Intégration numérique des EDOs

Gabriel STOLTZ

gabriel.stoltz@enpc.fr

(CERMICS, Ecole des Ponts & Equipe-projet MATHERIALS, INRIA Paris)

Cours Ecole des Mines, 1ère année, octobre 2017

Un exemple : la dynamique céleste

• Système solaire réduit : Soleil et petites planètes (q_0), Jupiter, Saturne, Uranus, Neptune, Pluton (q_1 à q_5)

• Energie $H(q,p) = V(q) + \sum_{i=1}^{N} \frac{p_i^2}{2m_i}$ avec $V(q) = -\sum_{0 \leqslant i < j \leqslant 5} G \frac{m_i m_j}{|q_i - q_j|}$

• Unités réduites : masse du soleil, longueur = distance Terre-Soleil, temps = 1 jour

Dynamique Hamiltonienne

$$\begin{aligned} \dot{q}_i(t) &= \frac{\partial H}{\partial p_i} = \frac{p_i(t)}{m_i} \\ \dot{p}_i(t) &= -\frac{\partial H}{\partial q_i} = -\nabla_{q_i} V(q(t)) \end{aligned}$$

Préservation de l'énergie $H(q(t), p(t)) = H(q_0, p_0)$

$\rightarrow$ Notion de stabilité : conservation de l'énergie en temps long

Autres motivations

- Champ de vecteurs $f : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}^d$, temps $t \geqslant 0$ (parfois $t \in \mathbb{R}$)

Problème de Cauchy

$$\dot{y}(t) = f(t, y(t)), \qquad y(0) = y_0$$

- Applications
  - Intégration de trajectoires (satellites, missiles, ...) : précision
  - Dynamique des populations : Lokta-Volterra
  - Cinétique chimique : systèmes raides
  - Dynamique Hamiltonienne : comportement en temps long

- Extension au cas des
  - EDPs (météorologie, mécanique quantique,...)
  - équations différentielles stochastiques (finance, phys. stat. num.)

Intégration des équations différentielles ordinaires

- Etude du problème continu ("bien posé")
- Approximation numérique par méthodes à un pas
  - Exemples et mise en oeuvre
  - Analyse *a priori* directe : convergence (consistance + stabilité)

consistance + stabilité = convergence

- Compléments
  - Systèmes linéaires
  - Influence des erreurs d'arrondi
  - Pas de temps adaptatif (analyse a posteriori)
  - Analyse rétrograde

Etude du problème continu

Existence et unicité des solutions (problème continu)

- Existence locale et unicité si f localement Lipschitz (Cauchy-Lipschitz)

$$\forall (t, y_1, y_2) \in]t_0 - \tau, t_0 + \tau[\times B(y_0, r)^2 \quad |f(t, y_1) - f(t, y_2)| \leqslant L |y_1 - y_2|$$

où $|\cdot|$ est une norme sur $\mathbb{R}^d$ (toutes les normes sont équivalentes)

- Si on n'a pas de solution globale, alors $|y(t)| \to +\infty$ lorsque $t \to T_{\max}$

- Existence/unicité de la solution globale si...

- Stabilité si...

Approximation numérique : théorie générale

Approximation numérique

- Approximation y^n de la solution exacte $y(t_n)$, avec un pas de temps
  - fixe $\Delta t > 0$, auquel cas $t_n = n\Delta t$
  - variable $\Delta t_n = t_{n+1} - t_n$
  - nombre de pas de temps N $(=T/\Delta t$ dans les cas simples$)$

- Méthodes à un pas : discrétisation de la formulation intégrale par une règle de quadrature $\to$ méthodes de Runge-Kutta

$$y(t_{n+1}) = y(t_n) + \int_{t_n}^{t_{n+1}} f(s, y(s))\, ds$$

Méthode à un pas

$$y^{n+1} = y^n + \Delta t_n\, \Phi_{\Delta t_n}(t_n, y^n)$$

- Méthodes multi-pas (approcher y^n en utilisant $y^{n-1}, y^{n-2}, \dots$) : plus précise à coût de calcul fixé, mais attention à la stabilité

Méthodes d'Euler

Méthode d'Euler explicite

$$y^{n+1} = y^n + \Delta t_n f(t_n, y^n)$$

- Application $\Phi_{\Delta t_n}$ définie de manière explicite : $\Phi_{\Delta t_n}(t_n, y^n) = f(t_n, y^n)$

Méthode d'Euler implicite

$$y^{n+1} = y^n + \Delta t_n f(t_{n+1}, y^{n+1})$$

- Application $\Phi_{\Delta t_n}$ définie de manière implicite : pour tout (t^n, y^n),
$\Phi := \Phi_{\Delta t_n}(t_n, y^n) = f(t_{n+1}, y^{n+1})$ est solution de

$$\Phi = f(t_{n+1}, y^n + \Delta t_n \Phi)$$

Autres exemples

- Méthodes explicites
  - Heun : $y^{n+1} = y^n + \frac{\Delta t_n}{2}\Big(f(t_n, y^n) + f\big(t_{n+1}, y^n + \Delta t_n f(y^n)\big)\Big)$
- Méthodes implicites
  - Trapèzes : $y^{n+1} = y^n + \frac{\Delta t_n}{2}\left(f(t_n, y^n) + f(t_{n+1}, y^{n+1})\right)$
  - Point milieu : $y^{n+1} = y^n + \Delta t_n f\left(\frac{t_n + t_{n+1}}{2}, \frac{y^n + y^{n+1}}{2}\right)$

Un mot sur l'implémentation des schémas implicites

- Beaucoup de "bonnes" méthodes sont implicites (stabilité accrue)

- Il faut déjà garantir que la méthode est bien définie !

- Exemple du schéma d'Euler implicite $y^{n+1} = y^n + \Delta t_n \, f(t_{n+1}, y^{n+1})$
  - existence/unicité de y^{n+1} lorsque $\Delta t_n \Lambda_f(t_{n+1}) < 1$ où

$$\forall y_1, y_2 \in \mathbb{R}^d, \qquad |f(t_{n+1}, y_1) - f(t_{n+1}, y_2)| \leqslant \Lambda_f(t_{n+1})|y_1 - y_2|$$

  - construction numérique de la solution par itérations de point fixe
    - condition initiale : schéma explicite $z^{n+1,0} = y^n + \Delta t_n f(t_n, y^n)$
    - itérations selon

$$z^{n+1,k+1} = y^n + \Delta t_n \, f(t_{n+1}, z^{n+1,k})$$

  On a $z^{n+1,k} \xrightarrow[k \to +\infty]{} y^{n+1}$. En pratique, nombre fini d'itérations

Analyse d'erreur : consistance

- Erreur de troncature locale = erreur résiduelle si l'on glisse la solution **exacte** dans le schéma

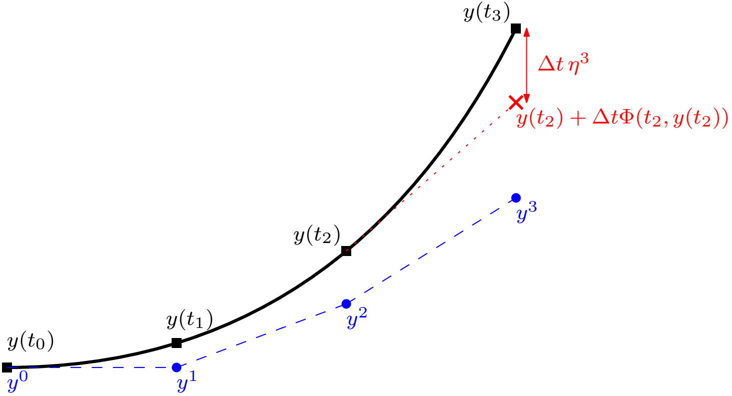
$$\eta^{n+1} := \frac{y(t_{n+1}) - \Big(y(t_n) + \Delta t_n \, \Phi_{\Delta t_n}(t_n, y(t_n))\Big)}{\Delta t_n}$$

- Consistance si $\max_{0 \leqslant n \leqslant N-1} |\eta^{n+1}| \to 0$ lorsque $\Delta t \to 0$
- Consistance d'ordre p si $\max_{0 \leqslant n \leqslant N-1} |\eta^{n+1}| \leqslant C_y \Delta t^p$
- Preuves : développements de Taylor (régularité de la sol. exacte y)
- **Exemple :** le schéma d'Euler explicite est d'ordre 1 ($t = t_n$, $\Delta t = \Delta t_n$)

$$y(t+\Delta t) - \Big(y(t) + \Delta t \, \underbrace{f(t, y(t))}_{=y'(t)}\Big) = \Delta t^2 \int_0^1 (1-\theta) y''(t+\theta\Delta t)\, d\theta$$

D'où $\displaystyle \max_{0 \leqslant n \leqslant N-1} |\eta^{n+1}| \leqslant \left(\frac{1}{2} \sup_{t\in[0,T]} |y''(t)|\right) \Delta t$

Analyse d'erreur : consistance



Trajectoire exacte $t \mapsto y(t)$ vs. trajectoire numérique $y^0, y^1, y^2, \dots$

Erreur de consistance = sur un pas, en partant de la trajectoire exacte

Analyse d'erreur : stabilité

Stabilité (Δt fixé pour simplifier)

Il existe une constante $S(T) > 0$ telle que, pour toute suite $z = \{z^n\}_{1 \leqslant n \leqslant N}$ partant de la même valeur $z^0 = y^0$ et vérifiant

$$\begin{cases} y^{n+1} = y^n + \Delta t \Phi_{\Delta t}(t_n, y^n) \\ z^{n+1} = z^n + \Delta t \Phi_{\Delta t}(t_n, z^n) + \Delta t \, \delta^{n+1} \end{cases}$$

on a la majoration $\displaystyle \max_{1 \leqslant n \leqslant N} |y^n - z^n| \leqslant S(T) \, \Delta t \sum_{n=1}^{N} |\delta^n|$

- $S(T)$ ne dépend que du temps de simulation $T = N\Delta t$ (pas de Δt ou N seuls)

Condition suffisante de stabilité

Supposons $\Phi_{\Delta t}$ Lipschitzienne en y

$$|\Phi_{\Delta t}(t, y_1) - \Phi_{\Delta t}(t, y_2)| \leqslant \Lambda_\Phi |y_1 - y_2|$$

- Dans ce cas, $|y^{n+1} - z^{n+1}| \leqslant (1 + \Lambda_\Phi \Delta t)|y^n - z^n| + \Delta t|\delta^{n+1}|$
- **Lemme de Gronwall discret :** suite $0 \leqslant a^{n+1} \leqslant (1+\lambda)a^n + b^{n+1}$ avec $\lambda > 0$, $b^n \geq 0$ et $a^0 = 0$; par récurrence

$$a^n \leqslant \sum_{k=0}^{n-1} (1+\lambda)^k b^{n-k} \leqslant (1+\lambda)^{n-1} \sum_{l=1}^{n} b^l$$

Ici, $(1+\lambda)^{n-1} = (1 + \Lambda_\Phi \Delta t)^{n-1} \leqslant (1 + \Lambda_\Phi \Delta t)^N \leqslant e^{N \Lambda_\Phi \Delta t} = e^{\Lambda_\Phi T}$

- **Conclusion :** stabilité avec $S(T) = \mathrm{e}^{\Lambda_\Phi T}$
  - $\Lambda_\Phi \simeq$ inverse de la plus petite échelle de temps physique
  - $T =$ temps de simulation

Analyse d'erreur : convergence

- Une méthode est convergente si l'erreur globale vérifie

$$\max_{0 \leqslant n \leqslant N} |y^n - y(t_n)| \to 0 \text{ lorsque } \Delta t \to 0$$

- Principe général de l'étude de convergence
  - erreur locale à chaque pas de temps : consistance
  - accumulation des erreurs : stabilité

Théorème fondamental (Lax)

Une méthode stable et consistante est convergente
Si la méthode est consistante d'ordre p, alors

$$\max_{0 \leqslant n \leqslant N} |y^n - y(t_n)| \leqslant C \Delta t^p$$

- On peut vérifier ces ordres numériquement **[DEMO]**

Preuve du théorème de Lax

- Prendre pour z^n la solution exacte $y(t_n)$, auquel cas

$$\begin{aligned} z^{n+1} = y(t_{n+1}) &= y(t_n) + \Delta t_n \Phi_{\Delta t_n}(t_n, y(t_n)) + \Delta t_n \eta^{n+1} \\ &= z^n + \Delta t_n \Phi_{\Delta t_n}(t_n, z^n) + \Delta t_n \eta^{n+1} \end{aligned}$$

- Par stabilité avec $\delta^{n+1} = \eta^{n+1}$,

$$e := \max_{1 \leqslant n \leqslant N} |y^n - y(t_n)| \leqslant S(T)\, \Delta t \sum_{n=1}^{N} |\eta^n| \leqslant S(T)\, T \left(\max_{1 \leqslant n \leqslant N} |\eta^n| \right)$$

- **Conclusions :**
  - méthode consistante : $e \leqslant S(T)\, T \left(\max_{1 \leqslant n \leqslant N} |\eta^n|\right) \to 0$
  - méthode consistante d'ordre p :

$$e \leqslant S(T) \Delta t \sum_{n=1}^{N} C \Delta t^p = S(T)\, T C \Delta t^p$$

Compléments

Stabilité des schémas linéaires

- Etude de stabilité pour le schéma linéaire $y^{n+1} = By^n$ avec $B \in \mathbb{R}^{d\times d}$
- On considère les suites

$$\begin{cases} y^{n+1} = By^n \\ z^{n+1} = Bz^n + \Delta t\, \delta^{n+1} \end{cases}$$

- Par récurrence et linéarité, il vient $y^n - z^n = \Delta t \sum_{k=0}^{n-1} B^k \delta^{n-k}$
- Une condition suffisante de stabilité est

$$|B| \leqslant 1$$

où $|\cdot|$ désigne une norme sur $\mathbb{R}^d$ et la norme matricielle induite

- On obtient $S = 1$ (à comparer au cas général où S croît exponentiellement avec le temps T)

Systèmes linéaires dissipatifs

- Systèmes linéaires dissipatifs $\dot{y}(t) = -Ay(t)$ avec $A \in \mathbb{R}^{d\times d}$ positive

$\rightarrow$ pratique d'utiliser la norme euclidienne $\|\cdot\|_{\ell^2}$ pour l'étude de stabilité

- Schéma d'Euler implicite $y^{n+1} = y^n - \Delta t A y^{n+1}$, soit

$$y^{n+1} = B_I y^n \text{ avec } B_I := (\mathrm{Id} + \Delta t A)^{-1}$$

$\rightarrow$ la matrice $\mathrm{Id} + \Delta t A$ est bien inversible car définie positive $\forall \Delta t$

$\rightarrow$ stabilité inconditionnelle $(\forall \Delta t)$

- Schéma d'Euler explicite $y^{n+1} = y^n - \Delta t A y^n$, soit

$$y^{n+1} = B_E y^n \text{ avec } B_E := \mathrm{Id} - \Delta t A$$

$\rightarrow$ stabilité conditionnelle : $\Delta t \leqslant 2\gamma$ où, pour A symétrique, γ est l'inverse du rayon spectral de A

Influence des erreurs d'arrondi (1)

- On calcule en fait une valeur approchée de la solution numérique

$\rightarrow$ pas trop d'opérations arithmétiques sinon l'erreur d'arrondi domine

- Trois sources d'erreurs
  - condition initiale $\widetilde{y}^0 = y^0 + \delta y^0$
  - évaluation de $\Phi(t_n, \widetilde{y}^n; \Delta t_n) \rightarrow \rho_n$
  - calcul de la nouvelle position $\rightarrow \sigma_n$

$$\widetilde{y}^{n+1} = \widetilde{y}^n + \Delta t_n \Big(\Phi(t_n, \widetilde{y}^n; \Delta t_n) + \rho_n \Big) + \sigma_n$$

- On suppose que $|\rho_n| \leqslant \rho$ et $|\sigma_n| \leqslant \sigma$.

- Typiquement, $\sigma \sim \varepsilon_{\mathrm{machine}}$ et $\rho \sim \kappa \varepsilon_{\mathrm{machine}}$ (où κ conditionnement Φ)

Influence des erreurs d'arrondi (2)

Pour une méthode stable et $N = [T/\Delta t]$ pas de temps (Δt fixé), l'erreur d'arrondi globale est

$$\max_{0 \leqslant n \leqslant N} \|\widetilde{y}^n - y^n\| \leqslant M \left(\|\delta y^0\| + \sum_{n=0}^{N-1} \|\sigma_n\| + \Delta t_n \|\rho_n\| \right)$$
$$\leqslant M \left(\|\delta y^0\| + \frac{T\sigma}{\Delta t} + T\rho \right)$$

- Erreur totale = erreur arrondi totale + erreur approximation $C_T \Delta t^p$.

Pas de temps donnant la précision maximale

$$\Delta t_{\mathrm{opt}} = \left(\frac{T\sigma}{p C_T} \right)^{1/(p+1)}$$

- On peut vérifier ce résultat numériquement sur $\dot{y} = y$ **[DEMO]**

Contrôle du pas d'intégration (analyse *a posteriori*)

• Fixer erreur totale $\displaystyle \max_{0 \leqslant n \leqslant N} \|y^n - y(t_n)\| \leqslant S \sum_{n=0}^{N-1} \|e(t_n, y(t_n); t_{n+1})\| \leqslant \varepsilon$

• Augmentation ou réduction prudente de Δt_n pour que

$$\|e(t_n, y(t_n); t_{n+1})\| \leqslant \eta \, \varepsilon \, \frac{\Delta t_n}{T}$$

• Utilise une estimation *a posteriori* de l'erreur de troncature (estimation *a priori* compliquée car demande le calcul de dérivées de f)

• Approches générales : méthode avec deux pas de temps différents (Δt_n et $\Delta t_n/2$), méthodes de Runge-Kutta emboîtées

• Cas particulier : schéma d'Euler explicite

$$\frac{\|e(t_n, y(t_n); t_{n+1})\|}{\Delta t_n} \simeq \frac{\left\| f(t_{n+1}, y^{n+1}) - f(t_n, y^n) \right\|}{2}$$

Analyse *a priori* rétrograde (1)

- Philosophie : la solution numérique...
  - est une solution approchée de la dynamique exacte
  - est la solution exacte d'une dynamique modifiée : $y^n = z(t_n)$

Dynamique modifiée (cas autonome, pas constant)

$$\dot{z} = f_{\Delta t}(z) = f(z) + \Delta t F_1(z) + \Delta t^2 F_2(z) + \ldots, \qquad z(0) = y^0$$

- Développement limité de la solution exacte de la dynamique modifiée

$$z(\Delta t) = z(0) + \Delta t \dot{z}(0) + \frac{\Delta t^2}{2} \ddot{z}(0) + \ldots$$

avec $\dot{z}(0) = f(z(0)) + \Delta t F_1(z(0)) + \mathrm{O}(\Delta t^2)$ et

$$\ddot{z}(0) = \partial_z f_{\Delta t}\big(z(0)\big) \cdot \dot{z}(0) = \partial_z f(z(0)) \cdot f(z(0)) + \mathrm{O}(\Delta t)$$

Analyse *a priori* rétrograde (2)

- Cas de la méthode d'Euler explicite : $y^1 = y^0 + \Delta t\, f(y^0)$

Dynamique modifiée à l'ordre 2

$$z(\Delta t) = y^0 + \Delta t\, f(y^0) + \Delta t^2 \left(F_1(y^0) + \frac{1}{2}\partial_z f(y^0) f(y^0) \right) + \mathrm{O}(\Delta t^3)$$

- Avec le choix $F_1(z) = -\frac{1}{2}\partial_z f(z) f(z)$ on a donc

$$\|y^1 - z(\Delta t)\| = \mathrm{O}(\Delta t^3)$$

au lieu de $\|y^1 - y(\Delta t)\| = \mathrm{O}(\Delta t^2)$

- On peut itérer l'argument (formellement) : propriétés du schéma numérique déduites des propriétés de $\dot{z} = f_{\Delta t}(z)$

- Exemple : $\dot{y} = y^2$, solution $y(t) = y^0/(1 - ty^0)$ et $\dot{z}(t) = z^2 \pm \Delta t\, z^3$ pour les schémas d'Euler

Conclusion : retour au début

- Etude du problème continu ("bien posé")

- Approximation numérique par méthodes à un pas
  - Exemples et mise en oeuvre
  - Analyse *a priori* directe : convergence (consistance + stabilité)

- Compléments
  - Systèmes linéaires
  - Influence des erreurs d'arrondi
  - Pas de temps adaptatif (analyse a posteriori)
  - Analyse rétrograde

- A vous de jouer ! (notamment en TP... et voici quelques instructions pour bien démarrer, et des images de simulation)