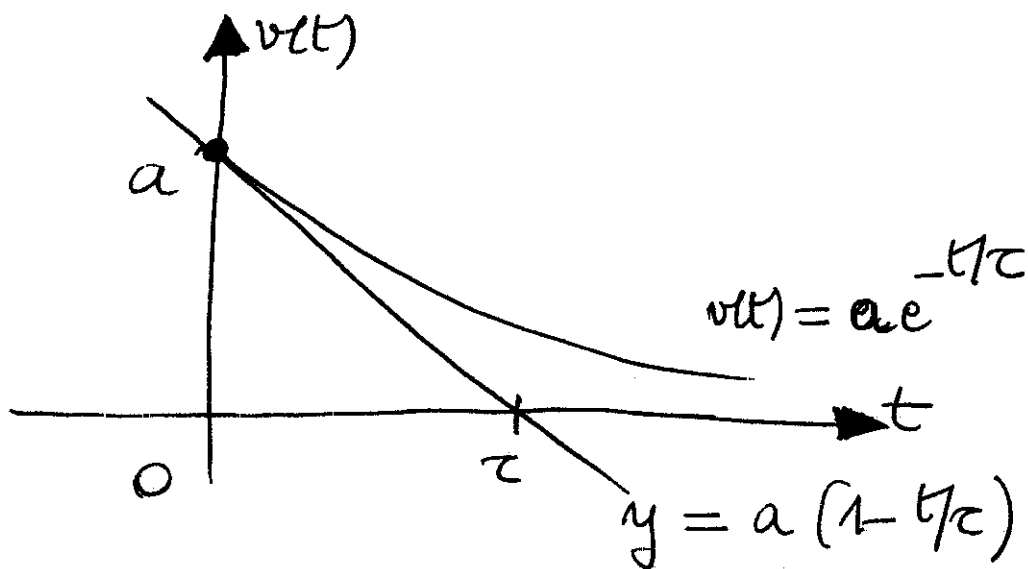


Figure 2 Retour exponentiellement décroissant vers l'équilibre.

La fonction  $v(t)$  de la relation (10) est illustrée à la figure 2. Nous avons reporté la tangente à l'origine déjà connue de la figure 1.

- Si les calculs classiques ont permis de proposer une "formule" pour résoudre le modèle (4)(2), on doit d'une part s'assurer qu'on a bien la solution et de plus que c'est la seule, ce qui n'est pas évident a priori. Vérifier que  $v(t)$  est solution de (4) en simple :

$$\frac{dv}{dt} = -\frac{a}{\tau} e^{-t/\tau} = -\frac{1}{\tau} v(t) \text{ et la relation (4) est satisfaite. On a aussi compte tenu de (10): } v(0) = a \text{ et la relation (2) est établie.}$$

On a aussi compte tenu de (10):  $v(0) = a$  et la relation (2) est établie.

- Nous démontrons maintenant que la fonction  $v$  définie à la relation (10) est bien la seule solution  $v(t)$  du système (4)(2). Pour

cela, nous supposons que  $u(t)$  est une solution de (4) avec la condition initiale (2).  
Nous posons :

$$(11) \quad x(t) = u(t) e^{t/\tau}, \quad t \geq 0$$

On peut calculer sans difficulté la dérivée de la fonction  $x(\cdot)$ .

$$\frac{dx}{dt} = \frac{du}{dt} e^{t/\tau} + u(t) \cdot \frac{1}{\tau} e^{t/\tau}$$

$$= \left( \frac{du}{dt} + \frac{u}{\tau} \right) e^{t/\tau}, \quad \forall t$$

$$= 0 \quad \forall t \quad \text{car } u(t) \text{ est solution de (4).}$$

- Nous utilisons alors le résultat classique d'Analyse qui énonce que si pour un intervalle  $I$  de  $\mathbb{R}$ , une fonction dérivable  $x: I \rightarrow \mathbb{R}$  a une dérivée nulle, alors cette fonction est constante : toujours

$$(12) \quad \frac{dx}{dt} = 0 \quad \forall t \quad \Rightarrow \quad x(t) = \text{constante}$$

Il existe donc une constante  $C$  telle que pour tout  $t \in \mathbb{R}$ ,  $x(t)$  soit identiquement égale à  $C$  :

$$(13) \quad \exists C \in \mathbb{R}, \quad \forall t \in \mathbb{R}, \quad u(t) e^{t/\tau} = C$$

On déduit alors sans difficulté de (13) que  $C = a$  grâce à la condition initiale (2), puis que  $u(t) = v(t) = a e^{-t/\tau}$  nécessairement.

- grâce à la simplicité du problème (4)(2) et à la connaissance de la fonction exponentielle, nous avons construit une solution  $u(t)$  de (4)(2) et nous avons montré que c'est la seule. Le résultat en général. Le théorème de Cauchy Lipschitz affirme que si on considère le problème (1)(2) avec une fonction générale  $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$  continuellement dérivable (pour fixer les idées), alors il existe  $T > 0$  de sorte que le système dynamique composé de l'équation d'évolution (1) et de la condition initiale (2) admet une unique solution  $u(t)$  pour  $0 \leq t \leq T$ . On ne peut pas toujours "intégrer" l'équation différentielle, mais elle définit toujours (si  $f \in \mathcal{C}^1$ ) une et une seule solution pour les "temps petits". Ce résultat est bon d'être intuitif ni facile. Mais il permet de donner un sens mathématique à de nombreux modèles issus de la physique, de la chimie, de la biologie, de l'économie, etc.

## ② Schéma d'Euler explicite

- Nous imaginons ne pas connaître la fonction exponentielle et voulons approcher  $u(t)$  à l'aide d'un algorithme discret, un schéma numérique. Nous nous donnons un intervalle de temps  $\Delta t$ ,

un "pas de temps", et nous cherchons, pour  $j$  entier naturel, une approximation  $u^j$  de  $u(j\Delta t)$ . Nous introduisons la notation

$$(14) \quad t^j = j\Delta t, \quad j \in \mathbb{N}$$

en respectant une tradition qui veut que pour les problèmes d'évolution, l'indice  $j$  figure en position supérieure, sans pour autant être un exposant! Nous cherchons donc un algorithme pour approcher  $u(t^j)$ :

$$(15) \quad u^j \approx u(t^j), \quad j \in \mathbb{N}.$$

Dans la relation (15), nous devons faire attention au fait que  $u(t^j)$  est la valeur (à priori toujours inconnue) de la solution de (4)(2) à l'instant  $t = t^j = j\Delta t$ , alors que  $u^j$  est une valeur approchée que nous allons savoir calculer, ce de manière éventuellement automatique à l'aide d'un ordinateur.

- L'idée de l'algorithme est de développer  $u(t^j + \Delta t) = u(t^{j+1})$  au voisinage de  $u(t^j)$ , en supposant  $\Delta t$  assez petit. Nous utilisons la formule de Taylor:

$$(16) \quad u(t^{j+1}) = u(t^j) + \Delta t \left( \frac{du}{dt} \right)(t^j) + O(\Delta t^2)$$

Nous utilisons l'équation (4) au point  $t = t^j$  pour remplacer  $\left( \frac{du}{dt} \right)(t^j)$  par sa valeur:



$\frac{du}{dt}(t^j) = -\frac{1}{\tau} u(t^j)$ . Nous reportons cette valeur  
 et nous trouvons un développement limité  
 satisfait par la solution exacte de l'équation  
 (4):

$$(17) \quad u(t^{j+1}) = \left(1 - \frac{\Delta t}{\tau}\right) u(t^j) + O(\Delta t^2).$$

Le schéma d'Euler explicite (milieu du 18<sup>e</sup> siècle)  
 consiste à remplacer  $u(t^{j+1})$  par son approximation  
 $u^{j+1}$ , à remplacer  $u(t^j)$  par son approximation  $u^j$ ,  
 et à négliger le reste dans la formule de Taylor.  
 On remplace enfin toutes ces "valeurs approchées"  
 par un simple symbole d'égalité. On tire  
 alors de (17) avec cette méthodologie:

$$(18) \quad u^{j+1} = \left(1 - \frac{\Delta t}{\tau}\right) u^j, \quad j \text{ entier } \geq 0$$

- La relation (18) est une simple suite géomé-  
 tique qu'on peut expliciter sans difficulté,  
 en choisissant par exemple

$$(19) \quad u^0 = u(0) = a \quad (\text{cf (2)}).$$

### ③ Stabilité

- Nous savons d'après la relation (10) jointe à  
 la définition (14) que pour  $j$  tendant vers  
 l'infini,  $u(t^j)$  tend vers zéro. C'est le fameux  
 "retour à l'équilibre". Il doit qualitativement  
 en être de même pour le modèle discret (18)(19).

Une suite géométrique tend vers zéro si l'argument a<sup>o</sup>t de plus en plus si et seulement si la raison est de module (de valeur absolue ici) strictement inférieure à 1. Cette condition s'écrit ici :

$$(20) \quad \left| 1 - \frac{\Delta t}{\tau} \right| < 1 .$$

C'est une condition nécessaire sur le pas de temps  $\Delta t$  (laissé à la disposition de l'utilisateur de la méthode numérique !) pour que le modèle discret (18)(19) en un comportement qualitatif comparable au modèle continu (10) lorsque le temps croît vers l'infini.

- La relation (20) s'écrit sans difficulté et nous avons  $-1 < 1 - \frac{\Delta t}{\tau} < 1$ , soit

$$(21) \quad 0 < \Delta t < 2\tau$$

puisque  $\tau > 0$ . Nous retenons que le pas de temps  $\Delta t$  doit au plus être de l'ordre de grandeur de la constante de temps  $\tau$  du modèle continu. Souvenons nous de la figure 2: la fonction  $v(t)$  change notablement de valeur pour  $t$  changé en  $t + \tau$ . Si on s'aventure à utiliser un pas de temps  $\Delta t$  trop grand devant la constante de temps du modèle initial, le calcul numérique est tout simplement faux!

- On peut aussi faire une seconde remarque très simple à partir de la connaissance qualitative de  $u(t^j)$ . La relation (10) nous dit que  $u(t^j)$  ne change jamais de signe si j décrit les nombres entiers. Il peut donc sembler faux qu'il en soit de même pour le modèle numérique. Or la relation (18) peut aussi s'écrire

$$(22) \quad \frac{u^{j+1}}{u^j} = 1 - \frac{\Delta t}{\tau}, \quad j \in \mathbb{N}.$$

Le rapport  $u^{j+1}/u^j$  est toujours positif si et seulement si  $u^j$  et  $u^{j+1}$  sont de même signe. Cette condition impose donc  $1 - \frac{\Delta t}{\tau} \geq 0$ , soit

$$(23) \quad \Delta t \leq \tau.$$

Tout à la relation (21) le pas de temps  $\Delta t$  doit donc satisfaire à

$$(24) \quad 0 < \Delta t \leq \tau.$$

Cette contrainte sur le choix du pas de temps pour garder une cohérence qualitative avec le modèle continu est connue sous le nom de "condition de stabilité".

## ④ Schéma d'Euler rétrograde

11

- Nous pourrions être déçu du résultat de stabilité (24). La dynamique (4) est celle d'un retour à l'équilibre, et parfois la constante de temps  $\tau$  n'est même pas connue! Comment alors trouver a priori un pas de temps  $\Delta t$  qui vérifie la relation (24)? Une réponse possible est de construire un autre schéma. L'idée est de développer  $u(t^j)$  autour du pas sui vant  $u(t^{j+1})$ , ce qui est une idée peu naturelle a priori. Nous avons

$$(25) \quad u(t^j) = u(t^{j+1} - \Delta t) = u(t^{j+1}) - \Delta t \frac{du}{dt}(t^{j+1}) + O(\Delta t^2)$$

puis nous remplaçons  $\frac{du}{dt}$  par sa valeur avec l'équation (4). Nous en déduisons:

$$(26) \quad u(t^j) = \left(1 + \frac{\Delta t}{\tau}\right) u(t^{j+1}) + O(\Delta t^2)$$

- Le schéma s'obtient en remplaçant  $u(t^j)$  par  $u^j$  puis  $u(t^{j+1})$  par  $u^{j+1}$  et en négligeant le reste  $O(\Delta t^2)$ . Nous trouvons

$$(27) \quad u^{j+1} = \frac{1}{1 + \Delta t/\tau} u^j, \quad j \in \{1, \dots, N\}$$

pour respecter une "dynamique" où le futur est "à gauche" du symbole d'égalité.

- Toute à la condition initiale (19), le modèle numérique discret en temps une suite géométrique, de raison  $\frac{1}{1+\Delta t/\tau}$  toujours comprise dans l'intervalle  $]0,1[$  dès que  $\Delta t > 0$ :

$$(28) \quad \Delta t > 0 \Rightarrow 0 < \frac{1}{1+\Delta t/\tau} < 1.$$

Le comportement qualitatif de  $(u^n)_{n \in \mathbb{N}}$  défini en (27) est alors toujours sain, quel que soit  $\Delta t > 0$ . D'une part  $(u^n)_{n \in \mathbb{N}}$  tend vers 0 si  $j \neq \infty$  car la raison de la suite géométrique est de module  $< 1$  et d'autre part  $\frac{u^{j+1}}{u^j}$  reste strictement positif, ce qui garantit une cohérence de la monotonie du processus.

- Par contre, le mode de définition du schéma est plus complexe, et pour un modèle général de dynamique (cf(1)), le schéma d'Euler rétrograde ne fournit qu'une équation qu'il faut ensuite résoudre. On parle pour cette raison d'un schéma impléte. Nous n'évoquons pas davantage ce point dans le cadre de ce cours.

⑤ Schéma de Crank-Nicolson

- L'expérience numérique montre que les deux schémas d'Euler étudiés plus haut

soit précis à l'ordre 1. On fixe  $T$  et on découpe l'intervalle  $[0, T]$  en  $N = \frac{T}{\Delta t}$  intervalles. L'entier  $N$  étant fixé, on calcule  $u^N \equiv u(N\Delta t) = u(T)$  pour diverses valeurs de  $N$  et on mesure l'erreur  $\epsilon_N$ .

$$(29) \quad \epsilon_N \equiv |u^N - u(T)|, \quad \Delta t = \frac{T}{N}$$

en fonction de l'entier  $N$ . Les expériences numériques indiquent qu'avec une très bonne précision, on a

$$(30) \quad \log \epsilon_N \approx \text{Cste} - \log N, \quad N \leq N$$

• Ceci indique qu'en fonction de  $\Delta t$ , on a :

$$(31) \quad \epsilon(\Delta t) \equiv \epsilon_N \approx C \Delta t, \quad \Delta t = T/N.$$

avec un exposant de  $\Delta t$  égal à 1. Pour cette raison, on qualifie ces schémas de premier ordre, ce qui est peu satisfaisant. Mais aimerions faire mieux, et disposer en particulier d'un schéma "d'ordre deux" pour lequel l'erreur  $\epsilon(\Delta t)$  est de la forme

$$(32) \quad \epsilon(\Delta t) \approx C \Delta t^2, \quad \Delta t \rightarrow 0.$$

D'expérience numérique indique que c'est le cas avec le schéma de Crank-Nicolson que nous allons construire maintenant.

- On rappelle la formule pour approcher la valeur de l'intégrale  $\int_a^b f(t) dt$  si on connaît les valeurs  $f(a)$  et  $f(b)$ . On remplace  $f(t)$  par son interpolé affine

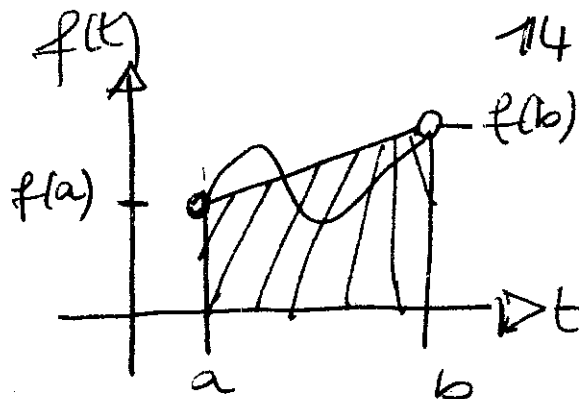


Figure 3. Trapezets

$$(33) \quad \Phi(t) = \frac{b-t}{b-a} f(a) + \frac{t-a}{b-a} f(b), \quad a \leq t \leq b$$

sur l'intervalle  $[a, b]$  et on écrit

$$(34) \quad \int_a^b f(t) dt \approx \int_a^b \Phi(t) dt$$

ainsi qu'illustre à la figure 3. on obtient alors sans difficulté :

$$(35) \quad \int_a^b f(t) dt \approx (b-a) \frac{f(a) + f(b)}{2}$$

C'est la formule des trapèzes pour approcher une intégrale.

- Le schéma de Crank-Nicolson utilise cette idée. On cherche  $u(t^{j+1})$  à partir de  $u(t^j)$ , sachant que  $u(t)$  est solution de l'équation différentielle (4). on a par simple intégration:

$$(36) \quad u(t^{j+1}) = u(t^j) - \frac{1}{\tau} \int_{t^j}^{t^j + \tau} u(t) dt$$

on approche l'intégrale au membre de droite de la relation (36) avec la formule des trapèzes:

$$(37) \quad u(t^{j+1}) \approx u(t^j) - \frac{\Delta t}{2\tau} (u(t^j) + u(t^{j+1}))$$

15

et on remplace comme pour la construction des deux autres schémas  $u(t^j)$  par  $u^j$ ,  $u(t^{j+1})$  par  $u^{j+1}$  et l'approximation par une égalité pour les valeurs approchées. Nous en construisons:

$$(38) \quad u^{j+1} = u^j - \frac{\Delta t}{2\tau} (u^j + u^{j+1}), \quad j \in \mathbb{N}$$

- Nous obtenons un schéma implicite. La connaissance de  $u^j$  ne permet celle de  $u^{j+1}$  que via la résolution d'une équation. Mais cette équation est particulièrement simple dans le cas (38):

$$(39) \quad u^{j+1} = \frac{1 - \Delta t / 2\tau}{1 + \Delta t / 2\tau} u^j, \quad j \in \mathbb{N}.$$

Le schéma de Crank-Nicolson pour le modèle (4) d'un retour à l'équilibre fait encore apparaître une suite géométrique. La raison est positive pour

$$(40) \quad 0 < \Delta t < 2\tau$$

ce qui garantit la monotonie du schéma dans ce cas.



## ⑥ Schema de Heun (exercice)

16

- Sa construction démanue comme le schéma de Crank-Nicolson, mais on distingue la valeur finale  $u^{j+1}$  du schéma dans le membre de gauche de l'équation (38) et la valeur approchée  $\tilde{u}^{j+1}$  utile pour calculer le membre de droite :

$$(41) \quad u^{j+1} = u^j - \frac{\Delta t}{2\tau} (u^j + \tilde{u}^{j+1}), \quad j \in \mathbb{N}.$$

Pour cette valeur de  $\tilde{u}^{j+1}$ , on décide d'utiliser le schéma d'Euler explicite, phase de "prédicteur" qui donne une première approximation :

$$(42) \quad \tilde{u}^{j+1} = u^j - \frac{\Delta t}{\tau} u^j, \quad j \in \mathbb{N}.$$

Quand on reporte la valeur de  $\tilde{u}^{j+1}$  au sein de (41), on définit le schéma de Heun à l'aide d'une seule relation algébrique :

$$(43) \quad u^{j+1} = \left[ 1 - \frac{\Delta t}{\tau} + \frac{1}{2} \left( \frac{\Delta t}{\tau} \right)^2 \right] u^j, \quad j \in \mathbb{N}.$$

- La monotonie du schéma (garantir que le rapport  $u^{j+1}/u^j$  reste  $> 0$  conduit à la condition

$$(44) \quad 0 < 1 - \xi + \frac{\xi^2}{2} < 1, \quad \xi = \frac{\Delta t}{\tau}$$

quand on la joint à la stabilité (la suite  $u^j \rightarrow 0$  si  $j \rightarrow \infty$ ).  
Comme  $1 - \xi + \frac{\xi^2}{2} = \frac{1}{2} + \frac{1}{2}(1-\xi)^2 \geq \frac{1}{2} > 0 \quad \forall \xi$ , la seconde condition  $0 < \xi(1 - \frac{\xi}{2})$  exprime que  $\xi$  est entre les racines du trinôme, soit

$$(45) \quad 0 < \Delta t < 2\tau. \quad \xi, \text{ pair } 0 < \xi < 2.$$