Calcul scientifique
TD1 – 29 janvier 2015

Intégration numérique des équations différentielles ordinaires (1)

Exercice 1 : Stabilité linéaire des schémas d'Euler

On considère une équation différentielle linéaire autonome $\dot{y}(t) = f(y(t)) = -Ay(t)$, pour une matrice A dissipative
$$\langle Ay, y \rangle_{\ell^2} \geq 0, \qquad \forall y \in \mathbb{R}^d,$$
où $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\ell^2}$ désigne le produit scalaire Euclidien dans $\mathbb{R}^d$, la norme Euclidienne étant notée $\|\cdot\|_{\ell^2}$ ainsi que la norme matricielle induite. Notons que l'on ne suppose pas que la matrice A est symétrique.

L'objectif de cet exercice est de prouver des inégalités telles que (1) ci-dessous, qui montrent que les schémas d'Euler implicite et explicite sont stables, avec des constantes de stabilité égales à 1 quelque soit le temps d'intégration T (avec potentiellement des restrictions sur les pas de temps toutefois).

(1) Montrer que l'on peut réécrire le schéma d'Euler implicite $y^{n+1} = y^n + \Delta t\, f(y^{n+1})$ sous une forme explicite : $y^{n+1} = B_{\Delta t} y^n$, pour une matrice $B_{\Delta t}$ que l'on précisera. Indication : pour montrer que la matrice $\mathrm{Id} + \Delta t\, A$ est inversible, on montrera que son noyau est réduit à 0.

(2) Montrer que, quelque soit le pas de temps $\Delta t > 0$, $\|B_{\Delta t}\|_{\ell^2} \leqslant 1$. On pourra considérer $y = B_{\Delta t} x$ et utiliser
$$\langle y - x, y \rangle_{\ell^2} = \frac{1}{2}\|y\|_{\ell^2}^2 + \frac{1}{2}\|y - x\|_{\ell^2}^2 - \frac{1}{2}\|x\|_{\ell^2}^2$$
pour montrer que $\|y\|_{\ell^2} \leqslant \|x\|_{\ell^2}$.

(3) On considère deux suites $y^{n+1} = y^n + \Delta t\, f(y^{n+1})$ et $z^{n+1} = z^n + \Delta t\, f(z^{n+1}) + \Delta t\, \delta^{n+1}$, partant de $y^0 = z^0$. Montrer la propriété de stabilité suivante :
$$\max_{n=1,\dots,N} \|y^n - z^n\|_{\ell^2} \leqslant \Delta t \sum_{n=1}^{N} \|\delta^n\|_{\ell^2}. \tag{1}$$

(4) On considère à présent le schéma d'Euler explicite. Reformuler les itérations de la méthode numérique sous la forme matricielle $y^{n+1} = \widetilde{B}_{\Delta t} y^n$, pour une matrice $\widetilde{B}_{\Delta t}$ que l'on précisera.

(5) On suppose qu'il existe $\gamma > 0$ tel que
$$\langle Ax, x \rangle_{\ell^2} \geq \gamma \|Ax\|_{\ell^2}^2.$$
Montrer que sous la condition $\Delta t \leq 2\gamma$, on a $\|\widetilde{B}_{\Delta t}\|_{\ell^2} \leq 1$ (procéder comme pour le schéma d'Euler implicite en considérant cette fois $\langle y - x, x \rangle_{\ell^2}$). En déduire la stabilité de la méthode numérique.

Exercice 2 : Etude de la stabilité face aux erreurs d'arrondi

Dans les calculs effectués en pratique sur un ordinateur, chaque opération arithmétique est entâchée d'erreurs d'arrondi informatiques liées à la représentation machine des nombres. L'objectif de cet exercice est de quantifier l'impact de l'accumulation de ces erreurs par une analyse de stabilité.

(1) Le premier objectif est de contrôler l'accumulation d'erreurs en général, via une inégalité de Gronwall discrète. Montrer que si une suite $(r_n)_{n\geqslant 0}$ satisfait la relation de récurrence

$$0 \leqslant r_{n+1} \leqslant \delta\Delta t + (1+\Delta t\Lambda) r_n,$$

avec $\delta \geqslant 0$, $\Lambda \geqslant 0$ et $r_0 \geqslant 0$, alors on a la borne supérieure

$$0 \leqslant r_n \leqslant \mathrm{e}^{\Lambda n \Delta t}\Big(r_0 + \Lambda^{-1}\delta\Big).$$

(2) En déduire que si on considère deux suites telles que $y^0 = z^0$ et

$$\begin{cases} y^{n+1} = y^n + \Delta t\, \Phi_{\Delta t}(t_n, y^n), \\ z^{n+1} = z^n + \Delta t\, \Phi_{\Delta t}(t_n, z^n) + \Delta t\, \delta^{n+1}, \end{cases}$$

pour une application $\Phi_{\Delta t}$ uniformément Lipschitzienne

$$|\Phi_{\Delta t}(t, y_1) - \Phi_{\Delta t}(t, y_2)| \leqslant \Lambda |y_1 - y_2|,$$

alors la méthode numérique est stable : il existe une constante $S > 0$ (que l'on précisera en fonction de Λ et $T = N\Delta t$) telle que [1]

$$\max_{1\leqslant n\leqslant N} |y^n - z^n| \leqslant S\,\delta, \qquad \delta = \max_{n=1,\dots,N} |\delta_n|.$$

(3) L'erreur d'arrondi globale est définie comme la différence entre la solution numérique idéale y^n et celle calculée en pratique, notée $\widetilde{y}^n$ dans la suite. Les écarts ont deux origines : les opérations arithmétiques nécessaires à l'évaluation à chaque pas de temps de l'incrément $\Phi_{\Delta t_n}(t_n, \widetilde{y}^n)$ et les opérations arithmétiques liées au calcul de l'itéré suivant. Ainsi, pour une méthode à pas de temps fixes $\Delta t_n = \Delta t$, on peut écrire

$$\widetilde{y}^{n+1} = \widetilde{y}^n + \Delta t\Big(\Phi_{\Delta t}(t_n, \widetilde{y}^n) + \rho_n\Big) + \sigma_n.$$

On suppose que $|\rho_n| \leqslant \rho$ et $|\sigma_n| \leqslant \sigma$. Typiquement, σ est de l'ordre de la précision machine $\varepsilon_{\text{machine}}$ alors que $\rho \sim \kappa\varepsilon_{\text{machine}}$ pour un certain nombre $\kappa > 0$ (appelé conditionnement de la méthode numérique). [2] Montrer que si la méthode numérique est stable, alors

$$\max_{1\leqslant n\leqslant N} |\widetilde{y}^n - y^n| \leqslant S\left(\rho + \frac{\sigma}{\Delta t}\right).$$

(4) L'erreur numérique totale est majorée par la somme de l'erreur d'approximation et de l'erreur d'arrondi :

$$e(\Delta t) = \max_{1\leqslant n\leqslant N} |y(t_n) - y^n| + \max_{1\leqslant n\leqslant N} |\widetilde{y}^n - y^n|.$$

En ne retenant que le terme principal de l'erreur d'arrondi et en supposant que l'erreur d'approximation est d'ordre $C_T\Delta t^p$, on obtient

$$e(\Delta t) = C_T \Delta t^p + \frac{S\sigma}{\Delta t}.$$

Donner le pas de temps optimal pour lequel l'erreur numérique totale est minimale.

1. Noter que l'estimation ci-dessous est du type ℓ^∞/ℓ^∞ et non pas ℓ^∞/ℓ^1 comme dans le cours. Les deux résultats sont toutefois équivalents lorsque le minimum des $|\delta_n|$ est comparable au maximum, ce qui est typiquement le cas pour les erreurs d'arrondi.

2. Pour estimer l'ordre de grandeur de la précision machine, par exemple pour les opérations effectuées sur votre téléphone portable, on peut calculer `(4/3 - 1) * 3 - 1`, qui est de l'ordre de 10^{-16} lorsque les opérations sont effectuées avec le format `double`.

Corrigé

Exercice 1 : Stabilité linéaire des schémas d'Euler

1. Le schéma d'Euler implicite s'écrit $y^{n+1} = y^n - \Delta t\, Ay^{n+1}$, ce qui donne $B_{\Delta t} = (\mathrm{Id}+\Delta t\, A)^{-1}$. La matrice $(\mathrm{Id} + \Delta t A)$ est inversible car son noyau est réduit à $\{0\}$. En effet, si $x \in \mathbb{R}^d$ est tel que $(\mathrm{Id} + \Delta t A)x = 0$, en prenant le produit scalaire avec x et en utilisant la positivité de A, il vient $\|x\|_{\ell^2}^2 = -\Delta t \langle Ax, x\rangle_{\ell^2} \leq 0$ d'où $x = 0$.
2. Montrons que $\|B_{\Delta t}\|_{\ell^2} \leq 1$. Pour cela, nous devons montrer que pour tout $x \in \mathbb{R}^d$, le vecteur $y = B_{\Delta t}x$ est tel que $\|y\|_{\ell^2} \leq \|x\|_{\ell^2}$. En observant que $y - x = -\Delta t Ay$ dont on prend le produit scalaire avec y, on obtient
$$\frac{1}{2}\|y\|_{\ell^2}^2 + \frac{1}{2}\|y-x\|_{\ell^2}^2 - \frac{1}{2}\|x\|_{\ell^2}^2 = \langle y-x, y\rangle_{\ell^2} = -\Delta t\langle Ay, y\rangle_{\ell^2} \leq 0,$$
si bien que $\|y\|_{\ell^2} \leq \|x\|_{\ell^2}$.
3. On commence par noter que
$$y^{n+1} - z^{n+1} = B_{\Delta t}(y^n - z^n) + \Delta t\, B_{\Delta t}\delta^{n+1},$$
ce qui conduit par récurrence à l'expression
$$y^n - z^n = \Delta t \sum_{k=1}^{n} B_{\Delta t}^{n-k+1}\delta^k.$$
En utilisant l'inégalité triangulaire pour le membre de droite ainsi que le fait que $\|B_{\Delta t}\|_{\ell^2} \leq 1$, il vient
$$\max_{1\leq n\leq N} \|y^n - z^n\|_{\ell^2} \leq \Delta t \sum_{k=1}^{N} \left\|\delta^k\right\|_{\ell^2}.$$
4. On voit immédiatement que $\widetilde{B}_{\Delta t} = \mathrm{Id} - \Delta t\, A$.
5. Nous devons montrer que pour tout $x \in \mathbb{R}^d$, le vecteur $y = \widetilde{B}_{\Delta t}x$ est tel que $\|y\|_{\ell^2} \leq \|x\|_{\ell^2}$. En observant que $y - x = -\Delta t Ax$ dont on prend le produit scalaire avec x, on obtient
$$\frac{1}{2}\|y\|_{\ell^2}^2 - \frac{1}{2}\|y-x\|_{\ell^2}^2 - \frac{1}{2}\|x\|_{\ell^2}^2 = \langle y-x, x\rangle_{\ell^2} = -\Delta t\langle Ax, x\rangle_{\ell^2},$$
si bien que
$$\begin{aligned}\frac{1}{2}\|y\|_{\ell^2}^2 - \frac{1}{2}\|x\|_{\ell^2}^2 &= \frac{1}{2}\|y-x\|_{\ell^2}^2 - \Delta t\langle Ax, x\rangle_{\ell^2}\\ &= \frac{1}{2}\Delta t^2\|Ax\|_{\ell^2}^2 - \Delta t\langle Ax, x\rangle_{\ell^2}\\ &\leq \frac{\Delta t}{2\gamma}(\Delta t - 2\gamma)\langle Ax, x\rangle_{\ell^2} \leq 0,\end{aligned}$$
grâce à l'hypothèse faite sur Δt. La stabilité est obtenue comme pour le schéma d'Euler implicite.

Exercice 2 : Etude de la stabilité face aux erreurs d'arrondi

(1) Une récurrence immédiate montre que, pour $n \geqslant 1$,
$$0 \leqslant r_n \leqslant (1+\Lambda\Delta t)^n\, r_0 + \Big(1 + (1+\Lambda\Delta t) + \cdots + (1+\Lambda\Delta t)^{n-1}\Big)\delta\Delta t.$$

Comme

$$1 + (1+\Lambda\Delta t) + \cdots + (1+\Lambda\Delta t)^{n-1} = \frac{(1+\Lambda\Delta t)^n - 1}{\Lambda\Delta t} \leqslant \frac{(1+\Lambda\Delta t)^n}{\Lambda\Delta t},$$

on en déduit que

$$0 \leqslant r_n \leqslant (1+\Lambda\Delta t)^n \left(r_0 + \Lambda^{-1}\delta\right).$$

On conclut en notant que $1+\Lambda\Delta t \leqslant \mathrm{e}^{\Lambda\Delta t}$ et donc $(1+\Lambda\Delta t)^n \leqslant \mathrm{e}^{n\Lambda\Delta t}$.

(2) On considère $r_n = |y^n - z^n|$. Alors $r_0 = 0$ et

$$r^{n+1} \leqslant |y^n - z^n| + \Delta t\, |\Phi_{\Delta t}(t_n, y^n) - \Phi_{\Delta t}(t_n, z^n)| + \Delta t \left|\delta^{n+1}\right| \leqslant (1+\Lambda\Delta t) r_n + \Delta t\, \delta.$$

On obtient donc le résultat voulu avec $S = \mathrm{e}^{\Lambda T}/\Lambda$.

(3) Par définition de la stabilité,

$$\max_{1\leqslant n\leqslant N} |\widetilde{y}^n - y^n| \leqslant S \max_{1\leqslant n\leqslant N} \left|\frac{\sigma_n}{\Delta t} + \rho_n\right| \leqslant S\left(\frac{\sigma}{\Delta t} + \rho\right),$$

ce qui donne le résultat.

(4) On voit que $e(\Delta t) \to +\infty$ lorsque $\Delta t \to 0$ ou $\Delta t \to +\infty$. On calcule

$$e'(\delta) = pC_T\, \delta^{p-1} - \frac{S\sigma}{\delta^2},$$

d'où on déduit qu'il existe un seul point pas de temps critique (*i.e.* $e'(\Delta t_{\mathrm{opt}}) = 0$), qui est nécessairement associé à un minimum global de l'erreur. Un calcul simple montre que

$$\Delta t_{\mathrm{opt}} = \left(\frac{S\sigma}{pC_T}\right)^{1/(p+1)}.$$