



COURS DE PHYSIQUE

INTRODUCTION À L'ANALYSE NUMÉRIQUE

JIMMY ROUSSEL

2021

Cours d'introduction à l'analyse numérique – femto-physique.fr
JIMMY ROUSSEL, professeur agrégé à l'École Nationale Supérieure de Chimie de
Rennes

Copyright © 2021 Jimmy Roussel

© ⓘ ⓘ Ce document est sous licence *Creative Commons* « Attribution - Pas d'Utilisation Commerciale 3.0 non transposé (CC BY-NC 3.0) ».

Pour plus d'informations : creativecommons.org/licenses/by-nc/3.0/

Ce document est réalisé avec l'aide de KOMA-Script et L^AT_EX en utilisant la classe [kaobook](#).

1^{re} édition – Janv. 2011

Version en ligne – femto-physique.fr/analyse-numerique

Preface

L'analyse numérique a pour propos la recherche et l'optimisation de méthodes qui permettent d'**approcher** la solution d'un problème mathématique pour lequel la solution exacte est inaccessible. Cette branche des mathématiques appliquées s'est fortement développée avec la montée en puissance des moyens de calcul informatique.

L'objectif de ce cours est avant tout d'expliquer le principe de quelques méthodes d'intérêt pour la « résolution numérique de problèmes en Physique. Il s'adresse à tout étudiant investi dans des projets informatiques (TIPE, épreuve MODELISATION de certains concours au Grandes Écoles, stage de recherche, etc.) et plus généralement à tout scientifique cherchant à simuler ou résoudre un phénomène.

Notez que le contenu est amené à évoluer au fil du temps en fonction des projets informatiques que je donne dans le cadre de mon enseignement et du temps disponible.

Jimmy Roussel

Table des matières

Preface	iii
Table des matières	v
AUTOUR DES ÉQUATIONS DIFFÉRENTIELLES	1
1 LA MÉTHODE D'EULER	3
1.1 Généralités	3
1.2 La méthode d'Euler	5
2 MÉTHODES DE RUNGE-KUTTA	9
2.1 Introduction	9
2.2 Retour sur Euler	10
2.3 Les schémas de Runge-Kutta	11
2.4 Conclusion	14
3 LA MÉTHODE DE VERLET	15
3.1 Algorithmes de Verlet	15
3.2 Exemples	17
4 MÉTHODE D'EULER-RICHARDSON	21
4.1 Schéma d'Euler-Richardson	21
4.2 Mouvement képlérien	23
4.3 Conclusion	25
AUTOUR DES CHAMPS	27
5 RÉSOUDRE L'ÉQUATION DE LAPLACE	29
6 COMMENT TRACER UNE LIGNE DE CHAMP ?	31
7 COMMENT TRACER UNE COURBE DE NIVEAU ?	33
ANNEXES	35
A LES ERREURS NUMÉRIQUES	37
Notations	39

Table des figures

1.1	Solution numérique de l'équation $\dot{v} + \frac{v}{\tau} = \frac{v_{\infty}}{\tau}$ avec $v(0) = 0$	6
1.2	Exemple d'instabilité.	7
1.3	Solution $\theta(t)$ avec un pas $h = 0,05$ et $\theta_0 = 45^\circ$ (1 point sur 10 est représenté).	8
2.1	Méthode d'intégration suivant le schéma d'Euler explicite.	10
2.2	Méthode d'intégration suivant le schéma d'Euler implicite.	10
2.3	Méthode d'intégration suivant le schéma de Runge-Kutta d'ordre 2.	11
2.4	Résolution numérique de l'équation (2.6) par la méthode de Runge-Kutta-4.	13
3.1	Simulations numériques de la trajectoires de deux astres liés par gravitation	19
4.1	Trajectoire d'un astre autour du Soleil obtenue numériquement	25

Liste des tableaux

**AUTOUR DES ÉQUATIONS
DIFFÉRENTIELLES**

Ce chapitre est accessible en ligne à l'adresse :

<https://femto-physique.fr/omp/euler.php>

La méthode d'Euler¹ est une procédure numérique qui permet de résoudre de façon approximative des équations différentielles ordinaires du premier ordre avec condition initiale. Elle a le mérite d'être simple à comprendre et à programmer.

On cherche donc une solution approchée d'une équation ordinaire se mettant sous la forme

$$\begin{cases} \dot{\mathbf{y}} &= f(t, \mathbf{y}(t)), \quad 0 \leq t \leq T \\ \mathbf{y}(0) &= \mathbf{y}_0 \end{cases}$$

où $\mathbf{y}(t)$ est un scalaire ou un vecteur et $f(t, \mathbf{y}(t))$ une fonction suffisamment régulière pour que l'existence et l'unicité de la solution ne pose pas de problème.

1.1 Généralités

L'approche numérique

Les méthodes numériques employées pour « résoudre » les équations différentielles sont des méthodes approximatives basées sur la *discrétisation* de la variable t ainsi que sur l'utilisation de *différences finies* pour approcher les dérivées. Le problème se ramène alors à un calcul itératif, facile à automatiser à l'aide d'un programme informatique.

Pour effectuer ce calcul numérique, l'utilisateur doit disposer :

1. de la durée T de la simulation numérique ;
2. des conditions initiales et de la fonction f ;
3. du *pas de discrétisation* h . L'intervalle $[0, T]$ est alors divisé en N subdivisions de même longueur h . Finalement, la méthode numérique renvoie une liste (y_0, y_1, \dots, y_N) contenant les valeurs approchées de $y(t_n)$ pour les différents instants $t_n = nh$.

On voit immédiatement que si l'on cherche le comportement de $y(t)$ à long terme, le nombre de points à calculer peut devenir très important ce qui exige rapidité de calcul et de la mémoire. Insistons sur le fait que toutes les méthodes numériques ont leur point faible. Le bon choix est souvent un compromis entre simplicité de mise en œuvre, rapidité, stabilité et précision. Cette dernière est en effet limitée par les erreurs liées à l'algorithme (on parle d'*erreurs de troncature*) et celle liées à la machine (*erreurs d'arrondi*). En général, quand les unes diminuent les

1.1 Généralités	3
L'approche numérique	3
Travail préliminaire	4
1.2 La méthode d'Euler	5
Algorithme d'Euler	5
Équa-diff d'ordre un	6
Équa-diff d'ordre deux	7

1. Méthode inventée par le mathématicien Leonhard Euler en 1768.

autres augmentent de telle sorte qu'il est impossible de minimiser, *en même temps*, et l'erreur d'arrondi et l'erreur de troncature : le meilleur choix est le fruit d'un compromis.

Travail préliminaire

Avant de résoudre numériquement une équation différentielle ordinaire, il est conseillé de procéder à un travail de simplification qui passe par la définition d'un nouveau système d'unités adapté au problème. En effet, pour minimiser les erreurs d'arrondi, il est bon de faire en sorte que les valeurs numériques utilisées soient de l'ordre de l'unité. Par exemple, pour traiter le problème de deux astres liés par la gravitation, il est préférable d'adopter le système d'unités astronomiques (le temps exprimé en années, les masses en masses solaires et les distances en distances Terre-Soleil) plutôt que le Système international (seconde, kilogramme et mètre). Or, changer d'unités, c'est finalement, définir de nouvelles grandeurs *adimensionnées*.

Simplifier

Avant toute chose, simplifier l'équation différentielle en l'exprimant à l'aide de grandeurs adimensionnées.

Prenons l'exemple de la chute libre d'une bille subissant une résistance proportionnelle à la vitesse régie par l'équation différentielle (relation fondamentale de la dynamique)

$$m \frac{dv}{dt} = -\alpha v + mg \quad \text{avec} \quad v(0) = 0$$

où m désigne la masse, α le coefficient de frottement et g le champ de pesanteur. À partir de ces trois paramètres, on peut définir un temps caractéristique (temps de relaxation) $\tau = m/\alpha$ et une vitesse caractéristique (vitesse limite) $v_\infty = g\tau$. Ainsi, il est tentant d'adopter un nouveau système d'unités dans lequel :

1. le temps est mesuré en unité de τ , d'où la nouvelle variable temporelle $t^* = t/\tau$;
2. la vitesse est mesurée en unité de v_∞ d'où la nouvelle variable $v^* = v/v_\infty$;
3. la distance étant le produit d'une vitesse par un temps, est mesurée en unité de ℓ avec $\ell = v_\infty\tau$.

Avec ce nouveau choix d'unités et de variables adimensionnées, l'équation différentielle initiale prend une forme simple :

$$\frac{dv^*}{dt^*} = 1 - v^* \quad \text{avec} \quad v^*(0) = 0$$

Notez que cette équation différentielle est celle que nous aurions obtenue en faisant $m = 1$ et $g = 1$ et $\alpha = 1$. Finalement, on retiendra que lorsque l'on rend unitaire des paramètres physiques, cela équivaut à définir un nouveau jeu d'unités².

2. Il faut juste prendre garde à rendre unitaire des paramètres de dimensions indépendantes.

Enfin, ce qui va conditionner la valeur du pas h c'est l'ensemble des temps caractéristiques du phénomène que l'on modélise. Par exemple, dans le problème à N corps en orbite autour d'une étoile fixe, on peut définir N temps caractéristiques (les périodes orbitales par exemple). Si l'on veut décrire la dynamique du système de façon complète et précise il est impératif que, d'une part le pas d'intégration h soit plus petit que le plus petit des temps caractéristiques, d'autre part que la durée T de la simulation soit supérieur au plus grand des temps caractéristiques.

$$h \ll \tau_{\min} \quad \text{et} \quad T > \tau_{\max}$$

Dans l'exemple de la chute libre, l'unique temps caractéristique vaut $\tau = 1$ dans le nouveau système d'unité. Ainsi, on prendra $h \ll 1$ et $T > 1$. Par exemple, si l'on choisit $h = 0,01$ et $T = 10$, le nombre de points à calculer est de $N = 10/0,01 = 1000$.

Remarque : Il existe une classe de problèmes, dit « problèmes raides » qui ont la particularité de posséder des temps caractéristiques qui s'étalent sur plusieurs ordres de grandeur. C'est par exemple le cas, dans l'étude de la cinétique d'une réaction chimique décrite par deux processus moléculaires dont les constantes de vitesse diffèrent sur plusieurs ordres de grandeur. On voit alors qu'imposer $h \ll \tau_{\min}$ et $T > \tau_{\max}$ amène à calculer un nombre colossal de points ce qui coûte du « temps machine » et produit des instabilités. Il faut alors adopter des méthodes particulières que nous n'abordons pas ici.

1.2 La méthode d'Euler

Algorithme d'Euler

La méthode présentée ici est dite méthode d'Euler explicite. Considérons l'équation différentielle ordinaire suivante

$$\begin{cases} \dot{\mathbf{y}} &= f(t, \mathbf{y}(t)), \quad 0 \leq t \leq T \\ \mathbf{y}(0) &= \mathbf{y}_0 \end{cases}$$

On peut intégrer cette équation comme suit :

$$\mathbf{y}(t_{n+1}) = \mathbf{y}(t_n) + \int_{t_n}^{t_{n+1}} f(t, \mathbf{y}(t)) dt \quad (1.1)$$

La méthode d'Euler consiste à approcher l'intégrale par la méthode des rectangles à gauche :

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

D'où le schéma itératif suivant

$$\begin{cases} \mathbf{y}_{n+1} &= \mathbf{y}_n + h f(t_n, \mathbf{y}_n), \quad n = 0, 1, \dots, N \\ \mathbf{y}_0 &= \mathbf{y}(0) \end{cases} \quad (1.2)$$

où \mathbf{y}_n désigne l'approximation numérique de $\mathbf{y}(t_n)$. La mise en œuvre est alors extrêmement simple :

Algorithme d'Euler

1. Initialisation du pas h et de la durée T .
2. Initialisation des conditions initiales : $t = 0$ et $\mathbf{y} = \mathbf{y}(0)$.
3. Tant que $t \leq T$ faire :
 - a) Calcul de $\mathbf{k}_1 = f(t, \mathbf{y})$.
 - b) $\mathbf{y} = \mathbf{y} + h\mathbf{k}_1$; $t = t + h$.
 - c) Enregistrement des données.

Exemple d'une équation-diff d'ordre un

Appliquons cette méthode au problème de la chute libre décrite [Section 1.1](#). L'équation différentielle s'écrit

$$\frac{dv^*}{dt^*} = 1 - v^* \quad \text{avec} \quad v^*(0) = 0$$

et le schéma itératif (1.2) donne :

$$\begin{cases} v_{n+1}^* &= v_n^* + h(1 - v_n^*) \\ v_0^* &= 0 \end{cases}$$

On peut voir ici que la méthode d'Euler est **une approximation au premier ordre** en h . En effet, calculons le premier terme v_1^* et comparons le au terme exacte $v^*(h)$, sachant que la solution exacte est $v^*(t^*) = 1 - e^{-t^*}$. On a

$$v_1^* = v_0^* + h(1 - v_0^*) = h$$

à comparer avec $v^*(h) = 1 - e^{-h}$. Il apparaît immédiatement que v_1^* et $v(h)$ concordent si l'on remplace e^{-h} par son développement limité au premier ordre, à savoir $e^{-h} = 1 - h + O(h^2)$.

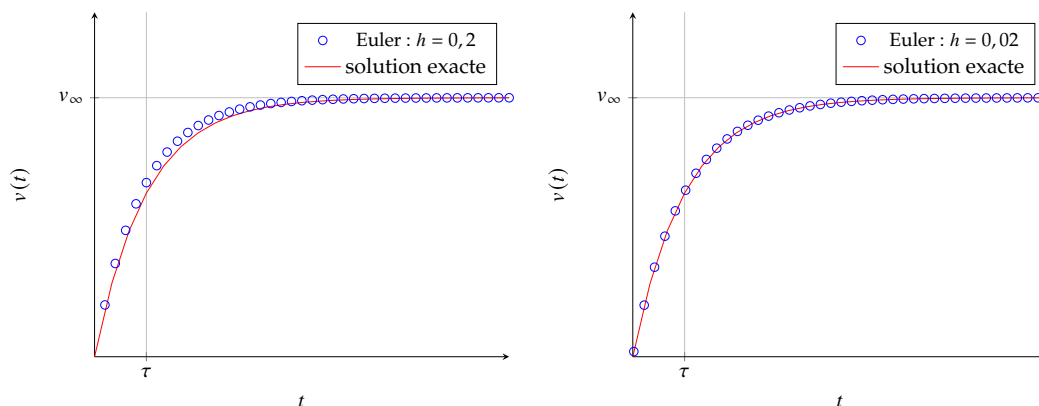


FIGURE 1.1 – Solution numérique de l'équation $\dot{v} + \frac{v}{\tau} = \frac{v_\infty}{\tau}$ avec $v(0) = 0$. À gauche, le pas vaut 0,2, à droite 0,02 (1 point sur 10 est représenté)

La Figure 1.1 montre la solution numérique pour différents pas ainsi que la solution exacte. On constate que plus le pas h est petit meilleure est l'adéquation avec la solution exacte. On constate qu'avec un pas $h = 0,2$, l'erreur est visible à l'œil nu (de l'ordre de quelques %). Ça n'est que lorsque le pas est très petit devant 1 que l'erreur est insignifiante.

Choisissons maintenant $h = 2$, autrement dit un pas de discrétisation plus grand que le temps caractéristique τ (qui vaut 1 puisque τ est l'unité de temps). On voit alors apparaître un phénomène d'*instabilité numérique*. C'est l'un des inconvénients de la méthode d'Euler : la stabilité n'est pas toujours garantie. C'est pourquoi il est recommandé de tester différents pas pour vérifier que le résultat est robuste. Dans ce cas, cela signifie généralement que l'on est loin des conditions d'instabilité.

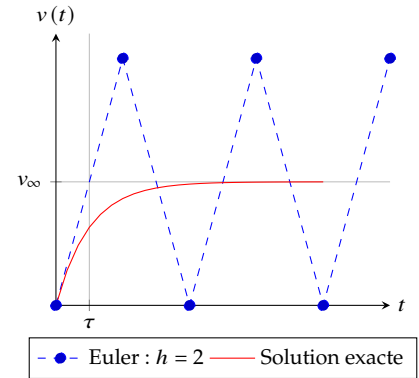


FIGURE 1.2 – Exemple d'instabilité.

Exemple d'une équation-diff d'ordre deux

La plupart du temps, l'évolution d'un système physique obéit à une équation différentielle qui n'a pas forcément le bon goût d'être une équation différentielle scalaire du premier ordre. On rencontre plus souvent des systèmes d'équations différentielles ou une équation différentielle scalaire d'ordre supérieure à un. En mécanique, il arrive couramment que la dynamique d'un système soit décrite par une équation différentielle d'ordre deux.

Par exemple, considérons le mouvement d'un pendule simple de masse m et de longueur ℓ qu'on lâche dans le champ de pesanteur g après l'avoir écarté de l'angle θ_0 . L'équation du mouvement s'écrit

$$\ddot{\theta} = -\omega_0^2 \sin \theta \quad \text{avec} \quad \begin{cases} \omega_0^2 = \sqrt{g/\ell} \\ \theta(0) = \theta_0 \\ \dot{\theta}(0) = 0 \end{cases}$$

Tout d'abord, changeons l'unité de temps de façon à simplifier l'équation différentielle. Posons $\tau = \sqrt{\ell/g}$ notre nouvelle unité de temps ce qui revient à redéfinir le temps par $t_* = t/\tau$. Il est alors facile de montrer qu'après cette redéfinition du temps, l'équation différentielle se simplifie³

$$\ddot{\theta} = -\sin \theta \quad \text{avec} \quad \begin{cases} \theta(0) = \theta_0 \\ \dot{\theta}(0) = 0 \end{cases}$$

Cette équation peut se mettre sous la forme d'une équation différentielle d'ordre un, à condition de l'écrire sous forme vectorielle. En effet, définissons le vecteur de dimension 2 dont la première composante est l'angle θ et la seconde la vitesse angulaire $\omega = \dot{\theta}$:

$$\mathbf{y} = \begin{pmatrix} \theta \\ \omega \end{pmatrix} \quad \text{avec} \quad \mathbf{y}(0) = \begin{pmatrix} \theta_0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

3. Notez que dans ce nouveau système d'unités, tout se passe comme si $g = 1$ et $\ell = 1$.

On peut alors écrire l'équation du pendule simple sous la forme

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \theta \\ \omega \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \omega \\ -\sin \theta \end{pmatrix} = f(t, \mathbf{y}(t))$$

Posons θ_n et ω_n l'angle et la vitesse angulaire à l'instant $t_n = nh$. La méthode d'Euler donne

$$\begin{pmatrix} \theta_{n+1} \\ \omega_{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \theta_n \\ \omega_n \end{pmatrix} + h \begin{pmatrix} \omega_n \\ -\sin \theta_n \end{pmatrix} \implies \begin{cases} \theta_{n+1} = \theta_n + h \omega_n \\ \omega_{n+1} = \omega_n - h \sin \theta_n \end{cases} \quad (1.3)$$

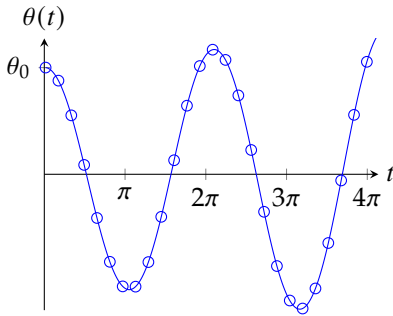


FIGURE 1.3 – Solution $\theta(t)$ avec un pas $h = 0,05$ et $\theta_0 = 45^\circ$ (1 point sur 10 est représenté).

On peut constater sur le résultat de la Figure 1.3 un autre défaut de la méthode d'Euler : bien que le système étudié soit conservatif, le schéma d'Euler ne respecte pas la conservation de l'énergie. En effet, en vertu des lois de la mécanique, l'amplitude des oscillations doit rester constante, contrairement à ce que l'on observe. Plus précisément, l'énergie mécanique du pendule simple à l'instant t_n est proportionnelle à $E_n = \frac{1}{2}\omega_n^2 - \cos \theta_n$. Or, à partir de la récurrence (1.3), on obtient

$$E_{n+1} = E_n + h^2 \left(\frac{1}{2}\omega_n^2 \cos \theta_n + \frac{1}{2} \sin^2 \theta_n \right)$$

Par conséquent, puisque le terme $\left(\frac{1}{2}\omega_n^2 \cos \theta_n + \frac{1}{2} \sin^2 \theta_n \right)$ est positif en moyenne, il en découle une dérive positive de l'énergie quel que soit le pas. Autrement dit, le comportement à long terme est mal décrit⁴. En pratique, lorsque l'on met en place une résolution numérique d'un système conservatif, on fait plutôt appel à l'algorithme de Verlet⁵ particulièrement adapté dans le sens où elle conduit à une dérive de l'énergie faible aux temps longs.

Conclusion

Bien que la méthode d'Euler présente l'inconvénient de propager facilement les erreurs, et même de les amplifier, elle n'est pas dénuée d'intérêt : simple à programmer, elle produit rapidement une solution approximative qui, si le pas est bien choisi et la durée d'observation raisonnable, permet d'avoir une première approche du phénomène étudié.

4. Sur femto-physique.fr on trouve une [simulation](#) qui illustre cette dérive.

5. Voir Chapitre 3.

MÉTHODES DE RUNGE-KUTTA

2

Les techniques de Runge-Kutta sont des schémas numériques à un pas qui permettent de résoudre les équations différentielles ordinaires. Elles font parties des méthodes les plus populaires de part leur facilité de mise en œuvre et leur précision. C'est Carle Runge et Martin Kutta qui, au début du 20^e siècle, ont inventé ces méthodes.

Nous décrivons ici deux algorithmes assez utilisés : celles de Runge-Kutta d'ordre 2 et 4.

Ce chapitre est accessible en ligne à l'adresse :

<https://femto-physique.fr/omp/runge-kutta.php>

2.1 Introduction	9
2.2 Retour sur Euler	10
Euler explicite	10
Euler implicite	10
2.3 Les schémas de Runge-Kutta 11	
Runge-Kutta d'ordre 2	11
Runge Kutta d'ordre 4	12
2.4 Conclusion	14

2.1 Introduction

Dans de nombreux cas, les systèmes d'équations différentielles que l'on rencontre en science peuvent se mettre sous la forme d'une équation différentielle ordinaire du premier ordre du type :

$$\begin{cases} \frac{dy}{dt} = f(t, y(t)), & 0 \leq t \leq T \\ y(0) = y_0 \end{cases}$$

où $y(t)$ est la fonction que l'on recherche, y_0 sa valeur initiale et f une fonction *connue* suffisamment régulière pour que l'existence et l'unicité de la solution ne pose pas de problème. Notez que $y(t)$ peut être un scalaire ou un vecteur⁷.

7. Pour un exemple, voir Section 1.2 du Chapitre 1

À l'instar de la méthode d'Euler, celles de Runge-Kutta sont des schémas numériques à un pas basés sur la *discrétisation* de la variable t . On note h ce pas et y_n la valeur approchée de $y(t_n)$ pour les différents instants $t_n = nh$.

En intégrant l'équation différentielle entre t_n et t_{n+1} on a la relation

$$y(t_{n+1}) - y(t_n) = \int_{t_n}^{t_{n+1}} f(t, y(t)) dt \quad (2.1)$$

L'idée consiste à approcher cette intégrale de façon plus précise que ne le fait la méthode d'Euler. Mais avant de voir comment, revenons sur la méthode d'Euler.

2.2 Retour sur Euler

Euler explicite

L'intégrale (2.1) peut s'approcher par la méthode du rectangle à gauche :

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

D'où le schéma itératif suivant

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + hf(t_n, y_n) \\ y_0 = y(0) \end{cases} \quad (2.2)$$

Il s'agit de la fameuse méthode d'Euler explicite. Graphiquement, on voit immédiatement que cette méthode sous-estime (sur-estime) l'aire quand la fonction f croît (décroît) au cours du temps.

L'erreur produite correspond à l'aire grisée 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

$$e_E \simeq \frac{1}{2} p h^2 \quad (2.3)$$

Après N itérations, on commet une erreur globale de l'ordre de $N \frac{1}{2} p h^2 = \frac{1}{2} T p h$ où T est la durée totale. Aussi, pour une durée donnée, l'erreur globale augmente linéairement avec le pas h : on dit que la méthode d'Euler est d'ordre un.

Euler implicite

On aurait également pu approcher l'intégrale (2.1) par la méthode du rectangle à droite :

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

D'où le schéma numérique, dit schéma d'Euler implicite :

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + hf(t_n, y_{n+1}) \\ y_0 = y(0) \end{cases} \quad (2.4)$$

Notez que dans ce cas, y_{n+1} est présent dans le terme de gauche et celui de droite. Contrairement à la méthode d'Euler explicite, la grandeur recherchée y_{n+1} est reliée à une fonction qui dépend de cette même grandeur. Autrement dit, y_{n+1} est défini *implicitement* d'où le nom de la méthode. Il faut donc résoudre l'équation implicite à chaque étape ce qui demande l'emploi d'un algorithme annexe (dichotomie, algorithme de Newton-Raphson, etc.).

Cette méthode, comme on le voit graphiquement, produit une erreur opposée à celle de la méthode d'Euler explicite ; elle est donc aussi

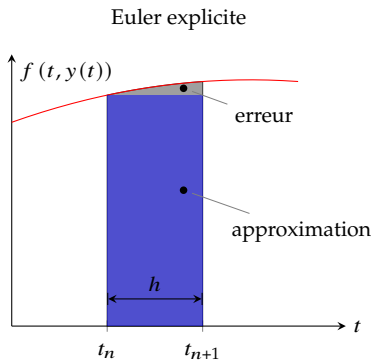


FIGURE 2.1 – Méthode d'intégration suivant le schéma d'Euler explicite.

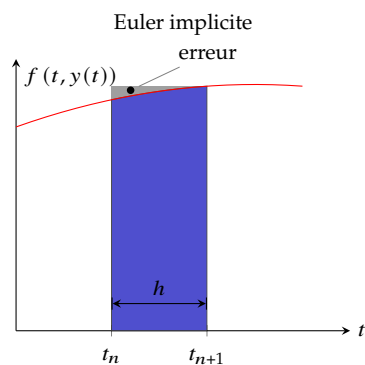


FIGURE 2.2 – Méthode d'intégration suivant le schéma d'Euler implicite.

d'ordre un. De surcroît, elle apporte une complication dans la résolution de l'équation (2.4). Cependant, cet inconvénient est compensé par le fait, qu'en général, les méthodes implicites sont plus stables que les méthodes explicites.

2.3 Les améliorations de Runge-Kutta

Runge-Kutta d'ordre 2

On voit immédiatement que l'on peut améliorer l'estimation de l'intégrale en calculant l'aire d'un trapèze au lieu de celui d'un rectangle. La méthode du trapèze consiste en l'approximation suivante :

$$\int_a^b f(x) dx \approx \frac{b-a}{2} [f(a) + f(b)]$$

Appliquée à l'intégrale (2.1), cela donne

$$\int_{t_n}^{t_{n+1}} f(t, y(t)) dt \approx \frac{h}{2} [(f(t_n, y(t_n))) + f(t_{n+1}, y(t_{n+1}))]$$

Ici, l'intégrale dépend des valeurs de y_n et y_{n+1} ce qui, si on en restait là, donnerait lieu à une méthode implicite. Pour éviter ces complications, on utilise la méthode d'Euler (explicite) afin d'estimer la valeur y_{n+1} qui intervient dans $f(t_{n+1}, y(t_{n+1}))$. On obtient le schéma itératif suivant :

$$y_{n+1} = y_n + h \left(\frac{1}{2}k_1 + \frac{1}{2}k_2 \right) \quad \text{avec} \quad \begin{cases} k_1 = f(t_n, y_n) \\ k_2 = f(t_n + h, y_n + hk_1) \\ y_0 = y(0) \end{cases} \tag{2.5}$$

Cette méthode présente l'avantage d'être précise et assez simple à programmer (voir algorithme ci-dessous).

Algorithme RK2

1. Initialisation du pas h , de la durée T .
2. Initialisation des conditions initiales : $t = 0$ et $y = y(0)$.
3. Définition de la fonction $f(t, y)$.
4. Tant que $t \leq T$ faire :
 - a) Calcul de $k_1 = f(t, y)$.
 - b) Calcul de $k_2 = f(t + h, y + hk_1)$.
 - c) $y = y + \frac{h}{2}(k_1 + k_2)$; $t = t + h$.
 - d) Enregistrement des données

Ce schéma numérique présente deux erreurs de troncature. Tout d'abord, l'approximation de l'intégrale par l'aire d'un trapèze produit une première erreur e_1 . On voit bien graphiquement que la méthode du tra-

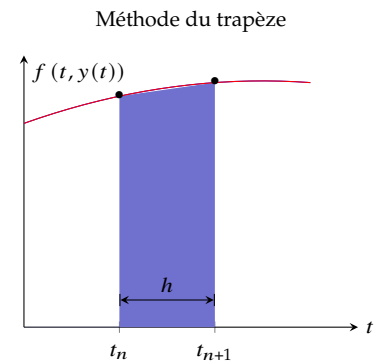


FIGURE 2.3 – Méthode d'intégration suivant le schéma de Runge-Kutta d'ordre 2.

pèze neutralise l'erreur des méthodes d'Euler : l'erreur e_1 est liée à la courbure de la fonction et non à sa pente c'est pourquoi e_1 varie comme h^3 (au lieu de h^2 pour les méthodes d'Euler). Ensuite, on commet une deuxième erreur e_2 lorsque l'on estime y_{n+1} par $y_n + hf(t_n, y_n)$ dans le calcul de $f(t_{n+1}, y_{n+1})$. Dans ce cas, un calcul de propagation d'erreur mène au résultat suivant : $e_2 = \frac{h}{2} \times \frac{\partial f}{\partial y} \times e_E$ avec e_E l'erreur donnée par la formule (2.3). Pour finir, l'erreur produite à chaque étape s'écrit $e_{RK2} = e_1 + e_2 = C^{te}h^3$ de sorte que l'erreur globale, pour une durée T fixée, se comporte comme h^2 . Il s'agit donc bien d'une méthode d'ordre deux comme son nom l'indique.

Runge Kutta d'ordre 4

La méthode de Runge-Kutta d'ordre 4 est une étape supplémentaire dans le raffinement du calcul de l'intégrale (2.1). Au lieu d'utiliser la méthode des trapèzes, on utilise la méthode de Simpson. Celle-ci consiste à remplacer la fonction intégrée par une parabole passant par les points extrêmes et le point milieu. On a

$$\int_a^b f(x) dx \simeq \frac{b-a}{6} \left[f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b) \right]$$

Appliquée à l'intégrale (2.1), cela donne

$$\int_{t_n}^{t_{n+1}} f(t, y(t)) dt \simeq \frac{h}{6} \left[f(t_n, y(t_n)) + 4f(t_{n+1/2}, y(t_{n+1/2})) + f(t_{n+1}, y(t_{n+1})) \right]$$

d'où la relation

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{6} \left[f(t_n, y_n) + 4f(t_{n+1/2}, y_{n+1/2}) + f(t_{n+1}, y_{n+1}) \right]$$

Ici, une difficulté apparaît car l'équation présente deux inconnues : $y_{n+1/2}$ et y_{n+1} . Pour rendre le schéma explicite, il faut estimer $4f(t_{n+1/2}, y_{n+1/2})$ et $f(t_{n+1}, y_{n+1})$ à partir de y_n, t_n et h .

Commençons par le terme $4f(t_{n+1/2}, y(t_{n+1/2}))$ que l'on décompose en deux termes identiques

$$2f(t_{n+1/2}, y_{n+1/2}) + 2f(t_{n+1/2}, y_{n+1/2})$$

Dans le premier, on remplace $y_{n+1/2}$ par sa valeur déduite de la méthode d'Euler explicite ; à savoir $y_{n+1/2}^a = y_n + h/2f(t_n, y_n)$. Dans le deuxième terme, on remplace $y_{n+1/2}$ par sa valeur déduite de la méthode d'Euler implicite : $y_{n+1/2}^b = y_n + h/2f(t_{n+1/2}, y_{n+1/2})$ que l'on va approcher par $y_n + h/2f(t_{n+1/2}, y_{n+1/2}^a)$. Les méthodes d'Euler implicite et explicite produisant des erreurs quasi-opposées, on a ainsi l'espoir de minimiser l'erreur sur le calcul de $4f(t_{n+1/2}, y_{n+1/2})$. Pour résumer, on écrira

$$4f(t_{n+1/2}, y_{n+1/2}) \simeq 2k_2 + 2k_3 \quad \text{avec} \quad \begin{cases} k_1 = f(t_n, y_n) \\ k_2 = f(t_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}hk_1) \\ k_3 = f(t_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}hk_2) \end{cases}$$

Quant au terme $f(t_{n+1}, y_{n+1})$, on l'approche en estimant y_{n+1} par la méthode du point milieu, c'est-à-dire en appliquant la méthode du rectangle au milieu :

$$y_{n+1} \simeq y_n + hf(t_{n+1/2}, y_{n+1/2}) \simeq y_n + hf(t_{n+1/2}, y_{n+1/2}^b)$$

In fine, on obtient le schéma explicite, dit de Runge-Kutta d'ordre 4 :

$$y_{n+1} = y_n + h \left[\frac{1}{6}k_1 + \frac{1}{3}k_2 + \frac{1}{3}k_3 + \frac{1}{6}k_4 \right] \quad \text{avec} \quad \begin{cases} k_1 = f(t_n, y_n) \\ k_2 = f(t_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}hk_1) \\ k_3 = f(t_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}hk_2) \\ k_4 = f(t_n + h, y_n + hk_3) \end{cases}$$

Par rapport à la méthode RK2, ce schéma numérique exige deux fois plus de calcul à chaque pas et donc un temps de calcul plus long, sans parler des erreurs d'arrondi qui s'accumulent plus vite. Cependant, ce défaut est compensé par un gain de précision. En effet, comme son nom l'indique, il s'agit d'une méthode d'ordre 4. On peut le vérifier sur un exemple simple. Prenons l'équation

$$\frac{dy}{dt} = 1 - y \quad \text{avec} \quad y(0) = 0 \tag{2.6}$$

dont la solution est la fonction exponentielle $y(t) = 1 - e^{-t}$.

Quelle valeur prévoit la méthode de Runge-Kutta-4 pour $y_1 = y(h)$? Sachant que l'on a ici $f(t, y(t)) = 1 - y(t)$, le schéma numérique donne

$$\begin{cases} k_1 = f(0, y_0) = 1 - y_0 = 1 \\ k_2 = f(\frac{1}{2}h, y_0 + \frac{1}{2}hk_1) = 1 - \frac{1}{2}h \\ k_3 = f(\frac{1}{2}h, y_0 + \frac{1}{2}hk_2) = 1 - \frac{1}{2}(h - \frac{1}{2}h^2) \\ k_4 = f(h, y_0 + hk_3) = 1 - h(1 - \frac{1}{2}h + \frac{1}{4}h^2) \end{cases} \tag{2.7}$$

d'où il vient

$$y_1 = y_0 + h \left[\frac{1}{6}k_1 + \frac{1}{3}k_2 + \frac{1}{3}k_3 + \frac{1}{6}k_4 \right] = h - \frac{1}{2}h^2 + \frac{1}{6}h^3 - \frac{1}{24}h^4$$

qui n'est rien d'autre que le *développement limité de la solution exacte* $y(h)$ à l'ordre 4. Ainsi, même avec un pas modeste, la précision reste bonne comme l'illustre la Figure 2.4.

Terminons par l'algorithme complet :

Algorithme RK4

1. Initialisation du pas h , de la durée T .
2. Initialisation des conditions initiales : $t = 0$ et $\mathbf{y} = \mathbf{y}(0)$.
3. Définition de la fonction $f(t, y)$.
4. Tant que $t \leq T$ faire :
 - a) Calcul de $k_1 = f(t, y)$.
 - b) Calcul de $k_2 = f(t + h/2, y + hk_1/2)$.

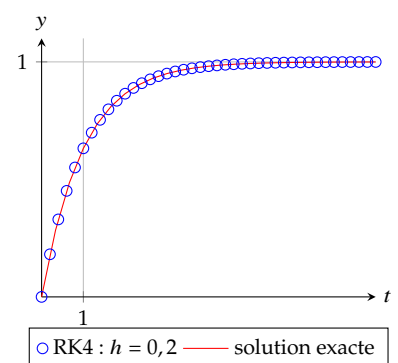


FIGURE 2.4 – Résolution numérique de l'équation (2.6) par la méthode de Runge-Kutta-4.

- c) Calcul de $k_3 = f(t + h/2, y + hk_2/2)$.
- d) Calcul de $k_4 = f(t + h, y + hk_3)$.
- e) $y = y + \frac{h}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)$; $t = t + h$.
- f) Enregistrement des données

2.4 Conclusion

Les techniques de Runge-Kutta, d'ordre 2 ou 4, ont l'avantage d'être simples à mettre en œuvre, précises et assez stables pour les fonctions courantes rencontrées en physique. C'est ce qui explique leur grande popularité. De nombreux logiciels de calcul utilisent par défaut la méthode RK4 dans sa version adaptative⁸.

Bien entendu ces méthodes ont aussi leurs défauts : elles sont assez gourmandes en temps de calcul et ne sont pas adaptés aux systèmes conservatifs aux temps longs⁹.

8. Le pas h est alors variable et s'adapte pour optimiser précision et temps de calcul

9. Voir par exemple [Chapitre 3](#)

Il est fréquent de vouloir étudier un système dynamique conservatif sur une longue durée. Par exemple, la question de la stabilité du système solaire - dont il est nul besoin de rappeler l'importance - nécessite d'étudier sur des périodes séculaires un système quasi-conservatif de 8 planètes et de leurs satellites. La solution analytique étant inaccessible, on met en place un traitement numérique du problème. Les algorithmes classiques d'ordre élevé (Runge-Kutta d'ordre 4) ont tendance à fournir une dynamique aux temps courts de bonne qualité mais ont le défaut de produire une dérive de l'énergie aux temps longs. Dans ce cas, on a recours à des méthodes numériques dites *symplectiques*, particulièrement adaptées aux systèmes conservatifs et supérieures aux méthodes classiques dans le sens où elles conduisent à une dérive de l'énergie faible aux temps longs.

Ce chapitre est accessible en ligne à l'adresse :

<https://femto-physique.fr/omp/methode-de-verlet.php>

- 3.1 Algorithmes de Verlet . . . 15
 - Les méthodes classiques . . 15
 - Verlet à deux pas 16
 - Verlet à un pas 16
- 3.2 Exemples 17
 - Le pendule simple 17
 - Le problème à deux corps . 18

3.1 Algorithmes de Verlet

Défauts des méthodes classiques

Une des raisons de l'inefficacité des méthodes classiques (Euler, Runge-Kutta) est leur caractère non réversible en temps : changer le pas temporel h en $-h$ donne des équations différentes. Or, un système conservatif est réversible.

Voyons pourquoi la méthode d'Euler est intrinsèquement irréversible sur l'exemple d'une particule soumise à une force conservative :

$$\begin{cases} \frac{d\vec{v}}{dt} = \frac{\vec{f}(\vec{r})}{m} = \vec{a}(\vec{r}) \\ \frac{d\vec{r}}{dt} = \vec{v} \end{cases} \quad (3.1)$$

La méthode d'Euler permet de ramener cette équation différentielle à un schéma itératif :

$$\begin{cases} \vec{v}_{n+1} = \vec{v}_n + \vec{a}_n h \\ \vec{r}_{n+1} = \vec{r}_n + \vec{v}_n h \end{cases} \quad (3.2)$$

Changeons le sens d'écoulement du temps ($h \rightarrow -h$ et $n + 1 \rightarrow n - 1$). On obtient alors :

$$\begin{cases} \vec{v}_n = \vec{v}_{n-1} + \vec{a}_n h \\ \vec{r}_n = \vec{r}_{n-1} + \vec{v}_n h \end{cases}$$

ce qui ne correspond pas à ce que donne le schéma (3.2) à l'instant $n h$. Le schéma d'Euler est donc irréversible alors que l'équation du mouvement ne l'est pas.

L'algorithme de Verlet à deux pas

Un des algorithmes symplectiques les plus simples à mettre en œuvre et largement utilisé en dynamique moléculaire est l'*algorithme de Verlet*. Il repose sur le développement de Taylor du vecteur position à l'ordre 3 aux instants $t + h$ et $t - h$:

$$\begin{cases} \vec{r}(t+h) = \vec{r}(t) + h\vec{v}(t) + \frac{h^2}{2}\vec{a}(\vec{r}(t)) + \frac{h^3}{3!}\frac{d^3\vec{r}}{dt^3} + \mathcal{O}(h^4) \\ \vec{r}(t-h) = \vec{r}(t) - h\vec{v}(t) + \frac{h^2}{2}\vec{a}(\vec{r}(t)) - \frac{h^3}{3!}\frac{d^3\vec{r}}{dt^3} + \mathcal{O}(h^4) \end{cases}$$

En sommant ces deux équations, la vitesse disparaît et l'on obtient, aux erreurs d'ordre 4 près, le schéma itératif suivant :

$$\vec{r}_{n+1} = 2\vec{r}_n - \vec{r}_{n-1} + \vec{a}_n h^2 \quad (3.3)$$

Il est facile de constater que ce schéma est réversible en temps et donc particulièrement adapté à l'étude des systèmes conservatifs dont les forces ne dépendent que de la position. En revanche cet algorithme présente deux défauts :

1. Il s'agit d'un schéma à deux pas : l'itération ne peut démarrer que si l'on connaît \vec{r}_0 et \vec{r}_{-1} . Or, en général, les conditions initiales se résument par la donnée de \vec{r}_0 et \vec{v}_0 . Il est d'usage alors d'initier l'itération à l'aide d'un développement de Taylor :

$$\vec{r}_{-1} = \vec{r}_0 - \vec{v}_0 h + \frac{h^2}{2}\vec{a}_0$$

2. Si l'on s'intéresse à l'évolution d'une grandeur faisant intervenir la vitesse (comme l'énergie cinétique), celle-ci se calcule à l'aide de la formule

$$\vec{v}_n = \frac{\vec{r}_{n+1} - \vec{r}_{n-1}}{2h}$$

On voit donc que le calcul de la vitesse consiste à soustraire deux nombres voisins ce qui produit des erreurs d'arrondi importants.

C'est pourquoi, on utilise en général une autre version algorithmique qui est mathématiquement équivalente à la version originale de Verlet mais qui présente l'intérêt d'être à un pas.

Algorithme de Verlet à un pas

L'algorithme de Verlet à un pas repose sur le schéma numérique suivant :

$$\begin{cases} \vec{r}_{n+1} = \vec{r}_n + h\vec{v}_n + \frac{h^2}{2}\vec{a}_n \\ \vec{v}_{n+1} = \vec{v}_n + \frac{h}{2}(\vec{a}_n + \vec{a}_{n+1}) \end{cases}$$

On procédera donc ainsi :

Algorithme de Verlet à un pas

1. Initialisation du pas h , de la durée T .
2. Initialisation des conditions initiales : $t = 0$, $\vec{r} = \vec{r}_0$ et $\vec{v} = \vec{v}_0$.
3. Définition de la fonction $\vec{a}(\vec{r})$.
4. Tant que $t \leq T$ faire :
 - a) Calcul de $\vec{a}_0 = \vec{a}(\vec{r})$.
 - b) Nouvelle position : $\vec{r} = \vec{r} + h\vec{v} + \frac{h^2}{2}\vec{a}_0$.
 - c) Calcul de $\vec{a}_1 = \vec{a}(\vec{r})$.
 - d) Nouvelle vitesse : $\vec{v} = \vec{v} + \frac{h}{2}(\vec{a}_0 + \vec{a}_1)$
 - e) $t = t + h$.
 - f) Enregistrement des données

Cette méthode, de part sa qualité et sa facilité de mise en œuvre est l'une des plus utilisée en dynamique moléculaire.

3.2 Exemples

Le pendule simple

Considérons un pendule simple de masse m , de longueur ℓ dans un champ de pesanteur \vec{g} . L'écart angulaire θ par rapport à la position d'équilibre vérifie l'équation différentielle

$$\ddot{\theta} = -\omega_0^2 \sin \theta \quad \text{avec} \quad \omega_0^2 = \sqrt{g/\ell}$$

Tout d'abord changeons l'unité de temps de façon à simplifier l'équation différentielle. Posons $\tau = \sqrt{\ell/g}$ notre nouvelle unité de temps ce qui revient à redéfinir le temps par $t_* = t/\tau$. Il est alors facile de montrer qu'après cette redéfinition du temps, l'équation différentielle se simplifie¹¹

$$\ddot{\theta} = -\sin \theta \quad \text{ou} \quad \begin{cases} \dot{\theta} = \omega \\ \dot{\omega} = -\sin \theta \end{cases}$$

Comparons les schémas numériques d'Euler et de Verlet (version à un pas) associés à cette équation différentielle. Posons θ_n et ω_n l'angle et la vitesse angulaire à l'instant $t_n = nh$.

La méthode d'Euler donne

$$\begin{cases} \theta_{n+1} = \theta_n + \omega_n h \\ \omega_{n+1} = \omega_n - \sin \theta_n h \end{cases}$$

L'énergie mécanique du pendule simple est proportionnelle à $E_n = \frac{1}{2}\omega_n^2 - \cos \theta_n$. Le pendule simple étant un système conservatif, E_n doit

11. Notez que dans ce nouveau système d'unités, tout se passe comme si $g = 1$ et $\ell = 1$.

rester constant. Or, on trouve

$$E_{n+1} = E_n + h^2 \left(\frac{1}{2} \omega_n^2 \cos \theta_n + \frac{1}{2} \sin^2 \theta_n \right)$$

Le terme $\left(\frac{1}{2} \omega_n^2 \cos \theta_n + \frac{1}{2} \sin^2 \theta_n \right)$ est en moyenne positif de telle sorte que l'on observe une dérive positive à long terme.

Quant à la méthode de Verlet à un pas, on a le schéma numérique suivant :

$$\begin{cases} \theta_{n+1} = \theta_n + \omega_n h - 1/2 \sin \theta_n h^2 \\ \omega_{n+1} = \omega_n - 1/2 (\sin \theta_n + \sin \theta_{n+1}) h \end{cases}$$

À partir de cette relation de récurrence on montre que

$$E_{n+1} = E_n + \mathcal{O}(h^3)$$

En d'autres termes, à l'ordre 2, la méthode de Verlet respecte la conservation de l'énergie mécanique contrairement à la méthode d'Euler.

La simulation que l'on trouve sur femto-physique.fr illustre bien le phénomène de dérive de la méthode d'Euler et la grande stabilité de celle de Verlet.

Le problème à deux corps

La méthode de Runge-Kutta d'ordre 4 si utilisée présente également ce défaut de ne pas conserver l'énergie mécanique. On peut le voir dans le problème à deux corps suivant.

Supposons deux astres de masse $m_1 = 1 m_\star$ et $m_2 = 0,1 m_\star$ en interaction gravitationnelle. Initialement séparés de 2,5 ua, ils sont lancés avec des vitesses de sens opposé : $v_{01} = -0,3$ u.a/an et $v_{02} = 3$ u.a/an. Notez que la quantité de mouvement du système étant nulle, le centre de gravité reste fixe.

Sur le plan théorique, on montre que les deux astres doivent décrire des ellipses de foyer le centre de gravité du système double. On peut calculer que l'astre le plus léger doit décrire une ellipse de grand-axe $a = 3,64$ ua et de période $T = 2,34$ ans. L'équation à laquelle obéissent les vecteurs positions des deux astres s'écrit dans le système d'unités astronomiques :

$$\frac{d^2 \vec{r}_i}{dt^2} = -4\pi^2 \frac{m_j (\vec{r}_i - \vec{r}_j)}{r_{ij}^3}$$

La figure 3.1 montre les trajectoires que l'on obtient à l'aide des méthodes de Runge Kutta et de Verlet. On note que la méthode de Runge Kutta produit une dérive énergétique qui se traduit par une trajectoire en spirale : aux temps longs, l'astre de masse m_2 va finir par être éjecté du système ce qui contredit complètement le résultat exacte qui prévoit une trajectoire périodique stable.

Le système d'unités astronomiques

Dans ce système, la masse solaire m_\star est choisie comme unité de masse, l'année comme unité de temps et le demi-grand axe de l'orbite terrestre $a = 149,6 \cdot 10^9$ m comme unité de longueur. En vertu de la 3^e loi de Kepler on a, pour les planètes du système solaire,

$$\frac{a^3}{T^2} = \frac{\mathcal{G} m_\star}{4\pi^2}$$

avec \mathcal{G} la constante de gravitation, a le demi-grand axe de l'orbite et T la période orbitale. Si l'on adopte le système d'unités astronomiques, on a dans le cas de la Terre $a = 1$ et $T = 1$ de sorte que dans ce système d'unités la constante de gravitation universelle vaut $\mathcal{G} = 4\pi^2$.

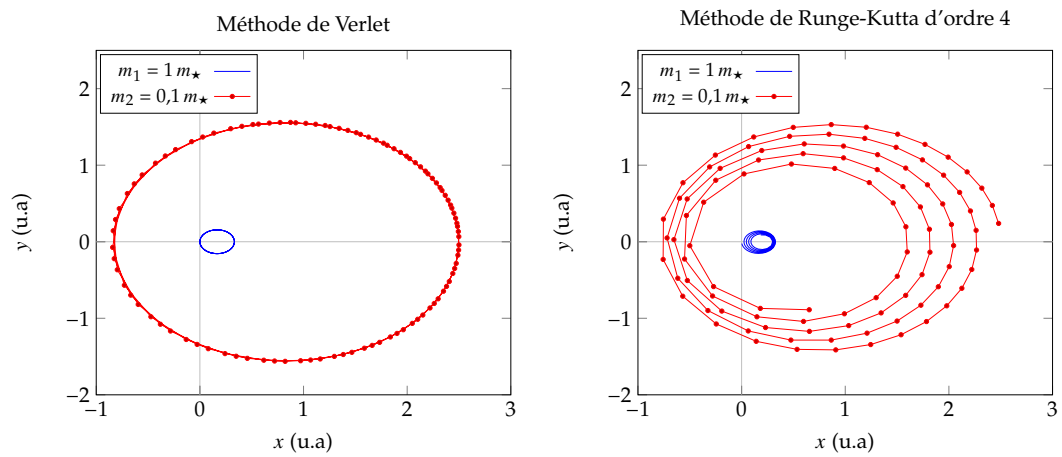


FIGURE 3.1 – Simulations numériques de la trajectoires de deux astres liés par gravitation avec un pas $h = 0,01$ an. Les points correspondent à une photographie toutes les 0,08 ans.

MÉTHODE D'EULER-RICHARDSON

4

Les méthodes classiques utilisées pour approcher les solutions des équations différentielles (Euler, Runge-Kutta ou Verlet) présentent l'inconvénient d'avoir un pas fixe. Or, dans de nombreuses situations, une grandeur physique peut varier rapidement un moment, puis plus lentement ensuite. Il est alors judicieux d'adapter le pas en fonction des besoins, c'est-à-dire de le diminuer lorsque les variations sont rapides et de l'augmenter dans l'autre cas, de façon à économiser du temps de calcul. C'est la philosophie des *algorithmes à pas adaptatif* dont la méthode décrite ici fait partie.

Ce chapitre est accessible en ligne à l'adresse :

<https://femto-physique.fr/omp/euler-richardson.php>

4.1 Schéma d'Euler-Richardson	21
Généralités	21
Principe de l'algorithme	22
4.2 Mouvement képlérien	23
Travail préliminaire	23
Résultat	24
4.3 Conclusion	25

4.1 Schéma d'Euler-Richardson

Généralités

Tout d'abord, précisons que l'on cherche à approcher la solution d'une équation différentielle avec condition initiale qui se met sous la forme

$$\begin{cases} \dot{\mathbf{y}} &= f(t, \mathbf{y}(t)), & 0 \leq t \leq T \\ \mathbf{y}(0) &= \mathbf{y}_0 \end{cases}$$

avec $\mathbf{y}(t)$ un scalaire ou un vecteur et $f(t, \mathbf{y}(t))$ une fonction suffisamment régulière pour que l'existence et l'unicité de la solution ne pose pas de problème.

À l'instar de la méthode d'Euler, la méthode d'Euler-Richardson est basée sur la discrétisation de la variable t ainsi que sur l'utilisation de différences finies pour approcher les dérivées. La différence réside ici dans l'utilisation d'un *pas variable*, dont la valeur est liée à la précision exigée par l'utilisateur. Ainsi, l'intervalle $[0, T]$ est divisé en subdivisions de longueur variable h_n . On a la relation

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

Le nombre de points n'est alors connu *qu'a posteriori*.

Rappelons enfin, qu'avant d'effectuer la résolution numérique, il est conseillé de procéder à un travail de simplification qui passe par la définition d'un nouveau système d'unités adapté au problème. On commence donc par ré-exprimer l'équation différentielle à l'aide de grandeurs sans dimension¹³).

13. cf. la Section 1.1 du Chapitre 1

Principe de l'algorithme

Commençons par rappeler la méthode d'Euler. La valeur \mathbf{y}_{n+1}^{e1} correspondant à l'instant t_{n+1} est donnée par

$$\mathbf{y}_{n+1}^{e1} = \mathbf{y}_n + h f(t_n, \mathbf{y}_n)$$

où h est le pas $t_{n+1} - t_n$. Nous savons que la méthode d'Euler est d'ordre un. Elle produit une erreur de troncature $\varepsilon_1 \simeq kh^2$ où k est une constante liée aux valeurs de la dérivée de $f(t, \mathbf{y}(t))$.

Envisageons maintenant une évolution en deux étapes de pas $h/2$, ce qui nous donne une seconde évaluation que l'on note \mathbf{y}_{n+1}^{e2} :

$$\mathbf{y}_{n+1}^{e2} = \mathbf{y}_n + \frac{h}{2} f(t_n, \mathbf{y}_n) + \frac{h}{2} f(t_{n+1/2}, \mathbf{y}_{n+1/2})$$

ce qui produit une erreur

$$\varepsilon_2 \simeq 2 \times k \left(\frac{h}{2} \right)^2 = k \frac{h^2}{2} = \frac{1}{2} \varepsilon_1$$

Ainsi, on peut espérer que les erreurs se compenseront (tout du moins à l'ordre 2) si l'on calcule \mathbf{y}_{n+1} de la façon suivante :

$$\mathbf{y}_{n+1} = 2 \mathbf{y}_{n+1}^{e2} - \mathbf{y}_{n+1}^{e1} = \mathbf{y}_n + h f(t_{n+1/2}, \mathbf{y}_{n+1/2})$$

d'où le schéma numérique suivant :

$$\begin{cases} \mathbf{k}_n & = f(t_n, \mathbf{y}_n) \\ \mathbf{k}'_n & = f(t_n + \frac{h}{2}, \mathbf{y}_n + \frac{h}{2} \mathbf{k}_n) \\ \mathbf{y}_0 & = \mathbf{y}(0) \\ \mathbf{y}_{n+1} & = \mathbf{y}_n + h \mathbf{k}'_n \end{cases} \quad (4.1)$$

En prime, on peut accéder à la quantité

$$\varepsilon_2 = |\mathbf{y}_{n+1}^{e2} - \mathbf{y}_{n+1}^{e1}| = \frac{h}{2} |f(t_{n+1/2}, \mathbf{y}_{n+1/2}) - f(t_n, \mathbf{y}_n)| = \frac{h}{2} |\mathbf{k}'_n - \mathbf{k}_n|$$

qui représente l'erreur que l'on fait avec la méthode d'Euler lorsque l'on multiplie par deux le pas ($h/2 \rightarrow h$). Cette erreur va nous servir d'indicateur pour savoir si l'on peut augmenter le pas ou s'il faut le diminuer. Il suffit alors de fixer un seuil de précision (notons le $\varepsilon_{\text{seuil}}$). Si l'erreur est plus grande que $\varepsilon_{\text{seuil}}$ d'un facteur α , il suffit de réduire le pas d'un facteur $\sqrt{\alpha}$ puisque ε_2 varie comme h^2 . Symétriquement, si l'erreur est plus petite que le seuil d'un facteur α , alors on s'autorise à augmenter le pas d'un facteur $\sqrt{\alpha}$, l'idée étant de ne pas gaspiller du temps de calcul.

Résumons maintenant la méthode :

Algorithme d'Euler-Richardson

1. Initialisation du pas h , de la durée T et du seuil de précision $\varepsilon_{\text{seuil}}$.
2. Initialisation des conditions initiales : $t = 0$ et $\mathbf{y} = \mathbf{y}(0)$.
3. Tant que $t \leq T$ faire :
 - a) Calcul de $\mathbf{k} = f(t, \mathbf{y})$.
 - b) Calcul de $\mathbf{k}' = f(t + h/2, \mathbf{y} + \mathbf{k}h/2)$.
 - c) Calcul de $\varepsilon = \frac{h}{2} |\mathbf{k}' - \mathbf{k}|$ et $\alpha = \varepsilon/\varepsilon_{\text{seuil}}$.
 - d) Si $\alpha > 1$ faire $h = 0,9 h/\sqrt{\alpha}$.
 - e) Si $\alpha < 1$ faire $\mathbf{y} = \mathbf{y} + \mathbf{k}'h$; $h = 0,9 h/\sqrt{\alpha}$; $t = t + h$; enregistrement des données.

Remarque : Le facteur 0,9 permet de rester en dessous du seuil de précision.

4.2 Le mouvement képlérien

Illustrons cette méthode sur l'exemple du mouvement d'un astre A en orbite elliptique autour du soleil S. Dans le cas où l'ellipse est de forte excentricité, la distance $r = AS$ varie de façon importante entre le périhélie (point le plus proche du soleil) et l'aphélie (point le plus éloigné) ce qui signifie que la force de gravitation -inversement proportionnelle au carré de la distance AS- varie sur de grandes échelles. On comprend dès lors qu'une méthode à pas variable convienne mieux qu'une méthode classique.

Travail préliminaire

Si l'on note m_\star la masse du soleil, et $m \ll m_\star$ celle de l'astre, le mouvement de ce dernier dans le référentiel héliocentrique¹⁴ est régi par l'équation du mouvement :

$$m \frac{d^2 \vec{SA}}{dt^2} = - \frac{\mathcal{G} m m_\star}{r^3} \vec{SA} \quad (4.2)$$

Adoptons le système d'unités astronomiques (u.a) dans lequel l'unité de longueur est le demi-grand axe de l'orbite terrestre $a \approx 150.10^6$ km, l'unité de temps est la période orbitale terrestre $T_0 = 1$ an et l'unité de masse, celle du soleil m_\star . La troisième loi de Kepler nous donne la valeur de \mathcal{G} dans ce système d'unités

$$\frac{a^3}{T_0^2} = \frac{\mathcal{G} m_\star}{4\pi^2} \implies \mathcal{G} = 4\pi^2$$

ce qui permet de reformuler l'équation (4.2) dans le plan (x, y) :

$$\ddot{x} = - \frac{4\pi^2 x}{(x^2 + y^2)^{3/2}} \quad \text{et} \quad \ddot{y} = - \frac{4\pi^2 y}{(x^2 + y^2)^{3/2}}$$

14. Référentiel que nous supposons galiléen pour notre propos. En réalité, le soleil oscille légèrement autour du centre de masse du système solaire.

Il s'agit donc de deux équations scalaires du second ordre que l'on peut transformer en une équation vectorielle du premier ordre, de la forme $\dot{\mathbf{y}} = f(\mathbf{y})$ si l'on pose :

$$\mathbf{y} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ v_x \\ v_y \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad f(\mathbf{y}) = \begin{pmatrix} v_x \\ v_y \\ -\frac{4\pi^2 x}{(x^2 + y^2)^{3/2}} \\ -\frac{4\pi^2 y}{(x^2 + y^2)^{3/2}} \end{pmatrix}$$

Notons qu'ici la fonction d'évolution $f(\mathbf{y})$ ne dépend pas explicitement du temps (on dit que l'équation différentielle est autonome).

Résultat

Supposons qu'à l'instant initial $t = 0$, l'astre soit lancé depuis le point $(x = 0,5, y = 0)$ avec un vecteur vitesse $(v_x = 0, v_y = 11,5)$ (dans les unités astronomiques). Observons le résultat correspondant à une durée $T = 1,95$ ans, un pas initial $h = 0,0124$ et une précision $\varepsilon_{\text{seuil}} = 0,01$. On applique la méthode d'Euler-Richardson :

1. Initialisation : $h = 0,0124$, $T = 1,95$ ans et $\varepsilon_{\text{seuil}} = 0,01$.

2. Conditions initiales : $t = 0$ et $\mathbf{y} = \begin{pmatrix} y_1 = 0,5 \\ y_2 = 0 \\ y_3 = 0 \\ y_4 = 11,5 \end{pmatrix}$.

3. Tant que $t \leq T$ faire :

- a) Calcul de $\mathbf{k} = f(\mathbf{y})$:

$$\mathbf{k} = \begin{pmatrix} y_3 \\ y_4 \\ -\frac{4\pi^2 y_1}{(y_1^2 + y_2^2)^{3/2}} \\ -\frac{4\pi^2 y_2}{(y_1^2 + y_2^2)^{3/2}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} k_1 \\ k_2 \\ k_3 \\ k_4 \end{pmatrix}$$

- b) Calcul de $\mathbf{k}' = f(\mathbf{y} + \frac{h}{2}\mathbf{k})$:

$$\mathbf{k}' = \begin{pmatrix} y_3 + (h/2)k_3 \\ y_4 + (h/2)k_4 \\ -\frac{4\pi^2 [y_1 + (h/2)k_1]}{[(y_1 + (h/2)k_1)^2 + (y_2 + (h/2)k_2)^2]^{3/2}} \\ -\frac{4\pi^2 [y_2 + (h/2)k_2]}{[(y_1 + (h/2)k_1)^2 + (y_2 + (h/2)k_2)^2]^{3/2}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} k'_1 \\ k'_2 \\ k'_3 \\ k'_4 \end{pmatrix}$$

- c) Calcul de l'erreur $\varepsilon = |\mathbf{k} - \mathbf{k}'|_{\frac{h}{2}}$ et α :

$$\varepsilon = \frac{h}{2} \sqrt{(k'_1 - k_1)^2 + (k'_2 - k_2)^2 + (k'_3 - k_3)^2 + (k'_4 - k_4)^2} \quad \text{et} \quad \alpha = \varepsilon / \varepsilon_{\text{seuil}}$$

- d) Si $\alpha > 1$ faire $h = 0,9 h / \sqrt{\alpha}$.

- e) Si $\alpha < 1$ faire $\mathbf{y} = \mathbf{y} + \mathbf{k}'h$; $h = 0,9 h/\sqrt{\alpha}$; $t = t + h$; enregistrement des données.

La figure 4.1, montre le résultat et le compare à celui obtenu avec la méthode de Runge-Kutta. Dans les deux cas, le nombre de pas est le même : $N = 158$. Théoriquement, on prévoit une trajectoire elliptique d'excentricité $e = 0,853$, d'aphélie $x = -2,58$ ua et de période $T_A = 1,908$ an. Malgré le faible nombre de points, la méthode d'Euler-Richardson donne un résultat tout à fait acceptable : l'astre fait un tour sur une orbite quasi-elliptique en $t = 1,901$ an. Les points sont d'autant plus denses que l'astre est près du périhélie car l'attraction et donc l'accélération, est grande. En revanche, la méthode de Runge-Kutta est décevante. Le pas étant trop grand près du périhélie, la trajectoire est instable et l'astre spirale en convergeant sur le soleil pour quitter le système solaire au bout d'un certain temps.

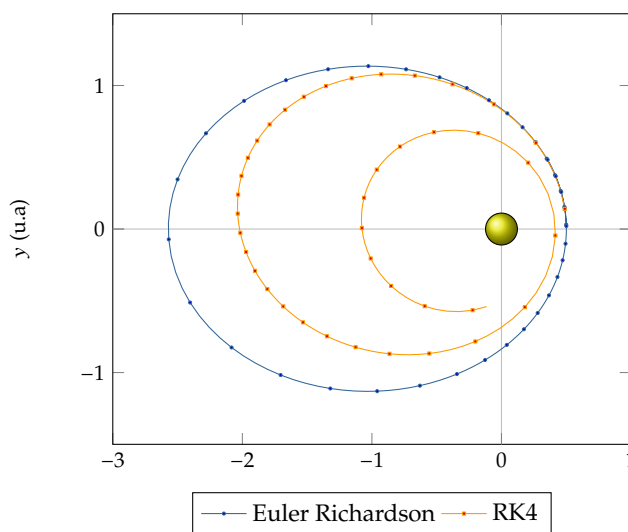


FIGURE 4.1 – Trajectoire d'un astre autour du Soleil obtenue numériquement pour une durée $T = 1,95$ ans. Conditions initiales : $x(0) = 0,5$ ua, $y(0) = 0$, $\dot{y}(0) = 11,5$ ua/an et $\dot{x}(0) = 0$. Nombre de points $N = 158$ (un point sur quatre est représenté).

4.3 Conclusion

En conclusion, le calcul numérique est un outil intéressant à condition d'avoir un regard critique sur le problème et les résultats. Bien que les méthodes classiques soient très utilisées, il faut savoir qu'il existe de nombreuses méthodes numériques plus ou moins sophistiquées, les plus précises étant les méthodes à pas adaptatifs comme la méthode que l'on vient de présenter.

AUTOUR DES CHAMPS

RÉSOLVRE L'ÉQUATION DE LAPLACE

5

Ce cours aborde une méthode numérique simple à mettre en œuvre pour résoudre l'équation de Laplace : la méthode de relaxation.

Ce chapitre est accessible en ligne à l'adresse :

<https://femto-physique.fr/omp/methode-de-relaxation.php>

COMMENT TRACER UNE LIGNE DE CHAMP?

6

En physique, il arrive souvent que l'on veuille représenter la distribution d'un champ vectoriel ; le champ d'écoulement en dynamique des fluides ou le champ magnétique créé par un circuit électrique en sont des exemples. La ligne de champ est un concept intéressant à ce titre. Ce tutoriel explique comment tracer numériquement ces lignes de champs connaissant l'expression du champ en chaque point de l'espace.

Ce chapitre est accessible en ligne à l'adresse :

[https : //femto – physique.fr/omp/tracer – ligne – de – champ.php](https://femto-physique.fr/omp/tracer-ligne-de-champ.php)

COMMENT TRACER UNE COURBE DE NIVEAU?

7

Ce chapitre est accessible en ligne à l'adresse :

<https://femto-physique.fr/omp/tracer-courbe-de-niveau.php>

ANNEXES

LES ERREURS NUMÉRIQUES



Lorsque l'on met en place une méthode numérique pour résoudre un problème scientifique il importe d'avoir une approche critique des résultats. Notamment, si l'on recherche de la précision, il n'est pas inutile d'avoir une idée de l'erreur que produit la méthode numérique utilisée. Cette erreur est essentiellement de deux types : l'erreur d'arrondi et l'erreur d'approximation.

Ce chapitre est accessible en ligne à l'adresse :

<https://femto-physique.fr/omp/erreurs-numeriques.php>

Notations

Notations mathématiques utilisées dans ce cours.

Notation	Signification
\triangleq	relation de définition
\sim	égal en ordre de grandeur
\bar{f}	moyenne temporelle de $f(t)$
f_{pp}	amplitude crête-à-crête du signal $f(t)$
f_{rms}	valeur efficace du signal $f(t)$
$\Pi_a(t)$	fonction porte de largeur a
$\delta(t)$	impulsion de Dirac
$\frac{df}{dt}$	dérivée première par rapport au temps
$\frac{d^n f}{dt^n}$	dérivée n-ième par rapport au temps
$\xrightarrow{t \rightarrow \infty}$	limite lorsque t tend vers l'infini, équivalent à $\lim_{t \rightarrow \infty}$
\underline{z}	grandeur complexe
\underline{z}^*	complexe conjuguée
$\text{Re}(\underline{z})$	partie réelle d'un nombre complexe
$\text{Im}(\underline{z})$	partie imaginaire d'un nombre complexe
$\widehat{f}(\nu)$	transformée de Fourier associée à $f(t)$ équivalent à ou $\text{TF}[f(t)]$
$\widehat{f}(\nu_x, \nu_y)$	transformée de Fourier bi-dimensionnelle associée à $f(x, y)$ équivalent à $\text{TF}_{2d}[f(x, y)]$
$\xleftrightarrow[\text{TF}^{-1}]{\text{TF}}$	relation de dualité entre le signal et sa transformée de Fourier
\vec{u}	vecteur unitaire
$(\vec{u}_x, \vec{u}_y, \vec{u}_z)$	base cartésienne
$\ \vec{A}\ $ ou A	norme du vecteur \vec{A}
A_z	composante suivant l'axe $(Oz) = A_z = \vec{A} \cdot \vec{u}_z$
\log_{10}	logarithme à base 10