

Méthodes numériques géométriques et raides pour équations différentielles

I. / Intégration des systèmes hamiltoniens non raides

PLAN

II. / Intégration d'équations raides

I. /

(1) Exemples de systèmes hamiltoniens et méthodes numériques

Systèmes hamiltoniens

On considère une ED de la forme

$$\ddot{q}(t) = -\nabla U(q(t))$$

avec $U: \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ une fonction nommée potentiel, \mathbb{E}^2

$q: [0, T] \rightarrow \mathbb{R}^d$ la fonction solution

$$\nabla U(q) = \begin{pmatrix} \frac{\partial U}{\partial q_1}(q) \\ \vdots \\ \frac{\partial U}{\partial q_d}(q) \end{pmatrix}$$

le gradient



Presque tout est vecteur, on ne va donc pas les mentionner

colonne

• On peut réécrire l'équation sous la forme d'une ED d'ordre 1 :

$$\begin{cases} \dot{q}(t) = p(t) \\ \dot{p}(t) = -\nabla U(q(t)) \end{cases}$$

ou (\Leftrightarrow)

$$\begin{cases} \dot{q} = \nabla_p H(p, q) \\ \dot{p} = -\nabla_q H(p, q) \end{cases}$$

avec $H: \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ appelé l'hamiltonien et

défini par $H(p, q) = \frac{1}{2} p^T p + U(q)$

$\nabla_p H$ de sa donne p

L'hamiltonien représente l'énergie du système, qui est conservée au cours du temps, ie:

$$H(p(t), q(t)) = \text{const.}$$

On dit que $H(p, q)$ est un invariant ou intégrale première du système d'ED.

Preuve

$$\frac{d}{dt} H(p(t), q(t)) = \nabla_p H(p(t), q(t)) \dot{p}(t) + \nabla_q H(p(t), q(t)) \dot{q}(t)$$

(?)

$$\Rightarrow = p \cdot \dot{p} + \nabla U(q) \cdot \dot{q} = p \cdot (-\nabla U(q)) + \nabla U(q) \cdot p$$

= 0 car 2 vect. colonne

Plutôt que le gradient, on aurait pu utiliser la jacobienne. Mais on préfère travailler avec des vecteurs colonnes.

vecteur ligne

Avec des jacobiniennes:

$$\frac{d}{dt}(H(p, q)) = \underbrace{\frac{\partial H}{\partial p}(p, q) \dot{p}}_{\text{vecteurs lignes}} + \underbrace{\frac{\partial H}{\partial q}(p, q) \dot{q}}$$

Expérience numérique avec $U(q) = (1 - q^2)^2$ avec dim. $d=1$

Euler explicite

$$\begin{cases} q_{n+1} = q_n + h p_n \\ p_{n+1} = p_n - h \nabla U(q_n) \end{cases} \quad \begin{aligned} q_n &\approx q(t_n) \\ p_n &\approx p(t_n) \\ t_n &= nh \end{aligned}$$

Avec une condition initiale donnée à $t=0=t_0$, ie p_0 et q_0 sont donnés.
(U est \mathbb{C}^2 , donc ce syst. de vect. est \mathbb{C}^2 , donc 3 solution (pas forcément global))

Euler simélectique

← méthode cool

$$\begin{cases} q_{n+1} = q_n + h p_n \\ p_{n+1} = p_n - h \nabla U(q_{n+1}) \end{cases}$$

ou la variante

$$\begin{cases} q_{n+1} = q_n + h p_{n+1} \\ p_{n+1} = p_n - h \nabla U(q_n) \end{cases}$$

Δ ne sont pas équivalentes, mais ont le même nom

Euler implicite

$$\begin{cases} q_{n+1} = q_n + h p_{n+1} \\ p_{n+1} = p_n - h \nabla U(q_{n+1}) \end{cases}$$

← système non-lin. à résoudre à chaque pas de la méthode

Rmg

- Avec explicite, et implicite, ça marche moyen car l'énergie (H) n'est pas conservée !!
Euler implicite est stable, mais les résultats sont faux! Stable ✗ correcte

Problème à N corps



Pour $p_i, q_i \in \mathbb{R}^3$, $i=1, \dots, N = \# \text{corps}$ on considère l'hamiltonien

$$H(p, q) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \frac{1}{m_i} p_i^T p_i + \sum_{1 \leq i < j \leq N} U_{ij}(||q_i - q_j||)$$

en cinétique

énergie potentielle $U_{ij}(r)$

Avec par exemple le potentiel gravitationnel

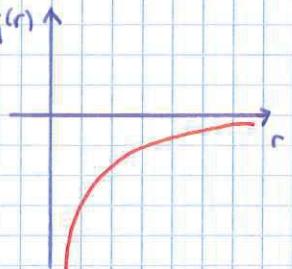
$$U_{ij}(r) = -\frac{G m_i m_j}{r}$$

$$m_i q_i = p_i \quad \text{quantité de mouvement}$$

m_i : masse de i

q_i : position de i

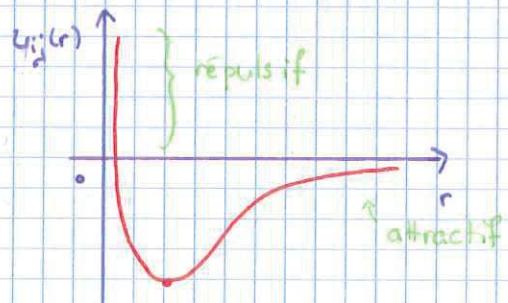
G est univ. de gravit.



on obtient une ED de dimension $6N$. (?)

En dynamique moléculaire, on peut considérer le potentiel de Lennard-Jones :

$$U_{ij}(r) = 4 \varepsilon_{ij} \left(\left(\frac{\sigma_{ij}}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{ij}}{r} \right)^6 \right)$$



→ Quantités conservées par le problème à N corps

(intégrales premières) :

(a) l'hamiltonien (l'énergie mécanique totale)

(b) Quantité de mouvement totale : $P(p, q) = \sum_{i=1}^N p_i$

(c) Moment angulaire total : $L(p, q) = \sum_{i=1}^N q_i \times p_i$ produit vectoriel

Preuve

(a) $\frac{dP}{dt}(p(t), q(t)) = \dots = 0$ (à voir)

(b) $\frac{dL}{dt}(p(t), q(t)) = \dots = 0$ (à voir)

(2) Propriétés géométriques du flot (solution) exact

Le flot exact : on considère un système d'EDO

$$\dot{y} = f(y) \quad y: [0, T] \xrightarrow{\text{on } \mathbb{R}} \mathbb{R}^d$$

$$f: \mathbb{R}^d \longrightarrow \mathbb{R}^d \text{ régulière}$$

On note $\varphi_t(y_0) := y(t)$ la solution du système avec condition initiale

$$y(0) = y_0 \in \mathbb{R}^d$$

(Rmq)

Propriété

(a) $\varphi_0(y_0)$ ou φ_0 est l'application identité

(b) Si la solution est globalement définie (ie sur \mathbb{R}) : $\varphi_s \circ \varphi_t = \varphi_{s+t} \quad \forall s, t \in \mathbb{R}$

⇒ action de groupe sur la solution

$$\varphi_{-t} \circ \varphi_t = id \quad \text{ie } (\varphi_t)^{-1} = \varphi_{-t}$$

(3) Invariant (Intégrale première)

Déf Une fonction non-constante $I(y)$ est une intégrale première de $\dot{y} = f(y)$ si $I'(y) \cdot f(y) = 0 \quad \forall y$.

Ceci équivaut à la propriété que pour toute solution $y(t)$ de $\dot{y} = f(y)$,

$$I(y(t)) = \text{const.}$$

$$\text{En effet: } (I(y(t)))' = I'(y) \cdot y' = I'(y) f(y)$$

Preuve

[\Leftarrow] On dérive par rapport à t la relation $I(y(t)) = \text{const.}$

$$0 = I'(y(t)) \dot{y}(t) = I'(y(t)) f(y(t)) = \nabla I(y(t)) \cdot \dot{y}(t) \text{ pour } I: \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$$

On fait $t = t_0$ pour $y(t_0) = y_0$.

$$I'(y_0) f(y_0) = 0 \quad \square$$

[\Rightarrow] Réciproquement, si $I'(y) f(y) = 0 \quad \forall y$, alors

$$\frac{d}{dt} (I(y(t))) = \dots = 0 \quad \square$$

Exemple

(1) Conservation de l'énergie pour un système hamiltonien; qu'on peut écrire

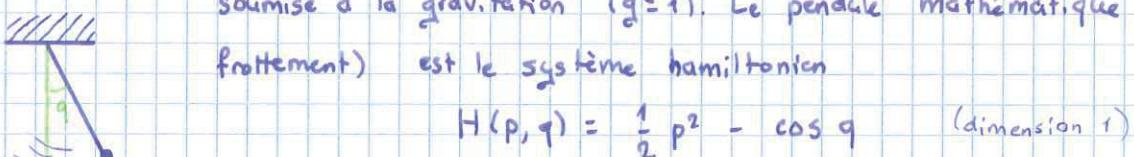
$$\begin{cases} \dot{q} = \nabla_p H(p, q) \\ \dot{p} = -\nabla_q H(p, q) \end{cases} \quad H(p, q) \text{ l'hamiltonien est un invariant.}$$

(2) La quantité de mouvement et le moment angulaire pour le problème à N corps.

c.f. série 2

(3) Le pendule mathématique: on considère une masse ($m=1$) attachée à une tige rigide,

soumise à la gravitation ($g=1$). Le pendule mathématique (sans aucun frottement) est le système hamiltonien



$$H(p, q) = \frac{1}{2} p^2 - \cos q \quad (\text{dimension 1})$$

Équation du mouvt:

$$q \text{ est l'angle avec l'} \quad (*) \quad \begin{cases} \dot{q} = p \\ \dot{p} = -\sin q \end{cases}$$

$\leftarrow m \cdot \text{accélération} = \sum \text{forces}$

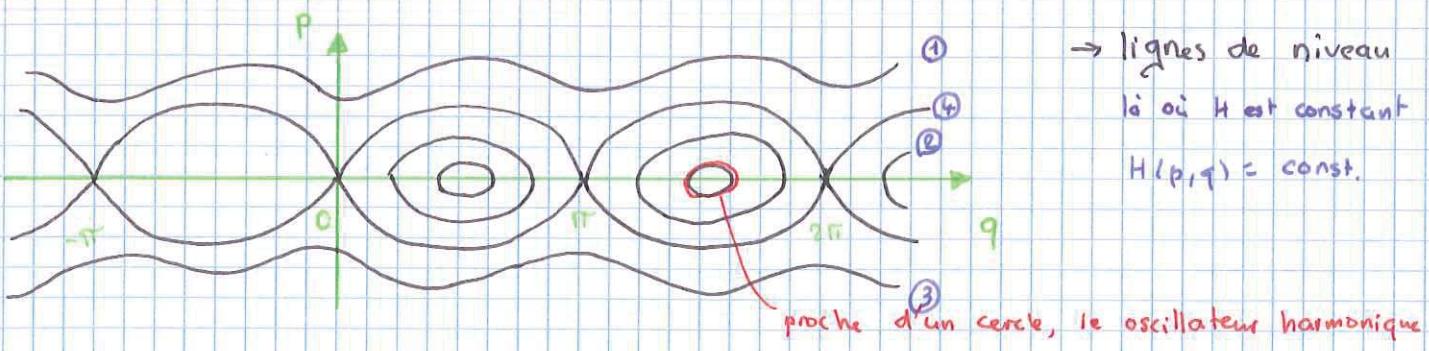


Si q est très petit, on peut dire $\sin q \approx q$, et ça nous donne l'oscillateur

harmonique (c.f. s2): $\begin{cases} \dot{q} = p \\ \dot{p} = -q \end{cases}$

\leftarrow linéaire \square

Pour étudier les solutions de (*), on étudie le portrait de phases (dans le plan (p, q))



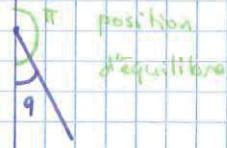
① : le pendule fait des tours dans un sens

orientation, angle pas
pareil que d'habitude

② : Le pendule oscille en bas

③ : Le pendule fait des tours dans l'autre sens

④ : Le pendule n'arrive tout juste pas à la verticale (position d'équilibre)



(4) Transformations symplectiques \Rightarrow préserve l'autre

Cas : dimension 2 ($d=1$)

On considère un parallélogramme engendré par $\xi, \eta \in \mathbb{R}^2$:

$$P = \{ s\xi + t\eta : s, t \in [0,1] \}$$

L'aire orientée de P est donnée par :

$$\text{Aire}(P) = \det(\xi, \eta) = \xi_p \eta_q - \xi_q \eta_p \quad \text{où} \quad \xi = \begin{pmatrix} \xi_p \\ \xi_q \end{pmatrix}, \eta = \begin{pmatrix} \eta_p \\ \eta_q \end{pmatrix}$$

2 aire négative possible

Déf On dit que $A : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^2$ linéaire est symplectique si

$\text{Aire}(P) = \text{Aire}(A(P)) \quad \forall P$ parallélogramme si elle préserve l'aire des parallélo

$$\text{Aire}(P) = \int_P 1 d\xi dq ; \quad \text{Aire}(A(P)) = \int_{A(P)} 1 d\xi dq = \int_P |\det A| dx dy$$

On voit que A est symplectique si $|\det(A)| = 1$.

changer variable; le dét de la jacobienne apparaît
 $(\xi, \eta) := A(x, y)$

Δ Seulement en dimension 2 Δ

On remarque que les rotations sont symplectiques en dimension 2.

Cas : dimension multiple

On considère un parallélogramme $P = \{ s\xi + t\eta : s, t \in [0,1] \} \subset \mathbb{R}^d$

avec

$$\xi = \begin{pmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \\ \vdots \\ \xi_d \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{2d} \quad \eta = \begin{pmatrix} \eta_1 \\ \eta_2 \\ \vdots \\ \eta_d \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{2d}$$

$$\xi_p = \begin{pmatrix} \xi_{p1} \\ \vdots \\ \xi_{pd} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^d$$

On considère la somme des aires orientées de projection de P sur les coordonnées polaires (p_i, q_i) , $i=1, \dots, d$:

$$\omega(\xi, \eta) = \sum_{i=1}^d \det \begin{bmatrix} \xi^P & \eta^P \\ \xi^q & \eta^q \end{bmatrix}$$

aire orientée (dim 2)

\Rightarrow aire de tous les parallèles possibles entre ξ_i et η_i

C'est une forme bilinéaire sur \mathbb{R}^{2d} , $\omega: \mathbb{R}^{2d} \times \mathbb{R}^{2d} \rightarrow \mathbb{R}$. Sous forme matricielle:

$$J = \begin{bmatrix} 0 & I \\ -I & 0 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{2d} \times \mathbb{R}^{2d} \quad J^T = -J$$

où I = Identité

On a

$$\omega(\xi, \eta) = \xi^T J \eta$$

$\Rightarrow \omega$ est la forme symplectique, J la matrice symplectique $\Rightarrow |\det J| = 1$ pour dim=2

\Rightarrow Échanger ξ et η inverse le signe (pour les 2 formes)

$\overset{!}{\text{Q}}$ - symplectique toujours en dim. paire

[Def] Une application linéaire $A: \mathbb{R}^{2d} \rightarrow \mathbb{R}^{2d}$ est symplectique si

$$A^T J A = J$$

sorte d'aire préservée

Ou de manière équivalente, $\omega(A\xi, A\eta) = \omega(\xi, \eta) \quad \forall \xi, \eta \in \mathbb{R}^{2d}$

En effet : $\omega(\xi, \eta) = \xi^T J \eta$; $\omega(A\xi, A\eta) = (A\xi)^T J (A\eta) = \xi^T A^T J A \eta$

[Def] Une application $g: U \rightarrow \mathbb{R}^{2d}$, $U \subset \mathbb{R}^{2d}$ ouvert est symplectique (g supposée différentiable) si la jacobienne $g'(p, q)$ est symplectique $\forall (p, q) \in U$, ie
 $(\Rightarrow g'(p, q)$ est linéaire) ou $(g'(p, q))^T J g'(p, q) = J$

$$\omega(g'(p, q)\xi, g'(p, q)\eta) = \omega(\xi, \eta) \quad \forall \xi, \eta$$

$\forall p, q$

Rappel (jacobienne)

$$g'(p, q) = \begin{bmatrix} \frac{\partial g_p}{\partial p}(p, q) & \frac{\partial g_p}{\partial q}(p, q) \\ \frac{\partial g_q}{\partial p}(p, q) & \frac{\partial g_q}{\partial q}(p, q) \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{(2d) \times (2d)}$$

$$\text{où } g = \begin{pmatrix} g_p \\ g_q \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{2d}$$

Symétrie du flot exact d'un système hamiltonien

Pour simplifier les notations, on pose

$$y = \begin{pmatrix} p \\ q \end{pmatrix}$$

Un système hamiltonien s'écrit :

$$\dot{y} = J^{-1} \nabla H(y)$$

$J: \mathbb{R}^{2d} \rightarrow \mathbb{R}$ donc $\nabla H(y) \in \mathbb{R}^{2d}$

∇H est un vecteur colonne

gradient

$$\nabla H(y) = \begin{pmatrix} \nabla_p H(p, q) \\ \nabla_q H(p, q) \end{pmatrix}$$

$$\dot{q} = \nabla_p H(p, q), \quad \dot{p} = -\nabla_q H(p, q)$$

Problème de signe

Théorème (Poincaré)

On suppose $H(p, q)$ de classe C^2 . Alors le flot exact du système hamiltonien φ_t est symplectique $\forall t$ où φ_t est défini.

Preuve

- La jacobienne du flot exact variationnelle :

$$\frac{\partial \varphi_t}{\partial y_0} (y_0) = \Psi(t) \text{ où } y_0 = \begin{pmatrix} p_0 \\ q_0 \end{pmatrix}$$

est solution de l'équation

$$\dot{\Psi}(t) = J^{-1} \nabla^2 H(\varphi_t(y_0)) \Psi$$

obtenue en dérivant par rapport à y_0 l'EDO vérifiée par $\varphi_t(y_0)$

$$\frac{d}{dt} \left(\underbrace{\varphi_t(y_0)}_{= y(t)} \right) = J^{-1} \nabla H(\varphi_t(y_0))$$

$\underbrace{= \dot{y}(t)}$

? dérivée de flot composées : $\frac{\partial J^{-1}}{\partial y_0} = \Psi$ (?)

$\Rightarrow \Psi(t)$ est une matrice

- Mtq la jacobienne du flot vérifie la condition de symétrie

$$\left(\frac{\partial \varphi_t}{\partial y_0} \right)^T J \left. \frac{\partial \varphi_t}{\partial y_0} \right|_{t=0} = I J I = J$$

-Q: La dérivée d'une application linéaire est elle-même : $f(x) = Ax$

$$f'(x) = A = f \quad \begin{matrix} \text{appli} \\ (\text{est}) \end{matrix}$$

$$f''(x) = 0$$

Mtq ça reste vrai au cours du temps (on dérive donc par rapport au temps) :

$$\frac{d}{dt} \left(\left(\frac{\partial \varphi_t}{\partial y_0} \right)^T J \left. \frac{\partial \varphi_t}{\partial y_0} \right|_{t=0} \right) = \frac{d}{dt} (\Psi^T J \Psi) = \dot{\Psi}^T J \Psi + \Psi^T J \dot{\Psi}$$

notations

$$= \Psi^T (\nabla^2 H)^T (J^{-1})^T J \Psi + \Psi^T J J^{-1} \nabla^2 H \Psi = 0$$

sym. $\underbrace{= J}_{J^2 = -Id}$

Ainsi la relation de similitude

$$\left(\frac{\partial \varphi_t}{\partial y_0} (y_0) \right)^T J \left(\frac{\partial \varphi_t}{\partial y_0} (y_0) \right) = J = \varphi_t^T J \varphi_t = I(y, \Psi)$$

est vérifiée pour tout y_0 , tout t tq $\varphi_t(y_0)$ est bien défini. \square

On a aussi montré que la similitude du flot exact est un invariant du système augmenté avec l'équation variationnelle :

$$\begin{cases} \dot{y} = J^{-1} \nabla H(y) \\ \dot{\psi} = J^{-1} \nabla^2 H(y) \psi \end{cases}$$

Rmq ▷ Dans la preuve du thm de Poincaré, on a au fait montré que l'équation variationnelle

$$\begin{cases} \dot{y} = J^{-1} \nabla H(y) & y(0) = y_0 \\ \dot{\psi} = J^{-1} \nabla^2 H(y) \psi & \psi(0) = I \quad \leftarrow \text{identité} \end{cases}$$

Possède l'intégrale première quadratique

$$\psi^T J \psi = J \quad \leftarrow \text{const}$$

▷ Réciproquement, on peut montrer que la similitude du flot exact est une propriété caractéristique du système hamiltonien:

[Thm]

Soit $f: U \subset \mathbb{R}^{2d} \rightarrow \mathbb{R}^{2d}$ de classe C^1 . Alors $\dot{y} = f(y)$ est localement un système hamiltonienssi son flot exact φ_t est similitue pour tout $y \in U$ et tout t assez petit.

localement hamiltonien \Rightarrow flot similitue
à hamilt. sur un voisinage pour tout point

deja prouve

Preuve

[\Rightarrow] Ok par thm de Poincaré

[\Leftarrow] On suppose φ_t similitue $\forall t$ assez petit, et $\forall y \in U$. On dérive par rapport à t la condition de similitude:

$$\frac{d}{dt} \left[\left(\frac{\partial \varphi_t}{\partial y_0} (y_0) \right)^T J \left(\frac{\partial \varphi_t}{\partial y_0} (y_0) \right) \right] = \frac{d}{dt} J = 0 \quad (*)$$

$\triangleq J \text{ indép. de } t$

Rappel:

$$\dot{y} = f(y) = f(\varphi_t(y_0))$$

$$\dot{\psi} = f'(y) \psi = f'(\varphi_t(y_0)) \frac{\partial \varphi_t}{\partial y_0} (y_0)$$

(*) devient donc:

$$0 = \underbrace{\frac{\partial \varphi_t(y_0)}{\partial y_0}^T J f'(\varphi_t(y_0))}_{\text{produit dériver}} \underbrace{\frac{\partial \varphi_t(y_0)}{\partial y_0}}_{J'} + \underbrace{\frac{\partial \varphi_t(y_0)}{\partial y_0}^T f'(\varphi_t(y_0))^T J}_{f'} \underbrace{\frac{\partial \varphi_t(y_0)}{\partial y_0}}_J$$

Cette identité est vraie pour tout t , donc on prend $t=0$:

$$0 = 1 \cdot J f'(y_0) \cdot 1 + 1 \cdot f'(y_0)^T J \cdot 1$$

$$0 = J f'(y_0) + f'(y_0)^T J \Leftrightarrow J f'(y_0) = (J f'(y_0))^T$$

$J f'(y_0)$ est une matrice symétrique. \square

Par le lemme d'intégrabilité, on obtient que $J f'(y_0)$ est localement le gradient d'une fonction $H(y)$ (ie vrai au voisinage de tout point $y_0 \in U$.)

Ce qui nous donne:

$$J f(y) = \nabla H(y) \quad \forall y \text{ ds vsg de } y_0 \in U$$

$$\Rightarrow f(y) = J^{-1} \nabla H(y) \Rightarrow \text{champ de vecteur hamiltonien} \quad \square$$

L Lemme (d'intégrabilité)

Soient $D \subset \mathbb{R}^n$ ouvert et $f: D \rightarrow \mathbb{R}^n$ de classe C^1 , avec $f'(y)$ (la matrice jacobienne) symétrique pour tout $y \in D$.

Alors pour tout $y_0 \in D$, il existe un vsg $V \ni y_0$ et une fonction

$$H: V \rightarrow \mathbb{R}^n \text{ de classe } C^2 \text{ tq } f(y) = \nabla H(y) \quad \forall y \in V.$$

La matrice jacobienne symétrique \Rightarrow localement le gradient d'un H

Rmq

• La réciproque est toujours vraie : $f(y) = \nabla H(y) \Rightarrow f'(y) = \nabla^2 H(y)$ symétrique pour H de classe C^2 (car l'ordre des dérivées importe peu)

• On a appliqué le Lemme d'int. au champ de vecteurs $J f(y)$ et non $f(y)$!

P

Preuve (Lemme)

• wlog, supposons $y_0 = 0$ (ok par changement variable). On considère une boule V autour de y_0 et inclue dans D . (ce sera notre voisinage)

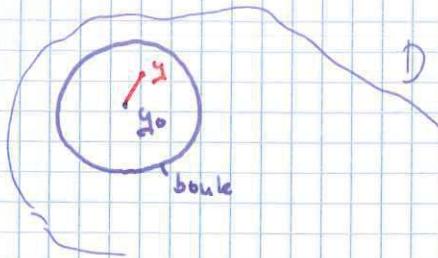
On pose:

$$H(y) = \int_0^1 y^T f(ty) dt + \text{const.}$$

• $H(y)$ est bien défini.

$H(y)$ est un réel car

~ produit scalaire $v^T u$



• On vérifie la condition :

$$f_k(y) \stackrel{!}{=} \frac{\partial H}{\partial y_k}(y) \quad \text{ie} \quad f(y) = \nabla H(y) \quad \forall y \in V$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial H}{\partial y_k}(y) &= \int_0^1 \left(e_k^T f(ty) + y^T \frac{\partial f}{\partial y_k}(ty) \cdot t \right) dt \\ &\stackrel{\frac{\partial y^T}{\partial y_k} = (0 \ 0 \dots 0 \ 1 \ 0 \dots 0)}{\substack{\text{1ère composante}}} \\ &= \int_0^1 \left(f_k(ty) + ty^T \nabla f_k(ty) \right) dt \end{aligned}$$

$$(*) \quad \frac{\partial f_i}{\partial y_k} = \frac{\partial f_k}{\partial y_i} \quad \text{car la jacobienne est symétrique}$$

Aussi, on remarque :

$$\frac{\partial H}{\partial y_k}(y) = \int_0^1 \frac{d}{dt} \left(+ f_k(ty) \right) dt = t \cdot f_k(ty) \Big|_{t=0}^{t=1} = \underbrace{f_k(y)}_{\text{D}}$$

L

Rmq

• Si $D = \mathbb{R}^n$ ou $D \subset \mathbb{R}^n$ ouvert étoilé, alors on a l'existence globale de $H(y)$ (alors définie sur D entier)

↑ ouvert étoilé : le segment $y_0 \rightarrow y$ sera toujours inclu dans D

• Au fait vrai pour tout D simplement connexe (grp fondamental trivial, ou "pas de trous")

Exemple

(1) $U = \mathbb{R}^2 \setminus \{0\}$ \leftarrow il a un trou en 0 , donc rmq s'applique pas !

$$\text{On peut m'tq} \quad \begin{pmatrix} p \\ q \end{pmatrix} = \frac{1}{p^2+q^2} \begin{pmatrix} p \\ q \end{pmatrix}$$

possède un flot exact symplectique, mais ce système n'est pas globalement hamiltonien sur U . \rightarrow c.f. exos 2, 3

⚠ Dans la preuve du lemme d'intégrabilité, $H(y)$ dépend de y_0 et V ⚡

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial f_i}{\partial y_k} \\ \vdots \\ \frac{\partial f_n}{\partial y_k} \end{pmatrix} (y) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_i}{\partial y_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial f_i}{\partial y_n} \end{pmatrix}$$

Propriétés fondamentales des transformations symplectiques

1. Si $g: U \subset \mathbb{R}^{2d} \rightarrow \mathbb{R}^{2d}$ est symplectique, alors g préserve le volume (réciroque vraie pour $d=1$)

Preuve (1)

$$\det((g'(y))^T J(g'(y))) = \det(J)$$

$$\Rightarrow \det(g'(y))^2 \det(J) = \det(J) = 1$$

$$\det(A \cdot B) = \det(A) \cdot \det(B)$$

$$\Rightarrow |\det(g'(y))| = 1$$

$|\det(g \circ h)| = 1 \Rightarrow$ volume préservé (à voir):

$$\text{Vol}(g(D)) = \int_U 1 dx = \left\{ \begin{array}{l} \text{change de} \\ \text{variable} \\ g(y) = x \end{array} \right\} = \int_D |\det(g'(y))| dy = \text{Vol}(D)$$

$$\Rightarrow \text{Vol}(g(D)) = \text{Vol}(D) \quad \square$$

2. Une composée de transformations symplectiques est encore symplectique.

Preuve (2)

Soient $g: U \rightarrow V$ symplectiques, posons $f = h \circ g$.
 $h: V \rightarrow W$

$$f'(y)^T J f(y) = (h \circ g)'(y)^T J (h \circ g)'(y) = (h'(g(y)) g'(y))^T J (h'(g(y)) g'(y))$$

$$= g'(y)^T \underbrace{h'(g(y))^T J h'(g(y))}_{= J} g'(y)$$

= J car h symplectique en tout point, particulièrement
en $g(y)$

$$= g'(y)^T J g'(y) = J$$

\uparrow
g symplectique

$$(p_n, q_n) \mapsto (p_{n+1}, q_{n+1})$$

La méthode d'Euler symplectique appliquée à un système hamiltonien avec $H(p, q)$

$$H(p, q) = \frac{1}{2} p^T p + U(q)$$

est symplectique.

ou plus généralement: $H(p, q) = T(p) + U(q)$

Preuve

En effet:

$$\begin{cases} \dot{p} = -\nabla V(q) \\ \dot{q} = \nabla T(p) \end{cases}$$

Euler simplectique peut s'écrire :

$$\begin{cases} p_{n+1} = p_n - h \nabla V(q_n) \\ q_{n+1} = q_n + h \nabla T(p_n) \end{cases} \quad (1)$$

$$\begin{cases} p_{n+1} = p_n - h \nabla V(q_n) \\ q_{n+1} = q_n + h \nabla T(p_n) \end{cases} \quad (2)$$

- (1) correspond au fait au flot exact de: \rightarrow après un temps h

$$(*) \begin{cases} \dot{p} = -\nabla V(q) \\ \dot{q} = 0 \end{cases}$$

Or (*) est un système hamiltonien, avec $H_1(p, q) = V(q)$

Ainsi $(p_n, q_n) \xrightarrow{\Phi_1} (p_{n+1}, q_n)$ est simplectique

- De même $(p_n, q_n) \xrightarrow{\Phi_2} (p_n, q_{n+1})$ est simplectique, comme flot exact du système hamiltonien $H_2(p, q) = T(p)$
- Ainsi la méthode d'Euler simplectique s'écrit $\Phi_2 \circ \Phi_1$ et est simplectique car comp. d'applications simplectiques. \square

On interprète cette méthode comme une méthode de splitting, où on résoud alternativement les sous-problèmes hamiltoniens:

$$\begin{cases} \dot{p} = -\nabla V(q) \\ \dot{q} = 0 \end{cases} \quad \text{et} \quad \begin{cases} \dot{p} = 0 \\ \dot{q} = \nabla T(p) \end{cases}$$

- Au fait Euler simplect. est simplect. même pour un H pas séparable.)

(5) Méthodes de Runge-Kutta simplectique

Déf Une méthode de RK pour un problème $\dot{y} = f(t, y)$, $f: [0, T] \times \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$ est définie par l'application $y_0 \mapsto y_1$, donnée par

$$\left\{ \begin{array}{l} k_i = f(t_0 + c_i h, y_0 + h \sum_{j=1}^s a_{ij} k_j) \quad i = 1, \dots, s \\ y_1 = y_0 + h \sum_{i=1}^s b_i k_i \end{array} \right. \quad (1)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} k_i = f(t_0 + c_i h, y_0 + h \sum_{j=1}^s a_{ij} k_j) \\ y_1 = y_0 + h \sum_{i=1}^s b_i k_i \end{array} \right. \quad y \in \mathbb{R}^d, k_i \in \mathbb{R}^d \quad (2)$$

où s - étages

a_{ij} , b_i , c_i - coefficients de la méthode notés à l'aide du tableau de Butcher.

| | | | | |
|----------|----------|----------|----------|---|
| c_1 | a_{11} | \dots | a_{1s} | En général, $c_i = \sum_{j=1}^s a_{ij}$ (somme ligne) |
| \vdots | \vdots | \ddots | \vdots | |
| c_s | a_{s1} | \dots | a_{ss} | |
| | b_1 | \dots | b_s | |

Exemple

(1) $[s=1]$

$$\begin{array}{|c|c|} \hline 0 & 0 \\ \hline & 1 \\ \hline \end{array}$$

Euler explicite

$$\begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 1 \\ \hline & 1 \\ \hline \end{array}$$

Euler implicite

$$\begin{array}{|c|c|} \hline \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \hline & 1 \\ \hline \end{array}$$

Point milieu

\rightarrow cheele !

Rmg

- La méthode de RK est explicite si $a_{ij} = 0 \forall j > i$, ie la matrice $(a_{ij})_{i,j}$ est strictement triangulaire inférieure.
 \Rightarrow pt milieu n'est pas explicite
- Si explicite $\Rightarrow k_i$ explicites. Sinon, trouver les k_i en résolvant un syst. non-lin.

Prop

Soit f continue, localement lipschitz. par rapport à y (2e variable). Alors $\forall h$ pas assez petit, la méthode est bien déf., ie le système \star possède une unique solution.

Preuve

On considère $\Psi : \mathbb{R}^{d \times s} \longrightarrow \mathbb{R}^{d \times s}$

$$(k_i)_{i=1}^s \longmapsto f(t_0 + c_i h, y_0 + h \sum_{j=1}^s a_{ij} k_j)_{i=1}^s$$

(Au fait on remarque que (1) ressemble à une équa. pour pt fixe)

Soit L la constante de Lipschitz tq

$$\|f(t_0 + c_i h, y) - f(t_0 + c_i h, z)\| \leq L \|y - z\| \quad \forall y, z \text{ ds nsq de } y.$$

$L := \max \{ L_i \}$ car locale et lipschitzien

z dépend de y .

Est-ce que Ψ est lipschitzienne? Oui, $t_0 + c_i h$ est fixé, ne joue aucun rôle.

Et $___$ est lipschitzien. On compose 2 appli. lipschitz, donc Ψ est lipschitz de

constante $L h c < 1 \quad \forall h < \frac{1}{L c}$ (assez petit)

\uparrow dépend de la $\|\cdot\|$ choisie

la solution \cup

Donc Ψ est contractante \Rightarrow possède un unique pt fixe: $(k_i)_{i=1,\dots,s}$

Rmq

- Le problème est non-raide (ie L pas trop grand), donc on peut résoudre par une itération du point fixe en itérant la fct Ψ .
- On peut aussi utiliser la méthode de Newton

Exemple

$$(1) \begin{cases} k_1 = f(t_0 + \frac{h}{2}, y_0 + \frac{h}{2} k_1) \\ y_1 = y_0 + h k_1 \end{cases} \quad (\text{RK})$$

$$\Rightarrow \frac{y_1 + y_0}{2} = y_0 + \frac{h}{2} k_1$$

$$\Rightarrow y_1 = y_0 + h f(t_0 + \frac{h}{2}, \frac{y_0 + y_1}{2}) \Leftrightarrow \text{RK}$$

La méthode du point milieu est symplectique (pour un syst. hamiltonien)

(6) Méthodes de RK et intégrales premières quadratiques

Thm

Si une méthode de RK préserve exactement les int. premières quadra. de tout système d'EDO $\dot{y} = f(y)$,

Alors la méthode est symplectique (lorsqu'on l'applique à un syst. hamiltonien)

Rmq

(1) $I(y)$ est une fct quadratique $\mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ si elle est de la forme

$$I(y) = y^T C y \quad \text{où } C \in M_{d \times d}(\mathbb{R}) \text{ symétrique}$$

(2) Si C n'est pas sym., ça reste une forme quadra.

Toute matrice carrée M peut être exprimée comme $M = A + S$ où A est anti-sym. et S est sym. Cette décomposition est unique.

$$M = S + A = \underbrace{\frac{M + M^T}{2}}_{\text{sym}} + \underbrace{\frac{M - M^T}{2}}_{\text{anti-sym}}$$

$$y^T M y = y^T S y + \underbrace{y^T A y}_{* \in \mathbb{R} \Rightarrow \text{symétrique}} \quad * = (y^T A y)^T = y^T A^T y = -y^T A y$$

Donc la partie anti-sym. n'a aucune contribution pour la forme quadra. On peut donc dire wlog M symétrique !!

Rappel

(1) $I(y)$ est une int. première de $\dot{y} = f(y)$

$$\text{si } f(y) \cdot \nabla I(y) = 0$$

$$\nabla I(y)^T f(y)$$

$$I'(y) f(y)$$

(2) pour $I(y) = y^T C y$, (*) $\nabla I(y) = 2 C y$ ← en exo

(*) → on écrit $\nabla I(y+h)$ et on regarde quelle est la partie lin.

Preuve (thm)

Soit $y_{n+1} = \Phi_h(y_n)$ une méthode de RK qui préserve les int. premières quadra.

Mtq $\Psi_h^T J \Psi_h = J$, avec $\Psi_h = \Phi'_h$ la jacobienne du flot numérique Φ_h

Condition de similité pour des appli. non-lin.

On va réutiliser l'équation variationnelle:

$$\begin{cases} \dot{y} = f(y) \\ y(0) = y_0 \end{cases} \xrightarrow{\Psi := \frac{\partial y(t)}{\partial y_0}} \begin{cases} \dot{y} = f(y) & y(0) = y_0 \\ \dot{\Psi} = f'(y) \Psi & \Psi(0) = I \end{cases}$$

méthode RK

$$y_{n+1} = \Phi_h(y_n)$$

$$\{y_n\}_{n \in \mathbb{N}}$$

$$\Psi_n := \frac{\partial y_n(t)}{\partial y_0}$$

la même méthode RK

$$(y_{n+1}, \Psi_{n+1}) = \Phi_h(y_n, \Psi_n)$$

$$\{y_n, \Psi_n\}_{n \in \mathbb{N}}$$

Ce diagramme commute.

Autrement dit, la méthode de RK appliquée à l'équa. variationnelle coïncide avec la méthode de RK appliquée au problème de départ et sa dérivée ($\frac{\partial y_n}{\partial y_0} =: \Psi_n$) par rapport à la donnée initiale.

Exemple

Euler explicite $y_{n+1} = y_n + h f(y_n)$

$$\left(\frac{\partial y_{n+1}}{\partial y_0} = \frac{\partial y_n}{\partial y_0} + h f'(y_n) \frac{\partial y_n}{\partial y_0} \right)$$

$$\Psi_{n+1} = \Psi_n + h f'(y_n) \Psi_n$$

⇒ On retrouve Euler explicite appliquée à l'équa. variationnelle 😊

On suppose le syst. hamiltonien, l'équa. variationnelle quadratique possède alors l'intégrale première quadratique

$$\Psi(t)^T J \Psi(t) = J$$

Comme la méthode de RK préserve cette int. première quadra. $\Psi_n^T J \Psi_n = J$ et on conclut en remarquant

$$\Psi_n = \frac{\partial \Psi}{\partial y_0} \quad \leftarrow \text{car le diag. commute.}$$

□

Rmq

(1) $I(y) : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^m$ est quadra. si chacune de ses m composantes est une forme quadratique

Prop

La méthode du point milieu préserve exactement les int. premières quadratiques.

→ En particulier, elle est symplectique (pour les syst. hamiltoniens)

Preuve

Soit $I(y) = y^T C y$ (où C -symétrique) une intégrale première
Cela signifie

$$I'(y) f(y) = 0 \quad \Rightarrow (\nabla I(y) = 2C_y \text{ et } I'(y) = (\nabla I(y))^T)$$

$$\underbrace{2y^T C f(y)}_{\in \mathbb{R}} = 2f(y)^T C y$$

$$\text{Point milieu: } y_{n+1} \stackrel{(4)}{=} y_n + h f\left(\frac{y_n + y_{n+1}}{2}\right)$$

$$\text{à montrer: } I(y_{n+1}) = I(y_n) \quad =: Y$$

$$I(y_{n+1}) = y_{n+1}^T C y_{n+1} \stackrel{(4)}{=} (y_n + h f(Y))^T C (y_n + h f(Y))$$

$$\stackrel{\text{dup}}{=} \underbrace{y_n^T C y_n}_{\text{commutables}} + \underbrace{h y_n^T C f(Y)}_{\text{symétrique}} + h f(Y)^T C \underbrace{y_{n+1}}_{\text{pas } y_n ?}$$

$$= I(y_n) + 2f(Y)^T C h \cdot \underbrace{\left(\frac{y_n + y_{n+1}}{2}\right)}_{= Y} \stackrel{\text{sa transposée}}{\text{?}}$$

$$= I(y_n) + 2h \underbrace{f(Y)^T C f(Y)}_{= 0} \quad ?$$

$$= I(y_n) \quad \Rightarrow I(y) \text{ conservée} \quad \square$$

Thm (+ gnr)

Si les coeff. d'une méthode de RK vérifient

$$b_i a_{ij} + b_j a_{ji} = b_i b_j \quad \forall i=1, \dots, s \quad \text{à cond. sym. en } i \text{ et } j$$

Alors la méthode de RK préserve exactement les int. premières quadra. de tout syst. $\dot{y} = f(y)$.

⇒ En particulier, elle est symplectique pour les systèmes hamiltoniens, ie pour f de la forme $f(y) = J^{-1} \nabla H(y)$, $H: U \subset \mathbb{R}^{2d} \rightarrow \mathbb{R}$, $H \in C^2$

Exemple

Point milieu

$$a_{11} = \frac{1}{2} \quad (s=1)$$

$$b_1 = 1 \quad b_1 a_{11} + b_1 a_{11} = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} = b_1 b_1 \quad \text{😊}$$

⇒ symplectique

Preuve

→ c.f. série

□

On peut étendre ce résultat aux méthodes de RK partitionnées (c.f. série)

Déf Pour un syst. partitionné $\begin{cases} \dot{y} = f(y, z) \\ \dot{z} = g(y, z) \end{cases}$, on définit une méthode de

RK partitionnée

$$\begin{cases} k_i = f(y_0 + h \sum_{j=1}^s a_{ij} k_j, z_0 + h \sum_{j=1}^s \hat{a}_{ij} \hat{k}_j) \\ h_i = g(y_0 + h \sum_{j=1}^s a_{ij} k_j, z_0 + h \sum_{j=1}^s \hat{a}_{ij} \hat{k}_j) \\ y_1 = y_0 + h \sum_{i=1}^s b_i k_i \\ z_1 = z_0 + h \sum_{i=1}^s \hat{b}_i \hat{k}_i \end{cases}$$

$$\begin{array}{c|c} a_{ij} & \hat{a}_{ij} \\ \hline b_i & \hat{b}_i \end{array}$$

Rmq

Si $a_{ij} = \hat{a}_{ij}$ et $b_i = \hat{b}_i \quad \forall i, j = 1, \dots, s$ alors on retrouve une méthode de RK non partitionnée.

Exemple

(1) Euler symplectique est partitionnée

$$\begin{array}{c|c} 0 & 1 \\ \hline 1 & 1 \end{array}$$

ou bien

$$\begin{array}{c|c} 1 & 0 \\ \hline 1 & 1 \end{array}$$

(il y a 2 Euler sympl.)

Rmq

- (1) Une méthode de RK partitionnée est symplectique (pour un syst. hamiltonien) si elle préserve les invariants quadratiques de forme $y^T D y$ de tout système partitionné
- $$\dot{y} = f(y, z)$$
- $$\dot{z} = g(y, z) \quad (\text{c.f. série } \overset{\text{du 3}}{w})$$

(7) Conditions d'ordres des méthodes de RK

Déf. On dit qu'une méthode numérique (à un pas) $y_{n+1} = \Phi_h(y_n)$ est d'ordre (local) p pour $\dot{y} = f(t, y)$ $\forall y_0, t_0$ avec $y(t_0) = y_0$ si

$$y(t_0 + h) - y_1 = O(h^{p+1}) \quad h \rightarrow 0$$

sol. num
vraie solution

i.e. $\|y(t_0 + h) - y_1\| \leq C \cdot h^{p+1}$ $\forall h$ assez petit, où C indép de h

Rmq

1. On peut se ramener au cas autonome $\dot{y} = f(y)$ wlog en posant $t = s$ et
- $$c_i = \sum_{j=1}^s a_{ij}$$
- (c.f. série)

2. On considère maintenant $\begin{cases} \dot{y} = f(y) \\ y(0) = y_0 \end{cases}$

(a) Développement en séries de Taylor de la solution exacte

On considère un système autonome $\begin{cases} \dot{y} = f(y) \\ y(0) = y_0 \end{cases}$. wlog on peut poser $s = 1$ et $s(t_0) = t_0$

Une formule valable pour y analytique (f analytique) et h assez petit:

$$y(h) \approx y(0) + \sum_{k \geq 1} \frac{y^{(k)}(0)}{k!} h^k$$

Formule plus générale :

$$y(h) = y(0) + \sum_{k=1}^N \frac{y^{(k)}(0)}{k!} h^k + \underbrace{h^{N+1} R_N(h)}_{= O(h^{p+1})} \quad \text{si } y \in \mathcal{C}^{p+1}$$

Or $y^{(1)} = f(y) = \dot{y} \Rightarrow \dot{y}(0) = f(y(0)) = f(y_0)$

$$y^{(2)} = (f(y))' = f'(y) \dot{y} = f'(y) f(y) \Rightarrow \dot{y}(0) = f'(y_0) f(y_0)$$

$$y^{(3)} = (f'(y) f(y))' = \underbrace{f''(y) f(y) f(y)}_{= (f'(y))'} + \underbrace{f'(y) f'(y) f(y)}_{= (f'(y))'}$$

Rmq

(1) $f'(y) = \left(\frac{\partial f_i}{\partial y_j} \right)_{i,j=1,\dots,d}$ est la matrice jacobienne de f en y , qui représente l'application lin. de la différentielle de f $f'_y: \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$

$$k \mapsto \underbrace{f'_y(k)}_{\substack{\text{matrice} \\ \text{vecteur}}} \quad ?$$

(2) Pour la différentielle seconde, l'appli. est bilin. et on lui donne deux vecteurs :

$$f''(y): \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$$

$$(h, k) \mapsto f''(y)(h, k)$$

$$\underbrace{f''(y)(K, L)}_{\substack{\text{vecteur}}} = \sum_{k,l=1}^d \frac{\partial^2 f_i(y)}{\partial y_k \partial y_l} K_k L_l = K^T (\nabla^2 f_i(y)) L$$

Au fait:

$$(f'_y K)' L = f''(y)(K, L) = f''(y)(L, K) \quad \leftarrow ?$$

(3) Pour la différentielle troisième

$$f^{(3)}(y): \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$$

$$(k, l, m) \mapsto f^{(3)}(y)(k, l, m)$$

(b) Développement en série de Taylor de la solution numérique

On considère une méthode de RK pour $\begin{cases} \dot{y} = f(y) \\ y(0) = y_0 \end{cases}$, ie où

$$y_1 = y_0 + h \sum_{i=1}^s b_i k_i =: y_0 + h \varphi(h)$$

où k_i dépendent de h

$$y_1 = y_0 + h \varphi(h) = y_0 + h \left(\varphi(0) + h \varphi'(0) + \frac{h^2}{2!} \varphi''(0) + \frac{h^3}{3!} \varphi'''(0) + \dots \right) (*)$$

Rappel (Taylor): $\varphi(x) = \sum_{k \geq 0} \frac{\varphi^{(k)}(a)}{k!} (x-a)^k$ ici: $x=h$, $a=0$

$$\text{où } \varphi(h) = \sum_{i=1}^s b_i k_i \Rightarrow \varphi(0) = \sum_{i=1}^s b_i f(y_0) \quad \leftarrow ?$$

$$k_i(h) = f(y_0 + h \sum_{j=1}^s a_{ij} k_j) \quad \leftarrow \text{cf. S. 5}$$

$$\varphi'(h) = \left(\sum_{i=1}^s b_i k_i \right)' = \sum_{i=1}^s b_i k'_i(h)$$

? cst

$$k'_i(h) = f'(y_0 + h \sum_{j=1}^s a_{ij} k_j) \left(\sum_{j=1}^s a_{ij} k_j + h \sum_{j=1}^s a'_{ij} k_j \right) \Rightarrow k'_i(0) = f'(y_0) \left(\sum_j a_{ij} f(y_0) \right)$$

indep de h $\underbrace{(h \sum a_{ij} k_j)'}_{\text{?}}$

$$= \sum_j a_{ij} f'(y_0) f(y_0)$$

Donc on peut développer :

$$\begin{aligned}
 h^2 \varphi'(0) &= h^2 \sum_{i=1}^s b_i k'_i(0) = h^2 \sum_{i=1}^s b_i f'(y_0 + 0 \cdot \sum_{j \neq i} a_{ij} k_j) \left(\sum_j a_{ij} k_j + 0 \cdot \sum_{j \neq i} a_{ij} k'_j \right) \\
 &= h^2 \sum_{i=1}^s b_i f'(y_0) \left(\sum_j a_{ij} k_j(0) \right) = h^2 \sum_{i=1}^s b_i f'(y_0) \left(\sum_j a_{ij} f(y_0) + 0 \cdot \sum_j a_{ij} k'_j \right) \\
 &= h^2 \sum_{i=1}^s b_i f'(y_0) \sum_j a_{ij} f(y_0) \\
 &= h^2 \left(\sum_{i,j=1}^s b_i a_{ij} \right) f'(y_0) f(y_0) \\
 k''_i(h) &= \left(f'(y_0 + h \sum_j a_{ij} k_j) \left(\sum_j a_{ij} k_j + h \sum_j a_{ij} k'_j \right) \right)' \\
 &= f''(\text{---} " \text{---}) (\text{---} " \text{---})^2 + f'(\text{---} " \text{---}) \left(\sum_j a_{ij} k'_j + \sum_j a_{ij} k'_j + h \sum_j a_{ij} k''_j \right)
 \end{aligned}$$

$$\text{Or } k'_i(0) = \sum_k a_{jk} f'(y_0) f(y_0)$$

$$\begin{aligned}
 \Rightarrow k''_i(0) &= f''(y_0) \left(\sum_j a_{ij} k'_j(0) \right)^2 + f'(y_0) \left(2 \sum_j a_{ij} k'_j(0) \right) \\
 &\quad = \sum_k a_{ik} f'(y_0) f(y_0) \\
 &= f''(y_0) \left(\sum_j a_{ij} f(y_0) \right)^2 + f'(y_0) \left(2 \sum_{j,k} a_{ij} a_{ik} f'(y_0) f(y_0) \right)
 \end{aligned}$$

En mettant tout ensemble dans $\boxed{\varphi}$, on a :

$$\begin{aligned}
 y_1 &= y_0 + h \sum_{k \geq 1} \frac{\varphi^{(k)}(0)}{k!} h^k \\
 &= y_0 + h \left[\sum_i b_i f(y_0) \right. \\
 &\quad + h \left(\sum_{i,j} b_i a_{ij} f'(y_0) f(y_0) \right. \\
 &\quad \left. \left. + \frac{h^2}{2} \sum_i b_i k''_i(0) \right) \right. \\
 &= y_0 + h \sum_i b_i f(y_0) + h^2 \sum_{i,j} b_i a_{ij} f'(y_0) f(y_0) \\
 &\quad + \frac{h^3}{2} \sum_i b_i \left(f''(y_0) \left(\sum_j a_{ij} f(y_0) \right)^2 + f'(y_0) 2 \sum_{j,k} a_{ij} a_{ik} f'(y_0) f(y_0) \right) \\
 &= \text{---} + \frac{h^3}{2} \sum_i b_i \left(f''(y_0) \sum_{j,k} a_{ij} a_{ik} (f(y_0))^2 + 2 \sum_{j,k} a_{ij} a_{ik} (f'(y_0))^2 f(y_0) \right)
 \end{aligned}$$

On obtient donc :

$$y_1 = y_0 + h \sum_i b_i f(y_0) + h^2 \sum_{i,j} b_i a_{ij} f'(y_0) f(y_0) + \frac{h^3}{2} \sum_{i,j,k} (b_i a_{ij} a_{ik} f''(y_0) f(y_0) f(y_0) + 2 b_i a_{ij} a_{ik} f'(y_0) f'(y_0) f(y_0))$$
$$\hookrightarrow y(h) = y_0 + h f + h^2 f' f + \frac{h^3}{2} (f''(f, f) + 2 f' f' f) + O(h^4)$$

Thm

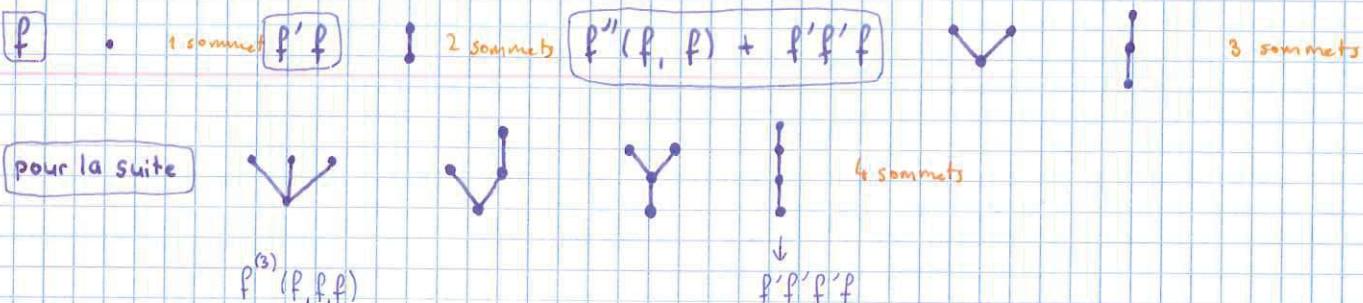
Une méthode de RK est d'ordre 1 si $\sum_i b_i = 1$

Elle est d'ordre 2 si de plus $\sum_{i,j} b_i a_{ij} = \frac{1}{2}$

Elle est d'ordre 3 si de plus $\sum_{i,j,k} b_i a_{ij} a_{ik} = \frac{1}{3}$ et $2 \sum_{i,j,k} b_i a_{ij} a_{ik} = \frac{1}{3}$

(c) Formulisme d'arbre pour les conditions d'ordre

Idee : utiliser des arbres racinés pour représenter les différentielles élémentaires de f



[Déf] L'ens. T des arbres non planaires racinés est défini récursivement par

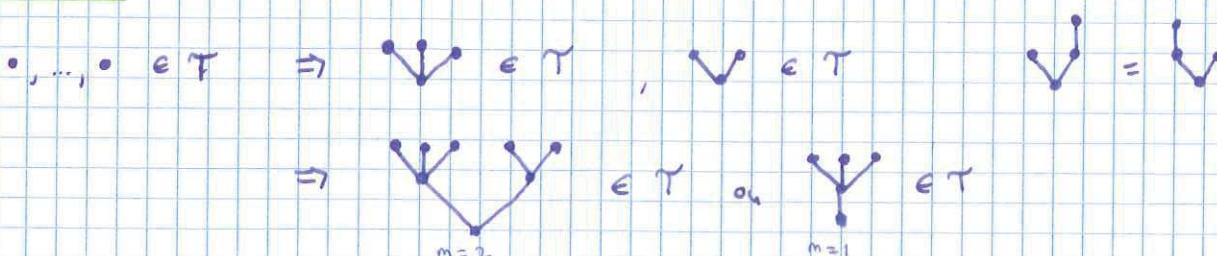
1. $\bullet \in T$
2. $\tau = [\tau_1, \dots, \tau_m] \in T$ si $m \geq 1$ et $\tau_1, \dots, \tau_m \in T$

▷ Où la notation $\tau = [\tau_1, \dots, \tau_m]$ désigne l'arbre obtenu en reliant les racines des arbres τ_1, \dots, τ_m à un nouveau noeud qui devient la racine de τ



▷ On ne tient pas compte de l'ordre des arbres τ_i

Exemple



Rmq

1. $f^{(m)}$ est une application m -multilin. symétrique $f^{(2)}(k, l) = f^{(2)}(l, k)$

Def A tout arbre $\tau \in T$, on associe la différentielle élémentaire $F(\tau)$ définie récursivement par

$$1. F(\cdot)(y) = f(y)$$

$$2. F([\underbrace{\tau_1, \dots, \tau_m}])(y) = f^{(m)}(F(\tau_1)(y), \dots, F(\tau_m)(y)) \quad \forall m \geq 1, \tau_i \in T$$

Exemples

$$(1) F(\swarrow)(y) = f^{(3)}(F(\cdot)(y), F(\cdot)(y), F(\cdot)(y)) = f^{(3)}(f, f, f)$$

$$\begin{aligned} (2) F(\vee)(y) &= f^{(2)}(F(\cdot)(y), F(\cdot)(y)) \\ &= f^{(2)}(f(y), f'(F(\cdot)(y))) \\ &= f''(f, (f', f)) = f''(f, f'f) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} (3) F(Y)(y) &= f'(F(\swarrow)(y)) \\ &= f'(f''(F(\cdot)(y), F(\cdot)(y))) \\ &= f'(f''(f, f)) = f'f''(f, f) \end{aligned}$$

$$(4) F(S)(y) = f'f'f'f$$

$$y(h) = y_0 + h F(\cdot) + \frac{h^2}{2} F(\wedge) + \frac{h^3}{3!} (F(V) + F(Y))$$

$$+ \frac{h^4}{4!} (F(V) + 3F(Y) + F(Y) + F(Z)) \quad \text{coeff qui jouent pas avec les notes plus haut !}$$

Def On définit la symétrie $\sigma(\tau)$ d'un arbre de $\tau \in T$ récursivement par

$$1. \sigma(\cdot) = 1$$

$$2. \sigma([\underbrace{\tau_1, \dots, \tau_1}_{n_1 \text{ fois}}, \underbrace{\tau_2, \dots, \tau_2}_{n_2 \text{ fois}}, \dots, \underbrace{\tau_k, \dots, \tau_k}_{n_k \text{ fois}}]) = \prod_{i=1}^k (n_i)! \sigma(\tau_i)^{n_i}$$

C'est le nombre de permutations possibles des branches de τ sans modifier τ

Exemples

$$(1) \sigma(\swarrow) = \sigma([\cdot, \cdot, \cdot]) = (3)! \sigma(\cdot)^3 = 3! = 6$$

$$(2) \sigma(\vee) = \sigma([\cdot, \cdot]) = \sigma(\cdot)^2 = \sigma(\cdot) \cdot \sigma([\cdot]) = 1$$

$$(3) \sigma(Y) = \sigma(\swarrow) = \sigma([\cdot, \cdot]) = 2! \sigma(\cdot)^2 = 2$$

$$\sigma(S) = 1 \quad \text{et} \quad \sigma(\S) = m!$$

Déf Le nombre de noeuds d'un arbre est défini récursivement par:

1. $| \circ | = 1$

2. $| [\tau_1, \dots, \tau_m] | = \left(\sum_{i=1}^m |\tau_i| \right) + 1$ noté $|\tau|$
L'arbre racine

Exemples

(1) $| \begin{array}{c} \bullet \\ \backslash \quad / \\ \bullet \quad \bullet \end{array} | = | [\circ, \circ, \circ] | = \sum_{i=1}^3 |\circ| + 1 = 3 + 1 = 4$

(2) $| \begin{array}{c} \bullet \\ \backslash \\ \circ \end{array} | = | [\circ, !] | = |\circ| + |!| + 1 = |\circ| + (|\circ| + 1) + 1 = 4$! auf !!

(3)

Déf Le factoriel d'un arbre, noté $\gamma(\tau)$ ou $\gamma(\tau)$, est défini récursivement par:

1. $\gamma(\circ) = 1$

2. $\gamma(\tau) = |\tau| \prod_{i=1}^m \gamma(\tau_i) \quad \forall \tau = [\tau_1, \dots, \tau_m]$

Exemples

(1) $\gamma\left(\begin{array}{c} \bullet \\ \backslash \quad / \\ \bullet \quad \bullet \end{array}\right) = 4 \left(\gamma(\circ)\right)^3 = 4$ bouquet: $\gamma(\tau) = \# \text{ noeuds}$

$\gamma\left(\begin{array}{c} \bullet \\ \backslash \quad / \\ \bullet \quad \bullet \\ \text{m fois} \end{array}\right) = (m+1) \left(\gamma(\circ)\right)^m = m+1$ 

(2) $\gamma\left(\begin{array}{c} \bullet \\ \backslash \quad / \\ \circ \quad ! \end{array}\right) = 4 \left(\gamma(\circ) + \gamma(!)\right) = 4 \left(\gamma(\circ) + 2 \gamma(\circ)\right) = 4 \cdot 2 = 8$

(3) $\gamma\left(\begin{array}{c} \bullet \\ \backslash \quad / \\ \circ \quad ! \\ \vdots \quad \vdots \\ \text{m fois} \quad \text{t}_{m-1} \text{ fois} \end{array}\right) = m \cdot \gamma\left(\begin{array}{c} \bullet \\ \backslash \quad / \\ \circ \quad ! \\ \vdots \quad \vdots \\ \text{t}_1 \quad \text{t}_0 \end{array}\right) = \dots = m!$ bambou: $\gamma(\tau) = (\# \text{ noeuds})!$

Thm

Le flot exact $\varphi_t(y_0)$ d'un système d'EDO général $\begin{cases} \dot{y} = f(y) \\ y(0) = y_0 \end{cases}$ est développable en série formelle :

$$\begin{aligned} \varphi_t(y_0) &= y_0 + \sum_{\tau \in T} \frac{t^{|\tau|}}{\gamma(\tau) \sigma(\tau)} F(\tau)(y_0) \\ &= y_0 + t f(y_0) + \frac{t^2}{2} f'(y_0) f(y_0) + \dots \end{aligned}$$

Rmg

1. En général, la série diverge et on doit la tronquer.

(pour t très petit, si $\varphi_t(y_0)$ analytique alors ça converge. On rajoute un reste pour être exact)

Preuve

Il suffit de vérifier que $\varphi_t(y_0)$ ainsi défini est solution de

$$\varphi_t(y_0) = y_0 + \int_0^t f(\varphi_s(y_0)) ds \leftarrow \text{formulation intégrale équivalente à (*)}$$

Développer $f(\varphi_s(y_0))$:

$$\Delta = \varphi_s(y_0) - y_0 = \sum_{\tau} \frac{s^{|\tau|}}{\gamma(\tau) \sigma(\tau)} F(\tau)(y_0)$$

$$f(\varphi_s(y_0)) = f(y_0 + \Delta) = f(y_0) + \sum_{k=1}^{+\infty} \frac{1}{k!} f^{(k)}(y_0)(\Delta, \dots, \Delta)$$

K fois
appli. multipl. lin.

En notant $\tau = [\tilde{\tau}_1, \dots, \tilde{\tau}_k]$ on obtient:

$$f(\varphi_s(y_0)) = f(y_0) + \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{\substack{\tilde{\tau}_1, \dots, \tilde{\tau}_k \in \mathcal{T} \\ \text{et } \Delta \\ \downarrow \\ \text{et } k \Delta}} \frac{1^{|\tilde{\tau}_1|} + \dots + 1^{|\tilde{\tau}_k|}}{k! \sigma(\tilde{\tau}_1) \dots \sigma(\tilde{\tau}_k) \gamma(\tilde{\tau}_1) \dots \gamma(\tilde{\tau}_k)} f^{(k)}(F(\tilde{\tau}_1), \dots, F(\tilde{\tau}_k))(y_0)$$

? chaque Δ vient avec $\frac{1}{\sigma(\tilde{\tau}_1)} \cdot \frac{1}{\gamma(\tilde{\tau}_1)}$

On utilise:

$$F(\tau) = f^{(k)}(F(\tilde{\tau}_1), \dots, F(\tilde{\tau}_k)) \quad \text{ou}$$

$$t^{|\tau|-1} = t^{1^{|\tilde{\tau}_1|} + \dots + 1^{|\tilde{\tau}_k|}}$$

$$\frac{\gamma(\tau)}{|\tau|} = \gamma(\tilde{\tau}_1) \dots \gamma(\tilde{\tau}_k)$$

$$(*) \cdot \frac{1}{r_1! \dots r_m!}$$

au lieu de sommer sur $\tilde{\tau}_i \in \mathcal{T}$, on somme sur

$[\tilde{\tau}_1, \dots, \tilde{\tau}_k] \Rightarrow$ on doit oublier l'ordre des

branches, ça va ajouter un coeff. (*)

Pour σ , il faut réécrire:

$$\tau = [\tilde{\tau}_1, \dots, \tilde{\tau}_k] = [\underbrace{\tau_1, \dots, \tau_r}_{r_1 \text{ fois}}, \dots, \underbrace{\tau_m, \dots, \tau_m}_{r_m \text{ fois}}]$$

$$\sigma(\tau) = \prod_{i=1}^k (r_i)! \sigma(\tau_i)^{r_i}$$

$$\Rightarrow \sigma(\tilde{\tau}_1) \dots \sigma(\tilde{\tau}_k) = \sigma(\tau_1)^{r_1} \dots \sigma(\tau_m)^{r_m} = \frac{\sigma(\tau)}{r_1! \dots r_m!}$$

vraie & fait sur des arbres

Si on somme avec $\sum_{\tilde{\tau}_1, \dots, \tilde{\tau}_k \in \mathcal{T}}$, ie sur tous les k-uplets d'arbres, par rapport à

une somme $\sum_{\tau \in [\tilde{\tau}_1, \dots, \tilde{\tau}_k]}$ il faut prendre en compte le fait que les branches sont

ordonnées, et donc diviser par le coeff. multinomial

$$\frac{k!}{r_1! \dots r_m!}$$

On obtient

$$\int_0^t f(\varphi_s(y_0)) = \sum_{\tau \in \mathcal{T}} \frac{t^{|\tau|} s^{|\tau|-1}}{\sigma(\tau) \gamma(\tau)} F(\tau)$$

(*) On obtient

$$f(y_0) + \sum_{k=1}^{+\infty} \sum_{\tau \in [\tilde{\tau}_1, \dots, \tilde{\tau}_k]} \frac{k!}{r_1! \dots r_m!} \frac{1^{|\tilde{\tau}_1|} + \dots + 1^{|\tilde{\tau}_k|}}{k! \sigma(\tilde{\tau}_1) \dots \sigma(\tilde{\tau}_k) \gamma(\tilde{\tau}_1) \dots \gamma(\tilde{\tau}_k)}$$

Et donc $\int_0^t |z(s)|^2 ds = s^2 \Big|_0^t = t^2 \Rightarrow$ on conclut.

"polygone"

redire correctement cette preuve présentée avec
10 000 erreurs :)

Somme sur $t \in [t_0, T]$

Somme sur t_0, t_1, \dots, t_k

Voir comment les facteurs changent (def)
 $\alpha, \beta, \gamma, \delta$

(d) B-séries et développement de la solution numérique

[Def] Soit $a: T \rightarrow \mathbb{IR}$ une appli. On appelle B-série la série formelle

$$B(a, y_0) = y_0 + \sum_{\tau \in T} \frac{h^{|\tau|}}{\sigma(\tau)} a(\tau) F(\tau)(y_0)$$

notes perso
Rmq

1. Avec $a(\tau) = \frac{1}{\gamma(\tau)}$ on obtient la série formelle du thm précédent (pour le flot exact)

Exemples

1. La solution exacte de $\dot{y} = f(y)$ peut se développer en B-série avec le coeff.

$$a(\tau) = \frac{1}{\gamma(\tau)} \quad \text{pour tout } \tau \in T$$

$$\varphi_h(y_0) = B\left(\frac{1}{\gamma}, y_0\right) \quad \leftarrow \text{série formelle donc on donne pas de valeur à } h$$

2. Exemple de méthode num. développable en B-série

$$\text{Euler explicite: } y_1 = y_0 + h f(y_0) = y_0 + h \frac{F(\cdot)(y_0)}{\sigma(\cdot)} + 0$$

$$\Rightarrow y_1 = B(a, y_0)$$

$$\text{où } a(\tau) = \begin{cases} 1 & \text{si } \tau = \cdot \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

Toutes les méthodes de RK

Un besoin d'un Lemme

Lemme

Soit $B(a, y_0)$ une B-série, alors

$$y_0 + h f(B(a, y_0)) = B(b, y_0) \text{ est une B-série où}$$

$$\begin{cases} b(\tau) = a(\tau_1) \dots a(\tau_m) & \text{pour tout } \tau = [\tau_1, \dots, \tau_m] \in \mathcal{T} \\ b(\cdot) = 1 & \end{cases}$$

$B(b, y_0)$ dépend de f et de h , au fait

Preuve

On reprend la preuve précédente, mais avec $\Delta = B(0, y_0) - y_0$. On peut donc écrire :

$$\begin{aligned}
 y_0 + h f(B(a, y_0)) &= y_0 + h f(y_0 + \Delta) \\
 &= y_0 + h f(y_0) + \sum_{k=1}^{+\infty} \sum_{\substack{\tau \in \mathcal{T} \\ \tau = [\tau_1, \dots, \tau_k]}} h \cdot \frac{h}{\sigma(\tau)} \underbrace{a(\tau_1) \dots a(\tau_k) F(\tau)(y_0)}_{=: b(\tau)} \\
 &\text{même calcul, mais} \\
 &\text{avec } a \text{ au lieu de } \underbrace{Y}_{Y} \\
 &= y_0 + \sum_{\tau \in \mathcal{T}} \frac{h}{\sigma(\tau)} b(\tau) F(\tau)(y_0)
 \end{aligned}$$

On a la même formule que dans la preuve précédente, mais avec $\frac{1}{\sigma(\tau)}$ remplacé par $a(\tau)$.

Thm

On considère une méthode de RK avec coefficients a_{ij}, b_j pour $i, j = 1, \dots, s$

$$\begin{bmatrix} a_{ij} \\ b_j \end{bmatrix}$$

Alors son flot numérique est développable en B-série $y_1 = B(a, y_0)$ et on a

$$y_1 = \Phi_h(y_0) = y_0 + \sum_{\tau \in \mathcal{T}} \frac{h}{\sigma(\tau)} a(\tau) F(\tau)(y_0)$$

où

$$a(\tau) = b^T a(\tau) \quad \text{où } a(\cdot) = \underline{1} = \begin{bmatrix} 1 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^s$$

coeff RK

b_j

$$a([\tau_1, \dots, \tau_k]) = A(a(\tau_1) \diamond \dots \diamond a(\tau_k))$$

$\overset{\text{coeff RK}}{\underset{a_{ij}}{\diamond}}$

$$u \diamond v = \begin{bmatrix} u_1 v_1 \\ \vdots \\ u_s v_s \end{bmatrix} \quad \text{noté } \star \text{ en matlab}$$

$$a: \mathcal{T} \rightarrow \mathbb{R}^s$$

Preuve (thm)

Soit une méthode de RK: $\begin{cases} Y_i = y_0 + h \sum_{j=1}^s a_{ij} f(Y_j) \\ y_i = y_0 + h \sum_{j=1}^s b_j f(Y_j) \end{cases} \quad i=1, \dots, s$

On suppose $Y_i = B(\alpha_i, y_0)$ et on pose $\alpha = \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \vdots \\ \alpha_s \end{bmatrix}$

avec $\alpha: \mathbb{T} \rightarrow \mathbb{R}^s$

$$\begin{aligned} Y_i &= y_0 + \sum_{j=1}^s a_{ij} h f(B(\alpha_j, y_0)) \\ &= y_0 + \sum_{j=1}^s a_{ij} \left(B(\beta_j, y_0) - y_0 \right) \quad \text{où } \beta_j(\tau) = \alpha_j(\tau_1) \dots \alpha_j(\tau_k) \\ &\quad \begin{array}{l} \text{Lemme pour} \\ \text{chaque } j \end{array} \quad \begin{array}{l} \text{linéaire} \\ \text{si } \tau = [\tau_1, \dots, \tau_k] \in \mathbb{T} \end{array} \\ &= y_0 + B\left(\sum_{j=1}^s a_{ij} \beta_j, y_0\right) - \dots \quad \begin{array}{l} \text{hors } p. 180 \\ \text{... } y_0 \end{array} \end{aligned}$$

On obtient:

$$B(\alpha_i, y_0) = Y_i = B\left(\sum_{j=1}^s a_{ij} \beta_j, y_0\right) = B((AB)_i)$$

Où on a utilisé la linéarité de

$$a \mapsto B(a, y_0) - y_0$$

Ainsi, on a

$$\alpha([\tau_1, \dots, \tau_k]) = A \underbrace{(\alpha(\tau_1) \diamond \dots \diamond \alpha(\tau_k))}_{\begin{bmatrix} \alpha_1(\tau_1) & \dots & \alpha_1(\tau_k) \\ \vdots & & \vdots \\ \alpha_s(\tau_1) & \dots & \alpha_s(\tau_k) \end{bmatrix}} \in \mathbb{R}^s$$

On conclut avec:

$$y_s = y_0 + h \sum_{i=1}^s b_i f(Y_i) = B(\alpha, y_0)$$

avec $\alpha = b^T \alpha$

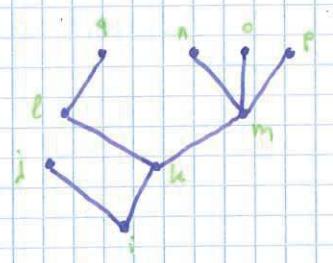
□

Exemples

(1) $a(\cdot) = \sum_{i=1}^s b_i$

on introduit le coeff. $c_i = \sum_{j=1}^s a_{ij}$

(2) $a(1) = \sum_{i,j=1}^s b_i a_{ij} = \sum_{i=1}^s b_i c_i$

(3) $T =$ 

$$; \quad F(T) = f''(f, f''[f'f, f'''(f, f, f)])$$

$\sigma(T) = 3!$

$\Rightarrow \frac{F(T)}{\sigma(T)} = \frac{1}{6} \quad \text{---} \quad \text{---}$

$$a(\tau) = \sum_{i,j,\dots,q=1}^s b_i \underset{a_{ij} a_{ik} a_{il} a_{jq} a_{km}}{=} c_i a_{ik} a_{lk} c_l a_{km} \underset{a_{mn} a_{mo} a_{mp}}{=}$$

Ton suit les branches de l'arbre

$$= \sum_{i,k,l,m=1}^s b_i \underset{a_{ij} a_{ik} a_{lk} c_l}{=} c_i a_{ik} a_{lm} \underset{(c_m)^3}{=}$$

^{↑ pas besoin de sommer sur les noeuds seuls q}

$$a(\bigvee^k) = \sum_{i,j,k=1}^s b_i \underset{a_{ij} a_{ik}}{=} c_i^2 \quad \text{l'indice n'apparaît qu'une fois}$$

$$a(\bigwedge^k) = \sum_{i,j,k=1}^s b_i \underset{a_{ij} a_{ik}}{=} c_i c_j \quad \text{l'indice apparaît deux fois}$$

Thm (*)

Une méthode de RK est avec coefficients $\begin{pmatrix} a_{ij} \\ b_i \end{pmatrix}$ est d'ordre p si

$$a(\tau) = (\gamma(\tau))^{-1} \quad \forall \tau \in \mathbb{T} \text{ avec } |\tau| \leq p$$

Preuve

En effet, cela équivaut à faire coïncider les B-séries de la solution exacte et la solution numérique jusqu'à l'ordre p.

□

Exemples

$$a(\bigvee) = \sum_{i=1}^s b_i c_i^3 \quad \underbrace{\quad}_{\text{conditions d'ordre}} = \frac{1}{4} = \frac{1}{\gamma(\downarrow)}$$

$$a(\gtrless) = \sum_{i,j,k=1}^s b_i a_{ij} a_{ik} c_k = \frac{1}{4!}$$

$$a(\triangleright) = \sum_{i,j=1}^s b_i c_i a_{ij} c_j = \frac{1}{8}$$

$$a(\Upsilon) = \sum b_i a_{ij} c_j^2 = \frac{1}{12}$$

valent pas vraiment justes

| ordre p | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | ... | 10 |
|--|---|---|---|---|---|----|-----|------|
| $ \tau = p$ # arbres (# conditions d'ordre) | 1 | 1 | 2 | 4 | 9 | 17 | ... | 1205 |



En dimension $n > 1$, on n'a pas le droit de faire certaines choses.

$$F(\begin{array}{c} \nearrow \\ f \end{array}) = f' (f''(f, f, f))$$

$$F(\begin{array}{c} \searrow \\ f \end{array}) = f'''(f'f, f, f)$$

differentes, sauf en dimension $d=1$

Rmg

Le caractère suffisant des conditions d'ordre obtenues est clair.

On peut montrer que ces conditions d'ordre sont néc. en mtq les $F(\tau)$ sont indépendantes et constituent une base de l'esp. vect. est séries formelles de la forme $B(a, y_0) - y_0$.
(en série: on trouve des f tq $F(\tau) = 0$ et $F(f) \neq 0$.)

Mise à jour du thm (*):

Thm (maj)

Une méthode de RK $\left| \begin{array}{c} a_{ij} \\ b_j \end{array} \right|$ est d'ordre p pour tout problème d'EDO

$y = f(g)$ ssi $a(\tau) = (y(\tau))''$ $\forall \tau \in T$ avec $|\tau| \leq p$

Thm

La composée de deux méthodes de RK

$$y_{n+1} = \Phi_h(y_n)$$

$$z_{n+1} = \hat{\Phi}_h(z_n)$$

$$\left| \begin{array}{c} a_{ij} \\ b_j \end{array} \right| \quad \left| \begin{array}{c} \hat{a}_{ij} \\ \hat{b}_j \end{array} \right|$$

Donnée par $\hat{\Phi}_h \circ \Phi_h$ est encore une méthode de RK

Preuve

$$\begin{matrix} A & O \\ \hline [b_1 \dots b_s] & \star \\ b_1 \dots b_s & \left[\begin{array}{c} \vdots \\ \bar{A} \end{array} \right] \\ b_1 \dots b_s & \hline b_1 \dots b_s & \bar{b}_1 \dots \bar{b}_s \end{matrix}$$

2s étages internes car on n'utilise pas l'étage *

le y_0 de la 2^e méthode est le y_1 de la 1^{ère}

C'est le tableau de Butcher de $\hat{\Phi}_h \circ \Phi_h$

□

Thm (+général)

L'ensemble des méthodes de RK muni de la composition des flots num. est un groupe (grp de Butcher)

Première

neutre :

$$y_n \mapsto y_n \quad (\gamma_{n+1} = y_n = e(y_n)) \Rightarrow \boxed{0}$$

inverse : existe, et est une méthode de RK

stable : cf. preuve du thm précédent □

assoc' : (?)

Rmq

- On peut montrer que la composée de deux B-séries est encore une B-série, i.e pour $a, b : T \rightarrow \mathbb{R}$, il existe $a \cdot b : T \rightarrow \mathbb{R}$ tq

$$B(b, B(a, y)) = B(a \cdot b, y)$$

- neutre : $a(\tau) = 0 \quad \forall \tau \in T \quad \Rightarrow B(a, y) = y \quad (+\circ)$

cult. gant Lien avec l'algèbre de Hopf des arbres de Connes et Kreimer (1980). On considère l'algèbre H des polynômes sur les arbres de T . $T \subset H$

Ex:

$$(+) + 2(I \circ) - \frac{3}{2}(+^2 \circ \circ) =: K$$

Une application $a : T \rightarrow \mathbb{R}$ peut s'étendre en morphisme d'algèbre $a : H \rightarrow \mathbb{R}$ par linéarité et multiplicativité $a(\tau_1 \tau_2) = a(\tau_1) a(\tau_2)$

Ex:

$$a(K) = a(+) + 2a(I)a(\circ) - \frac{3}{2}a(+)^2a(\circ \circ)$$

Pour faire de l'algèbre H une algèbre de Hopf, il faut rajouter deux opérations :

> coproduit : $H \rightarrow H \otimes H$

$$\exists \circ \otimes \circ + 2I \otimes \circ \circ + \dots \leftarrow \text{combi. lin. de } \{I_i\}_{i \in I} \otimes \{f_j\}_{j \in J}$$

On a la relation avec le groupe de B-séries :

$$a \cdot b(\tau) = \mu \circ (a \otimes b) \circ \Delta(\tau) \quad \forall \tau \in T$$

produit coproduit

> antipode : $H \rightarrow H$

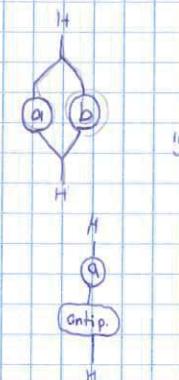
Permet de calculer l'inverse dans le groupe de B-séries :

$$a^{-1}(\tau) = a \circ S(\tau)$$

l'antipode

$$a \cdot a^{-1}(\tau) = e(\tau)$$

l'unité



(e) Méthodes de RK partitionnées

On considère un système d'EDO

$$\begin{cases} \dot{y} = f(y, z) \\ \dot{z} = g(y, z) \end{cases}$$

Rmq

1. Pour un système hamiltonien, $y(t), z(t) \in \mathbb{R}^d$ et $f = \nabla_y H$, $g = -\nabla_z H$ pour un hamiltonien $H: \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$, $H(y, z)$.

→ On note souvent p et q

2. Pour de tels systèmes, les invariants quadratiques sont de la forme

$$y^T C y + z^T D y + z^T E z = \star \text{ où } C, E \text{ symétriques}$$

En effet :

$$\begin{bmatrix} y^T & z^T \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C & \frac{1}{2} D^T \\ \frac{1}{2} D & E \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y \\ z \end{bmatrix} = \star$$

$$L = v^T S v \quad \text{où } S \text{ est une matrice sym. genl}$$

3. On a vu en exercice que la condition de similitude est un invariant quadratique de la forme $z^T D y$ pour l'équation variationnelle

$$\begin{cases} \dot{y} = f(y) \\ \dot{Y} = f'(y) Y \end{cases} \quad \text{où } Y(t) = \frac{\partial y}{\partial y_0}(t)$$

Thm

Si une méthode de RK partitionnée

$$\begin{array}{c|c} a_{ij} & \hat{a}_{ij} \\ \hline b_i & \hat{b}_i \end{array}$$

vérifie

$$\begin{cases} b_i \hat{a}_{ij} + b_j \hat{a}_{ji} = b_i \hat{b}_j & \forall i, j = 1, \dots, s \\ \hat{b}_i = b_i \end{cases}$$

Alors la méthode conserve exactement les invariants quadratiques de la forme

$$z^T D y$$

De plus la méthode est similitude pour les systèmes hamiltoniens.

Exemples

(1) Le moment angulaire $L(p, q) = p_1 q_2 - p_2 q_1$ pour le problème à 2 corps

$$\dot{q} = p \quad \dot{p} = -\alpha \frac{q}{\|q\|^3} \quad p, q \in \mathbb{R}^2$$

Rmq

(1) $\dot{z}^T D y$ est un invariant quadratique si

$$0 = \frac{d}{dt} \left[z(t)^T D y(t) \right] = \dot{z}(t)^T D y(t) + z(t)^T D \dot{y}(t)$$

$$0 = g(y, z)^T D y + z^T D f(y, z)$$

\Rightarrow Il faudrait faire: au temps $t=0$ ok, puis ...

(2) Une méthode de RK non-partitionnée symplectique ne peut pas être explicite.
(ou \Leftrightarrow : RK symplectique et explicite \Rightarrow partitionnée)

En effet

Pour l'oscillateur harmonique $\begin{cases} \dot{q} = p \\ \dot{p} = -q \end{cases} \Rightarrow H(p, q) = \frac{p^2}{2} + \frac{q^2}{2}$

l' trajectoire d'un cerceau

Posons $z = p + iq$ où $i \in \mathbb{C}$. On obtient

$$\dot{z} = iz \quad (\dot{z} = \dot{p} + i\dot{q} = -q + ip = i(p + iq) = iz)$$

On reconnaît l'équation scalaire test avec valeur propre i . Une méthode de RK non-partitionnée donne une récurrence

$$z_{n+1} = R(hi) z_n \quad \text{avec } R(z) \text{ la fct de stabilité}$$

Conserver l'invariant quadratique $H(p, q)$ équivaut pour la méthode numérique à avoir $|z_{n+1}| = |z_n|$, ou encore $|R(hi)| = 1$.

\Rightarrow Cette condition ne peut être vérifiée pour tout h si $R(hi)$ est un polynôme

(faire $h \rightarrow \infty$)

↯

s: la méthode est explicite

(3) Pour la méthode du point milieu, $R(z) = \frac{1+z/2}{1-z/2}$

On peut vérifier $|R(ih)| = 1$

La méthode est implicite

Exemple

1. Euler symplectique:

$$(a) \quad \begin{array}{c|c} 0 & 1 \\ \hline 1 & 1 \end{array} \quad \text{ou} \quad (b) \quad \begin{array}{c|c} 1 & 0 \\ \hline 1 & 1 \end{array}$$

[ordre 1]

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + h f(y_n, z_n) \\ z_{n+1} = z_n + h g(y_n, z_n) \end{cases}$$

l' implicite en z , expl. en y : (a)

\Rightarrow Ces méthodes implicites en général deviennent explicites pour un système de la forme $\dot{y} = f(z)$, $\dot{z} = g(y)$; En particulier c'est vrai avec un système

hamiltonien de la forme $H(p, q) = T(p) + U(q)$

2. Störmer-Verlet

[ordre 2]

(RK partitionnée d'ordre 2 et symplectique)

| | | |
|---|---------------|---------------|
| 0 | 0 | 0 |
| 1 | $\frac{1}{2}$ | $\frac{1}{2}$ |
| * | $\frac{1}{2}$ | $\frac{1}{2}$ |

| | | |
|---------------|---------------|---------------|
| $\frac{1}{2}$ | $\frac{1}{2}$ | 0 |
| $\frac{1}{2}$ | $\frac{1}{2}$ | 0 |
| | $\frac{1}{2}$ | $\frac{1}{2}$ |

(tableaux)

$$\begin{array}{|c|c|} \hline t & \begin{array}{|c|c|} \hline a_{ij} \\ \hline b_i \\ \hline \end{array} \\ \hline \end{array}$$

$$\begin{array}{|c|c|} \hline t & \begin{array}{|c|c|} \hline \hat{a}_{ij} \\ \hline \hat{b}_i \\ \hline \end{array} \\ \hline \end{array}$$

$$k_1 = f(y_0, z_0 + \frac{h}{2} \hat{k}_1) \quad (2)$$

$$k_2 = f(y_0 + \frac{1}{2} h k_1 + \frac{1}{2} h k_2, z_0 + \frac{1}{2} h \hat{k}_1) \quad (2)$$

$$\hat{k}_1 = g(y_0, z_0 + \frac{1}{2} h k_1) \quad (1)$$

$$\hat{k}_2 = g(y_0 + \frac{1}{2} h k_1 + \frac{1}{2} h k_2, z_0 + \frac{1}{2} h \hat{k}_1) \quad (3)$$

$$y_1 = y_0 + \frac{h}{2} (k_1 + k_2) \quad (4)$$

$$z_1 = z_0 + \frac{h}{2} (\hat{k}_1 + \hat{k}_2)$$

simplifications

Si $\dot{y} = f(z)$, $\dot{z} = g(y)$; on peut calculer dans l'ordre suivant pour rendre la méthode explicite.

⇒ simplifiable pour le pendule simple, pas pour le pendule double

⚠ Résultat non valide en général pour les méthodes de RK partitionnées

► Réinterprétation de Störmer-Verlet comme méthode de splitting pour un problème de

la forme $\begin{cases} \dot{y} = f(z) \\ \dot{z} = g(y) \end{cases}$ On parle de méthode saute-mouton ou leap frog

étape 1.

$$\begin{cases} \dot{y} = 0 & y(0) = y_0 \\ \dot{z} = g(y) & z(0) = z_0 \end{cases} \quad \text{avec un pas de temps } \frac{h}{2} \quad \rightarrow \text{on obtient } (z_0, z_{\frac{1}{2}})$$

$$z_{\frac{1}{2}} = z_0 + \frac{h}{2} g(y_0)$$

étape 2.

$$\begin{cases} \dot{y} = f(z) & y(0) = y_0 \\ \dot{z} = 0 & z(0) = z_{\frac{1}{2}} \end{cases} \quad \text{avec un pas de temps } h \quad \rightarrow \text{on obtient } (y_1, y_{\frac{1}{2}})$$

$$y_1 = y_0 + h f(y_{\frac{1}{2}})$$

Étape 3.

$$\begin{cases} \dot{y} = 0 \\ \dot{z} = g(y) \end{cases} \quad \begin{cases} y(0) = y_0 \\ z(0) = z_{\frac{1}{2}} \end{cases} \quad \text{avec un pas } h/2 \rightarrow \text{on obtient } (y_1, z_1)$$

$$z_1 = z_{\frac{1}{2}} + h g(y_1) = z_0 + \frac{h}{2} g(y_0) + \frac{h}{2} g(y_1)$$

Rmq

(1) Pour un syst. hamiltonien séparable, les systèmes intermédiaires

$$\begin{cases} \dot{y} = 0 \\ \dot{z} = g(y) = -\nabla T(y) \end{cases} \quad \text{et} \quad \begin{cases} \dot{y} = f(z) = U(z) \\ \dot{z} = 0 \end{cases} \quad \text{sont aussi hamiltoniens.}$$

Le syst. hamilt. séparable a l'hamiltonien suivant:

$$H(y, z) = T(y) + U(z) \quad \begin{cases} \dot{y} = f(z) = \nabla U(z) \\ \dot{z} = g(y) = -\nabla T(y) \end{cases}$$

Les syst. intermédiaires ont les hamiltoniens respectifs suivants :

$$(y, z) \mapsto T(y)$$

$$(y, z) \mapsto U(z)$$

On retrouve que la méthode saute-mouton est symplectique comme composition de flots exacts de systèmes hamiltoniens

(f) Méthodes de collocation

← construction de
méthode d'ordre élevé

But : construire des méthodes de RK non-partitionnées symplectiques d'ordre élevé pour un système $\dot{y} = f(y)$, $y(t) \in \mathbb{R}^d$

Déf. Soient $c_1 < \dots < c_s$ des réels dans $[0, 1]$. Le polynôme de collocation $u(t)$ de degré ≤ s à valeur dans \mathbb{R}^d est défini par :

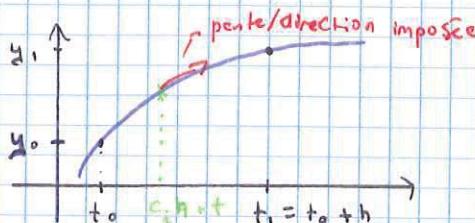
$$\begin{cases} u(t_0) = y_0 \\ u(t_0 + c_i h) = f(u(t_0 + c_i h)) \end{cases} \quad \begin{matrix} \leftarrow 1 \text{ condition} \\ i=1, \dots, s \quad \leftarrow s \text{ conditions} \\ \leftarrow \text{comme } \dot{y} = f(y) \end{matrix}$$

La méthode de collocation associée à $c_1 < \dots < c_s$ est alors définie par

$$y_0 \mapsto u(t_0 + h) := y_1$$

$\Rightarrow u(t)$ vérifie l'équa. diff. aux temps $t_0 + c_i h$, $i=1, \dots, s$

$\Rightarrow s+1$ contraintes, $\deg(u) = s \rightarrow$ on a de bonnes chances d'avoir un u unique!



exemple avec $s=1$ nœud c_1 ,

Le polynôme est de la forme

$$u(t) = y_0 + (t - t_0)k \quad \text{avec } k \in \mathbb{R}^d$$

$$\text{On obtient : } \begin{cases} k = f(y_0 + c_1 h, h) \\ y_1 = y_0 + h k \end{cases} = y_0 + (t_0 + h - t_0) k = u(t_0 + h)$$

On reconnaît la méthode de RK suivante : $\begin{array}{c|c} c_1 \\ \hline 1 \end{array}$

$$c_1 = 0 \rightarrow \text{EE}$$

$$c_1 = 1 \rightarrow \text{EI}$$

$$c_1 = \frac{1}{2} \rightarrow \text{point milieu}$$

\Rightarrow Pour $s=1$, la méthode est bien définie !!

Thm

Une méthode de collocation avec les nœuds $c_1 < \dots < c_s$ équivaut à une méthode de RK à s étages avec :

$$a_{ij} = \int_0^{c_i} l_j(\tau) d\tau \quad l_j(\tau) = \prod_{i \neq j} \frac{\tau - c_i}{c_j - c_i} \quad - \text{polyn. de Lagrange}$$

$$b_i = \int_0^1 l_i(\tau) d\tau \quad l_i(c_j) = \delta_{ij}$$

Réquivalent à une méthode de RK implicite

Corollaire

La méthode de collocation est bien définie pour tout pas h supposé assez petit.

Preuve (thm)

c.f. série 18?)

important ! Revoir ce que c'est !

Rappel :

La méthode de quadrature $\int_0^1 g(t) dt \approx \sum_{i=1}^s b_i g(c_i)$ d'ordre le plus élevé

est la méthode de Gauss d'ordre $2s=p$ (ie méthode exacte pour tout polyn.

de degré $< p$) obtenue pour c_1, \dots, c_s les racines du polynôme de

Legendre

$$\frac{d^s}{dt^s} \left(t^s (1-t)^s \right) \quad \leftarrow a s \text{ racines réelles ; degré } 2s-s=s \right. \square$$

Thm

La méthode de collocation de Gauss (associée aux nœuds de la formule de quadrature de Gauss) conserve les intégrales premières quadratiques.

En particulier, pour les systèmes hamiltoniens elle est symplectique.

Preuve

Soit $y^T C y$ (C sym) une intégrale première quadratique du système d'EDO $\dot{y} = f(y)$.

Donc $f(y)^T C y = 0 \quad \forall y \quad \textcircled{*}$

On considère la méthode avec y_i et y_0 .

$$y_1^T C y_1 - y_0^T C y_0 = u(t_0+h)^T C u(t_0+h) - u(t_0)^T C u(t_0)$$

$$= \int_{t_0}^{t_0+h} \frac{d}{dt} (u(t)^T C u(t)) dt = 2 \int_{t_0}^{t_0+h} \underbrace{\dot{u}(t)^T C u(t)}_{\substack{\text{polyn. de degré } \leq 2s-1}} dt$$

$$\text{or } \sum_{i=1}^s h \underbrace{u(t_0 + c_i h)^T C u(t_0 + c_i h)}_{\substack{\text{quadrature de Gauss d'ordre } 2s \\ \text{exacte pour les polyn. de degré } \leq 2s-1}}$$

$$= 2 \sum_{i=1}^s h f(u(t_0 + c_i h))^T C u(t_0 + c_i h) = 0$$

def de u $= 0 \quad \forall i=1, \dots, s$ par $\textcircled{*}$

On a bien $y_1^T C y_1 = y_0^T C y_0 \quad \textcircled{**}$

□

Superconvergence (2^e avantage des méthodes de collocation)

Thm

Si la condition $B(p)$: $\sum_{i=1}^s b_i c_i^{k-1} = \frac{1}{k} \quad k=1, \dots, p$ est vérifiée,

Alors la méthode de collocation avec les noeuds c_1, c_2, \dots, c_s est d'ordre p pour tout système d'EDO.

Rmg

(1) Il suffit de vérifier pour les boucles

(2) Une formule de quadrature $\int_0^1 g(t) dt \approx \sum_{i=1}^s b_i g(c_i)$ est par définition d'ordre p si elle est exacte pour tout $g \in P_{p-1}$ (polyn.)

Ceci équivaut à avoir une formule exacte pour une base de P_{p-1} . Avec la base canonique $\{1, t, t^2, \dots, t^{p-1}\}$ on obtient la condition

$$\frac{1}{k} = \int_0^1 t^{k-1} dt = \sum_{i=1}^s b_i c_i^{k-1} \quad k=1, \dots, p \quad \leftarrow \text{on retrouve la condition } B(p)$$

(3.) Avec $p=s$, la base de Lagrange $l_i(t) = \prod_{j \neq i} \frac{t - c_j}{c_i - c_j} \quad i=1, \dots, s$ on obtient

$$b_i = \sum_{i=1}^s b_i \underbrace{l_i(c_i)}_{= \delta_{ii}} = \int_0^1 l_i(t) dt$$

Cet unique choix des b_j garantit un ordre d'au moins s pour la formule de quadrature.

(4.) Pour un problème de quadrature $\begin{cases} \dot{y} = f(t) \\ t = 1 \end{cases}$ une méthode de RK correspond

à la formule de quadrature avec nœuds $c_i = \sum_{j=1}^s a_{ij}$ et poids b_i ; Ici,

$B(p)$ correspond au fait aux conditions d'ordre pour les arbres "bouquet": $(\gamma(\tau))^{-1} = \frac{1}{|\tau|}$

$$\text{et } a(\tau) = \sum_{\substack{i,j_1 \\ \dots \\ i,j_s}} b_i a_{ij_1} a_{ij_2} \dots a_{ij_s} = \sum_{i=1}^s b_i c_i$$

On a donc la condition: $a(\tau) = \frac{1}{\gamma(\tau)}$ pour $|\tau| \leq p$ ← ordre d'une méthode de quadrature \geq ordre d'une méthode de RK
 τ bouquet

Preuve (thm superconv.)

Ce thm est vraiment cool, car #arbre croît exponentiellement avec $|\tau|$.

Soit $\delta(t)$ tq $\dot{u}(t) = f(u(t)) + \underbrace{\delta(t)}_{\text{défaut}}$ (On pose au fait $\delta(t) = u(t) - f(u(t))$)

avec $u(t)$ le polyn. de collocation.

On soustrait avec $\dot{y} = f(y)$:

$$\dot{u} - \dot{y} = f(u(t)) - f(y(t)) + \delta(t)$$

$$\text{et } f(u) - f(y) = f'(y)(u-y) + \underbrace{O(\|u-y\|^2)}_{=: r(t)} \quad \begin{array}{l} \text{• développement de Taylor} \\ \text{• } u \text{ et } y \text{ sont qd'm proches} \\ \text{• } f \text{ est régulière} \end{array}$$

On obtient en intégrant entre t_0 et t_0+h :

$$u(t_0+h) - y(t_0+h) - \underbrace{(u(t_0) - y(t_0))}_{= y_0 - u_0 = 0} = \int_{t_0}^{t_0+h} (f'(y)(u-y) + \delta(t) + r(t)) dt$$

On a aussi:

$$(u - y)(t) = f'(y(t)) (u-y)(t) + \delta(t) + r(t) \quad \leftarrow \text{équa. diff. lin par rapport à } u \text{ et } y$$

$$=: A(t)$$

Par la formule de la variation des constantes, et en intégrant entre t_0 et t_0+h on obtient:

$$u(t_0+h) - y(t_0+h) = \int_{t_0}^{t_0+h} R(t_0+h, s) (\delta(s) + r(s)) ds$$

$$\begin{aligned} \dot{y}(t) &= A y(t) + g(t) \\ y(t) &= \int_{t_0}^t e^{(t-s)A} g(s) ds + y(t_0) e^{(t-t_0)A} \end{aligned}$$

où $R(t, s)$ est la matrice résolvante définie par

$$\begin{cases} \frac{\partial R(t, s)}{\partial t} = A(t) R(t, s) \\ R(s, s) = I_d \end{cases} \quad \leftarrow \text{EDO matricielle par rapport à } t$$

Remarques: pour $A(t)$ indép. de t , on a $R(t, s) = \exp((t-s)A)$

But: montrer $u(t_0+h) - y(t_0+h) = O(h^{s+1})$

$$1. \text{ On a } \int_{t_0}^{t_0+h} R(t_0+h, s) \delta(s) ds = \sum_{i=1}^s h R(t_0+h, t_0+c_i h) \delta(t_0+c_i h) + O(h^{p+1})$$

↑
la formule de
quadra est
d'ordre p

par déf de
 $u(t)$

\Rightarrow premier terme

2. On peut montrer $\|u(t) - y(t)\| = O(h^{s+1})$ par le lemme suivant.

$$\Rightarrow \text{Ainsi } r(t) = O(\|u(t) - y(t)\|^2) = O(h^{2s+2})$$

Donc $r(t) = O(h^{p+1})$ car $p \leq 2s$ (l'ordre maximal d'une formule de quadrature)

$\approx y \approx 1$ de marge
au fait: $O(h^{p+2})$ $g(h) \leq C \cdot h^3 \Rightarrow g(h) \leq C \cdot h^2$

On obtient

$$u(t_0+h) - y(t_0+h) = O(h^{p+1})$$

$\approx y_1$ ↑ avec de la marge

$$\|y_1 - y(t_0+h)\| \leq C h^{p+1}$$

indép du temps car on la calcule avec la méthode

Donc la méthode numérique est bien d'ordre p

D

Lemme

Le polynôme de collocation $u(t)$ est un polyn. d'approximation de la solution $y(t)$ à l'ordre s sur $[t_0, t_0+h]$, i.e. $\|u(t) - y(t)\| \leq C \cdot h^{s+1}$

moins fort que le thm car $p \in [s, 2s]$

(en considérant la méthode au 1er pas)

Preuve

$$u(t_0+\tau h) = \sum_{i=1}^s f(u(t_0+c_i h)) l_i(\tau) \quad \tau \in [0, 1]$$

décomp. dans la base de Lagrange $= u(t_0+c_i h)$ Lagrange

$$y(t_0+\tau h) = \sum_{i=1}^s f(y(t_0+c_i h)) l_i(\tau) + E(\tau, h)$$

erreur

où $E(\tau, h)$ est l'erreur d'interpolation de $y(t_0+\tau h)$ par le polyn. d'interpolation aux nœuds c_i .

On n'a pas d'erreur d'interpol. avec u car u est un polyn. de degré $\leq s-1$.

On rappelle • $\|E(\tau, h)\| \leq C \sup_{\tau \in [t_0, t_0+h]} h^s \|y^{(s+1)}(t)\|$

• $\|E^{(k)}(\tau, h)\| \leq C \cdot h^{s+1-k} \sup_{\tau \in [t_0, t_0+h]} \|y^{(s+1)}(t)\|$

On perd des puissances de h

On intègre la différence $\hat{u} - \hat{y}$ entre 0 et τ :

$$(*) u(t_0 + th) - y(t_0 + th) = h \sum_{i=1}^s \Delta f_i \int_0^\tau l_i(\sigma) d\sigma + \underbrace{\int_0^\tau E(\sigma, h) d\sigma}_{O(h^{s+1})}$$

où $\Delta f_i = f(u(t_0 + c_i h)) - f(y(t_0 + c_i h))$ \star \star ie exactement ce qu'il faut

$\star \int_0^\tau l_i(\sigma) d\sigma$ est une constante (indép. de h)

En utilisant que f est localement lipschitzienne de constante L :

$$\Delta f_i \leq L \|u(t_0 + c_i h) - y(t_0 + c_i h)\|$$

On obtient, en prenant le max des $\tau \in [0, 1]$:

$$(*) \max_{t \in [t_0, t_0 + h]} \|u(t) - y(t)\| \leq h L C E + O(h^{s+1})$$

""

$$(1 - h L C) E = O(h^{s+1})$$

$$E = \frac{1}{\underbrace{1 - h L C}_{\leq 2}} O(h^{s+1}) \quad h L C \leq \frac{1}{2}$$

On a bien:

$$E = O(h^{s+1}) \quad \square$$

"?"

Formules de quadrature de Gauss est d'ordre p
pour les méthodes de collocation.

q. Méthodes symétriques et méthodes de composition

> On remarque que le flot exacte vérifie

$$\varphi_t \circ \varphi_{-t} = \text{id} \quad \text{ie} \quad \varphi_t^{-1} = \varphi_{-t} \quad \text{A t assez petit pour avoir } \varphi_t, \varphi_{-t} \text{ bien définies}$$

> $\Phi_h^{-1} = \Phi_{-h}$ est fausse en générale pour une méthode numérique

[Déf] L'adjoint d'une méthode $\Phi_h(y_n) = y_{n+1}$ est $\Phi_h^* = \Phi_{-h}$ (pour un h assez petit)

De manière équivalente, $\Phi_h^* \circ \Phi_h = \text{id}$

La méthode est symétrique si $\Phi_h^* = \Phi_h$

Propriétés

$$(\Phi_h^*)^*$$

Exemples

1. E.E. $y_{n+1} = y_n + h f(y_n)$

$$\begin{aligned} &\stackrel{h \leftrightarrow -h}{\Rightarrow} y_{n+1} = y_n - h f(y_n) \\ &\stackrel{y_n \leftrightarrow y_{n+1}}{\Rightarrow} y_n = y_{n+1} - h f(y_{n+1}) \\ &\Rightarrow y_{n+1} = y_n + h f(y_{n+1}) \quad \text{E.I.} \end{aligned}$$

$$(E.E)^* = E.I.$$

2. Les méthodes du point milieu, du trapèze et de Störmer-Verlet sont symétriques

Pt milieu $y_{n+1} = y_n + h f\left(\frac{y_n + y_{n+1}}{2}\right) \quad h \leftrightarrow -h$

$$y_n \leftrightarrow y_{n+1}$$

(On l'avait déjà prouvé en disant que c'était une méthode de Galois avec un nœud)

3. Pour une méthode num. Φ_h , $\Psi_h := \Phi_{h/2}^* \circ \Phi_{h/2}$ est symétrique car

$$\Psi_h^* = (\Phi_{h/2}^* \circ \Phi_{h/2})^* = \Phi_{h/2}^* \circ (\Phi_{h/2}^*)^* = \Psi_h$$

| Φ_h | Ψ_h |
|--------------|------------------|
| E.E. | méthode trapèzes |
| E.I. | point milieu |
| E. Simplect. | Störmer-Verlet |

$$\begin{aligned} \Phi_{h/2} &= Y = y_n + \frac{h}{2} f(y_n) \\ y_{n+1} &= \Phi_{h/2}^*(Y) = Y + \frac{h}{2} f(y_{n+1}) \\ &= y_n + \frac{h}{2} (f(y_n) + f(y_{n+1})) \end{aligned}$$

↑ méthodes sym. d'ordre au moins 1 \Rightarrow donc d'ordre 2 !!

T Thm

Soit φ_t le flot exact de $\dot{y} = f(y)$ et Φ_h une méthode num. d'ordre p , i.e.

$$\Phi_h(y) - \varphi_h(y) = O(h^{p+1}) =: C(y) h^{p+1} + O(h^{p+2})$$

Alors l'adjoint Φ_h^* est encore d'ordre p . De plus

$$\Phi_h^*(y) - \varphi_h(y) = (-1)^p C(y) h^{p+1} + O(h^{p+2})$$

 La composition de deux méthodes d'ordre p est d'ordre $2p$ (si la compo est symétrique) Une méthode sym. est d'ordre pair

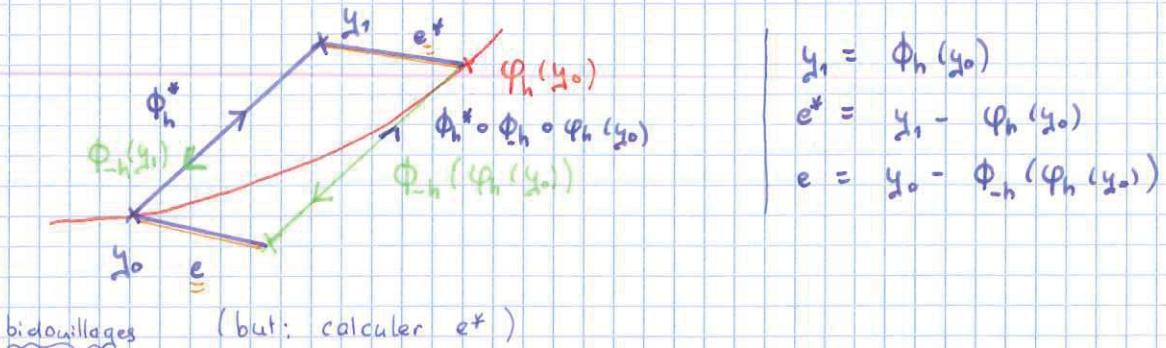
En particulier, si $\Phi_h = \Phi_h^*$: $C(y) = (-1)^p C(y)$

p impair $\Rightarrow C(y) = 0 \Rightarrow$ méthode d'ordre $p+1$

L

Preuve

Un petit dessin pour illustrer les notations utilisées



$$-e = \Phi_{-h}(\varphi_h(y_0)) - \Phi_{-h}(\varphi_h(y_0))$$

On reconnaît l'erreur locale de Φ_h avec le pas $-h$ et la donnée initiale $\varphi_h(y_0)$

$$\text{Ainsi: } -e = (-1)^{p+1} C(y) h^{p+1} + O(h^{p+2})$$

$$e = (-1)^p C(y) h^{p+1} + O(h^{p+2})$$

$\varphi_h(y_0)$ normalement. Mais $\varphi_h(y_0) = y_0 + O(h) \rightsquigarrow C(\varphi_h(y_0)) = C(y_0) + O(h)$

$$\text{De plus: } e = \Phi_{-h}(y_1) - \Phi_{-h}(\varphi_h(y_0))$$

$$\text{Or } \Phi_h = I_d + O(h) \leftarrow \text{perturbation de l'identité } \Phi_{\pm h}$$

$$\text{Donc } e = (I_d + O(h)) e^* \leftarrow e \text{ et } e^* \text{ de la même taille}$$

$$\text{et } e^* = (I + O(h)) e = (-1)^p C(y) h^{p+1} + O(h^{p+2}) \quad \square$$

L

Méthodes de composition

[Déf] Soit Φ_h une méthode numérique de base. Soient y_1, \dots, y_s des réels. On définit la méthode de composition associée comme

$$\Psi_h := \Phi_{y_sh} \circ \dots \circ \Phi_{y_1h}$$

[Thm]

Si Φ_h est d'ordre r Alors Ψ_h est d'ordre $r+1$

$$y_1 + \dots + y_s = 1$$

$$y_1^{r+1} + \dots + y_s^{r+1} = 0$$

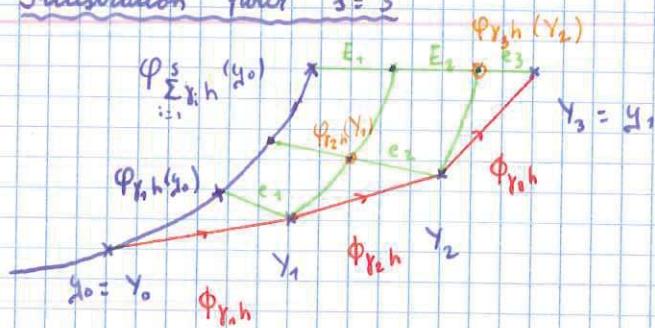
[Preuve]

On suppose $\Phi_h(y) = \varphi_h(y) + C(y) h^{r+1} + O(h^{r+2})$

On montrera $\Psi_h(y_0) - \varphi_h(y_0) = C(y_0) (\underbrace{y_1^{r+1} + \dots + y_s^{r+1}}_{=0}) h^{r+1} + O(h^{r+2})$

On pose $Y_0 = y_0$ et $Y_{i+1} = \Phi_{y_ih}(Y_i)$; ainsi $y_i = \Psi_h(Y_0) = Y_s$

Illustration pour s=3



$$\begin{aligned} E_3 &= e_3 & (e_3 = Y_2 - \varphi_{Y_2h}(Y_1)) \\ E_2 &= \varphi_{Y_3h}(Y_2) - \varphi_{(Y_2+y_3)h}(Y_1) & \text{propager avec } \varphi_{Y_2h} \\ E_1 &= \varphi_{(Y_2+y_3)h}(Y_1) - \varphi_{(Y_1+y_2+y_3)h}(Y_0) & \underbrace{\quad}_{=1} \end{aligned}$$

Par hypothèse: $e_i := \Phi_{y_ih}(Y_{i-1}) - \varphi_{y_ih}(Y_{i-1})$

$$\begin{aligned} &= C(Y_{i-1})(y_i h)^{r+1} + O(h^{r+2}) \\ &= C(y_0)(y_i h)^{r+1} + O(h^{r+2}) \end{aligned}$$

Ainsi, comme $\varphi_h = I + O(h)$, on a :

$$E_i = (I + O(h)) e_i \quad \leftarrow E_i \text{ obtenus en appliquant } \varphi_{y_ih} \text{ à chaque terme de } e_i$$

On obtient l'erreur locale de Ψ_h , avec $\sum_{i=1}^s y_i = 1$:

$$\begin{aligned} \Psi_h(y_0) - \varphi_h(y_0) &= E_1 + \dots + E_s = (I + O(h))(e_1 + \dots + e_s) \\ &= C(y_0)((y_1 h)^{r+1} + \dots + (y_s h)^{r+1}) + \\ &= C(y_0)(y_1^{r+1} + \dots + y_s^{r+1}) h^{r+1} + O(h^{r+2}) \end{aligned}$$

D

Rmq

- (1) Les conditions $\begin{cases} \gamma_1 + \dots + \gamma_s = 1 \\ \gamma_1^{r+1} + \dots + \gamma_s^{r+1} = 0 \end{cases}$ n'ont pas de solution pour r impair

On peut donc monter un ordre seulement pour r pair, donc on va travailler avec des méthodes symétriques.

Application Méthode du "triple saut"

- On prend $s=3$, $\gamma_1 = \gamma_3$ imposé.

Ainsi, si $\Phi_h = \Phi_{-h}^*$, on aura $\Psi_h = \Phi_{Y_1,h} \circ \Phi_{Y_2,h} \circ \Phi_{Y_3,h}$ symétrique et d'ordre pair.

$$\text{On pose } \gamma_1 = \gamma_3 = \frac{1}{2 - 2^{\frac{1}{r+1}}} \quad \text{et} \quad \gamma_2 = 1 - 2\gamma_1 = \frac{-2^{\frac{1}{r+1}}}{1 - 2^{\frac{1}{r+1}}}$$

→ Ainsi, si Φ_h est symétrique d'ordre $2=r$, Ψ_h est d'ordre 4 par symétrie.

- On applique la même méthodologie avec Ψ_h comme nouvelle méthode de base. On obtient une nouvelle méthode de composition d'ordre 6 avec 9 compositions de Φ_h .

→ En itérant cette méthodologie, on obtient une méthode d'ordre $2p$ avec 3^{p-1} compositions de Φ_h (ordre 2)

↑
chaque itération multiplie par 3

Rmq

- (2) Avec $s=5$ et $\gamma_1 = \gamma_2 = \gamma_4 = \gamma_5$, on obtient une méthode d'ordre 4 à partir de Φ_h symétrique d'ordre 2 qui a une meilleure cst d'erreur que "triple saut" (c.f. Série)

- (3) Les méthodes de compositions sont chouettes car:

- faciles à implémenter
- préserrent les propriétés géométriques de Φ_h en général
 Φ_h symplectique $\Rightarrow \Psi_h$ aussi
 Φ_h préserve un invariant $\forall h \Rightarrow \Psi_h$ aussi

Application Construction de méthodes de splitting d'ordre élevé

$$\dot{y} = f^A(y) + f^B(y) \quad \text{Soient } \Phi_h^A \text{ une méthode pour } \dot{y} = f^A(y) \\ \Phi_h^B \quad \text{---} \quad \dot{y} = f^B(y)$$

$$\text{On pose } \Psi_h := \Phi_h^A \circ \Phi_h^B$$

$$\Phi_h := \Psi_{h/2}^* \circ \Psi_{h/2} \quad \leftarrow \text{méthode de base symétrique simple}$$

Si Φ_h^B est symétrique, on peut prendre

$$\Phi_h = \Phi_{h/2}^{A^*} \circ \Phi_h^B \circ \Phi_{h/2}^A$$

Si Φ_h^B et Φ_h^A sont symétriques, on peut prendre

$$\Phi_h = \Phi_{h/2}^A \circ \Phi_h^B \circ \Phi_{h/2}^A$$

Préservation des invariants, conservation de l'énergie

Thm

Une méthode de RK ne peut pas préserver tous les invariants polynomiaux de degré $k \geq 3$

Preuve

e.f. S.11 ; preuve avec exemple $\dot{Y} = AY$ avec $\text{tr}(A) = 0$; $\det(Y)$ comme invariant non préservé

Rmq

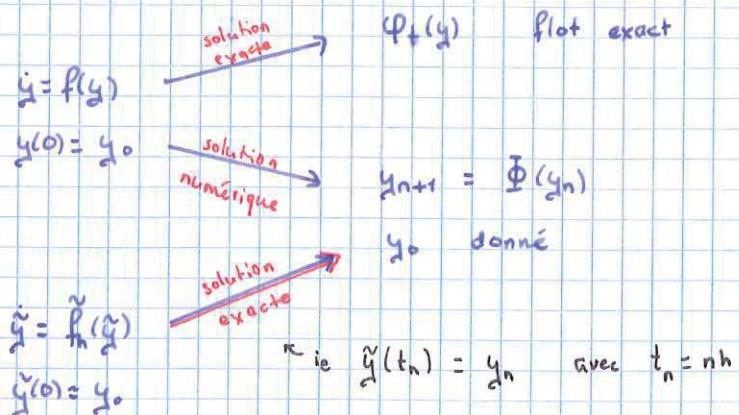
Pour le degré $k=2$, les méthodes de RK symplectiques préservent exactement les invariants quadratiques (ie inv. polyn. deg 2)

on l'a fait dans l'autre sens

Préservation de l'énergie: théorie de l'analyse rétrograde

Backward error analysis

On considère



L'idée est d'interpréter la solution numérique comme la solution exacte d'un problème modifié.

Exemples

1. On considère le cas linéaire $\begin{cases} \dot{y} = Ay \\ y(0) = y_0 \end{cases}$ (*)

Série converge

Si on applique une méthode de RK, on obtient $y_{n+1} = R(hA) y_n$ (**)

?
fct de stabilité

La solution exacte est $y(t) = e^{tA} y_0$

Pour que (**) soit une solution exacte, on va écrire $R(hA)$ comme une exponentielle de

L qqch: $R(hA) = e^{h\tilde{A}_h}$ où $\tilde{A}_h = \frac{1}{h} \log(R(hA))$
 $= \exp(h \cdot \frac{1}{h} \log(R(hA))) = R(hA)$

Donc la solution numérique est solution exacte de

$$\dot{y} = \tilde{A}_h y \Rightarrow \dot{y} = \frac{1}{h} \log(R(hA)) y$$

Reste à voir que c'est bien défini:

$$\log(R(z)) \text{ avec } R(z) = 1 + z + O(z^2)$$

est une fct analytique au voisinage de 0, car composée de fct analytiques, donc la série associée à $h\tilde{A}_h = \log(R(hA))$ converge pour $|hA|$ assez petit, i.e $\forall h$ assez petit.

L $\tilde{A}_h = A + h a_2 A^2 + h^2 a_3 A^3 + \dots = A + O(h)$
? coefficients

L \tilde{A}_h est une perturbation de A ; le problème modifié est proche

Rmg

En général, on a $\tilde{f}_h = f + hf_2 + h^2 f_3 + \dots$

Mais la série diverge en général pour f non linéaire.

2. On considère $\begin{cases} \dot{y} = f(t) \\ y(0) = y_0 \end{cases}$

Série diverge

On peut écrire ce problème sous forme autonome en posant:

$$Y = (y, t) \quad F(y, t) = (f(t), 1)$$

$$\dot{Y} = F(Y)$$

On considère la méthode des trapèzes

$$\Phi_h(t, y) = y + \frac{h}{2} f(t) + \frac{h}{2} \underline{f(t+h)}$$

$$\leftarrow y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2} f(y_n) + \frac{h}{2} \underline{f(y_{n+1})}$$

Développer en série de Taylor quand $h \rightarrow 0$

$$f(t+h) = f(t) + h f'(t) + \frac{h^2}{2} f''(t) + \frac{h^3}{6} f'''(t) + \dots$$

Donc :

$$\begin{aligned}\Phi_h(t, y) &= y + \frac{h}{2} f(t) + \frac{h}{2} \underline{\underline{f(t+h)}} \\ &= y + h f(t) + \frac{h^2}{2} f'(t) + \frac{h^3}{4} f''(t) + \dots\end{aligned}$$

On cherche une équation modifiée de la forme

$$\tilde{y} = \tilde{f}_h(t) = f(t) + h b_1 f'(t) + h^2 b_2 f''(t) + \dots$$

Avec b_1, b_2, \dots à trouver.

On peut trouver les b_k en posant $f(t) = e^t$. On obtient

$$\tilde{y} = (1 + h b_1 + h^2 b_2 + \dots) e^t$$

$$\tilde{y} = y_0 + (1 + h b_1 + h^2 b_2 + \dots) (e^t - 1)$$

(pour avoir condition initiale ok)

La condition $\tilde{y}(t_n) = y_n$ devient :

$$y_n = y_0 + (1 + h b_1 + h^2 b_2 + \dots) (e^{t_n} - 1) \quad (*)$$

$$(y_n = y_0 + (1 + h b_1 + h^2 b_2 + \dots) (e^h - 1) \quad n=1 \Rightarrow t_1 = h)$$

$$(*) \Leftrightarrow \Phi_h(t_n, y_n) = \tilde{y}(t_{n+1}) - \tilde{y}(t_n)$$

On trouve alors :

$$y_n + \frac{h}{2} (e^{t_n} + e^{t_n+h}) = y_0 + (1 + h b_1 + h^2 b_2 + \dots) (e^{t_n+h} - e^{t_n})$$

$$\Rightarrow \frac{h}{2} (1 + e^h) = (1 + h b_1 + h^2 b_2 + \dots) (e^h - 1)$$

$$\Rightarrow 1 + h b_1 + h^2 b_2 + \dots = \frac{h}{2} \frac{e^h + 1}{e^h - 1} \stackrel{n}{=} \sum_{k \geq 0} \frac{B_k}{k!} h^k + \frac{h}{2} \text{ où } B_k \text{ - nbr de Bernoulli}$$

analytique
⇒ série entière

$$\begin{cases} b_1 = 0 \\ b_k = \frac{B_k}{k!} \text{ pour } k \geq 2 \end{cases}$$

II) Les nombres de Bernoulli tendent vers 0 un peu lentement, ce qui va poser des problèmes pour la convergence de la série.

$$(*) = \frac{h}{2} \frac{(e^h - 1) + 2}{e^h - 1} = \frac{h}{2} + \frac{h}{e^h - 1}$$

$$B_0 = 1 \quad B_5 = 0$$

$$B_1 = -\frac{1}{2}$$

$$B_2 = \frac{1}{4}$$

$$B_3 = 0$$

$$B_4 = -\frac{1}{30}$$

Les nombres de Bernoulli vérifient $\frac{B_k}{k!} \sim \frac{\text{const}}{(2\pi)^k}$ pour $k \rightarrow \infty$ pair

Pas assez rapide!

$$\tilde{f}_h = \sum_{k \geq 0} B_k \frac{f^{(k)}(t)}{k!} h^k \quad \text{diverge si } \frac{f^{(k)}(t)}{k!} \sim \frac{M}{R^k} \quad (k \rightarrow \infty) \quad \text{ce qui est}$$

$\sim \frac{B_k}{k!} \quad k \geq 2$

typique pour f analytique avec un nbr fini de pôles, comme par exemple $\frac{1}{1+t^2} = f(t)$

Ainsi l'égalité $y_n = \tilde{g}(t_n)$ est seulement formelle, mais on peut tronquer la série à un ordre N . Alors l'égalité est vraie à un reste près.

Exemple

Méthode des trapèzes

$$\frac{h}{2} f(t_0) + \sum_{j=1}^{n-1} h f(t_j) + \frac{h}{2} f(t_n) = \int_0^{t_n} \left(h f(t) + \sum_{k \geq 2} B_k \frac{f^{(k)}(t)}{k!} \right) dt$$

$\underbrace{y_n - y_0}_{\text{trapèzes}}$ $\underbrace{\tilde{g}(t_n) - g_0}_{\text{formelle}}$

Égalité formelle car pas forcément convergence !

Construction dans le cas général $\dot{y} = f(y)$, $y(0) = y_0$.

On suppose d'abord que $\Phi_h(y)$ peut se développer comme

$$\Phi_h(y) = y + h f(y) + h^2 d_2(y) + h^3 d_3(y) + \dots$$

? $\text{série finie? conv?}$

► Par exemple les méthodes de RK en B-séries

$$\text{On cherche } \tilde{y} = \tilde{f}_h(\tilde{y}) = f(\tilde{y}) + h f_2(\tilde{y}) + h^2 f_3(\tilde{y}) + \dots$$

avec
$$\begin{cases} \tilde{y}(t) = y_0 \\ \tilde{y}(t+h) = \Phi_h(y_0) \end{cases}$$

On développe $\tilde{y}(t+h)$ solution exacte à l'instant $t+h$ de $\dot{y} = \tilde{f}_h(\tilde{y})$

$$\tilde{y}(t+h) = y_0 + h \tilde{f}_h(y_0) + \frac{h^2}{2} \tilde{f}'_h(y_0) \tilde{f}_h(y_0) + \dots$$

$$= B \left(\frac{1}{y_1}, \tilde{f}_h, y_0 \right)$$

↓ on reconnaît la B-série de:

$$\Phi_h(y_0) = \tilde{y}(t+h)$$

$$= y_0 + h(f + hf_2 + h^2 f_3 + \dots) + \frac{h^2}{2} (f + hf_2 + h^2 f_3 + \dots)' (f + hf_2 + h^2 f_3 + \dots) + \dots$$

On développe et on égale avec les mêmes puissances de h :

$$[h^2] \quad d_2 = f_2 + \frac{1}{2} f' f \quad \text{ainsi: } f_2 = d_2 - \frac{1}{2} f' f$$

$$[h^3] \quad d_3 = f_3 + \frac{1}{2} f'_1 f_2 + \frac{1}{2} f'_2 f_1 + \frac{1}{3!} (f''(f, f) + f' f' f)$$

ainsi : $f_3 = d_3 - \dots$

On construit ainsi les f_j par récurrence sur j , avec

$$f_1 = f$$

Supposons f_1, f_2, \dots, f_j construits

Posons : $\varphi_h^{[j+1]} = f + h f_2 + h^2 f_3 + \dots + h^{j-1} f_j$

Posons : $\varphi_h^{(j)} = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{\varphi_h^{[j+1]}(y) - \Phi_h(y)}{h^{j+1}}$

De manière équivalente :

$$\varphi_h^{[j+1]}(y) - \Phi_h(y) = -h^{j+1} f_{j+1}(y) + O(h^{j+2})$$

$\tilde{f}_1 = f$

Par construction, on obtient ce thm suivant:

}

construction des f_j par récurrence

$$\tilde{f}_h^{[j+1]} = \sum_{k=1}^{j+1} h^{k-1} f_k$$

(champ de vecteurs modifié)

Thm

Si $\Phi_h(y)$ est d'ordre p , alors $f_j = 0$, $2 \leq j \leq p$ dans l'équation diff. modifiée de l'analyse rétrograde.

Prop

Si Φ_h est une méthode développable en B-série et consistante (i.e $\Phi_h(y) = y + h f(y) + O(h^2)$)

alors : $\varphi_h^{[p+h^{j-1}q]} = \varphi_h^f + h^{j-1} q + O(h^j)$

Preuve (prop)

c.f. série 11

On applique ce résultat au flot exact de $\dot{y} = \tilde{f}_h^{[j-1]} + h^{j-1} \underbrace{f_j}_{q}$

On obtient $\varphi_h^{[j-1]} + h^j f_j = \varphi_h^{[j]} + O(h^{j+1})$

$$\varphi_h^{[j]} - \Phi_h(y) = O(h^{j+1})$$

Thm (équa. modifiée pour les systèmes hamiltoniens)

On considère un système hamiltonien $\dot{y} = f(y) = J^{-1} \nabla H(y)$ avec $H: U \subset \mathbb{R}^{2d} \rightarrow \mathbb{R}$ régulier. Si Φ est un intégrateur symplectique, alors l'équation modifiée reste localement hamiltonienne, i.e

$\exists H_j$ régulier défini sur un vsg de tout $y_0 \in U$, tq $f_j = J^{-1} \nabla H_j$

c'est un champ de vect.
hamiltonien

Rmq

1. Si $U = \mathbb{R}^n$, ou bien U étoilé, ou bien U simplement connexe, alors les H_i sont globalement définis sur tout U (\neq local)

2. L'équation modifiée hérite des propriétés géométriques de l'intégrateur

Exemples

(a) ordre r

conditions sur Φ_h

$$\Phi_h \circ \varphi_h = O(h^{r+1})$$

(b) symétrie

$$\Phi_h^T J \Phi_h = J$$

(c) conservation d'intégrales premières

$$L(\Phi_h(y)) = L(y)$$

(d) symétrie

$$\Phi_{-h} \circ \Phi_h = id$$

conditions pas linéaires en g et g'

conditions sur \tilde{f}_h

$$f_j = 0 \quad \forall j=2, \dots, r$$

$$f_j = J^{-1} \nabla H_j \quad \forall j$$

$$\nabla L \circ f_j = 0$$

$$\tilde{f}_h = \tilde{f}_{-h}$$

les puissances paires (ou impaires?) sont nulles

conditions linéaires :
yupi !

Preuve (ex)

(b) On suppose le résultat vrai pour $j=1, \dots, r$ (preuve par récurrence). Vrai pour $j=1$ par hypothèse car $f = f_1 = J^{-1} \nabla H$.

Par hypothèse; $\tilde{f}_h^{[r]} = f + \dots + h^{r-1} f_r$ est hamiltonien
 $= J^{-1} \nabla H_1 + \dots + h^{r-1} J^{-1} \nabla H_r$

Son flot exact vérifie :

$$\begin{aligned} \Phi_h(y_0) &= \varphi_h^{[r]}(y_0) + h^{r+1} f_{r+1}(y_0) + O(h^{r+2}) \\ \Phi_h'(y_0) &= (\varphi_h^{[r]}(y_0))' + h^{r+1} f'_{r+1}(y_0) + O(h^{r+2}) \end{aligned} \quad \begin{array}{l} \text{c.f. série} \\ \text{ok car tout est régulier, on peut dév en série de Taylor} \end{array}$$

Or Φ_h et $\varphi_h^{[r]}$ sont symplectiques \leftarrow hypothèse + hypo. recu et thm de Poincaré

$$J = \Phi_h'(y_0)^T J \Phi_h(y_0)$$

$$= (\varphi_h^{[r]}(y_0))^T J (\varphi_h^{[r]}(y_0)) + h^{r+1} \left[f'_{r+1}(y_0)^T J \Phi_h'(y_0) + \Phi_h'(y_0) J f'_{r+1}(y_0) \right] + O(h^{r+2})$$

$$\Phi_h'(y_0) = I + O(h)$$

méthode est \Rightarrow perturbation de l'identité

$$J = J + h^{r+1} (f'_{r+1}^T J + J f'_{r+1}) + O(h^{r+2})$$

$$= 0$$

Dans $J f'_{r+1}(y_0)$ est symétrique pour tout $y_0 \in U$.

En appliquant le lemme d'intégrabilité au champ de vecteurs $J f_{r+1}$ (de jacobienne $(J f_{r+1})' = J f'_{r+1}$) : il existe localement H_{r+1} défini sur un voisinage de tout y_0 fermé tq $J f_{r+1} = \nabla H_{r+1}$, ie $f_{r+1} = J^{-1} \nabla H_{r+1}$.

$\Rightarrow f_{r+1}$ est localement hamiltonienne OK

Preuve de la presque-conservation de l'énergie par une méthode num. (=integrateur) symplectique.

On considère l'hamiltonien modifié tronqué à l'ordre N (grd)

$$\tilde{H}^{(N)} = H + h H_2 + \dots + h^{N-1} H_N \quad (\text{on a } \tilde{f}^{(N)} = J^{-1} \nabla \tilde{H}^{(N)})$$

On suppose que la sol. num. reste dans un compact $K \subset U$, et que $\tilde{H}^{(N)}$ est globalement défini sur U (vrai si U simplement connexe, ou encore si \tilde{Q}_h est une méthode de B-série).

Alors pour $h \rightarrow 0$

$$\begin{aligned} \tilde{H}^{(N)}(y_n) &= \tilde{H}(y_0) \\ \text{tronquer à l'ordre } N \quad \tilde{H}^{(N)}(y_1) &= \tilde{H}^{(N)}(y_0) + O(h^{N+1}) \\ \tilde{H}^{(N)}(y_n) - \tilde{H}^{(N)}(y_0) &= \sum_{j=0}^{n-1} (\tilde{H}^{(N)}(y_{j+1}) - \tilde{H}^{(N)}(y_j)) \quad \text{Somme télescopique} \\ &= O(n \cdot h^{N+1}) \quad \text{difficulté: les séries des} \\ &= O(t_n h^N) \quad \text{éqns modifiées divergent en} \\ &\quad \downarrow t_n = nh \quad \text{généralité} \end{aligned}$$

Si la méthode est d'ordre r , alors

$$\tilde{H}^{(N)} = H + O(h^r)$$

On en déduit

$$H(y_n) - H(y_0) = O(h^r) + O(h^r) + O(t_n h^N) = O(h^r) \quad \text{t pour faire disparaître ce } O$$

(*) en supposant $t_n \leq T$ avec $T = O(h^{r-N})$

$$\text{on a } t_n h^N = O(h^{r-N} h^N) = O(h^r)$$

$\underbrace{\text{puissance négative car }}_{\text{dans }} N > r \quad \text{long}$

Ainsi, l'hamiltonien original est conservé avec la précision $O(h^r)$ sur un intervalle long de taille $O(h^{r-N})$ pour tout N arbitrairement grand

la constante de O dépend de N , mais est indép. de h, n, t_n

Rmq

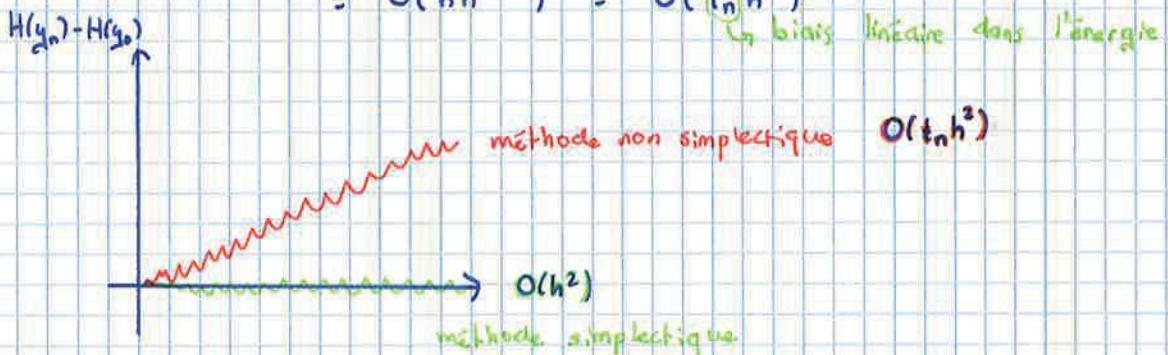
1. En supposant f analytique, on peut remplacer le reste $O(t_n h^N)$ par un reste exponentiellement petit $O(e^{-Lh})$ en supposant dans la preuve $N = O(h^{-1})$ et en supposant $t_n \leq T = O(e^{-Lh})$ \leftarrow ici, N dépend de ...

Où L = cst de Lipschitz de f si L grd, ce résultat est un peu nul car Lh ne sera pas petit

⚠ Résultat vide si $L \gg 1 \rightarrow$ problèmes raides

2. Pour une méthode ^{num. d'ordre r} non symplectique appliquée à un syst. hamilt., on a:

$$\begin{aligned}
 H(y_n) - H(y_0) &= \sum_{j=0}^{n-1} (H(y_{j+1}) - H(y_j)) \\
 &= \sum_{j=0}^{n-1} (\underbrace{H(\varphi_h(y_j)) - H(y_j)}_{\text{thm Poincaré}} + \underbrace{H(y_{j+1}) - H(\varphi_h(y_j))}_{\text{lipschitzien}}) \\
 &= \sum_{j=0}^{n-1} O(h^{r+1}) \\
 &= O(nh^{r+1}) = O(t_n h^r) \quad \text{biais linéaire dans l'énergie}
 \end{aligned}$$



$$\tilde{H}^{[N]}(y_n) - \tilde{H}^{[N]}(y_0) = O(h^{N+1}) = \tilde{H}^{[N]}(\varphi_h^{t_n}(y_0)) - \underbrace{\tilde{H}^{[N]}(y_0) + \tilde{H}^{[N]}(y_n) - \tilde{H}^{[N]}(\varphi_h(y_0))}_{=0}$$

II Méthodes numériques raides

1. Exemples de problèmes raides

→ Pas de déf. rigoureuse

(a) équation chaleur

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad x \in (0, 1), \quad t > 0 \quad u(x, t) \in \mathbb{R}$$



$$u(x, 0) = u_0(x) \quad x \in (0, 1) \quad \text{cond. initiale}$$

$$u(0, t) = u(1, t) = 0 \quad \text{cond. au bord de Dirichlet homogène}$$

i) subdivision uniforme (discréétisation de l'espace)

On considère la grille en espace uniforme

$$x_0 = 0, \quad x_i = i \Delta x \quad i = 1, \dots, N+1$$

$$x_{N+1} = 1, \quad \Delta x = \frac{1}{N+1}$$

ii) On approche $u(x_i, t) \approx u_i(t)$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_i, t) \approx \frac{u_{i+1}(t) - 2u_i(t) + u_{i-1}(t)}{\Delta x^2}$$

$$\frac{\partial u}{\partial x}(x_i, t) \approx \frac{u_{i+1}(t) - u_i(t)}{\Delta x}$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)(x_i, t) \approx \frac{\frac{u_{i+1}(t) - u_i(t)}{\Delta x} - \frac{(u_i(t) - u_{i-1}(t))}{\Delta x}}{\Delta x}$$

$$= \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{\Delta x^2}$$

iii) On obtient un système d'EDO en dim. N :

$$\frac{u_i(t)}{\Delta x^2} = \frac{u_{i+1}(t) - 2u_i(t) + u_{i-1}(t)}{\Delta x^2} \quad i=1, \dots, N$$

par rapport au temps car on veut $\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$

iv) Matriciellement : \Leftrightarrow passer en matrice pour diagonaliser

Posons $U = \begin{bmatrix} u_1 \\ \vdots \\ u_N \end{bmatrix}$; on ne met pas u_0 ni u_{N+1} car on les connaît. On obtient

\Leftrightarrow ok car conditions au bord homogènes

$$\dot{U} = AU \quad \text{où } \frac{1}{\Delta x^2} \begin{bmatrix} -2 & 1 & & \\ 1 & -2 & 1 & \\ & 1 & -2 & 1 \\ & & 1 & -2 \end{bmatrix} =: A$$

$$\begin{aligned} u_0 &= 0 \\ u_{N+1} &= 0 \\ u_i &= \frac{u_2 - 2u_1 + u_0}{\Delta x^2} \end{aligned}$$

A est une matrice symétrique réelle, donc on peut la diagonaliser en base orthonormée:

$$A = P D P^{-1} \quad \text{où } P P^T = I_d \quad (\text{P orthog.}) \quad (\text{P-anciennes coord. en fait des nuls})$$

$$\begin{array}{c} \text{D diag.} \\ \begin{array}{cccc} A & = & P & D & P^{-1} \\ B_1 \rightarrow B_1 & B_1 \rightarrow B_2 & B_2 \rightarrow B_2 & B_2 \rightarrow B_1 \end{array} \end{array}$$

En posant

$$\begin{array}{lll} U = PY & (\text{i.e. } Y = P^T U), \text{ on a} & U = P Y \\ \dot{Y} = DY & & B_1 \rightarrow B_2, \quad B_2 \rightarrow B_3, \quad B_3 \rightarrow 0 \end{array}$$

En effet: $\dot{U} = P^T \dot{U} = P^T A U = P^T P D P^{-1} U = D P^{-1} U = D Y$

On obtient N problèmes scalaires linéaires découplés:

$$\dot{Y}_i(t) = \lambda_i Y_i(t) \quad i=1, \dots, N$$

$$Y = \begin{bmatrix} Y_1 \\ \vdots \\ Y_N \end{bmatrix}$$

On remarque aussi:

$$\|U\|_2 = \|Y\|_2 \quad (\text{car } P \text{ orthogonale}) \quad \|P\|=1$$

"(v) Si on applique EExplicit, on obtient:

$$U_{n+1} = U_n + h A U_n = R(hA) U_n \quad \text{où } R(z) = 1+z \text{ fait de stabilité}$$

De manière équivalente:

$$Y_{n+1} = R(hD) Y_n \quad \text{indice temporel, pas spatial}$$

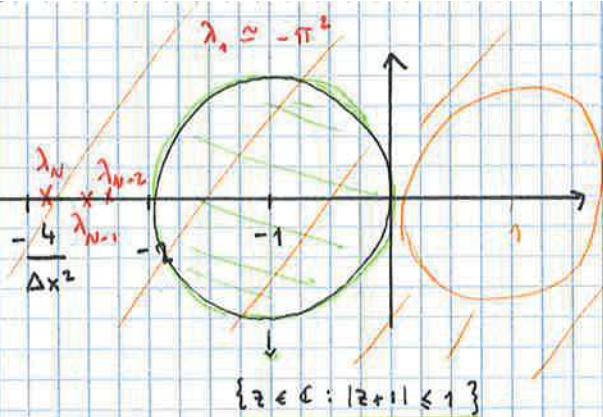
\Rightarrow La solution numérique est bornée (i.e. $\|Y\|_2 = \|U\|_2$ borné) si $|R(h\lambda_i)| \leq 1$ pour

$$i=1, \dots, N, \text{ i.e. } z \in S = \{z \in \mathbb{C} : |R(z)| \leq 1\} \quad \text{Domaine de stabilité pour EE}$$

Or les valeurs propres de $\Delta x^2 A$ sont dans l'intervalle $[-4, 0]$. (On peut montrer qu'elles sont $-2 + 2 \cos\left(\frac{i\pi k}{N}\right)$) $\Delta x^2 \lambda_i \in [-4, 0] \Rightarrow \lambda_i \in [-4, 0]$

Donc les val. propres de A sont dans l'intervalle $\left[-\frac{4}{\Delta x^2}, 0 \right]$

Solution num. bornée \Leftrightarrow conditions sur R \Leftrightarrow domaine de stabilité de R



La solution numérique est bornée si:

$$-\frac{h}{\Delta x^2} \in [-2, 0] \quad (*)$$

Donc si:

$$h \leq \frac{1}{2} \Delta x^2$$

⇒ Conditions CFL très restrictives! Ça nous impose un h vraiment trop petit

CFL -

Friedrich-Lax

La restriction sur le pas de temps est très sévère. On dit que le problème est raide car le même problème (h petit) apparaît pour toute méthode explicite standard de type RK.

!!

(vi) Si on applique une méthode implicite, par exemple E Implicite

$$U_{n+1} = U_n + hAU_n \Rightarrow U_{n+1} = (I - hA)^{-1} U_n = R(hA) U_n$$

où $R(z) = \frac{1}{1-z}$

$$Y_{n+1} = R(hD) Y_n$$

Domaine de stabilité?

disque moyen 1 centre 1

$$\{z \in \mathbb{C} \mid \left| \frac{1}{1-z} \right| \leq 1\} = \mathbb{C} \setminus \{z \in \mathbb{C} \mid |z-1| \leq 1\}$$

En particulier on inclut tout le demi-plan gauche $\mathbb{C}_- = \{z \in \mathbb{C} \mid \operatorname{Re}(z) \leq 0\}$

def On dit que la méthode est A-stable. Ici, aucune condition de stabilité sur h pour la chaleur. (solution bornée \Rightarrow acceptable) ↳ bornée sur \mathbb{C}_- fait de stabilité

Retour sur l'équation de Dalquist:

$$\dot{y} = \lambda y, \quad y(0) = 1$$

La solution exacte $y = e^{\lambda t} y_0$ est bornéessi $\lambda \in \mathbb{C}_-$.

En effet:

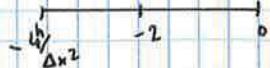
$$|e^{\lambda t}| = \left| e^{\underbrace{\operatorname{Re}(\lambda)t}_{\text{module}}} e^{i \underbrace{\operatorname{Im}(\lambda)t}_{\text{argument}}} \right| = \left| e^{\operatorname{Re}(\lambda)t} \right| = e^{(\operatorname{Re}(\lambda))t}$$

$$(*) \text{ calculé: } \lambda_i \in \left[-\frac{4}{\Delta x^2}, 0 \right] \Rightarrow h\lambda_i \in \left[-\frac{4h}{\Delta x^2}, 0 \right]$$

sym. réelle \Rightarrow

domaine de stab. de R impose: $h\lambda_i \in [-2, 0]$ (λ_i réels car matrice diag.)

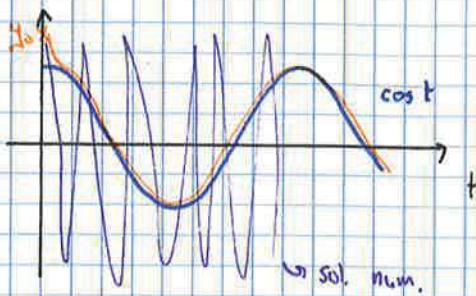
Donc il faut un $h, \Delta x^2$ tq



$$\text{i.e. } -\frac{4h}{\Delta x^2} \leq -2 \Leftrightarrow -4h \leq -2\Delta x^2 \Leftrightarrow$$

(b) Curtis - Minoh Felder

$$\begin{cases} \dot{y}(t) = \lambda(y(t) - \cos t) \\ y(0) = y_0 \end{cases} \quad \lambda \leq 0 \text{ et } |\lambda| > 1$$



→ Se rapproche très vite de $\cos t$, puis suit $\cos t$

Version linéarisée: $\dot{y} = \lambda y$

⇒ E.E.:

$$|h\lambda| \leq 2, \text{ i.e. } h \leq \frac{2}{|\lambda|}$$

⇒ point milieu:

$$y_{n+1} = R(h\lambda) y_n \quad \text{où } R(z) = \frac{1 + z/2}{1 - z/2}$$

Mais si λ est très grand:

$$\lambda = -2'000 \quad \text{et} \quad h \approx 1 \quad \frac{2+z}{2-z} = \frac{2+h\lambda}{2-h\lambda} = \frac{2/\lambda + h}{2/\lambda - h} \xrightarrow{\lambda \text{ grande}} -1$$

$$\Rightarrow R(h\lambda) = \text{_____} \approx -1$$

On va avoir de grandes oscillations car on multiplie le pas précédent par -1.

On est stable, et on a une solution numérique complètement fausse: on obtient de grandes oscillations de la sol. num., qui devient complètement fausse. Motive la déf. suivante:

Déf Une méthode de RK est L-stable si: elle est A-stable et $R(\infty) = 0 = \lim_{|z| \rightarrow \infty} R(z)$

Exemples

1. ! A-stable : E.E.
2. A-stable et ! L-stable : point milieu
3. L-stable : E.I. ; A-stable car $C_- \subset S$

$$|R(h\lambda)| \leq 1$$

point des conditions initiales trop marqués

Déf Une méthode de RK est I-stable si $\{iy; y \in \mathbb{R}\} \subset S$ - domaine de stabilité

?? A-stable \Leftrightarrow I-stable
 {
 } contient C_- vrai si pas pôle dans C_-

à E.I.

Prop

Une méthode de RK est A-stablessi: elle est I-stable et $R(z)$ ne contient pas de pôle dans C_- . (ie cl. s'annule jamais dans C_-)

$$\begin{aligned} \text{E.I.: } & \left| \frac{1}{1-iy} \right| \leq 1 \Leftrightarrow 1 \leq |1-iy| \Leftrightarrow 1 \leq \sqrt{1+y^2} = \sqrt{2} \quad \left. \begin{array}{l} \text{?} \\ \text{ok!} \end{array} \right\} \text{ donc elle est A-stable} \\ & \frac{1}{1-z} \text{ n'a pas de pôle dans } C_- \end{aligned}$$

Preuve

\Rightarrow ok, car $|R(z)|$ est non bornée au vsg d'un pôle ; A-stable $\Leftrightarrow R(z)$ bornée sur \mathbb{C}_-

\Leftarrow Considérons un domaine borné : " \mathbb{D}_R " disque centré en 0 de rayon R

$$D_R := \{ z \in \mathbb{C}_- \mid |z| \leq R \}$$

(1) nous une méthode de $R(z)$, R est rationnelle ?
 \rightarrow oui (3.6)

On remarque que $R(z)$ est holomorphe (i.e analytique sans pôle) dans l'intérieur de D_R . Par le principe du maximum,

$$\sup_{z \in D_R} |R(z)| = \sup_{z \in \partial D_R} |R(z)|$$

max atteint sur le bord

car I-stable

On sait par hypothèse que $|R(z)| \leq 1$ sur l'axe imaginaire. Or $R(z)$ est rationnelle, donc $|R(z)| \xrightarrow[|z| \rightarrow \infty]{} |R(\infty)| \leq 1$ \leftarrow la conv. à l'infini dans toutes les directions, en particulier dans la direction Im

Soit $\varepsilon > 0$, pour tout R assez grand, $\rightarrow |R(\infty)| \leq 1 + \varepsilon$

$$|z| \geq R \Rightarrow |R(z)| \leq 1 + \varepsilon$$

\downarrow c'est lui le maximum, car $1 + \varepsilon > 1$ et pour $z \notin \partial D_R$, ce sera plus petit

$$\hookrightarrow |R(z)| \leq 1 + \varepsilon \quad \text{et} \quad \rightarrow |R(z)| \leq 1$$

Par le principe du maximum, $|R(z)| \leq 1 + \varepsilon$ pour $z \in D_R$.

On déduit que $|R(z)| \leq 1 + \varepsilon$ pour tout $z \in \mathbb{C}_-$.

En faisant $\varepsilon \rightarrow 0$ à z fixé, on déduit que la méthode est A-stable. \square

? A-stable ? Vérifier \nexists pôles ; Vérifier ok sur $i\mathbb{R}$ dans \mathbb{C}_-

Exemples

1. La méthode θ : $y_{n+1} = y_n + (1-\theta)h f(y_n) + \theta h f(y_{n+1})$

$$R(z) = \frac{1 + (1-\theta)z}{1 - \theta z}$$

Dans quelles conditions est-on A-stables ?

► Pôles en $\frac{1}{\theta}$ si $\theta \neq 0$, ainsi $R(z)$ n'a pas de pôles dans \mathbb{C}_- pour $\theta > 0$.

► Sur l'axe imaginaire :

$$|R(iz)| = \left| \frac{1 + (1-\theta)iz}{1 - \theta iz} \right| \leq 1 \Leftrightarrow |1 + (1-\theta)iz| \leq |1 - \theta iz|$$

$$\Leftrightarrow (1-\theta)^2 \leq 1 \quad \begin{matrix} \text{Mettre au carré et} \\ \text{regarder} \end{matrix}$$

$$\Leftrightarrow \theta \geq \frac{1}{2}$$

La méthode O est A-stable ssi $\theta \geq \frac{1}{2}$

" L-stable ssi $\theta = 1$

$$\hookrightarrow R(\infty) = \lim_{|z| \rightarrow \infty} R(z) = \frac{1-\theta}{-\theta} \quad \text{pour } \theta \neq 0$$
$$R(\infty) \rightarrow 0 \quad \text{ssi } \theta = 1$$

EE appliquée n fois avec un pas le plus petit:

Rmg

domaine de stab; boule de rayon 4

1. Il existe des méthodes de RK explicites stabilisées, qui sont explicites mais avec un domaine de stabilité très grand.

Idée: construire une famille de méthodes de RK dont le domaine de stabilité est le polynôme

$$R(z) = T_s(1 + \frac{z}{s^2})$$

où $T_s(x)$ est le polynôme de Chebychev de degré s, donnés par

$$T_s(\cos \theta) = \cos(s\theta) \quad \forall \theta$$

$$T_0(x) = 1$$

$$T_1(x) = x$$

$$T_2(x) = 2x^2 - 1$$

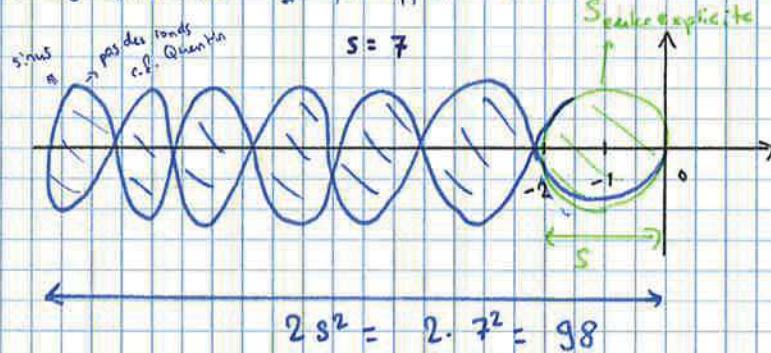
$$T_3(x) = \dots$$

$$\begin{aligned} &\text{cos}(2x) = 2\cos^2(x) - 1 \\ &\cos^2(x) = \frac{1 + \cos(2x)}{2} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &\cos^2(x) = \frac{1 + \cos(2x)}{2} \\ &\text{"} \\ &(1 - \cos^2(x)) \end{aligned}$$

On remarque $T_s([-1, 1]) \subset [-1, 1]$. Ainsi, pour $z \in [-2s^2, 0]$, $|R(z)| \leq 1$

Domaine de stabilité (sym. par rapport à l'origine)



Le domaine de stabilité grandit linéairement avec E.E.

Mais avec le polyn. de Chch, il grandit quadratiquement:

« c'est cool »

2. Le domaine de stabilité d'une méthode de RK est toujours sym. par rapport à l'axe réel (pour $\begin{pmatrix} a_{ij} \\ b_j \end{pmatrix}$ réels)

Preuve

Soit $S = \{z \in \mathbb{C} \mid |R(z)| \leq 1\}$.

On a bien: $\bar{z} \in S \Leftrightarrow z \in S$ □

$$|R(z)| \leq 1 \Leftrightarrow |R(\bar{z})| \leq 1 \Leftrightarrow |R(\tilde{z})| \leq 1$$

car R est rationnelle

Rmg

• Pour un problème de diffusion-advection : $\partial_t u = \partial_{xx} u + \partial_x u$

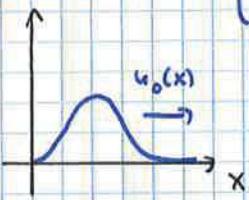
$u(x, t)$ où $x \in (0, 1)$

cond. au bord homog.

$$\dot{u} = \frac{1}{\Delta x^2} \begin{bmatrix} 2 & 1 & & \\ 1 & -1 & 1 & \\ & 1 & -1 & 2 \end{bmatrix} u + \frac{1}{2\Delta x} \begin{bmatrix} 0 & -1 & & \\ 1 & 1 & -1 & \\ & 1 & 1 & 0 \end{bmatrix} u$$

$=: A$ $=: B$

• La solution de $\begin{cases} \partial_t u = c \partial_x u \\ u(x, 0) = u_0(x) \quad x \in \mathbb{R} \end{cases}$ est donnée par $u(x, t) = u_0(x + ct)$



Le rayon spectral (c'est la plus grande valeur propre en l.1) de A : $O(\Delta x^2) \rightarrow$ val. propres dans \mathbb{R}

Le rayon spectral de B : $O(\Delta x^{-1}) \rightarrow$ val. propres dans \mathbb{R}_-

Donc pour $\Delta x \rightarrow 0$, les termes $\Delta t \lambda_j$ se "rapprochent" de l'axe réel négatif.

En pratique, pour appliquer une méthode explicite stabilisée :

- on fixe Δx (pour une certaine précision espace)

- on fixe Δt (pour _____ temps)

→ on fixe s tq : $\Delta t \frac{4}{\Delta x^2} \leq 2s^2$ (s le plus petit possible)

$$\frac{\Delta t}{\Delta x^2} \leq \frac{2s^2}{4} \quad \begin{array}{l} \uparrow \\ \text{domaine de stab} \\ \text{rayon spectral} \end{array}$$

2 - $\frac{4}{3}\sqrt{2}$ avec $\eta \geq 0$

Un bon choix de s :

$$s = \left\lfloor \sqrt{\frac{2\Delta t}{\Delta x^2}} \right\rfloor + 1$$

? marge

Chouette, car on voit que $s = O(\Delta x^{-1})$: coût en temps linéaire par rapport au raffinement en espace.

2. Stabilité des méthodes de collocation : approx. de Padé

On considère une méthode de collocation avec des noeuds $0 \leq c_1 < \dots < c_s \leq 1$

$$M(t) = \frac{1}{s!} (t - c_1) \dots (t - c_s)$$

$$M^{(s)}(t) \equiv 1$$

Thm

La fct de stabilité de la méthode de collocation est donnée par :

$$R(z) = \frac{M^{(s)}(1) + z M^{(s-1)}(1) + \dots + z^s M(1)}{M^{(s)}(0) + z M^{(s-1)}(0) + \dots + z^s M(0)} = \frac{P(z)}{Q(z)}$$

fct rationnelle

Préuve

On considère le problème scalaire test : $\dot{y} = \lambda y$ et $u(t)$ le polyn. de collocation. On a :

$$\begin{cases} y_1 = R(\lambda h) y_0 \\ y_1 = u(h), \quad y_0 = u(0) \end{cases}$$

Posons $z = \lambda h$, et $h=1$. On peut alors écrire : $u(1) = R(z) u(0)$

$$\begin{aligned} \overset{h=1}{\dot{u}(c_i; h)} &= f(u(c_i; h)) \quad \leftarrow \text{déf. du polyn. de colloc.} \\ \overset{\text{par } z=\lambda h}{\dot{u}(c_i)} &= \lambda u(c_i; h) = z u(c_i) \\ &\quad \lambda = \lambda h, h=1 \end{aligned}$$

On remarque alors :

$$\underbrace{\dot{u}(t) - z u(t)}_{\text{nulle pour } t = c_i, i=1, \dots, s} = K \underbrace{M(t)}_{\text{pareil}} \quad \text{où } K \text{ constante}$$

Car deux polyn. de même degré avec les mêmes racines sont proportionnels. On dérive cette relation :

$$\begin{aligned} \ddot{u}(t) &= z \dot{u}(t) + K \dot{M}(t) \\ &= z (\dot{z} u(t) + K M(t)) + K \dot{M}(t) \\ &= z^2 u(t) + K (z M(t) + \dot{M}(t)) \end{aligned}$$

$$\dddot{u}(t) = z^3 u(t) + K (\ddot{M}(t) + z \dot{M}(t) + z^2 M(t))$$

$$\vdots$$

$$u^{(s+1)}(t) = z^{s+1} u(t) + K (M^{(s)}(t) + z M^{(s-1)}(t) + \dots + z^s M(t))$$

$\underset{0}{\text{---}} \text{u poly. deg s}$

Donc on peut exprimer $R(z)$:

$$R(z) = \frac{y_1}{y_0} = \frac{u(1)}{u(0)} = \frac{M^{(s)}(1) + z M^{(s-1)}(1) + \dots + z^s M(1)}{M^{(s)}(0) + z M^{(s-1)}(0) + \dots + z^s M(0)}$$

D

$$\text{Poisson } R(z) = \frac{M(s)(0) + \dots + z^s M(0)}{M(s)(1) + \dots + z^s M(1)}$$

< Utilisé

$$M(t) = q_s + q_{s-1} \frac{z}{t} + q_{s-2} \frac{z^2}{t^2} + \dots + \frac{z^s}{t^s}$$

Pour avoir $R(z) = M(s)(0) + \dots + z^s M(0)$, on identifie les coefficients :

$$Q_n \text{ écrit } Q(z) = 1 + q_1 z + \dots + q_s z^s$$

< Complémentation de $M(t)$

Préuve

$$R(z) = \frac{M(s)z^2 + \dots + (0)}{M(s)(1) + \dots + z^s M(1)}$$

Alors il existe un unique poly. de degré s, note $M(t)$, avec $M(s)(t) = 1$ et tq

$$\text{Suppositions } R(z) = e^z + O(z^{s+1})$$

$$\text{Soit } R(z) = \frac{P(z)}{Q(z)} \text{ une fct rationnelle, avec } Q(0) = 1, \deg P \leq s \text{ et } \deg Q \leq s.$$

Prop

D

$$R(z) = c + O(z^{s+1})$$

Donc il y a deux cas :
Soit tous pour $c_1 < c_2 < \dots < c_s$ réelles, donc il y a une infinie de racines !

$$R(0) = 1 \quad i = 1, \dots, s \quad R(z) = 1 + z R(0) + z^2 \frac{R''(0)}{2!} + \dots + \frac{z^s}{s!} R^{(s)}(0) + O(z^{s+1})$$

On remarque que les fct rationnelles en c_1, \dots, c_s

< Si les $c_i \in \mathbb{C}$ (même pas bornement distincts) :

d'ordre au moins s)

réultant est la conséquence de la superconvergences des méthodes de collecte (qui sont

$$\text{Soit } M(t) = \frac{s!}{(t - c_1) \cdots (t - c_s)} \text{ avec } c_1 < c_2 < \dots < c_s \text{ (donc } c_i \text{ réelles distinctes) alors le}$$

Préuve

$$\text{Alors } R(z) = e^z + O(z^{s+1})$$

$$R(z) = \frac{M(s)(0) + \dots + z^s M(0)}{M(s)(1) + \dots + z^s M(1)}$$

Soit $M(t)$ (unimorphe quel) poly. de degré s tq $M(s)(t) = 1$. On pose

Prop

$$\tilde{R}(z) = R(z) \quad (\text{à voir})$$

Par la prop. précédente, $\tilde{R}(z) = e^z + O(z^{s+1})$ ($\star\star$) se rapproche l'exponentielle

Par hypothèse : $R(z) = e^z + O(z^{s+1})$ ($\star\star$)

On multiplie (\star) et ($\star\star$) par $Q(z)$ et on soustrait (\star) - ($\star\star$) :

$$P(z) - \left(M^{(s)}(z) + z M^{(s+1)}(z) + \dots + z^s M(z) \right) = O(z^{s+1})$$

$\deg \leq s$ $\deg \leq s$

LHS: polyn. de degré $\leq s$
 RHS: puissance la plus petite: $s+1$

} donc $\tilde{R} - R = 0$

□

3 Approximations de Padé

Soient $(k, j) \in \mathbb{N}^2$ fixés, il existe une unique fraction rationnelle

$$R(z) = \frac{P(z)}{Q(z)} \quad \text{avec } Q(0) = 1, \deg P = k, \deg Q = j$$

tq $R(z) = e^z + O(z^{k+j+1})$; on note cette fraction $R_{k,j}(z)$

On a des formules explicites pour P et Q : c.f. série ~13.

Exemples

$$1. j=0 \quad R_{k,0}(z) = 1 + z + \dots + \frac{z^k}{k!}$$

2. $k=j$ $R_{k,k}(z)$ est la fct de stabilité de la méthode de RK de Gauss à k étage (elle est d'ordre $2k$)

$$3. E.I \quad R_{0,1}(z) = \frac{1}{1-z}$$

4. $k=j-1$ Méthode de RK de Radau
 $j=k+1$

5. $j=k+2$ — " — de Lobatto

Thm

L'approximation de Padé $R_{k,j}(z)$ est A-stable si:

$$j-2 \leq k \leq j$$

| $k \backslash j$ | 0 | 1 | 2 | 3 | \dots |
|------------------|-------------------------------|--|---|-------------------------------------|---------|
| 0 | 1 | $1+z$ | $1+z+\frac{z^2}{2!}$ | $1+z+\frac{z^2}{2!}+\frac{z^3}{3!}$ | \dots |
| 1 | $\frac{1}{1-z}$ | $\frac{1+z/2}{1-z/2}$ p.e.null. | $\frac{1+\frac{2}{3}z+\frac{1}{6}z^2}{1-\frac{2}{3}z}$ | | |
| 2 | $\frac{1}{1-z+\frac{z^2}{2}}$ | $\frac{1+z/3}{1-\frac{2}{3}z+\frac{z^2}{6}}$ | $\frac{1+\frac{z}{2}+\frac{z^2}{12}}{1-\frac{z}{2}+\frac{z^2}{12}}$ | | |

Méthodes de Gauss

pas A-stables

A-stables

pas A-stable

Rmq

$$R_{k,j} = \frac{P_{k,j}(z)}{Q_{k,j}(z)} = e^z + O(z^{k+j+1})$$

On prend l'inverse et on remplace z par $-z$

$$R_{k,j} = \frac{Q_{k,j}(-z)}{P_{k,j}(-z)} = \frac{1}{e^{-z}} + O(z^{k+j+1}) = e^z + O(z^{k+j+1})$$

Ce qui explique la symétrie dans le tableau.

- Faire des liens ex: méthodes de Gauss préserrent énergie, et sont A-stable
- Pourquoi est-ce important ce qu'on fait
- Préparer des exemples