# Équations différentielles et simulations de particules

Chapitre 2 (Séance 1)

30 septembre 2022

## 1. Généralités

- Soit $U$ un ouvert de $\mathbb{R} \times \mathbb{R}^d$ et $f : U \to \mathbb{R}^d$ une application supposée au moins continue par rapport aux deux variables. On considère l'équation différentielle (EDO) suivante

$$y'(t) = f(t, y(t)) \qquad (E)$$

- Une solution de $(E)$ est tout couple $(I, y)$ où $I \subset \mathbb{R}$ et $y$ une fonction définie et dérivable sur $I$ vérifiant

$$\forall t \in I, (t, y(t)) \in U, \text{ et } y'(t) = f(t, y(t))$$

- Une solution du problème de Cauchy associée à la donnée $(t_0, y_0)$ est toute solution $(I, y)$ de l'équation (E) vérifiant de plus

$$t_0 \in I, y(t_0) = y_0 \qquad (In)$$

- En intégrant $((E); (In))$ entre $t_0$ et $t$, on obtient :

$$y(t) - y_0 = \int_{t_0}^{t} f(s, y(s))ds$$

- Nous allons décrire un certain nombre de méthodes ( méthodes à pas multiple) permettant de résoudre numériquement le problème de Cauchy de condition initiale $In$ de l'équation $(E)$.

- On supposera que $f$ satisfait aux conditions du théorème de Cauchy-Lipschitz. Ceci assure que le problème $((E);(In))$ admet une unique solution.

- Étant donné une subdivision $t_0 < t_1 < \ldots < t_N = t_0 + T$ de $[t_0; t_0 + T]$ ; on cherche à déterminer des valeurs approchées $y_n$ des valeurs $y(t_n)$ ; $n = 0 \ldots N$ ; prise de la solution exacte $y$. On notera

$$h_n = t_{n+1} - t_n$$

- Si $y$ est une solution exacte de l'équation différentielle $((E); (In))$ alors

$$y(t_{n+1}) = y(t_n) + \int_{t_n}^{t_{n+1}} f(t, y(t))dt$$

- Un schéma numérique à pas $r+1$ ($r$ entier $r \geq 0$) est de la forme
$$\begin{cases} y_{n+1} = \Phi(y_{n+1}, t_n, y_n, h_n, \ldots, t_{n-r}, y_{n-r}, h_{n-r}), & r \leq n \leq N - \\ t_{n+1} = t_n + h_n \end{cases}$$

## 2. Schémas d'Adams

- Les schémas d'Adams approchent l'intégrale $\int_{t_n}^{t_{n+1}} f(t, y(t))dt$ par l'intégrale d'un polynôme d'interpolation de $f$ en des points donnés.
- Différents schémas peuvent être construites selon les points d'interpolation choisis.

## 2.1 Méthode d'Adams -Bashforth

- Cette méthode prédit $y_{n+1}$ à l'aide des $r$ points $y_n, y_{n-1}, \dots, y_{n-r+1}$ et des dérivées correspondantes $f_i = f(t_i, y_i)$, où $r \geq 0$ est fixé.

- C'est une méthode d'ordre $r$. Le polynôme utilisé est le polynôme de Lagrange de degrés $r - 1$.

$$P_{n,r}(t_{n-i}) = f(t_{n-i}, y(t_{n-i})); \quad 0 \leq i \leq r$$

Dans la base de Lagrange

$$P_{n,r}(t) = \sum_{i=0}^{r} f(t_{n-i}, y(t_{n-i})).L_{n,i,r}(t)$$

où

$$L_{n,i,r} = \prod_{0<j<r,\ i \neq j} \frac{t - t_{n-j}}{t_{n-i} - t_{n-j}}$$

Pour les cinq premiers ordres, on obtient les règles suivantes :

$r = 1 \qquad y_{n+1} = y_n + hf_n \qquad (1.1) \qquad \text{(Euler)}$

$$r = 2 \qquad y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}(3f_n - f_{n-1}) \qquad (1.2)$$

$$r = 3 \qquad y_{n+1} = y_n + \frac{h}{12}(23f_n - 16f_{n-1} + 5f_{n-2}) \qquad (1.3)$$

$$r = 4 \qquad y_{n+1} = y_n + \frac{h}{24}(55f_n - 59f_{n-1} + 37f_{n-2} - 9f_{n-3}) \qquad (1.4)$$

$$r = 5 \quad y_{n+1} = y_n + \frac{h}{720}(1901f_n - 2774f_{n-1} + 2616f_{n-2} - 1274f_{n-3} + 251f_{n-4})$$

## Exemple

On considère le problème de Cauchy suivant

$$\begin{cases} y_{n+1} & = & 1 + y(t), \qquad t \in [0, 1] \\ y_0 & = & 0 \end{cases}$$

Le schéma d'Adams-Baschforth d'ordre 3 à pas constant est donné par

$$y_n = y_{n-1} + \frac{h}{2}(3f_{n-1} - f_{n-2})$$

Ce qui donne

$$y_n = y_{n-1} + \frac{h}{2}(3(1 + y_{n-1}) - (1 + y_{n-2})$$

C'est-à-dire

$$y_n = 1.15y_{n-1} - 0.05y_{n-2} + 0.1$$

Le calcul de $y_1$ doit être effectué pas une méthode à un par (Euler par exemple).

$$y_1 = y_0 + hf_0 = 0.1$$

Nous obtenons

$$y_2 = 1.15y_1 - 0.05y_0 + 0.1 = 0.215$$
$$y_3 = 1.15y_2 - 0.05y_1 + 0.1 = 0.3422 \ \ldots\ldots\ldots\ldots$$

## 2.2 Méthode d'Adams -Moulton

- C'est une méthode qui prédit $y_{n+1}$ à l'aide, en plus des $r$ points précédents, d'un prédicteur $y_{n+1}^{pr}$ sur la valeur de $y_{n+1}$. C'est une méthode d'ordre $r+1$.

- Nous allons approcher $f$ par l'unique polynôme noté ici $P^*_{n,r}$ de degré $r+1$ vérifiant

$$P^*_{n,r} = f(t_{n-i}, y(t_{n-i})) \qquad -1 \leq i \leq r$$

Dans la base de Lagrange

$$P^*_{n,r} = \sum_{i=-1}^{r} f(t_{n-i}, y(t_{n-i})).L^*_{n,i,r}(t)$$

où

$$L^*_{n,i,r} = \prod_{-1<j<r,\ i\neq j} \frac{t - t_{n-j}}{t_{n-i} - t_{n-j}}$$

Nous obtenons une famille de schémas multi-pas **implicites**, puisque pour $i = -1$, la valeur de $y_{n+1}$ est inclue dans les valeurs connues. Pour les quatre premiers ordres, on obtient les règles suivantes :

$$r = 1 \qquad y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}(f_{n+1} + f_n) \qquad (2.1)$$

$$r = 2 \qquad y_{n+1} = y_n + \frac{h}{12}(5f_{n+1} + 8f_n - f_{n-1}) \qquad (2.2)$$

$$r = 3 \qquad y_{n+1} = y_n + \frac{h}{24}(9f_{n+1} + 19f_n - 5f_{n-1} + f_{n-2}) \qquad (2.3)$$

$$r = 4 \qquad y_{n+1} = y_n + \frac{h}{720}(241f_{n+1} + 646f_n - 264f_{n-1} + 106f_{n-2} - 19f_{n-3}) \qquad (2.4)$$

- En pratique, la valeur de $f_{n+1}$ doit être obtenue par une méthode explicite, à l'ordre précédent, soit par la méthode d'Adams-Bashforth au même $r$. Ainsi, en substituant (1.1) dans (2.1) pour la valeur de $y_{n+1}$ dans $f_{n+1}$.

- En substituant la valeur (1.4) de $y_{n+1}$ dans (2.4), on obtient une méthode d'ordre 5 qui ne demande que deux évaluations de la fonction $f$ par étape.