

---

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

---

---

## Encadrants :

- Marc Massot
- Laurent Series



# Méthodes d'Euler explicite et implicite et méthodes de Runge-Kutta

Hugo Negrel

Décembre 2022

## Table des matières

<b>1</b>	<b>Introduction</b>	<b>3</b>
<b>2</b>	<b>Modèle de Curtis et Hirschfelder</b>	<b>3</b>
2.1	Méthodes d'Euler explicite . . . . .	3
2.2	Methode d'Euler implicite . . . . .	6
<b>3</b>	<b>Le modèle du Brusselator</b>	<b>7</b>
<b>4</b>	<b>Conclusion</b>	<b>11</b>

# 1 Introduction

Ce premier TP du cours AMS X02 concerne l'implémentation et l'analyse des méthodes numériques de résolution d'équations différentielles. Le rapport sera principalement divisé en deux parties distinctes. On analysera en premier lieu l'équation différentielle de Curtis et Hirschfelder, caractérisée par une raideur variable via un paramètre  $\lambda$ . Ensuite viendra l'analyse du modèle du Brusselator, système de deux équations différentiels couplés.

## 2 Modèle de Curtis et Hirschfelder

Le modèle de Curtis et Hirschfelder est décrit par le problème de Cauchy suivant :

$$(1) \quad \begin{cases} \frac{dy(t)}{dt} = \lambda(-y(t) + \cos(t)) & \text{avec } \lambda > 1 \\ y(t=0) = y_0 \in \mathbb{R} \end{cases}$$

Commençons par dire que la fonction  $f(t, y) = -\lambda y + \lambda \cos(t)$  est  $\mathcal{C}^\infty$  en chacune de ses variables. On a par conséquent la garantie que  $f$  est globalement  $L$ -lipschitzienne en  $y$ . D'après le théorème de Cauchy-Lipschitz, on sait alors qu'il existe une unique solution maximale. Le problème est donc bien posé au sens de Hadamard.

La particularité de ce système est que l'on contrôle la valeur propre de la jacobienne. Il est très facile de voir que la valeur propre de la jacobienne est unique et est  $-\lambda$  ( $\lambda$  est noté  $k$  dans le TP). Elle est de plus indépendante du temps. Ainsi, plus on prend  $\lambda$  grand, plus on aura un système raide, puisque immédiatement  $|\lambda| \gg 1$ .

### 2.1 Méthodes d'Euler explicite

On va se concentrer dans un premier temps sur la méthode d'Euler explicite, à pas de temps constant. Comme on le voit dans le cours, cette méthode a l'avantage d'être toujours stable aux perturbations, les arrondis et erreurs de calculs numériques ne vont donc pas être amplifiés, garantissant que la solution numérique restera dans un voisinage de la solution exacte, et ce quelle que soit la valeur de  $\lambda$ . En revanche, la  $\mathcal{A}$ -stabilité est très contrainte dans ce cas. Une méthode explicite n'est par construction jamais  $\mathcal{A}$ -stable, ce qui signifie que si on prend  $\lambda$  ou  $\Delta t$  trop grand, le schéma numérique n'est plus garanti de suivre correctement la solution exacte. Une quantité importante à observer dans ce cas est le produit  $\lambda \Delta t$ , qui lorsque devient trop grand est responsable de l'instabilité du schéma. Le schéma d'Euler explicite nous montre que l'on peut introduire une fonction  $r$  définie de cette façon :

$$y_{n+1} = r(-\lambda \Delta t) y_n$$

où  $r(x) = 1 + x$ , en omettant ici le terme non homogène, non impacté par le schéma de discrétisation choisis. Pour que  $|r(-\lambda \Delta t)|$  soit inférieur à 1, il faut que  $-\lambda \Delta t$  se situe sur le disque complexe centré en -1 et de rayon 1. C'est réalisé en pratique lorsque  $\Delta t < \frac{2}{\lambda}$ . Nous pouvons observer cela sur les figures 1,2,3 et 4.

La figure 1 montre la résolution numérique pour un pas  $\Delta t$  tels que l'on soit bien dans la zone de convergence. Hormis sur la couche limite, où la dynamique est rapide, l'erreur est très bien contrôlée. Lorsqu'on est légèrement au dessus de 1, l'erreur augmente et la résolution de la couche limite devient grossière, ce qui est logique puisque le pas de temps est trop grand par rapport au temps caractéristique d'évolution du système  $\tau = \frac{1}{\lambda}$ . La solution reste cependant stable sur la variété centrale (ou d'évolution 'lente') du système. En revanche, quand on s'approche de 2, comme prévu plus tôt, le système sort de la zone de stabilité, il y a amplification de la solution numérique. Bien sûr, pour  $\Delta t \lambda = 2$ , on se trouve pile à la frontière entre le domaine stable et instable : les oscillations restent d'amplitudes constantes. Ce genre de comportement peut faire penser à une bifurcation de Hopf en temps discret, mais il faudrait prouver l'existence d'un cycle limite, et non pas qu'il y ait une simple divergence, sinon c'est simplement un foyer stable qui devient instable.

Lorsque la donnée initiale est proche de la variété centrale, la 'bavure' que l'on voit sur la figure 2 lorsqu'on dépasse le seuil  $\Delta t \lambda = 1$  n'apparaît plus aussi clairement, car la pente est alors plus petite que  $\Delta t \lambda$ . En effet, la pente à l'origine prendra approximativement la valeur  $\frac{y_{in}-1}{1/\lambda}$  et sera plus faible au fur et à mesure que l'on rapproche  $y_{in}$  de l'origine. J'ai illustré en figure 5 et 6 l'écart entre solution exacte et solution approchée selon la valeur de la condition initiale (C.I.).

Cela se constate immédiatement sur les estimations d'erreurs, allant de 0.006 environ pour le premier cas à 0.12 dans le second cas. La taille de la couche limite i.e la distance à la variété centrale, a donc une répercussion directe sur la précision, à  $\lambda \Delta t$  fixé.

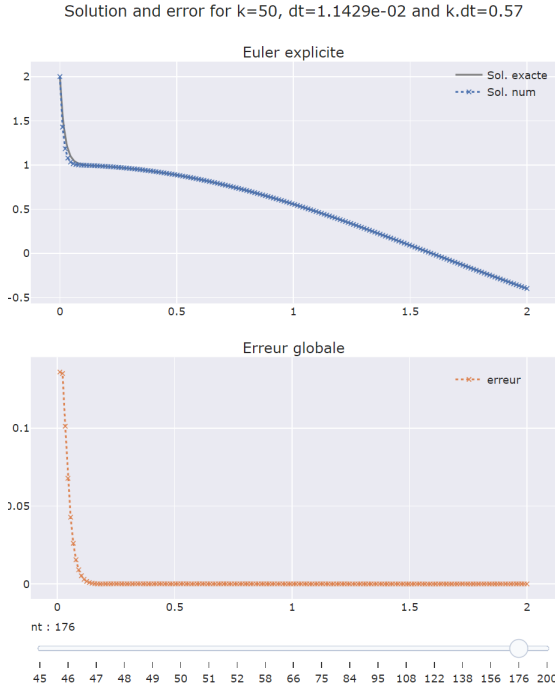


FIGURE 1 –  $\lambda\Delta t < 1$

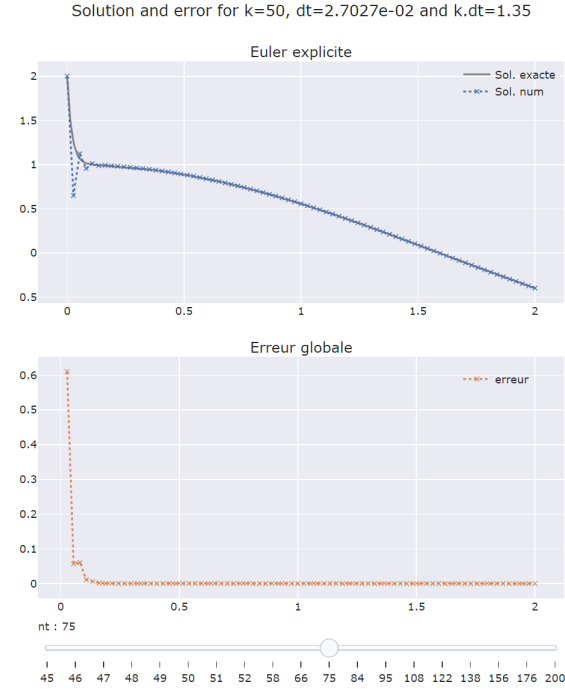


FIGURE 2 –  $\lambda\Delta t > 1$

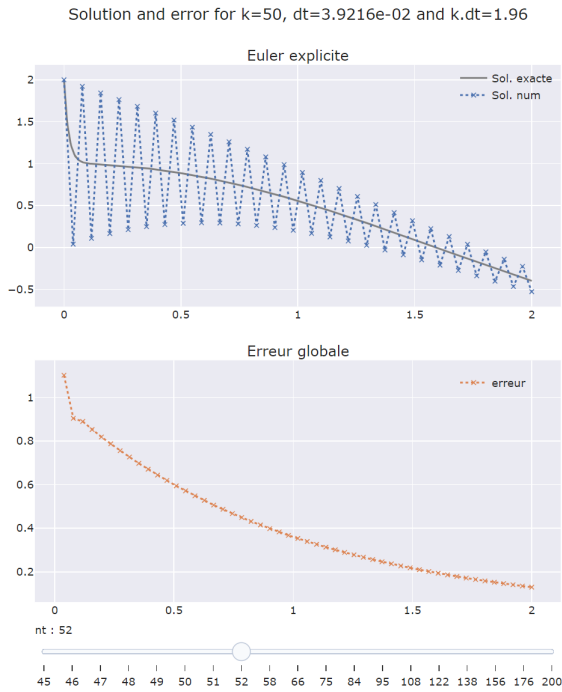


FIGURE 3 –  $\lambda\Delta t < 2$

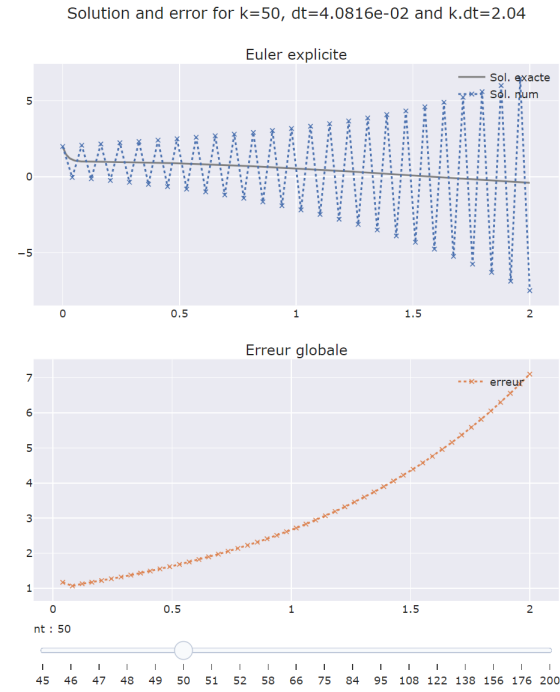


FIGURE 4 –  $\lambda\Delta t > 2$

Bien que le schéma d'Euler explicite soit inconditionnellement stable aux perturbations c'est-à-dire aux potentiels erreurs d'arrondis, il n'est absolument stable que dans une petite région du plan complexe, le cercle de rayon 1 et de centre -1. Cela le rend particulièrement sensible à la raideur du système, et donc  $\lambda$  dans le cas du modèle-jouet de Curtis-Hirschfelder. Comme je l'ai déjà dit, la valeur propre est indépendante du temps et donc de la dynamique, ce qui facilite grandement les choses. En revanche, partir près de la variété centrale ne résout en rien le problème de stabilité absolue du schéma numérique, il ne dépend pas de la présence de couche limite en soi puisque il est possible

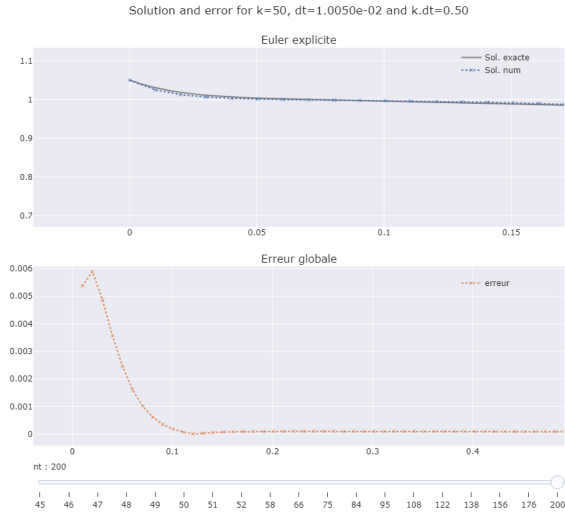


FIGURE 5 – C.I  $y_0 = 1.05$

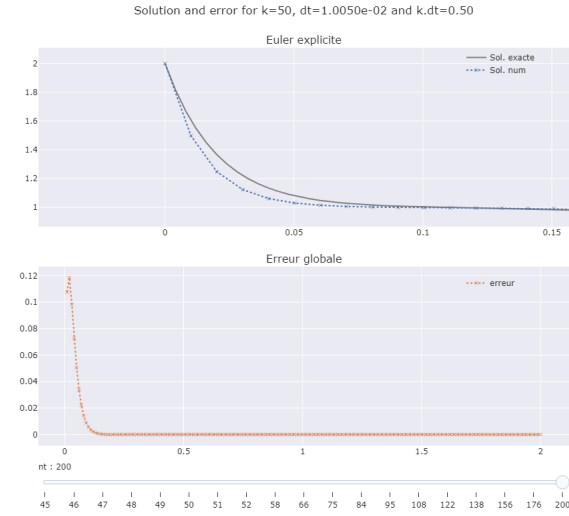


FIGURE 6 – C.I  $y_0 = 2$

d'avoir des valeurs propres très négatives en dehors. On le voit bien sur l'exemple de l'explosion thermique ou même encore sur ce modèle ( $-\lambda = cst$ ). Cela présage que pour des problèmes complexes, il est urgent d'avoir connaissance en tout temps pendant l'évolution du système des valeurs propres (au moins la partie réelle) du systèmes et d'en adapter le pas de temps en conséquence. Le temps de calcul peut par conséquent rapidement exploser avec cette méthode, d'autant plus pour des dynamiques très rapides.

## 2.2 Methode d'Euler implicite

Pour la méthode d'Euler implicite, les avantages et inconvénients sont différents. La stabilité aux perturbations de la méthode implicite est contrainte par la constante de Lipschitz  $L$  de la fonction  $f$ . On doit plus précisément avoir  $L\Delta t < 1$ , auquel cas toute erreur, aussi minime soit-elle, risque d'être amplifiée par le schéma. En revanche, par construction, le schéma d'Euler implicite sera toujours  $\mathcal{A}$ -stable,  $\mathcal{B}$ -stable et  $\mathcal{L}$ -stable. Par conséquent, la valeur propre  $-\lambda$  aura beau être aussi grande en valeur absolue qu'elle veut, le schéma n'en sera pas déstabilisé. Cela vient du fait que la fonction  $r$  prend aussitôt la forme  $r(x) = \frac{1}{1-x}$ . Les figures 7,8,9,10 font preuve de cette stabilité inconditionnelle.

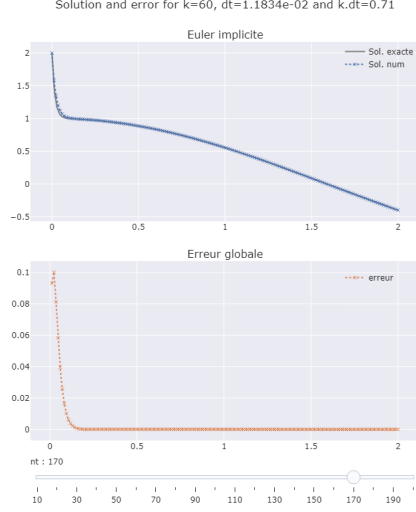


FIGURE 7 –  $\lambda\Delta t < 1$

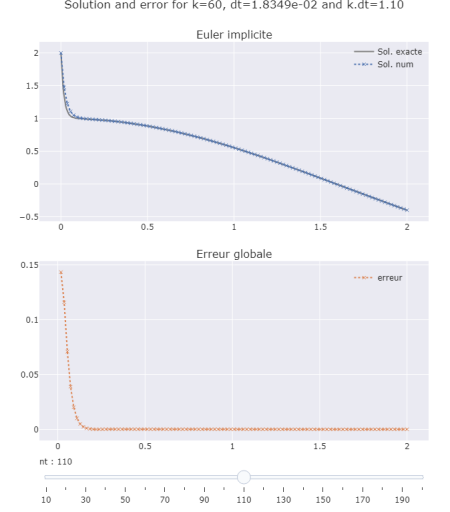


FIGURE 8 –  $2 > \lambda\Delta t > 1$

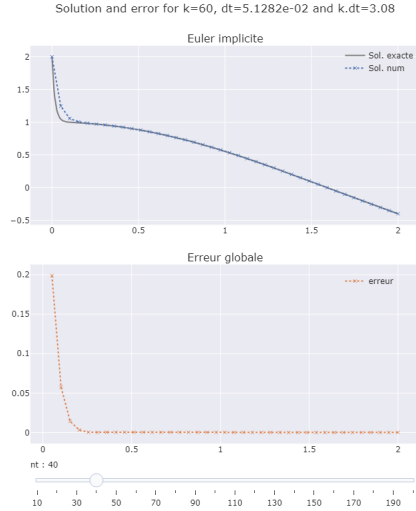


FIGURE 9 –  $2 < \lambda\Delta t$

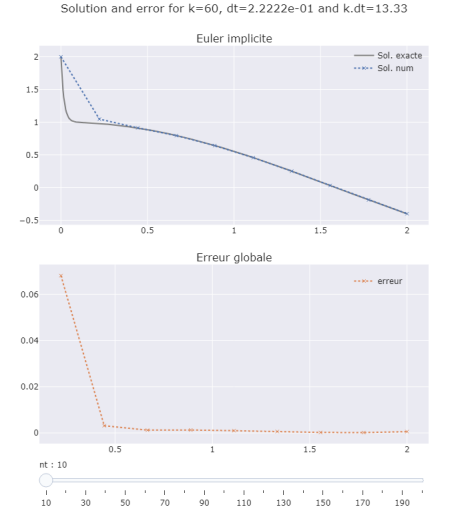


FIGURE 10 –  $10 < \lambda\Delta t$

Ces figures montrent que la solution approchée suit bien la solution exacte, même dans la couche limite, dû au caractère profondément stable du schéma implicite. Il n'y a en effet pas d'oscillation aux temps courts et la solution approchée tombe directement sur la variété d'équilibre. La couche limite risque cependant de passer inaperçue, elle n'est donc pas bien résolue pour des  $\lambda\Delta t$  trop grand. On le constate bien sur la figure 10 : la couche limite est trop rapide comparé au pas de temps. L'erreur en soit n'a même pas pu retranscrire correctement l'écart, puisqu'on tombe à  $\approx 0$  en 2 itérations. Elle apparaît même plus faible que sur la figure 9. Sur la variété d'équilibre cependant, l'erreur semble identique quel que soit le pas de temps choisis. On ne constate pas de différence notable entre la figure 7 et 10 une fois la couche limite en temps dépassé. On a donc tout intérêt à prendre le pas de temps le plus grand possible mais tout en gardant  $L\Delta t < 1$ . Ainsi, si on part d'une condition initiale très proche de la variété

stable, la couche limite n'apparaît quasiment pas et on peut par conséquent prendre un pas de l'ordre de  $1/L$ .

Le cours nous apprend que la méthode explicite est convergente d'ordre 1 à la condition que la fonction  $f$  est bien globalement lipschitzienne, ce qui est le cas comme énoncé en début de rapport. Sous la même condition, et pourvu que  $\Delta t L < 1$ , on a aussi la convergence d'ordre 1 de la méthode d'Euler implicite. Cela est illustré sur les figures 11 et 12. On voit bien que la pente est de 1.

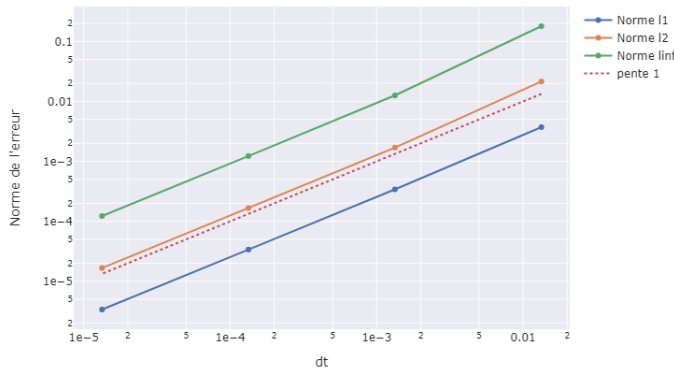


FIGURE 11 – courbe d'erreur pour la méthode explicite

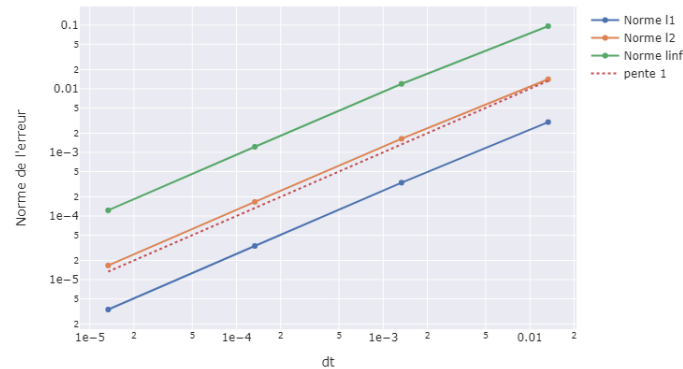


FIGURE 12 – courbe d'erreur pour la méthode impl

Si on rapproche la condition initiale de la variété d'équilibre, quel que soit le schéma, on constate bien une baisse de l'erreur globale, mais la valeur de la pente ne change pas, cela n'affecte en rien les propriétés intrinsèques du schéma numérique. Je n'ai pas représenté ce résultat sur des graphes.

### 3 Le modèle du Brusselator

Le système différentiel est cette fois un système couplé de deux fonctions :

$$(2) \quad \begin{cases} \frac{dy_1(t)}{dt} = 1 + y_1^2(t)y_2 - 4y_1(t) \\ \frac{dy_2(t)}{dt} = -y_1^2(t)y_2(t) + 3y_1(t) \\ y_1(t=0) = 1.5 \\ y_2(t=0) = 3 \end{cases}$$

De la même manière, la fonction  $f : \mathbb{R}^2 \mapsto \mathbb{R}^2$  défini par :

$$f(y_1, y_2) = (1 + y_1^2(t)y_2 - 4y_1(t), -y_1^2(t)y_2(t) + 3y_1(t))$$

est globalement lipschitzienne, ne serait-ce que parce qu'elle est évidemment  $\mathcal{C}^\infty(\mathbb{R}^2)$ .

Pour trouver les valeurs propres du système le long de la dynamique, il faut calculer les valeurs propres  $\lambda(t)$  de la jacobienne  $\frac{\partial f_i}{\partial y_j}$ .

On observe que la valeur propre selon  $y_2$  devient en effet très négative, autour de -35, périodiquement sur un temps assez court. Cependant, cela suffit pour caractériser le système de raide, il est seulement nécessaire qu'une valeur propre soit (très) négative sur un ensemble mesurable. Cependant, comme les valeurs propres ne sont pas constantes comme dans le cas constant, une adaptation du pas de temps peut être utile, en particulier pour le schéma explicite. la méthode d'Euler explicite à un pas est totalement équivalente à la méthode de Runge-Kutta d'ordre 1.

Comme prévu, on constate que l'erreur apparaît là où le système devient raide, le schéma explicite n'ayant pas le temps de réagir. On le constate d'autant plus sur la figure 15, là où les instabilités commencent à se faire sentir. Les régions de fortes pentes ne sont pas bien calculés, du moins le résultat n'est pas aussi clair que dans la figure



FIGURE 13 – Evolution de la partie réelle et imaginaire de la jacobienne

Runke Kutta ordre 1 (Euler explicite): solution and error for  $dt=1.0005e-02$

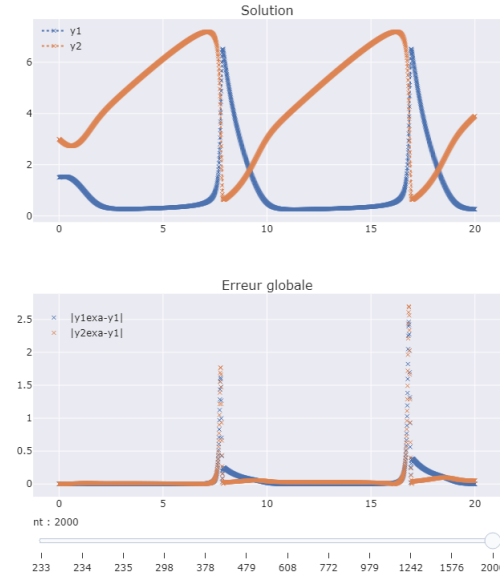


FIGURE 14 – Runge Kutta ordre 1 (petit pas)

Runke Kutta ordre 1 (Euler explicite): solution and error for  $dt=8.5837e-02$

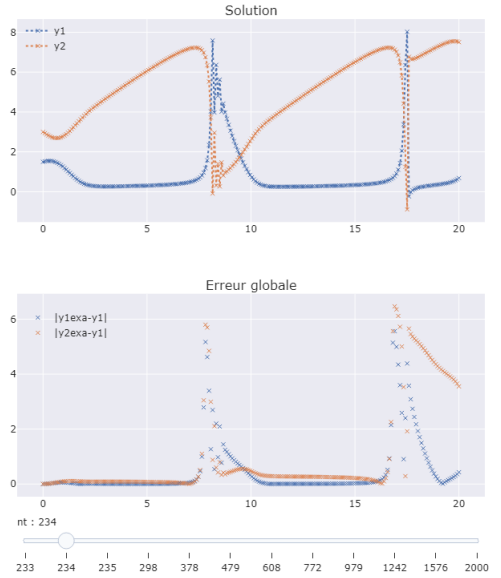


FIGURE 15 – Runge Kutta ordre 1 (grand pas)

14. Comme dans la première partie, on observe alors des oscillations amorties lorsqu'on arrive en dynamique plus lente.

Les méthodes explicites ne sont pas adaptés pour ce genre de système périodique passant périodiquement d'une dynamique lente à rapide. L'inconvénient principal est que les phases rapides seront mal retranscrites par le schéma, il faudrait raffiner le maillage dans cette période de temps. Le phénomène qui limite le pas de temps est l'explosion des valeurs propres lors du croisement de  $y_1$  et  $y_2$ , de telle sorte que l'on ne soit plus dans la région de stabilité du schéma.

Une méthode de Runge-Kutta d'ordre est  $p \in \mathbb{N}$  par définition si :  $|e_n| = |y(t_n) - y_n| = \mathcal{O}(\Delta t^p)$ . La pente de la courbe traduit donc l'ordre de la méthode. C'est bien ce qu'illustre la figure 16, la pente de l'erreur globale se raidit au fur et à mesure que l'ordre de la méthode augmente. L'intérêt d'utiliser des méthodes d'ordre élevé est alors éclatant, à nombre d'évaluation de la fonction constant, l'erreur se trouve  $10^8$  fois plus petit dans l'ordre 4 que l'ordre 1. Il y a donc un gain considérable de précision pour très peu de compromis calculatoire.

Il n'y a pas "une" méthode de runge-kutta d'ordre 4, le tableau de Butcher possède plusieurs variantes. Celle présenté dans le TP est la méthode dite de la règle "3/8". La méthode à pas de temps adapté consiste à adapter le pas de calcul selon la précision demandée. Comme vu plus haut, la méthode de Runge-Kutta sera peu efficace lorsque les valeurs propres du système deviennent trop grandes, il y a apparition d'oscillation amortie. On le voit bien sur les figures 17 et 18, et ce bien que la méthode est d'ordre 4.

Le Notebook propose d'adopter cette adaptation du pas de temps avec une méthode emboîtée pour limiter le



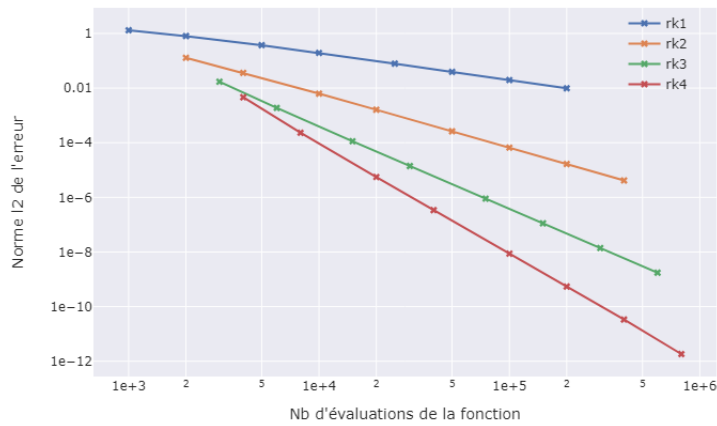


FIGURE 16 – erreur globale en fonction du nombre d'appel

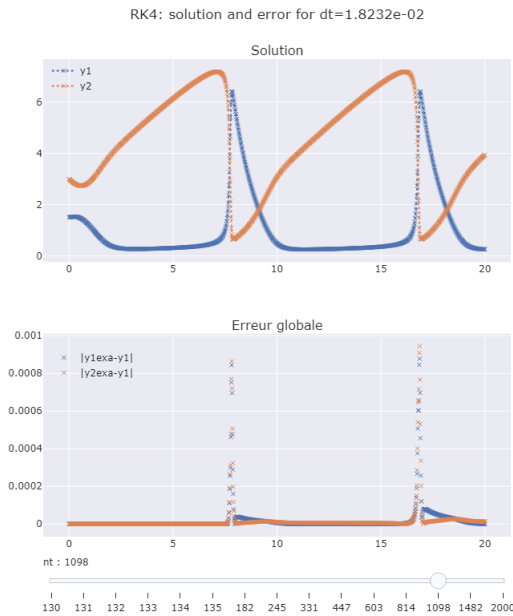


FIGURE 17 – Runge Kutta ordre 4 (petit pas)

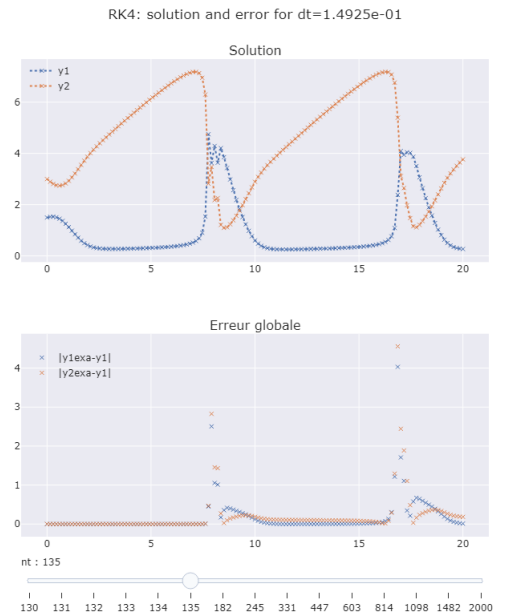


FIGURE 18 – Runge Kutta ordre 4 (grand pas)

nombre d'appel de la fonction  $f$  et de résoudre des points fixes, qui pourrait s'avérer très coûteux. On obtient la figure 19.

Comme prévu, le pas de temps se réduit drastiquement aux points sensibles du schéma numérique. Cependant, même si réduit comparé au pas de temps non adaptatif, l'erreur globale affiche des montées soudaines à ces endroits.

Enfin, il est possible de voir sur la figure 19 l'ordre de la méthode de Runge-Kutta d'ordre "3/8". Il suffit de lire la pente sur le graphe. On trouve que la pente est de -4, prouvant alors que il s'agit bien d'une méthode d'ordre 4. On remarque par ailleurs que la méthode du pas de temps adaptatif ne change pas l'ordre de la méthode. L'erreur globale est translaté verticalement, montrant certe une amélioration mais pas un changement d'ordre.

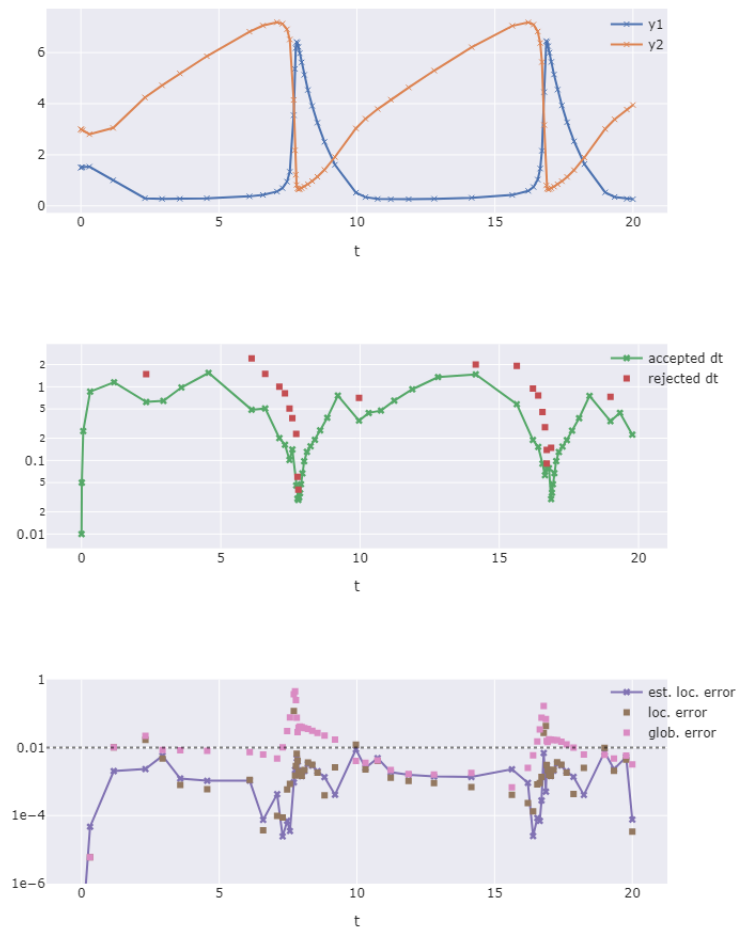


FIGURE 19 – Runge-Kutta "règle 3/8" avec pas de temps adaptatif

## 4 Conclusion

Ce TP fournit des modèles-jouets intéressant pour se faire une idée du comportement des schémas numériques. Ainsi, nous avons pu mettre à jour le caractère instable de la méthode explicite et le caractère stable de la méthode implicite. La position de la variété centrale s'est avéré importante pour la précision de la couche limite. En ce qui concerne la méthode de Runge-Kutta, bien que très intéressante pour ses propriétés de convergences à faible coût, elle reste tout de même sensible à la raideur du système. Cependant, un pas de temps adaptatif peut aider à résoudre ce problème, sans pour autant l'éliminer complètement.