Programmation et Algorithmes numériques 2

Intégration numérique d'équations différentielles ordinaires

D. Cornu

S4-2019

Définition

Un problème différentiel s'exprime selon une équation différentielle scalaire d'ordre n

$$\frac{d^n y}{dt^n} = f\left(t, y, \frac{dy}{dt}, \ldots, \frac{d^{n-1}y}{dt^{n-1}}\right)$$

f est la fonction **second membre**.

Donne une **famille** de solutions $y(t)$ à n paramètres.

Pour résoudre ce type de système il faut donner n conditions imposées
$\rightarrow$ nous donne **une** solution dans la famille

Type de problème

Conditions initale données pour une seule valeur t_0 de t :

$$y(t_0) = y_0, y'(t_0) = y'_0, \ldots, y^{n-1}(t_0) = y_0^{n-1}$$

Problème dit de conditions initiales ou de Cauchy

Conditions données pour des valeurs spécifiques de la variable indépendante t :

$$y(t_0) = y_0, y(t_1) = y_1, \ldots, y(t_{n-1}) = y_{n-1}$$

Problème dit de conditions aux limites

Motivation Physique

La plupart des problèmes physiques conduisent à des (systèmes d') **équations différentielles**.

Désintégration radioactive

$$\frac{d}{dt}N(t) = -kN(t)$$

$N(t)$ nb d'atomes au temps t
C.I : $N(0) = N_0$

Equation d'onde

$$\frac{1}{c^2}\frac{d^2}{dt^2}E(x,t) = \frac{d^2}{dx^2}E(x,t)$$

$E(x,t)$: champ électrique

Mécanique

$$m\frac{d^2}{dt^2}x(t) = -kx(t)$$

C.I : $x(0) = x_0$ &
$v(0) = \frac{dx}{dt}_{t=0} = v_0$

Très souvent on ne sait pas résoudre ces systèmes de manière analytique :
$\rightarrow$ résolution numérique

Equation différentielle scalaire d'ordre 1

Le probème général se simplifie dans le cas des EDO du premier ordre
Donne une famille de solution $y(t)$ à un paramètre (y_0)

$$\frac{dy}{dt} = f(t, y(t)) \quad \text{avec} \quad y(t_0) = y_0$$

Dans le cas où le membre de droite ne dépend pas de $y(t)$ on a :

$$\frac{dy}{dt} = f(t) \quad \text{solution :} \quad y(t) = y_0 + \int_{t_0}^{t} f(t)dt$$

Auquel cas on peut simplement utilisze une méthode d'intégration de type rectangles ou trapèzes, ...

Equation différentielle scalaire d'ordre 1

$$\frac{dy}{dt} = f(t, y(t)) \quad \text{avec} \quad y(t_0) = y_0$$

Exemple du cas général : particules dans un champ variable

$$m\frac{dv}{dt} = \sum \text{forces} = f(t, v(t))$$

On vois que la force dépend de la vitesse v et que le champ de force dépend explicitement du temps.

Note : un système d'EDO d'ordre supérieur n se ramène à **des systèmes différentiels couplés** *de n équationss du première ordre $\rightarrow$ EDO vectorielles d'ordre 1*

Résolution Numérique

Dans le cas d'une résolution numérique, on opère une discrétisation par découpage d'un intervalle $[t_0, t_0 + L]$ longueur L selon un pas constant h.

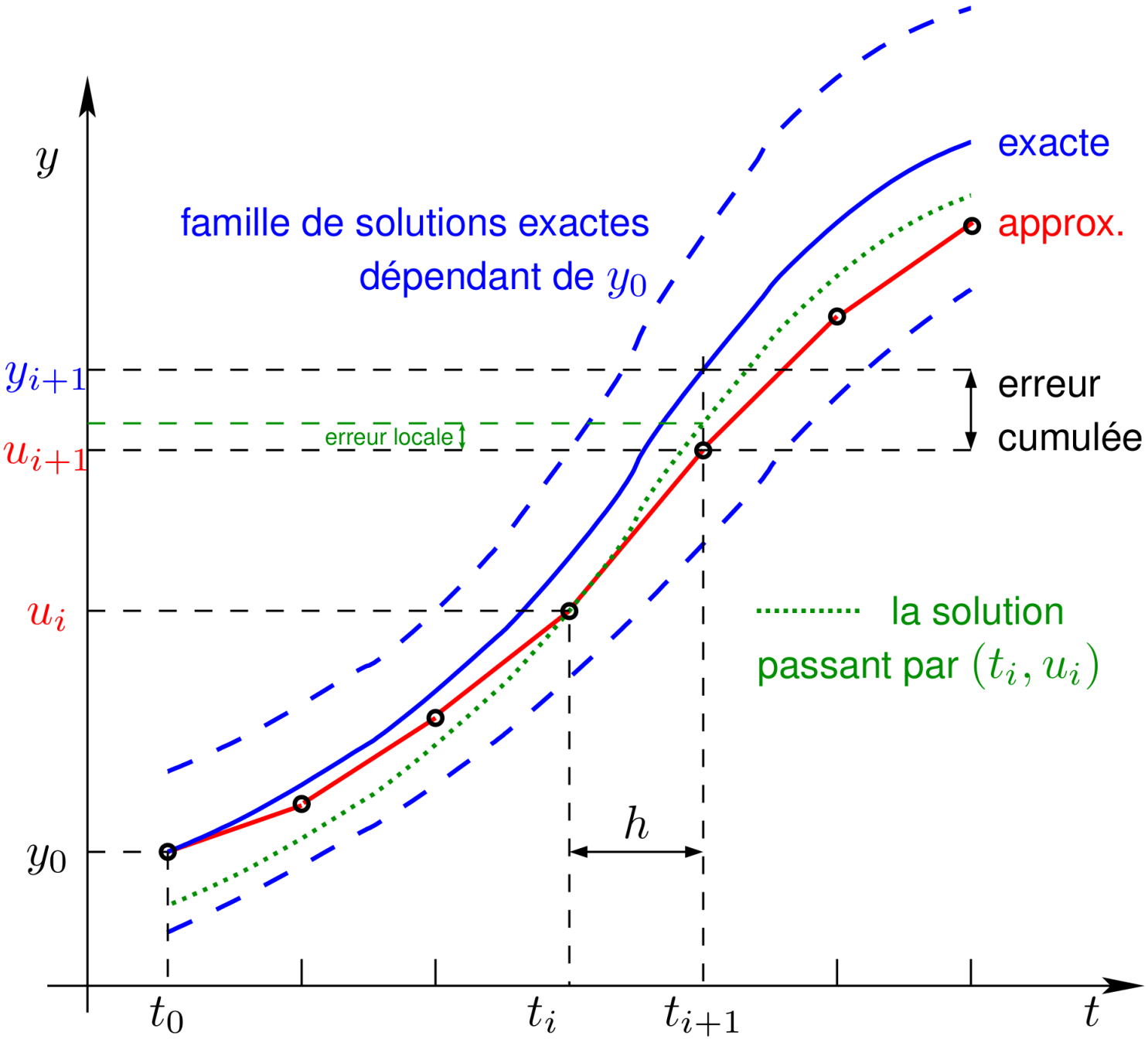
Echantillonage aux instants $\boldsymbol{t_i = y_0 + ih}$ pour $1 \leqslant i \leqslant n$

Numériquement pour un problème avec condition initiale, cela revient à faire une boucle sur les t_i pour calculer l'approximation u_{i+1} à t_{i+1}

C'est une approximation **de proche en proche** de la solution sur l'intervalle L.

$\Rightarrow$ accumulation des erreurs dans la boucle, on parle de **dérive** ou d'erreur cumulée

- Si calcul sur la dernière valeur calculée u_i : **méthodes à un pas**
- Si calcul sur plusieurs valeurs précédentes $u_{i-k}(k \geqslant 0)$: **méthodes à plusieurs pas** (initialisation le plus souvent à un pas)


y
famille de solutions exactes
dépendant de y_0
exacte
approx.
y_{i+1}
erreur locale
u_{i+1}
erreur
cumulée
u_i
la solution
passant par (t_i, u_i)
h
y_0
t_0
t_i
t_{i+1}
t

Méthodes à un pas

L'estimation de la fonction au pas suivant se résume à un développement limité de Taylor :

$$y(t_i + h) = y(t_i) + h\frac{dy}{dt}(t_i) + \frac{h^2}{2}\frac{d^2y}{dt^2}(t_i) + \dots$$

L'ordre n de la méthode est la plus grande puissance de h prise en compte dans l'approximation.

On distingue deux types d'erreur qui se cumulent :

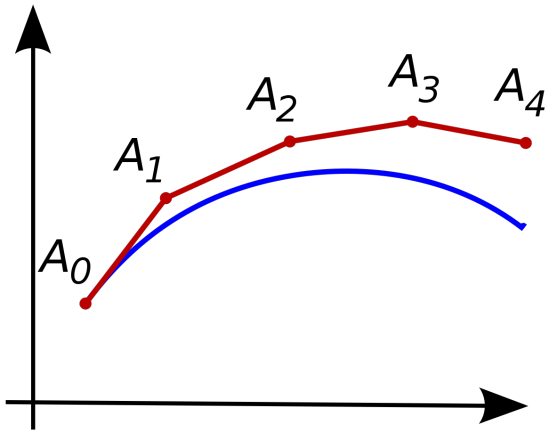
Erreur de troncature locale

- Somme des **termes négligés** $\propto h^{n+1}$.
- Déterministe : Augmente si le pas h augmente et est proportionelle à l'ordre de la méthode $+1$

Erreur d'arrondi

- **Erreur de précision (finie) des opérations** sur les réels.
- "Aleatoire" : Augmente si les calculs se compliquent, augmente pour un pas plus fin (h petit)

Taille des pas, "résolution/Sampling" de la méthode



Méthode d'ordre 1

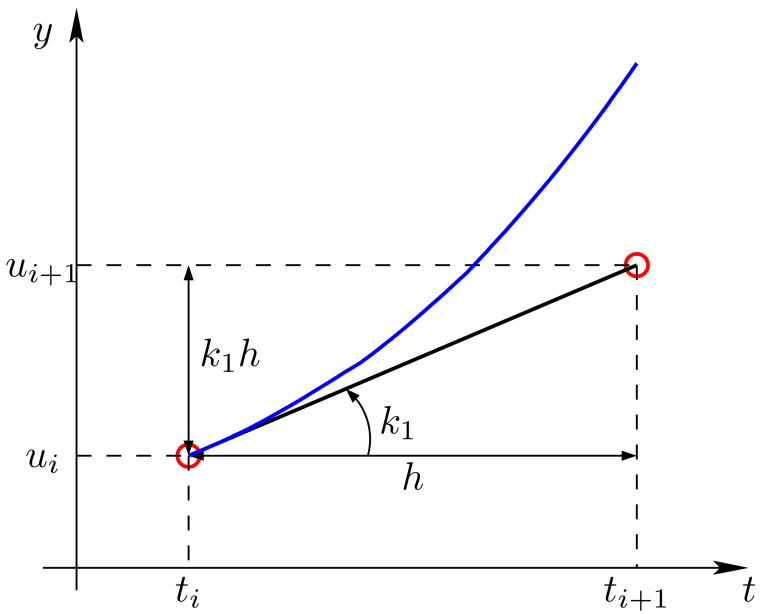
La dérive de l'erreur est plus forte si la fonction change rapidement.
Il faut adapter la taille du pas h afin de garantir que la fonction soit bien résolue.

L'Ordre de la méthode permet pour **une même taille de pas** de moins dériver.

D'une manière générale on considère que réduire le pas permet une meilleur solution au prix d'un coût de calcul élevé.

Attention cependant à ne pas devenir dominé par les erreurs d'arrondie ! Il sagit en réalité d'un compromis !

Méthode d'Euler explicite



On exprime la dérivée comme une dfférence finie :

$$\frac{dy}{dt} = f(t, y(t)) \approx \frac{y(t+h) - y(t)}{h}$$

$$\frac{u_{i+1} - u_i}{h} = f(t_i, u_i)$$

$$\Rightarrow \boldsymbol{u_{i+1} = u_i + h f(t_i, u_i)}$$

La méthode d'Euler néglige les termes en h^2
$\Rightarrow y(t_i + h) = y(t_i) + h\frac{dy}{dt}(t_i) + O(h^2)$
On integre sur L avec un pas h on a donc L/h pas d'intégration $\Rightarrow$ la méthode est donc uniquement d'ordre 1

Note : Il existe aussi une méthode d'Euler **Implicite** (ou rétrograde) mais qui nécessite de connaitre une solution analytique de u_{i+1}

Exemple de la méthode d'Euler

Rappel objectif : $\frac{dy}{dt} = f(t, y(t))$

$$u_{i+1} = u_i + hf(t_i, u_i)$$
$$y'(t) = t + y + 1$$

Solution exacte :

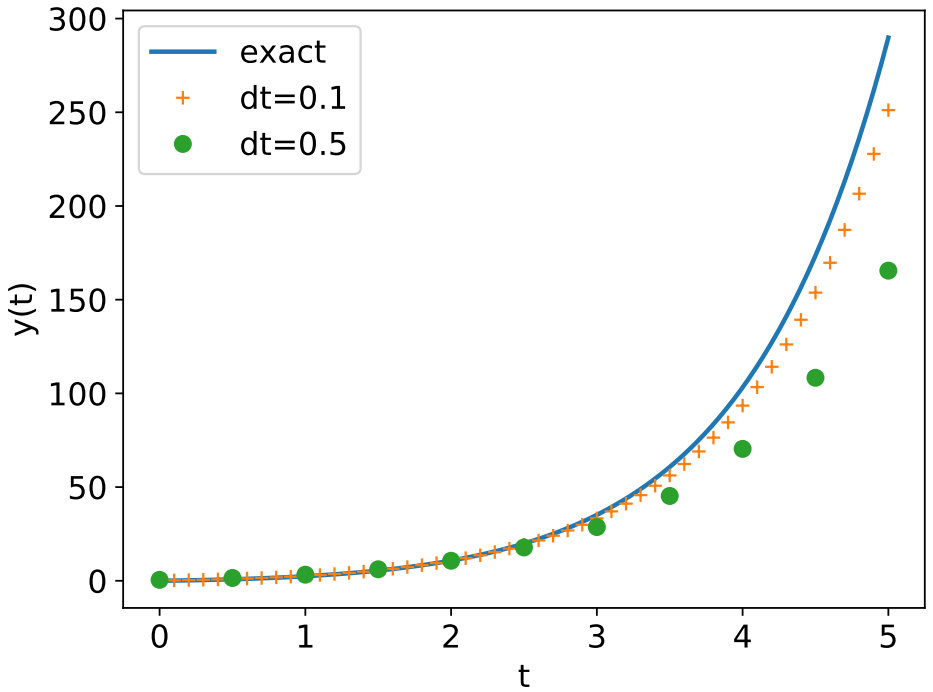
$$y(t) = 2e^t - t - 2$$

```
n = 10      #nb de pas
h = 0.5     #intervalle (dt)

t = 0
y = 0

data = np.zeros((n+1,2))

for i in range(0,n+1):
   t = i * h
   y = y + (t + y + 1) * h
   data[i,0] = t
   data[i,1] = y
...
plot...
```



Exemple 2 de la méthode d'Euler

Cas d'un projectile lancé avec une vitesse v_0 dans un repère x, y

Position : $\vec{r} = (x, y)$ et : $\vec{v} = (v_x, v_y)$ Les équations de newton nous donnent :

$$\frac{d}{dt}\vec{r} = \vec{v}$$
$$\frac{d}{dt}\vec{v} = \frac{\vec{F}}{m}$$

$$x' = v_x$$
$$y' = v_y$$
$$v'_x = F_x/m = 0$$
$$v'_y = F_y/m = -g$$

C'est donc un système de **4 équations différentielles couplées !**

Via la méthode d'Euler : $u_{i+1} = u_i + hf(t_i, u_i)$

$$\vec{y} = \begin{bmatrix} x \\ y \\ v_x \\ x_y \end{bmatrix} \quad \vec{f} = \begin{bmatrix} v_x \\ v_y \\ 0 \\ -g \end{bmatrix}$$

$$x_{i+1} = x_i + v_x \times h$$
$$y_{i+1} = y_i + v_y \times h$$
$$v_{x\,i+1} = v_{x\,i} + 0 \times h$$
$$v_{y\,i+1} = v_{y\,i} - g \times h$$

Attention : l'ordre des calculs importe ! Ici il faut bien prendre les vitesses en i.

Si on met à jour les vitesses PUIS les positions avec les nouvelles méthode il s'agit d'un leapfrog

Méthode d'ordre 2

Pour **augmenter l'ordre de la méthode** on va bien évidemment tenter d'ajouter des termes du développement de Taylor :

$$y(t_i + h) = y(t_i) + h\frac{dy}{dt}(t_i) + \frac{h^2}{2}\frac{d^2y}{dt^2}(t_i) + \dots$$

$$\frac{dy}{dt} = f(t, y(t)) \quad \Rightarrow \quad \frac{d^2y}{dt^2} = \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial y}\frac{dy}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial y}f$$

En pratique il est souvent difficile d'obtenir une évaluation correcte des dérivées partielles de f ...

On général on preferera une méthode capable d'évaluer **le second membre de f** en plusieurs points adaptés.

$$\Downarrow$$

Méthode du point milieu

On centre l'évaluation de la **dérivée** en $t_m = (t_i + t_{i+1})/2$,
appelé **point milieu** :

$$y(t_i + h) = y(t_m) + \frac{h}{2}\frac{dy}{dt}(t_m) + \frac{1}{2}\frac{h^2}{4}\frac{d^2y}{dt^2}(t_m) + O(h^3)$$
$$y(t_i) = y(t_m) - \frac{h}{2}\frac{dy}{dt}(t_m) + \frac{1}{2}\frac{h^2}{4}\frac{d^2y}{dt^2}(t_m) + O(h^3)$$

Par différence entre ces deux termes on trouve la solution suivante :

$$y(t_i + h) - y(t_i) = h\frac{dy}{dt}(t_m) + O(h^3)$$

Méthode du point milieu

Pour parler d'une méthode de second ordre ou doit faire l'évaluation de f en 2 points, en (t_i, u_i) et au milieu $(t_{i+1/2} = t_i + h/2, u_{i+1/2})$

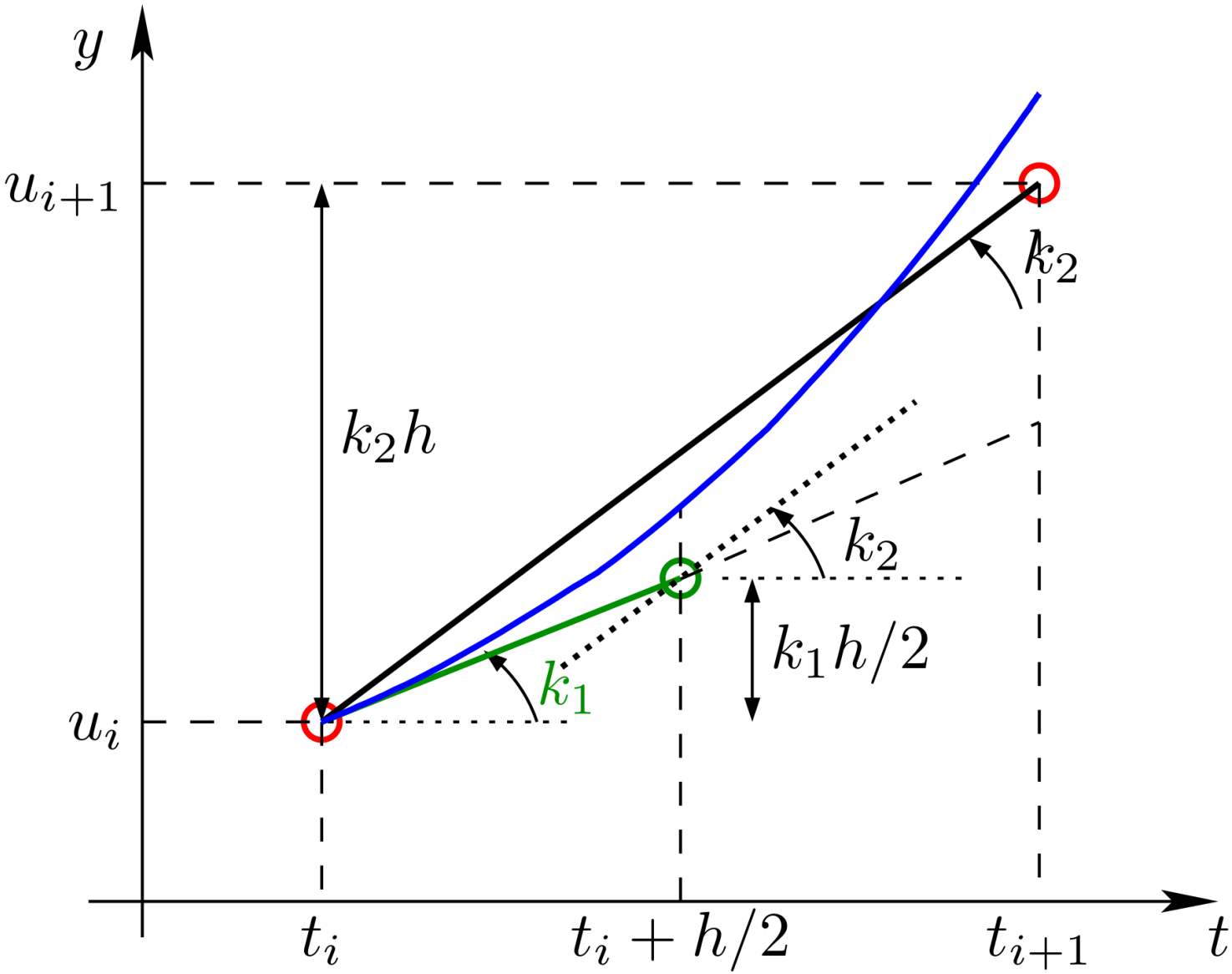
$$u_{i+1} = u_i + hf\left(t_i + \frac{h}{2}, u_i + \frac{h}{2} f(t_i, u_i)\right)$$

On peux alors écrire les coeficients k_i tels que :

$$\begin{aligned} k_1 &= f(t_i, u_i) \\ k_2 &= f\left(t_i + \frac{h}{2}, u_i + k_1 \frac{h}{2}\right) \\ u_{i+1} &= u_i + hk_2 \end{aligned}$$

Les termes k_1 et k_2 sont évalués l'un après l'autre et le dernier d'entre eux permet d'évaluer u_{i+1}

Illustration de la méthode du point milieu



Méthode de Runge-Kutta d'ordre 2 (RK2)

La méthode RK2 (ou Euler Modifée) reprend les equations en t_i et t_{i+1} et fait **la moyenne des dérivées aux ectrémités** (plutot que la somme). (similaire à la méthode des trapèzes)

$$\frac{dy}{dt}(t_i) + \frac{dy}{dt}(t_{i+1}) = 2\frac{dy}{dt}(t_m) + O(h^2)$$

ce qui évite une approximation via le point milieu t_m

$$u_{i+1} = u_i + \frac{h}{2}\big[f(t_i, u_i) + f(t_{i+1}, u_{i+1})\big]$$

C'est une méthode dite **implicite**, plus stable que les précédente (mais plus lourde)
Le plus souvent on se sert tout de même de la méthode d'euler pour évaluer u_{i+1}

Méthode de Runge-Kutta d'ordre 2 (RK2)

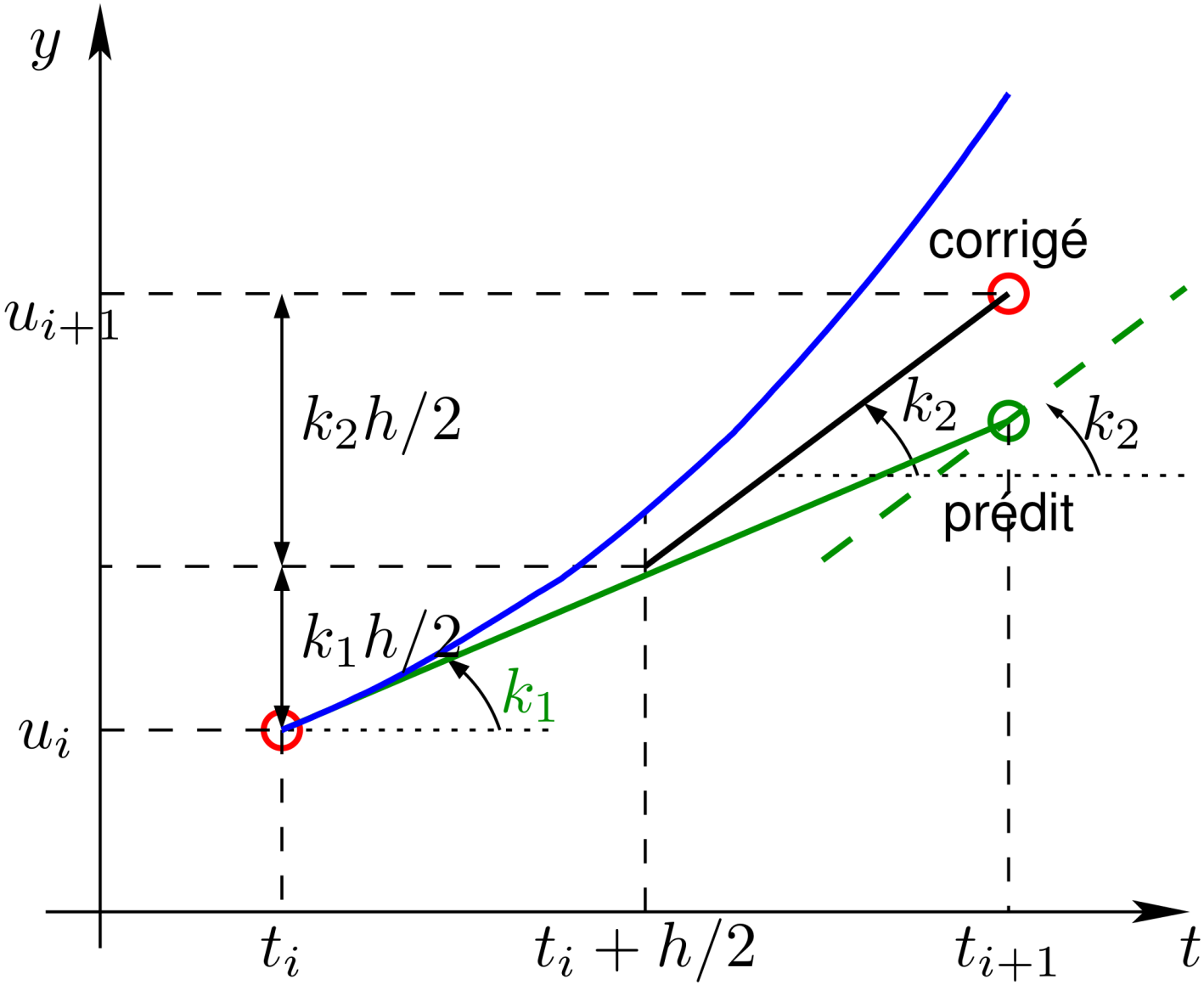
On parle de méthode : **prédicteur-correcteur**

$$k_1 = f(t_i, u_i)$$
$$k_2 = f(t_{i+1}, u_{i+1})$$
$$u_{i+1} = u_i + \frac{h}{2}\left[k_1 + k_2\right]$$

Revient à faire un demi-pas avec chacune des estimation u_i et u_{i+1} effectuée avec Euler progressif.

- C'est une méthode d'ordre 2 comme le point milieu mais pas d'évalution hors grille. - On peux itérer sur la correction jusqu'à ce que celle-ce devienne négligeable.

Illustration de la méthode RK2



Méthode de RK4

Les méthodes RK(N) fonctionnent toutes selon le même principe de **prédiction-correction** mais avec plusieus évaluations en différents points entre u_i et u_{i+1}, avec N le nombre d'évaluations nécessaires.

N peut être très élevé, pour un coût de calcul de plus en plus important. En pratique la méthode la plus utilisée est **RK4** (car la plus polyvalente)

$$
\begin{aligned}
k_1 &= f(t_i, u_i) \\
k_2 &= f\left(t_i + \frac{h}{2}, u_i + k_1 \frac{h}{2}\right) \\
k_3 &= f\left(t_i + \frac{h}{2}, u_i + k_2 \frac{h}{2}\right) \\
k_4 &= f\left(t_i + h, u_i + k_3 h\right) \\
u_{i+1} &= (k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)\frac{h}{6}
\end{aligned}
$$

Méthode de Velolcity-Verlet

Algorithme spécifiquement conçu pour l'intégration des **équations du mouvement** :

$$\Rightarrow \quad \frac{d}{dt}\vec{r} = \vec{v}$$

$$\frac{d}{dt}\vec{v} = \frac{\vec{F}\big(t, \vec{r}(t), \vec{v}(t)\big)}{m}$$

Développpement de Taylor associé :

$$\Rightarrow \quad \vec{r}(t+h) = \vec{r}(t) + \vec{v}(t)h + \frac{h^2}{2}\vec{a}(t)$$

$$\vec{v}(t+h) = \vec{v}(t) + \vec{a}(t)h + \frac{h^2}{2}\frac{d\vec{a}}{dt}$$

Différences finies :

$$\Rightarrow \quad \frac{d\vec{a}}{dt} = \frac{\vec{a}(t+h) - \vec{a}}{h}$$

Méthode de Velocity-Verlet

$$\Rightarrow \quad \vec{r}(t+h) = \vec{r}(t) + \vec{v}(t)h + \frac{h^2}{2}\vec{a}(t)$$

$$\vec{v}(t+h) = \vec{v}(t) + \vec{a}(t)h + \frac{\vec{a}(t) + \vec{a}(t+h)}{2}h$$

Méthode de Velolcity-Verlet

$$\vec{r}(t+h) = \vec{r}(t) + \vec{v}(t)h + \frac{h^2}{2}\vec{a}(t)$$

$$\vec{v}(t+h) = \vec{v}(t) + \vec{a}(t)h + \frac{\vec{a}(t) + \vec{a}(t+h)}{2}h$$

Cet intégrateur est d'ordre 2 sur les vitesses et d'ordre 3 sur les positions.

Il est *simple* à programmer.

C'est un intégrateur **symplectique** : l'évolution des érreurs est périodique $\Rightarrow$ il conserve l'énergie à long terme, **pas de dérive**.

Erreurs des méthodes précédentes

Méthoque	Ordre	Erreur locale	Erreur globale	Symplectique
Euler explicite	1	$\propto h^2$	$\propto h$	non
Point milieu	2	$\propto h^3$	$\propto h^2$	non
Runge-Kutta 2	2	$\propto h^3$	$\propto h^2$	non
Runge-Kutta 3	3	$\propto h^4$	$\propto h^3$	non
Runge-kutta 4	4	$\propto h^5$	$\propto h^4$	non
Velocity-Verlet	2+	$\propto h^3+$	$\propto h^2+$	oui

TABLE – Table des erreurs de troncature

L'erreur d'arrondi locale est indépendante de $h \rightarrow$ erreur d'arrondi globale $\propto \frac{1}{h}$