Modélisation/Calculs scientifiques - GME5

Leçon 4

Équations différentielles ordinaires scalaires

G. Vinsard

Gerard.Vinsard@univ-lorraine.fr

12 mai 2015

Objectifs

- Rappeler quelques résultats classiques pratiques sur les équations différentielles ordinaires (EDO) scalaires ;
- Introduire les méthodes d'Euler explicites, implicites et de Cranck=Nicholson ;
- Discuter de leurs précision et stabilité sur des exemples simples ;
- Rappeler la méthode des série pour le calcul de solutions exactes et utiliser cette méthode pour préciser la notion de précision ;
- Décrire l'extrapolation de Richardson pour préparer l'introduction des méthodes de Runge-Kutta.

Équation différentielle ordinaire scalaire

- Une équation différentielle (scalaire) ordinaire est une condition portant sur une fonction $x : \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R}$ de la forme

$$x'(t) = f(t, x(t))$$

où $f : \begin{array}{ccc} \mathbb{R}^2 & \longrightarrow & \mathbb{R} \\ (t, y) & \longrightarrow & f(t, y) \end{array}$ est une fonction donnée.

- Cette équation ne détermine pas une fonction x de façon unique mais plutôt une famille de fonctions qui dépend d'un paramètre.

- Dans la plupart des cas pratiques le paramètre est cherché de manière qu'une condition initiale en un temps t_0

$$x(t_0) = x_0$$

soit satisfaite ; il s'agit alors d'un problème de Cauchy.

- Il y aurait beaucoup à dire sur l'existence et l'unicité des solutions d'équation différentielles ordinaires scalaire, mais ces aspects ne seront discutés qu'au cas à cas dans la suite.

Équation différentielle ordinaire et quadrature

- Dans le cas où f ne dépend pas explicitement de t, soit $f(t, y) = f(y)$, l'équation différentielle s'écrit

$$x'(t) = f(x(t))$$

il est alors intéressant d'abandonner le concept de fonction x pour le remplacer par celui de variable ξ liée à t par une relation du type

$$\frac{d\xi}{dt} = f(\xi)$$

où $d\xi$ et dt sont des variations infinitésimales de ξ et t et où la dérivée est le rapport de ces quantités infinitésimales.

- Ainsi il devient possible d'écrire $\dfrac{dx}{f(x)} = dt$ soit finalement

$$\int_{x_0}^{x(t)} \frac{d\xi}{f(\xi)} = t - t_0$$

qui fournit une relation entre $x(t)$ et t. L'équation différentielle se réduit à une quadrature.

Équation différentielle à variables séparables

- Le cas où f est le produit

$$f(t,x) = g(t)\ h(x)$$

est similaire au cas de la non-dépendance explicite en t ; on écrit

$$\frac{d\xi}{h(\xi)} = g(\tau)\ d\tau$$

d'où

$$\int_{x_0}^{x(t)} \frac{d\xi}{h(\xi)} = \int_{t_0}^{t} g(\tau)\ d\tau$$

- L'équation différentielle de cette forme est dite à variables séparables[1] et elle se résoud par quadrature. La quadrature étant l'intégration ordinaire pour laquelle on dispose de moyens numériques de calculs.

1. L'équation différentielle qui ne dépend pas explicitement de t est un cas particulier d'équation différentielle séparable avec $g(t) = 1$

Équation différentielle linéaire

► si $f(t,x) = a(t)\,x + b(t)$ où $a : \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R}$ et $b : \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R}$ sont deux fonctions de t données, l'équation est dite linéaire.

► Elle se résoud par la méthode de ≪ la variation de la constante ≫ : on cherche déjà une solution de l'équation sans second membre

$$y'(t) = a(t)\; y(t)$$

par séparation de variable c'est

$$y(t) = y_0\; \exp^{\int_{t_0}^{t} a(\tau)\; d\tau}$$

où s'introduit la constante y_0. Et la forme sous laquelle x est cherché est

$$x(t) = y_0(t)\; \exp^{\int_{t_0}^{t} a(\tau)\; d\tau}$$

où la constante y_0 est maintenant considérée comme une fonction de t. En injectant cette forme dans l'équation il vient alors

$$y_0'(t) = b(t)\; \exp^{-\int_{t_0}^{t} a(\tau)\; d\tau} \Longrightarrow y_0(t) = x_0 + \int_{t_0}^{t} b(\alpha)\; \exp^{-\int_{t_0}^{\alpha} a(\tau)\; d\tau}$$

Le cas général : Méthode d'Euler explicite

- Sauf dans des cas particuliers (ceux qui précèdent et quelques autres) on ne sait pas trouver de solutions aux équations différentielles ordinaires ; il est donc nécessaire de disposer de méthodes numériques pour suppléer à cette carence.

- La méthode la plus simple (qui est à la base également un outil théorique pour discuter de l'existence et l'unicité des solutions des EDO) est la méthode d'Euler explicite.

- Le principe est de donner une suite de temps t_0, t_1, $\ldots t_N$ auquels des approximations de la suite de valeurs $x(t_0)$, $x(t_1)$, $\ldots x(t_N)$ sont cherchées en remplaçant $x'(t) = f(t, x(t))$ par

$$\frac{x_{n+1} - x_n}{t_{n+1} - t_n} = f(t_n, x_n) \text{ pour } n = 0, \ldots, N-1$$

Ainsi, x_0 étant la condition initiale, les x_n qui sont les approximations des $x(t_n)$ sont calculés successivement par

$$x_{n+1} = x_n + (t_{n+1} - t_n)\, f(t_n, x_n)$$

Évaluation de la méthode d'Euler explicite

- La méthode d'Euler explicite n'est pas très précise : i.e. la différence entre les x_n et les $x(t_n)$ n'est pas petite (cf. exemple script).

- Elle n'est pas très stable : i.e. le comportement des x_n est très différent de celui des $x(t_n)$ (cf. exemple script).

- La précision sera améliorée par l'utilisation de méthodes numériques de plus grand ordre, les méthodes de Runge-Kutta explicites.

- La stabilité sera améliorée par l'utilisation de méthodes implicites (toujours de Runge-Kutta) dont le prototype est la méthode d'Euler implicite

- La conjonction des demande de précision et stabilité correspond aux méthodes symplectiques dont le prototype est la méthode de Cranck-Nicholson.

Méthode d'Euler implicite

- Le principe est toujours de donner une suite de temps t_0, t_1, $\ldots t_N$ auquels des approximations de la suite de valeurs $x(t_0)$, $x(t_1)$, $\ldots x(t_N)$ sont cherchées mais cette fois en remplaçant $x'(t) = f(t, x(t))$ par

$$\frac{x_{n+1} - x_n}{t_{n+1} - t_n} = f(t_{n+1}, x_{n+1}) \text{ pour } n = 0, \ldots, N-1$$

La suite des x_n est alors déterminée par une équation algébrique implicite, c'est à dire qu'il n'y a pas de formule de la forme

$$x_{n+1} = \text{ expression dépendant de } x_n$$

mais la relation entre x_n et x_{n+1} nécessite la résolution d'une équation.

- L'équation par rapport à la variable x_{n+1} est

$$x_{n+1} = x_n + (t_{n+1} - t_n)\, f(t_{n+1}, x_{n+1})$$

qui doit être étudiée.

Équation induite par l'utilisation d'une méthode implicite

- Cette équation se présente sous la forme

$$x_{n+1} = x_n + (t_{n+1} - t_n)\, f(t_{n+1}, x_{n+1})$$

- Comme $(t_{n+1} - t_n)$ est destiné à être assez petit, et que

$$t_{n+1} - t_n = 0 \Longrightarrow x_{n+1} = x_n$$

il est presque sûr que la méthode de Newton sera efficace dans ce cas. Soit donc initialement

$$x_{n+1}^0 = x_n$$

et

$$x_{n+1}^{p+1} = x_{n+1}^p + \frac{(x_n - x_{n+1}^p) + (t_{n+1} - t_n)\, f(t_{n+1}, x_{n+1}^p)}{1 + (t_{n+1} - t_n)\, \dfrac{\partial f}{\partial x}(t_{n+1}, x_{n+1}^p)}$$

qui devrait converger rapidement vers une limite qui sera x_{n+1}.

Méthode de Cranck-Nicholson

- Le principe est encore de donner une suite de temps t_0, t_1, $\dots t_N$ auxquels des approximations de la suite de valeurs $x(t_0)$, $x(t_1)$, $\dots x(t_N)$ sont cherchées mais en remplaçant $x'(t) = f(t, x(t))$ par

$$\frac{x_{n+1} - x_n}{t_{n+1} - t_n} = f\left(t_{n+1}, \frac{x_{n+1} + x_n}{2}\right) \quad \text{pour } n = 0, \dots, N-1$$

- La méthode de Cranck-Nicholson est encore implicite dans le sens que x_{n+1} ne peut être trouvé qu'au moyen d'une résolution d'équation ; et elle posse le caractère de stabilité d'une implicite ;

- Mais elle est plus précise que la méthode implicite pure ; et c'est parce qu'elle est de plus haut ordre ; ce qui demande quelques développement pour être expliqué.

La méthode des séries

- Une méthode analytique de calcul des solutions de

$$x'(t) = f(t, x(t)) \text{ avec } x(t_0) = x_0$$

consiste à chercher cette solution sous forme de série au voisinage de t_0, c'est à dire de poser

$$x(t) = x(t_0 + (t - t_0)) = \sum_{n=0}^{\infty} x_n \frac{(t - t_0)^n}{n!}$$

et de chercher les valeurs des coefficients x_n des termes d'ordre n.

- L'ordre 0 revient à écrire $x_0 = x_0$; le « x_0 » du développement prend la valeur « x_0 » de la condition initiale.

- L'ordre 1 utilise l'EDO au temps t_0

$$x'(t_0) = f(t_0, x(t_0)) \Longrightarrow x_1 = f(t_0, x_0)$$

La méthode des séries

- Pour l'ordre 2, on dérive déjà l'EDO par rapport à t, soit

$$x''(t) = \frac{\partial f}{\partial t}(t, x(t)) + \frac{\partial f}{\partial x}(t, x(t))\, x'(t)$$

et on réécrit cette expression en $t = t_0$, soit

$$\underbrace{x''(t_0)}_{=x_2} = \frac{\partial f}{\partial t}(t_0, x_0) + \frac{\partial f}{\partial x}(t_0, x_0)\ \underbrace{x'(t_0)}_{=x_1}$$

d'où

$$x_2 = \frac{\partial f}{\partial t}(t_0, x_0) + \frac{\partial f}{\partial x}(t_0, x_0)\ = x_1$$

- Et on recommence cette suite d'opérations pour les termes suivant.

- Ce procédé s'appelle la méthode des séries et c'est en apparence un moyen commode pour obtenir une solution d'EDO.

Construction de la fonction exponentielle

- Si l'EDO est $x' = -a\,x$; $x(0) = 1$ dont la solution est $x = \exp^{-a\,t}$ l'application de la méthode des séries est très directe.

- En effet pour $x(t) = \sum_{n=0}^{\infty} x_n \frac{t^n}{n!}$:

Ordre 0 $x_0 = 1$

Ordre 1 $x_1 = -a$

Ordre 2 $x'' = -a\,x' \Longrightarrow x_2 = a^2$

...

Ordre n $x^{(n)} = -a\,x^{(n-1)} \Longrightarrow x_n = -a\,x_{n-1}$

d'où

$$x(t) = \exp^{-a\,t} = \sum_{n=0}^{\infty} (-a)^n \frac{t^n}{n!}$$

qui est bien la série qui permet de construire (et définir) l'exponentielle.

L'inconvénient de la méthode des séries

- Si on prend maintenant l'EDO $\dfrac{dx}{dt} = -t\, x$ avec $x(0) = 1$ dont la solution est $x(t) = e^{-t^2/2}$

- La méthode des séries pour $x(t) = \displaystyle\sum_{n=0}^{\infty} x_n \frac{t^n}{n!}$ fournit

Ordre 0 $x_0 = 1$

Ordre 1 $x_1 = 0$

Ordre 2 $x'' = -x - t\, x' \implies x_2 = -1$

Ordre 3 $x''' = -x' - x' - t\, x'' \implies x_3 = 0$

Ordre 4 $x^{(4)} = -3\, x'' - t\, x''' \implies x_4 = 3$

c'est un peu pénible à la main mais ça peut être automatisé (voir script)

- Seulement c'est inefficace pour des ordres même pas trop grands. Et donc les méthodes numériques ne sont pas détrônées.

Ordre des méthodes d'Euler

- Il est intéressant de comparer formellement les solutions produites par les méthodes d'Euler avec la solution exacte obtenue par la méthode des séries.

- Pour $x' = f(t,x)$ avec $x(t0) = x_0$, la solution exacte en t_1 est

$$x(t_1) = \underbrace{x_0}_{\text{Ordre } 0} + \underbrace{(t_1 - t_0)\ f(t_0, x_0)}_{\text{Ordre } 1}$$

$$+ \underbrace{\frac{(t_1 - t_0)^2}{2} \left(\frac{\partial f}{\partial t}(t_0, x_0) + \frac{\partial f}{\partial x}(t_0, x_0) \right)}_{\text{Ordre } 2} + \underbrace{\dots}_{\text{Ordres } > 2}$$

- La méthode d'Euler explicite produit l'approximation de $x(t_1)$

$$x_1 = \underbrace{x_0}_{\text{Ordre } 0} + \underbrace{(t_1 - t_0)\ f(t_0, x_0)}_{\text{Ordre } 1} + 0$$

elle coïncide donc avec la méthode exacte jusqu'à l'ordre 1 : elle est dite d'ordre 1.

Ordre des méthodes d'Euler

- La méthode d'Euler implicite produit x_1 qui est une approximation de $x(t_1)$ telle que

$$x_1 = x_0 + (t_1 - t_0)\, f(t_1, x_1)$$

Si on cherche un développement de Taylor de x_1 par rapport à $(t_1 - t_0)$ de la forme

$$x_1 = x_0 + x_{1|1}\,(t_1 - t_0) + x_{1|2}\,\frac{(t_1 - t_0)^2}{2} + \dots$$

il vient (après quelques calculs)

$$\begin{aligned} x_1 &= \underbrace{x_0}_{\text{Ordre } 0} + \underbrace{(t_1 - t_0)\, f(t_0, x_0)}_{\text{Ordre } 1} \\ &+ \underbrace{\frac{(t_1 - t_0)^2}{2}\, {\color{red}2} \left(\frac{\partial f}{\partial t}(t_0, x_0) + \frac{\partial f}{\partial x}(t_0, x_0)\right)}_{\text{Ordre } 2} + \underbrace{\dots}_{\text{Ordres} > 2} \end{aligned}$$

et donc là encore la méthode coïncide avec la méthode exacte jusqu'à l'ordre 1 : elle est d'ordre 1.

Ordre des méthodes d'Euler

- La méthode de Cranck-Nicholson produit x_1 qui est une approximation de $x(t_1)$ telle que

$$x_1 = x_0 + (t_1 - t_0)\, f\left(t_1, \frac{x_1 + x_0}{2}\right)$$

De la même façon il est possible de chercher un développement de Taylor de x_1 par rapport à $(t_1 - t_0)$ de la forme

$$x_1 = x_0 + x_{1|1}\,(t_1 - t_0) + x_{1|2}\,\frac{(t_1 - t_0)^2}{2} + \dots$$

mais là le développement est exactement le même que celui de la solution exacte jusqu'à l'ordre 2 inclus. Par contre les termes d'ordre 3 des deux développements diffèrent.

- La méthode de Cranck-Nicholson est donc d'ordre 2. Et c'est ce qui explique qu'elle est plus précise que la méthode implicite pure.

Préparation pour l'étude des méthodes de Runge-Kutta

- La prochaine leçon sera consacrée à l'étude des méthodes de Runge-Kutta de plus hauts ordres que 2. Leur principe est d'imiter la méthode des séries sans toutefois présenter l'inconvénient que présente la dérivation de la fonction f.

- Il est *a priori* étrange que cela soit possible ; aussi propose-t-on maintenant d'examiner un problème plus simple mais connexe : le calcul de limites singulières par la méthode d'extrapolation de Richardson.

- Typiquement il s'agit de chercher $\lim_{x->0} f(x)$ pour par exemple

$$f(x) = \sin x/x + x - 1$$

Cette limite existe, c'est 0. Mais si f était plus compliquée tout en comportant une singularité analogue, il ne serait pas si facile de trouver analytiquement cette limite.

Extrapolation de Richardson

- Le 1° procédé numérique consiste à calculer

$$f(\epsilon)$$

pour ϵ petit et d'affirmer qu'il s'agit là d'une approximation de $\lim\limits_{x->0} f(x)$.

- Mais il est possible de faire mieux. Si f est une fonction différentiable deux fois dont l'argument et la valeur sont des nombres réels, alors, pour un x quelconque

$$f(x+\epsilon) = f(x) + f'(x)\,\epsilon + \frac{1}{2}\,f''\,\epsilon^2 + \dots$$

on a aussi

$$f(x+k\epsilon) = f(x) + f'(x)\,k\,\epsilon + \frac{1}{2}\,f''(x)\,k^2\,\epsilon^2 + \dots$$

d'où s'ensuit que

$$k\,f(x+\epsilon) - f(x+k\epsilon) = (k-1)\,f(x) + k(1-k)\,\frac{1}{2}f''(x)\,\epsilon^2 + \dots$$

Extrapolation de Richardson

- Ce résultat permet d'approximer $f(x)$ à l'ordre 2 comme

$$f(x) \approx \frac{f(x+k\epsilon) - kf(x+\epsilon)}{1-k}$$

Cela s'appelle une extrapolation de Richarson, c'est plus précis que de se contenter d'une approximation comme

$$f(x) = f(x+\epsilon)$$

qui ne serait qu'à l'ordre 1.

- Sur l'exemple $f(x) = \sin x/x + x - 1$ en $x = 0$

x	$f(x) = \sin x/x + x - 1$	$(f(kx) - kf(x))/(1-k)$ pour $k = 1/2$
0.1	-0.09833416646828153	-0.0008326043588515741
0.01	-0.009983333416666351	-8.33326041682625e-06
0.001	-0.0009998333333416376	-8.333332601750953e-08
0.0001	-9.999833333340646e-05	-8.333334022836425e-10

avec deux calculs pour 0.1 et 0.05 on obtient la précision d'un calcul pour 0.001.