

وزارة التعليم العالي والبحث العلمي

Université 20 Aout 1955 de Skikda

Faculté des Sciences

Département de Mathématiques



جامعة 20 أوت 1955 ، سكيكدة

كلية العلوم

قسم الرياضيات

N° : U.S/F.S/D.M/2022/2023.

Faculté des Sciences
Département de Mathématiques

Mémoire

Présenté en vue de l'obtention du diplôme de
Master en Mathématiques

Quelques intégrateurs numériques

Option : Analyse Numérique des équations aux dérivées partielles

Par : BOUCHELLIT Karima

ABDENOUR Imane

Encadré par : BOUGHIOUT Nawel

MCB U. SKIKDA

Devant le jury :

Président : BOUZETTOUTA Lamine

MCA U. SKIKDA

Examineur : TILBI Djahida

MCB U. SKIKDA

Année : 2022/2023

شكر وتقدير

الحمد لله رب العالمين ملهم كل صواب وولي كل خير
أنطق الكون بآيات وجوده وعظيم سلطانه،
خلق الإنسان وشرفه بحمل أمانة العقل وعلمه البيان.
عن النبي صلى الله عليه وسلم أنه قال:
(من لا يشكر الناس لا يشكر الله)
لا بد لنا ونحن نخطو خطواتنا الأخيرة في الحياة الجامعية من
وقفة نعود
إلى أعوام قضيناها في رحاب الجامعة مع أساتذتنا الكرام الذين
قدموا

لنا الكثير باذلين بذلك جهود كبيرة.
وقبل أن نمضي نقدم أسمى آيات الشكر والامتنان والتقدير
والمحبة لهم
لأنهم حملوا أقدس رسالة في الحياة ومهدوا لنا طريق العلم
والمعرفة
" كن عالماً... فإن لم تستطع فكن متعلماً، فإن لم تستطع فأحب
العلماء، فإن لم تستطع فلا تبغضهم".
ونخص بالتقدير والشكر:
الأستاذة " بوغيوط نوال "

التي نقول لها بشراك قول رسول الله صلى الله عليه وسلم:
" إن الحوت في البحر، والطير في السماء، ليصلون على معلم
الناس الخير "

كما أننا نتوجه بخاص الشكر لرئيس قسم الرياضيات إلى من
علمنا التفاؤل والمضي إلى الأمام، إلى من رعانا وحافظ علينا،
إلى من وقف إلى جانبنا عندما ضللنا الطريق...
الدكتور "المين بوزطوطة"

وكذلك نشكر كل من ساعد على إتمام هذا العمل
وقدم لنا العون مد لنا يد المساعدة وزودنا
بالمعلومات اللازمة لإتمام هذا العمل

الأستاذة " كارك شافية "

إهداء

إلى من أفضلها على نفسي ولم لا فقد ضحت من أجلي ولم
تدخر جهدا في سبيل إسعادي على الدوام
(أمي الحبيبة).

نسير في دروب الحياة ويبقي من يسيطر على أدهاننا في كل
مسلك نسلكه.

صاحب الوجه الطيب ولأفعال الحسنة فلم يبخل على طيلة
حياتي

(والدي العزيز).

إلى أخواتي وأصدقائي وجميع من وقفو بجواري
وساعدوني.

إلى من لم أكتبهم في مذكرتي وهم حاضرون في ذاكرتي
إليهم جميعا أهذي هذا العمل المتواضع.

كريمة

إهداء

إلهي لا يطيب الليل إلا بشكرك ولا يطيب النهار إلا
بطاعتك ولا تطيب اللحظات إلا بذكرك
ولا تطيب الآخرة إلا بعفوك ولا تطيب الجنة إلا برويتك الله
جل جلاله.

إلى من بلغ الرسالة وأدى الأمانة ونصح الأمة إلى نبي
الرحمة ونور العالمين
سيدنا محمد صلى الله عليه وسلم.
إلى التي حملتني وهن على وهن، إلى الينبوع الذي لا يمل
العطاء، إلى من حاكت سعادتي
بخيوط منسوجة من قلبها، إلى أول كلمة نطقت بها شفاهي
أمي الحبيبة
إلى من أحمل اسمك بكل فخر، يا من أفقتك منذ الصغر، يا
من يرتعش قلبي لذكرك "أبي الطاهر"
رحمك الله وأسكنك فسيح جنانه، وجعلك ذكرى تضيء لي
حياتي.

إلى القلوب الطاهرة، الرقيقة والنفوس البريئة
إلى من كانوا يساندونني ويتنازلون عن حقوقهم لإرضائي
إخوتي: "صفوان" و "فرح"
إلى الأخوات التي لم تلد أمي، إلى من تحلو بالإخاء وتميزوا
بالوفاء

والعطاء إلى ينابيع الصدق الصافي، إلى من معهم سعدت،
وبرفقتهم في دروب الحياة الحلوة والحزينة سرت
إلى من كانوا معي على طريق النجاح والخير
إلى من عرفت كيف أجدهم وعلموني ألا أضيعهم
صديقاتي

إلى أهلي وعشيرتي، إلى من علمونا حروفا من ذهب
وكلمات من درر وعبارات من أسمي

وأجلى عبارات في العلم إلى من صاغوا لنا علمهم حروفا
ومن فكرهم منارة.

إيمان

Abstract

In this note, we are interested in numerical methods for solving ordinary differential equations. Passing by the firsts methods (Euler , Median point and Störmer-Verlet) and returning to the improve methods (RK, Collocation, Gauss and Lobatto). Consolidating our work by numerical simulations which we deal with two-body problem(also said Kepler problem) .

Key words : Runge-Kutta -problems with inital condition - numerical integrators

Résumé

Dans ce mémoire, nous nous intéressons aux méthodes numériques de résolution des équation différentielles ordinaires. Passant par les premiers méthodes (Euler, Point médian et Strömer-Verlet) et revenant aux méthodes améliorées (RK, Collocation, Gauss et Lobatto). Consolidant notre travail par des simulations numériques dont en traite le problème des deux corps (dit aussi problème de Kepler).

Mots clés : Runge-Kutta - problèmes à condition initial - intégration numérique

ملخص

نهتم في هذه المذكرة بالطرق العددية الخاصة بحل المعادلات التفاضلية العادية. مروراً بالطرق الأولى (أولر، منتصف نقطة و ستورم فارلي) ثم ننتقل إلى الطرق المحسنة (رانج كوثا، قوص، التجميع و لوباثو) . ندعم هذا العمل بالمحاكاة العددية لمسألة جسمين (أو مسألة كبلر).

كلمات مفتاحية: رانج كوثا - مسائل مع شروط ابتدائية - التكامل العددي

TABLE DES MATIÈRES

1	Les premières méthodes	10
1.1	Problème de Cauchy	10
1.2	Méthodes d'Euler	11
1.2.1	Méthode d'Euler explicite	12
1.2.2	Méthode d'Euler implicite	12
1.2.3	Méthode d'Euler symplectique	12
1.3	Méthode du point médian	13
1.4	Méthode de Strömer-Verlet	13
2	Intégrateurs numériques	14
2.1	Méthodes de Runge-Kutta	14
2.2	Méthodes de collocation	19
2.3	Les méthodes de Gauss	23
2.4	Les méthodes de Lobatto IIIA	24
2.5	Méthodes de Runge-Kutta partitionnées	25
3	Simulation Numérique	28
3.1	Définition du problème de Kepler	28
3.2	Intégration exacte du problème de Kepler	29

3.3 Intégration numérique du problème de Kepler 30

INTRODUCTION

L'intégration numérique constitue une importance pour l'approximation des solutions d'équations différentielles ordinaires. Ces techniques ont été développées autour de 1901 par les mathématiciens allemands Carle Runge et Martin Wilhelm Kutta.

Les méthodes de RK sont simples et précises, mais elles ne sont pas sans défauts, on plus de l'instabilité ces méthodes souffrent de la non-conservation des invariants importants comme la masse totale, l'énergie, le moment cinétique,...

Les méthodes de RK d'ordre élevé répondent au problème d'instabilité et les méthodes symplectiques sont performantes pour la conservation des invariants. Aussi les récents méthodes de relaxation répondent à ces deux problèmes.

Notre mémoire est organisé comme suite :

Dans le premier chapitre, nous débutons par les premiers méthodes, elles sont très simples mais un peu loin de l'exactitude dont la méthode d'Euler explicite mieux d'elle celle implicite ou bien beaucoup mieux la méthode d'Euler symplectique, on a étudié ensuite la méthode de médiane symétrique, à l'exception de ces deux méthodes, on trouve celle de Störmer-Verlet.

Le deuxième chapitre, est consacré à aux méthodes les plus célèbres sont les méthodes de Runge-Kutta. Les méthodes de RK ont un algorithme en une étape de haute précision

largement utilisé en plusieurs domaines. Étant donné que cet algorithme à une grande précision, il est construit sur un support mathématique. La base théorique de la méthode de RK est dérivée de la formule de Taylor et utilise l'approximation de la pente pour exprimer la différentielle, on calculant la pente de plusieurs points dans la période d'intégration puis on implémente une moyenne pondérée à utiliser comme base pour le point suivant. On obtient la méthode d'intégration numérique élevée si la pente de deux points est prise à l'avance et alors c'est la méthode de Runge-Kutta du second ordre, et si quatre points sont pris à l'avance, c'est la méthode Runge-Kutta du quatrième ordre...Aussi on peut traiter les méthodes de R-K en tant que des méthodes de collocation, ces méthodes ont ces origines du rôle implicite des méthodes des trapèzes, ces méthodes de collocation ne donnent pas seulement une approximation discrète mais aussi une approximation continue sous forme d'un polynôme. Comparant l'énorme difficulté de construction des méthodes de R-K 5 et 6 et plus Guillou et soulé ont découvert une preuve très simple utilisant ces méthodes de collocation.

Dans le chapitre trois nous consolidons notre travail par des simulations numériques du problème des 2-crops qui est la plus grande réalisation de l'histoire des sciences, déduit des lois de Kepler, tel que nous intéressons aux orbites et de la conservation de l'énergie qui est représentée dans ce problème par l'hamiltonien. Tous les programmes sont écrits en Matlab 2017a.

CHAPITRE

1

LES PREMIÈRES MÉTHODES

1.1 Problème de Cauchy

Définition 1.1 *Étant donné le problème :*

$$\begin{cases} \dot{\mathbf{y}}(x) = \mathbf{f}(x, \mathbf{y}(x)) & , \forall x \in [a, b] \\ \mathbf{y}(a) = \boldsymbol{\eta} & , \text{donné dans } \mathbf{R}^n. \end{cases} \quad (1.1)$$

le problème de Cauchy consiste à la recherche d'une fonction \mathbf{y} de classe \mathbf{C}^1 vérifiant (1.1)

Définition 1.2 *On dit que la fonction $\mathbf{f} : [a, b] \times \mathbf{R}^n \rightarrow \mathbf{R}^n$ est lipschitzienne en \mathbf{y} dans $[a, b] \times \mathbf{R}^n$ s'il existe une constante réelle strictement positive $L > 0$, appelée constante de Lipschitz telle que :*

$$\|\mathbf{f}(x, \mathbf{y}) - \mathbf{f}(x, \mathbf{y}^*)\| \leq L \|\mathbf{y} - \mathbf{y}^*\| : \quad \forall x \in [a, b]; \quad \forall \mathbf{y}, \mathbf{y}^* \in \mathbf{R}^n. \quad (1.2)$$

Théorème 1.1 *Soit le problème de Cauchy (1.1) si $\mathbf{f} : [a, b] \times \mathbf{R}^n \rightarrow \mathbf{R}^n$ vérifie les conditions suivantes :*

1. f continue

$$2. \|f(x, y) - f(x, y^*)\| \leq L \|y - y^*\|; L > 0 \quad \forall x \in [a, b], \forall y, y^* \in \mathbb{R}^n$$

Alors le problème de Cauchy (1.1) admet une solution (fonction y de classe C^1) unique de classe $C^1([a, b], \mathbb{R}^n)$.

Dans cette section, nous nous intéressons aux méthodes numériques qui s'intéressent à la résolution du problème précédent de Cauchy.

On commence par la méthode d'Euler la méthode la plus simple et très connue.

1.2 Méthodes d'Euler

L'inégale

$$y(t_{n+1}) - y(t_n) = \int_{t_n}^{t_{n+1}} f(t, y(t)) dt \quad (1.3)$$

peut s'approcher par la méthode du rectangle à gauche :

$$\int_{t_n}^{t_{n+1}} f(t, y(t)) dt \simeq h \times f(t_n, y(t_n)) \quad (1.4)$$

D'où le schéma itératif suivant :

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + hf(t_n, y_n) \\ y_0 = y(0) \end{cases} \quad (1.5)$$

Il s'agit de la fameuse méthode d'Euler explicite.

L'erreur produite correspond à l'aire de forme quasi triangulaire et de dimension $h \times ph$ où p est la pente de f à l'instant t_n . L'erreur vaut donc à peu près :

$$e_n = \frac{1}{2}ph^2$$

Après N itération, on a une erreur globale de l'ordre de $N \frac{1}{2}ph^2 = \frac{1}{2}Tph$ où T est la durée totale. Aussi, pour une durée donnée, l'erreur totale augmente linéairement avec le pas h : on dit que la méthode d'Euler est d'ordre un, appelée aussi \ll *méthode de tangente* \gg .

1.2.1 Méthode d'Euler explicite

En réalité la formule représente la méthode d'Euler explicite est la plus simple des méthodes d'Euler

$$\mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{y}_n + h\mathbf{f}(\mathbf{y}_n) \quad (1.6)$$

Elle utilise un pas constant h pour calculer, les unes après les autres, des approximations $\mathbf{y}_1, \mathbf{y}_2, \mathbf{y}_3, \dots$ aux valeurs $\mathbf{y}(h), \mathbf{y}(2h), \mathbf{y}(3h), \dots$ de la solution à partir d'une valeur initiale donnée $\mathbf{y}(0) = \mathbf{y}_0$. La méthode est appelée explicite, car l'approximation \mathbf{y}_{n+1} est calculée à l'aide d'une évaluation explicite de \mathbf{f} à la valeur déjà connue \mathbf{y}_n , une telle formule représente une application

$$\phi_n : \mathbf{y}_n \rightarrow \mathbf{y}_{n+1}$$

1.2.2 Méthode d'Euler implicite

La méthode d'Euler implicite

$$\mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{y}_n + h\mathbf{f}(\mathbf{y}_{n+1}) \quad (1.7)$$

est connu pour ses propriétés de stabilité de tout amortissement. Contrairement à (1.6), l'approximation \mathbf{y}_{n+1} est définie implicitement par (1.7) et l'implémentation nécessite la solution numérique d'un système d'équations non linéaires

1.2.3 Méthode d'Euler symplectique

Elle est appliquée aux systèmes partitionnés sous la forme suivante

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{u}} &= \mathbf{a}(\mathbf{u}, \mathbf{v}) \\ \dot{\mathbf{v}} &= \mathbf{b}(\mathbf{u}, \mathbf{v}) \end{aligned} \quad (1.8)$$

Suivant ces systèmes, nous considérons une méthode d'Euler partitionnés :

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_{n+1} &= \mathbf{u}_n + h\mathbf{a}(\mathbf{u}_n, \mathbf{v}_{n+1}) \quad \text{ou} \quad \mathbf{u}_{n+1} = \mathbf{u}_n + h\mathbf{a}(\mathbf{u}_n, \mathbf{v}_{n+1}) \\ \mathbf{v}_{n+1} &= \mathbf{v}_n + h\mathbf{b}(\mathbf{u}_n, \mathbf{v}_{n+1}) \quad \mathbf{v}_{n+1} = \mathbf{v}_n + h\mathbf{b}(\mathbf{u}_n, \mathbf{v}_{n+1}) \end{aligned} \quad (1.9)$$

qui traitent une variable par l'autre par la méthode explicite d'Euler. Compte tenu d'une propriété importante de cette méthode découverte par de Veegaere(1956), et à discuter, nous appelons méthode d'Euler symplectique.

1.3 Méthode du point médian

En prenant la moyenne de \mathbf{y}_n et \mathbf{y}_{n+1} dans l'argument de f , on obtient la règle implicite du point médian

$$\mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{y}_n + h f\left(\frac{\mathbf{y}_n + \mathbf{y}_{n+1}}{2}\right) \quad (1.10)$$

C'est une méthode symétrique, la formule est laissée inchangée après échange de $\mathbf{y}_n \leftrightarrow \mathbf{y}_{n+1}$ et $h \leftrightarrow -h$

1.4 Méthode de Strömer-Verlet

On trouve souvent des problèmes sous la formulation suivante :

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{p}} &= \mathbf{f}(\mathbf{q}) \\ \dot{\mathbf{q}} &= \mathbf{p} \\ \text{où } \ddot{\mathbf{q}} &= \mathbf{f}(\mathbf{q}) \end{aligned} \quad (1.11)$$

quelle est le cas particulier important d'une équation différentielle du second ordre. La discrétisation la plus naturalisée de (1.7) est

$$\mathbf{q}_{n+1} - 2\mathbf{q}_n + \mathbf{q}_{n-1} = h^2 \mathbf{f}(\mathbf{q}_n)$$

qui s'obtient juste en remplaçant la dérivée seconde dans (1.7) par la quotient centrale des différences d'ordre deux. Cette méthode de base, où sa formulation équivalente donnée s'appelle la méthode Störmer-Verlet appliquée souvent en astronomie.

CHAPITRE

2

INTÉGRATEURS NUMÉRIQUES

Après avoir au premier chapitre quelques méthodes numériques simples, nous présentons maintenant des classes plus élaborées des méthodes numériques. Nous commençons par les méthodes de Runge-Kutta, les méthodes de collocation, méthodes de Gauss et Lobatto et les méthodes de Runge-Kutta partitionnées, ces derniers qui peuvent être appliquées à des problèmes partitionnés tels que les système hamiltoniens séparables.

2.1 Méthodes de Runge-Kutta

Dans cette section, nous traitons des systèmes non autonomes d'équations différentielles ordinaires du premier ordre.

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{y}} &= \mathbf{f}(t, \mathbf{y}) \\ \mathbf{y}(t_0) &= \mathbf{y}_0 \end{aligned} \tag{2.1}$$

On intègre l'équation (2.1) sur le domaine $[t_0, t_1]$

$$\int_{t_0}^{t_1} \dot{\mathbf{y}} = \int_{t_0}^{t_1} \mathbf{f}(t, \mathbf{y}(t)) \Rightarrow \mathbf{y}(t_1) - \mathbf{y}(t_0) = \int_{t_0}^{t_1} \mathbf{f}(t, \mathbf{y}(t))$$

on a $\mathbf{y}(t_0) = \mathbf{y}_0$ donc

$$\mathbf{y}(t_1) = \mathbf{y}_0 + \int_{t_0}^{t_1} \mathbf{f}(t, \mathbf{y}(t)) dt$$

En remplaçant l'intégrale par la règle des trapèzes, on obtient

$$\mathbf{y}_1 = \mathbf{y}_0 + \frac{h}{2}(\mathbf{f}(t_0, \mathbf{y}_0) + \mathbf{f}(t_1, \mathbf{y}_1)) \quad (2.2)$$

C'est la règle des trapèzes implicite, qui en plus de son importance historique pour les calculs des équation aux dérivées partielles (Crank-Nicolson) et dans la théorie de la stabilité (Dahlquist), elle a joué un rôle crucial encore plus tôt dans la découverte des méthodes de Runge-Kutta, c'était le point de départ de Runge (1895), qui a "prédit" la valeur \mathbf{y}_1 inconnue à droite par un pas d'Euler, et a obtenu la première des formules suivantes (la seconde étant la formule analogue pour la règle du point médian)

$$\begin{aligned} \mathbf{k}_1 &= \mathbf{f}(t_0, \mathbf{y}_0) & \mathbf{k}_1 &= \mathbf{f}(t_0, \mathbf{y}_0) \\ \mathbf{k}_2 &= \mathbf{f}(t_0 + h, \mathbf{y}_0 + h\mathbf{k}_1) & \mathbf{k}_2 &= \mathbf{f}(t_0 + \frac{h}{2}, \mathbf{y}_0 + \frac{h}{2}\mathbf{k}_1) \\ \mathbf{y}_1 &= \mathbf{y}_0 + \frac{h}{2}(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2) & \mathbf{y}_1 &= \mathbf{y}_0 + h\mathbf{k}_2 \end{aligned} \quad (2.3)$$

Ces méthodes ont une belle interprétation géométrique elles consistent des lignes polygonales, qui assument les pentes prescrites par l'équation différentielle évaluée aux points précédents

L'idée de Heun(1900)et Kutta(1901) : est de calculer plusieurs droites polygonales, chacune partant de \mathbf{y}_0 et supposant les différentes pentes \mathbf{k}_j sur des portions de l'intervalle d'intégration, qui sont proportionnels à certaines constantes données \mathbf{a}_{ij} ; au point final de chaque polygone, évaluer une nouvelle pente \mathbf{k}_i , le dernier de ces polygones avec des constantes \mathbf{b}_i détermine la solution numérique \mathbf{y}_1 . Cette idée conduit à la classe des méthodes Runge-Kutta explicites, c'est -à-dire la formule (2.4) ci dessous avec $\mathbf{a}_{ij} = \mathbf{0}$ pour $i \leq j$.

Beaucoup plus importantes pour notre propos sont les méthodes Runge-Kutta implicites, introduites principalement dans les travaux de Butcher (1963).

Définition 2.1 Soit $\mathbf{b}_i, \mathbf{a}_{ij} (i, j = 1, \dots, s)$ des nombres réels et soit

$$\mathbf{c}_i = \sum_{j=1}^s \mathbf{a}_{ij}$$

Une méthode Runge-kutta s -stage est donnée par

$$\begin{aligned} \mathbf{k}_1 &= \mathbf{f}(t_0 + \mathbf{c}_i h, \mathbf{y}_0 + h \sum_{j=1}^s \mathbf{a}_{ij} \mathbf{k}_j), i = 1, \dots, s \\ \mathbf{y}_1 &= \mathbf{y}_0 + h \sum_{i=1}^s \mathbf{b}_i \mathbf{k}_i \end{aligned} \tag{2.4}$$

Ici nous autorisons une matrice complète \mathbf{a}_{ij} de coefficients non nuls. Dans ce cas, les pentes \mathbf{k}_i ne peuvent plus être calculées explicitement, et même n'existent pas nécessairement et pour h suffisamment petit, le système non linéaire (2.4) pour les valeurs $\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_s$ avait une solution localement unique proche de $\mathbf{k}_i \approx \mathbf{f}(t_0, \mathbf{y}_0)$

Depuis les travaux de Butcher, les coefficients sont généralement présentés comme suit

$$\begin{array}{c|ccc} \mathbf{c}_1 & \mathbf{a}_{11} & \cdots & \mathbf{a}_{1s} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \mathbf{c}_s & \mathbf{a}_{s1} & \cdots & \mathbf{a}_{ss} \\ \hline & \mathbf{b}_1 & \cdots & \mathbf{b}_s \end{array} \tag{2.5}$$

Définition 2.2 La méthode Rungr-Kutta (où une méthode générale en une étape) est d'ordre p , si pour tout problème suffisamment régulier (2.1) l'erreur locale $\mathbf{y}_1 - \mathbf{y}(t_0 + \mathbf{h})$ satisfait :

$$\mathbf{y}_1 - \mathbf{y}(t_0 + \mathbf{h}) = O(h^{p+1}) \text{ comme } h \rightarrow 0$$

Pour vérifier l'ordre d'une méthode de Runge-Kutta, il faut calculer le développement en série de Taylor de $\mathbf{y}(t_0 + \mathbf{h})$ et \mathbf{y}_1 autour de $\mathbf{h} = \mathbf{0}$. Cela conduit à les conditions algébriques suivantes pour les coefficients des ordres 1 et 2 :

Pour l'ordre 1 :

$$\sum_{i=1}^s \mathbf{b}_i = 1 \tag{2.6}$$

On utilise les développements Taylor de $\mathbf{y}(t_0 + h)$

$$\mathbf{y}(t_0 + h) = \mathbf{y}(t_0) + h\dot{\mathbf{y}}(t_0, \mathbf{y}(t_0)) + O(h^2)$$

On a $\mathbf{y}(t_0) = \mathbf{y}_0$ et $\dot{\mathbf{y}}(t_0, \mathbf{y}(t_0)) = \mathbf{f}(t_0, \mathbf{y}_0)$

$$\mathbf{y}(t_0 + h) = \mathbf{y}_0 + h\mathbf{f}(t_0, \mathbf{y}_0) + O(h^2)$$

$$\mathbf{y}(t_0 + h) - \mathbf{y}_0 = h\mathbf{f}(t_0, \mathbf{y}_0)$$

donc

$$\mathbf{y}_1 - \mathbf{y}_0 = h\mathbf{b}_1\mathbf{k}_1$$

$$\text{et } \mathbf{k}_1 = \mathbf{f}(t_0h + \mathbf{c}_1, \mathbf{y}_0 + h\mathbf{a}_{11}\mathbf{k}_1)$$

$$\begin{cases} \mathbf{b}_1 = 1 \\ \mathbf{c}_1 = 0 \\ \mathbf{a}_{11} = 0 \end{cases}$$

dans ce cas le tableau de Butcher est le suivant :

$$\begin{array}{c|c} 0 & 0 \\ \hline & 1 \end{array}$$

Pour l'ordre 2 :

$$\sum_{i=1} \mathbf{b}_i\mathbf{c}_i = 1/2$$

On utilise les développements de Taylor de $\mathbf{y}(t_0 + h)$ d'ordre 2

$$\mathbf{y}(t_0 + h) = \mathbf{y}(t_0) + h\dot{\mathbf{y}}(t_0, \mathbf{y}_0) + \frac{h^2}{2}\ddot{\mathbf{y}}(t_0, \mathbf{y}_0) + O(h^3)$$

$$(\mathbf{y}(t_0 + h) - \mathbf{y}(t_0))/h = \dot{\mathbf{y}}(t_0, \mathbf{y}_0) + \frac{h}{2}\ddot{\mathbf{y}}(t_0, \mathbf{y}_0) + O(h^2)$$

On a $\mathbf{y}(t_0) = \mathbf{y}_0$ et $\dot{\mathbf{y}}(t_0, \mathbf{y}_0) = \mathbf{f}(t_0, \mathbf{y}_0)$, $\ddot{\mathbf{y}}(t_0, \mathbf{y}_0) = \mathbf{f}'(t_0, \mathbf{y}_0)$

donc

$$\begin{aligned} (y(t_0 + h) - y(t_0))/h &= f(t_0, y_0) + \frac{h}{2} f''(t_0, y_0) \\ (y(t_0 + h) - y(t_0))/h &= f(t_0, y_0) + \frac{h}{2} [f_t + f' f_y] \end{aligned}$$

$$\sum_{i=1} b_i k_i = b_1 k_1 + b_2 k_2 = b_1 f(t_0, y_0) + b_2 f(t_0 + c_1 h, y_0 + a_{11} h k_1 + c_2 b_2 f_t + b_2 a_{11} f' f_y)$$

$$\begin{cases} b_1 + b_2 = 1 \\ c_1 b_2 = 1/2 \\ a_{11} b_2 = 1/2 \end{cases}$$

On pose $b_1 = 1/2$ donc

$$\begin{cases} b_1 = 1/2 \\ c_1 = 1 \\ a_{11} = 1 \\ b_2 = 1/2 \end{cases}$$

Pour les ordres supérieurs, cependant, ce problème a représenté un grand défi dans la première moitié 20 ème siècle.

Parmi les méthodes vues jusqu'à présent, les méthodes d'Euler explicite et implicite.

$$\begin{array}{c|c} 0 & 1 \\ \hline & 1 \end{array} \quad \begin{array}{c|c} 1 & 1 \\ \hline & 1 \end{array} \quad (2.7)$$

sont d'ordre 1, les règles implicites de trapèze et médianes ainsi que les deux méthodes de Runge

$$\begin{array}{c|cc} 0 & & \\ \hline 1 & 1/2 & 1/2 \\ \hline & 1/2 & 1/2 \end{array} \quad \begin{array}{c|c} 1/2 & 1/2 \\ \hline & 1 \end{array} \quad \begin{array}{c|c} 0 & \\ \hline 1 & 1 \\ \hline & 1/2 & 1/2 \end{array} \quad \begin{array}{c|c} 0 & \\ \hline 1/2 & 1/2 \\ \hline & 0 & 1 \end{array}$$

sont d'ordre 2. Les méthodes les plus réussies pendant plus d'un demi-siècle ont été les

méthodes du 4ème ordre de Kutta :

$$\begin{array}{c|cccc}
 0 & & & & \\
 1/2 & 1/2 & & & \\
 1/2 & 0 & 1/2 & & \\
 1 & 0 & 0 & 1 & \\
 \hline
 & 1/6 & 2/6 & 2/6 & 1/6
 \end{array}
 \qquad
 \begin{array}{c|ccc}
 0 & & & \\
 1/3 & 1/3 & & \\
 2/3 & -1/3 & 1 & \\
 1 & 1 & -1 & 1 \\
 \hline
 & 1/8 & 3/8 & 3/8 & 1/8
 \end{array}
 \tag{2.8}$$

2.2 Méthodes de collocation

Les méthodes de collocation pour les équations différentielles ordinaires ont leur origine, encore une fois, dans la règle de trapèze implicite (2.2) : Hammer et Hollingsworth (1955) ont découvert que cette méthode peut être interprétée comme étant engendré par une fonction quadratique. Une caractéristique intéressante des méthodes de collocation est que nous obtenons non seulement un ensemble discret d'approximations, mais aussi une approximation continue de la solution.

Définition 2.3 Soit c_1, \dots, c_s des nombres réels distincts (*généralement* $0 \leq c_i \leq 1$). Le polynôme de collocation $u(t)$ est un polynôme de degré s satisfaisant

$$\begin{aligned}
 u(t_0) &= y_0 \\
 \dot{u}(t_0 + c_i h) &= f(t_0 + c_i h, u(t_0 + c_i h)), \quad i = 1, \dots, s
 \end{aligned}
 \tag{2.9}$$

et la solution numérique de la méthode de collocation est définie par $y_1 = u(t_0 + h)$.

Pour $s = 1$, le polynôme doit être $u(t) = y_0 + (t - t_0)k$ avec

$$k = f(t_0 + c_1 h, y_0 + h c_1 k)$$

Nous voyons que les méthodes d'Euler explicites et implicite et la règle du point médian sont des méthodes de collocation avec respectivement $c_1 = 0$, $c_1 = 1$ et $c_1 = 1/2$. Pour $s = 2$ et $c_1 = 1$ on retrouve bien entendu, la règle des trapèzes implicite. Le choix de Hammer et Hollingsworth pour les points de collocation est $c_{1,2} = 1/2 \pm \sqrt{3}/6$ les nœuds en quadrature gaussienne. On verra que la méthode correspondante est d'ordre 4.

Théorème 2.1 (Guillou et Soulé 1969 ,Wright 1970) La méthode de collocation de la définition 2.3 est équivalente à la méthode de Runge-Kutta à s étapes (2.4) avec les coefficients

$$\mathbf{a}_{ij} = \int_0^{c_i} l_j(\tau) d\tau, \quad \mathbf{b}_i = \int_0^1 l_i(\tau) d\tau \quad (2.10)$$

Où $l_i(\tau)$ est le polynôme de Lagrange

$$l_i(\tau) = \prod_{l \neq i} (\tau - c_l) / (c_i - c_l)$$

Preuve

Soit $\mathbf{u}(\mathbf{t})$ le polynôme de collocation et définissons

$$\mathbf{k}_i = \dot{\mathbf{u}}(\mathbf{t}_0 + \mathbf{c}_i \mathbf{h}).$$

Par la formule d'interpolation de Lagrange on a

$$\dot{\mathbf{u}}(\mathbf{t}_0 + \tau \mathbf{h}) = \sum_{j=1}^s \mathbf{k}_j \cdot l_j(\tau)$$

et par intégration

$$\begin{aligned} \int_0^{c_i} \dot{\mathbf{u}}(\mathbf{t}_0 + \tau \mathbf{h}) d\tau &= \int_0^{c_i} \sum_{j=1}^s \mathbf{k}_j l_j(\tau) d\tau \\ \mathbf{u}(\mathbf{t}_0 + \mathbf{c}_i \mathbf{h}) - \mathbf{u}(\mathbf{t}_0) &= \sum_{j=1}^s \mathbf{k}_j \int_0^{c_i} l_j(\tau) d\tau \end{aligned}$$

On a $\mathbf{u}(\mathbf{t}_0) = \mathbf{y}_0$ et

$$\int_0^{c_i} d\tau = h$$

Donc on obtient

$$\mathbf{u}(\mathbf{t}_0 + \mathbf{c}_i \mathbf{h}) = \mathbf{y}_0 + h \sum_{j=1}^s \mathbf{k}_j \int_0^{c_i} l_j(\tau) d\tau$$

Inséré dans (2.9) cela donne la première formule de la formule de Runge-Kutta (2.4).

L'intégration de 0 à 1 donne la seconde.

La preuve ci-dessus peut également être lue dans l'ordre inverse. Cela montre que'une méthode de Runge-Kutta avec les coefficients donnés par (2.10) peut être interprétée comme

une méthode de collocation. Puisque

$$\tau^{k-1} = \sum_{j=1}^s c_j^{k-1} l_j(\tau)$$

pour $k = 1, \dots, s$ les relation (2.10) sont équivalentes aux systèmes linéaires.

$$\begin{aligned} C(q) : \sum_{j=1}^s a_{ij} c_j^{k-1} &= \frac{c_i^k}{k}, k = 1, \dots, q \\ B(p) : \sum_{j=1}^s b_i c_j^{k-1} &= \frac{1}{k}, k = 1, \dots, p \end{aligned} \tag{2.11}$$

avec $q = s$ et $p = s$. Quel est l'ordre d'une méthode de Runge-Kutta dont les coefficients b_i, a_{ij} sont ainsi déterminés ?

Par rapport aux énormes difficultés qu'eurent les premiers explorateurs à construire les méthodes de Runge-Kutta d'ordres 5 et 6, et aussi par rapport à la difficile preuves algébrique des premiers articles de Butcher, le théorème général suivant et sa preuve découverte dans celui-ci par Guillou et Soulé (1969), sont étonnamment simples.

Théorème 2.2 (*super convergence*) *Si la condition $B(p)$ est vérifiée pour certains $p > s$ alors la méthode de collocation (Définition 2.3) est d'ordre p . Cela signifie que la méthode de collocation a le même ordre que la formule de quadrature sous-jacente .*

Preuve

On considère le polynôme de collocation $\mathbf{u}(t)$ comme la solution d'une équation différentielle perturbée

$$\dot{\mathbf{u}} = \mathbf{f}(t, \mathbf{u}) + \delta(t) \tag{2.12}$$

avec défaut $\delta(t) = \dot{\mathbf{u}} - \mathbf{f}(t, \mathbf{u}(t))$. En soustrayant (2.1) de (2.12) on obtient après linéarisation

$$\dot{\mathbf{u}}(t) - \dot{\mathbf{y}}(t) = \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{y}}(t, \mathbf{y}(t))(\mathbf{u}(t) - \mathbf{y}(t)) + \delta(t) + \mathbf{r}(t) \tag{2.13}$$

où, pour $t_0 \leq t \leq t_0 + h$, le reste $\mathbf{r}(t)$ est de taille $O(\|\mathbf{u}(t) - \mathbf{y}(t)\|^2) = O(h^{2s+2})$

par le Lemme 2.1 ci-dessous. La formule de variation des constantes donne alors

$$\mathbf{y}_1 - \mathbf{y}(t_0 + h) = \mathbf{u}(t_0 + h) - \mathbf{y}(t_0 + h) = \int_{t_0}^{t_0+h} \mathbf{R}(t_0 + h, s)(\delta(s) + \mathbf{r}(s))ds \quad (2.14)$$

où $\mathbf{R}(t, s)$ est la résolvante de la partie homogène de l'équation différentielle (2.13), c'est-à-dire la solution de l'équation différentielle matricielle $\partial \mathbf{R}(t, s) / \partial t = \mathbf{A}(t)\mathbf{R}(t, s)$, $\mathbf{R}(s, s) = \mathbf{I}$ avec $\mathbf{A}(t) = \partial \mathbf{f} / \partial \mathbf{y}(t, \mathbf{y}(t))$. L'intégrale sur $\mathbf{R}(t_0 + h, s)\mathbf{r}(s)$ donne une contribution $\mathcal{O}(h^{2s+3})$. L'idée principale est maintenant d'appliquer la formule de quadrature $(\mathbf{b}_i, \mathbf{c}_i)_{i=1}^s$ à l'intégrale sur $\mathbf{g}(s) = \mathbf{R}(t_0 + h, s)\delta(s)$; parce que le défaut $\delta(s)$ disparaît aux points de collocation $t_0 + \mathbf{c}_i h$ pour $i = 1, \dots, s$, cela donne zéro comme résultat numérique. Ainsi, l'intégrale est égale à l'erreur de quadrature, qui est bornée par h^{p+1} fois une borne de la dérivée p de la fonction $\mathbf{g}(s)$. Cette ϵ est bornée indépendamment de h , car par le Lemme 2.1 toutes les dérivées du polynôme de collocation sont bornées uniformément comme $h \rightarrow 0$. Puisque, de toute façon, $p \leq 2s$, nous obtenons $\mathbf{y}_1 - \mathbf{y}(t_0 + h) = \mathcal{O}(h^{p+1})$ de (2.14).

Lemme 2.1 Le polynôme de collocation $\mathbf{u}(t)$ est une approximation d'ordre s de la solution exacte de (2.1) dans l'ensemble, c'est-à-dire

$$\|\mathbf{u}(t) - \mathbf{y}(t)\| \leq C.h^{s+1} \quad \text{pour } t \in [t_0, t_0 + h] \quad (2.15)$$

et pour h suffisamment petit.

De plus, les dérivées de $\mathbf{u}(t)$ satisfont pour $t \in [t_0, t_0 + h]$

$$\|\mathbf{u}(t)^{(k)} - \mathbf{y}(t)^{(k)}\| \leq C.h^{s+1-k} \quad \text{pour } k = 0, \dots, s.$$

Preuve

Le polynôme de collocation satisfait

$$\dot{\mathbf{u}}(t_0 + \tau h) = \sum_{i=1}^s \mathbf{f}(t_0 + \mathbf{c}_i h, \mathbf{u}(t_0 + \mathbf{c}_i h))l_i(\tau),$$

alors que la solution exacte de (2.1) satisfait

$$\dot{\mathbf{y}}(t_0 + \tau h) = \sum_{i=1}^s \mathbf{f}(t_0 + \mathbf{c}_i h, \mathbf{y}(t_0 + \mathbf{c}_i h))l_i(\tau) + h^s \mathbf{E}(\tau, h),$$

où l'erreur d'interpolation $\mathbf{E}(\boldsymbol{\tau}, \mathbf{h})$ est bornée par $\max_{t \in [t_0, t_0+h]} \|\mathbf{y}^{(s+1)}(t)\|/s!$ et ses dérivées satisfont

$$\|\mathbf{E}^{k-1}(\boldsymbol{\tau}, \mathbf{h})\| \leq \max_{t \in [t_0, t_0+h]} \frac{\|\mathbf{y}^{(s+1)}(t)\|}{(s-k+1)!}$$

Cela découle du fait que, par le théorème de Rolle, le polynôme différencié

$$\sum_{i=1}^s \mathbf{f}(t_0 + \mathbf{c}_i \mathbf{h}, \mathbf{y}(t_0 + \mathbf{c}_i \mathbf{h})) l_i^{(k-1)}(\boldsymbol{\tau})$$

peut être interprété comme le polynôme d'interpolation de $\mathbf{h}^{k-1} \mathbf{y}^k(t_0 + \boldsymbol{\tau} \mathbf{h})$ aux points $s-k+1$ situés dans $[t_0, t_0 + \mathbf{h}]$. L'intégration de la différence des deux équation ci dessus donne

$$\mathbf{y}(t_0 + \boldsymbol{\tau} \mathbf{h}) - \mathbf{u}(t_0 + \boldsymbol{\tau} \mathbf{h}) = \mathbf{h} \sum_{i=1}^s \Delta \mathbf{f}_i \int_0^\tau l_i(\boldsymbol{\sigma}) d\boldsymbol{\sigma} + \mathbf{h}^{s+1} \int_0^\tau \mathbf{E}(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{h}) d\boldsymbol{\sigma} \quad (2.16)$$

avec $\Delta \mathbf{f}_i = \mathbf{f}(t_0 + \mathbf{c}_i \mathbf{h}, \mathbf{y}(t_0 + \mathbf{c}_i \mathbf{h})) - \mathbf{f}(t_0 + \mathbf{c}_i \mathbf{h}, \mathbf{u}(t_0 + \mathbf{c}_i \mathbf{h}))$. En utilisant la condition de Lipschitz pour $\mathbf{f}(\mathbf{t}, \mathbf{y})$, cette relation donne

$$\max_{t \in [t_0, t_0+h]} \|\mathbf{y}(t) - \mathbf{u}(t)\| \leq \mathbf{h} \mathbf{C} \mathbf{L} \max_{t \in [t_0, t_0+h]} \|\mathbf{y}(t) - \mathbf{u}(t)\| + \mathbf{C} \mathbf{O} \mathbf{n} \mathbf{s} \mathbf{t} . \mathbf{h}^{s+1}$$

impliquant la déclaration (2.15) pour suffisamment petit $\mathbf{h} > 0$.

La preuve de la seconde affirmation découle de

$$\mathbf{h}^k (\mathbf{y}^{(k)}(t_0 + \boldsymbol{\tau} \mathbf{h}) - \mathbf{u}^{(k)}(t_0 + \boldsymbol{\tau} \mathbf{h})) = \mathbf{h} \sum_{i=1}^s \Delta \mathbf{f}_i l_i^{(k-1)}(\boldsymbol{\tau}) + \mathbf{h}^{s+1} \mathbf{E}^{k-1}(\boldsymbol{\tau}, \mathbf{h})$$

en utilisant une condition de Lipschitz pour $\mathbf{f}(\mathbf{t}, \mathbf{y})$ et l'estimation (2.15).

2.3 Les méthodes de Gauss

Si nous prenons $\mathbf{c}_1, \dots, \mathbf{c}_s$ comme les zéros de sème polynôme de Legendre

$$\frac{d^s}{dx^s} (x^s (x-1)^s),$$

la formule de quadrature interpolatoire est d'ordre $p = 2s$, et d'après le théorème (2.2), la méthode Runge-Kutta (ou collocation) basée sur ces nœuds est même ordre $2s$

Pour $s = 1$ nous obtenons la règle implicite du point médian. Les coefficients de Runge-Kutta pour $s = 2$ (la méthode de Hammer et Hollingsworth 1955) et $s = 3$ sont donnés dans tableau 1.1. La preuve des propriétés d'ordre pour le général s était un résultat sensationnel de Buther (1964). A cette époque, ces méthodes étaient considérées, du moins par les éditeurs de Math, d'être purement académique sans aucune valeur pratique; 5 ans plus tard, leur stabilité a été découverte, 12 ans plus tard leur B-stabilité, et 25 ans plus tard leur symplecticité. Ainsi, de tous les articles du numéro 85 de Math. de comput, le plus important pour nous est celui dont la publication a été la plus difficile.

$\frac{1}{2} - \frac{\sqrt{3}}{6}$	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{4} - \frac{\sqrt{3}}{6}$	$\frac{1}{2} - \frac{\sqrt{15}}{10}$	$\frac{5}{36}$	$\frac{2}{9} - \frac{\sqrt{15}}{15}$	$\frac{5}{36} - \frac{\sqrt{15}}{30}$
$\frac{1}{2} + \frac{\sqrt{3}}{6}$	$\frac{1}{4} + \frac{\sqrt{3}}{6}$	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{2} + \frac{\sqrt{15}}{10}$	$\frac{5}{36} + \frac{\sqrt{15}}{24}$	$\frac{2}{9} + \frac{\sqrt{15}}{15}$	$\frac{5}{36} + \frac{\sqrt{15}}{24}$
$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{5}{36} + \frac{\sqrt{15}}{30}$	$\frac{2}{9} + \frac{\sqrt{15}}{15}$	$\frac{5}{36} + \frac{\sqrt{15}}{24}$
	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$		$\frac{5}{18}$	$\frac{4}{9}$	$\frac{5}{18}$

Tableau 1.1 Méthodes d'ordre 4 et 6 de Gauss

2.4 Les méthodes de Lobatto IIIA

Les formules de quadrature de Lobatto ont l'ordre le plus élevé possible avec $c_1 = 0$ et $c_s = 1$. Dans ces conditions, les nœuds doivent être les zéros de

$$\frac{d^{s-2}}{dx^{s-2}}(x^{s-1}(x-1)^{s-1}) \tag{2.17}$$

et l'ordre de quadrature est $p = 2s - 2$. Les méthodes de collocation correspondantes sont appelées, pour des raisons historiques, méthodes Lobatto IIIA. Pour $s = 2$ nous avons la règle de trapèze implicite. Les coefficients pour $s = 3$ et $s = 4$ sont donnés dans le Tableau 1.2.

0	0	0	0
1/2	5/24	1/3	-1/24
1	1/6	2/3	1/6
	1/6	2/3	1/6

Tableau 1.2 Méthodes de Lobatto IIIA d'ordre 4

2.5 Méthodes de Runge-Kutta partitionnées

Certaines méthodes numériques intéressantes introduites au Chapitre I (Euler symplectique et la méthode de Strömer-Verlet) n'appartiennent pas à la classe des méthodes de Runge-Kutta. Ce sont des exemples importants de méthodes dites méthodes de Runge-Kutta partitionnées. Dans cette section, nous considérons les équations différentielles partitionnées

$$\dot{\mathbf{y}} = \mathbf{f}(\mathbf{y}, \mathbf{z}), \quad \dot{\mathbf{z}} = \mathbf{g}(\mathbf{y}, \mathbf{z}) \quad (2.18)$$

où \mathbf{y} et \mathbf{z} peuvent être des vecteurs de dimensions différentes. L'idée est de prendre deux méthodes différentes de Runge-Kutta, et de traiter les variables \mathbf{y} avec la première méthode $(\mathbf{a}_{ij}, \mathbf{b}_i)$, et les variables \mathbf{z} avec la seconde méthode $(\hat{\mathbf{a}}_{ij}, \hat{\mathbf{b}}_i)$

Définition 2.4 Soient $\mathbf{b}_i, \mathbf{a}_{ij}$ et $\hat{\mathbf{b}}_i, \hat{\mathbf{a}}_{ij}$ les coefficients de deux méthodes de Runge-Kutta. Une méthodes de Runge-Kutta partitionnées pour la solution de (2.18) est donnée par

$$\begin{aligned} \mathbf{k}_i &= \mathbf{f}\left(\mathbf{y}_0 + h \sum_{j=1}^s \mathbf{a}_{ij} \mathbf{k}_j, \mathbf{z}_0 + h \sum_{j=1}^s \hat{\mathbf{a}}_{ij} l_j\right), \\ \mathbf{l}_i &= \mathbf{g}\left(\mathbf{y}_0 + h \sum_{j=1}^s \mathbf{a}_{ij} \mathbf{k}_j, \mathbf{z}_0 + h \sum_{j=1}^s \hat{\mathbf{a}}_{ij} l_j\right), \\ \mathbf{y}_1 &= \mathbf{y}_0 + h \sum_{j=1}^s \mathbf{b}_j \mathbf{k}_j, \mathbf{z}_1 = \mathbf{z}_0 + h \sum_{j=1}^s \hat{\mathbf{b}}_j l_j \end{aligned} \quad (2.19)$$

Ces méthodes ont été proposées à l'origine par Hofer dans 1976 et par Griepentrog dans 1978 pour des problèmes avec des parties rigides et non rigides, L'importance pour les systèmes hamiltoniens n'a été découverte qu'au cours de la dernière décennie.

Un exemple intéressant est la méthode d'Euler symplectique, où la méthode d'Euler implicite $\mathbf{b}_1 = \mathbf{1}, \mathbf{a}_{11} = \mathbf{1}$ est combinée avec la méthode d'Euler explicite $\hat{\mathbf{b}}_1 = \mathbf{1}, \hat{\mathbf{a}}_{11} = \mathbf{0}$. La méthode de La Störmer-Verlet est de la forme (2.21) avec les coefficients donnés dans le

tableau 2.1.

Störmer-Verlet comme méthode de Runge-Kutta partitionnée

0	0	0	1/2	1/2	0
1	1/2	1/2	1/2	1/2	0
	1/2	1/2		1/2	1/2

Tableau 2.1

La théorie des méthodes de Runge-Kutta peut être étendue de manière simple aux méthodes partitionnées. Puisque (2.19) est une méthode en une étape $(\mathbf{y}_1, \mathbf{z}_1) = \Phi_h(\mathbf{y}_1, \mathbf{z}_1)$, la définition 2.1 de l'ordre s'applique directement, considérant les problèmes $\dot{\mathbf{y}} = \mathbf{f}(\mathbf{y}), \dot{\mathbf{z}} = \mathbf{g}(\mathbf{z})$, sans aucun terme de couplage, on voit que l'ordre de (2.19) ne peut pas dépasser $\min(p, \hat{p})$, où p et \hat{p} sont les ordres des deux méthodes.

Conditions pour le second ordre

En développant la solution exacte de (2.1) et la solution numérique (2.2) en série de Taylor, on voit que la méthode est d'ordre 2 si les conditions de couplage.

$$\sum_{ij} \mathbf{b}_i \hat{\mathbf{a}}_{ij} = \mathbf{1}/2, \quad \sum_{ij} \hat{\mathbf{b}}_i \mathbf{a}_{ij} = \mathbf{1}/2 \quad (2.20)$$

sont satisfaites en plus des conditions habituelles d'ordre Runge-Kutta pour l'ordre 2. La méthode du tableau 2.1 satisfait à ces conditions, et elle est donc d'ordre 2. Nous remarquons également que (2.20) est automatiquement satisfait par les méthodes partitionnées basées sur les mêmes nœuds de quadrature, c'est-à-dire

$$\mathbf{c}_i = \hat{\mathbf{c}}_i \text{ pour tous } i \quad (2.21)$$

où, comme d'habitude

$$\mathbf{c}_i = \sum_j \mathbf{a}_{ij} \text{ et } \hat{\mathbf{c}}_i = \sum_j \hat{\mathbf{a}}_{ij}$$

Conditions pour l'ordre trois

Les conditions pour l'ordre trois deviennent déjà assez compliquées, à moins que (2.21) ne soit satisfait. Dans ce cas, nous obtenons les conditions supplémentaires

$$\sum_{ij} b_i \hat{a}_{ij} c_j = 1/6, \quad \sum_{ij} \hat{b}_i a_{ij} c_j = 1/6. \quad (2.22)$$

CHAPITRE

3

SIMULATION NUMÉRIQUE

3.1 Définition du problème de Kepler

L'une des grandes réalisations de l'histoire des sciences a été la découverte des lois de J. Kepler (1609), basées sur de nombreuses mesures précises des positions de Mars par Tycho Brahe et lui-même. Les planètes se déplacent sur des orbites elliptiques avec le Soleil à l'un des foyers (première loi de Kepler)

Newton (principia 1687) a ensuite expliqué cette notion par sa loi générale d'attraction gravitationnelle (proportionnelle à $1/r^2$).

Cela ensuite ouvert la voie au traitement des mouvements célestes arbitraires en résolvant des équations différentielles.

Pour calculer le mouvement des deux corps qui s'attirent, nous avons choisi l'un des deux corps comme centre de notre système coordonné ; le mouvement restera alors dans un plan et on pourra utiliser le coordonné bidimensionnel $\mathbf{q} = (\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2)$ pour la position du second corps. Les lois de Newton, avec une normalisation appropriée, donnent alors les équations

différentielles suivantes.

$$\ddot{q}_1 = -\frac{q_1}{(q_1^2 + q_2^2)^{3/2}} \quad \ddot{q}_2 = -\frac{q_2}{(q_1^2 + q_2^2)^{3/2}} \quad (3.1)$$

Cela est équivalent à un système hamiltonien avec l'hamiltonien suivant :

$$H(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) = \frac{1}{2}(\mathbf{p}_1^2 + \mathbf{p}_2^2) - \frac{1}{\sqrt{q_1^2 + q_2^2}} \quad \mathbf{p}_i = \dot{\mathbf{q}}_i \quad (3.2)$$

Le système a non seulement l'énergie totale $H(\mathbf{p}, \mathbf{q})$ comme première intégrale, mais aussi le moment cinétique

$$L(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) = q_1 p_2 - q_2 p_1 \quad (3.3)$$

Ceci peut être vérifié par différenciation et n'est rien d'autre que la deuxième loi de Kepler, qui dit que les aires balayées en temps égaux sont égaux.

3.2 Intégration exacte du problème de Kepler

De (3.3) et (3.4), toute solution de (3.2) satisfaisait les deux relations

$$\frac{1}{2}(\dot{q}_1^2 + \dot{q}_2^2) - \frac{1}{\sqrt{q_1^2 + q_2^2}} = H_0, \quad q_1 \dot{q}_2 - q_2 \dot{q}_1 = L_0 \quad (3.4)$$

Où les constantes H_0 et L_0 sont déterminées par les valeurs initiales. En utilisant les coordonnées polaires $q_1 = r \cos \varphi$, $q_2 = r \sin \varphi$, ainsi le système devient

$$\frac{1}{2}(\dot{r}^2 + r^2 \dot{\varphi}^2) - \frac{1}{r} + H_0; r^2 \dot{\varphi} = L_0 \quad (3.5)$$

Pour sa solution on considère une fonction φ et on écrit $\dot{r} = \frac{dr}{d\varphi} \cdot \dot{\varphi}$. L'élimination de $\dot{\varphi}$ dans (2.6) donne alors

$$\frac{1}{2} \left(\left(\frac{dr}{d\varphi} \right)^2 + r^2 \right) \frac{L_0^2}{r^4} - \frac{1}{r} = H_0$$

Dans cette équation on utilise la substitution $r = 1/u$, $dr = -du/u^2$, ce qui donne (avec $L = d/d\varphi$)

$$\frac{1}{2}(u'^2 + u^2) - \frac{u}{L_0^2} - \frac{H_0}{L_0^2} = 0 \quad (3.6)$$

C'est un Hamiltonien pour le système

$$u'' + u = \frac{1}{d} \quad \text{c'est à dire} \quad u = \frac{1}{d} + c_1 \cos \varphi + c_2 \sin \varphi = \frac{1 + e \cos(\varphi - \varphi^*)}{d}$$

Où $d = L_0^2$ la constante e devienne, de (2.7).

$$e^2 = 1 + 2H_0L_0^2 \quad (3.7)$$

C'est précisément la formule (3.1) l'angle φ^* est déterminé par les valeurs initiales \mathbf{V}_0 et φ_0 . L'équation (3.1) représente une orbite elliptique d'excentricité e pour $H_0 < 0$ une parabole pour $H_0 > 0$, et une hyperbole pour $H=0$ une parabole.

Enfin, il faut déterminer les variables v est φ en fonction de avec la relation (3.2) et $\mathbf{r} = \mathbf{1}/u$, la seconde équation de (3.6) donne

$$\frac{d^2}{(1 + e \cos(\varphi - \varphi^*))^2} d\varphi = L_0 dt \quad (3.8)$$

Ce qui, après une intégration élémentaire, mais pas facile, représente une équation implicite pour $\varphi(t)$.

3.3 Intégration numérique du problème de Kepler

Toutes ces simulations ci-dessous indique l'orbite de la Terre avec les paramètres : $e = 0.1671022$ (l'excentricité de l'orbite), $h = 0.05$ (le pas du temps), $t_0 = 0$, $n = 4000$ (nombre des itérations), et les valeurs initiales

$$q_1(0) = 1 - e \quad q_2(0) = 0 \quad \dot{q}_1 = 0 \quad \dot{q}_2 = \sqrt{\frac{1+e}{1-e}} \quad (3.9)$$

La période de la solution est 2π .

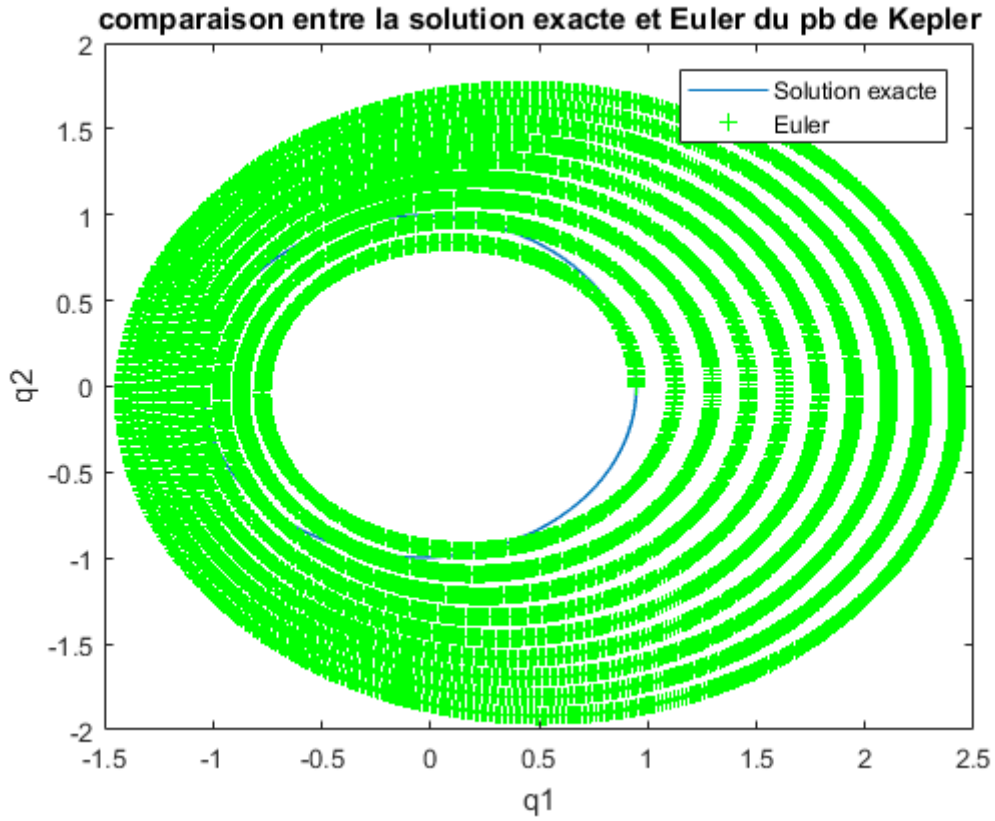


FIGURE 3.1 – comparaisons la solution exact et Euler du pb de Kepler

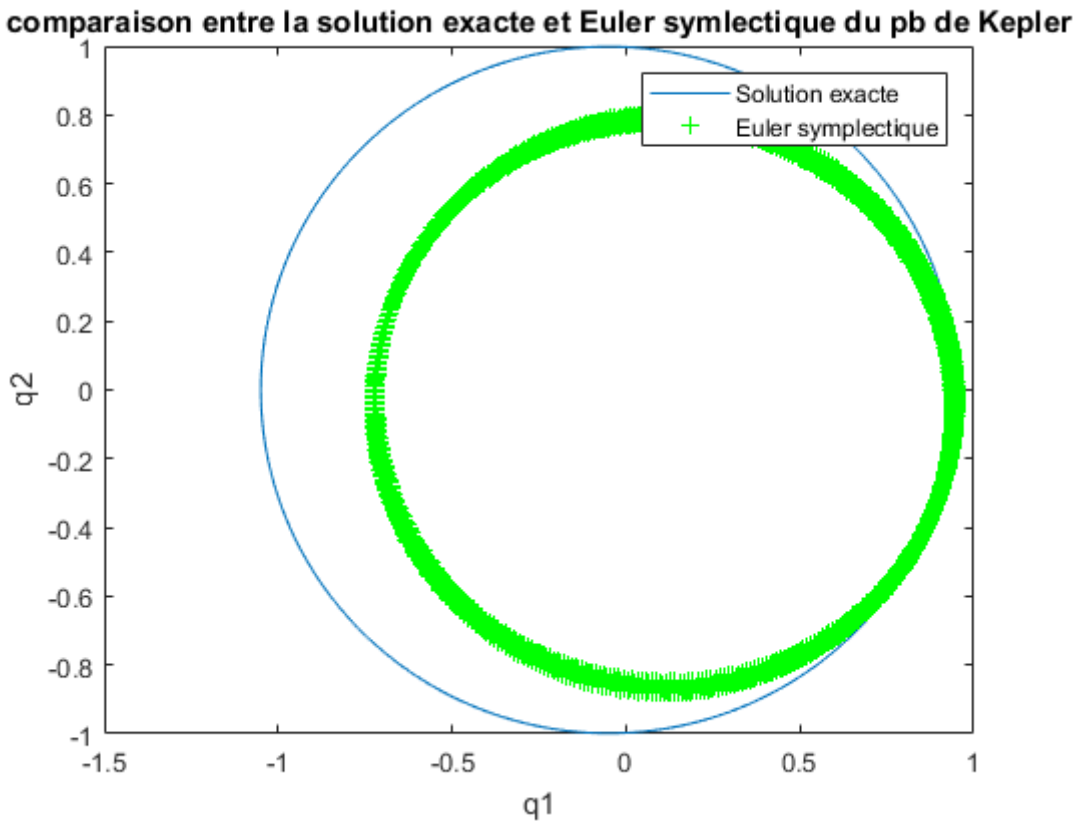


FIGURE 3.2 – comparaisons la solution exact et Euler symplectique du pb de Kepler

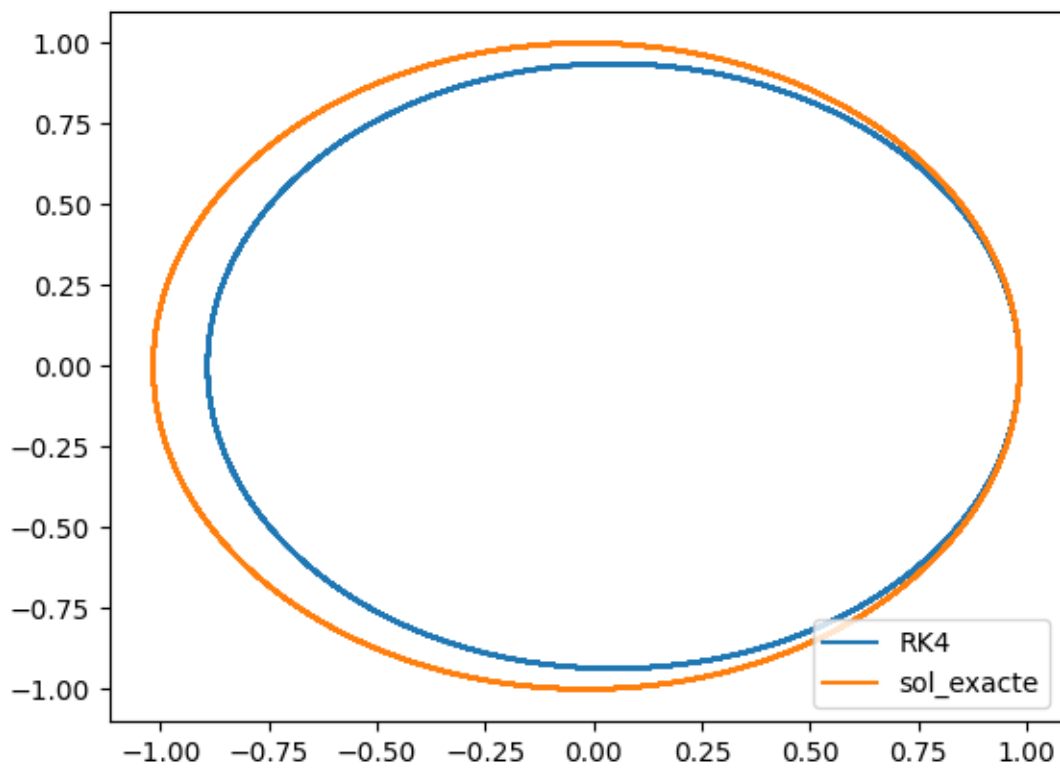


FIGURE 3.3 – comparaisons la solution exact et la méthode de Rk4

Les figures (3.1), (3.2) et (3.3) représente la comparaisons entre la solution exacte et celle approchée en utilisant les méthodes : Euler explicite, Euler symplectique et RK4. Après notre expérience précédente, ce n'est plus une surprise que la méthode explicite d'Euler tourne en spirale vers l'extérieure. Par contre les autres deux méthodes montrent une bonne approximation.

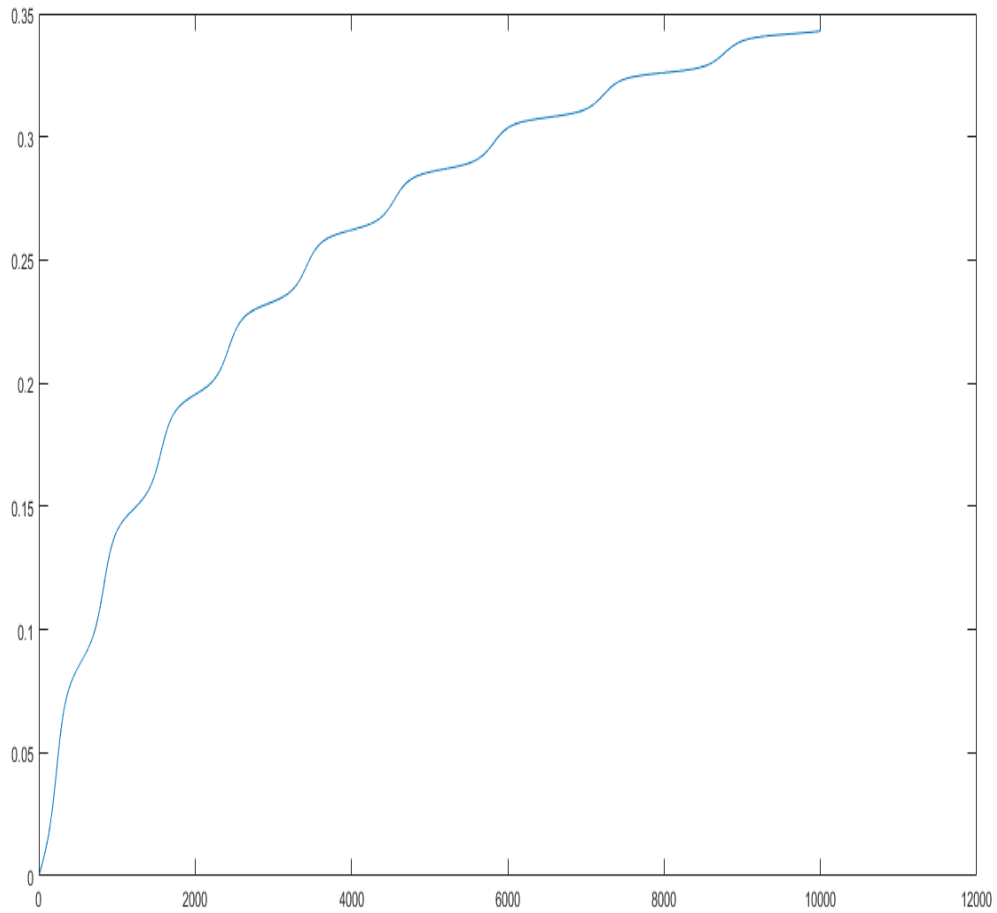


FIGURE 3.4 – Evolution de l'erreur hamiltonien de méthode Euler

On remarquant dans les figures(3.4),(3.5)et(3.6) la différence de la conservation de l'énergie en utilisant les trois méthodes Euler explicite, Euler symplectique et RK4.

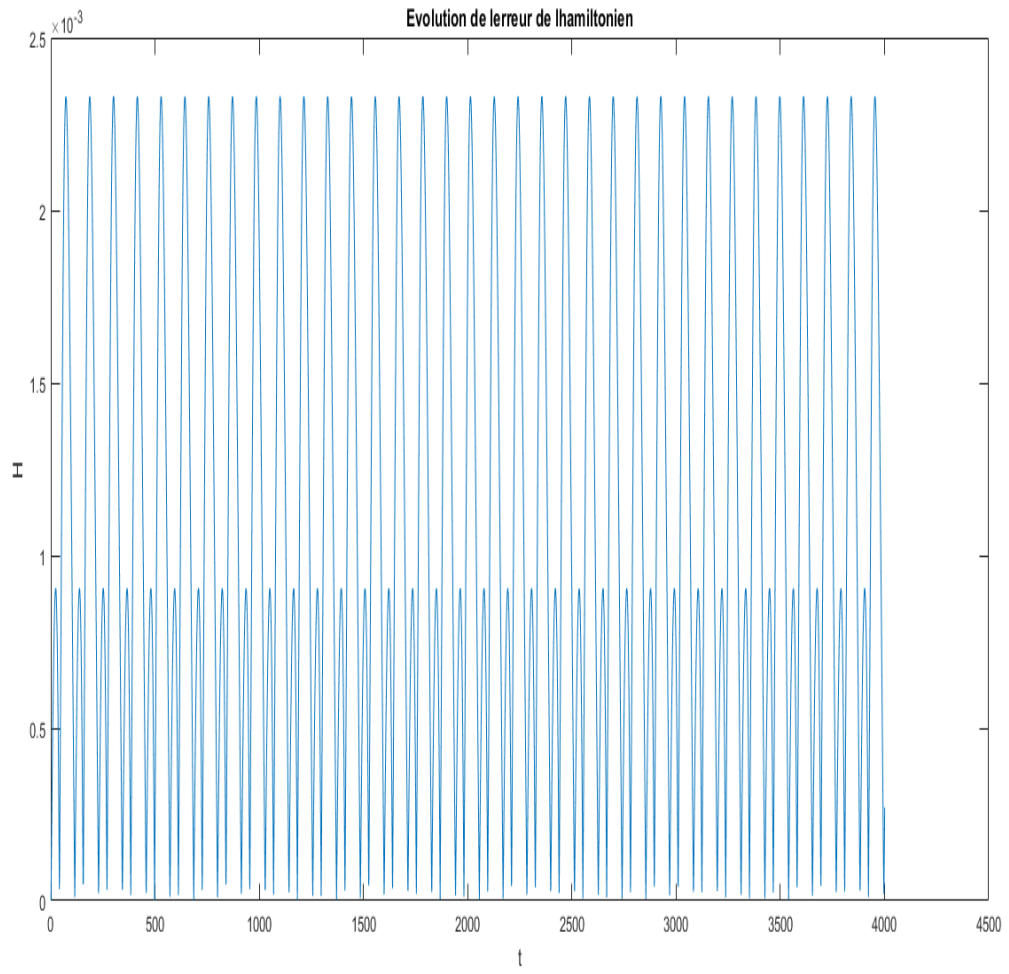


FIGURE 3.5 – Evolution de l'erreur hamiltonien de méthode symplectique

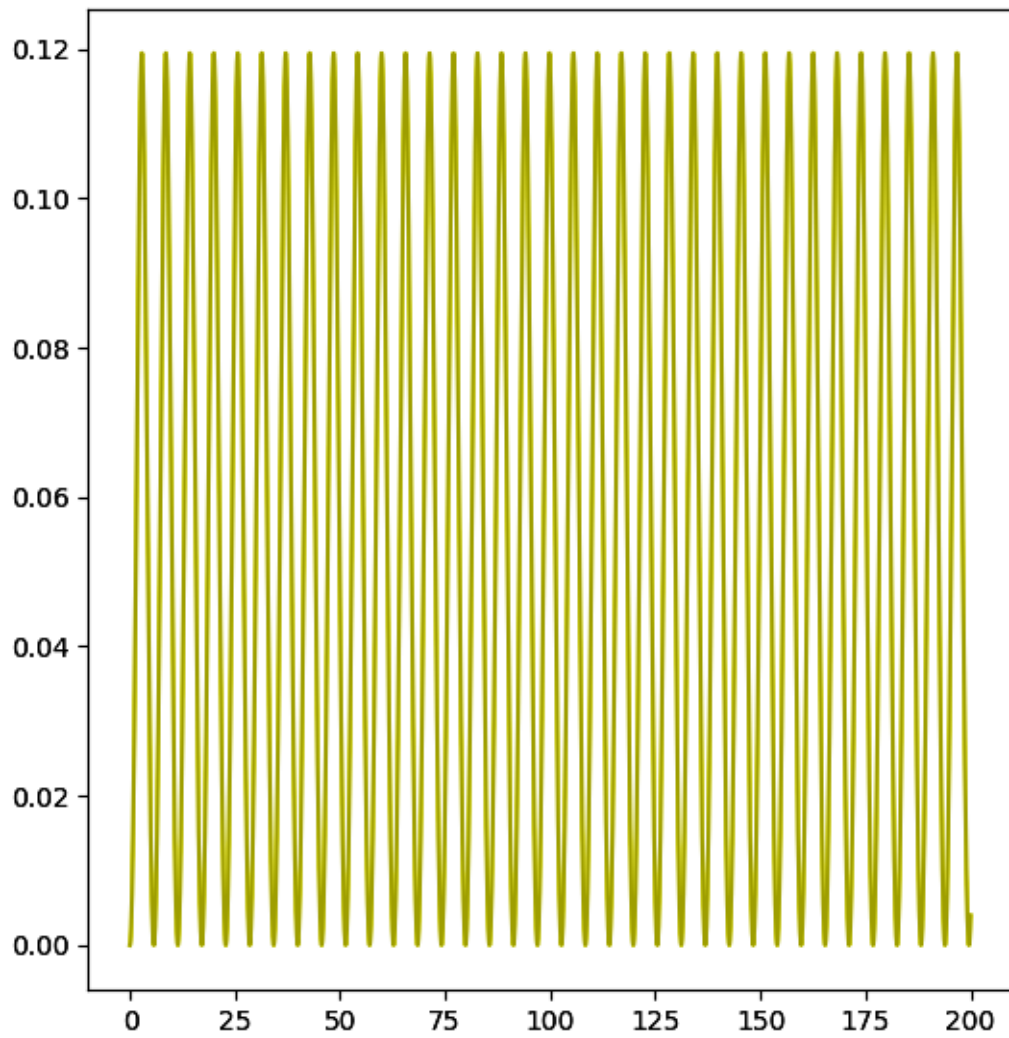


FIGURE 3.6 – Evolution de l'erreur hamiltonien de méthode de RK4

CONCLUSION

Dans cette mémoire, nous avons vu un ensemble des méthodes numériques bien connues, mais beaucoup d'entre elles n'ont pas été abordées, et des recherches sont toujours en cours à ce jour là, en particulier les méthodes de R-K, qui ont montré de bons résultats surtout celles symplectiques ou bien les récentes méthodes de relaxation R-K.

```
% Euler
h=0.05;
n=4000;
e=0.1671022;
q1=zeros(n,1);
q2=zeros(n,1);
p1=zeros(n,1);
p2=zeros(n,1);
q1(1)=1-e;
p2(1)=sqrt((1-e)/(1+e));
H=zeros(n,1);
H(1)=(1/2)*(p1(1)^2+p2(1)^2)-(1/(q1(1)^2+q2(1)^2))^(1/2);
for i=1:n-1
q1(i+1)=q1(i)+h*p1(i);
q2(i+1)=q2(i)+h*p2(i);
p1(i+1)=p1(i)-h*(q1(i)/(q1(i)^2+q2(i)^2)^(3/2));
p2(i+1)=p2(i)-h*(q2(i)/(q1(i)^2+q2(i)^2)^(3/2));
H(i+1)=(1/2)*(p1(i+1)^2+p2(i+1)^2)-(1/(q1(i+1)^2+q2(i+1)
^2))^(1/2);
end
errorH=max(abs(H(1)-H));
%solution exacte
t=[0:h:200]
q=zeros(n,1);
p=1-e^2;
for i=1:n-1
    q(i)=p/(1+e*cos(t(i)));
    x(i)=q(i)*cos(t(i));
    y(i)=q(i)*sin(t(i));
end
plot(x,y,q1,q2,'+g')
xlabel('q1')
ylabel('q2')
legend('Solution exacte','Euler')
title('comparaison entre la solution exacte et Euler du pb
de Kepler')
```

```

clear all
%euler symplectique
h=0.05;
n=4000;
e=0.01671022;
q1=zeros(n,1);
q2=zeros(n,1);
p1=zeros(n,1);
p2=zeros(n,1);
q1(1)=1-e;
p2(1)=sqrt((1-e)/(1+e));
H=zeros(n,1);
H(1)=(1/2)*(p1(1)^2+p2(1)^2)-(1/(q1(1)^2+q2(1)^2))^(1/2);
for i=1:n-1
    p1(i+1)=p1(i)-h*(q1(i)/(q1(i)^2+q2(i)^2)^(3/2));
    p2(i+1)=p2(i)-h*(q2(i)/(q1(i)^2+q2(i)^2)^(3/2));
    q1(i+1)=q1(i)+h*p1(i+1);
    q2(i+1)=q2(i)+h*p2(i+1);
    H(i+1)=(1/2)*(p1(i+1)^2+p2(i+1)^2)-(1/(q1(i+1)^2+q2(i+1)
^2))^(1/2);
end
errorH=max(abs(H(1)-H))
%solution exacte
t=[0:h:200]
q=zeros(n,1);
p=1-e^2;
for i=1:n-1
    q(i)=p/(1+e*cos(t(i)));
    x(i)=q(i)*cos(t(i));
    y(i)=q(i)*sin(t(i));
end
plot(x,y,q1,q2,'+g')
xlabel('q1')
ylabel('q2')
legend('Solution exacte','Euler symplectique')
title('comparaison entre la solution exacte et Euler
symplectique du pb de Kepler')

```

```

%méthode RK
clear all
clc
h=0.005;
n=4000;
e=0.01671022;
q1=zeros(n,1);
q1(1)=1-e;
p1=zeros(n,1);
q2=zeros(n,1);
p2=zeros(n,1);
p2(1)=sqrt((1-e)/(1+e));
H=zeros(n,1);
H(1)=(1/2)*(p1(1)^2+p2(1)^2)-(1/(q1(1)^2+q2(1)^2))^(1/2);
for i=1:n
    k1q1=p1(i);
    k1q2=p2(i);
    k1p1=-(q1(i))/(q1(i)^2+q2(i)^2)^(3/2);
    k1p2=-(q2(i))/(q1(i)^2+q2(i)^2)^(3/2);
    k2q1=p1(i)+(h/2)*k1p1;
    k2q2=p2(i)+(h/2)*k1p2;
    k2p1=-((q1(i)+(h/2)*k1q1)/((q1(i)+(h/2)*k1q1)^2+(q2(i)+
(h/2)*k1q2)^2)^(3/2));
    k2p2=-((q2(i)+(h/2)*k1q2)/((q1(i)+(h/2)*k1q1)^2+(q2(i)+
(h/2)*k1q2)^2)^(3/2));
    k3q1=p1(i)+(h/2)*k2p1;
    k3q2=p2(i)+(h/2)*k2p2;
    k3p1=-((q1(i)+(h/2)*k2p1)/((q1(i)+(h/2)*k2q1)^2+(q2(i)+
(h/2)*k2q2)^2)^(3/2));
    k3p2=-((q2(i)+(h/2)*k2p2)/((q1(i)+(h/2)*k2q1)^2+(q2(i)+
(h/2)*k2q2)^2)^(3/2));
    k4q1=p1(i)+h*k3p1;
    k4q2=p2(i)+h*k3p2;
    k4p1=-((q1(i)+h*k3q1)/((q1(i)+h*k3q1)^2+(q2(i)+h*k3q2)
^2)^(3/2));
    k4p2=-((q2(i)+h*k3q2)/((q1(i)+h*k3q1)^2+(q2(i)+h*k3q2)
^2)^(3/2));

```

BIBLIOGRAPHIE

- [1] A. Guillou and J.L. Soulé, *La résolution numérique des problèmes différentiels aux conditions initiales par les méthodes de collocation*. Rev. française Informat. Recherche Opérationnelle **3** (1969) Ser. R-3, 17-44 ; [II.1]
- [2] Butcher, John C. (May 1963), "Coefficients for the study of Runge-Kutta integration processes", *Jornal of the Australian Mathematical Society*, **3**(2) : 185-201.
- [3] B. Leimkuhler, S. Reich, *Simulating hamiltonian dynamics*, Cambridge university press, 2004.
- [4] Hairer, Ernst ; Nørsett, Syvert Paul ; Wanner, Gerhard (1993), *Solving ordinary differential equations I : Nonstiff problems*, Berlin, New York.
- [5] Kutta, Wilhelm (1901), "Beitrag zur näherungsweise Integration totaler Differentialgleichungen ", *Zeitschrift für Mathematik and Physik*, **46** : 435-453.
- [6] K. Wright, *Some relationships between implicit Runge-Kutta, collocation and Lanczos τ methods, and their stability properties*, BIT **10** (1970) 217-227. [II.1]
- [7] L. Abia and J.M. Sanz-Serna, *Partitioned Runge-Kutta methods for separable Hamiltonian problems*, Math. Comput. **60** (1993) 617-634. [VI.7],[IX.10]
- [8] L. Verlet, *Computer "experiments" on classical fluids. I. Thermodynamical properties of Lennard-Jones molecules*, Physical Review **159** (1967) 98-103. [I.1]. [XIII.1]

- [9] P.C. Hammer and J.W. Hollingsworth, *Trapezoidal methods of approximating solutions of differential equations*, **MTAC** **9** (1955) 92-96. [II.1]
- [10] Runge, Carl David Tolmé (1895), "*Über die numerische Auflösung von Differentialgleichungen*", *Mathematische Annalen*, Springer, **46** (2) : 167-178.