

---

# AMS X02 : Méthodes numériques avancées et calcul haute performance pour la simulation de phénomènes complexes

---

---

## Encadrants :

- Marc Massot
- Laurent Series



# Méthodes Radau5 et Rock4, Splitting et ondes

Hugo Negrel

Janvier 2023

## Table des matières

<b>1</b>	<b>Introduction</b>	<b>3</b>
<b>2</b>	<b>Le modèle de l'Oregonator</b>	<b>3</b>
<b>3</b>	<b>Résolution de l'équation de la chaleur</b>	<b>7</b>
<b>4</b>	<b>L'équation de Nagumo</b>	<b>10</b>

# 1 Introduction

Ce second TP du cours AMS X02 concerne l'implémentation et l'analyse de méthode numérique avancées sur la résolution d'équations différentielles. Le rapport sera principalement divisé en trois parties distinctes. En premier lieu, on s'intéressera au modèle de l'Oregonator, modèle de réaction chimique. Ensuite, nous aurons intérêt à la résolution de la célèbre équation de la chaleur. Enfin, nous appliquerons la technique de séparation d'opérateur au modèle de diffusion de Nagumo.

## 2 Le modèle de l'Oregonator

Le modèle de l'Oregonator est un modèle de réaction chimique auto-catalytique. L'état du système fait intervenir 3 variables  $y_1, y_2$  et  $y_3$ . L'évolution temporelle est décrit par le modèle suivant :

$$(1) \quad \begin{cases} d_t y_1 = y_2 - y_1 \\ \epsilon d_t y_2 = q y_3 - y_3 y_2 + y_2(1 - y_2) \\ \mu d_t y_3 = -q y_3 - y_3 y_2 + f y_1 \end{cases}$$

On prendra  $f = 1$ ,  $\mu = 10^{-5}$ ,  $\epsilon = 0.01$  et  $q = 2.10^{-4}$ . On peut en particulier montrer tout d'abord la solution dite quasi-exacte en figure 1 :

On peut constater en premier lieu le caractère périodique de chacune des variables ainsi que le comportement raide. On le constate immédiatement sur la forte pente, quasi-horizontale, des courbes en  $t \approx 7$ . Cela nous fait tout de suite pensé que des méthodes purement explicite risquent de ne pas être très efficace de prime abord, car de nature trop sensible à de telles sursauts.

Comme attendu, on constate sur la figure 2 que la partie réelle des valeurs propres deviennent très négatives au niveau des sursauts, témoignant d'une très forte relaxation vers la variété centrale. En ces intervalles de sursaut, qui sont clés pour la dynamique de la réaction, il est alors important de mettre en place une méthode numérique solide.

Cependant, la partie imaginaire n'est pas vraiment importante pour qualifier la raideur d'un système, on peut cependant constater qu'elle varie beaucoup moins que la partie réelle. Cette variation prend cependant place au même moment.

Une méthode explicite peut en réalité être employé au prix d'un pas de temps excessivement petit, ou encore de manière équivalente pour un nombre d'appel de fonction très important. Pour tester cela, la méthode DOPRI5. Cette méthode numérique correspond en particulier à un mélange de méthode de Runge-Kutta explicite d'ordre 4 et d'ordre 5. L'ordre 5 servant à utiliser un pas de temps adaptatif. Rappelons que pour une méthode explicite, on a stabilité si et seulement si  $|\lambda|\Delta t < 2$ . On constate que  $\frac{2}{|\lambda|}$  devient petit sur des régions limitées, lorsque les valeurs propres deviennent excessives. Ce sont donc bien les zones raides qui coûtent très cher en temps de calcul. Le résultat obtenu est très similaire à celui en figure 1, je ne le montre donc pas. Cependant, en figure 3, j'expose le nombre d'appel de la fonction d'évolution durant la simulation, les étapes de temps rejetés ainsi que les erreurs  $l^2$ . On voit que comme prévu, il y a un nombre très important d'appel de fonction, ce qui laisse présager un nombre de pas très important. C'est par ailleurs confirmé par les lignes d'en dessous, étant donné que l'on a  $132953 + 57 = 133010$  pas de temps. Les pas rejeté doivent en majoritairement intervenir au début des sursauts des valeurs propres, lorsque la dynamique devient raide, et à la fin, lorsque la dynamique "s'adoucit".

En conclusion, la méthode DOPRI5, bien que fonctionnelle, est bien trop gourmande en ressource. Et ce même si par définition d'une méthode explicite, il n'y a pas de système linéaire à résoudre. On peut rapidement noter que l'erreur  $l^2$  de  $y_3$  est la plus importante, ce qui est sans doute du au fait que la dynamique de  $y_3$  est raide sur une période plus longue. Le fait que l'erreur sur  $y_1$  est bien plus faible que celle de  $y_2$  et  $y_3$  vient probablement du fait que ces deux systèmes sont bien plus raides à cause des coefficients  $\mu$  et  $\epsilon$ .

Ensuite vient la proposition d'utiliser une méthode implicite, la méthode RADAU5, qui est à la base une méthode de Runge-kutta implicite. Cette méthode est fourni avec un estimateur d'erreur et un calcul de pas de temps adaptatif. Tout aussi important, cette méthode est dite "stiffly accurate" signifiant que l'on a la  $\mathcal{L}$ -stabilité en plus de la  $\mathcal{A}$ -stabilité. On se donne un tolérance  $Tol$  d'erreur locale. On introduit la quantité  $q = 0.9\Delta t^{\frac{1}{p+1}}\sqrt{\frac{Tol}{\|\hat{y}_1 - y_1\|}}$ . Si  $\|\hat{y}_1 - y_1\| \leq Tol$ , on prendra  $\Delta t_{n+1} = q$ . Dans le cas contraire, on réitère la n-ième étape avec  $\Delta t_n = q$ . Le résultat de ce schéma numérique est montré sur la figure 3.

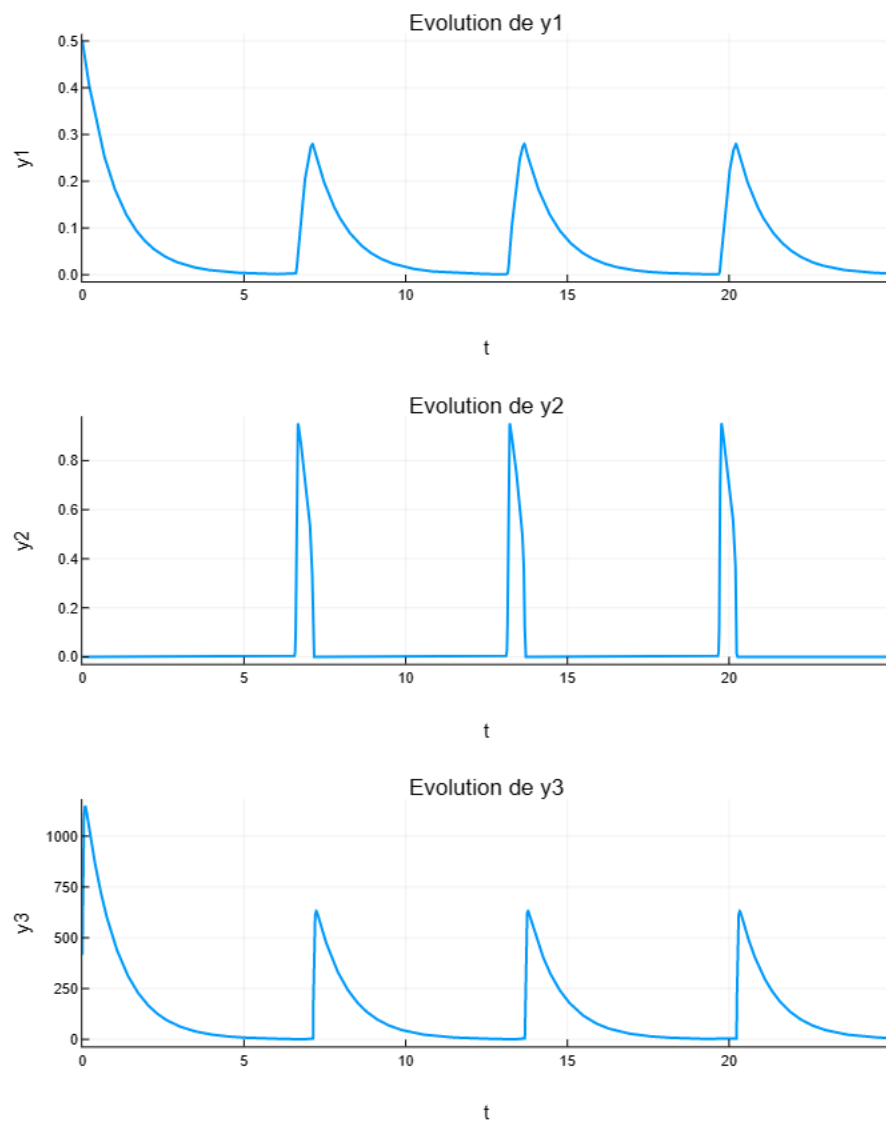


FIGURE 1 – Solution quasi-exacte du modèle de l'Oregonator

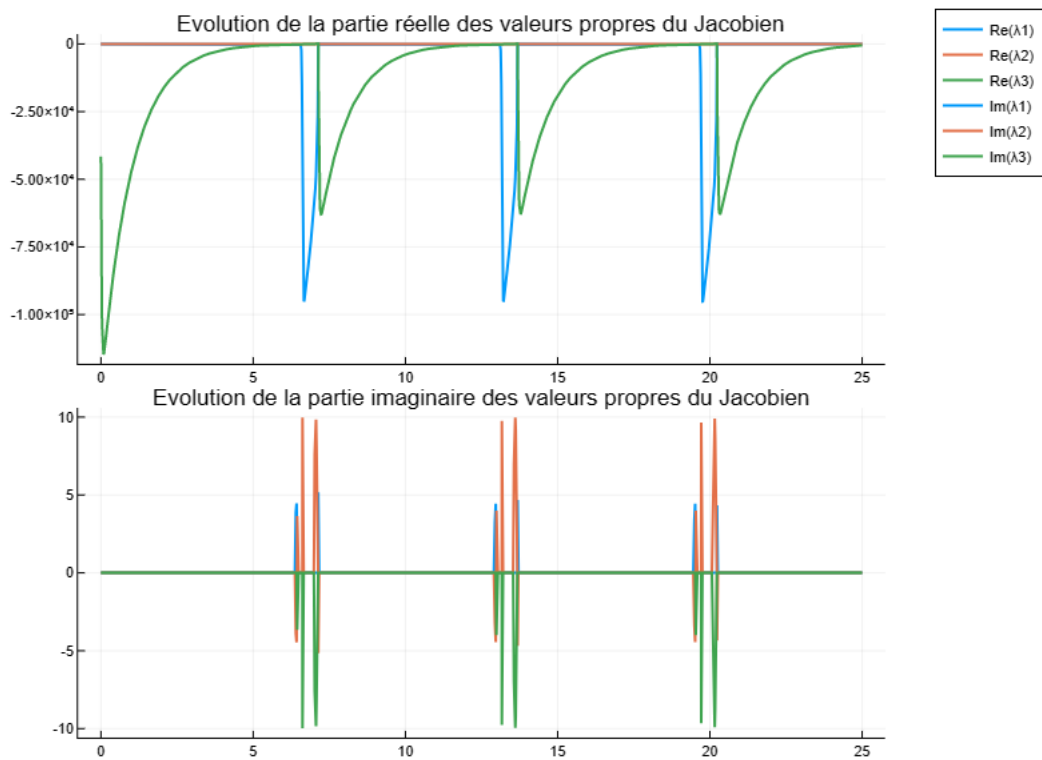


FIGURE 2 –

```

Number of function evaluations : 798063
Number of linear solves      : 0
Number of accepted steps    : 132953
Number of rejected steps    : 57

```

```

Norm 12 of error for y1 : 1.4985603067685037e-5
Norm 12 of error for y2 : 0.00022637884776498013
Norm 12 of error for y3 : 0.19372179573192874

```

FIGURE 3 –

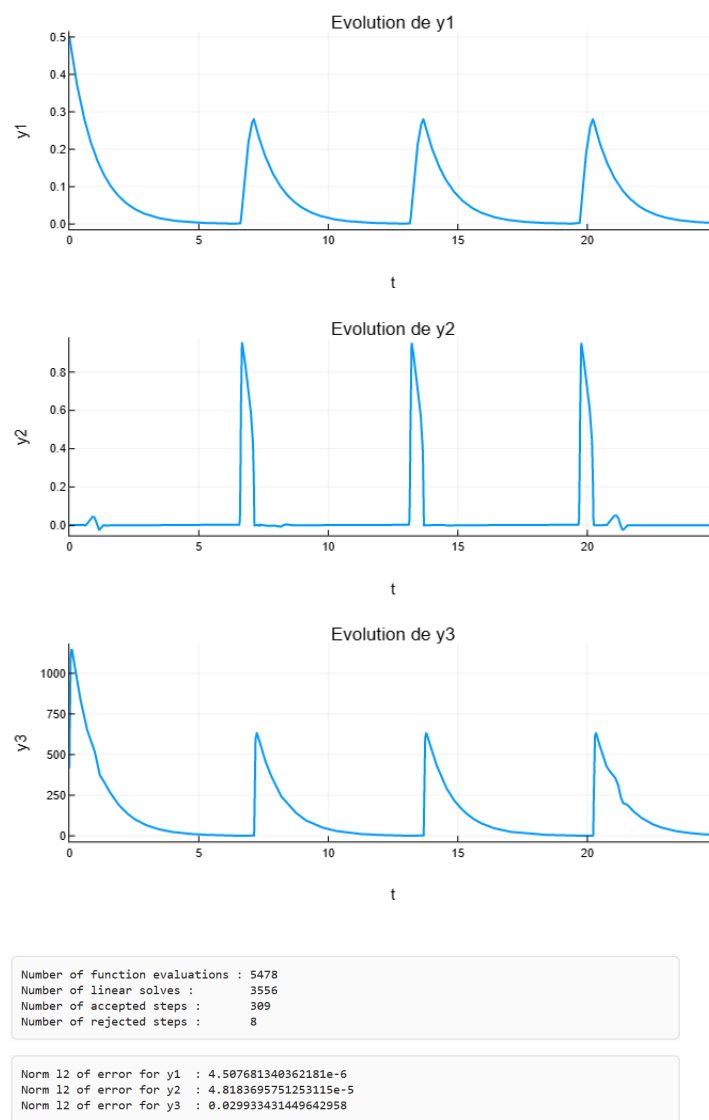


FIGURE 4 – Solution calculée avec le schéma numérique RADAU 5

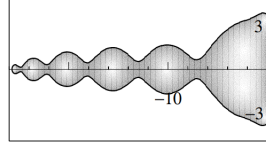


FIGURE 5 – visuel du domaine  $\mathcal{D}$  de la méthode ROCK4

On observe de légères différences comparées à la figure 1, des petites oscillations. On le voit en particulier en début et fin de graphe sur  $y_2$ . On observe un nombre d'appel de fonction bien moins élevé, ce qui vient conforter le fait que le pas de temps devient plus important. On le confirme en remarquant qu'il y a eu 317 pas utilisés. On reconnaît un système implicite de par le nombre de système linéaire résolu. Ces méthodes sont plus adaptées car sont toujours **A**-stable, ce qui rend le schéma robuste pour la raideur. Cela explique que l'on ait pas eu besoin de beaucoup moins d'itérations pour la simulation. La dynamique raide fait penser au modèle d'explosion du TP1. Une méthode implicite RADAU 5 avait aussi été utilisée et s'était aussi avérée efficace pour suivre la raideur. Quant à l'erreur sur  $y_2$ , on la trouve significativement améliorée comparée à DOPRI5. Tout comme pour DOPRI5, c'est  $y_3$  qui possède l'erreur  $l^2$  la plus importante. En effet, c'est cette courbe qui a le sursaut le plus verticale, et donc la dynamique la plus rapide.

Vient finalement la méthode ROCK4, qui est une méthode non pas  $\mathcal{A}$ -stable, mais dont la zone de stabilité a la forme similaire à celle présentée sur la figure 5.

Il s'agit bien d'une méthode explicite, mais le domaine de stabilité  $\mathcal{D}$  n'est pas un simple cercle de centre -1 et de rayon 1. Cela provient du fait que la fonction de stabilité est construite avec les polynômes de Tchebychev. Cette méthode peut d'une part faire gagner du temps de calcul de par son caractère explicite, mais aussi peut être adaptée pour simuler la dynamique raide. En effet, les valeurs propres réelles négatives du jacobien seront toujours dans le domaine de stabilité absolue. Cela n'est pas forcément vraie pour la partie imaginaire. La partie imaginaire peut cependant à tout instant rester dans  $\mathcal{D}$  puisque la figure 2 nous suggère qu'elle ne prend pas de valeur excessive. Cela justifie en un sens l'application de cette méthode.

On obtient une très bonne approximation de la solution, avec peu d'appel de fonction pour une méthode explicite. On a en effet seulement 48 184 appels, ce qui est bien inférieur au 800 000 appels de la méthode DOPRI5, pourtant aussi explicite. De même pour le nombre de pas de temps, bien moins grand. Cela marche aussi bien car, comme je l'ai dit plus tôt, les valeurs propres du jacobien restent toujours dans le domaine de stabilité absolue, par construction de la fonction de stabilité.

En conclusion pour le modèle de l'Oregonator, un schéma implicite n'est pas forcément nécessaire pour un système raide, si on examine à l'avance les valeurs propres du jacobien, alors une méthode explicite de type ROCK peut très bien convenir.

### 3 Résolution de l'équation de la chaleur

Le problème de Cauchy que l'on considère pour l'équation de la chaleur est le suivant :

$$(2) \quad \begin{cases} \partial_t u - D \partial_{xx} u = 0 & \text{dans } \mathbb{R} \\ u(x, 0) = \delta_0(x) \end{cases}$$

avec  $\delta_0$  la distribution de Dirac. En discrétisant la partie spatiale du système, on tombe sur le système suivant :

$$(3) \quad \begin{cases} \partial_t \vec{U}(t) - D A \vec{U}(t) = 0 & \text{dans } [-5, 5] \\ \vec{U}_i(0) = \delta_{0,i} \end{cases}$$

Les valeurs propres de  $\mathbb{D}$  sont  $\lambda_k = -\frac{4}{(\Delta x)^2} \sin^2\left(\frac{k\pi}{2(n+1)}\right)$ ,  $k = 0, \dots, n-1$ . Précisons tout de suite que les valeurs propres de l'opérateur laplacien sont :  $\hat{\lambda}_k = -\frac{k^2\pi^2}{L^2}$ . On remarque immédiatement que lorsque  $n$  tend vers l'infini, on a  $\lambda_k \rightarrow \hat{\lambda}_k$ , puisque  $\sin(x) \approx x$  pour  $x$  petit et  $n\Delta x = 2L$ . Cela reste bien sûr vraie pour des  $k$  pas trop importants afin de garder  $x$  petit. On voit immédiatement que  $\frac{|\lambda_{n-1}|}{|\lambda_1|} \approx \frac{4/(\Delta x)^2}{-\pi^2/(2L)^2} = \frac{4(2L)^2}{\pi^2(\Delta x)^2} = \frac{n^2}{(\pi/2)^2}$ . Il s'avère que cette quantité se trouve être le conditionnement de la matrice  $A$ , qui représente la sensibilité d'un système linéaire par

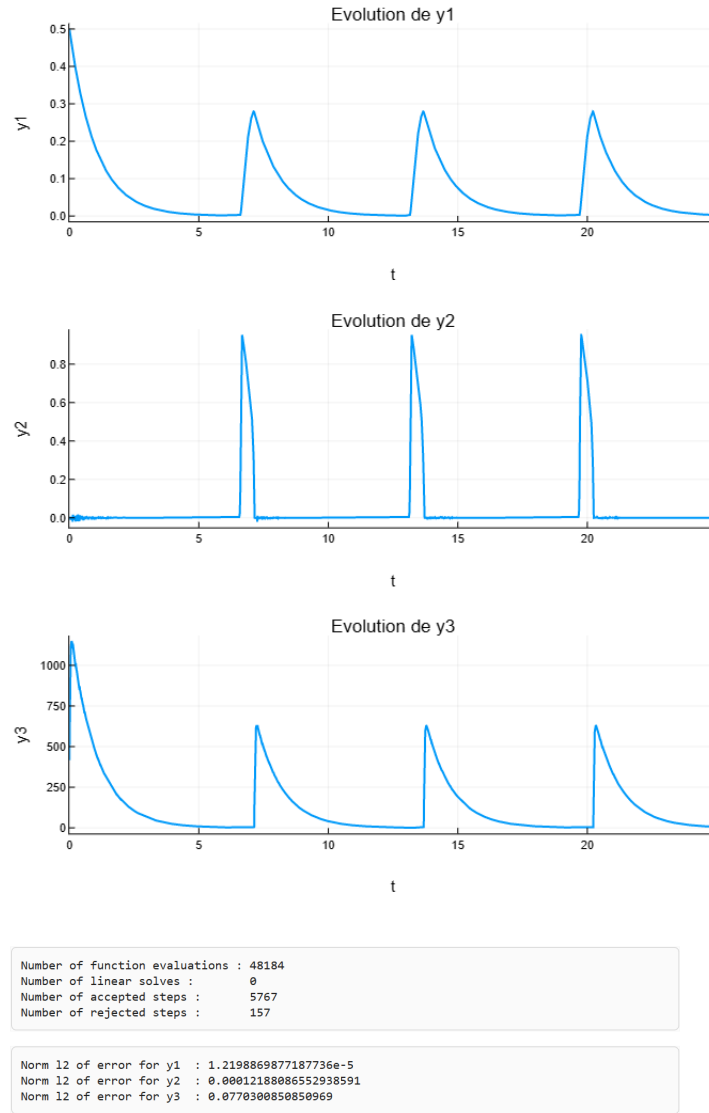


FIGURE 6 – Solution calculée avec le schéma numérique RADAU 5



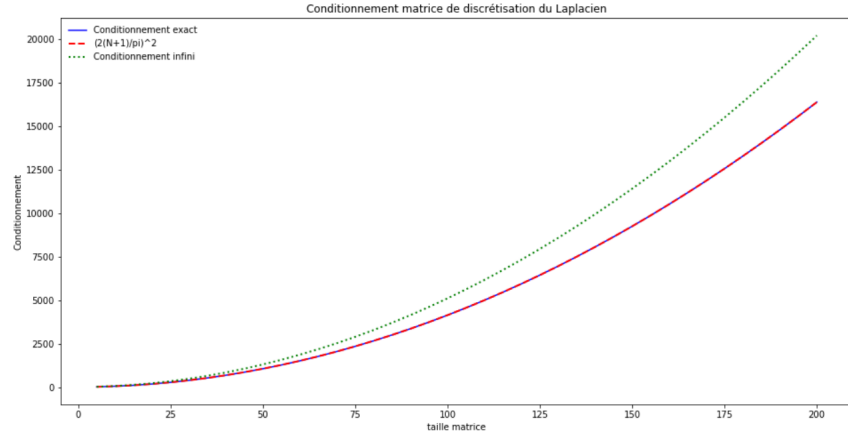


FIGURE 7 – Conditionnement de la matrice en fonction du nombre de points

rapport à ces données. Par ailleurs, cela permet d'en déduire si la machine va pouvoir calculer la solution avec une bonne résolution. Ainsi, plus  $n$  est grand, plus il sera difficile de calculer une solution précise numériquement, ce qui peut sembler paradoxale.

En affichant  $\lambda_k$  et  $\hat{\lambda}_k$ , on obtient la figure 7. On constate par ailleurs immédiatement que les valeurs propres sont toujours réelles négatives.

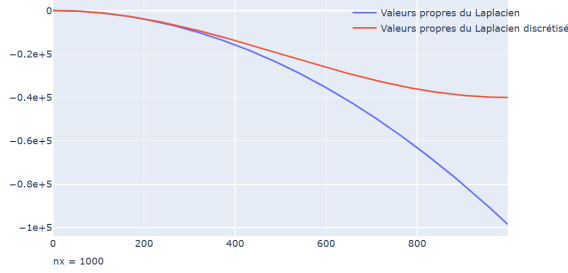


FIGURE 8 – Graphe des valeurs propres pour  $n_x = 1000$

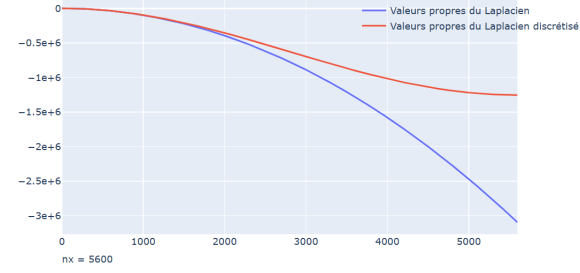


FIGURE 9 – Graphe des valeurs propres pour  $n_x = 5600$

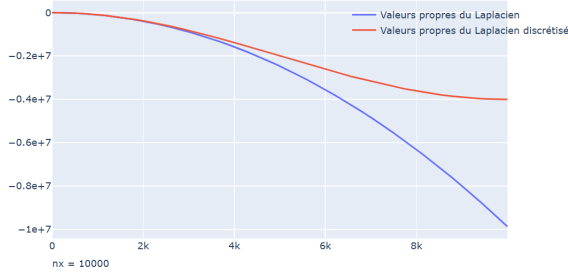


FIGURE 10 – Graphe des valeurs propres pour  $n_x = 10000$

L'abscisse représente  $k$ . On remarque tout de suite que chacune des courbes sont très semblables, les valeurs propres du laplacien discrétisé et continue ne coïncident plus à partir de  $k \approx n_x/3$ . Cependant, cela n'est pas forcément très grave car les composantes dont les valeurs propres sont négatives sont tués d'autant plus rapidement dans la dynamique. Au vu des valeurs prises, on pourrait à priori qualifier le système de raide. Cependant, pour estimer si un système est raide, il faut avant tout juger de l'efficacité des schémas explicites d'après Curtiss et Hirschfelder. Cela est l'objet de la suite de ce rapport. Un test est d'abord réalisé avec la méthode ROCK4, qui est un schéma explicite. On observe que l'erreur sature rapidement, surtout autour de la cloche de la gaussienne. A  $t = 0.101s$  seulement, on voit que  $err_{qe} = \|sol_{R4} - sol_{qe}\|$  est bien moins grande que  $err_e = \|sol_{R4} - sol_e\|$ , auquel cas l'erreur peut atteindre les  $1.5 \cdot 10^{-5}$ . La solution quasi-exacte est une solution calculée par schéma numérique, RADAUIA5, avec une tolérance de  $10^{-12}$ . Le fait que la solution ROCK4 soit bien plus proche de la solution quasi-

exacte provient du fait que les deux schémas ont "subis" le mauvais conditionnement de la matrice, contrairement à la solution exacte, qui ne fait pas intervenir la matrice A. Avec le schéma RADAU5, on a la même constatation, l'erreur avec la solution quasi-exacte (qui ne diffère alors que par la tolérance utilisé) est bien moindre que celle avec la solution exacte. Des valeurs légèrement différentes peuvent amener à des écarts relativement grands. En ce qui concerne l'analyse de l'erreur de discrétisation spatiale, on peut énoncer que la très grande majeure partie de l'erreur est compris dans la cloche de la gaussienne. On peut remarquer que l'erreur semble être maximal lorsque la dérivée seconde l'est. En effet, l'erreur est maximal lorsque l'on se trouve en haut de la cloche, puis redescend subitement, correspondant aux points d'inflexions où la dérivée seconde est nulle. Afin de vérifier cela, je me suis permis de tracer la dérivée seconde de la gaussienne sur la figure 13. Lorsque la dérivée seconde atteint de grandes valeurs, il y a une différence plus conséquente entre l'opérateur laplacien discrétisé et continu lorsque les valeurs propres deviennent importantes. C'est ce phénomène qui ressort ici entre les solutions numériques et exactes. Lorsque l'on passe à des opérateurs Laplacien en dimensions supérieur, on aura plus de matrice, et par conséquent plus d'erreur vis-à-vis de cette dernière. On sait qu'avec un intégrateur explicite de type ROCK4 par exemple, on aura des contraintes sur les valeurs propres du système pour assurer la stabilité du schéma. Par exemple, on doit avoir  $\frac{D\Delta t}{\Delta x^2} < 1/2$  pour le schéma d'Euler explicite à 1 dimension. Par conséquent, on préférera un schéma implicite de type RADAU5 lorsque les contraintes s'accumulent en dimension supérieur.

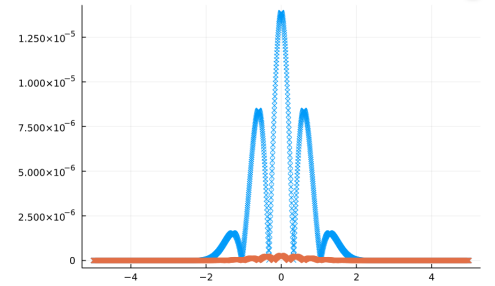
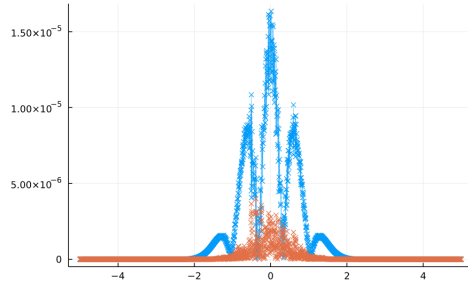


FIGURE 11 – Méthode Rock4 : erreur entre la solution exacte (en bleu) et la solution solution quasi-exacte (en rouge) (en bleu) et la solution solution quasi-exacte (en rouge)

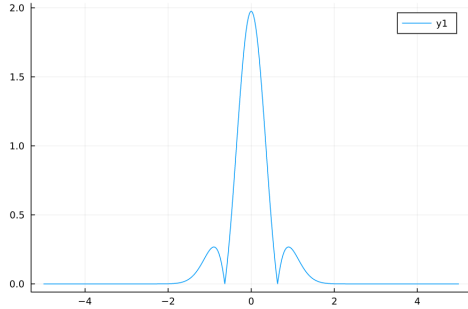


FIGURE 13 – Dérivée seconde de la gaussienne

Avec la méthode DOPRI5, qui est explicite, on trouve un nombre d'appel de fonction bien supérieur à ce que l'on a vu jusqu'à maintenant. On a 28989 appels de fonctions, alors que l'on en avait que 593 avec ROCK4. La zone de stabilité étant bien plus grande pour ROCK4, le pas de temps  $\Delta t$  n'a pas besoin d'être excessivement petit pour être dans la zone de stabilité. Ca n'est manifestement pas le cas de la méthode DOPRI5.

## 4 L'équation de Nagumo

L'équation de Nagumo est une équation aux dérivées partielles prenant la forme suivante :

$$\partial_t y - D\Delta y = ky^2(1 - y)$$

Etonnament pour une équation ayant le même opérateur différentiel que celui de l'équation de la chaleur, cette équation admet des solutions en onde progressive. Ce qui est intéressant dans cette équation, c'est que la dynamique est régit par deux phénomènes : l'opérateur de diffusion  $\Delta$  et l'opérateur de réaction  $ku^2(1 - u)$ . Au vu de la courbe,

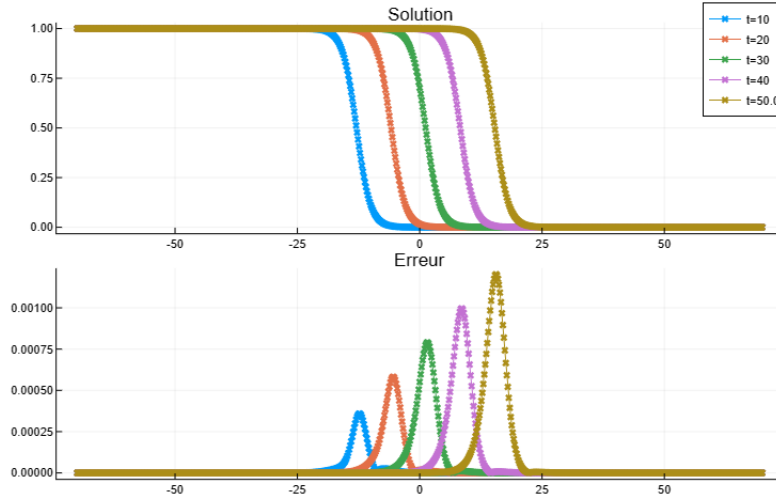


FIGURE 14 – Haut : Solution quasi-exacte pour différents pas de temps. Bas : erreur avec la solution analytique

on constate que l'erreur au sommet augmente linéairement avec le temps écoulé. Par ailleurs, comme on peut s'y attendre, le gros de l'erreur est commis dans le front se propageant, car s'est là que la raideur du système différentiel va rentrer en jeu. Comme on l'a vu avec l'exemple de l'équation de la chaleur, il est plus pertinent de comparer une solution numérique avec une autre solution numérique qu'avec la solution analytique. Le fait que l'opérateur de diffusion apparaissent une fois de plus nous incite à faire de même ici.

La technique de Strang permet de découpler les deux dynamiques en les faisant agir un à la fois. Cette technique a l'avantage d'être plus simple à mettre en oeuvre si on connaît l'opérateur d'évolution pour chacune des dynamiques. D'après le cours, avec les opérateurs de Strang, on fait une erreur en  $\mathcal{O}(\Delta t^3)$ .