INFORMATIQUE APPLIQUÉE AU CALCUL SCIENTIFIQUE

COURS 14

Schéma de Runge et Kutta *(ii)*

1) Construction du schéma
2) Une application

François Dubois, janvier 2005, édition 03 août 2006, 6 pages.

IACS (14) Schéma de Runge et Kutta (ii)

(1) Construction du schéma.

- Le schéma de Runge et Kutta (d'ordre 4 ; nous ne nous intéressons dans cette leçon qu'à ce cas particulier) est issu d'un savoir-faire spécifique que nous allons décrire rapidement. Rappelons qu'il s'agit d'approcher la solution de l'équation différentielle

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

où $u(t) \in \mathbb{R}^m$ pour fixer les idées et $f : \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}^m$ est une fonction assez régulière.

- On introduit un pas de temps Δt, on pose

(2) $\quad t^j = j\,\Delta t, \quad j \in \mathbb{N}, \quad \Delta t > 0$

et on cherche un <u>algorithme</u> pour approcher $u(t^j)$:

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

- Le schéma de Runge et Kutta consiste à intégrer l'équation (1) entre t^j et t^{j+1} :

(4) $\quad u(t^{j+1}) - u(t^j) = \displaystyle\int_{t^j}^{t^{j+1}} f(u(t))\, dt$

puis à approcher l'intégrale au membre de droite de (4) par la formule de Simpson :

$$(5) \quad \int_{t^j}^{t^{j+1}} f(u(t))\,dt \simeq \frac{\Delta t}{6}\left(f(u(t^j)) + 4 f\left(u\left(t^j + \frac{\Delta t}{2}\right)\right) + f(u(t^{j+1}))\right).$$

On a donc

$$(6) \quad u(t^{j+1}) - u(t^j) \simeq \frac{\Delta t}{6}\left[f(u(t^j)) + 4 f\left(u\left(t^j + \frac{\Delta t}{2}\right)\right) + f(u(t^{j+1}))\right].$$

- La relation (6) est a priori peu exploitable pour construire un schéma ; même si on remplace $u(t^j)$ par u^j, $u(t^{j+1})$ par u^{j+1} et qu'on impose l'égalité, la valeur $u(t^j + \frac{\Delta t}{2})$ reste <u>mal</u> déterminée. Nous allons l'approcher plusieurs fois pour construire le schéma de Runge et Kutta.

- Nous utiliserons d'abord un schéma explicite d'Euler entre les instants t^j et $t^j + \frac{\Delta t}{2}$:

$$(7) \quad u\left(t^j + \frac{\Delta t}{2}\right) \simeq \tilde{u}^{j+\frac{1}{2}} = u(t^j) + \frac{\Delta t}{2} f(u(t^j))$$

Puis nous utiliserons cette valeur $\tilde{u}^{j+1/2}$ pour fabriquer une <u>nouvelle</u> approximation au <u>même</u> instant intermédiaire :

$$(8) \quad u\left(t^j + \frac{\Delta t}{2}\right) \simeq \tilde{\tilde{u}}^{j+1/2} = u(t^j) + \frac{\Delta t}{2} f(\tilde{u}^{j+1/2}).$$

La relation (8) reste une représentation qui se calcule <u>explicitement</u> en fonction de $u(t^j)$. On évalue d'abord

$\tilde{u}^{j+1/2}$ à l'aide de la relation (7). Une fois cette première valeur intermédiaire connue, on tire $\tilde{\tilde{u}}^{j+1/2}$ grâce à la relation (8).

- Nous évaluons ensuite une première approximation $\tilde{u}^{j+1}$ de $u(t^{j+1})$ à l'instant suivant à l'aide d'une formule du point milieu :

$$(9) \quad u(t^{j+1}) - u(t^j) = \int_{t^j}^{t^{j+1}} f(u(t))\,dt \simeq \Delta t\, f\left(u\left(t^j + \frac{\Delta t}{2}\right)\right)$$

et nous remplaçons dans (9) $u(t^j + \frac{\Delta t}{2})$ par l'approximation $\tilde{\tilde{u}}^{j+1/2}$ calculée à la relation (8). Il vient

$$(10) \quad \tilde{u}^{j+1} = u(t^j) + \Delta t\, f(\tilde{\tilde{u}}^{j+1/2}).$$

- Le calcul final utilise la formule de Simpson (6). On approche $4 f(u(t^j + \frac{\Delta t}{2}))$ par la moyenne suivante :

$$(11) \quad 4 f\left(u\left(t^j + \frac{\Delta t}{2}\right)\right) \simeq 2 f(\tilde{u}^{j+1/2}) + 2 f(\tilde{\tilde{u}}^{j+1/2})$$

puis $f(u(t^{j+1}))$ par $f(\tilde{u}^{j+1})$:

$$(12) \quad f(u(t^{j+1})) \simeq f(\tilde{u}^{j+1}).$$

La solution exacte $u(t)$ de (1) vérifie donc

$$(13) \quad u(t^{j+1}) - u(t^j) \simeq \frac{\Delta t}{6}\left[f(u(t^j)) + 2 f(\tilde{u}^{j+1/2}) + 2 f(\tilde{\tilde{u}}^{j+1/2}) + f(\tilde{u}^{j+1})\right]$$

avec $\tilde{u}^{j+1/2}$, $\tilde{\tilde{u}}^{j+1/2}$ et $\tilde{u}^{j+1}$ calculés à l'aide des relations (7), (8) et (10) respectivement.

- Le schéma de Runge Kutta remplace la valeur exacte $u(t^j)$ (inconnue) par son approximation u^j. On a donc :

$$(14) \qquad \tilde{u}^{j+1/2} = u^j + \frac{\Delta t}{2} f(u^j)$$

$$(15) \qquad \tilde{\tilde{u}}^{j+1/2} = u^j + \frac{\Delta t}{2} f(\tilde{u}^{j+1/2})$$

$$(16) \qquad \tilde{u}^{j+1} = u^j + \Delta t \, f(\tilde{\tilde{u}}^{j+1/2})$$

$$(17) \qquad u^{j+1} = u^j + \frac{\Delta t}{6}\left[f(u^j) + 2f(\tilde{u}^{j+1/2}) + 2f(\tilde{\tilde{u}}^{j+1/2}) + f(\tilde{u}^{j+1})\right].$$

Les relations (14) à (17) définissent bien un <u>algorithme</u> explicite. Une fois u^j, Δt et f connus, les relations (14) (15) (16) et (17) permettent le calcul de proche en proche de $\tilde{u}^{j+1/2}$, $\tilde{\tilde{u}}^{j+1/2}$, $\tilde{u}^{j+1}$ puis u^{j+1}.

② <u>Une application</u>

- Nous appliquons le schéma de Runge et Kutta pour un modèle linéaire

$$(18) \qquad \frac{dW}{dt} = A \cdot W(t), \quad W(t) \in \mathbb{R}^m,$$

avec A matrice <u>fixe</u> carrée d'ordre m. Si $W(t^j)$ est connu, on sait (voir le cours de mathématiques générales) qu'alors $W(t^{j+1})$ peut s'exprimer comme

$$(19) \quad W(t^{j+1}) = e^{\Delta t A} \cdot W(t^j)$$

avec la matrice $e^{\Delta t A}$ donnée par la série (absolument convergente) :

$$(20) \quad e^{\Delta t A} = I + \Delta t A + \frac{\Delta t^2}{2} A^2 + \dots + \frac{\Delta t^k}{k!} A^k + \dots = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\Delta t^k}{k!} A^k$$

- Nous appliquons le schéma de Runge Kutta pour ce système. Nous avons

$$(21) \quad \tilde{w}^{j+1/2} = \left(I + \frac{\Delta t}{2} A\right) w^j$$

$$(22) \quad \tilde{\tilde{w}}^{j+1/2} = \left(I + \frac{\Delta t}{2} A \left(I + \frac{\Delta t}{2} A\right)\right) w^j$$

$$(23) \quad \tilde{w}^{j+1} = \left[I + \Delta t A\left(I + \frac{\Delta t}{2} A + \frac{\Delta t^2}{4} A^2\right)\right] w^j$$

$$w^{j+1} = \Big[I + \frac{\Delta t}{6}\Big(A + 2A\left(I + \frac{\Delta t}{2} A\right) + 2A\left(I + \frac{\Delta t}{2} A\left(I + \frac{\Delta t}{2} A\right)\right) + A\left\{I + \Delta t A\left(I + \frac{\Delta t}{2} A + \frac{\Delta t^2}{4} A^2\right)\right\}\Big)\Big] \cdot w^j$$

$$= \left[I + \frac{\Delta t}{6}\left(A + 2A + 2A + A\right) + \frac{\Delta t^2}{6}\left(A^2 + A^2 + A^2\right) + \frac{\Delta t^3}{6}\left(\frac{1}{2} A^3 + \frac{1}{2} A^3\right) + \frac{\Delta t^4}{6}\left(\frac{1}{4} A^4\right)\right] \cdot w^j$$

$$(24) \quad w^{j+1} = \left(I + \Delta t A + \frac{1}{2} \Delta t^2 A^2 + \frac{1}{6} \Delta t^3 A^3 + \frac{1}{24} \Delta t^4 A^4\right) \cdot w^j$$

- La relation (24) montre bien que le schéma de Runge Kutta est explicite ; il suffit de calculer les matrices A^2, A^3, A^4 et de considérer la somme

$$(25) \quad \Phi_4(A) = \sum_{k=0}^{4} \frac{\Delta t^k}{k!} A^k$$

pour calculer la nouvelle valeur W^{j+1} grâce à

$$(26) \quad W^{j+1} = \Phi_4(A) \cdot W^j .$$

- Les relations (19) et (26) diffèrent ~~peu~~ ! Bien entendu, $W(t^j)$ et W^j sont une valeur exacte et une valeur approchée et il en est de même pour $W(t^{j+1})$ et W^j. Mais l'opérateur qui permet de passer de l'un à l'autre s'écrit $\exp(\Delta t A)$ dans le premier cas et $\Phi_4(A)$ dans le second. Or

$$(27) \quad e^{\Delta t A} = \Phi_4(A) + O(\Delta t^5)$$

donc $\Phi_4(A)$ est une approximation du "propagateur exact" $e^{\Delta t A}$ au quatrième ordre de précision. Le schéma de Runge-Kutta est précis au 4° ordre. C'est ce que montre aussi l'étude des erreurs à l'aide d'expériences numériques.

FD, juin 05.