Méthodes numériques

Résolution numérique des équations différentielles ordinaires

Resp. : Jean-Christophe Robinet

Laboratoire DynFluid
Arts & Métiers – ParisTech
Jean-Christophe.Robinet@ensam.eu
Xavier.Merle@ensam.eu

Janvier 2011

Définitions générales

Les équations différentielles ordinaires, ou ODEs en anglais (pour « ordinary differential equations »), sont des équations mettant en jeu une fonction y de la variable x et au moins l'une de ses dérivées. Elles sont de la forme

$$\mathcal{F}\left(\frac{d^n y}{dx^n}n, \frac{d^{n-1} y}{dx^{n-1}}n-1, \cdots, y' \equiv \frac{dy}{dx}, y, g(x), x\right) = 0$$

où g est une fonction de x (n est l'ordre de l'équation). La forme la plus simple sur laquelle nous discuterons largement dans ce cours est

$$\frac{dy}{dx} = f(y, x)$$

où f englobe toute forme explicite de x et de y. Elle représente en fait, dans le plan $(x\,;\,y)$, le champ des pentes de la fonction y.

Définitions générales

On trouve également des systèmes d'équations différentielles ordinaires où il y a $\mathcal{F}_i$ fonctions du même type. Un tel système s'écrit

$$\begin{cases} \mathcal{F}_1\left(\dfrac{d^{n_1}y_1}{dx^{n_1}}, \dfrac{d^{n_1-1}y_1}{dx^{n_1-1}}, \cdots, y_1' \equiv \dfrac{dy_1}{dx}, y_1, g_1(x), x\right) = 0 \\ \mathcal{F}_2\left(\dfrac{d^{n_2}y_2}{dx^{n_2}}, \dfrac{d^{n_2-1}y_2}{dx^{n_2-1}}, \cdots, y_2' \equiv \dfrac{dy_2}{dx}, y_2, g_2(x), x\right) = 0 \\ \ldots \\ \mathcal{F}_N\left(\dfrac{d^{n_N}y_N}{dx^{n_N}}, \dfrac{d^{n_N-1}y_N}{dx^{n_N-1}}, \cdots, y_N' \equiv \dfrac{dy_N}{dx}, y_N, g_N(x), x\right) = 0 \end{cases}$$

Son ordre est l'ordre le plus élevé, soit $\sup\{n_i\}$.

Remarques

Du point de vue purement mathématique, plusieurs fonctions y (souvent une infinité) peuvent être solutions des équations précédentes. Toutefois, les solutions mathématiques ne correspondront pas forcément à la situation physique recherchée. Pour le Physicien, il s'agira de sélectionner les fonctions qui satisfont un certain nombre de contraintes appelées *conditions aux limites*, par exemple une condition sur la valeur de la fonction et/ou la valeur de sa ou ses dérivée(s) en certains points de intervalle d'étude $[a; b]$. Pour une équation différentielle ordinaire d'ordre n (ou un système de n équations d'ordre 1), il faut nécessairement n conditions aux limites pour définir une solution $y(x)$. Compte-tenu de ces contraintes imposées par le modèle physique, il pourra finalement ne pas exister de solution au problème posé ou, mieux, en exister une et une seule. Dans certains cas, les solutions resteront dégénérées (*i.e.* multiples).

Méthode du « Splitting »

Quand l'ordre n de l'équation différentielle est strictement supérieur à 1, on aura fortement intérêt (du moins dans l'objectif d'une recherche de solutions numériques) à former un système de n équations différentielles du premier ordre. Ceci est toujours réalisable en faisant appel à $n-1$ fonctions intermédiaires y_j , par exemple en posant

$$\frac{dy_{j-1}}{dx} \equiv y_j, \;\; j = 1, n-1$$

avec $y_0 \equiv y$. On réalise alors un « *splitting* ». Par exemple, l'équation non-linéaire du second ordre à coefficients non constants

$$f'' + f' - xf = \sin(x)$$

se ré-écrira sous la forme d'un système couplé

$$\left\{ \begin{array}{lcl} y_1' & = & xy_0 - y_1 + \sin(x) \\ y_0' & = & y_1 \end{array} \right.$$

avec $y_0 \equiv f$.

Méthode du « Splitting »

On peut voir le problème de résolution d'une équation différentielle ordinaire comme un problème d'intégration et l'on peut légitimement envisager d'utiliser les méthodes dédiées au calcul des quadratures. En effet, la relation $dy/dx = f(y,x)$ s'écrit aussi

$$y(x) = \int_a^x f(x', y)\,dx' + y(a),$$

Toutefois, une différence fondamentale est que la fonction y n'est pas connue au préalable. La forme implicite de la relation (f dépend de y !) rend en principe impossible le calcul directe de y de cette manière. Dans la majorité des techniques, la construction de y se fera de proche en proche, à partir d'un point de départ $(a\,;\,y(a))$ ou d'un point d'arrivée $(b\,;\,y(b))$. Tout la difficulté sera alors de calculer le plus précisément possible l'incrément δ_i, permettant de passer de y_i à y_{i+1}, soit

$$y_{i+1} = y_i + \delta_i$$

Les conditions aux limites

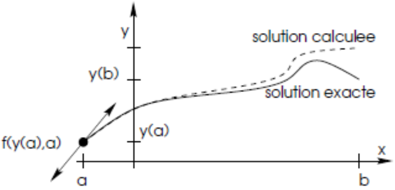
Valeurs initiales et valeurs aux frontières

On distingue habituellement deux classes de problèmes selon l'endroit de l'intervalle d'étude $[a; b]$ où s'appliquent les conditions aux limites :

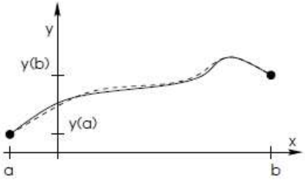
- les problèmes aux conditions initiales ou encore IVPs (pour « Initial Value Problems » en anglais). Dans ce cas, les conditions aux limites sont imposées au même endroit, en $x = a$ ou en $x = b$.
- les problèmes aux conditions aux contours encore appelés (T)BVPs (pour « (Two) Boundary Value problems » en anglais). Les contraintes sont cette fois données à deux endroits différents (au moins), en a et en b.

Les conditions aux limites

Valeurs initiales et valeurs aux frontières



Conditions initiales.



Conditions aux frontières.

- Dans toute approche numérique, la résolution de problème, aussi propre soit-elle, ne donnera jamais la solution exacte, mais une solution approchée, entachée en chaque point d'une certaine erreur $\Delta y(x)$. Le choix de la méthode d'intégration sera alors guidé par la recherche d'un compromis entre rapidité et précision.
- Dans un problème aux conditions initiales, on aura facilement tendance à s'écarter de la solution exacte (généralement inconnue), d'autant plus que l'intervalle d'intégration sera grand et que la fonction présentera de fortes variations.
- Dans un problème aux conditions aux contours, la solution étant contrainte de part et d'autre de l'intervalle $[a; b]$, les écarts à la solution exacte seront généralement moindres, et les erreurs seront soit localisées dans les régions de fortes variations, soit distribuées sur tout l'intervalle.

- Les conditions aux limites qui portent sur la fonction sont dites de conditions Dirichlet.
- Lorsqu'elles portent sur la dérivée, on parle de conditions de Neumann.
- On peut bien sûr rencontrer des situations où les deux types de sconditions co-existent.

Une condition aux limites s'écrit de manière générale

$$\mathcal{C}\left(y, \frac{dy}{dx}, x, c(x)\right) = 0 \text{ en } x = a, b$$

où $c(x)$ est une fonction quelconque.

Problème de Cauchy

L'équation différentielle (ou système différentiel) suivant

$$\begin{cases} \dfrac{dy}{dt} = f(t, y) \\ y(a) = \eta \end{cases}$$

est un problème dit de Cauchy.

Définition 1.1

Soit $[a; b]$ un intervalle réel, η est un élément de $\mathbb{R}^m$ ($m \in \mathbb{N}$) et f une application de $[a; b] \times \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^m$. Une solution du problème de Cauchy ci-dessus est une application dérivable y de $[a; b] \rightarrow \mathbb{R}^m$ telle que

$$\forall t \in [a; b], \;\; y'(t) = f(t, y(t)) \;\; y(a) = \eta$$

Remarque : l'existence et l'unicité de la solution n'est pas garantie.

Problème de Cauchy

Définition 1.2

La fonction $f : [a;b] \times \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}^m$ est lipschitzienne en y et uniforme en t s'il existe une constante $L > 0$ telle que

$$\forall t \in [a;b],\ \forall y_1, y_2 \in \mathbb{R}^m, \|f(t,y_1) - f(t,y_2)\| \leq L\|y_1 - y_2\|$$

L est appelée constante de Lipschitz de f.

Théorème 1.1 (Cauchy - Lipschitz)

Si la fonction $f : [a;b] \times \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}^m$ vérifie les hypothèses

1. *f est continue sur $[a;b] \times \mathbb{R}^m$;*
2. *f est lipschizienne en y uniformement en t.*

Alors le problème de Cauchy admet une solution unique de classe $\mathcal{C}^1$.

On supposera par la suite que ces hypothèses sont vérifiées.

But de ce cours : résoudre ce type d'équation par voie numérique.

Méthodes à pas séparés

On considère une suite de points équidistants de $[a; b]$. $\forall n \in \{0, 1, \cdots, N\}$, $t_n = a + nh$ où $h = (b - a)/N$ est le pas d'intégration.

Deux familles de méthodes existent :

- Les méthodes à pas séparés : $y_{n+1} = f(y_n, h)$;
- Les méthodes à pas liés : $y_{n+1} = f(y_n, y_{n-1}, \cdots, y_{n-k}; h)$.

Commençons par les méthodes à pas séparés.
Cette méthode permet de résoudre tout type de problème, scalaire ($m = 1$), vectoriel ($m \neq 1$), linéaire ou non-linéaire.

Méthodes à pas séparés

Le schéma d'Euler

La méthode d'intégration la plus intuitive et la plus simple aussi est la méthode d'Euler qui reprend la notion de taux d'accroissement sans passage à la limite, soit

$$y_{i+1} = y_i + hf(t_i, y_i), \ \ i \in \{0, \cdots, N-1\}, \ \ y_0 = \eta \text{ fixé}$$

où l'on a posé $h = t_{i+1} - t_i$.

- On peut évidemment voir la relation ci-dessus comme le développement de Taylor de y à l'ordre le plus bas. Elle implique un schéma aux différences finies. L'incrément est très simple à calculer : $\delta_i = hf(y_i; t_i)$.
- Notez qu'il n'est pas spécifié ici que les points de la grille, c'est-à-dire les t_i, soient tous équidistants. On peut en effet choisir, selon la variation locale de la fonction y que l'on est en train de calculer, de réduire l'intervalle, ou de l'agrandir. On réalise alors une méthode au pas adaptatif.

Remarques :

1. f vérifie les hypothèses du théorème de Cauchy-Lipschitz ;
2. f est de classe $\mathcal{C}^1\left([a;b]\times\mathbb{R}\right)$ alors la solution du problème est de classe $\mathcal{C}^2\left([a;b]\right)$.

On cherche a majorer l'erreur du schéma : $e_n = y(t_n) - y_n$. On peut montrer que :

$$\mid e_n \mid \leq \frac{M}{2}\frac{e^{(b-a)L}-1}{L}h$$

où $M = \max_{t\in[a;b]} \mid y''(t) \mid$ et L est la constante de Lipschitz.

L'erreur est donc d'ordre 1 : $\mathcal{O}(h)$.

L'approximation est meilleure si la dérivée est calculée au milieu de l'intervalle, d'où le schéma d'Euler modifié :

$$\left\{\begin{array}{lcl} y_{n+1} & = & y_n + hf\left(t_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2} f(t_n, y_n)\right) \\ y_0 & = & \eta \end{array}\right.$$

La formule de récurrence peut se décomposer sous la forme :

$$\left\{\begin{array}{lcl} k_1 & = & f(t_n, y_n) \\ k_2 & = & f(t_n + \frac{h}{2}, y_n + hk_1) \\ y_{n+1} & = & y_n + hk_2 \end{array}\right.$$

On peut montrer que ce schéma est d'ordre 2.

D'une façon générale les méthodes à pas séparés s'écrivent plus généralement :

$$\left\{ \begin{array}{lcl} y_{n+1} & = & y_n + h\phi\left(t_n, y_n; h\right) \\ y_0 & = & \eta \end{array} \right.$$

où ϕ est un application de $[a; b] \times \mathbb{R}^m \times]0; h_0]$ dans $\mathbb{R}^m$ et qui ne dépend que de f.

Définition 2.1 (Consistance)

Une méthode à pas séparés est consistante si pour toute fonction f

$$\forall t \in [a; b], \forall y \in \mathbb{R},\ \ \phi(t, y, 0) = f(t, y)$$

En d'autres termes, un schéma de discrétisation est consistant quand celui-ci tend vers la formulation continue lorsque le pas de discrétisation tend vers zéro.

Cela revient à dire que la formulation discrète de l'EDO correspond bien à la formulation continue de l'EDO.

On considère les deux suites $(y_n)_{n\in\{0,\cdots,N\}}$ et $(z_n)_{n\in\{0,\cdots,N\}}$ définies par

$$\boxed{1}\left\{\begin{array}{lcl} y_{n+1} & = & y_n + h\phi\left(t_n, y_n; h\right) \\ y_0 & = & \eta \end{array}\right. \quad \boxed{2}\left\{\begin{array}{lcl} z_{n+1} & = & z_n + h\left[\phi\left(t_n, z_n; h\right) + \varepsilon_n\right] \\ z_0 & = & \eta \end{array}\right.$$

$\boxed{2}$ est le schéma $\boxed{1}$ perturbé par ε_n.

Définition 2.2 (Stabilité)

La méthode à pas séparés est stable s'il existe deux constantes positives M_1 et M_2 indépendantes de h, telles que :

$$\max_{n\in\{0,\cdots,N\}} \mid y_n - z_n \mid \leq M_1 \mid y_0 - z_0 \mid + M_2 \max_{n\in\{0,\cdots,N\}} \mid \varepsilon_n \mid .$$

Ceci signifie que la méthode est peu sensible aux erreurs (de méthode, de données, de troncature).

Définition 2.3 (Convergence)

Une méthode à pas séparés est convergente si

$$\forall \varepsilon > 0, \exists h_0 \textit{ tel que } (\mid y_0 - \eta \mid \leq h_0 \textit{ et } h \in [0; h_0]) \Rightarrow \max_{0 \leq n \leq N} \mid y(t_n) - y_n \mid \leq \varepsilon$$

Ceci signifie que l'on peut obtenir une solution approchée aussi voisine que l'on veut de la solution exacte si l'on prend un pas assez petit.

Théorème 2.1

Si une méthode à pas séparés est stable et consistante alors elle est convergente.

Théorème 2.2

Si une méthode à pas séparés est consistante et si ϕ est lipschitzienne en y alors la méthode est stable et donc convergente.

- On appelle erreur de méthode : $e_n = y(t_n) - y_n$
- On appelle erreur locale : $\epsilon = y(t+h) - y(t) - h\phi(t, y(t); h)$. C'est l'erreur que l'on commet en faisant un pas par la méthode ϕ en partant de la valeur exacte de la solution.

Définition 2.4

La méthode est d'ordre p ($p \in \mathbb{N}^\star$) si, pour toute fonction f de classe $\mathcal{C}^p$ au moins et pour toute solution y de $y_0 = f(t, y)$, il existe une constante positive C dépendante de f mais ni de t, ni de h et telle que

$$\max_{a \leq t \leq b} \mid \epsilon(t; h) \mid \leq Ch^{p+1}$$

Théorème 2.3 (de Taylor)

On suppose que :

1. f *est de classe* $\mathcal{C}^p$ *;*
2. ϕ, $\dfrac{\partial \phi}{\partial h}, \cdots, \dfrac{\partial^p \phi}{\partial h^p}$ *sont continues sur* $[a;b] \times \mathbb{R}^m \times]0;h_0]$.
   Une condition nécessaire et suffisante pour que la méthode soit d'ordre p *est que, pour tout* $(t,y) \in [a;b] \times \mathbb{R}$*, on ait*

$$\left\{\begin{array}{lcl} \phi(t,y,0) & = & f^{(0)}(t,y) \\ \dfrac{\partial \phi}{\partial h}(t,y,0) & = & \dfrac{1}{2} f^{(1)}(t,y) \\ \vdots & = & \vdots \\ \dfrac{\partial^{p-1} \phi}{\partial h^{p-1}}(t,y,0) & = & \dfrac{1}{p} f^{(p-1)}(t,y) \end{array}\right. \quad \text{où l'on a posé} \quad \left\{\begin{array}{lcl} f^{(0)} & = & f \\ f^{(1)} & = & \dfrac{\partial f}{\partial t} + f \dfrac{\partial f}{\partial y} \\ \vdots & = & \vdots \\ f^{(k)} & = & \dfrac{\partial^{(k-1)} f}{\partial t^{(k-1)}} + f \dfrac{\partial^{(k-1)} f}{\partial y^{(k-1)}} \end{array}\right.$$

Théorème 2.4

Si la méthode est d'ordre p *et si* ϕ *est lipschitzienne en* y *de constante* L_ϕ *alors*

$$| e_n | \leq | e_0 | e^{nhL_\phi} + \frac{e^{nhL_\phi} - 1}{L_\phi} Ch^p$$

Méthodes à pas séparés

Schéma de Heun - schéma prédicteur/correcteur

Dans cette méthode, appelée le schéma de Heun (ou méthode de Newton modifiée), on évalue l'incrément en deux étapes. La première étape consiste à écrire

$$y_{i+1} = y_i + \int_{t_i}^{t_{i+1}} f(y_i, t_i)\,dt$$

en estimant l'intégrale par la méthode des trapèzes, soit

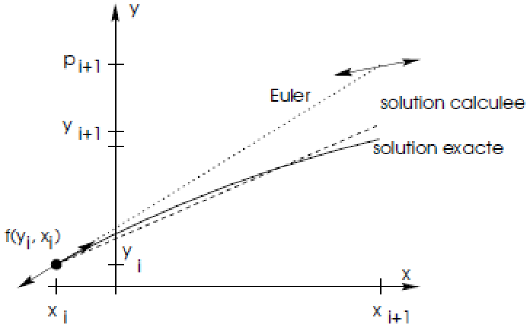
$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{2}\left(f(y_i, t_i) + f(y_{i+1}, t_{i+1})\right) \tag{1}$$

Cette formule est une formule implicite en y_{i+1} et elle n'est généralement pas inversible. De ce fait, on ne connaît encore pas y_{i+1} à ce stade. On trouve une valeur approchée de $f(y_{i+1}; t_{i+1})$ grâce à la méthode d'Euler. C'est la seconde étape. On a

$$\begin{array}{rcl} p_{i+1} & = & y_i + hf(y_i, t_i) \\ & \approx & y_{i+1} \end{array}$$

La méthode de Heun met en jeu ce que l'on appelle classiquement un schéma de type prédicteur/correcteur. Le schéma prédicteur donne une estimation de y_{i+1} qui permet d'intuiter ou de prédire la valeur de la fonction en t_{i+1}. Le schéma correcteur associé est donné par la relation (1). Globalement, on a donc

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{2}\left[f(y_i, t_i) + f(y_i + hf(y_i, t_i), t_{i+1})\right] \tag{2}$$



Dans la méthode de Heun, la fonction y est d'abord estimée en $t_i + h$ grâce à la méthode d'Euler, soit $y_{i+1} \approx p_{i+1}$. La valeur retenue pour y_{i+1} est alors calculée par la méthode des trapèzes à partir de y_i et de p_{i+1}.

Méthodes à pas séparés
Schéma de Runge-Kutta

Les méthodes de Runge-Kutta de rang q on pour fonction incrément

$$\phi(t, y; h) = \sum_{j=1}^{q} w_j k_j, \tag{3}$$

où les w_j sont des poids positifs et où les fonctions k_j sont définies par :

$$\left\{ \begin{array}{lcl} k_1(t, y; h) & = & f(t, y) \\ k_j(t, y, h) & = & f\left(t + \alpha_j h, y + h \sum_{i=1}^{j-1} \beta_{ji} k_i(t, y; h)\right), \ \forall i \geq 2 \end{array} \right.$$

- On estime la pente de la fonction y en N points de l'intervalle $[t_i; t_i + h]$, puis l'on calcule une pente moyenne (c'est le terme $\sum w_j f_j$) qui sert alors à calculer l'incrément par la méthode d'Euler.
- Les coefficients α_j , β_{jk} et les poids w_i sont choisis pour que la méthode soit d'ordre maximum au sens de Taylor. On peut utiliser le théorème de Taylor pour les déterminer.

Méthodes à pas séparés
Schéma de Runge-Kutta

On les regroupe dans un tableau de Butcher :

$$
\begin{array}{c|cccccc}
\alpha_2 & \beta_{2,1} & & & & \\
\alpha_3 & \beta_{3,1} & \beta_{32} & & & \\
\vdots & \vdots & \vdots & \ddots & & \\
\alpha_{q-1} & \beta_{q-1,1} & \beta_{q-1,2} & \cdots & \beta_{q-1,q-2} & \\
\alpha_q & \beta_{q,1} & \beta_{q,2} & \cdots & \beta_{q,q-2} & \beta_{q,q-1} \\
\hline
w_1 & w_2 & w_3 & \cdots & w_{q-1} & w_q
\end{array}
$$

- La méthode de Runge-Kutta est consistante si

$$\sum_{i=1}^{j-1} \beta_{ji} = \alpha_j, \text{ pour } j = 2, \cdots, q$$

- En fait, le système d'équations qui relie les coefficients α_j , β_{jk} et w_i entre-eux est sous-déterminé (il y a une équation de moins par rapport au nombre d'inconnues). En conséquence, on doit introduire à la main l'un des coefficients, ce qui revient à pouvoir construire, pour un ordre donné, autant de méthode de Runge-Kutta qu'on le souhaite.

Les méthodes de Runge-Kutta les plus utilisées sont celle d'ordre 2 et d'ordre 4. La fonction incrément s'écrit sous forme développée

$$\phi(t, y; h) = w_1 f(t, y) + w_2 f\left(t + \alpha_2 h, y + \beta_{2,1} h f(t, y)\right)$$

en appliquant le théorème de Taylor on obtient

$$w_1 + w_2 = 1 \text{ et } w_2\alpha_2 = w_2\beta_{2,1} = \frac{1}{2}$$

En posant $\lambda = w_2$ (qui ne peut être nul) on obtient :

$$\phi(t, y; h) = (1-\lambda) f(t, y) + \lambda f\left(t + \frac{h}{2\lambda}, y + \frac{h}{2\lambda} f(t, y)\right)$$

$$\begin{array}{c|c} \frac{h}{2\lambda} & \frac{h}{2\lambda} \\ \hline (1-\lambda) & \lambda \end{array}$$

Cas particulier :

- Schéma d'Euler modifié : $\lambda = 1$, $\phi(t, y; h) = f(t + h/2, y + hf(t, y)/2)$
- Schéma d'Euler-Cauchy : $\lambda = 1/2$,
  $\phi(t, y; h) = f(t, y)/2 + f(t + h, y + hf(t, y))/2$

- Schéma de Heun : $\lambda = \frac{3}{4}$

$$\begin{array}{c|c} \dfrac{2}{3} & \dfrac{2}{3} \\ \hline \dfrac{1}{4} & \dfrac{3}{4} \end{array}$$

$$\phi(t, y; h) = \frac{1}{4} f(t, y) + \frac{3}{4} f\left(t + \frac{2}{3} h, y + \frac{2}{3} h f(t, y)\right)$$

- Méthodes de Runge-Kutta d'ordre supérieur

  Les calculs induits par l'application du théorème de Taylor deviennent rapidement très pénibles lorsque q augmente. Pour $q \leq 4$ l'ordre est égal au rang ; nous donnons les formules « classiques » d'ordres 3 et 4 :

Ordre 3, rang 3

$$\phi(t, y; h) = \frac{1}{6}\left(k_1 + 4k_2 + k_3\right)$$

où

$$\left\{\begin{array}{lcl} k_1 & = & f(t, y) \\ k_2 & = & f(t + \frac{h}{2}, y + \frac{h}{2} k_1) \\ k_3 & = & f(t + h, y - hk_1 + 2hk_2) \end{array}\right.$$

Ordre 4, rang 4

$$\phi(t, y; h) = \frac{1}{6}\left(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4\right)$$

où

$$\left\{\begin{array}{lcl} k_1 & = & f(t, y) \\ k_2 & = & f(t + \frac{h}{2}, y + \frac{h}{2} k_1) \\ k_3 & = & f(t + \frac{h}{2}, y + \frac{h}{2} k_2) \\ k_4 & = & f(t + h, y + hk_3) \end{array}\right.$$

Lorsque $q \geq 5$ il n'existe plus de schéma dont l'ordre est égal au rang : on peut trouver des schémas d'ordre 5 et de rang 6, d'ordre 6 et de rang 8.

Méthodes à pas séparés

Schéma de Runge-Kutta d'ordre 4

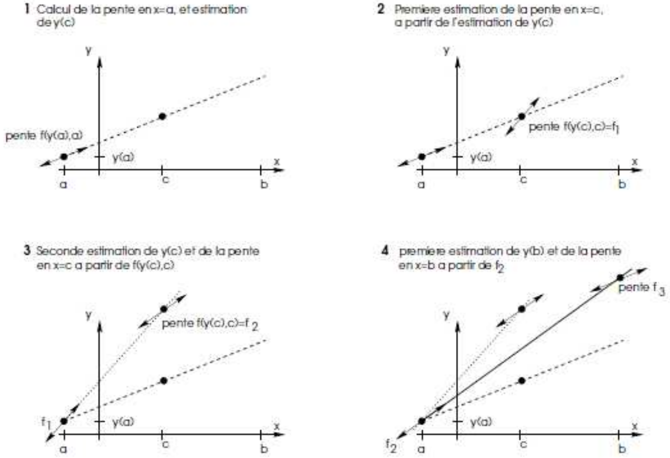
Le principe général est le suivant : l'idée est que la valeur suivante (y_{n+1}) est approchée par la somme de la valeur actuelle (y_n) et du produit de la taille de l'intervalle (h) par la pente estimée. La pente est obtenue par une moyenne pondérée de pentes :

- k_1 est la pente au début de l'intervalle ;
- k_2 est la pente au milieu de l'intervalle, en utilisant la pente k_1 pour calculer la valeur de y au point $t_n + h/2$ par le biais de la méthode d'Euler ;
- k_3 est de nouveau la pente au milieu de l'intervalle, mais obtenue cette fois en utilisant la pente k_2 pour calculer y ;
- k_4 est la pente à la fin de l'intervalle, avec la valeur de y calculée en utilisant k_3.

Dans la moyenne des quatre pentes, un poids plus grand est donné aux pentes au point milieu.

$$\text{pente} = \frac{k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4}{6}.$$

La méthode RK4 est une méthode d'ordre 4, ce qui signifie que l'erreur commise à chaque étape est de l'ordre de h^5, alors que l'erreur totale accumulée est de l'ordre de h^4.



Interprétation graphique du schéma de Runge-Kutta d'ordre 4.

- Les méthodes décrites précédemment permettent d'estimer la fonction en t_{i+1} connaissant uniquement la fonction et sa dérivée au point précédent t_i. Elles constituent ce que l'on appelle des méthodes *mono-pas*.

- Par opposition, les méthodes *multi-pas* permettent d'accéder à y_{i+1} à partir de toute l'information disponible sur y. On utilise un certain nombre de points calculés précédemment, généralement 3 ou 4, soient $(t_{i-1}; y_{i-1})$, $(t_{i-2}; y_{i-2})$, $(t_{i-3}; y_{i-3})$, et éventuellement $(t_{i-4}; y_{i-4})$.

- Malgré certaines difficultés de mise en oeuvre elles sont généralement plus rapides que les méthodes à pas séparés.

- L'idée est de représenter la pente de la fonction y (soit la fonction f elle-même) par un polynôme P_N de degré N (par exemple par l'approximation de Lagrange).
- Pour $N+1$ points successifs $(t_k; f_k)$, on impose donc

$$P_N(t_{i-(N+1-k)}) = f(y_i, t_{i-(N+1-k)}) \;\; k = 1, N+1$$

Ainsi, la relation $y_{i+1} = y_i + \delta_i$ devient intégrable analytiquement

$$y_{i+1} = y_i + \int_{t_i}^{t_{i+1}} P_N(t')\,dt'$$

- En pratique, on travaille à bas ordres, pour éviter le phénomène de Runge. Pour $N = 1$, on retrouve la méthode d'Euler. Pour $N = 2, 3$ et 4 on trouve les formules d'Adams-Bashforth.

Nous nous limiterons aux méthodes linéaires qui peuvent s'écrire, en posant $f_n = f(t_n, y_n)$

$$\left\{ \begin{array}{c} y_n = \displaystyle\sum_{i=1}^{k} \alpha_i y_{n-i} + h \sum_{i=0}^{k} \beta_i f_{n-i} \text{ pour } n \geq k, \\ y_0, y_1, \cdots, y_{k-1} \text{ donnés} \end{array} \right.$$

Généralement ces méthodes ne sont pas auto-démarrantes et le calcul des valeurs initiales est réalisé par une méthode à pas séparés d'ordre suffisant.

- Si $\beta_0 = 0$ le schéma est explicite,
- si $\beta_0 \neq 0$ le schéma est implicite ; dans ce cas la détermination de y_n nécessite l'emploi d'une méthode de point fixe ou de techniques de prédiction-correction.

Méthodes à pas liés
Méthodes d'ADAMS-BASHFORTH

Ce sont des schémas explicites qui s'écrivent

$$y_n = y_{n-1} + h \sum_{i=1}^{k} \beta_i f_{n-i}$$

Les coefficients β_i sont choisis de sorte que l'ordre de la méthode soit maximum.

Méthode AB2 : ADAMS-BASHFORTH d'ordre 2

On détermine les coefficients β_1 et β_2 de sorte que le schéma

$$y_n = y_{n-1} + h\phi(y, t; h) = y_{n-1} + h\left(\beta_1 f_{n-1} + \beta_2 f_{n-2}\right)$$

soit d'ordre maximum. L'erreur locale est

$$\epsilon(t, h) = y(t) - \left[y(t-h) + h\left(\beta_1 f(t-h, y(t-h)) + \beta_2 f(t-2h, y(t-2h))\right)\right]$$

Puisque y est solution de l'équation différentielle on a $y'(t) = f(t, y(t))$ et donc

$$\epsilon(t, h) = y(t) - \Big(y(t-h) + h\left(\beta_1 y'(t-h) + \beta_2 y'(t-2h)\right)\Big)$$

Supposant les conditions de dérivabilité satisfaites on écrit les développements de TAYLOR à un ordre convenable :

$$
\begin{aligned}
\epsilon(t,h) &= y(t) - \left(y(t) - hy'(t) + \frac{h^2}{2}y''(t) - \frac{h^3}{6}y'''(t) + o(h^3)\right) \\
&\quad -h\beta_1\left(y'(t) - hy''(t) + \frac{h^2}{2}y'''(t) + o(h^2)\right) \\
&\quad -h\beta_2\left(y'(t) - 2hy''(t) + 2h^2y'''(t) + o(h^2)\right) \\
&= hy'(t)\left(1-\beta_1-\beta_2\right) + \frac{h^2}{2}y''(t)\left(-1+2\beta_1+4\beta_2\right) \\
&\quad + \frac{h^3}{6}y'''(t)\left(1-3\beta_1-12\beta_2\right) + o(h^3)
\end{aligned}
$$

On peut annuler les termes d'ordre 1 et 2 :

$$
\left\{\begin{array}{lcl} \beta_1+\beta_2 &=& 1 \\ \beta_1+2\beta_2 &=& \dfrac{1}{2} \end{array}\right. \Leftrightarrow \left\{\begin{array}{lcl} \beta_1 &=& \dfrac{3}{2} \\ \beta_2 &=& -\dfrac{1}{2} \end{array}\right.
$$

L'erreur locale est alors $\epsilon(t,h) = 5h^2/12y'''(t) + o(h^3)$

Méthodes à pas liés
Méthodes d'ADAMS-BASHFORTH

Le schéma AB2, qui est donc d'ordre 2, s'écrit $y_n = y_{n-1} + \frac{h}{2}\left(3f_{n-1} - f_{n-2}\right)$
Remarque : ce schéma est de rang 1 car on calcule à chaque pas une seule valeur, f_{n-1}, de f, la valeur de f_{n-2} ayant été déterminée au pas précédent.

- Pour $N = 3$

$$y_n = y_{n-1} + \frac{h}{12}\left(23f_{n-1} - 16f_{n-2} + 5f_{n-3}\right)$$

- Pour $N = 4$

$$y_n = y_{n-1} + \frac{h}{24}\left(55f_{n-1} - 59f_{n-2} + 37f_{n-3} - 9f_{n-4}\right) \tag{4}$$

Une variante consiste à utiliser ces formules comme prédicteurs où $p_n \sim y_n$. Par exemple, pour $N = 4$, le prédicteur est donné par la relation (4). Pour produire un schéma correcteur associé, on introduit le point $(t_n; p_n)$ et on construit un second polynôme qui met en jeu les quatre points $(t_{n-3}; f_{n-3})$, $(t_{n-2}; f_{n-2})$, $(t_{n-1}; f_{n-1})$ et $(t_n; f_n)$ où $f_n \equiv f(p_n; t_n)$. On obtient sur le même principe

$$y_n = y_{n-1} + \frac{h}{24}\left(f_{n-3} - 5f_{n-2} + 19f_{n-1} + 5f_n\right) \tag{5}$$

Les formules (4) et (5) constituent le schéma prédicteur-correcteur de

Adams-Bashforth-Moulton d'ordre 4. Il en existe d'autres ...

Ce sont des schémas implicites qui s'écrivent

$$y_n = y_{n-1} + h \sum_{i=0}^{k} \beta_i f_{n-i}, \text{ avec } \beta_0 \neq 0$$

Les coefficients β_i sont choisis de sorte que l'ordre de la méthode soit maximum.

- AM2 : schéma d'ADAMS-MOULTON d'ordre 2 :

$$y_n = y_{n-1} + \frac{h}{2}\left(f_n + f_{n-1}\right), \text{ avec } \epsilon(t,h) = -\frac{h^3}{12} y'''(t) + o(h^3)$$

- AM3 : schéma d'ADAMS-MOULTON d'ordre 3 :

$$y_n = y_{n-1} + \frac{h}{12}\left(5f_n + 8f_{n-1} - f_{n-2}\right), \text{ avec } \epsilon(t,h) = -\frac{h^4}{24} y^{(4)}(t) + o(h^4)$$

Dans les méthodes implicites se pose, à chaque pas, le problème de la résolution d'une équation pour obtenir y_n. Il n'y a pas de difficulté si l'équation différentielle est linéaire ; lorsqu'elle ne l'est pas, c'est-à-dire dans la majorité des cas, on utilisera une méthode approchée : on détermine une approximation $y_n^\star$ de y_n par une méthode explicite (prédiction) et on reporte cette valeur dans le schéma implicite pour calculer y_n (correction).