

# INFORMATIQUE APPLIQUÉE AU CALCUL SCIENTIFIQUE

COURS 12

## Cycle limite linéaire

- 1) Equation différentielle du second ordre
- 2) Système différentiel du premier ordre
- 3) Schéma d'Euler explicite
- 4) Schéma d'Euler rétrograde
- 5) Schéma de Crank-Nicolson
- 6) Schéma de Heun

## Cycle limite linéaire

(1) Équation différentielle du second ordre

- On suspend une masse  $m$  à un ressort de raideur  $k$ . Ce dernier s'allonge et prend une position d'équilibre. Puis on tire un peu sur la masse d'une distance  $a$ , et on relâche la masse sans lui donner de vitesse. On constate alors un mouvement oscillatoire de la masse suspendue au ressort. En absence de frottement, ce mouvement se poursuit indéfiniment. Ce paragraphe étudie plus en détail la modélisation mathématique de ce phénomène physique.
- on note  $u$  la distance (algébrique) de la masse  $m$  par rapport à sa position d'équilibre. Une analyse mécanique du système montre que la fonction  $t \mapsto u(t)$  est solution de l'équation différentielle

$$(1) \quad m \frac{d^2u}{dt^2} + ku = 0, \quad t \geq 0.$$

on introduit alors la pulsation  $\omega$  par

$$(2) \quad \omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$$

et l'équation (1) prend la forme adimensionnée :

$$(3) \quad \frac{d^2u}{dt^2} + \omega^2 u = 0$$

- 2
- La résolution mathématique de l'équation (3) est classique. Nous rappelons dans ce paragraphe l'essentiel de ce qui est à retenir pour mener les calculs. D'une part, les fonctions  $t \mapsto \cos(\omega t)$  et  $t \mapsto \sin(\omega t)$  sont des solutions particulières de l'équation (3). D'autre part, si on dispose de deux solutions  $u_1(t)$  et  $u_2(t)$  de l'équation (3), la linéarité de ce modèle entraîne que pour tout couple  $(\alpha, \beta)$  de réels, la combinaison linéaire

$$(4) \quad v(t) = \alpha u_1(t) + \beta u_2(t)$$

est encore une solution de l'équation (3). On a en effet

$$\begin{aligned} \frac{d^2v}{dt^2} + \omega^2 v(t) &= \frac{d}{dt^2} (\alpha u_1(t) + \beta u_2(t)) + \omega^2 (\alpha u_1(t) + \beta u_2(t)) \\ &= \alpha \frac{d^2u_1}{dt^2} + \beta \frac{d^2u_2}{dt^2} + \alpha \omega^2 u_1 + \beta \omega^2 u_2(t) \\ &= \alpha \left( \frac{d^2u_1}{dt^2} + \omega^2 u_1 \right) + \beta \left( \frac{d^2u_2}{dt^2} + \omega^2 u_2 \right) \\ &= (\alpha \times 0) + (\beta \times 0) = 0 \end{aligned}$$

car  $u_1$  et  $u_2$  sont solutions particulières de (3).

Nous déduisons des considérations précédentes que toute fonction de la forme

$$(5) \quad u(t) = \alpha \cos(\omega t) + \beta \sin(\omega t)$$

est solution de l'équation (3). On peut démontrer (c'est un théorème qui n'est pas si facile !) qu'il n'y en a pas d'autre.

- La solution "générale" de l'équation (3) dépend de deux paramètres  $a$  et  $b$ . Nous avons vu lors de l'exemple mécanique du ressort qu'on s'est donné deux conditions à l'instant initial  $t=0$ ; une sur la position

$$(6) \quad u(0) = a$$

et l'autre sur la vitesse initiale

$$(7) \quad \frac{du}{dt}(0) = b, \quad b \neq 0$$

De manière générale, la connaissance de  $a$  et  $b$  permet de calculer complètement  $u(t)$  à partir de (5), (6) et (7). Il vient sans difficulté

$$(8) \quad u(t) = a \cos(\omega t) + \frac{b}{\omega} \sin(\omega t), \quad t \geq 0.$$

- Nous retenons que la solution de l'équation (3) jointe avec la condition initiale (double !) (6)(7) s'écrit sous la forme (8). On a bien une fonction périodique, de période

$$(9) \quad T = \frac{2\pi}{\omega}$$

qui est la trace mathématique du comportement physique observé avec le ressort.

## 4

### ② Système différentiel du premier ordre

- Afin de formuler de manière unifiée l'ensemble des modèles différentiels (voir le chapitre suivant), on modifie l'écriture de l'équation (3). On introduit une variable  $v(t)$  qui est (au signe près) la vitesse du processus  $u(t)$ :

$$(10) \quad v(t) = -\frac{du}{dt}.$$

Alors la dérivée de  $v(t)$  s'exprime facilement en fonction de  $u$  à l'aide de l'équation (3); on a en effet

$$(11) \quad \frac{dv}{dt} = -\frac{d^2u}{dt^2} = \omega^2 u.$$

- Nous pouvons écrire de manière unifiée les deux équations (10) et (11):

$$(12) \quad \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -v \\ \omega^2 u \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ \omega^2 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}$$

en utilisant le vecteur de  $\mathbb{R}^2$

$$(13) \quad w = \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}$$

et la matrice deux par deux

$$(14) \quad A = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ \omega^2 & 0 \end{pmatrix}.$$

Avec ces notations, la relation (12) se écrit

$$(15) \quad \frac{dw}{dt} = A \cdot w(t).$$

- Les conditions initiales (6) et (7) prennent une forme très simple avec le vecteur  $w$ :

$$(16) \quad w(0) = \begin{pmatrix} a \\ -b \end{pmatrix}.$$

Nous avons donc remplacé l'ensemble (3)(6)(7) par une équation du premier ordre<sup>(15)</sup> portant sur un vecteur de  $\mathbb{R}^2$ , associé à une condition initiale (16) pour ce même vecteur. La solution de (15)(16) s'écrit sans difficulté à partir de la relation (8)

$$(17) \quad w(t) = \begin{pmatrix} a \cos \omega t + \frac{b}{\omega} \sin \omega t \\ a \omega \sin \omega t - b \cos \omega t \end{pmatrix}, \quad t \geq 0.$$

- quand le temps varie, le point  $w(t) \in \mathbb{R}^2$  décrit en général une ellipse dans un plan dit classiquement "plan de phase". Ainsi la périodicité du processus se traduit dans cette représentation par le retour à la position initiale, après un temps  $T$  donné par la relation (9).

### ③ Schéma d'Euler explicite

- Même si le fait de connaître la solution (17) du modèle (15)(16) ne rend pas nécessaire l'emploi d'une méthode numérique, cette connaissance permet de tester et valider les méthodes d'approximation par différences finies.

introduites au chapitre précédent on introduit donc un pas de temps  $\Delta t > 0$ , une approximation  $w^j$  de la solution  $w(j\Delta t)$  au temps  $t = j\Delta t$ :

$$(18) \quad w^j \approx w(t^j), \quad t^j = j\Delta t, \quad j \in \mathbb{N}$$

et on cherche un algorithme pour calculer  $w^j$ , sans tenir de la solution analytique (17), uniquement à partir de l'équation (15) et de la condition initiale (16).

- Le schéma d'Euler explicite se construit en utilisant la formule de Taylor pour approcher  $w(t^{j+1})$  si  $w(t^j)$  est supposé connu. On a

$$(19) \quad w(t^{j+1}) = w(t^j + \Delta t) = w(t^j) + \Delta t \frac{dw}{dt}(t^j) + O(\Delta t^2);$$

on remplace dans l'expression (19) la dérivée  $\frac{dw}{dt}(t^j)$  par sa valeur calculée à l'aide de l'équation (15) :

$$(20) \quad \frac{dw}{dt}(t^j) = A \cdot w(t^j).$$

on reporte la relation (20) au second membre de la relation (19). Il vient

$$(21) \quad w(t^{j+1}) = w(t^j) + \Delta t A \cdot w(t^j) + O(\Delta t^2).$$

La relation (20) est exacte pour la solution exacte  $w(t)$ . L'algorithme consiste à remplacer  $w(t^j)$  (le passage à un) par  $w^j$ ,  $w(t^{j+1})$  par  $w^{j+1}$  et à supprimer le reste dans la formule de

Taylor. Il vient

$$(22) \quad w^{j+1} = w^j + \Delta t A w^j = (I + \Delta t A) w^j.$$

- on peut expliciter la relation (22) pour chaque des composantes. Compte tenu de l'expression (14) de la matrice  $A$  et de la définition (13) du vecteur  $w$ , il vient

$$(23) \quad \begin{cases} u^{j+1} = u^j - \Delta t v^j \\ v^{j+1} = v^j + w^2 \Delta t u^j. \end{cases}$$

Ces relations permettent une programmation élémentaire sans difficulté.

#### ④ Schéma d'Euler rétrograde

- La méthode d'approximation est ici un peu plus complexe à concevoir. On développe la condition "initiale"  $w(t^j)$  à partir du "résultat"  $w(t^{j+1})$  ! On a en effet

$$(24) \quad w(t^j) = w(t^{j+1} - \Delta t) = w(t^{j+1}) - \Delta t \frac{dw}{dt}(t^{j+1}) + O(\Delta t^2).$$

Puis on écrit l'équation différentielle (15) à l'instant final  $t^{j+1}$ :

$$(25) \quad \frac{dw}{dt}(t^{j+1}) = A \cdot w(t^{j+1}).$$

on reporte l'expression (25) au membre de droite de (24). On trouve

$$(26) \quad w(t^j) = (I - \Delta t A) \cdot w(t^{j+1}) + O(\Delta t^2).$$

Le processus de construction d'un schéma est alors analogue aux cas déjà vus : on remplace chaque  $w(t^k)$  par la valeur approchée  $w^k$  et on néglige le reste dans la formule de Taylor. Il vient :

$$(27) \quad (I - \Delta t A) \cdot w^{j+1} = w^j, \quad j \in \mathbb{N} -$$

- Cette fois, le résultat du schéma numérique est une équation. Cette équation (27) est un système linéaire de deux équations à deux inconnues qui s'écrit

$$(28) \quad \begin{cases} u^{j+1} + \Delta t v^{j+1} = u^j & | 1 \quad | \Delta t w^2 \\ -\Delta t w^2 u^{j+1} + v^{j+1} = v^j. & | -\Delta t \quad | 1 \end{cases}$$

On peut le résoudre sans difficulté à l'aide du jeu de multiplicateurs figuré à droite de (28). Mais ce travail supplémentaire est à faire ; il justifie la dénomination d'"implicite" également donnée pour le schéma d'Euler rétrograde.

On a donc finalement

$$(29) \quad \begin{cases} u^{j+1} = \frac{1}{1 + (\Delta t w)^2} [u^j - \Delta t v^j] \\ v^{j+1} = \frac{1}{1 + (\Delta t w)^2} [\Delta t w^2 u^j + v^j] \end{cases}$$

Notons au passage qu'on a établi la relation

$$(30) \quad \begin{pmatrix} 1 & \Delta t \\ -\Delta t w^2 & 1 \end{pmatrix}^{-1} = \frac{1}{1 + (\Delta t w)^2} \begin{pmatrix} 1 & -\Delta t \\ \Delta t w^2 & 1 \end{pmatrix}.$$

## ⑤ Schéma de Crank - Nicolson.

- La construction de ce schéma opère non plus par la formule de Taylor, mais par l'emploi de la formule des trapèzes pour approcher une intégrale. On a en effet

$$(31) \quad \int_{\alpha}^{\alpha+\Delta t} f(t) dt \simeq \frac{\Delta t}{2} (f(\alpha) + f(\alpha+\Delta t)) .$$

on utilise cette relation avec  $\alpha = t^j$ ,  $f(t) = \frac{dw}{dt}$  = A.w. On a donc

$$(32) \quad w(t^{j+1}) - w(t^j) \simeq \frac{\Delta t}{2} [A.w(t^j) + A.w(t^{j+1})] .$$

on remplace ensuite  $w(t^j)$  et  $w(t^{j+1})$  par  $w^j$  et  $w^{j+1}$  respectivement et le symbole " $\simeq$ " par " $=$ ". Le schéma de Crank - Nicolson s'écrit donc de façon "finie":

$$(33) \quad w^{j+1} - w^j = \frac{\Delta t}{2} (A w^j + A w^{j+1})$$

- La relation (33) est une équation où  $w^j$  est supposé connu et  $w^{j+1}$  inconnu. On l'écrit à nouveau en séparant ces deux variables:

$$(34) \quad (I - \frac{\Delta t}{2} A) w^{j+1} = (I + \frac{\Delta t}{2} A) w^j .$$

Formellement, on a donc

$$(35) \quad w^{j+1} = (I - \frac{\Delta t}{2} A)^{-1} (I + \frac{\Delta t}{2} A) w^j .$$

Le calcul complet de  $w^{j+1}$ ,  $v^{j+1}$  demande de résoudre le système (34), on le fait le produit

des deux matrices au membre de droite de la relation (35). Nous optons pour cette dernière solution.

La matrice  $(I - \frac{\Delta t}{2} A)^{-1}$  s'obtient à l'aide de la relation (30) en remplaçant  $\Delta t$  par  $\Delta t/2$ .  
Nous en déduisons :

$$(I - \frac{\Delta t}{2} A)^{-1} (I + \frac{\Delta t}{2} A) = \frac{1}{1 + \frac{1}{4}(\Delta t w)^2} \begin{pmatrix} 1 & -\frac{\Delta t}{2} \\ \frac{\Delta t w^2}{2} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & -\frac{\Delta t}{2} \\ \frac{\Delta t w^2}{2} & 1 \end{pmatrix}$$

$$= \frac{1}{1 + \frac{1}{4}(\Delta t w)^2} \begin{pmatrix} 1 - \frac{1}{4}(\Delta t w)^2 & -\Delta t \\ \Delta t w^2 & 1 - \frac{1}{4}(\Delta t w)^2 \end{pmatrix}$$

et le schéma s'explique alors par la composition :

$$(36) \quad \left\{ \begin{array}{l} u^{j+1} = \frac{1}{1 + (\Delta t w)^2/4} \left[ \left(1 - \frac{(\Delta t w)^2}{4}\right) u^j - \Delta t v^j \right] \\ v^{j+1} = \frac{1}{1 + (\Delta t w)^2/4} \left[ \Delta t w^2 u^j + \left(1 - \frac{(\Delta t w)^2}{4}\right) v^j \right]. \end{array} \right.$$

Les formules restent élémentaires. Elles ne sont plus banales si on se dit qu'en départ, on ne disposait que de l'équation (3) !

## ⑥ Schéma de Heun

- Le schéma de Heun est une variante explicite (dans facile à calculer, sans résoudre de système linéaire) du schéma de Crank-Nicolson. On part de la relation (33) et on refuse le  $w^{j+1}$

du membre de droite. On le remplace par une approximation  $\tilde{w}^{j+1}$  donnée par le schéma d'Euler explicite :

$$(37) \quad \tilde{w}^{j+1} = w^j + \Delta t A \cdot w^j$$

On reporte donc cette valeur à la place de  $w^{j+1}$  dans le membre de droite de l'équation (33). On remplace donc l'équation (33) par

$$(38) \quad w^{j+1} - w^j = \frac{\Delta t}{2} (A w^j + A \cdot \tilde{w}^{j+1})$$

c'est à dire

$$(39) \quad w^{j+1} = (I + \frac{\Delta t}{2} A) w^j + \frac{\Delta t}{2} A \tilde{w}^{j+1}.$$

- on reporte la relation (37) au sens de (39) :

$$\begin{aligned} w^{j+1} &= (I + \frac{\Delta t}{2} A) w^j + \frac{\Delta t}{2} A (w^j + \Delta t A w^j) \\ &= \left[ I + \frac{\Delta t}{2} A + \frac{\Delta t}{2} A (I + \Delta t A) \right] w^j \\ &= \left[ I + \Delta t A + \frac{1}{2} (\Delta t A)^2 \right] w^j \end{aligned}$$

$$(40) \quad w^{j+1} = \left[ I + \Delta t A + \frac{1}{2} \Delta t^2 A^2 \right] w^j.$$

La relation (40) ne demande que de calculer le carré de la matrice  $A$  :

$$A^2 = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ \omega^2 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ \omega^2 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\omega^2 & 0 \\ 0 & -\omega^2 \end{pmatrix}$$

$$(41) \quad A^2 = -\omega^2 I.$$

on en déduit donc

$$(42) \quad w^{j+1} = \begin{pmatrix} 1 - \frac{1}{2} \Delta t^2 w^2 & -\Delta t \\ w^2 \Delta t & 1 - \frac{1}{2} \Delta t^2 w^2 \end{pmatrix} w^j$$

soit

$$(43) \quad \begin{cases} u^{j+1} = (1 - \frac{1}{2} \Delta t^2 w^2) u^j - \Delta t v^j \\ v^{j+1} = w^2 \Delta t u^j + (1 - \frac{1}{2} \Delta t^2 w^2) v^j \end{cases}$$

On peut résumer les schémas mis dans ce chapitre pour l'approximation de  $\frac{dw}{dt} = Aw$ :

Euler explicite  $w^{j+1} = (I + \Delta t A) w^j$

Euler implicite  $w^{j+1} = (I - \Delta t A)^{-1} w^j$

Crank Nicolson  $w^{j+1} = (I - \frac{\Delta t}{2} A)^{-1} (I + \frac{\Delta t}{2} A) w^j$

Huen  $w^{j+1} = (I + \Delta t A + \frac{\Delta t^2}{2} A^2) w^j$ .

Nous remarquons que ce sont des approximations respectivement d'ordre 1, 1, 2, 2 de la solution  $w(t^{j+1})$  qui sont synthétiquement

$$(44) \quad w(t^{j+1}) = e^{\Delta t A} w(t^j)$$

où l'exponentielle  $e^{\Delta t A}$  est définie par la suite

$$(45) \quad e^{\Delta t A} = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{j!} (\Delta t)^j A^j.$$

D, janvier 2005.