Résolution numérique d'EDO : méthodes de Runge-Kutta

1 Introduction : méthode du point milieu

On s'intéresse à l'équation différentielle

$$y' = f(t, y), \quad t \in I, \, y \in U \subset \mathbb{R}^n \tag{1}$$

d'inconnue $y : I \to \mathbb{R}^n$. On suppose que le problème de Cauchy de condition initiale $y(t_0) = y_0$ admet une solution maximale unique, comme par exemple dans l'application du théorème de Cauchy-Lipschitz. On note cette solution z, et on fixe $T > 0$ ainsi qu'une discrétisation $t_0 < t_1 < \cdots < t_N = t_0 + T$, où T est choisi de sorte que z est définie sur $[t_0, t_0 + T]$. Alors, pour chaque $k \in [\![0, N-1]\!]$, on peut écrire

$$z(t_{k+1}) - z(t_k) = \int_{t_k}^{t_{k+1}} f(s, z(s)) ds,$$

et l'idée est d'approximer l'intégrale du membre de droite par une méthode de quadrature. Par exemple, en choisissant la méthode des rectanges à gauche, on obitent

$$z(t_{k+1}) - z(t_k) \simeq (t_{k+1} - t_k) f(t_k, z(t_k)),$$

c'est la méthode d'Euler explicite. Plutôt que la méthode des rectangles à gauche, on peut par exemple choisir la méthode du point milieu. En notant $h_k = t_{k+1} - t_k$,

$$z(t_{k+1}) - z(t_k) \simeq (t_{k+1} - t_k) f\left(t_k + \frac{h_k}{2}, z\left(t_k + \frac{h_k}{2}\right)\right),$$

mais pour cette méthode, on voit qu'il faut d'abord calculer une valeur approchée de $z(t_k + h_k/2)$, pour laquelle on peut choisir une autre méthode de quadrature, comme par exemple celle des rectangles à gauche (qui correspond à la méthode d'Euler). Dans ce cas, on obtient la formule suivante :

$$z(t_{k+1}) - z(t_k) \simeq (t_{k+1} - t_k) f\left(t_k + \frac{h_k}{2}, z(t_k) + \frac{h_k}{2} f(t_k, z(t_k))\right).$$

Cette formule est celle de la méthode dite du point milieu (aussi appelée Runge-Kutta 2). Notons qu'on a utilisé deux méthodes de quadrature, la première d'ordre 1, et la seconde d'ordre 2, il n'est donc pas évident que la méthode du point milieu soit d'ordre supérieur à 1, mais c'est pourtant le cas, comme un calcul explicite le prouve.

Proposition 1. *La méthode du point milieu est consistante d'ordre 2 si f est de classe $\mathcal{C}^2$.*

Démonstration. Comme souvent pour ce genre de preuve, il suffit de faire des développements limités et de regrouper les termes. Remarquons d'abord que la solution exacte z vérifie

$$z''(t) = \frac{d}{dt} f(t, z(t)) = \frac{\partial f}{\partial t}(t, z(t)) + \nabla_y f(t, z(t)) z'(t) = \left(\frac{\partial f}{\partial t} + (\nabla_y f) f\right)(t, z(t)),$$

où ∇_y désigne le gradient par rapport à la variable y. Alors

$$\begin{aligned} f\left(t_k + \frac{h_k}{2}, z(t_k) + \frac{h_k}{2} f(t_k, z(t_k))\right) &= f(t_k, z(t_k)) + \left(\frac{h_k}{2} \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{h_k}{2} (\nabla_y f) f\right)(t_k, z(t_k)) + O(h_k^2) \\ &= z'(t_k) + \frac{h_k}{2} z''(t_k) + O(h_k^2). \end{aligned}$$

Par conséquent, l'erreur de consistance est donnée par

$$\begin{aligned} e_k &= z(t_{k+1}) - z(t_k) - h_k f\left(t_k + \frac{h_k}{2}, z(t_k) + \frac{h_k}{2} f(t_k, z(t_k))\right) \\ &= h_k z'(t_k) + \frac{h_k^2}{2} z''(t_k) - h_k\left(z'(t_k) + \frac{h_k}{2} z''(t_k)\right) + O(h_k^3) \\ &= O(h_k^3), \end{aligned}$$

où le dernier O peut dépendde $z^{(3)}$ et $D^2 f$. □

2 Définition des méthodes Runge-Kutta

Les méthodes de Runge-Kutta constituent une généralisation de la méthode du point milieu : on fixe une subdivision $0 = c_0 \leqslant c_1 \leqslant c_2 \leqslant \cdots \leqslant c_q = 1$, et on calcule de manière récursive la valeur approchée en $t_{k,i} = t_k + c_i h_k$ grâce à une formule de quadrature fixée,

$$\int_0^{c_i} g(u)du = \sum_{j=0}^{i-1} a_{ij} g(c_j),$$

donc

$$z(t_{k,i}) = z(t_k) + \int_{t_k}^{t_{k,i}} f(u, z(u))du \simeq h_k \sum_{j=0}^{i-1} a_{ij} f(t_{k,j}, z(t_{k,j})).$$

Notons bien que pour que la méthode reste explicite, il est nécessaire de choisir une méthode de quadrature ne faisant pas intervenir l'indice $i = j$. La méthode est donc entièrement déterminée par le choix des points c_i et des coefficients a_{ij}, $i \in [\![1, q]\!]$, $j \in [\![0, i-1]\!]$. On la résume conventionnellement dans un tableau.

$$\begin{array}{r|cccc} 0 = c_0 & & & & \\ c_1 & a_{1,0} & & & \\ c_2 & a_{2,0} & a_{2,1} & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \\ \hline 1 = c_q & a_{q,0} & a_{q,1} & \cdots & a_{q,q-1} \end{array} \qquad \left\{ \begin{aligned} p_0 &= f(t_k, y_k) \\ p_1 &= f(t_k + c_1 h_k,\ y_k + h_k a_{1,0} p_0) \\ &\ \vdots \\ p_{q-1} &= f\left(t_k + c_{q-1} h_k,\ y_k + h_k \sum_{i=0}^{q-2} a_{q-1,i} p_i\right) \\ y_{k+1} &= y_k + h_k \sum_{i=0}^{q-1} a_{q,i} p_i \end{aligned} \right.$$

FIGURE 1 – Méthode de Runge-Kutta : tableau de coefficients et algorithme correspondant

Exemple 2. Le tableau des méthodes d'Euler explicite et du point milieu s'écrivent alors respectivement

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

Remarque 3. — Pour que la méthode soit d'ordre élevé, il est naturel d'imposer que les méthodes de quadratures intervenant soient toutes d'ordre au moins 0 (donc exactes pour les fonctions constantes), ce qui implique que la somme des coefficients $a_{i,j}$ de chaque ligne i est égale à c_i.

— Il est possible de choisir, pour certains i, $c_i = c_{i+1}$: c'est ce qu'on fait par exemple dans la méthode de Runge-Kutta 4 décrite ci-après. Dans ce cas, $t_{k,i} = t_{k,i+1}$ et la valeur $y_{k,i+1}$ est une meilleure approximation de $z(t_{k,i})$ que ne l'est $y_{k,i}$.

Exemple 4. La méthode de Runge-Kutta 4 (ou Runge-Kutta classique) est donnée par le tableau

$$\begin{array}{c|cccc} 0 & & & & \\ 1/2 & 1/2 & & & \\ 1/2 & 0 & 1/2 & & \\ 1 & 0 & 0 & 1 & \\ \hline 1 & 1/6 & 1/3 & 1/3 & 1/6 \end{array}$$

Les quadratures utilisées sont successivement les rectangles à gauche, puis à droite, puis le point milieu, et enfin la méthode de Simpson (Newton-Cotes de rang 2).

3 Détermination de l'ordre des méthodes

On rappelle la proposition suivante, sur une méthode numérique donnée par la fonction Φ, dont on suppose qu'elle est continue.

Proposition 5. *La méthode est consistante si, et seulement si,* $\Phi(t, y, 0) = f(t, y)$.

On peut généraliser ce résultat pour établir la consistance d'ordre $p \in \mathbb{N}$. L'idée est essentiellement toujours la même, on effectue des développements limités dans la formule de l'erreur de consistance. Pour ce faire, on suppose que f et Φ sont de classe $\mathcal{C}^p$, et on définit la notion de dérivée suivante, qu'on peut voir comme une dérivée particulaire.

Définition 6. Soit $g : \mathbb{R} \times \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ une fonction de classe $\mathcal{C}^1$. On définit

$$Dg(t, y) = \frac{\partial g}{\partial t}(t, y) + (\nabla_y g(t, y))f(t, y).$$

Alors, en posant $f^{[j]} = D^j f$, la solution de (1) vérifie

$$z^{(j+1)}(t) = f^{[j]}(t, z(t))$$

pour tout $j \in [\![0, p]\!]$.

Théorème 7. *Si* Φ *vérifie*

$$\frac{\partial^j \Phi}{\partial h}\Phi(t, y, 0) = \frac{1}{j+1} f^{[j]}(t, y) \tag{2}$$

pour tout $j \in [\![0, p-1]\!]$, *alors la méthode est d'ordre* p.

Démonstration. On effectue un développement limité pour z (par rapport à t) et pour Φ (par rapport à h) dans la définition de l'erreur de consistance

$$e_k = z(t_{k+1}) - z(t_k) - h_k \Phi(t_k, z(t_k), h_k).$$

D'une part,

$$\begin{aligned} z(t_{k+1}) - z(t_k) &= \sum_{j=1}^{p+1} \frac{h_k^j}{j!} z^{(j)}(t_k) + o(h_k^{p+1}) \\ &= \sum_{j=0}^{p} \frac{h_k^{j+1}}{(j+1)!} f^{[j]}(t_k, z(t_k)) + o(h_k^{p+1}), \end{aligned}$$

et d'autre part,

$$\Phi(t_k, z(t_k), h_k) = \sum_{j=0}^{p} \frac{h_k^j}{j!} \frac{\partial^j \Phi}{\partial h^j}(t_k, z(t_k), 0) + o(h_k^p).$$

Ainsi, si la relation (2) est vérifiée, on obtient que

$$|e_k| = o(h_k^{p+1}),$$

d'où, en sommant sur k,

$$\sum_{k=0}^{N-1} |e_k| = O(h_{max}^p).$$

$\square$

En application directe de ce théorème, on peut montrer que la méthode de Runge-Kutta 4 de l'exemple 4 est d'ordre 4. De manière plus générale, on peut établir des conditions sur les paramètres a_{ij} et c_j pour que la méthode de Runge-Kutta correspondante soit d'ordre p, dont certaines sont listées dans le livre de Demailly (p.243).