Modélisation/Calculs scientifiques - GME5

Leçon 5

Méthodes de Runge-Kutta explicites

G. Vinsard

Gerard.Vinsard@univ-lorraine.fr

28 mai 2015

Objectifs

- Expliquer le principe des méthodes de Runge-Kutta explicites d'ordre élevé pour des EDO scalaires ;
- Expliquer le principe des méthodes de Runge-Kutta emboîtées toujours pour des EDO scalaires ;
- Expliquer la transformation d'EDOs comportant des dérivées d'ordre supérieur à 1 en des systèmes d'ordre 1 ; ce qui permet d'utiliser les méthodes de Runge-Kutta ;
- Expliquer l'autonomisation des EDOs.

Méthode d'Euler explicite

- Si $x : \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R}$ est solution de l'EDO

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

et que $t_1, \ldots, t_n$ est une suite de temps successifs, il s'agit de trouver des approximations $x_1, \ldots, x_n$ de $x(t_1), \ldots, x(t_N)$ sous forme explicite.

- La méthode d'Euler explicite

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

fournit de telles approximations mais elle n'est que d'ordre 1. C'est à dire que, la solution formelle obtenue par la méthode des séries étant

$$x_{n+1} = x_n + (t_{n+1} - t_n)\, f(t_n, x_n) + \frac{(t_{n+1} - t_n)^2}{2} \left(\frac{\partial f}{\partial t}(t_n, x_n) + \frac{\partial f}{\partial x}(t_n, x_n) \right) + \ldots$$

le terme d'ordre 1 de la méthode d'Euler explicite coïncident avec ceux de la série mais pas celui d'ordre 2 (nul pour Euler).

Méthode de Runge-Kutta explicite à deux étages

- Cherchons une méthode explicite de plus haut ordre que 1.

- Pour cela on introduit une construction à deux étages

$$\left|\begin{array}{lcl} x_{01} & = & x_0 \\ x_{02} & = & x_0 + (a_{21}\ f(t_{01}, x_{01}))\ (t_1 - t_0) \\ t_{01} & = & t_0 + c_1\ (t_1 - t_0) \\ t_{02} & = & t_0 + c_2\ (t_1 - t_0) \\ x_1 & = & x_0 + (b_1\ f(t_{01}, x_{01}) + b_2\ f(t_{02}, x_{02}))\ (t_1 - t_0) \end{array}\right.$$

qui permet de calculer l'approximation x_1 de $x(t_1)$ en fonction de x_0 dès lors que les nombres a_{21}, b_1, b_2, c_1, c_2 sont connus.

- La question est de déterminer ces nombres pour que les séries du développement formel de $x(t_1) + x(t_0 + (t_1 - t_0))$ et x_1 par rapport à $(t_1 - t_0)$ aient le plus possible de termes successifs identiques.

Méthode de Runge-Kutta explicite à deux étages

- Les deux séries sont

$$x(t_1) = x_0 + (t_1 - t_0)\ f(t_0, x_0) + \frac{(t_1 - t_0)^2}{2} \left(\frac{\partial f}{\partial t}(t_0, x_0) + \frac{\partial f}{\partial x}(t_0, x_0) \right) + \dots$$

et

$$\begin{array}{rcl} x_1 & = & x_0 + b_1\ f(t_0, x_0)\ (t_1 - t_0) \\ & + & b_2\ f\left(t_0 + c_2\ (t_1 - t_0), x_0 + a_{21}\ f(t_0, x_0)\ (t_1 - t_0)\right)\ (t_1 - t_0) \\ & + & \dots \end{array}$$

il faut donc que $b_1 + b_2 = 1$, $a_{21} = c_2$, $b_2\ a_{21} = 1/2$, soit donc

$$\left\{ \begin{array}{rcl} b_1 & = & 1 - \alpha \\ b_2 & = & \alpha \\ a_{21} & = & 1/(2\ \alpha) \\ c_2 & = & 1/(2\ \alpha) \end{array} \right. \qquad \alpha \text{ est un paramètre}$$

et c_1 n'étant pas utilisé, on peut convenir de le prendre nul.

Méthode de Runge-Kutta explicite à deux étages

- En transcrivant le passage de (t_0, x_0) à (t_1, x_1) à celui de (t_n, x_n) à (t_{n+1}, x_{n+1}) les méthodes à deux étages sont donc de la forme

$$\left|\begin{array}{lcl} x_{n|1} & = & x_n \\ x_{n|2} & = & x_n + (1/(2\,\alpha)\; f(t_{n|1}, x_{n|1}))\;(t_{n+1} - t_n) \\ t_{n|1} & = & t_n \\ t_{n|2} & = & t_n + 1/(2\,\alpha)\;(t_{n+1} - t_n) \\ x_{n+1} & = & x_n + ((1-\alpha)\; f(t_{n|1}, x_{n|1}) + \alpha\; f(t_{n|2}, x_{n|2}))\;(t_{n+1} - t_n) \end{array}\right.$$

où les $x_{n|1}$, $x_{n|2}$, $t_{n|1}$ et $t_{n|2}$ sont des valeurs intermédiaires et où le paramètre α peut *a priori* être quelconque mais pour des raisons de stabilité (non discutées ici) doit être compris entre 0 et 1.

- L'ordre de ces méthodes (une par valeur de α) est 2 parce que les termes d'ordre 2 en $t_{n+1} - t_n$ coïncident mais pas les termes d'ordre 3 (et pour aucune valeur de α). Ce sont des méthodes de Runge-Kutta à deux étages.

Méthodes de Runge-Kutta explicite générales

- Le calcul des coefficients est relativement facile pour une méthode à deux étages, mais il se complique beaucoup au delà.

- Mais le travail a été effectué par de nombreux mathématiciens depuis Runge et Kutta (≈ 1900) ; il se présente sous forme de tableaux de la forme

$$
\begin{array}{c|ccccccc}
c_1 & 0 & 0 & \dots & & & & \\
c_2 & a_{21} & 0 & \dots & & & & \\
\vdots & & & & & & & \\
c_p & a_{p1} & \dots & a_{p(p-1)} & 0 & \dots & & \\
\vdots & & & & & & & \\
c_P & a_{p1} & \dots & & & a_{P(P-1)} & 0 & \\
\hline
 & b_1 & \dots & & & & b_{P-1} & b_P
\end{array}
$$

où P est le nombre d'étages de la méthode.

Méthodes de Runge-Kutta explicite générales

- Et ces tableaux

$$
\begin{array}{c|cccccc}
c_1 & 0 & 0 & \dots & & & \\
c_2 & a_{21} & 0 & \dots & & & \\
\vdots & & & & & & \\
c_p & a_{p1} & \dots & a_{p(p-1)} & 0 & \dots & \\
\vdots & & & & & & \\
c_P & a_{p1} & \dots & & a_{P(P-1)} & 0 & \\
\hline
 & b_1 & \dots & & & b_{P-1} & b_P
\end{array}
$$

s'utilisent comme

$$x_{n+1} = x_n + (t_{n+1} - t_n) \sum_{p=1}^{P} b_p \, f(t_{n|p}, x_{n|p})$$

$$\text{où} \quad \forall p = 1 \dots P \left\{ \begin{array}{l} x_{n|p} = x_n + (t_{n+1} - t_n) \displaystyle\sum_{q=1}^{P} a_{pq} \, f(t_{n|q}, x_{n|q}) \\ t_{n|p} = t_n + (t_{n+1} - t_n) \, c_p \end{array} \right.$$

Exemples

- Méthodes à deux étages

$$
\begin{array}{c|cc}
0 & 0 & 0 \\
1/2\alpha & 1/2\alpha & 0 \\
\hline
 & 1-\alpha & \alpha
\end{array}
$$

- Méthodes à 3 et 4 étages

$$
\begin{array}{c|cccc}
0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
1/2 & 1/2 & 0 & 0 & 0 \\
1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\
1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\
\hline
 & 1/6 & 2/3 & 0 & 1/6
\end{array}
$$

Runge, Ordre 3

$$
\begin{array}{c|ccc}
0 & 0 & 0 & 0 \\
1/3 & 1/3 & 0 & 0 \\
2/3 & 0 & 2/3 & 0 \\
\hline
 & 1/4 & 0 & 3/4
\end{array}
$$

Heun, Ordre 3

$$
\begin{array}{c|cccc}
0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
1/2 & 1/2 & 0 & 0 & 0 \\
1/2 & 0 & 1/2 & 0 & 0 \\
1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\
\hline
 & 1/6 & 2/6 & 2/6 & 1/6
\end{array}
$$

La Runge-Kutta (Ordre 4)

$$
\begin{array}{c|cccc}
0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
1/3 & 1/3 & 0 & 0 & 0 \\
2/3 & -1/3 & 1 & 0 & 0 \\
1 & 1 & -1 & 1 & 0 \\
\hline
 & 1/8 & 3/8 & 3/8 & 1/8
\end{array}
$$

3/8 (Ordre 4)

Exercice

- Trouver l'approximation x_1 de $x(h)$ pour

$$x' = -t\,x \text{ avec } x(0) = 1$$

en utilisant la méthode des 3/8 :
$$\begin{array}{c|rrrr} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1/3 & 1/3 & 0 & 0 & 0 \\ 2/3 & -1/3 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & -1 & 1 & 0 \\ \hline & 1/8 & 3/8 & 3/8 & 1/8 \end{array}$$

- Vérifier qu'elle est d'ordre 4 en comparant avec le développement de Taylor de la solution exacte

$$e^{-h^2/2} = 1 - \frac{h^2}{2} + \frac{h^4}{8} - \frac{h^6}{48} + \dots$$

Correction

$$
\begin{array}{ll}
x_{01} = 1 & ; \quad t_{01} = 0 \\
x_{02} = 1 + 1/3 \times -0 \times 1 \; h = 1 & ; \quad t_{02} = 0 + 1/3 \; h = h/3 \\
x_{03} = 1 - 1/3 \times -0 \times 1 \times h & \\
\qquad +1 \times -h/3 \times 1 \times h & ; \quad t_{03} = 0 + 2/3 \; h = 2 \; h/3 \\
\quad = 1 - h^2/3 & \\
x_{04} = 1 + 1 \times -0 \times 1 \times h & \\
\qquad -1 \times -h/3 \times 1 \times h & \\
\qquad +1 \times -2h/3 \times (1 - h^2/3) \times h & ; \quad t_{04} = 0 + 1 \; h = h \\
\quad = 1 - h^2/3 + 2h^4/9 &
\end{array}
$$

et donc

$$x_1 = 1 - \frac{h}{8}\left(0 + 3 \times h/3 \times 1 + 3 \times 2h/3 \times (1 - h^2/3) + h \times (1 - h^2/3 + 2h^4/9)\right)$$

soit

$$x_1 = 1 - h^2/2 + h^4/8 - h^6/36$$

Algorithmique

- Comme l'exercice permet de le constater, les méthodes de Runge-Kutta rendent l'ordinateur indispensable ;

- Il y a deux tâches à accomplir : la première est celle qui correspond au calcul d'un pas. On connait x_n au temps t_n et on cherche x_{n+1} au temps t_{n+1} ;

- La seconde est de gérer la suite de valeurs aux pas de temps. Cette seconde question est reportée à la suite, après avoir traité des méthodes de Runge-Kutta emboîtées.

Algorithme : un pas de calcul

Données : La fonction f, un point initial x_0, un temps initial t_0, le pas de temps h, on cherche la solution x_1 une approximation de $x(t_0 + h)$ pour x solution de $dx/dt = f(t, x)$ avec $x(t_0) = x_0$. Les tableaux des a_{pq}, b_p et c_p d'une méthode de Runge-Kutta à P étages.

Résultat : x_1

début

- $p \longleftarrow 1$;
- **tant que** $p \leq P$ **faire**
  - $x0_p \longleftarrow x_0$; $q \longrightarrow 1$; $t0_p \longleftarrow t_0 + h \times c_p$;
  - **tant que** $q < p$ **faire**
    - $x0_p \longleftarrow x0_p + a_{pq} \times h \times f(t0_q, x0_q)$;
    - $q \longleftarrow q + 1$
  - $p \longleftarrow p + 1$
- $x_1 \longleftarrow x_0$; $p \longleftarrow 1$;
- **tant que** $p \leq P$ **faire**
  - $x_1 \longleftarrow x_1 + b_p \times h \times f(t0_p, x0_p)$;
  - $p \longleftarrow p + 1$

Méthodes de Runge-Kutta emboîtées

- Le choix du pas de temps est problématique : s'il est trop grand la méthode manque de précision, s'il est trop court le temps de calcul est inutilement long.
- Il est donc nécessaire de disposer d'un critère permettant d'adapter le pas de temps au problème traité. Ce critère peut être de calculer deux valeurs précises à des ordres différents pour un même pas de temps. Si elles sont suffisamment proche c'est que le pas était suffisamment petit (et il peut même peut-être être agrandi) ; sinon il faut le diminuer.
- Les méthodes de Runge-Kutta emboîtées (embedded Runge-Kutta methods) fournissent une infrastructure économique pour réaliser ce programme.

Méthodes de Runge-Kutta emboîtées

- Pratiquement elles correspondent à un tableau de la forme

$$
\begin{array}{c|ccccccc}
c_1 & 0 & 0 & \dots & & & & \\
c_2 & a_{21} & 0 & \dots & & & & \\
\vdots & & & & & & & \\
c_p & a_{p1} & \dots & a_{p(p-1)} & 0 & \dots & & \\
\vdots & & & & & & & \\
c_P & a_{p1} & \dots & & & a_{P(P-1)} & 0 & \\
\hline
 & b_1 & \dots & & & & b_{P-1} & b_P \\
\hline
 & b'_1 & \dots & & & & b'_{P-1} & b'_P
\end{array}
$$

où les $x_{n|p}$ et $t_{n|p}$ sont calculé comme précedemment mais où on obtient deux valeurs d'approximation de $x(t_n + h)$ comme

$$
x_{n+1} = x_0 + h \sum_{p=1}^{P} b_p \; f(t_{0p}, x_{0p}) \; ; \; x'_{n+1} = x_0 + h \sum_{p=1}^{P} b'_p \; f(t_{0p}, x_{0p})
$$

et ces deux valeurs sont calculées à deux ordres différents, ce qui permet de régler le pas de temps h.

Algorithmique

- La suite de pas de temps t_1, t_2, $\ldots$ n'est plus déterminée à l'avance.

- Au lieu de cela on donne une valeur de pas de temps h initial, une « tolérance » *tol* et un temps limite T.

- Le calcul de x_1 et x_1' approximant la valeur de $x(t_0 + h)$ est fait. Deux cas peuvent se produire :
  - $|x_1 - x_1'| < tol$: alors le pas de temps est validé, le nouveau temps est $t_0 + h$ et on essaie d'augmenter ce pas de temps pour le pas suivant, typiquement $h \leftarrow 1.2\ h$;
  - Sinon le pas de temps n'est pas validé, on diminue h (typiquement de moitié $h \leftarrow h/2$ et on recommence à partir de t_0.

- Et on réitère les itérations jusqu'à ce que le temps limite T soit atteint.

Algorithme : des pas de temps

Données : La fonction f, un point initial x_0, un temps initial t_0, un temps d'arrivée T, une longueur de pas h initiale, une tolérance *tol*

Résultat : X un tableau des solutions aux temps $t_0, \dots, t_N$, N étant le nombre de points de calcul

début

$X[1][1] \longleftarrow t_0$; $X[2][1] \longleftarrow x_0$;

$N \longleftarrow 2$;

tant que $t_0 < T$ **faire**

trouver x_1 et $\tilde{x}_1$ avec une méthode de Runge-Kutta emboîtée à partir de x_0, t_0 avec le pas h ; **si** $|x_1 - \tilde{x}_1| < tol$ **alors**

$t_0 \longleftarrow t_0 + h$; $x_0 \longleftarrow x_1$;

$X[1][N] \longleftarrow t_0$; $X[2][N] \longleftarrow x_0$;

$h \longleftarrow 1.2 \times h$;

$N \longleftarrow N + 1$

sinon

$h \longleftarrow h/2$

Méthode de Dormand et Prince 5-4

$$
\begin{array}{c|ccccccc}
0 & 0 & \dots & & & & & \\
1/5 & 1/5 & 0 & \dots & & & & \\
3/10 & 3/40 & 9/40 & 0 & \dots & & & \\
4/5 & 44/45 & -56/15 & 32/9 & 0 & \dots & & \\
8/9 & \frac{19372}{6561} & -\frac{25360}{2187} & \frac{64448}{6561} & -\frac{212}{729} & 0 & \dots & \\
1 & \frac{9017}{3168} & -\frac{355}{33} & \frac{46732}{5247} & \frac{49}{176} & -\frac{5103}{18656} & 0 & \dots \\
1 & \frac{35}{384} & 0 & \frac{500}{1113} & \frac{125}{192} & -\frac{2187}{6784} & \frac{11}{84} & 0 \quad \dots \\
\hline
 & \frac{35}{384} & 0 & \frac{500}{1113} & \frac{125}{192} & -\frac{2187}{6784} & \frac{11}{84} & 0 \\
\hline
 & \frac{5179}{57600} & 0 & \frac{7571}{16695} & \frac{393}{640} & -\frac{92097}{339200} & \frac{187}{2100} & \frac{1}{40}
\end{array}
$$

Cette méthode est à 7 étages. La première ligne de b fournit un ordre 5, la seconde un ordre 4

Système d'EDOs à base de dérivées 1°

▶ Jusqu'ici on a considéré une EDO ne comportant qu'une dérivée 1° d'une une seule variable scalaire ; mais les méthodes de Runge-Kutta restent valables pour les EDOs à variable vectorielle, i.e. on cherche le vecteur de fonction du temps

$$X(t) = \begin{pmatrix} x_1(t) \\ \vdots \\ x_N(t) \end{pmatrix}$$

solution de

$$X' = F(t, X') \text{ avec } X(t_0) = X_0 \in \mathbb{R}^N$$

avec $\begin{array}{cccc} F & : & \mathbb{R} \times \mathbb{R}^N & \longrightarrow & \mathbb{R}^N \\ & & (t, X) & \longrightarrow & F(t, X) \end{array}$.

▶ En effet aucune des opérations algébriques qu'elles utilisent n'est incompatible avec l'algèbre vectorielle !

Lagrange et Newton vs Leibniz

- La notation x' pour la dérivation est celle de Lagrange, les dérivées d'ordre supérieures peuvent se noter x'', x''', et $x^(n)$ au delà.

- La notation de Newton est elle, $\dot{x}$ pour la dérivée 1° , $\ddot{x}$ pour la seconde et ça s'arrête à peu près là, quoique $\dddot{x}$ puisse être utilisé.

- Une notation alternative est celle de Leibniz $\dfrac{dx}{dt}$ pour la dérivée 1° et $\dfrac{d^n x}{dt^n}$ pour les dérivées suivantes.
C'est cele qui va être utilisée maintenant.

EDOs avec des dérivées 2° et plus encore

- On donne une fonction $\varphi \;:\; \mathbb{R} \times \mathbb{R}^N \longrightarrow \mathbb{R}$ et on forme l'EDO

$$\frac{d^N y}{dt^N} = \varphi\left(t, y, \frac{dy}{dt}, \ldots, \frac{d^{N-1}y}{dt^{N-1}}\right)$$

Comment utiliser une méthode de Runge-Kutta pour trouver $y \;:\; \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R}$?

- on peut alors introduire la fonction vectorielle

$$\begin{array}{cccl} f & : & \mathbb{R} \times \mathbb{R}^N & \longrightarrow & \mathbb{R}^N \\ & & (t, x = (x_1, x_2, \ldots, x_N)) & \longrightarrow & f(t,x) = (x_2, x_3, \ldots, x_N, \varphi(t, x_1, \ldots, x_N)) \end{array}$$

puis le vecteur de fonctions $X \;:\; \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R}^N$ tel que

$$X(t) = \left(\begin{array}{cccc} y(t) & \frac{dy}{dt}(t) & \ldots & \frac{d^{N-1}y}{dt^{N-1}}(t) \end{array} \right)$$

et alors

$$\frac{dx}{dt}(t) = f(t,x)$$

C'est un système d'EDO à base de dérivées 1° dont la solution peut être calculée par une méthode de Runge-Kutta.

Exercice

- Mettre sous forme calculable par une méthode de Runge-Kutta l'équation de circuit RLC suivante

$$l\frac{d^2q}{dt^2} + r\,\frac{dq}{dt} + \frac{q}{c} = 0; \quad q(0) = q_0; \quad \frac{dq}{dt}(0) = i_0$$

Correction

- On pose $i = \dfrac{dq}{dt}$ et $X = \begin{pmatrix} q \\ i \end{pmatrix}$
- Il vient alors $\dfrac{d}{dt}X = \begin{pmatrix} \dfrac{dq}{dt} = i \\ \dfrac{di}{dt} = -\dfrac{r\ i + q/c}{l} \end{pmatrix}$
- D'où $\dfrac{d}{dt}\begin{pmatrix} q \\ i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} i \\ -\dfrac{r}{l}\ i - \dfrac{q}{l\ c} \end{pmatrix}$ (système de 1° ordre)
- Les conditions initiales sont $\begin{pmatrix} q \\ i \end{pmatrix}(t = 0) = \begin{pmatrix} q_0 \\ i_0 \end{pmatrix}$

Autonomisation

- Reprenons l'EDO où $X : \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R}^N$, le vecteur de N fonctions $(x_1(t), x_2(t), \dots, x_N(t))$, est solution de

$$\frac{dX}{dt}(t) = f(t, X(t)) \quad \text{avec} \quad x(0) = X_0$$

où $\begin{array}{rccl} f & : & \mathbb{R} \times \mathbb{R}^N & \longrightarrow & \mathbb{R}^N \\ & & (t, X) & \longrightarrow & f(t, X) = (f_1(t, X), \dots, f_N(t, X)) \end{array}$

- on peut introduire le vecteur de $N+1$ fonctions $\tilde{x}(t) = (x_0(t), x_1(t), x_2(t), \dots, x_N(t))$ puis la fonction

$$\begin{array}{rccl} \tilde{f} & : & R^{N+1} & \longrightarrow & \mathbb{R}^{N+1} \\ & & \tilde{x} = (x_0, \underbrace{x}_{=(x_1, x_2, \dots, x_N)}) & \longrightarrow & f(\tilde{x}) = (1, f_1(t, x), \dots, f_N(t, x)) \end{array}$$

pour voir que le problème de départ se transforme en

$$\frac{d\tilde{x}}{dt}(t) = f(\tilde{x}(t)) \quad \text{avec} \quad \tilde{x}(0) = (0, x_0)$$

Exemple

- Autonomiser l'EDO

$$dx/dt = -t\ x \text{ avec } x(0) = 1$$

Correction

- On introduit τ tel que $\dfrac{d\tau}{dt} = 1$
- On pose $X = \begin{pmatrix} \tau \\ x \end{pmatrix}$
- et donc $\dfrac{d}{dt}\begin{pmatrix} \tau \\ x \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ -\tau\, x \end{pmatrix}$ (système autonome)
- La condition initiale est $\begin{pmatrix} \tau \\ x \end{pmatrix}(t = 0) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$