ENSIMAG 1ère année, 2005-2006

TP Méthodes Numériques

Objectifs

Les objectifs de ce TP sont :

- d'étudier et de comprendre deux méthodes numériques : d'une part, l'intégration numérique (partie 1), d'autre part, des méthodes de résolution des équations différentielles (partie 2) ;
- d'utiliser un logiciel de calcul scientifique, *Scilab*, pour implémenter et résoudre les algorithmes et visualiser les résultats ;
- de valider cette méthode numériquement.

Compte rendu

Vous devez rédiger un compte-rendu de TP dans lequel vous répondrez à toutes les questions de l'énoncé, expliciterez les méthodes employées, présenterez et commenterez les résultats obtenus. La qualité de la rédaction, de la synthèse, de l'analyse des résultats obtenus sont des critères importants pour la note.
La dernière page de votre compte-rendu devra être une sorte de manuel d'utilisation où vous expliquerez comment utiliser vos programmes.

Le compte-rendu sera **dactylographié**, de préférence avec le logiciel LaTeX (vous aurez à votre disposition un fichier de réponses). Ce compte-rendu **n'excèdera pas 10 pages** et ne comportera **pas de programmes** !
Vous me ferez également parvenir vos fichiers *Scilab* : la lisibilité du code et la pertinence des commentaires seront pris en compte.

Le TP est à rendre **au plus tard le vendredi 24 Février 2006, à 17h00** : votre compte-rendu imprimé dans le casier prévu à cet effet, et vos fichiers *Scilab* par mail dans un fichier `Nom1Nom2.tar` ou dans une archive `Nom1Nom2.zip`.
Tout retard devra m'être justifié en personne.

Modalités pratiques

Ce TP est à réaliser en **binôme**. Aucun trinôme n'est accepté.

Pour toute question, commentaire ou demande de précisions, vous avez trois solutions :

- La page web du TP, accessible depuis le Kiosk de l'Ensimag.
- Le mail tous les jours, à toute heure.
- Vous pouvez aussi venir me voir à l'Ensimag, où j'assurerai une permanence. L'horaire sera indiqué sur le Kiosk.

C. Lucas
Carine.Lucas@imag.fr

1 Exercices

On considère une fonction f définie sur $[a, b]$ et on souhaite approcher $\int_a^b f(s)\,ds$.
Soit $a = t_1 < t_2 < \cdots < t_{n+1} = b$ une subdivision uniforme de l'intervalle $[a, b]$.
On note $dt = t_i - t_{i-1} = \frac{b-a}{n}$.

1.1 La méthode des trapèzes

On approche l'intégrale par la surface des trapèzes bâtis sur les cordes :

$$\int_a^b f(s)\,ds \simeq \frac{dt}{2}\left[f(t_1) + f(t_{n+1})\right] + dt \sum_{i=2}^{n} f(t_i).$$

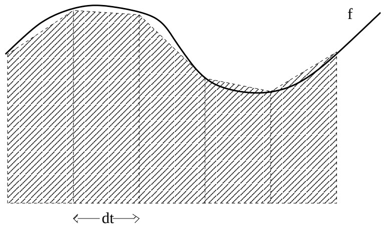

FIG. 1 – Méthode des trapèzes

Question 1.1 *Programmer une fonction* `trapeze` *qui calcule une approximation par la méthode des trapèzes de l'intégrale d'une fonction sur un intervalle.*

Question 1.2 *L'intégrale exacte de la fonction* $f(t) = \sqrt{1 + e^t}$ *sur l'intervalle [0,2] est :*

$$\int_0^2 \sqrt{1+e^t}\,dt = 2\left(\sqrt{1+e^2} - \sqrt{2}\right) + \ln\left(\frac{\sqrt{2}+1}{\sqrt{2}-1}\right) + \ln\left(\frac{\sqrt{1+e^2}-1}{\sqrt{1+e^2}+1}\right) \backsimeq 4.006994.$$

En calculant cette intégrale pour plusieurs subdivisions, étudier l'effet du nombre d'intervalles n sur l'erreur de calcul.

On note maintenant

$$S_k(dt) = \frac{dt}{2}\left[f(t_1) + f(t_k)\right] + dt \sum_{i=2}^{k-1} f(t_i)$$

pour $2 \leq k \leq n+1$ (approximation de l'intégrale de f sur $[a, t_k]$).

Question 1.3 *Donner une formule de récurrence sur S_k.*

Question 1.4 *Programmer une fonction* `trapeze2` *qui calcule l'approximation par la méthode des trapèzes de l'intégrale d'une fonction sur un intervalle en utilisant cette formule de récurrence.*

Question 1.5 *Comparer* `trapeze` *et* `trapeze2` *dans les cas suivants :*

- *si on veut calculer $\int_a^b f(s)\,ds$*
- *si on veut calculer tous les termes $\int_a^{t_k} f(s)\,ds$ pour $k = 2, \ldots n+1$.*

1.2 La méthode de Simpson

La méthode de Simpson repose sur l'interpolation de f entre a et b par une parabole, sur les valeurs a, b, $\frac{a+b}{2}$. Plus précisément, on cherche un polynôme P de degré inférieur ou égal à 2 tel que : $f(a) = P(a)$, $f(b) = P(b)$ et $f\left(\frac{a+b}{2}\right) = P\left(\frac{a+b}{2}\right)$. On trouve :

$$\int_a^b f(s)\,ds \simeq \frac{b-a}{6}\left[f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b)\right].$$

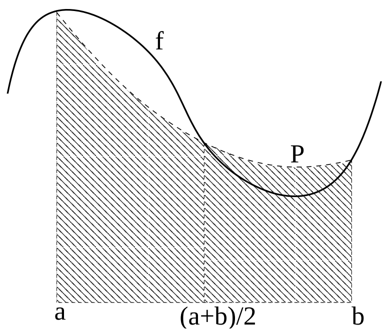

FIG. 2 – Méthode de Simpson

Cette méthode peut être améliorée en utilisant une subdivision uniforme de pas $dt = \frac{b-a}{n}$, où n est pair. Avec les notations introduites au début, on a :

$$\int_a^b f(s)\,ds = \int_{t_1}^{t_3} f(s)\,ds + \int_{t_3}^{t_5} f(s)\,ds + \cdots + \int_{t_{n-1}}^{t_{n+1}} f(s)\,ds.$$

On applique la formule ci-dessus pour les i pairs :

$$\int_{t_{i-1}}^{t_{i+1}} f(s)\,ds = \frac{2dt}{6}\left[f(t_{i-1}) + 4f(t_i) + f(t_{i+1})\right],$$

et on obtient :

$$\int_a^b f(s)\,ds \simeq \frac{dt}{3}\left[f(t_1) + f(t_{n+1}) + 4\sum_{\substack{i=2\\ i \text{ pair}}}^{n} f(t_i) + 2\sum_{\substack{i=3\\ i \text{ impair}}}^{n-1} f(t_i)\right],$$

c'est la formule de Simpson.

Question 1.6 *Programmer une fonction* `simpson` *qui calcule une approximation par la méthode de Simpson de l'intégrale d'une fonction sur un intervalle.*

Question 1.7 *Donner les valeurs de l'intégrale de* $f(t) = \sqrt{1+e^t}$ *sur l'intervalle [0,2] pour* $n = 2$; 4 ; 8 *et* 16.

On note

$$\widetilde{S}_{k+1}(dt) = \frac{dt}{3}\left[f(t_1) + f(t_{k+1}) + 4\sum_{\substack{i=2\\ i \text{ pair}}}^{k} f(t_i) + 2\sum_{\substack{i=3\\ i \text{ impair}}}^{k-1} f(t_i)\right] \qquad k \text{ pair}$$

pour $2 \leq k \leq n$, (intégrale de f sur $[a, t_{k+1}]$), $\widetilde{S}_1(dt) = 0$.

Question 1.8 *Donner une formule de récurrence sur* $\widetilde{S}_{k+1}$.

Question 1.9 *Programmer une fonction* `simpson2` *qui calcule l'approximation par la méthode de Simpson de l'intégrale d'une fonction sur un intervalle en utilisant cette formule de récurrence.*

On souhaite maintenant modifier ces fonctions pour étudier le cas où n est impair. Dans la fonction `simpson` il faut rajouter la valeur de l'intégrale $\int_{t_n}^{t_{n+1}} f(s)\, ds$, que l'on approchera par la méthode des trapèzes : $\frac{dt}{2}\left[f(t_{n+1}) + f(t_n)\right]$.

Question 1.10 *Modifier la fonction* `simpson` *pour tenir compte du cas n impair.*

Si on considère maintenant la formule de récurrence, c'est $\widetilde{S}_2$ qu'il faut donner, et la formule de récurrence permettra de calculer tous les $\widetilde{S}_{2k}$.
On fait la même approximation que précédemment : $\widetilde{S}_2(dt) = \frac{dt}{2}\left[f(t_1) + f(t_2)\right]$.

Question 1.11 *Modifier la fonction* `simpson2` *pour tenir compte du cas impair.*

Question 1.12 *Comme dans le cas de la formule des trapèzes, comparer* `simpson` *et* `simpson2`*.*

2 Modèle de population de Volterra

2.1 Introduction

Vito Volterra (1860-1940), mathématicien italien (cf [1]), a principalement étudié les modèles "proies-prédateurs", à la suite d'un problème de pêche dans la mer Adriatique.
Le cas le plus simple est celui d'un organisme asexué qui se reproduit et qui est insensible à l'âge. Son comportement ne change pas au cours du temps, ni en fonction du nombre d'organismes.
La quantité $p(t)$ peut représenter le nombre d'individus, ou bien le poids total, le poids total de certaines parties ou toute autre mesure de la quantité de vie. Sous ces conditions, si α est le taux intrinsèque de croissance de la population, on a : $\frac{dp(t)}{dt} = \alpha p(t)$, donc $p(t) = p_0 \exp(\alpha t)$.
Dans ce modèle, les ressources environnementales sont illimitées. On peut cependant considérer une capacité environnementale finie en prenant pour α une fonction décroissante de p, par exemple une fonction linéairement décroissante avec p : c'est l'équation de Verhulst-Pearl $\frac{dp(t)}{dt} = \alpha(p)p(t) = (a - bp(t))\, p(t)$, souvent appelée équation logistique.
Si on considère des mécanismes spécifiques affectant la reproduction ou la mortalité, on a des relations beaucoup plus complexes. Dans la suite, nous allons étudier un environnement complètement clos, comme des micro-organismes confinés dans un tube à essais. La quantité de nutriments disponibles diminue au cours du temps, proportionnellement à la quantité totale de métabolisme qui a lieu dans le tube depuis le début de l'expérience. Le métabolisme total détermine également la concentration de déchets ou de toxines dans le milieu.
Pour simplifier, supposons que l'activité métabolique de la population soit directement proportionnelle au nombre d'individus, et que la quantité de métabolisme affecte linéairement le coefficient de croissance α. Ce système peut être représenté par l'équation intégro-différentielle

$$\begin{cases} p(0) = p_0 \\ \dfrac{dp}{dt} = ap - bp^2 - cp \int_0^t p(\tau)\, d\tau \end{cases} \tag{1}$$

où :

- $a > 0$ est le taux de naissances,
- $b > 0$ est le coefficient de compétition interne à l'espèce,
- $c > 0$ est le coefficient de toxicité de la toxine,
- $p_0 \geq 0$ est la population initiale.

On se propose d'étudier l'évolution du modèle (1) en fonction des paramètres a, b, c et de la donnée initiale p_0.
Pour ramener au minimum le nombre de paramètres qui sont effectivement significatifs dans le modèle, on introduit les variables adimensionnelles :

$$s = \frac{c}{b}t,\ u(s) = \frac{b}{a}p(t) \text{ et on note } \kappa = \frac{c}{ab}.$$

On considèrera que κ est une constante d'ordre 1.

Question 2.1 *Montrer que le système (1) se réécrit en fonction de ces nouvelles variables :*

$$\begin{cases} u(0) = u_0 = \dfrac{b}{a} p_0 \\ \kappa \dfrac{du}{ds} = u - u^2 - u \int_0^s u(\sigma)\, d\sigma. \end{cases} \tag{2}$$

Question 2.2 *Rechercher les solutions stationnaires (solutions qui ne dépendent pas du temps) de (2).*

Question 2.3 *Donner l'expression de la solution analytique du système (2).*

Avant d'étudier ce système plus en détails, nous allons voir comment on peut l'exprimer sous la forme d'un système différentiel ordinaire pour déduire l'existence et l'unicité de solutions du système initial.

2.2 Réduction à un système différentiel ordinaire

On va ramener (2) à un système différentiel classique en posant $y = \ln u$.

Question 2.4 *Montrer qu'après plusieurs étapes, le système (2) s'écrit :*

$$\begin{cases} x' = -\dfrac{x+1}{\kappa} u \\ u' = xu, \end{cases} \tag{3}$$

avec les conditions initiales

$$\begin{cases} x(0) = \dfrac{1-u_0}{\kappa} \\ u(0) = u_0, \end{cases} \tag{4}$$

où $x = y'$ est le taux de variation relatif de u.

Question 2.5 *En utilisant un théorème du cours, étudier l'existence et l'unicité de solutions de (3)-(4). On admettra que cette solution est globale en temps.*

Question 2.6 *Programmer la résolution numérique de ce système.*

2.3 Approche numérique directe

On considère le système (2) sous l'angle de l'approximation numérique.

Question 2.7 *Montrer que le problème (2) peut être vu sous une forme symbolique comme :*

$$\begin{cases} u' = f(s,u) \\ u(0) = u_0. \end{cases}$$

On va appliquer à ce problème les schémas numériques courants.
Soit h un pas de temps et $s_n = nh$ $(n \in \mathbb{N})$ des points de discrétisation en temps.

2.3.1 Méthode d'Euler

L'analogue de la méthode d'Euler consisterait à approcher la solution à l'aide de la suite

$$u_{n+1} = u_n + h\widetilde{f}(s_n, u_n) = u_n + h\frac{u_n}{\kappa}\left(1 - u_n - \int_0^{s_n} u_n(\sigma)\, d\sigma\right).$$

Question 2.8 *Ecrire une fonction* `Euler` *qui calcule $(u_n)_{n\in\mathbb{N}}$ en utilisant dans l'égalité ci-dessus la formule des trapèzes ou la formule de Simpson, au choix de l'utilisateur.*

On peut améliorer cette méthode en utilisant un schéma prédicteur-correcteur : le prédicteur u^p_{n+1} est obtenu par la formule ci-dessus et permet de calculer le correcteur. On a donc :

$$\begin{cases} u^p_{n+1} = u_n + h\dfrac{u_n}{\kappa}\left(1 - u_n - \int_0^{s_n} u_n(\sigma)\, d\sigma\right) \\ u_{n+1} = u_n + \dfrac{h}{2}\left(f(s_n, u_n) + f(s_{n+1}, u^p_{n+1})\right). \end{cases}$$

On appellera cette méthode “Euler modifiée”.

Question 2.9 *Programmer Euler modifiée.*

2.3.2 Méthode de Runge-Kutta d'ordre 4

On peut également utiliser la méthode de Runge-Kutta d'ordre 4 (RK4) pour passer de u_n à u_{n+1}. On définit :

$$\begin{aligned}
k_1 &= hf(s_n, u_n) \\
u^p_{n+\frac{1}{2}} &= u_n + \frac{k_1}{2} \\
k_2 &= hf\left(s_{n+\frac{1}{2}}, u^p_{n+\frac{1}{2}}\right) \\
u^c_{n+\frac{1}{2}} &= u_n + \frac{k_2}{2} \\
k_3 &= hf\left(s_{n+\frac{1}{2}}, u^c_{n+\frac{1}{2}}\right) \\
u^p_{n+1} &= u_n + k_3 \\
k_4 &= hf\left(s_{n+1}, u^p_{n+1}\right) \\
u_{n+1} &= u_n + \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4).
\end{aligned}$$

Question 2.10 *Comme précédemment avec la méthode d'Euler, programmer la méthode RK4.*

2.4 Résultats et conclusions

On prendra $\kappa = 0.1$ et $u_0 = 0.1$.

Question 2.11 *Tracer les courbes obtenues avec les différentes méthodes, les comparer, commenter et interpréter les resultats.*
(Remarque : la détermination du temps où u atteint son maximum peut être utile si on envisage de récolter la population)

Question 2.12 *Avec le menu "GUI and Dialogs" de l'aide de Scilab, créer une interface graphique qui permette de choisir les méthodes, qui fasse bien apparaître la distinction entre les étapes de calcul et les tracés. Cette interface doit permettre de répondre à la majorité des questions numériques de ce TP.*

Question 2.13 *Conclusions personnelles sur ce TP : intérêt, difficultés rencontrées, temps de travail, planning ...*

Références

[1] Francesco M. Scudo, *Vito Volterra and theoretical ecology*, Theoretical Population Biology, 2 (1971), pp.1-23.