Équations différentielles : Euler vs. Heun vs. RK4 vs. `odeint`

Les 26 et 27 mars et 2 avril 2014
`http://www.mp933.fr/ - stephane@gonnord.org`

Buts du TP

- Mettre en place deux méthodes concurrentes à la méthode d'Euler : la méthode de Heun, et la très fameuse méthode de Runge-Kutta d'ordre 4, *aka* « RK4 ».
- Comparer les performances respectives.
- Calculer des approximations de solutions d'équations différentielles dans des situations « réelles ».

Il n'est évidemment pas question de traiter l'ensemble du TP pendant le temps imparti ! Les cinq premiers exercices constituent l'objectif principal ; le reste sera pour votre culture/caler votre armoire [1].

Exercice 1 *Créer (au bon endroit) un dossier associé à ce TP.*

Créer dans ce dossier un sous-dossier `jolis-dessins` *dans lequel seront placés les différents (jolis) pdf produits pendant ce TP.*

Lancer Spyder, sauvegarder immédiatement le fichier édité au bon endroit. Écrire une commande absurde, de type `print(5*3)` *dans l'éditeur, sauvegarder et exécuter. À l'aide de F6, bien fixer la configuration d'exécution : « exécuter dans un interpréteur dédié » et « interagir avec l'interpréteur après exécution » semblent deux bons choix...*

1 Contexte mathématique

On s'intéresse à des approximations de solutions d'équations différentielles de la forme

$$y'(t) = F\left(t, y(t)\right)$$

sur un segment $[a, b]$, avec $y(a)$ donné, et F une application de $\mathbb{R} \times \mathbb{R}$ dans $\mathbb{R}$. Par exemple : « J'ai dans ma poche une fonction qui vaut 1 en 0, et vérifie $y'(t) = 2y(t)$ pour tout $t \in [0, 1]$; que vaut $y(1)$? » Dans cet exemple, $F(t, z) = 2z$. Si cet exemple peut sembler un peu stupide [2]... il ne l'est pas tant que ça : le fait de connaître la valeur exacte de $y(1)$ va permettre d'évaluer la *qualité de l'approximation* calculée.

Si on prend l'exemple $y'(t) = te^{t^2 y(t)}$, on a cette fois $F(t, z) = \mathrm{e}^t \mathrm{e}^{t^2 z}$, et ici, on ne sait pas donner d'expression analytique des solutions de l'équation différentielle, d'où l'intérêt d'une méthode d'approximation.

On peut aussi imaginer des équations d'ordre un... mais vectorielles :

$$\begin{cases} x'(t) &= (1 - y(t))x(t) \\ y'(t) &= (x(t) - 1)y(t) \end{cases}$$

Ici, en prenant $F\left(t, (a, b)\right) = ((1 - b)a, (a - 1)b)$ (donc f va de $\mathbb{R} \times \mathbb{R}^2$ dans $\mathbb{R}^2$), on a bien une équation de la forme $Z'(t) = F(t, Z(t))$, pour peu qu'on pose $Z(t) = (x(t), y(t))$.

Enfin, les équations d'ordre deux se ramènent à l'ordre 1 par « vectorialisation » : l'équation du pendule $y''(t) = -\sin\left(y(t)\right)$, ou encore $\begin{pmatrix} y \\ y' \end{pmatrix}' = \begin{pmatrix} y' \\ -\sin y \end{pmatrix}$ est par exemple équivalente, en posant $Y(t) = (y(t), y'(t))$, à $Y'(t) = F(t, Y(t))$, avec $F(t, (u, v)) = (v, -\sin u)$.

Dans la suite, on va donc se donner une fonction F (de $\mathbb{R} \times \mathbb{R}$ dans $\mathbb{R}$ pour les équations scalaires d'ordre un, mais potentiellement de $\mathbb{R} \times \mathbb{R}^2$ dans $\mathbb{R}^2$ pour traiter les cas d'ordre deux/vectoriels). On va également se donner deux réels $a < b$, et une condition initiale : on suppose que $y(a)$ est connu, et on souhaite calculer une approximation de $y(b)$, en faisant des « petits pas », c'est-à-dire en calculant des approximations des $y(t_n)$, avec $a = t_0 < t_1 < \cdots < t_n = b$.

1. Voir aussi l'intéressant point de vue de monsieur Ridde sur cette question.
2. On connaît $y(t)$: c'est e^{2t} !

2 Les quatre candidats

Il s'agit à chaque fois de calculer les approximations y_k de la solution de l'équation $y'(t) = F(t, y(t))$ (avec condition initiale) aux différents temps $t_k = a + k\frac{b-a}{n}$. En notant $h = t_{k+1} - t_k = \frac{b-a}{n}$ le pas :

- Dans la méthode d'Euler (cf. un TP précédent), on exploite l'idée basique

$$F(t_k, y(t_k)) = y'(t_k) \simeq \frac{y(t_{k+1}) - y(t_k)}{t_{k+1} - t_k}$$

en posant $y_0 = y(a)$ et pour tout $k < n$:

$$y_{k+1} = y_k + hF(t_k, y_k).$$

```
def euler(F, a, y0, b, n):
    les_yk = [y0]         # la liste des valeurs calculées
    t = a                 # le temps du dernier calcul
    h = float(b-a) / n  # le pas
    dernier = y0          # la dernière valeur calculée
    for i in range(n):
        suivant = dernier + h*F(t, dernier) # le nouveau terme
        les_yk.append(suivant)  # on le place à la fin des valeurs calculées
        t = t+h                 # le nouveau temps
        dernier = suivant       # et on met à jour le dernier terme calculé
    return les_yk  # c'est fini
```

- Pour la méthode de Heun, on prend :

$$y_{k+1} = y_k + \frac{h}{2}\left(F\left(t_k, y_k\right) + F\left(t_{k+1}, y_k + hF(t_k, y_k)\right)\right)$$

(on fait une moyenne entre la dérivée au temps t_k, et celle au temps t_{k+1} en la valeur approchée calculée par Euler).

- Dans la méthode de Runge-Kutta d'ordre 4, on réinjecte successivement des premières approximations dans de nouvelles [3]. On calcule donc successivement :

$$\alpha_k = y_k + \frac{h}{2}F(t_k, y_k), \quad \beta_k = y_k + \frac{h}{2}F(t_k + h/2, \alpha_k), \quad \gamma_k = y_k + hF(t_k + h/2, \beta_k)$$

(oops, encore une typo repérée dans un livre bâclé...) et enfin :

$$y_{k+1} = y_k + \frac{h}{6}\left(F(t_k, y_k) + 2F(t_k + h/2, \alpha_k) + 2F(t_k + h/2, \beta_k) + F(t_{k+1}, \gamma_k)\right).$$

- Le dernier candidat est la fonction `odeint` de la librairie `scipy.integrate`.
  Tout d'abord, attention à l'ordre des arguments : on parle ici de l'équation $y'(t) = F(y(t), t)$ (ordre inversé par rapport à l'usage « commun » du matheux, exposé depuis le début de ce TP). On donne donc comme arguments à `odeint` cette fonction F, la valeur initiale $y(a)$, et une liste (ou un tableau `numpy`) de temps en lesquels on veut des approximations de la solution. Par exemple, pour avoir une approximation de la solution de $y' = y$ avec la condition initiale $y(0) = 1$ aux temps 0, $\frac{1}{2}$ et 1, on commence par définir $F(z, t) := z$:

```
>>> def f0(z, t):
        return z
>>> les_y = odeint(f0, 1, [0, 0.5, 1])
...
```

Exercice 2 *Programmer la méthode de Heun*

```
def heun(F, a, y0, b, n):
    ...
    return les_yk
```

3. α_k est une approximation de $y(t_k + h/2)$, injectée dans une nouvelle approximation β_k de $y(t_k + h/2)$, elle-même utilisée pour calculer une première approximation γ_k de $y(t_{k+1})$; on utilise ensuite une intégration « à la Simpson ».

Tester sur $[0,1]$ *avec l'équation* $y' = y$ *et* $y(0) = 1$ *pour différentes valeurs de* n.

```
>>> def f1(t, z): # attention à l'ordre des arguments !
        return z
>>> heun(f1, 0, 1, 1, 2)
[1, 1.625, 2.640625]
```

EXERCICE 3 *Même chose avec RK4 !*

```
>>> RK4(f1, 0, 1, 1, 2)
[1, 1.6484375, 2.71734619140625]
```

EXERCICE 4 *Comparer les quatre méthodes sur ce même problème de Cauchy pour* $n = 10$, $n = 100$ *et* $n = 1000$, *en regardant l'approximation finale de* $y(1) \simeq \mathrm{e}$.

```
from math import exp
e = exp(1)

print("exp(1)=%.15f"%e)
for n in [10, 100, 1000]:
    eul = euler(f1, 0, 1, 1, n)[-1]
    heu = heun(f1, 0, 1, 1, n)[-1]
    rk4 = RK4(f1, 0, 1, 1, n)[-1]
    print("Pour n=%i :\n\t\t%.15f\t%.15f\t%.15f"%(n,eul,heu,rk4))
    print("Erreurs absolues : \n\t\t%.15f\t%.15f\t%.15f\n"\
            %(abs(eul-e), abs(heu-e), abs(rk4-e)))
------------------
exp(1)=2.718281828459045
Pour n=10 :
2.593742460100000 2.714080846608224 2.718279744135166
Erreurs absolues :
0.124539368359045 0.004200981850821 0.000002084323879

Pour n=100 :
2.704813829421526 2.718236862559957 2.718281828234404
...
```

On rappelle que pour représenter une solution approchée, on peut exécuter par exemple les lignes suivantes (après avoir importé `matplotlib.pyplot` sous l'alias `pypl` par exemple) :

```
t = numpy.linspace(0, 1, 5)
# Les temps t_k. Il en faut le même nombre que les yk, attention...

yeuler = euler(f1, 0, 1, 1, 4)
yheun = heun(f1, 0, 1, 1, 4)
yrk4 = RK4(f1, 0, 1, 1, 4)

yodeint = odeint(f0, 1, t)

pypl.plot(t, yeuler)
pypl.plot(t, yheun)
pypl.plot(t, yrk4)
pypl.plot(t, yodeint)

pypl.legend(['Euler', 'Heun', 'RK4', 'odeint'], loc = 'upper left')

pypl.savefig('comparaison-methodes.pdf')
pypl.show()
```

3 À l'ordre deux

Normalement, le code écrit précédemment doit fonctionner pour les équations à valeurs vectorielles (pour peu qu'on utilise des `array` de `numpy` pour que les additions se passent... comme des additions, et non des concaténations de listes).

EXERCICE 5 *Adapter, si besoin est, vos programmes pour qu'ils fonctionnent sur l'exemple* $y'' = -\sin(y)$ *:*

```
def f_pendule(t, z):
    y, yp = z # Ack TERRIBLE pour éviter (y, yp) = (z[0], z[1]). C'est MAL...
    return numpy.array([yp, -numpy.sin(y)])

Y = euler(f_pendule, 0, numpy.array([0, 1.5]), 10, 100)
```

Si tout se passe bien, `Y` doit être la liste des approximations de (y, y') aux temps $t_k = \frac{10}{k}$ $(0 \leqslant k \leqslant 100)$, avec y la solution de $y'' = -\sin y$, sous les conditions initiales $y(0) = 0$ et $y'(0) = 1.5$. Si c'est bien le cas, on peut représenter la solution approchée en commençant par extraire la première colonne de Y, c'est-à-dire le premier élément de chaque ligne. On peut faire quelque chose comme `[ligne[0] for ligne in Y]`, ou bien utiliser le slicing des `array` de `numpy` :

```
Yarray = numpy.array(Y)
t = numpy.linspace(0, 10, 101)

pypl.plot(t, Yarray[:, 0])  # sur chaque ligne de Y, on prend la première composante
```

EXERCICE 6 *Représenter les solutions de l'équation du pendule non amorti sur* $[0, 10]$ *pour* $y(0) = 0$*,* $y'(0) = 1.5$*, et* $n \in \{20, 100, 1000\}$*. Pour chaque valeur de* n*, on tracera sur un même graphique le résultat des trois méthodes numériques.*

EXERCICE 7 *Avec les conditions initiales* $y(0) = 0$ *et* $y'(0) = 2$*, on peut montrer que la solution théorique de l'équation* $y'' = -\sin(y)$ *est strictement croissante et converge vers* π (physiquement : le pendule a exactement l'énergie cinétique nécessaire et suffisante pour tendre vers le demi-tour... sans jamais l'atteindre, mais sans retomber non plus ! C'est bien entendu irréaliste, puisqu'en pratique il y a d'une part des frottements, et que d'autre part ça n'a pas de sens d'avoir *exactement* $y'(0) = 2$).

Mettre en concurrence les quatre méthodes de résolution numérique sur cet exemple, et observer sur un même graphique les solutions calculées sur l'intervalle $[0, 30]$.

4 Un peu de physique-chimie

EXERCICE 8 *On jette un projectile* M *à partir du point* O *avec une vitesse* $\overrightarrow{v_0}$ *constante en norme, mais faisant un angle variable avec l'horizontale. Si le projectile est soumis seulement à la gravitation, la trajectoire est connue*[4] *: ce sera une parabole. On démontre même de façon classique que l'ensemble des trajectoires est « enveloppé » par une parabole, dite de sécurité. Cet exercice a pour objet la visualisation de cette parabole.*

1. *Faire un dessin !*
2. *Vectorialiser l'équation* $\dfrac{d^2}{dt^2}\overrightarrow{OM} = \overrightarrow{g}$ *(on doit se retrouver en dimension 4, non ?).*
3. *Résoudre numériquement l'équation* $\dfrac{d^2}{dt^2}\overrightarrow{OM} = \overrightarrow{g}$*.*
4. *Représenter une vingtaine de paraboles, avec des angles répartis sur* $[0, \pi/2]$*.*
5. *On suppose maintenant que le projectile est soumis à une force de frottement de la forme* $-k\overrightarrow{v}$*. Modifier les équations, les vectorialiser, et représenter à nouveau quelques trajectoires du projectile*[5]*.*

4. La résolution des équations $x'' = 0$ et $z'' = -g$ ne pose pas trop de problème...
5. Ici, on ne connaît pas de solution analytique de ces solutions.

Exercice 9 *On s'intéresse ici aux concentrations de trois produits (A, B et C) au cours du temps. Deux réactions entrent en jeu : $A \longrightarrow B$ d'une part et $B \longrightarrow C$ d'autre part. Ces réactions sont d'ordre un : leur vitesse est proportionnelle à la concentration du réactif. Les concentrations respectent donc des lois de la forme :*

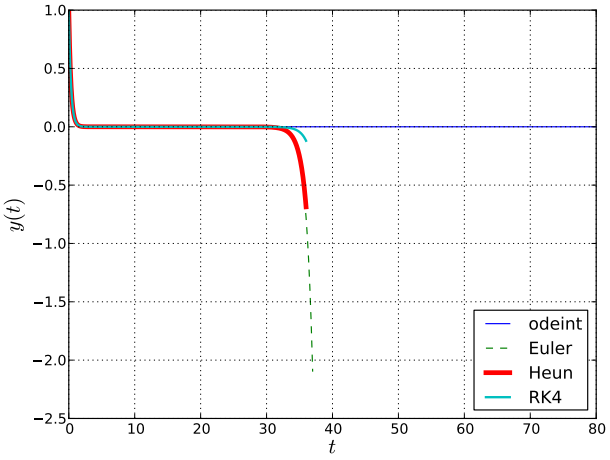
$$\begin{cases} \dfrac{d[A]}{dt} &= -\alpha[A] \\ \dfrac{d[B]}{dt} &= \alpha[A] - \beta[B] \\ \dfrac{d[C]}{dt} &= \beta[B] \end{cases}$$

On part de concentrations initiales $[A] = 1$ et $[B] = [C] = 0$.

1. *Résoudre numériquement*[6] *ces équations différentielles, puis les représenter pour $t \in [0, 6]$, avec $(\alpha, \beta) = (1, 1)$, $(\alpha, \beta) = (10, 1)$ puis $(\alpha, \beta) = (1, 10)$.*
2. *On suppose maintenant que les vitesses des réactions sont de la forme $\alpha'[A]^2$ et $\beta'[B]^2$ (réactions d'ordre deux). Modifier le système différentiel et observer les évolutions des trois concentrations au cours du temps.*

5 Pour ceux qui s'ennuient

Exercice 10 *La résolution numérique de l'équation $y'' = -2y' + 3y$ avec les conditions initiales $y(0) = 1$ et $y'(0) = -3$ produit les résultats suivants :*



Tenter une explication. Que doit-il se passer avec l'équation translatée $y'' = -2y' + 3y - 1$ sous les conditions initiales $y(0) = \dfrac{4}{3}$ et $y'(0) = -3$? Vérifier !

Exercice 11 *Représenter quelques portraits de phase de l'équation de van der Pol :*

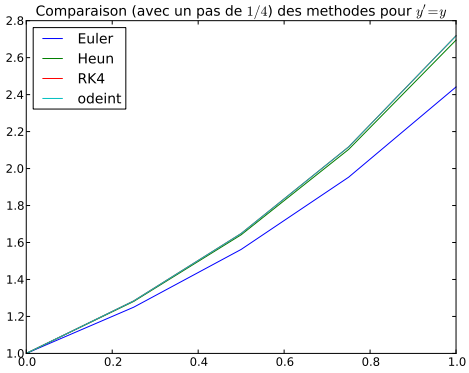
$$x'' = \mu(1 - x^2)x' - x.$$

Il s'agit de représenter des trajectoires de (x, x'), avec différentes conditions initiales. On pourra prendre $\mu = 1$

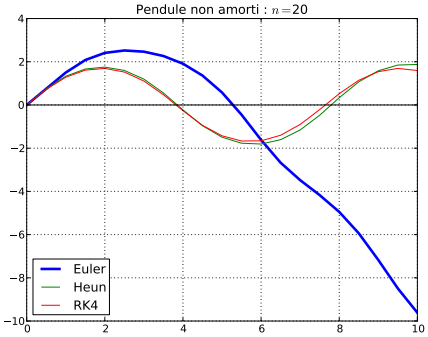
6 Les jolis dessins que j'obtiens

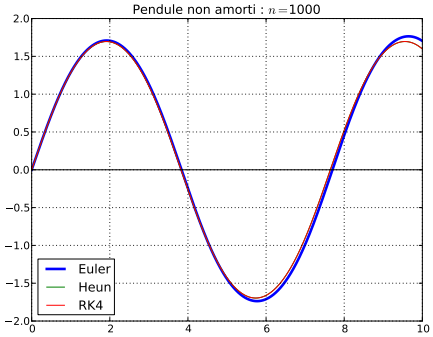
– Exercice 4. Pour un pas de 1/4, la méthode de Runge-Kutta d'ordre 4 donne déjà un résultat indiscernable de celui fourni par `odeint`.

6. Avec cette modélisation très simple, on peut même sans trop de mal déterminer une solution analytique.

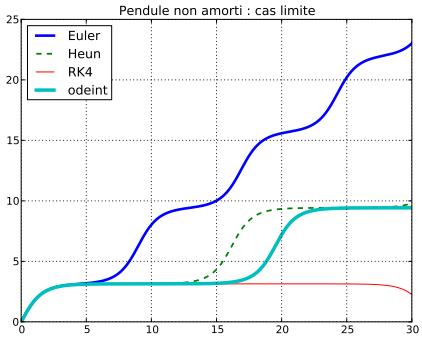


– Exercice 6. Pour $n = 20$ et $n = 1000$, on trouve :

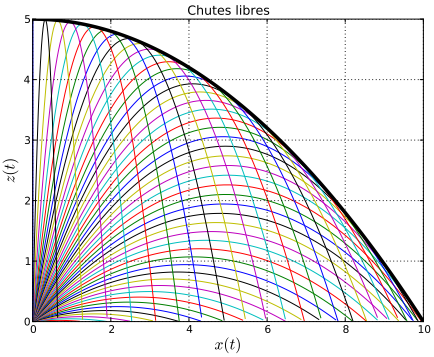


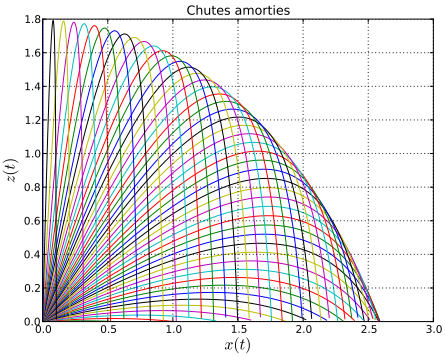


– Exercice 7. Aucune méthode [7] ne fournit une solution convergente, et c'est normal !



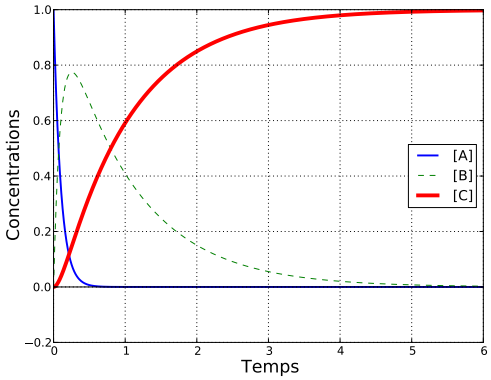
– Exercice 8. Sans frottement, on voit la parabole se dessiner (figure de gauche). Sur la figure de droite, on voit l'effet des frottements, qui raccourcissent les trajectoires :

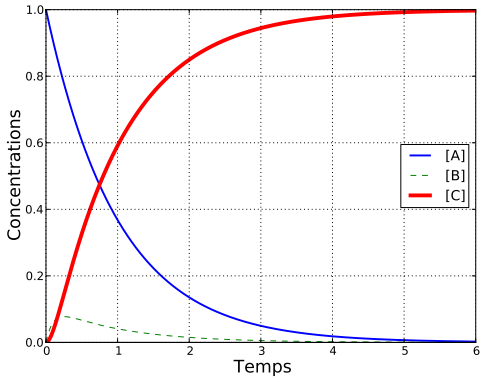




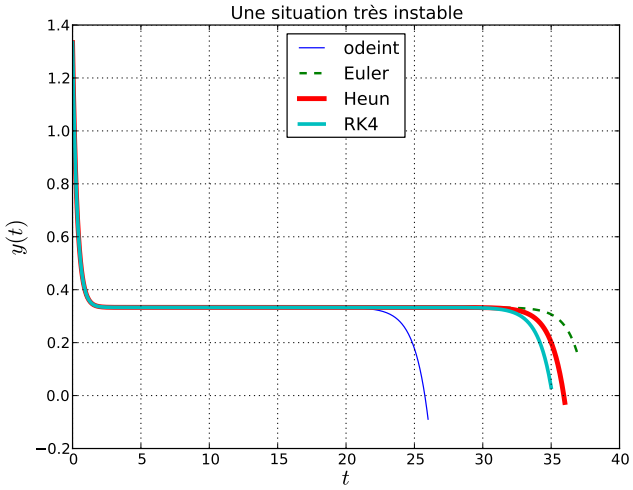
– Exercice 9. Pour $(\alpha, \beta) = (10, 1)$ puis $(\alpha, \beta) = (1, 10)$, on obtient :

7. $n = 10^4$ pour les trois premières.





– Exercice 10. La solution théorique tend vers $\frac{1}{3}$, et sa solution approchée n'a aucune chance de passer accidentellement par cette valeur (codage binaire des flottants), donc va diverger :



– Exercice 11. Pour obtenir la figure suivante, j'ai pris $\mu = 1$. On voit apparaître le « cycle limite » bien connu des matheux.