

Activité 10

Il est né le divin Euler

J'initialise, je calcule les incréments, j'incrmente, je stocke !

1 Résolution numérique d'une équation différentielle, ou d'un système !

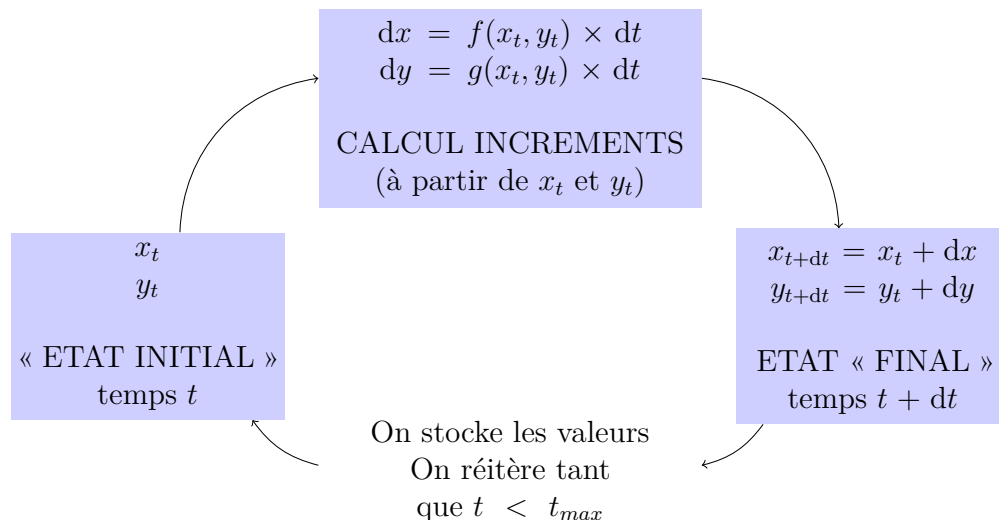
1.1 Méthode d'Euler explicite

C'est la seule méthode explicitement au programme.

a Rappel du principe de la méthode

On peut relativement simplement implémenter la méthode d'EULER en langage python. L'objectif est de déterminer l'évolution temporelle d'un système à partir de conditions initiales pour peu que l'on connaisse les conditions d'évolution de ce système.

Le principe consiste à appliquer un incrément à un jeu de variables :



La principale difficulté réside dans le choix de l'incrément dt de la méthode d'EULER.

- s'il est trop grand, les variations de N sont trop importantes et N peut avoir des valeurs qui deviennent négatives, puis positives, puis négatives... ;
- s'il est trop petit, les calculs peuvent devenir longs (même si les machines « modernes » sont performantes) et des erreurs d'arrondis de calculs peuvent s'accumuler.

On parle, ici, de méthode d'EULER explicite car les incréments pour passer de t à $t + dt$ sont calculés au temps t .

Dans une présentation plus « mathématicienne » des choses, on noterait h le pas d'incrément (équivalent du dt) et on construirait deux suites x_n et y_n telles que :

$$\begin{cases} x_{n+1} = x_n + f(x_n, y_n) \times h \\ y_{n+1} = y_n + g(x_n, y_n) \times h \end{cases}$$

Nos élèves doivent savoir programmer la méthode d'EULER explicite pour une équation différentielle du type : $\frac{dx}{dt} = f(x, t)$.

b Implémentation

A titre personnel, quitte à écrire quelques lignes de code en plus, je conseille d'utiliser une variable « courante » en plus des variables de stockage.

Voici, sur l'exemple de la cinétique d'une réaction successive, comment je code la méthode d'EULER

```

1  import matplotlib.pyplot as plt
2
3  def euler(C0,k1,k2,tmax, dt):
4      # j'initialise
5      a = C0 # les variables courantes
6      b = 0
7      c = 0
8      t = 0
9      A = [a] # les tableaux de stockage
10     B = [b]
11     C = [c]
12     T = [t]
13     while t <= tmax : # la boucle d'itération
14         # je calcule les incréments
15         da = -k1*a*dt
16         db = (k1*a-k2*b)*dt
17         dc = k2*b*dt
18         # j'incrémente
19         a = a + da
20         b = b + db
21         c = c + dc
22         t = t + dt
23         #je stocke
24         A.append(a)
25         B.append(b)
26         C.append(c)
27         T.append(t)
28     #on retourne T, A, B, C
29     return T, A, B, C
30
31 T, A, B, C = euler(1,1,1,5,0.01)
32
33 plt.plot(T,A,'r')
34 plt.plot(T,B,'b')
35 plt.plot(T,C,'g')
36 plt.show()
```

L'intérêt de l'utilisation des variables courantes est d'éviter une erreur de méthode en codant, dans la boucle while quelque chose comme :

```

1      a = a -k1*a*dt
2      b = b + (k1*a-k2*b)*dt
3      c = c + k2*b*dt

```

Ici, la nouvelle valeur de a est calculée à partir de la valeur précédente, par contre b est calculé avec la nouvelle valeur de a et l'ancienne valeur de b . . . ce n'est pas la mort du petit cheval, mais ce n'est pas vraiment une méthode d'EULER explicite.

Pour les gens à l'aise, on peut se contenter uniquement des tableaux. . . voire même de tableaux avec des indices négatifs, ce qui permet de diminuer le nombre de lignes de code.

c Pour les physiciens. . .

En physique, on est souvent amené à résoudre une équation différentielle du second ordre.

Supposons un système défini par sa position x , sa vitesse $v = \frac{dx}{dt}$, son accélération $a = \frac{dv}{dt} = f(x, v, t)$.

L'idée est de remplacer l'équation du second ordre : $a = \frac{d^2x}{dt^2} = f(x, v, t)$ par un système de deux

$$\text{équations : } \begin{cases} v = \frac{dx}{dt} \\ a = f(x, v, t) = \frac{dv}{dt} \end{cases} .$$

Il « suffira » donc, dans l'algorithme d'exprimer les incréments sous la forme : $\begin{cases} dx = v \times dt \\ dv = f(x, v, t) \times dt \end{cases}$

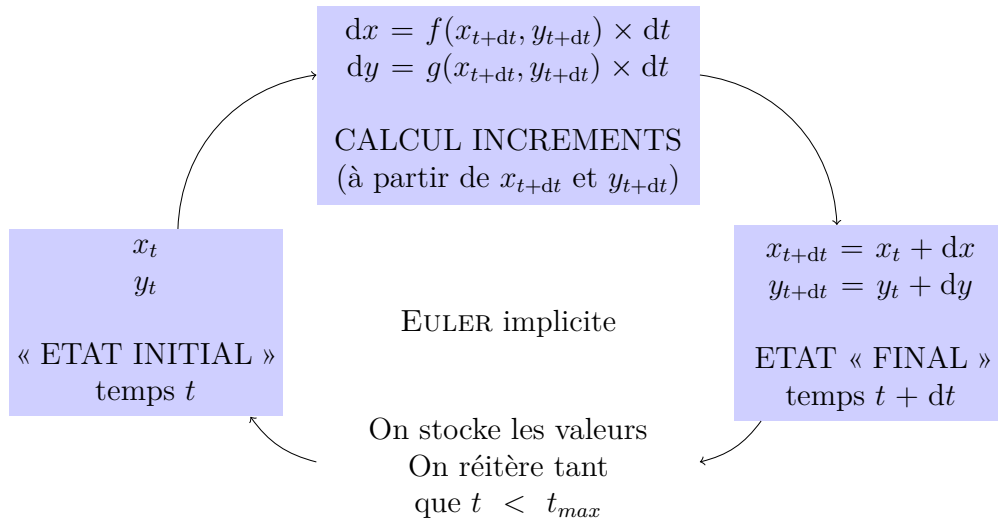
1.2 Quelques remèdes. . .

Parfois la méthode d'EULER explicite diverge (c'est le cas, par exemple de lors de l'étude d'un oscillateur harmonique). On peut alors proposer quelques méthodes alternatives relativement simples à mettre en oeuvre.

a Méthode d'Euler implicite

L'idée est de calculer les incréments, non pas à partir des grandeurs au temps t mais à partir des grandeurs au temps $t + dt$. . . donc, *a priori*, à partir de grandeurs que l'on ne connaît pas !

On peut alors modifier le schéma de la façon suivante :



Une autre présentation consisterait à écrire :
$$\begin{cases} x_{n+1} = x_n + f(x_{n+1}, y_{n+1}) \times h \\ y_{n+1} = y_n + g(x_{n+1}, y_{n+1}) \times h \end{cases}.$$

b Méthode de Runge-Kutta

Une alternative à la méthode d'EULER est la méthode de RUNGE-KUTTA. La méthode la plus « classique » est la méthode d'ordre 4 dite *RK4*.

Pour une équation différentielle du première ordre $\frac{dx}{dt} = f(x, t)$ avec $x(t_0) = x_0$ on a, pour un pas d'intégration h :

$$x_{n+1} = x_n + \frac{h}{6} (k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \text{ avec : } \begin{cases} k_1 = f(x_n, t_n) \\ k_2 = f\left(x_n + \frac{h}{2} \times k_1, t_n + \frac{h}{2}\right) \\ k_3 = f\left(x_n + \frac{h}{2} \times k_2, t_n + \frac{h}{2}\right) \\ k_4 = f(x_n + h \times k_3, t_n + h) \end{cases}.$$

2 Exemples d'application

2.1 L'oscillateur harmonique

On cherche, ici, à résoudre l'équation différentielle : $\frac{d^2x}{dt^2} + \omega^2 x = 0$. Comme précédemment, on se

ramène à un système de deux équations :
$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = v \\ \frac{dv}{dt} = -\omega^2 x \end{cases}.$$

a Méthode d'Euler

1. Ecrire une routine permettant d'intégrer ce système d'équation différentielle à l'aide de la méthode d'EULER. On attend en retour 3 tableaux de valeur : X, V, T (position, vitesse, temps).

2. Appeler cette fonction avec, par exemple, $\omega^2 = 1$, $x_0 = 1$, $v_0 = 0$, une durée maximale de simulation de 100 et un incrément de 0,1 entre deux calculs.
3. Tracer la courbe $X = f(T)$ et conclure !
4. Tracer également le portrait de phase de l'oscillateur.
5. On pourrait se dire que l'on a pris un pas trop grand... tester pour un intervalle de temps de 0,01 ; observe-t-on une amélioration des résultats ?

b Méthode d'Euler implicite

Dans la méthode d'EULER explicite on écrivait : $\begin{cases} x_{t+dt} = x_t + v_t \times dt \\ v_{t+dt} = v_t - \omega^2 \times x_t \times dt \end{cases}$, ou encore $\begin{cases} x_{n+1} = x_n + v_n \times dt \\ v_{n+1} = v_n - \omega^2 \times x_n \times dt \end{cases}$

ou encore, sous forme matricielle : $\begin{pmatrix} x_{n+1} \\ v_{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & h \\ -\omega^2 h & 1 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} x_n \\ v_n \end{pmatrix}$

Dans la méthode d'EULER implicite on doit écrire : $\begin{cases} x_{t+dt} = x_t + v_{t+dt} \times dt \\ v_{t+dt} = v_t - \omega^2 \times x_{t+dt} \times dt \end{cases}$; un calcul est donc nécessaire pour exprimer l'incrément.

On trouve : $\begin{cases} x_{t+dt} = \frac{x_t}{1 + \omega^2 dt^2} + \frac{v_t}{1 + \omega^2 dt^2} \times dt \\ v_{t+dt} = \frac{v_t}{1 + \omega^2 dt^2} - \frac{\omega^2 x_t}{1 + \omega^2 dt^2} \times dt \end{cases}$

ou encore, sous forme matricielle : $\begin{pmatrix} x_{n+1} \\ v_{n+1} \end{pmatrix} = \frac{1}{1 + \omega^2 dt^2} \begin{pmatrix} 1 & h \\ -\omega^2 h & 1 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} x_n \\ v_n \end{pmatrix}$

Reprendre les mêmes questions que précédemment et conclure.

c Méthode de Runge-Kutta

On souhaite écrire la routine résolvant l'équation différentielle de l'oscillateur harmonique par la méthode de RUNGE-KUTTA d'ordre 4.

La suite des valeurs calculés revient donc à : $\begin{cases} t_{n+1} = t_n + h \\ v_{n+1} = v_n + \frac{dt}{6} (a_1 + 2a_2 + 2a_3 + a_4) \\ x_{n+1} = x_n + \frac{dt}{6} (b_1 + 2b_2 + 2b_3 + b_4) \end{cases}$

On montre alors que $\begin{cases} a_1 = -\omega^2 \times x_n \\ b_1 = v_n \\ a_2 = -\omega^2 \times \left(x_n + \frac{b_1}{2}\right) \\ b_2 = v_n + \frac{a_1}{2} \end{cases}$ et $\begin{cases} a_3 = -\omega^2 \times \left(x_n + \frac{b_2}{2}\right) \\ b_3 = v_n + \frac{a_2}{2} \\ a_4 = -\omega^2 \times (x_n + b_3) \\ b_4 = v_n + a_3 \end{cases}$.

Reprendre les mêmes questions que précédemment et conclure.

2.2 Et en chimie...

A vous de jouer, vous en savez plus que moi !