

C11, Schémas numériques pour les systèmes

$f \in C([0, T[\times \mathbb{R}^n, \mathbb{R}^n)$, localement lipschitzienne par rapport à son 2eme argument. On cherche une approximation de la fonction $X \in \mathcal{C}^1([0, T_m[, \mathbb{R}^n) \cap ([0, T_m[, \mathbb{R}^n)$ solution de

$$\begin{aligned}X'(t) &= f(t, X(t)), \quad t > 0, \\X(0) &= X^{(0)},\end{aligned}$$

où T_m est le temps maximal d'existence de la solution.

Exemple 1, système proie-prédateur $a, b, c, d > 0$

$$\begin{aligned}x_1'(t) &= ax_1(t) - bx_1(t)x_2(t), \quad t > 0, \\x_2'(t) &= -cx_2(t) + dx_1(t)x_2(t), \quad t > 0\end{aligned}$$

Le TP4 calcule des solutions approchées de ce système

Exemple 2, Système du pendule

$$\begin{aligned}x_1'(t) &= x_2(t) \\x_2'(t) &= -\sin(x_1(t)) + \sin t\end{aligned}$$

Le projet calcule des solutions approchées de ce système

Exemples de schémas numériques

$\alpha < T$, $h = \alpha/N$, $t_n = nh$. On note $X_k \in \mathbb{R}^n$ l'approximation recherchée de $X(t_k)$, $k \in \{1, \dots, N\}$ ($X_0 = X^{(0)}$). Exemples de schémas (déjà vus)

Schémas d'ordre 1

1. Schéma d'Euler explicite:

$$\frac{X_{k+1} - X_k}{h} = f(t_k, X_k)$$

2. Schéma d'Euler implicite:

$$\frac{X_{k+1} - X_k}{h} = f(t_{k+1}, X_{k+1})$$

Exemples de schémas numériques, suite

Schémas d'ordre 2

1. Schéma de Crank Nicolson:

$$\frac{X_{k+1} - X_k}{h} = \frac{1}{2}f(t_k, X_k) + \frac{1}{2}f(t_{k+1}, X_{k+1})$$

Il correspond à faire la moyenne entre le schéma d'Euler explicite et le schéma d'Euler implicite. Ce schéma est implicite, comme le schéma d'Euler implicite.

2. Schéma de Heun

$$\frac{X_{k+1} - X_k}{h} = \frac{1}{2}f(t_k, X_k) + \frac{1}{2}f(t_{k+1}, X_k + hf(t_k, X_k))$$

Exemples de schémas numériques, fin

Schéma d'ordre 4

Schéma Runge Kutta d'ordre 4 (RK4)

$$X_{k,1} = X_k + \frac{h}{2} f(t_k, X_k),$$

$$X_{k,2} = X_k + \frac{h}{2} f\left(t_k + \frac{h}{2}, X_{k,1}\right),$$

$$X_{k,3} = X_k + hf\left(t_k + \frac{h}{2}, X_{k,2}\right),$$

$$\frac{X_{k+1} - X_k}{h} = \frac{1}{6} [f(t_k, X_k) + 2f(t_k, X_{k,1}) + 2f(t_k, X_{k,2}) + f(t_{k+1}, X_{k,3})]$$

Questions pour le choix du schéma numérique

1. Quelles sont les propriétés souhaitées ?
2. Le schéma est-il convergent ? Peut on démontrer une estimation d'erreur ?
3. Comment calculer X_{k+1} quand X_{k+1} dépend non linéairement de X_k ?

1er exemple : Conservation de la positivité

$$y'(t) = -f(y),$$
$$y(0) = y_0, \quad y_0 > 0,$$

avec $f(y) = y$ ou $f(y) = y^2$ ou $f(y) = \sqrt{y}$.

La quantité y peut représenter une concentration, une masse volumique, une température, grandeurs qui doivent rester positives

Exemples : sûreté nucléaire (énergie, masse volumique d'eau, concentration en éléments radioactif...), formation des réservoirs d'hydrocarbure (température)

Le non respect de la positivité de certains inconnus du modèle peut entraîner une solution approchée très éloignée de la réalité (l'idée simple consistant à mettre à 0 l'approximation numérique lorsque le schéma fournit une valeur négative peut avoir des conséquences catastrophiques)

1er exemple : Conservation de la positivité, suite

$$\begin{aligned}y'(t) &= -\sqrt{y}, \\y(0) &= y_0, \quad y_0 > 0,\end{aligned}$$

Le schéma d'Euler explicite s'écrit, pour $y_k > 0$, $y_{k+1} = y_k - h\sqrt{y_k}$

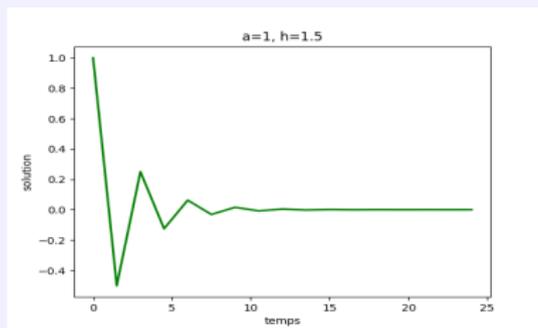
Ceci donne $y_{k+1} < 0$ si $\sqrt{y_k} < h$, ce qui finit par arriver (voir tp1)

Avec le schéma d'Euler implicite, on a $y_k > 0 \Rightarrow y_{k+1} > 0$

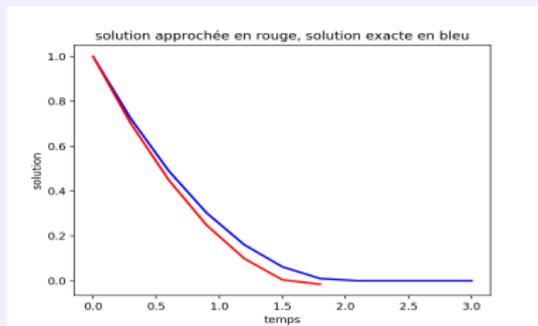
En effet, $y_{k+1} = y_k - h\sqrt{y_{k+1}}$. En posant $z = \sqrt{y_{k+1}}$, z est solution $z^2 + hz = y_k$ et cette équation a toujours une solution strictement positive. y_{k+1} est la racine carrée de cette solution positive

Dans cet exemple, si on veut conserver la positivité, on a donc intérêt à choisir le schéma d'Euler implicite plutôt que le schéma d'Euler explicite

Non conservation de la positivité, schéma EE



Solution approchée, $y'(t) = -y(t)$, $y_0 = 1$, $h = 1.5$



$y'(t) = -\sqrt{y(t)}$, $h = 3/10$, solution explicite négative pour $t = 1.8$

2eme exemple : Conservation de l'énergie

Exemple : système de Coriolis, tp4

$$u'(t) = -v(t)$$

$$v'(t) = u(t)$$

Conservation de l'énergie cinétique

$$E_c(t) = \frac{1}{2}(u^2(t)+v^2(t)) = cste, \text{ c'est-à-dire } E'_c(t) = 0 \text{ pour tout } t > 0$$

Exemple : modélisation des ouragans

Avec Euler explicite l'énergie de la solution approchée croît très vite

Avec Euler implicite l'énergie de la solution approchée décroît

Avec le schéma RK4 elle décroît très légèrement.

Avec le schéma de Crank-Nicolson l'énergie est conservée

Coriolis, EE et EI

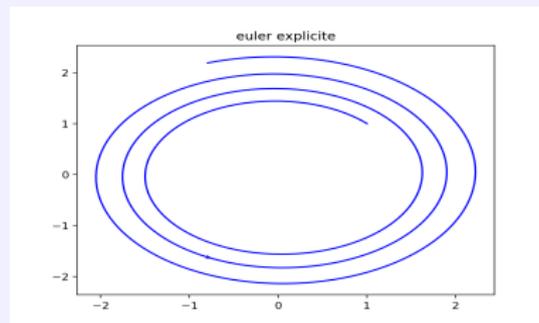


Figure: Schéma EE, l'énergie croît, condition initiale : $u_0 = v_0 = 1$

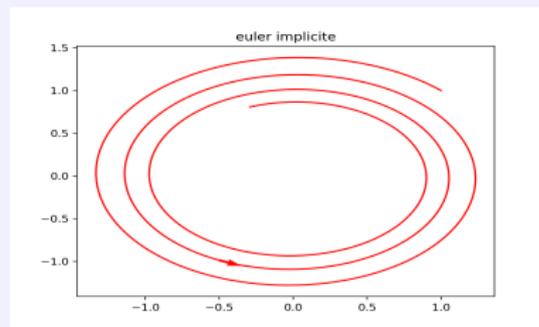


Figure: Schéma EI, l'énergie décroît, condition initiale : $u_0 = v_0 = 1$

Fonction de Lyapunov

Fonction de Lyapunov associée au système $X'(t) = f(X(t))$:

Une fonction $g : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ telle que $\frac{d}{dt}(g(X(t))) \leq 0$.

Exemple fonctions de Lyapunov en mécanique :
l'énergie ou l'entropie

On va chercher un schéma numérique qui respecte la fonction de Lyapunov et qui soit donc tel que $g(X_{k+1}) \leq g(X_k)$.

Exemple, exercice 3 du td 8

$$x'(t) = y(t) - f(x(t)), \quad t > 0$$

$$y'(t) = -x(t), \quad t > 0$$

La fonction f vérifie $f(z)z > 0$ pour tout $z \neq 0$. Une fonction de Lyapunov est ici $g(x, y) = x^2 + y^2$. On a bien $\frac{d}{dt}g(x(t), y(t)) \leq 0$.

Intérêts à avoir la décroissance de la fonction de Lyapunov :

1. Conserver une propriété importante du modèle.
2. Donner un résultat de stabilité qui peut permettre de montrer la convergence du schéma numérique.

Convergence et estimation d'erreur

$X \in C([0, \alpha], \mathbb{R}) \cap C^1(]0, \alpha[, \mathbb{R})$ solution de $X'(t) = f(t, X(t))$

Pas de temps h , $Nh = \alpha$, $N \in \mathbb{N}^*$

X_k , $k \in \{0, \dots, N\}$, valeurs donnée par un schéma numérique

Erreur de discrétisation : $e_h = \max\{\|X_k - X(t_k)\|, 0 \leq k \leq N\}$

Questions :

1. $e_h \rightarrow 0$ quand $h \rightarrow 0$? (convergence du schéma)
2. il existe $c > 0$ et $k \in \mathbb{N}^*$ tels que $\|e_h\| \leq ch^k$? (estimation d'erreur). On dit alors que le schéma est au moins d'ordre k .

Cette étude de convergence et d'estimation d'erreur s'effectue en règle générale en deux parties :

1. Consistance du schéma.
2. Stabilité du schéma (au sens "estimation sur la solution approchée indépendante de h ").

Estimation d'erreur

$X \in C([0, \alpha], \mathbb{R}) \cap C^1(]0, \alpha[, \mathbb{R})$ solution de $X'(t) = f(t, X(t))$

Pas de temps h , $Nh = \alpha$, $N \in \mathbb{N}^*$

X_k , $k \in \{0, \dots, N\}$, valeurs donnée par un schéma numérique

Erreur de discrétisation : $e_h = \max\{\|X_k - \bar{X}_k\|, 0 \leq k \leq N\}$,

$\bar{X}_k = X(t_k)$

1. Erreur de Consistance

$$\frac{\bar{X}_{k+1} - \bar{X}_k}{h} = f(t_k, \bar{X}_k) + \varepsilon_k$$

EE ou EI, f de classe C^1 , $\|\varepsilon_k\| \leq Ch$ (pour tout k)

Heun ou CN, f de classe C^2 , $\|\varepsilon_k\| \leq Ch^2$ (pour tout k)

RK4, f de classe C^4 , $\|\varepsilon_k\| \leq Ch^4$ (pour tout k)

2. Stabilité du schéma

Pour $h < h_0$, $\|X_k\| \leq C$, pour tout $k \in \{0, \dots, N\}$

Estimation d'erreur, suite

$X \in C([0, \alpha], \mathbb{R}) \cap C^1(]0, \alpha[, \mathbb{R})$ solution de $X'(t) = f(t, X(t))$

Pas de temps h , $Nh = \alpha$, $N \in \mathbb{N}^*$

X_k , $k \in \{0, \dots, N\}$, valeurs donnée par un schéma numérique

Erreur de discrétisation : $e_h = \max\{\|X_k - \bar{X}_k\|, 0 \leq k \leq N\}$,

$\bar{X}_k = X(t_k)$

Avec la majoration de l'erreur de Consistance et la stabilité, on montre une majoration de l'erreur de discrétisation

1. EE ou EI, f de classe C^1 , $e_h \leq Ch$
2. Heun ou CN, f de classe C^2 , $e_h \leq Ch^2$
3. RK4, f de classe C^4 , $e_h \leq Ch^4$

Preuve : simple, en utilisant la caractère localement lipschitzien de f par rapport à son deuxième argument, comme pour $n = 1$

Convergence sans régularité sur la solution exacte

Dans les slides précédents, nous avons montré la convergence du schéma grâce à une estimation d'erreur, qui nécessite l'existence de la solution exacte et qui nécessite aussi une régularité plus que C^1 de cette solution exacte

Autre moyen de prouver la convergence de la solution du schéma numérique. Pour cette nouvelle méthode, les ingrédients sont :

1. La solution approchée est “presque” solution du problème de Cauchy (c'est bien une sorte d'erreur de consistance).
2. Estimations sur la solution approchée

Intérêt de cette méthode :

1. Elle montre la convergence sans que la solution exacte soit mieux que C^1
2. Elle donne l'existence de solution pour le problème de Cauchy (et remplace le théorème d'existence de Cauchy-Lipschitz) **mais ne donne pas le théorème d'unicité**

Convergence sans régularité avec le schéma EE

$$f \in C([0, T[\times \mathbb{R}^n, \mathbb{R}^n)$$

Rappel: $0 < \alpha < T$ la fonction X de $[0, \alpha]$ dans \mathbb{R}^n est solution de $X'(t) = f(t, X(t))$ avec donnée initiale $X^{(0)}$ si et seulement si

$$X \in C([0, \alpha], \mathbb{R}^n),$$

$$X(t) = X^{(0)} + \int_0^t f(s, X(s)) ds \text{ pour tout } 0 \leq t \leq \alpha$$

Pour $N \in \mathbb{N}^*$ et $h = \alpha/N$, le schéma EE s'écrit ($t_k = kh$)

$$X_0 = X^{(0)}$$

$$\frac{X_{k+1} - X_k}{h} = f(t_k, X_k) \text{ pour } 0 \leq k \leq N-1.$$

On peut alors définir une fonction χ_h (continue, affine par morceaux) sur tout l'intervalle $[0, \alpha]$ en posant

$$\chi_h(t) = X_k + hf(t_k, X_k)(t - t_k), \quad t_k < t \leq t_{k+1}, \quad k \in 0, \dots, N-1.$$

Convergence sans régularité avec le schéma EE, suite

La fonction χ_h est “presque” solution problème. En posant $g_h(s) = f(t_k, X_k)$ pour $t_k < t \leq t_{k+1}$, on a pour $0 \leq t \leq \alpha$:

$$\begin{aligned}\chi_h(t) &= X^{(0)} + \int_0^t g_h(s) ds \\ &= X^{(0)} + \int_0^t f(s, \chi_h(s)) ds + \int_0^t (g_h(s) - f(s, \chi_h(s))) ds\end{aligned}$$

L'erreur de consistance est donc due ici à la différence entre $f(t_k, X_k)$ et $f(s, \chi_h(s))$ lorsque $t_k < s \leq t_{k+1}$

Si $\chi_h \rightarrow X$ uniformément sur $[0, \alpha]$ quand $h \rightarrow 0$ on obtient

$$X(t) = X^{(0)} + \int_0^t f(s, X(s)) ds \text{ pour tout } 0 \leq t \leq \alpha$$

X est solution de $X'(t) = f(t, X(t))$ avec donnée initiale $X^{(0)}$

On obtient $\chi_h \rightarrow X$ uniformément sur $[0, \alpha]$, à sous suite près, grâce aux estimations sur χ_h et au théorème d'Ascoli (cours de topologie)

Théorème d'Ascoli

Soit $\alpha > 0$. Soit $(u_N)_{N \in \mathbb{N}^*}$ une suite de fonctions définies sur $[0, \alpha]$ et à valeurs dans \mathbb{R}^n telle que:

1. La suite $(u_N)_{N \in \mathbb{N}^*}$ est uniformément bornée, c'est-à-dire qu'il existe $M > 0$ tel que

$$\forall N \in \mathbb{N}, \forall t \in [0, \alpha], \|u_N(t)\| \leq M,$$

2. La suite $(u_N)_{N \in \mathbb{N}^*}$ est uniformément équicontinue, c'est-à-dire

$$\forall \varepsilon > 0, \exists \eta > 0 \text{ tel que } \forall N \in \mathbb{N}, \forall (t, s) \in [0, \alpha]^2, \\ |t - s| < \eta \Rightarrow \|u_N(t) - u_N(s)\| < \varepsilon$$

Alors, il existe une sous-suite de la suite $(u_N)_{N \in \mathbb{N}^*}$ qui converge uniformément sur $[0, \alpha]$.

Résolution des systèmes non linéaires

Dans le cas des schémas implicites (EI, CN...), la valeur de X_{k+1} nécessite la résolution d'un système qui peut être non linéaire

Exemple, schéma d'Euler implicite

$$X_{k+1} = X_k + hf(t_{k+1}, X_{k+1})$$

où X_k , t_k , t_{k+1} sont connus

On définit la fonction g (de \mathbb{R}^n dans \mathbb{R}^n) par $g(z) = f(t_{k+1}, z)$

On cherche donc X_{k+1} tel que

$$X_{k+1} = X_k + hg(X_{k+1})$$

ou encore, en posant $y = X_k$ et $F(z, h) = z - hg(z) - y$

$$F(X_{k+1}, h) = 0$$

Si f est de classe C^1 , le théorème des fonctions implicites permet de montrer que pour $h > 0$ assez petit, il existe un et un seul X_{k+1} proche de y (c'est-à-dire proche de X_k) tel que $F(X_{k+1}, h) = 0$

Théorème des fonctions implicites

Soit $F \in C^1(\mathbb{R}^n \times \mathbb{R})$. Soit $y \in \mathbb{R}^n$ tel que $F(y, 0) = 0$. On suppose que la dérivée de F par rapport à son premier argument au point $(y, 0)$ est inversible, alors:

$$\exists \varepsilon > 0 \exists \delta > 0, \forall h \in]-\varepsilon, \varepsilon[\exists ! z \in B(y, \delta) \text{ tel que } F(z, h) = 0$$

(On rappelle que $B(y, \delta) = \{z \in \mathbb{R}^n, \|y - z\| < \delta\}$.)

Ici, nous avons $F(z, h) = z - hg(z) - y$ avec $g(z) = f(t_{k+1}, z)$

La fonction F est bien de classe C^1 car f est de classe C^1

En notant D_1F la dérivée de F par rapport à son premier argument, on a $D_1F(z, y) = I - hDg(z)$ de sorte que $D_1F(y, 0) = I$ On peut donc appliquer le théorème des fonctions implicites

Il donne l'existence de X_{k+1} (tel que $F(X_{k+1}, h) = 0$) au moins si h assez petit (il donne aussi l'unicité si on se limite à chercher X_{k+1} proche de X_k).

Algorithme de Newton

Comment peut-on effectivement calculer X_{k+1} si le système est non linéaire ?

X_k, t_k, t_{k+1} sont connus. On ajoute que h est connu

En posant $G(z) = F(z, h)$, on cherche donc X_{k+1} tel que $G(X_{k+1}) = 0$ ($G \in C^1(\mathbb{R}^n, \mathbb{R}^n)$)

Méthode de Newton pour la résolution de l'équation $G(z) = 0$

initialisation : $z_0 = y$,

itérations :

$DG(z_\ell)(z_{\ell+1} - z_\ell) = J_G(z_\ell)(z_{\ell+1} - z_\ell) = -G(z_\ell)$ pour $\ell \geq 0$

Un avantage considérable de la méthode de Newton est qu'elle converge très rapidement. Un inconvénient est que la convergence n'est assurée que si l'initialisation est faite en un point assez près de la solution. Dans le cas des schémas numériques, on initialise le calcul de X_{k+1} par X_k qui est proche de X_k si h est petit

Exemple : système du pendule avec forcing

$$\begin{aligned}x_1'(t) &= x_2(t) \\x_2'(t) &= -\sin(x_1(t)) + \sin t\end{aligned}$$

Schéma EI, $x_{1,k}$, $x_{2,k}$, t_{k+1} connus, on calcule $x_{1,k+1}$ et $x_{2,k+1}$

$$\begin{aligned}x_{1,k+1} &= x_{1,k} + hx_{2,k+1} \\x_{2,k+1} &= x_{2,k} - h \sin(x_{1,k+1}) + h \sin(t_{k+1})\end{aligned}$$

$$Z = \begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \end{bmatrix}, G(Z) = \begin{bmatrix} z_1 - x_{1,k} - hz_2 \\ z_2 - x_{2,k} + h \sin(z_1) - h \sin(t_{k+1}) \end{bmatrix}$$

On cherche donc Z tel que $G(Z) = 0$ et on prend alors $X_{k+1} = Z$

Exemple : système du pendule avec forcing, suite

$$G(Z) = \begin{bmatrix} z_1 - x_{1,k} - h z_2 \\ z_2 - x_{2,k} + h \sin(z_1) - h \sin(t_{k+1}) \end{bmatrix}$$

La dérivée de G au point Z est donnée par sa matrice jacobienne :

$$J_G(Z) = \begin{bmatrix} 1 & -h \\ h \cos(z_1) & 1 \end{bmatrix}$$

La méthode de Newton s'écrit donc :

initialisation : $Z_0 = X_k$,

itérations: $J_G(Z_\ell)(Z_{\ell+1} - Z_\ell) = -G(Z_\ell)$ pour $\ell \geq 0$.

La valeur de X_{k+1} est alors Z_ℓ pour un indice $\ell \geq 0$ choisi avec un critère d'arrêt, par exemple $\|Z_\ell - Z_{\ell-1}\| \leq \varepsilon$ pour un $\varepsilon > 0$.

En général, la méthode de Newton ne nécessite que quelques itérations