Informatique Appliquée au Calcul Scientifique

Cours 13

Schéma de Runge et Kutta *(i)*

1) Equations différentielles non linéaires
2) Quelques schémas d'intégration
3) Formule de Simpson

François Dubois, janvier 2005, édition 03 août 2006, 10 pages.

IACS (13) **Schéma de Runge et Kutta (i)**

(1) Equations différentielles non linéaires.

- Nous avons vu dans les chapitres précédents deux modèles dynamiques qu'on a pu écrire sous la forme

(1) $$\frac{du}{dt} = f(u).$$

Dans le premier exemple du retour à l'équilibre, on a $u(t) \in \mathbb{R}$ et $f(u) = -u/\tau$ alors que dans le second de l'oscillateur harmonique linéaire qui conduit à un cycle limite, on a $u \in \mathbb{R}^2$ et $f(u) = A \cdot u$, avec A matrice deux par deux constante égale à $\begin{pmatrix} 0 & -1 \\ \omega^2 & 0 \end{pmatrix}$.

- L'expression (1) permet de faire entrer dans un unique cadre symbolique l'étude de nombreuses dynamiques qu'on rencontre en physique, en chimie, en biologie, en économie, etc. Dans le cas général, $u(t)$ à l'instant t est un vecteur de $\mathbb{R}^m$, avec m entier modéré comme dans les exemples précédents ou éventuellement très grand pour des modèles précis de certains phénomènes. De plus: $f : \mathbb{R}^m \longrightarrow \mathbb{R}^m$

est une fonction régulière donnée. Pour tout $u \in \mathbb{R}^m$, l'évaluation $f(u)$ est possible, même si elle peut être assez coûteuse. Ces propriétés permettent de donner un sens mathématique à la solution $u(t)$ de l'équation (1) et de la condition initiale :

$$(2) \qquad u(0) = u_0,$$

où u_0 est un vecteur donné de $\mathbb{R}^m$.

(2) quelques schémas d'intégration

- Le calcul analytique de la solution $u(t)$ du système (1)(2) est en général impossible. On utilise en général la méthode des différences finies. Nous rappelons dans ce paragraphe comment se formulent dans le cas général les schémas numériques introduits dans les deux cas particuliers des chapitres 11 et 12. On se donne un pas de temps $\Delta t > 0$ (toujours laissé à la disposition de l'utilisateur de la méthode d'approximation !) et on cherche à approcher la solution u au temps t^j :

$$(3) \qquad t^j = j\,\Delta t, \quad j \in \mathbb{N}, \; \Delta t > 0.$$

Si $u(t^j)$ désigne la valeur de la solution du système (1)(2) à l'instant $j\Delta t$, laquelle valeur restera en général accessible seulement avec des arguments abstraits, on cherche une valeur u^j qui l'approche :

$$(4) \qquad u^j \simeq u(t^j), \quad j \in \mathbb{N}$$

de sorte que u^j soit effectivement calculable à l'aide d'un algorithme.

- A l'instant initial, on connaît $u(t^0) = u(0) = u_0$. Il est donc naturel de poser

$$(5) \qquad u^0 = u_0, \quad j = 0,$$

ce qui permet de démarrer le processus algorithmique. Il importe donc de le poursuivre, c'est à dire expliciter comment, à partir d'une valeur u^j connue, on peut calculer u^{j+1}. Le calcul de l'ensemble $\{u^k, k \geq 0\}$ résulte ensuite d'une induction, d'une récurrence, mise en œuvre algorithmiquement avec une boucle.

- Dans les paragraphes suivants, on suppose donné $\Delta t > 0$, ainsi que $u^j \in \mathbb{R}^m$, avec $m = 1$ pour fixer les idées ; u^j est un nombre, mais en général toutes les relations écrites peuvent se généraliser avec des vecteurs. On explicite une méthode pour calculer u^{j+1}, nouvelle valeur approchée à l'instant suivant.

- Le schéma d'Euler explicite consiste à écrire la formule de Taylor pour les valeurs exactes $u(t^j)$ et $u(t^{j+1}) = u(t^j + \Delta t)$ on a :

$$(6) \quad u(t^{j+1}) = u(t^j) + \Delta t \left(\frac{du}{dt}\right)(t^j) + O(\Delta t^2).$$

Comme $u(t)$ est solution de l'équation d'évolution (1), on a $\left(\frac{du}{dt}\right)(t^j) = f(u(t^j))$ à l'instant particulier t^j et on peut reporter cette valeur dans le développement (6). on obtient :

$$(7) \quad u(t^{j+1}) = u(t^j) + \Delta t \, f(u(t^j)) + O(\Delta t^2).$$

La méthode d'Euler consiste à faire trois actions à partir de la relation (7) : remplacer la valeur exacte $u(t^j)$ par la valeur approchée u^j (utilisant l'hypothèse (4)), faire de même pour $u(t^{j+1})$ qu'on remplace par u^{j+1} et négliger le reste $O(\Delta t^2)$ dans la formule de Taylor. La relation obtenue

$$(8) \quad u^{j+1} = u^j + \Delta t \, f(u^j) \quad , j \in \mathbb{N}$$

définit le schéma d'Euler explicite.

• Le schéma d'<u>Euler implicite</u>, ou <u>rétrograde</u>, consiste à partir de la valeur $u(t^{j+1})$ et de développer la valeur $u(t^j)$ à partir de cette valeur finale ! On a donc

$$(9) \quad u(t^j) = u(t^{j+1}) - \Delta t \left(\frac{du}{dt}\right)(t^{j+1}) + O(\Delta t^2)$$

puis on remplace $\left(\frac{du}{dt}\right)(t^{j+1})$ par $f(u(t^{j+1}))$, écrivant l'équation (1) à l'instant précis t^{j+1} :

$$(10) \quad u(t^j) = u(t^{j+1}) - \Delta t \; f(u(t^j)) + O(\Delta t^2).$$

On passe d'une expression asymptotique (10), vraie pour la solution exacte de (1) pour des valeurs assez petites du pas de temps Δt, au schéma de la même façon que pour Euler explicite : remplacer $u(t^j)$ et $u(t^{j+1})$ respectivement par u^j et u^{j+1} et négliger $O(\Delta t^2)$. Après une légère modification algébrique, le schéma d'Euler implicite s'écrit donc

$$(11) \quad u^{j+1} - \Delta t \, f(u^{j+1}) = u^j, \quad j \in \mathbb{N}.$$

L'écriture (11) est décevante. Si u^j est donné, la relation (11) n'écrit pas une "formule" pour "expliciter" u^{j+1}, comme pour la relation (8). On ne dispose que d'une <u>équation</u> (11) dont l'inconnue u^{j+1} est "implicitement définie". Il faut donc ensuite résoudre (11), à l'aide des méthodes du point fixe ou de Newton.

- Le schéma de Crank Nicolson est plus précis. Il part de la formule des trapèzes pour approcher une intégrale

(12) $\int_a^b \varphi(t)\,dt \simeq \frac{b-a}{2}\left(\varphi(a)+\varphi(b)\right)$.

On sait que la solution de (1) peut être intégrée entre les instants t^j et t^{j+1}:

(13) $u(t^{j+1})-u(t^j) = \int_{t^j}^{t^{j+1}} f(u(t))\,dt$.

On utilise donc la relation (12) avec $\varphi(t)=f(u(t))$, $a=t^j$ et $b=t^{j+1}$. Il vient

(14) $u(t^{j+1})-u(t^j) \simeq \frac{\Delta t}{2}\left(f(u(t^j)) + f(u(t^{j+1}))\right)$.

On passe d'une relation approchée vraie pour la solution exacte de l'équation différentielle à une relation exacte vraie pour l'approximation à l'aide du procédé décrit plus haut. On trouve:

(15) $u^{j+1} - u^j = \frac{\Delta t}{2}\left(f(u^j)+f(u^{j+1})\right)$, $j\in\mathbb{N}$.

Dans la relation (15), u^j est connu, ainsi que la fonction f, mais u^{j+1} est inconnu. On a donc à nouveau une équation à résoudre:

(16) $u^{j+1} - \frac{\Delta t}{2} f(u^{j+1}) = u^j + \frac{\Delta t}{2} f(u^j)$, $j\in\mathbb{N}$.

- On change pour un moment les notations : on pose $g = u^j + \frac{\Delta t}{2} f(u^j)$ et on note y l'inconnue u^{j+1}. L'équation (16) peut alors s'écrire

$$(17) \qquad y = \frac{\Delta t}{2} f(y) + g .$$

On imagine un algorithme de point fixe pour approcher la solution de (17) :

$$(18) \qquad y_{k+1} = \frac{\Delta t}{2} f(y_k) + g , \quad k \in \mathbb{N}$$

avec une condition initiale pour l'algorithme donnée par le schéma d'Euler explicite :

$$(19) \qquad y_0 = u^j + \Delta t \, f(u^j) .$$

La première itérée de l'algorithme (18) avec la condition initiale (19) s'écrit

$$(20) \qquad y_1 = \frac{\Delta t}{2} f(y_0) + g = \frac{\Delta t}{2}$$

soit en détaillant les expressions de y_0 et g :

$$(21) \qquad y_1 = \frac{\Delta t}{2} f\left(u^j + \Delta t f(u^j)\right) + u^j + \frac{\Delta t}{2} f(u^j) .$$

L'algorithme de Heun (ou schéma de Runge-Kutta d'ordre 2) consiste à conserver cette valeur pour définir une approximation de $u(t^{j+1})$ à l'instant suivant :

$$(22) \quad u^{j+1} = u^j + \frac{\Delta t}{2} f(u^j) + \frac{\Delta t}{2} f\left(u^j + \Delta t\, f(u^j)\right).$$

③ Formule de Simpson

- Le schéma de Runge-Kutta (d'ordre 4) utilise les mêmes ingrédients que pour la construction du schéma de Heun, mais en un peu plus complexe. Le point de départ est une formule de quadrature plus précise que la formule des trapèzes (12), la formule de Simpson qui s'écrit

$$(23) \quad \int_a^b \varphi(t)\,dt \simeq \frac{b-a}{6}\left(\varphi(a) + 4\varphi\left(\frac{a+b}{2}\right) + \varphi(b)\right).$$

- La formule de Simpson consiste, pour calculer l'intégrale $\int_a^b \varphi(t)\,dt$ de remplacer la fonction φ par son interpolé de Lagrange $\tilde{\varphi}$ qui respecte les trois valeurs $\varphi(a), \varphi\left(\frac{a+b}{2}\right), \varphi(b)$:

$$(24) \quad \tilde{\varphi}(a) = \varphi(a), \quad \tilde{\varphi}\left(\frac{a+b}{2}\right) = \varphi\left(\frac{a+b}{2}\right), \quad \tilde{\varphi}(b) = \varphi(b).$$

Afin de simplifier les calculs, on va établir la relation (23) pour $a = 0$ et $b = 1$:

$$(25) \quad \int_0^1 g(\theta)\,d\theta \simeq \frac{1}{6}\left(g(0) + 4g\left(\frac{1}{2}\right) + g(1)\right).$$

- Nous calculons d'abord le polynôme d'interpolation de Lagrange $\tilde{g}(\theta)$ (de degré 2) qui respecte la fonction g aux points $0, \frac{1}{2}, 1$:

(26) $\tilde{g}(0) = g(0)$, $\tilde{g}(\frac{1}{2}) = g(\frac{1}{2})$, $\tilde{g}(1) = g(1)$.

On introduit pour cela les trois polynomes γ_0, $\gamma_{1/2}$, γ_1, qui vérifient

$$(27)\left\{\begin{array}{l} \gamma_0(0) = 1,\ \gamma_0(1/2) = \gamma_0(1) = 0 \\ \gamma_{1/2}(0) = 0,\ \gamma_{1/2}(1/2) = 1/2,\ \gamma_{1/2}(1) = 0 \\ \gamma_1(0) = \gamma_1(1/2) = 0,\quad \gamma_1(1) = 1 \\ \gamma_0, \gamma_{1/2}, \gamma_1 \text{ polynomes de degré} \leqslant 2. \end{array}\right.$$

Le calcul des γ_j est facile; il est laissé au lecteur :

$$(28)\left\{\begin{array}{l} \gamma_0(\theta) = \quad (2\theta-1)(\theta-1) \\ \gamma_{1/2}(\theta) = 4\theta(1-\theta) \\ \gamma_1(\theta) = \theta(2\theta-1). \end{array}\right.$$

La fonction $\tilde{g} \in P_2$ qui répond à (26) est simplement donnée par

(29) $\tilde{g}(\theta) = g(0)\,\gamma_0(\theta) + g(\frac{1}{2})\gamma_{1/2}(\theta) + g(1)\,\gamma_1(\theta)$.

- La relation (25) consiste simplement à remplacer la fonction g par son interpolé $\tilde{g}$ pour approcher l'intégrale :

(30) $\int_0^1 g(\theta)\,d\theta \simeq \int_0^1 \tilde{g}(\theta)\,d\theta = \sum_{k=0,\frac{1}{2},1} g(k) \int_0^1 \gamma_k(\theta)\,d\theta$

Le calcul du second membre de (30) demande de calculer les intégrales $\int_0^1 \gamma_0(\theta)\,d\theta$, $\int_0^1 \gamma_{1/2}(\theta)\,d\theta$ et $\int_0^1 \gamma_1(\theta)\,d\theta$.

Il s'effectue sans difficulté à partir des expressions polynomiales (28) :

$$\int_0^1 \gamma_0(\theta)\,d\theta = \frac{2}{3} - \frac{1}{2} - \frac{2}{2} + 1 = \frac{1}{6}(4-3-6+6) = \frac{1}{6}$$

$$\int_0^1 \gamma_{1/2}(\theta)\,d\theta = 4\left(\frac{1}{2} - \frac{1}{3}\right) = \frac{4}{6} = \frac{2}{3}$$

$$\int_0^1 \gamma_1(\theta)\,d\theta = \frac{2}{3} - \frac{1}{2} = \frac{1}{6}.$$

Quand on reporte les valeurs précédentes au membre de droite de (30), on établit la relation (25).

- Le cas général (23) de la formule de Simpson s'obtient à partir du cas particulier en paramétrant l'intervalle $[a,b]$ à l'aide de $\theta \in [0,1]$:

(31) $\quad t = (1-\theta)\, a + \theta\, b \quad \in [a,b]$ si $\theta \in [0,1]$.

puis on introduit $g(\theta)$ par

(32) $\quad g(\theta) = \varphi\big((1-\theta) a + b\big), \quad 0 \leq \theta \leq 1.$

Le changement de variables $\theta = \dfrac{t-a}{b-a}$ dans l'intégrale (23) et la remarque que

(33) $\quad g(0) = \varphi(a), \quad g\left(\tfrac{1}{2}\right) = \varphi\left(\tfrac{a+b}{2}\right), \quad g(1) = \varphi(b)$

entraînent que (23) est une conséquence directe de la relation (25).

FD, janv05.