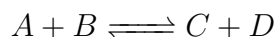


1 Contexte et problème de Cauchy

Dans notre vie, des réactions chimiques se produisent autour de nous, et même en nous, tous les jours. Il y a tellement de réactions chimiques différentes que les scientifiques trouvent utile de les regrouper en catégories (dosage, photosynthèse, décomposition, acidobasique, combustion, ...) pour les classer afin de les maîtriser en produisant des éléments essentiels (Eau H_2O , Sel de table $NaCl$, Carbonate de sodium Na_2CO_3 , Hydrogène H_2 , Oxygène O_2 , ...) pour nous et notre planète. Ces réactions chimiques sont décrites par des équations chimiques qui s'écrivent en général sous la forme



où les éléments A et B appelés les réactifs qui réagissent entre eux pour donner naissance aux éléments C et D , appelés les produits de la réaction chimique.



FIGURE 1 – Image illustrant la réaction chimique (réf. www.istockphoto.com).

L'étude de processus chimiques complexes fait intervenir très souvent des réactions qui s'enchaînent. Il peut arriver que certains éléments jouant le rôle de réactifs à une certaine étape soient aussi le produit dans une étape ultérieure. Ce phénomène, appelé auto-catalyse, donne lieu à des changements périodiques dans la concentration de ces éléments chimiques. Dans ce cadre de réactions oscillantes, nous trouvons les réactions suivantes que nous pourrions consulter sur Youtube en cliquant sur les liens associés :

- i. Cœur battant de mercure^{1, 2}.
- ii. Réaction de Belousov-Jabotinski³ ; $3HOOC - CH - COOH + 4BrO \longrightarrow 4Br^- + 9CO + 6HO$.
- iii. Réaction de Briggs-Rauscher⁴ ; $IO_3^- + 2H_2O_2 + CH_2(CO_2H)_2 + H + ICH(CO_2H)_2 + 2O_2 + 3H_2O$.

1. <https://www.youtube.com/watch?v=INMHbMSOLb8>
 2. <https://www.youtube.com/watch?v=MW9PHH2wI5o>
 3. <https://www.youtube.com/watch?v=IBa4kgXI4Cg>
 4. <https://www.youtube.com/watch?v=O4T0D2E9Bj4>

Dans ce projet, il s'agit d'illustrer ce phénomène à travers le modèle simple du Brusselator, où les concentrations x et y de deux éléments chimiques évoluent au cours du temps $t > 0$ suivant le système d'équations différentielles ordinaires (EDO) :

$$\begin{cases} x' &= a + x^2y - (b+1)x, \\ y' &= bx - x^2y \end{cases} \quad (1)$$

où a et b sont deux réels et x' et y' sont les dérivées en temps des concentrations x et y associées respectivement aux éléments chimiques A et B . Le système part d'un état initial $(x(0), y(0)) = (x_0, y_0) \in \mathbb{R}^2$ donné et tend vers une position d'équilibre lorsque $b \leq 1 + a^2$ et on écrit ainsi :

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} (x(t), y(t)) = \left(a, \frac{b}{a}\right).$$

En revanche, le système (2) est instable pour $b > 1 + a^2$ et donne lieu à des oscillations perpétuelles dans la concentration des deux éléments autour du point $\left(a, \frac{b}{a}\right)$.

1. Présenter le système (1) sous la forme d'un problème de Cauchy suivant :

$$\begin{cases} Y' &= f(Y), \quad \forall t \in I, \\ Y(0) &= Y_0 = (x_0, y_0) \quad \text{donné.} \end{cases} \quad (2)$$

2. Indiquer quel $Y(t)$ à poser et quelle fonction f en précisant le domaine de départ et d'arrivée.

On peut démontrer que ce problème de Cauchy admet une et une seule solution (bien que, au sens strict, F n'est pas une fonction lipschitzienne par rapport à Y).

2 Méthode d'Euler explicite

Pour $T > 0$ fixé, nous cherchons une approximation numérique de $Y(t)$ solution du problème de Cauchy (2) pour tout instant $t \in I = [0, T]$. On souhaite approcher $Y(t)$ "au mieux possible" en $N + 1$ instants de temps $t \in I$, que l'on notera t_n (avec $0 \leq n \leq N$). On considère le cas où les instants sont uniformément répartis sur l'espace temporel I de sorte que, en posant $\tau = \frac{T-0}{N}$, on aura $t_n = n\tau$.

1. En utilisant le développement de Taylor de $Y(t_n + \tau)$ autour de t_n , montrer que

$$Y(t_{n+1}) = Y(t_n + \tau) = Y(t_n) + \tau f(Y(t_n)) + \mathcal{O}(\tau^2), \quad 0 \leq n \leq N - 1$$

En négligeant les termes d'ordre supérieur à τ , rappeler le principe de la méthode d'Euler explicite.

2. Appliquer la méthode d'Euler explicite pour donner une solution approchée de $Y(t)$. Pour cela, on pourra :

- (a) Implémenter une fonction $f(t, Y)$ qui, étant donné le vecteur Y , retourne le vecteur $f(Y)$. Afin de ne pas introduire les constantes a et b dans l'appel à la fonction f , on pourra structurer cette partie du code comme suit :

```
def Brusselator(a, b) :
    def f(Y) :
        #Ecrire ici la fonction f
    return ..
return f
```

On pourra ensuite évaluer la fonction comme suit dans le reste du code :

```
(a, b) = (·, ·)
f = Brusselator (a, b)
Y = ...
f(Y)
```

Dans le code Python, nous conseillons vivement d'exprimer les vecteurs sous la forme **array** de la librairie **numpy** et pas sous forme de listes.

- (b) Implémenter un schéma d'Euler **EulerExplicit** qui, partant de l'approximation Y_n à un certain instant t_n , renvoie l'approximation Y_{n+1} à l'instant suivant $t_{n+1} = t_n + \tau$.
- (c) En utilisant la condition initiale Y_0 , faire une boucle sur tous les temps permettant d'obtenir l'approximation Y_n à tous les instants $n = 0, \dots, N$. Stocker la trajectoire, il s'agit plus précisément de stocker l'ensemble des approximations Y_n pour tous les instants t_n dans une liste.
- (d) Utiliser le code pour obtenir la trajectoire de 0 à T pour

$$T = 18, \quad a = 1, b = 3, \quad x(0) = 0, \quad y(0) = 1, \quad N = 1000.$$

Au vu des valeurs de a et b , prédire le comportement du système.

- (e) Même question pour $a = 1$ et $b = 1.5$.
3. Pour visualiser les résultats, nous conseillons de suivre les étapes ci-dessous :
- i. Coder une fonction **concentrationPlotting** qui représente graphiquement l'évolution temporelle des concentrations x et y pour $t = t_n, n = 0, \dots, N$. Vous pouvez stocker la figure avec la commande **plt.savefig('evol-concentration.pdf')**.
 - ii. Coder une fonction **trajectoryPlotting** qui représente graphiquement la trajectoire (x, y) des concentrations pour tout $t = t_n, n = 0, \dots, N$. Stocker la figure avec le nom **'trajectoire.pdf'**.
 - iii. Utiliser les fonctions ci-dessus pour représenter graphiquement l'évolution temporelle en utilisant les données des questions (d) et (e).

3 Une (autre) méthode Runge-Kutta d'ordre 4

Si la fonction $t \rightarrow Y(t)$ est suffisamment régulière, l'erreur d'approximation avec la méthode d'Euler explicite au temps final $t = T$ est de l'ordre du pas temps τ , c'est-à-dire il existe une constante $C > 0$ telle que

$$\|Y(T) - Y_N\| \leq C\tau.$$

Donc, lorsque $\tau \rightarrow 0$, on a convergence de la solution numérique vers la solution du système Y . Cependant, dans la pratique la constante C de l'inégalité est souvent très grande et augmente avec T . Pour cette raison, il est en général nécessaire de prendre des pas de temps τ extrêmement petits pour arriver à une précision convenable. Cela augmente considérablement le nombre d'instants intermédiaires et rallonge les temps de calcul et motive la recherche d'approximations dont l'erreur est de la forme

$$\|Y(T) - Y_N\| \leq C\tau^r,$$

où $r > 1$ et $C > 0$. On parle de schémas d'ordre supérieur. Pour les construire, une première possibilité serait de prendre des développements de Taylor d'ordre supérieur mais cela est en général très coûteux voire parfois même impossible en fonction du problème.

Une façon plus simple de construire des schémas d'ordre supérieur est le schéma Runge-Kutta. Dans cette approche, f est évaluée en un certain nombre de points et l'approximation se construit comme suit.

Pour tout $0 \leq n \leq N - 1$, on pose

$$Y_{n+1} := Y_n + \tau \sum_{j=1}^M \gamma_j K_n^j$$

où

$$K_n^i := \begin{cases} f(Y_n) & \text{si } i = 1 \\ f\left(Y_n + \tau \sum_{j=1}^{i-1} \beta_{ij} K_n^j\right) & \text{si } 2 \leq i \leq M. \end{cases}$$

Les coefficients β_{ij} et γ_i sont usuellement donnés dans le tableau ci-dessous appelé tableau de Butcher

$$\begin{array}{c|c} \alpha_i & \beta_{ij} \\ \hline & \gamma_j \end{array}$$

où les indices i sont des indices de ligne et les indices j des indices de colonne. Le tableau comporte aussi des coefficients α_i dont on n'aura pas réellement besoin dans ce problème (la fonction f a une seule variable y). Dans ce type d'approche, étant donné un ordre d'approximation r souhaité, la question est de trouver des bons coefficients β_{ij} et γ_j qui satisfont cet ordre d'approximation r . Afin de réduire le coût des calculs, il faut aussi que M soit le plus petit possible. Les questions tournant autour de la recherche des coefficients β_{ij} et γ_j donnant un certain ordre r et avec le plus petit degré possible M est une question difficile et nous nous contenterons de considérer le tableau suivant qui donne un schéma d'ordre $r = 4$, que nous appellerons RKF4, pour lequel $M = 6$.

0					
$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{4}$				
$\frac{3}{8}$	$\frac{3}{32}$	$\frac{9}{32}$			
$\frac{12}{13}$	$\frac{1932}{2197}$	$-\frac{7200}{2197}$	$\frac{7296}{2197}$		
1	$\frac{439}{216}$	-8	$\frac{3680}{513}$	$-\frac{845}{4104}$	
$\frac{1}{2}$	$-\frac{8}{27}$	2	$-\frac{3544}{2565}$	$\frac{1859}{4104}$	$-\frac{11}{40}$
γ_i	$\frac{16}{135}$	0	$\frac{6656}{12825}$	$\frac{28561}{56430}$	$-\frac{9}{50}$
				$\frac{2}{55}$	

1. Implémenter un schéma **RKF4Butcher** qui, partant de l'approximation Y_n à un certain instant t_n , renvoie l'approximation Y_{n+1} à l'instant $t_n + \tau$ avec la méthode Runge-Kutta d'ordre 4.
2. Appliquer ce schéma pour les données en question (d) et (e) de la section 2 pour obtenir la trajectoire de 0 à T et prédire le comportement de système.
3. Tracer l'évolution temporelle des concentrations (x et y) et la trajectoire obtenues.
4. Exposer le schéma RK4 classique vu dans le cours pour le système (2), implémenter **RK4** et tracer l'évolution temporelle des concentrations (x et y) et la trajectoire obtenues. Commenter les résultats.

4 Méthode RK45 et pas de temps adaptatif

En utilisant deux méthodes de Runge-Kutta d'ordre différents, il est possible de calculer la différence des solutions pour estimer l'erreur d'approximation à chaque pas de temps τ . Il est possible de garantir que l'erreur ne dépasse pas un certain seuil $\varepsilon_{\max} > 0$ en adaptant le pas de temps τ au problème étudié.

Pour mettre en œuvre cette stratégie, nous considérerons deux méthodes de Runge-Kutta construits de sorte à ne différer que dans la valeur des coefficients γ_i : la méthode RKF4 d'ordre 4 présentée dans le début de la section 3 et un schéma d'ordre 5 dont les coefficients $\bar{\gamma}_i$ sont définis dans la dernière ligne du tableau de Butcher étendu :

0						
$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{4}$					
$\frac{3}{8}$	$\frac{3}{32}$	$\frac{9}{32}$				
$\frac{12}{13}$	$\frac{1932}{2197}$	$-\frac{7200}{2197}$	$\frac{7296}{2197}$			
1	$\frac{439}{216}$	-8	$\frac{3680}{513}$	$-\frac{845}{4104}$		
$\frac{1}{2}$	$-\frac{8}{27}$	2	$-\frac{3544}{2565}$	$\frac{1859}{4104}$	$-\frac{11}{40}$	
γ_i	$\frac{16}{135}$	0	$\frac{6656}{12825}$	$\frac{28561}{56430}$	$-\frac{9}{50}$	$\frac{2}{55}$
$\bar{\gamma}_i$	$\frac{25}{216}$	0	$\frac{1408}{2565}$	$\frac{2197}{4104}$	$-\frac{1}{5}$	0

En notant $\delta_i = \gamma_i - \bar{\gamma}_i$, l'estimation de l'erreur d'approximation entre deux points consécutifs t_n et $t_n + \tau$ s'écrit ainsi

$$E(t_n + \tau) = \tilde{Y}_{n+1} - \bar{Y}_{n+1} = \tau \sum_{i=1}^M (\gamma_i - \bar{\gamma}_i) K^i = \tau \sum_{i=1}^M \delta_i K^i.$$

Posons $\varepsilon(t_n + \tau) := \|E(t_n + \tau)\|_\infty$, l'algorithme adaptatif fonctionne comme suit. Supposons que l'on ait calculé la solution à l'instant $t = t_n$. On cherche de façon itérative :

- i. le pas de temps τ_{next} qui garantisse que $\varepsilon(t_n + \tau_{\text{next}}) < \varepsilon_{\text{max}}$. Ce pas de temps définit l'instant suivant $t_{n+1} = t_n + \tau_{\text{next}}$ où la solution \tilde{Y}_{n+1} est calculée avec RKF4.
- ii. le pas de temps τ_{init} qui sera utilisé à l'instant suivant pour initialiser l'algorithme d'actualisation des pas de temps. Cet algorithme se décrit ainsi :
 - Pour $k = 0$, on fixe τ_0 à la valeur τ_{init} trouvée à l'instant précédent.
 - Pour $k \geq 0$, on définit un nouveau pas de temps suivant la règle

$$\tau_{k+1} = \tau_k \times \begin{cases} 0.1, & \text{si } e < 0.1 \\ 5, & \text{si } e > 5, \\ e, & \text{sinon} \end{cases} \quad \text{avec } e = 0.9 \left(\frac{\varepsilon_{\text{max}}}{\varepsilon(t_n + \tau_k)} \right)^{1/5}$$

Si $\varepsilon(t_n + \tau_k) > \varepsilon_{\text{max}}$, on passe à l'itération suivante.

Si $\varepsilon(t_n + \tau_k) \leq \varepsilon_{\text{max}}$, alors on arrête les itérations et on pose $\tau_{\text{next}} = \tau_k$, $\tau_{\text{init}} = \tau_{k+1}$. On calcule alors la solution à $t_{n+1} = t_n + \tau_{\text{next}}$, et on passe au temps suivant. Pour traiter ce nouvel instant, on utilisera la valeur de τ_{init} obtenue pour initialiser l'algorithme d'actualisation du pas de temps.

1. Implémenter le schéma de Runge-Kutta adaptatif **stepRK45** qui, partant de l'approximation Y_n à un certain instant $t = t_n$ et d'une valeur τ_{init} pour actualiser le pas de temps, renvoie la solution approchée Y_{n+1} avec RKF4 pour la nouvelle valeur $t_{n+1} = t_n + \tau_{\text{next}}$ et qui calcule τ_{init} pour l'instant suivant en fixant $\varepsilon_{\text{max}} = 10^{-4}$.
2. Appliquer ce schéma pour les données en question (d) et (e) de la section 2 pour obtenir la trajectoire de 0 à T et prédire le comportement de système.
3. Tracer l'évolution temporelle des concentrations (x, y) et la trajectoire obtenues.
4. Tracer la variation de la valeur des pas de temps en fonction du temps.