Chap 4 Méthodes à pas multiples

I) Introduction :

On continue à étudier le problème à valeurs initiales, ou problème de Cauchy :

Déterminer la fonction $y : [a,b] \longrightarrow \mathbb{R}$ telle que :

$$(1) \begin{cases} y'(t) = f(t, y(t)) \\ y(a) = \alpha. \end{cases}$$

On a vu dans les Méthodes à 1 pas, que pour calculer w_{i+1}, on fait intervenir :

- 1 point dans $f(t_i, w_i)$ pour la Méthode d'Euler et l'ordre de précision de la Méthode d'Euler est 1.
- 2 points dans $f(t_i, w_i)$ et $f(t_{i+1}, w_i + h f(t_i, w_i))$ dans la Méthode de Runge-Kutta 2, et son ordre de précision est égal à 2.
- 4 points dans la Méthode de Runge-Kutta 4, et son ordre de précision est égal à 4.

Ceci laisse penser que plus le nombre de points utilisés est important, meilleure est la précision.

Ainsi, pour le calcul de w_{i+1}, il serait judicieux de construire une méthode numérique faisant intervenir plusieurs point précédents : $t_{i-3}, t_{i-2}, t_{i-1}$ ainsi que les solutions numériques calculées précédemment $w_{i-3}, w_{i-2}, w_{i-1}$, etc...

C'est l'idée des Méthodes numériques à pas multiples.

II) Définitions :

Une méthode à pas multiples calcule l'approximation w_{i+1} au point $t_{i+1} = a + (i+1)h$, où $h = \frac{b-a}{N}$, grâce à une expression de la forme :

$$w_{i+1} = a_{m-1} w_i + a_{m-2} w_{i-1} + \dots + a_0 w_{i+1-m}$$

$$+ h \left[b_m f(t_{i+1}, w_{i+1}) + b_{m-1} f(t_i, w_i) + \dots + b_0 f(t_{i+1-m}, w_{i+1-m}) \right.$$

$\forall\, i = m-1, m, m+1, \dots, N-1.$

Dans cette méthode numérique, il est nécessaire d'adjoindre m conditions initiales :

$$\begin{cases} w_0 = \alpha \\ w_1 = \alpha_1 \\ w_2 = \alpha_2 \\ \vdots \\ w_{m-1} = \alpha_{m-1} \end{cases}$$

Exemple : pour $m=2$, la méthode s'écrit :

$$w_{i+1} = a_1 w_i + a_0 w_{i-1} + h\left[b_2 f(t_{i+1}, w_{i+1}) + b_1 f(t_i, w_i) + b_0 f(t_{i-1}, w_{i-1}) \right].$$

Remarques : 1) si $b_2 = 0$: on a une méthode explicite, car on calcule w_{i+1} à partir des valeurs précédentes w_i et w_{i-1}.

2) si $b_2 \neq 0$: w_{i+1} est présent à droite et à gauche du schéma. On dira que l'on a une méthode implicite.

3) si on pose : $\begin{cases} a_1 = 1 \\ a_0 = 0 \\ b_2 = 0 \end{cases}$ et $\begin{cases} b_1 = 1 \\ b_0 = 0 \end{cases}$,

on retrouve la méthode d'Euler :

$$w_{i+1} = w_i + h f(t_i, w_i).$$

Les méthodes à pas multiples constituent donc une généralisation, et permettent d'augmenter la précision.

III) Construction des méthodes à pas multiples :

On considère l'équation du problème à valeurs initiales :

$$(2) : \quad y'(t) = f(t, y(t)).$$

On va intégrer l'équation (2) entre t_i et t_{i+1} :

$$\int_{t_i}^{t_{i+1}} y'(t)\, dt = \int_{t_i}^{t_{i+1}} f(t, y(t))\, dt$$

$$\Leftrightarrow \quad y(t_{i+1}) - y(t_i) = \int_{t_i}^{t_{i+1}} f(t, y(t))\, dt$$

$$\Leftrightarrow \quad \boxed{y(t_{i+1}) = y(t_i) + \int_{t_i}^{t_{i+1}} f(t, y(t))\, dt \qquad (3).}$$

Or, on ne sait pas forcément calculer : $\int_{t_i}^{t_{i+1}} f(t, y(t))\, dt$, notamment si la fonction f est non-linéaire.

On va utiliser une approximation :

- on va approcher la fonction $f(t, y(t))$ par le polynôme d'interpolation de Newton $P(t)$.

- on va supposer que :

$$\int_{t_i}^{t_{i+1}} f(t, y(t)) \simeq \int_{t_i}^{t_{i+1}} P(t)\, dt.$$

1) Méthode explicite d'Adams-Bashforth :

Pour obtenir la Méthode explicite d'Adams-Bashforth à m pas, on remplace la fonction $f(t, y(t))$ par le polynôme d'interpolation de Newton $P_{m-1}(t)$ construit à partir des m points précédents :

$$\left\{ (t_i, f(t_i, y(t_i)) ; (t_{i-1}, f(t_{i-1}, y(t_{i-1})) ; (t_{i-2}, f(t_{i-2}, y(t_{i-2})) \right.$$
$$\left. \dots ; (t_{i-(m-1)} ; f(t_{i-(m-1)}, y(t_{i-(m-1)})) \right\}.$$

On a donc :

$$\boxed{f(t, y(t)) = P_{m-1}(t) + \frac{f^{(m)}(\xi_i, y(\xi_i))}{m!}(t-t_i)(t-t_{i-1})\dots(t-t_{i-(m-1)})}$$

où $\xi_i \in [t_{i-(m-1)} ; t_i]$.

Le terme $f^{(m)}(\xi_i, y(\xi_i))(t-t_i)(t-t_{i-1})\dots(t-t_{i-(m-1)})$ représente l'erreur d'interpolation commise entre $f(t, y(t))$ et $P_{m-1}(t)$.

Posons : $t = t_i + sh$

D'après le Chapitre 3, le polynôme d'interpolation de Newton s'écrit :

$$\boxed{P_{m-1}(t) = \sum_{k=0}^{m-1} (-1)^k C_{-s}^k \nabla^k f(t_i, y(t_i)).}$$

On nous avons :

(3) $y(t_{i+1}) = y(t_i) + \int_{t_i}^{t_{i+1}} f(t, y(t))\,dt$

$$\Rightarrow y(t_{i+1}) = y(t_i) + \int_{t_i}^{t_{i+1}} \sum_{k=0}^{m-1} (-1)^k C_{-s}^k \nabla^k f(t_i, y(t_i))\,dt$$

(4)

$$+ \int_{t_i}^{t_{i+1}} \frac{f^{(m)}(\xi_i, y(\xi_i))}{m!} (t-t_i)(t-t_{i-1})\cdots(t_{i-(m-1)})\,dt$$

On nous avons posé : $t = t_i + sh$.

$$dt = h\,ds$$

Nous faisons un changement de variables : nous passons de la variable d'intégration t à la variable s.

Bornes : quand $t = t_i$: $s = 0$

quand $t = t_{i+1}$: $s = 1$.

L'équation (4) devient :

(5) $$y(t_{i+1}) = y(t_i) + \sum_{k=0}^{m-1} \nabla^k f(t_i, y(t_i))\, h (-1)^k \int_0^1 C_{-s}^k\,ds$$

$$+ \frac{h^{m+1}}{m!} \int_0^1 f^{(m)}(\xi_i, y(\xi_i))\, s(s+1)(s+2)\cdots(s+m-1)\,ds$$

avec $\xi_i \in [t_i, t_{i+1}]$.

Pour le calcul des coefficients $(-1)^k \int_0^1 C_{-s}^k \, ds$, on donnera un tableau.

k	0	1	2	3	4	5
$(-1)^k \int_0^1 C_{-s}^k \, ds$	1	$\frac{1}{2}$	$\frac{5}{12}$	$\frac{3}{8}$	$\frac{251}{720}$	$\frac{95}{288}$

Exemple : pour $k = 3$: calculons $(-1)^3 \int_0^1 C_{-s}^3 \, ds$:

$$C_{-s}^3 = \frac{(-s)!}{3!\,(-s-3)!} = \frac{(-s)(-s-1)(-s-2)}{3!} = \frac{(-s)(-s-1)(-s-2)}{6}$$

et
$$(-1)^3 \int_0^1 C_{-s}^3 \, ds = -\int_0^1 \frac{(-s)(-s-1)(-s-2)}{6} \, ds$$
$$= \int_0^1 \frac{s(s+1)(s+2)}{6} \, ds$$
$$= \frac{1}{6} \int_0^1 (s^3 + 3s^2 + 2s) \, ds$$
$$= \frac{1}{6} \left[\frac{s^4}{4} + s^3 + s^2 \right]_0^1$$
$$= \frac{1}{6} \left[\frac{1}{4} + 2 \right] = \frac{1}{6} \left[\frac{9}{4} \right] = \frac{3}{8}$$

On retrouve bien la valeur du tableau. Et on peut calculer tous les coefficients ainsi.

L'équation (5) s'écrit, en développant :

(6) : $$y(t_{i+1}) = y(t_i) + h\Big[f(t_i, y(t_i)) + \frac{1}{2}\nabla f(t_i, y(t_i)) + \frac{5}{12}\nabla^2 f(t_i, y(t_i)) + \frac{3}{8}\nabla^3 f(t_i, y(t_i)) + \dots + \text{coeff}\,\nabla^{m-1} f(t_i, y(t_i))\Big]$$
$$+ \frac{h^{m+1}}{m!}\int_0^1 s(s+1)(s+2)\dots(s+m-1)\, f^{(m)}(\xi_i, y(\xi_i))\, ds.$$

Le Terme d'erreur s'écrit :

$$\frac{h^{m+1}}{m!}\int_0^1 s(s+1)(s+2)\dots(s+m-1)\, f^{(m)}(\xi_i, y(\xi_i))\, ds =$$

$$\frac{h^{m+1} f^{(m)}(\xi_i, y(\xi_i))}{m!}\int_0^1 s(s+1)(s+2)\dots(s+m-1)\, ds =$$

$$\frac{h^{m+1} f^{(m)}(\xi_i, y(\xi_i))}{m!}(-1)^m\int_0^1 (-s)(-s-1)(-s-2)\dots(-s-m+1)\, ds$$

$$= h^{m+1} f^{(m)}(\xi_i, y(\xi_i))\,(-1)^m\int_0^1 C_{-s}^m\, ds.$$

où $\boxed{C_{-s}^m = \frac{(-s)!}{m!\,(-s-m)!}}$.

Exemples : La méthode d'Adams-Bashforth à 2 pas $(m=2)$ s'écrit :

$$y(t_{i+1}) \simeq y(t_i) + h\left[f(t_i, y(t_i)) + \frac{1}{2}\nabla f(t_i, y(t_i)) \right]$$

Pour calculer la Méthode d'Adams-Bashforth à m pas, on s'arrête à $\nabla^{m-1} f(t_i, y(t_i))$ dans la somme.

Or par définition de l'opérateur gradient (Voir Chap 3), on a : $\nabla f(t_i, y(t_i)) = f(t_i, y(t_i)) - f(t_{i-1}, y(t_{i-1}))$

D'où on obtient :

$$y(t_{i+1}) \simeq y(t_i) + h\left[\frac{3}{2} f(t_i, y(t_i)) - \frac{1}{2} f(t_{i-1}, y(t_{i-1})) \right]$$

On aboutit à la Méthode d'Adams-Bashforth à 2 pas qui s'écrit :

$$\begin{cases} w_{i+1} = w_i + \frac{h}{2}\left[3 f(t_i, w_i) - f(t_{i-1}, w_{i-1}) \right] \\ w_0 = \alpha \; ; \; w_1 = \alpha_1 \quad \text{et } i = 1, 2, \dots, N-1. \end{cases}$$

Ordre de précision de cette Méthode :

On a : $$h^{m+1} f^{(m)}(\xi_i, y(\xi_i)) \, (-1)^m \int_0^1 C_{-s}^m \, ds =$$

$$h^3 f^{(2)}(\xi_i, y(\xi_i)) \int_0^1 C_{-s}^2 \, ds$$

pour $m = 2$.

Et d'après le tableau : $\int_0^1 C_{-s}^2 \, ds = \frac{5}{12}$.

L'erreur de troncature locale de la méthode d'Adams-Bashforth à 2 pas ($m = 2$) vérifie :

$$e_{i+1}(h) = \frac{y(t_{i+1}) - y(t_i)}{h} - \left[\frac{3}{2} f(t_i, y(t_i)) - \frac{1}{2} f(t_{i-1}, y(t_{i-1}))\right]$$

$$= \frac{1}{h}\left[\frac{5}{12} h^3 f^{(2)}(\xi_i, y(\xi_i))\right]$$

$$= \frac{5}{12} h^2 f^{(2)}(\xi_i, y(\xi_i)) \text{ pour } \xi_i \in [t_{i-1}, t_{i+1}].$$

Or comme $y'(t) = f(t, y(t))$ d'après le problème à valeurs initiales que nous approchons ; nous avons :

$$f^{(2)}(\xi_i, y(\xi_i)) = y^{(3)}(\xi_i) \text{ pour une certaine valeur}$$

de ξ_i dans l'intervalle $[t_{i-1}, t_{i+1}]$.

L'erreur de troncature locale vérifie :

$$\boxed{e_{i+1}(h) = \frac{5}{12} h^2 y^{(3)}(\xi_i)} \text{ où } \xi_i \in [t_{i-1}, t_{i+1}].$$

Nous voyons donc que la méthode d'Adams-Bashforth à 2 pas ($m = 2$) est d'ordre 2.

Autre exemple : écrivons la Méthode d'Adams-Bashforth à 3 pas ($m=3$) :

$$y(t_{i+1}) \simeq y(t_i) + h \Big[f(t_i, y(t_i)) + \frac{1}{2} \nabla f(t_i, y(t_i)) + \frac{5}{12} \nabla^2 f(t_i, y(t_i)) \Big].$$

On s'arrête à $\nabla^{m-1} f(t_i, y(t_i))$ avec $m=3$.

Par définition de l'opérateur gradient, nous avons :

$$\nabla f(t_i, y(t_i)) = f(t_i, y(t_i)) - f(t_{i-1}, y(t_{i-1}))$$

et $\nabla^k f(t_i, y(t_{i-1})) = \nabla (\nabla^{k-1} f(t_i, y(t_i))) \; \forall k \geq 1$.

donc
$$\begin{aligned}\nabla^2 f(t_i, y(t_i)) &= \nabla f(t_i, y(t_i)) - \nabla f(t_{i-1}, y(t_{i-1})) \\ &= f(t_i, y(t_i)) - f(t_{i-1}, y(t_{i-1})) \\ &\quad - \big(f(t_{i-1}, y(t_{i-1})) - f(t_{i-2}, y(t_{i-2})) \big) \\ &= f(t_i, y(t_i)) - 2 f(t_{i-1}, y(t_{i-1})) + f(t_{i-2}, y(t_{i-2}))\end{aligned}$$

D'où on obtient :

$$y(t_{i+1}) \simeq y(t_i) + h \Big[f(t_i, y(t_i)) + \frac{1}{2} \big(f(t_i, y(t_i)) - f(t_{i-1}, y(t_{i-1})) \big) + \frac{5}{12} \big(f(t_i, y(t_i)) - 2 f(t_{i-1}, y(t_{i-1})) + f(t_{i-2}, y(t_{i-2})) \big) \Big]$$

$$\Rightarrow y(t_{i+1}) \simeq y(t_i) + \frac{h}{12} \Big[23 f(t_i, y(t_i)) - 16 f(t_{i-1}, y(t_{i-1})) + 5 f(t_{i-2}, y(t_{i-2})) \Big]$$

La Méthode d'Adams-Bashforth à 3 pas ($m=3$) s'écrit :

$$\begin{cases} w_{i+1} = w_i + \dfrac{h}{12}\left[23 f(t_i, w_i) - 16 f(t_{i-1}, w_{i-1}) \right. \\ \left. \qquad + 5 f(t_{i-2}, w_{i-2})\right] \quad \forall i = 2, 3, \dots, N-1 \\ w_0 = \alpha \,;\; w_1 = \alpha_1 \,;\; w_2 = \alpha_2 . \end{cases}$$

Ordre de précision de cette Méthode :

On a : $h^4 f^{(3)}(\xi_i, y(\xi_i))(-1)^3 \int_0^1 C_{-s}^3 \, ds = \frac{3}{8} h^4 f^{(3)}(\xi_i, y(\xi_i))$
d'après le tableau des coefficients.

L'erreur de troncature locale vérifie :

$$e_{i+1}(h) = \frac{y(t_{i+1}) - y(t_i)}{h} - \frac{1}{12}\left[23 f(t_i, y(t_i)) \right.$$

$$\left. - 16 f(t_{i-1}, y(t_{i-1})) + 5 f(t_{i-2}, y(t_{i-2}))\right]$$

$$= \frac{1}{h}\left[\frac{3}{8} h^4 f^{(3)}(\xi_i, y(\xi_i))\right]$$

$$= \frac{3}{8} h^3 y^{(4)}(\xi_i) \text{ pour un certain } \xi_i \in [t_{i-2}, t_{i+1}].$$

Nous voyons que la Méthode d'Adams-Bashforth à 3 pas ($m=3$) est d'ordre 3.

Théorème 1 : Les méthodes d'Adams-Bashforth à m pas sont d'ordre m, et nécessitent m conditions initiales.

- Problème du choix de la méthode numérique pour calculer les conditions initiales :

Nous avons vu que dans la méthode d'Adams-Bashforth à 2 pas, il faut 2 conditions initiales w_0 et w_1 ; et dans la méthode d'Adams-Bashforth à 3 pas, il faut 3 conditions initiales w_0, w_1, w_2.

Comment calcule-t-on ces valeurs ?

Pour w_0 : c'est simple, on utilise la condition initiale du problème à valeurs initiales.

On pose : $w_0 = y(t_0) = \alpha$ qui est donné.

Pour la méthode d'Adams-Bashforth à 2 pas $(m=2)$, comment calcule-t-on w_1 ?

Nous avons vu que l'erreur vérifie :

$$E(h) = \max_{i=1,\dots,N} |w_i - y(t_i)| \leq \text{Const}.\, h^2$$

car le schéma est d'ordre 2.

Pour w_1, il faut choisir une méthode à 1 pas qui vérifie : $|w_1 - y(t_1)| \leq \text{Const}.\, h^2$.

On peut donc choisir une méthode d'ordre 2 telle que la méthode de Runge-Kutta 2 (ou méthode d'Heun) pour le calcul de w_1; afin de rester cohérent avec l'ordre de précision du schéma d'Adams-Bashforth à 2 pas. Sinon, une erreur importante dans la phase d'initialisation reste présente dans les itérations suivantes et s'amplifie; ce qui dégrade considérablement la qualité de la méthode numérique.

De même, comme la méthode d'Adams-Bashforth à 3 pas ($m=3$) est d'ordre 3, il faudra utiliser une méthode d'ordre 3 pour initialiser w_1 et w_2.
On peut choisir la méthode de Runge-Kutta 3 (RK3) qui est d'ordre 3.

2) Méthode implicite d'Adams - Moulton :

Pour obtenir la Méthode implicite d'Adams - Moulton à m pas, on remplace la fonction $f(t, y(t))$ par le polynôme d'interpolation de Newton $P_m(t)$ construit à partir des $m+1$ points précédents :

$$\{(t_{i+1}, f(t_{i+1}, y(t_{i+1}))) ; (t_i, f(t_i, y(t_i)) ; (t_{i-1}, f(t_{i-1}, y(t_{i-1})), \dots ; (t_{i-(m-1)} ; f(t_{i-(m-1)}, y(t_{i-(m-1)}$$

On a donc :

$$\boxed{f(t, y(t)) = P_m(t) + \frac{f^{(m+1)}(\xi_i, y(\xi_i))}{(m+1)!}(t-t_{i+1})(t-t_i)\dots(t-t_{i-(m-1)})}$$

où $\xi_i \in [t_{i-(m-1)}, t_{i+1}]$.

Le terme $f^{(m+1)}(\xi_i, y(\xi_i))(t-t_{i+1})(t-t_i)\dots(t-t_{i-(m-1)})$ représente l'erreur d'interpolation commise entre $f(t, y(t))$ et $P_m(t)$.

Posons : $t = t_{i+1} + sh$

Le polynôme d'interpolation de Newton $P_m(t)$ s'écrit :

$$P_m(t) = \sum_{k=0}^{m} (-1)^k C_{-s}^k \nabla^k f(t_{i+1}, y(t_{i+1})).$$

Or nous avons :

$$(3)\quad y(t_{i+1}) = y(t_i) + \int_{t_i}^{t_{i+1}} f(t, y(t))\, dt$$

$$\Rightarrow y(t_{i+1}) = y(t_i) + \int_{t_i}^{t_{i+1}} \sum_{k=0}^{m} (-1)^k C_{-s}^{k} \nabla^k f(t_{i+1}, y(t_{i+1}))\, dt \quad (4)$$

$$+ \int_{t_i}^{t_{i+1}} \frac{f^{(m+1)}(\xi_i, y(\xi_i))}{(m+1)!} (t-t_{i+1})(t-t_i)\cdots(t-t_{i-(m-1)})\, dt$$

Or nous avons posé : $t = t_{i+1} + sh$

$$dt = h\, ds$$

Nous faisons un changement de variables : nous passons de la variable d'intégration t à la variable s.

Bornes : quand $t = t_i$: $s = -1$

quand $t = t_{i+1}$: $s = 0$

L'équation (4) devient :

$$(5) : y(t_{i+1}) = y(t_i) + \sum_{k=0}^{m} \nabla^k f(t_{i+1}, y(t_{i+1}))\, h (-1)^k \int_{-1}^{0} C_{-s}^{k}\, ds$$

$$+ \frac{h}{(m+1)!} \int_{-1}^{0} f^{(m+1)}(\xi_i, y(\xi_i))\, (sh)(s+1)h\,(s+2)h \cdots (s+m)h\, ds$$

avec $\xi_i \in [t_i, t_{i+1}]$.

Pour le calcul des coefficients $(-1)^k \int_{-1}^{0} C_{-s}^{k}\, ds$, on donnera un tableau.

k	0	1	2	3	4	5
$(-1)^k \int_{-1}^{0} C_{-s}^{k}\, ds$	1	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{12}$	$-\frac{1}{24}$	$-\frac{19}{720}$	$-\frac{3}{160}$

Exemple : pour $k=2$: calculons $(-1)^2 \int_{-1}^{0} C_{-s}^{2}\, ds$:

$$C_{-s}^{2} = \frac{(-s)!}{2!\,(-s-2)!} = \frac{(-s)(-s-1)}{2} = \frac{s(s+1)}{2} = \frac{s^2+s}{2}.$$

$$\int_{-1}^{0} C_{-s}^{2}\, ds = \frac{1}{2}\int_{-1}^{0} (s^2+s)\, ds = \frac{1}{2}\left[\frac{s^3}{3} + \frac{s^2}{2}\right]_{-1}^{0}$$

$$= \frac{1}{2}\left(\frac{1}{3} - \frac{1}{2}\right) = -\frac{1}{12}.$$

On retrouve bien la valeur du tableau.

L'équation (5) s'écrit en développant :

$$(6) : \quad y(t_{i+1}) = y(t_i) + h\Big[f(t_{i+1}, y(t_{i+1})) - \frac{1}{2}\nabla f(t_{i+1}, y(t_{i+1})) - \frac{1}{12}\nabla^2 f(t_{i+1}, y(t_{i+1})) - \frac{1}{24}\nabla^3 f(t_{i+1}, y(t_{i+1})) + \cdots + \text{coeff}\, \nabla^m f(t_{i+1}, y(t_{i+1}))\Big]$$

$$+ \frac{h^{m+2}}{(m+1)!} \int_{-1}^{0} s(s+1)(s+2)\cdots(s+m)\, f^{(m+1)}(\xi_i, y(\xi_i))\, ds.$$

Le Terme d'erreur s'écrit :

$$\frac{h^{m+2}}{(m+1)!}\int_{-1}^{0} s(s+1)(s+2)\dots(s+m)\, f^{(m+1)}(\xi_i, y(\xi_i))\, ds =$$

$$\frac{h^{m+2}}{(m+1)!} f^{(m+1)}(\xi_i, y(\xi_i))\,(-1)^{m+1}\int_{-1}^{0}(-s)(-s-1)\dots(-s-m)\, ds$$

$$= h^{m+2} f^{(m+1)}(\xi_i, y(\xi_i))\,(-1)^{m+1}\int_{-1}^{0} C_{-s}^{m+1}\, ds$$

où $\boxed{C_{-s}^{m+1} = \frac{(-s)!}{(m+1)!\,(-s-m-1)!} = \frac{(-s)(-s-1)\dots(-s-m)}{(m+1)!}}$

Exemple : La méthode d'Adams-Moulton à 2 pas $(m=2)$ s'écrit :

$$y(t_{i+1}) \simeq y(t_i) + h\left[f(t_{i+1}, y(t_{i+1})) - \frac{1}{2}\nabla f(t_{i+1}, y(t_{i+1})) - \frac{1}{12}\nabla^2 f(t_{i+1}, y(t_{i+1}))\right]$$

Pour calculer la Méthode d'Adams-Moulton, on s'arrête à $\nabla^m f(t_{i+1}, y(t_{i+1}))$ dans la Somme.

Par définition de l'opérateur gradient, on a :

$$\nabla f(t_{i+1}, y(t_{i+1})) = f(t_{i+1}, y(t_{i+1})) - f(t_i, y(t_i))$$

et $\nabla^2 f(t_{i+1}, y(t_{i+1})) = \nabla f(t_{i+1}, y(t_{i+1})) - \nabla f(t_i, y(t_i))$

$$\Rightarrow \nabla^2 f(t_{i+1}, y(t_{i+1})) = f(t_{i+1}, y(t_{i+1})) - f(t_i, y(t_i)) - \left(f(t_i, y(t_i)) - f(t_{i-1}, y(t_{i-1})) \right)$$

$$\Rightarrow \nabla^2 f(t_{i+1}, y(t_{i+1})) = f(t_{i+1}, y(t_{i+1})) - 2 f(t_i, y(t_i)) + f(t_{i-1}, y(t_{i-1}))$$

D'où on obtient :

$$y(t_{i+1}) \simeq y(t_i) + h \Big[f(t_{i+1}, y(t_{i+1})) - \frac{1}{2} \left(f(t_{i+1}, y(t_{i+1})) - f(t_i, y(t_i)) \right) - \frac{1}{12} \left(f(t_{i+1}, y(t_{i+1})) - 2 f(t_i, y(t_i)) + f(t_{i-1}, y(t_{i-1})) \right) \Big]$$

$$y(t_{i+1}) \simeq y(t_i) + \frac{h}{12} \left[5 f(t_{i+1}, y(t_{i+1})) + 8 f(t_i, y(t_i)) - f(t_{i-1}, y(t_{i-1})) \right].$$

On aboutit à la méthode implicite d'Adams-Moulton à 2 pas ($m = 2$) qui s'écrit :

$$w_{i+1} = w_i + \frac{h}{12} \left[5 f(t_{i+1}, w_{i+1}) + 8 f(t_i, w_i) - f(t_{i-1}, w_{i-1}) \right]$$

$w_0 = \alpha$; $w_1 = \alpha_1$ et $i = 1, 2, \ldots, N-1$.

Ordre de précision de cette Méthode :

On a : $h^{m+2} f^{(m+1)}(\xi_i, y(\xi_i)) (-1)^{m+1} \int_{-1}^{0} C_{-s}^{m+1} ds$

$= h^4 f^{(3)}(\xi_i, y(\xi_i)) (-1)^3 \int_{-1}^{0} C_{-s}^{3} ds$

pour $m = 2$.

Et d'après le tableau : $(-1)^3 \int_{-1}^{0} C_{-s}^{3} ds = \frac{-1}{24}$.

L'erreur de troncature locale de la Méthode d'Adams-Moulton à 2 pas ($m=2$) s'écrit :

$$e_{i+1}(h) = \frac{y(t_{i+1}) - y(t_i)}{h} - \left[\frac{5}{12} f(t_{i+1}, y(t_{i+1})) + \frac{8}{12} f(t_i, y(t_i)) - \frac{1}{12} f(t_{i-1}, y(t_{i-1}))\right]$$

$$\Rightarrow e_{i+1}(h) = \frac{1}{h}\left[-\frac{1}{24} h^4 f^{(3)}(\xi_i, y(\xi_i))\right]$$

$$\Rightarrow e_{i+1}(h) = -\frac{1}{24} h^3 f^{(3)}(\xi_i, y(\xi_i)) \text{ par } \xi_i \in [t_{i-1}, t_{i+1}]$$

Or $f^{(3)}(\xi_i, y(\xi_i)) = y^{(4)}(\xi_i)$ pour une certaine valeur de ξ_i dans l'intervalle $[\xi_{i-1}, \xi_{i+1}]$.

L'erreur de troncature locale vérifie :

$$e_{i+1}(h) = -\frac{1}{24} h^3 y^{(4)}(\xi_i) \text{ où } \xi_i \in [t_{i-1}, t_{i+1}].$$

Nous voyons donc que la méthode d'Adams_Moulton à 2 pas ($m=2$) est d'ordre 3.

Théorème 2 : les méthodes implicites d'Adams_Moulton à m pas sont d'ordre $m+1$, et nécessitent m conditions initiales.

① Problème du choix de la méthode numérique pour calculer les conditions initiales :

Comme pour les méthodes explicites d'Adams_Bashforth, il est nécessaire de trouver une méthode numérique qui calcule ces m conditions initiales, tout en respectant l'ordre global de la méthode d'Adams_Moulton.

Ainsi pour w_0 : on calcule w_0 à l'aide de la condition initiale $w_0 = y(t_0)$.

Pour w_1 : comme la méthode d'Adams-Moulton à 2 pas est d'ordre 3, nous devons avoir :

$$|w_1 - y(t_1)| \leq \text{Cst}.\, h^3.$$

Pour le calcul de w_1, nous devons utiliser une méthode numérique à 1 pas qui est d'ordre 3 : par exemple, la méthode de Runge-Kutta 3 (RK_3) qui est d'ordre 3.

3) Schémas prédicteurs - correcteurs :

Il s'agit des méthodes numériques les plus employées. Un schéma prédicteur - correcteur procède en 2 étapes, à chacune des itérations.

1) **Prédiction** : on calcule une approximation de w_{i+1}, notée w_{i+1}^{approx} à l'aide d'un schéma explicite, dit schéma prédicteur.

2) **Correction** : on utilise un schéma implicite, comme la méthode d'Adams-Moulton, dans lequel on remplace le terme $f(t_{i+1}, w_{i+1})$ par le terme : $f(t_{i+1}, w_{i+1}^{approx})$.

Exemple : on construit un schéma prédicteur - correcteur utilisant :

- le schéma explicite d'Adams - Bashforth à 2 pas $(m=2)$ pour la méthode de prédiction.
- le schéma implicite d'Adams - Moulton à 2 pas $(m=2)$ pour la méthode de correction.

On obtient le schéma numérique suivant :

Données : $[a,b]$, α, β, N : nombre de points discrétisés.

Sorties : w_i les valeurs approchées de $y(t_i)$.

Algorithme :

1 - Initialisation :

$$h = \frac{b-a}{N}, \quad t_0 = a, \quad w_0 = \alpha, \quad t_1 = a+h, \quad w_1 = \beta \text{ et } i = 1.$$

2 - Tant que $i < N$, répéter les étapes 3 à 6 :

3 - $t_{i+1} = t_i + h$

4 - Prédicteur :

$$w_{i+1}^{approx} = w_i + \frac{h}{2}\left(3f(t_i, w_i) - f(t_{i-1}, w_{i-1})\right)$$

5 - Correcteur :

$$w_{i+1} = w_i + \frac{h}{12}\left(5f(t_{i+1}, w_{i+1}^{approx}) + 8f(t_i, w_i) - f(t_{i-1}, w_{i-1})\right)$$

6 - $i = i+1$

Remarque : du point de vue de l'erreur de troncature du schéma prédicteur-correcteur, l'influence du prédicteur est moins importante que celle du correcteur.

Ainsi pour obtenir un schéma prédicteur-correcteur d'ordre $k+1$, il convient de choisir un correcteur d'ordre $k+1$ et un prédicteur d'ordre k.

Ainsi dans l'exemple précédent, le prédicteur est d'ordre 2 et le correcteur est d'ordre 3. Donc le schéma prédicteur-correcteur est d'ordre 3.

On ne fait pas la démonstration ici.

De plus, les termes des conditions initiales à initialiser doivent être choisis en préservant l'ordre $k+1$ de la méthode prédicteur-correcteur.