

Introduction

Pour passer d'un problème exact continu régi par une EDP au problème approché discret, il existe trois grandes familles de méthodes : méthode par différences finies, méthode par volumes finis et méthode par éléments finis. On s'intéressera uniquement à la méthode par différences finies : cette méthode consiste à remplacer les dérivées partielles par des différences divisées ou combinaisons de valeurs ponctuelles de la fonction en un nombre fini de points discrets ou noeuds du maillage.

- ✕ Avantages : grande simplicité d'écriture et faible coût de calcul.
- ✕ Inconvénients : limitation à des géométries simples, difficultés de prise en compte des conditions aux limites de type Neumann.

1 Méthode par différences finies

1.1 Principe

Cette méthode consiste à approximer les dérivées des équations de la physique au moyen des développements de Taylor et se déduit directement de la définition de la dérivée. Elle est due aux travaux de plusieurs mathématiciens du 18ème siècle (Euler, Taylor, Leibniz...).

Soit $u(x, y, z, t)$ une fonction de l'espace et du temps. Par définition de la dérivée, on a :

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{u(x + \Delta x, y, z, t) - u(x, y, z, t)}{\Delta x}$$

Si Δx est petit, un développement de Taylor de $u(x + \Delta x, y, z, t)$ au voisinage de x donne :

$$u(x + \Delta x, y, z, t) = u(x, y, z, t) + \Delta x \frac{\partial u}{\partial x}(x, y, z, t) + \frac{\Delta x^2}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x, y, z, t) + \frac{\Delta x^3}{6} \frac{\partial^3 u}{\partial x^3}(x, y, z, t) + \dots$$

En tronquant la série au premier ordre en Δx , on obtient :

$$\frac{u(x + \Delta x, y, z, t) - u(x, y, z, t)}{\Delta x} = \frac{\partial u}{\partial x}(x, y, z, t) + \mathcal{O}(\Delta x)$$

L'approximation de la dérivée $\frac{\partial u}{\partial x}(x)$ est alors d'ordre 1 indiquant que l'erreur de troncature $\mathcal{O}(\Delta x)$ tend vers zéro comme la puissance première de Δx .

Définition :

la puissance de Δx avec laquelle l'erreur de troncature tend vers zéro est appelée l'ordre de la méthode.

1.2 Schéma d'ordre 1 - Notation indicielle

Considérons un cas monodimensionnel où l'on souhaite déterminer une grandeur $u(x)$ sur l'intervalle $[0, 1]$. La recherche d'une solution discrète de la grandeur u amène à constituer un maillage de l'intervalle de définition. On considère un maillage (ou grille de calcul) composé de $N + 1$ points x_i pour $i = 0, \dots, N$ régulièrement espacés avec un pas Δx . Les points $x_i = i\Delta x$ sont appelés les noeuds du maillage.

Le problème continu de départ de détermination d'une grandeur sur un ensemble de dimension infinie se ramène ainsi à la recherche de N valeurs discrètes de cette grandeur aux différents noeuds du maillage.

Notation : on note u_i la valeur discrète de $u(x)$ au point x_i , soit $u_i = u(x_i)$. De même pour la dérivée de $u(x)$ au noeud x_i , on note :

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_{x=x_i} = \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_i = u'_i$$

Cette notation s'utilise de façon équivalente pour toutes les dérivées d'ordre successif de la grandeur u .

Le schéma aux différences finies d'ordre 1 présenté au-dessus s'écrit, en notation indicielle :

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_i = \frac{u_{i+1} - u_i}{\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x)$$

Ce schéma est dit "avant" ou "décentré avant" ou upwind.

Il est possible de construire un autre schéma d'ordre 1, appelé "arrière" :

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_i = \frac{u_i - u_{i-1}}{\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x)$$

1.3 Schémas d'ordre supérieur

Des schémas aux différences finies d'ordre supérieur peuvent être construits en manipulant des développements de Taylor au voisinage de x_i . On écrit :

$$\begin{aligned} u_{i+1} &= u(x_i + \Delta x) = u_i + \Delta x \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_i + \frac{\Delta x^2}{2} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_i + \mathcal{O}(\Delta x^3) \\ u_{i-1} &= u(x_i - \Delta x) = u_i - \Delta x \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_i + \frac{\Delta x^2}{2} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_i + \mathcal{O}(\Delta x^3) \end{aligned}$$

La soustraction de ces deux relations donne :

$$u_{i+1} - u_{i-1} = 2\Delta x \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_i + \mathcal{O}(\Delta x^3)$$

Ce qui permet d'obtenir le schéma d'ordre deux dit "centré" pour approximer la dérivée première de u :

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_i = \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x^2)$$

Pour obtenir des ordres supérieurs, il faut utiliser plusieurs noeuds voisins de x_i . Le nombre de points nécessaire à l'écriture du schéma s'appelle le stencil. Par exemple, un schéma aux différences finies d'ordre 3 pour la dérivée première s'écrit :

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_i = \frac{-u_{i+2} + 6u_{i+1} - 3u_i - 2u_{i-1}}{6\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x^3)$$

1.4 Dérivées d'ordre supérieur

Le principe est identique et repose sur les développements de Taylor au voisinage de x_i . Par exemple pour construire un schéma d'approximation de la dérivée seconde de u , on écrit :

$$\begin{aligned} u_{i+1} &= u_i + \Delta x \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_i + \frac{\Delta x^2}{2} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_i + \frac{\Delta x^3}{6} \left(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\right)_i + \mathcal{O}(\Delta x^4) \\ u_{i-1} &= u_i - \Delta x \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_i + \frac{\Delta x^2}{2} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_i - \frac{\Delta x^3}{6} \left(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\right)_i + \mathcal{O}(\Delta x^4) \end{aligned}$$

En faisant la somme de ces deux égalités, on aboutit à :

$$u_{i+1} - u_{i-1} - 2u_i = \Delta x^2 \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_i + \mathcal{O}(\Delta x^4)$$

Ce qui permet d'obtenir le schéma d'ordre deux dit "centré" pour approximer la dérivée seconde de u :

$$\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_i = \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{\Delta x^2} + \mathcal{O}(\Delta x^2)$$

Il existe aussi une formulation "avant" et "arrière" pour la dérivée seconde, toute deux d'ordre 1 :

$$\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_i = \frac{u_{i+2} - 2u_{i+1} + u_i}{\Delta x^2} + \mathcal{O}(\Delta x) \quad \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_i = \frac{u_i - 2u_{i-1} + u_{i-2}}{\Delta x^2} + \mathcal{O}(\Delta x)$$

Il est également possible de construire, par le même procédé, des schémas aux différences finies d'ordre supérieur pour les dérivées deuxième, troisième, etc...

1.5 Généralisation de la notation indicielle

Dans le cas 1D instationnaire, considérons l'évolution d'une grandeur $u(x, t)$ en fonction de l'espace et du temps. Le domaine de définition de u est décomposé en N noeuds x_i répartis régulièrement avec un pas d'espace Δx . De même, le temps est décomposé en intervalle élémentaire de pas constant Δt . On notera u_i^n la valeur discrète de la grandeur $u(x, t)$ au noeud x_i et au temps $n\Delta t$.

Dans le cas 2D, considérons une grandeur $u(x, y)$ définie sur un certain domaine. Ce dernier est décomposé en $N \times P$ noeuds (x_i, y_j) répartis régulièrement avec un pas d'espace Δx dans la direction x et Δy dans l'autre direction. On notera u_{ij} la valeur discrète de la grandeur $u(x, y)$ au noeud (x_i, y_j) .

De façon similaire, dans le cas 2D instationnaire, on notera u_{ij}^n la valeur discrète de la grandeur $u(x, y, t)$ au noeud x_i, y_j et au temps $n\Delta t$. Et dans le cas 3D instationnaire, on notera u_{ijk}^n la valeur discrète de la grandeur $u(x, y, z, t)$ au noeud (x_i, y_j, z_k) et au temps $n\Delta t$.

1.6 Quelques schémas

1.6.1 Différences finies avant, ordre 1

	u_i	u_{i+1}	u_{i+2}	u_{i+3}	u_{i+4}
$\Delta x u'_i$	-1	1			
$\Delta x^2 u''_i$	1	-2	1		
$\Delta x^3 u'''_i$	-1	3	-3	1	
$\Delta x^4 u^{(4)}_i$	1	-4	6	-4	1

1.6.2 Différences finies arrière, ordre 1

	u_{i-4}	u_{i-3}	u_{i-2}	u_{i-1}	u_i
$\Delta x u'_i$				-1	1
$\Delta x^2 u''_i$			1	-2	1
$\Delta x^3 u'''_i$		-1	3	-3	1
$\Delta x^4 u^{(4)}_i$	1	-4	6	-4	1

1.6.3 Différences finies centré, ordre 2

	u_{i-2}	u_{i-1}	u_i	u_{i+1}	u_{i+2}
$2\Delta x u'_i$		-1		1	
$\Delta x^2 u''_i$		1	-2	1	
$2\Delta x^3 u'''_i$	-1	2	0	-2	1
$\Delta x^4 u^{(4)}_i$	1	-4	6	-4	1

1.6.4 Différences finies centré, ordre 4

	u_{i-3}	u_{i-2}	u_{i-1}	u_i	u_{i+1}	u_{i+2}	u_{i+3}
$12\Delta x u'_i$		1	-8	0	8	-1	
$12\Delta x^2 u''_i$		-1	16	-30	16	-1	
$8\Delta x^3 u'''_i$	-1	-8	13	0	-13	8	-1
$6\Delta x^4 u^{(4)}_i$	-1	12	-39	56	-39	12	-1

1.7 Dérivées croisées

Déterminons une approximation de la dérivée croisée $\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y}$ de la fonction de 2 variables $f(x, y)$. La discrétisation du domaine de calcul est bidimensionnelle et fait intervenir deux pas d'espace supposés constants Δx et Δy dans les directions x et y . Le principe est toujours basé sur les développements de Taylor :

$$\begin{aligned} f(x_{i+l}, y_{j+m}) &= f(x_i, y_j) + l\Delta x \left(\frac{\partial f}{\partial x} \right)_i + m\Delta y \left(\frac{\partial f}{\partial y} \right)_j + \frac{(l\Delta x)^2}{2} \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right)_i + \frac{(m\Delta y)^2}{2} \left(\frac{\partial^2 f}{\partial y^2} \right)_j \\ &\quad + \frac{2ml\Delta x \Delta y}{2} \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} \right)_{i,j} + \dots \end{aligned}$$

Au voisinage du point (i, j) :

$$\begin{aligned} f_{i+1,j+1} &= f_{i,j} + \Delta x \left(\frac{\partial f}{\partial x} \right)_i + \Delta y \left(\frac{\partial f}{\partial y} \right)_j + \Delta x \Delta y \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} \right)_{i,j} + \frac{\Delta x^2}{2} \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right)_i + \frac{\Delta y^2}{2} \left(\frac{\partial^2 f}{\partial y^2} \right)_i \\ f_{i-1,j-1} &= f_{i,j} - \Delta x \left(\frac{\partial f}{\partial x} \right)_i - \Delta y \left(\frac{\partial f}{\partial y} \right)_j + \Delta x \Delta y \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} \right)_{i,j} + \frac{\Delta x^2}{2} \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right)_i + \frac{\Delta y^2}{2} \left(\frac{\partial^2 f}{\partial y^2} \right)_i \\ f_{i+1,j-1} &= f_{i,j} + \Delta x \left(\frac{\partial f}{\partial x} \right)_i - \Delta y \left(\frac{\partial f}{\partial y} \right)_j - \Delta x \Delta y \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} \right)_{i,j} + \frac{\Delta x^2}{2} \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right)_i + \frac{\Delta y^2}{2} \left(\frac{\partial^2 f}{\partial y^2} \right)_i \\ f_{i-1,j+1} &= f_{i,j} - \Delta x \left(\frac{\partial f}{\partial x} \right)_i + \Delta y \left(\frac{\partial f}{\partial y} \right)_j - \Delta x \Delta y \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} \right)_{i,j} + \frac{\Delta x^2}{2} \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right)_i + \frac{\Delta y^2}{2} \left(\frac{\partial^2 f}{\partial y^2} \right)_i \end{aligned}$$

En effectuant une combinaison linéaire des quatre équations précédentes ((1) + (2) - (3) - (4)), nous obtenons une approximation de la dérivée croisée à l'ordre 1 :

$$\left(\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} \right)_{i,j} = \frac{f_{i+1,j+1} - f_{i+1,j-1} - f_{i-1,j+1} + f_{i-1,j-1}}{4\Delta x \Delta y}$$

1.8 Exemple simple 1D avec conditions de Dirichlet

Considérons l'équation différentielle suivante :

$$\begin{cases} -u''(x) = f(x) \\ u(0) = \alpha \text{ et } u(1) = \beta \end{cases}, \quad x \in]0, 1[$$

où f est une fonction continue.

Le maillage est construit en introduisant $N + 1$ noeuds x_i avec $i = 0, 1, \dots, N$, régulièrement espacés avec un pas Δx . La quantité u_i désignera la valeur de la fonction $u(x)$ au noeud x_i .

L'équation à résoudre s'écrit, sous forme discrète en chaque noeud x_i :

$$-\left(\frac{d^2 u}{dx^2} \right)_i = f(x_i) = f_i$$

Approximons la dérivée seconde de u au moyen d'un schéma centré à l'ordre 2 :

$$\left(\frac{d^2u}{dx^2}\right)_i = \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{\Delta x^2}$$

L'équation discrétisée est ainsi :

$$\frac{2u_i - u_{i+1} - u_{i-1}}{\Delta x^2} = f_i \quad ; \text{ pour } i \text{ variant de } 1 \text{ à } N-1$$

Il est très pratique d'utiliser une formulation matricielle en faisant apparaître le vecteur des inconnues discrètes :

$$\frac{1}{\Delta x^2} \begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 & \cdots & 0 \\ -1 & 2 & -1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & -1 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_{N-2} \\ u_{N-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_1 + \alpha/\Delta x^2 \\ f_2 \\ \vdots \\ f_{N-2} \\ f_{N-1} + \beta/\Delta x^2 \end{bmatrix}$$

1.9 Exemple simple 1D avec conditions mixtes Dirichlet-Neumann

Considérons l'équation différentielle suivante :

$$\begin{cases} -u''(x) = f(x) \\ u(0) = \alpha \text{ et } u'(1) = \beta \end{cases}$$

où $x \in]0, 1[$ Avec la condition de Neumann en $x = 1$ portant sur la dérivée de u et non pas u .

Les modifications du problème discrétisé par rapport au cas précédent sont les suivantes :

- ✗ Tout d'abord, le nombre d'inconnues a changé. Il y a une inconnue au bord en $x = 1$. Le problème discret a donc maintenant, sur la base du même maillage que précédemment, N inconnues u_i pour i variant de 1 à N .
- ✗ D'autre part, il faut discrétiser la condition de Neumann $u'(1) = \beta$. Plusieurs choix sont possibles pour approximer cette dérivée première. C'est un des inconvénients de la méthode des différences finies : elle ne donne pas de façon naturelle une bonne approximation des conditions de Neumann. Dans notre cas, utilisons une approximation d'ordre 1 : $u'(1) = \frac{u_N - u_{N-1}}{\Delta x}$

Sous forme matricielle, on obtient :

$$\frac{1}{\Delta x^2} \begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & -1 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_{N-2} \\ u_{N-1} \\ u_N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_1 + \alpha/\Delta x^2 \\ f_2 \\ \vdots \\ f_{N-2} \\ f_{N-1} \\ \beta/\Delta x \end{bmatrix}$$

2 Discrétisation de l'équation de la chaleur 1D

2.1 Principe

Considérons le problème monodimensionnel de la conduction de la chaleur dans une barre de 1 m de longueur. Le champ de température $T(x, t)$ vérifie l'équation de la chaleur :

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$$

où α est la diffusivité thermique.

A cette EDP s'ajoute deux conditions aux limites aux extrémités de la barre $T(0, t) = T_g$ et $T(1, t) = T_d$ ainsi qu'une condition initiale $T(x, 0) = T_0$.

L'intervalle $[0, 1]$ est discrétisé en $N + 1$ noeuds de coordonnées x_i (i variant de 0 à N) régulièrement espacés. Notons Δx le pas d'espace. Le temps est discrétisé en intervalles de pas constant Δt . Notons T_i^n la température au noeud $x_i = i\Delta x$ et à l'instant $t = n\Delta t$.

On peut utiliser deux approches pour discrétiser cette équation de la chaleur. La première dite explicite utilise une discrétisation au noeud x_i et à l'itération courante n :

$$\left(\frac{\partial T}{\partial t}\right)_i^n = \alpha \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}\right)_i^n$$

Et la seconde dite implicite utilise une discrétisation au noeud x_i et à l'itération $n + 1$:

$$\left(\frac{\partial T}{\partial t}\right)_i^{n+1} = \alpha \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}\right)_i^{n+1}$$

2.2 Schéma explicite

Nous utilisons un schéma avant d'ordre 1 pour évaluer la dérivée temporelle et un schéma centré d'ordre 2 pour la dérivée seconde en espace :

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial T}{\partial t}\right)_i^n &= \frac{T_i^{n+1} - T_i^n}{\Delta t} \\ \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}\right)_i^n &= \frac{T_{i+1}^n - 2T_i^n + T_{i-1}^n}{\Delta x^2} \end{aligned}$$

En posant $\lambda = \alpha \frac{\Delta t}{\Delta x^2}$, la température à l'itération $n + 1$ est donnée par :

$$T_i^{n+1} = \lambda T_{i-1}^n + (1 - 2\lambda)T_i^n + \lambda T_{i+1}^n \quad i \text{ variant de } 1 \text{ à } N - 1$$

On remarquera que le programme associé est assez lent. On pourrait penser augmenter le pas de temps pour aller plus vite. Mais, si on augmente trop le pas de temps, le calcul explose. On peut vérifier que :

$$\Delta t = \frac{\Delta x^2}{2\alpha}$$

est la limite supérieure à ne pas franchir,

Soit :

$$\lambda < 1/2$$

Au delà, le programme devient instable, il « explose ». Le schéma que l'on a écrit est explicite, pour pouvoir résoudre avec un pas de temps plus grand, il faudrait faire un schéma dit « implicite ». Cela complique un peu la résolution.

Notons enfin que l'on peut aussi procéder à une résolution matricielle :

$$\begin{bmatrix} T_1 \\ T_2 \\ \vdots \\ T_{N-2} \\ T_{N-1} \end{bmatrix}^{n+1} = \begin{bmatrix} 1-2\lambda & \lambda & 0 & \cdots & 0 \\ \lambda & 1-2\lambda & \lambda & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \lambda & 1-2\lambda & \lambda \\ 0 & 0 & 0 & \lambda & 1-2\lambda \end{bmatrix} \begin{bmatrix} T_1 \\ T_2 \\ \vdots \\ T_{N-2} \\ T_{N-1} \end{bmatrix}^n + \lambda \begin{bmatrix} T_g \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ T_d \end{bmatrix}$$

2.3 Schéma implicite

Nous utilisons un schéma arrière d'ordre 1 pour évaluer la dérivée temporelle et un schéma centré d'ordre 2 pour la dérivée seconde en espace :

$$\begin{aligned}\left(\frac{\partial T}{\partial t}\right)_i^{n+1} &= \frac{T_i^{n+1} - T_i^n}{\Delta t} \\ \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}\right)_i^{n+1} &= \frac{T_{i+1}^{n+1} - 2T_i^{n+1} + T_{i-1}^{n+1}}{\Delta x^2}\end{aligned}$$

En posant $\lambda = \alpha \frac{\Delta t}{\Delta x^2}$, la température à l'itération $n + 1$ est donnée par :

$$(1 + 2\lambda)T_i^{n+1} - \lambda(T_{i-1}^{n+1} + T_{i+1}^{n+1}) = T_i^n \quad i \text{ variant de } 1 \text{ à } N - 1$$

On constate que les inconnues à l'itération $n + 1$ sont reliées entre elles par une relation implicite (d'où le nom de la méthode).

Sous forme matricielle :

$$\begin{bmatrix} 1+2\lambda & -\lambda & 0 & \cdots & 0 \\ -\lambda & 1+2\lambda & -\lambda & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & -\lambda & 1+2\lambda & -\lambda \\ 0 & 0 & 0 & -\lambda & 1+2\lambda \end{bmatrix} \begin{bmatrix} T_1 \\ T_2 \\ \vdots \\ T_{N-2} \\ T_{N-1} \end{bmatrix}^{n+1} = \begin{bmatrix} T_1 \\ T_2 \\ \vdots \\ T_{N-2} \\ T_{N-1} \end{bmatrix}^n + \lambda \begin{bmatrix} T_g \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ T_d \end{bmatrix}$$

A chaque itération, le vecteur des inconnues discrètes se détermine par résolution d'un système linéaire. La matrice du système étant tridiagonale, un algorithme de Thomas (basé sur la méthode du pivot de Gauss) est très souvent utilisé.

2.4 Algorithme de Thomas

Cet algorithme est utilisé pour la résolution d'un système avec une matrice tridiagonale :

$$\begin{bmatrix} b_1 & c_1 & 0 & \cdots & 0 \\ a_2 & b_2 & c_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & a_{N-2} & b_{N-2} & c_{N-2} \\ 0 & 0 & 0 & a_{N-1} & b_{N-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} X_1 \\ X_2 \\ \vdots \\ X_{N-2} \\ X_{N-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} d_1 - a_1 X_0 \\ d_2 \\ \vdots \\ d_{N-2} \\ d_{N-1} - c_{N-1} X_n \end{bmatrix}$$

Le calcul s'effectue en deux étapes (qui correspondent aux deux étapes du pivot de Gauss). L'étape de triangularisation fait apparaître les coefficients α_i et β_i évalués par :

$$\alpha_i = \frac{-a_i}{b_i + c_i \alpha_{i+1}} \quad \text{et} \quad \beta_i = \frac{d_i - c_i \beta_{i+1}}{b_i + c_i \alpha_{i+1}} \quad \text{pour } i \text{ variant de } N-1 \text{ à } 1$$

avec $\alpha_N = 0$ et $\beta_N = X_N$ (où X_N est une condition aux limites).

La deuxième étape détermine les inconnues, pour i variant de 1 à $N - 1$: $X_i = \alpha_i X_{i-1} + \beta_i$.

3 Discrétisation de l'équation de la chaleur 2D stationnaire

3.1 Principe

Considérons le problème bidimensionnel stationnaire de la conduction de la chaleur dans un domaine rectangulaire $[0, L_x] \times [0, L_y]$. Le champ de température $T(x, y)$ vérifie l'équation de Laplace :

$$\begin{cases} \Delta T = \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} = 0 & , \quad (x, y) \in [0, L_x] \times [0, L_y] \\ T(0, y) = T_g \text{ et } T(L_x, y) = T_d & 0 < y < L_y \\ T(x, 0) = T_b \text{ et } T(x, L_y) = T_h & 0 < x < L_x \end{cases}$$

Le domaine de calcul est discrétisé en $(N+1) \times (P+1)$ noeuds (x_i, y_j) (i variant de 0 à N et j variant de 0 à P). On supposera que les pas d'espace dans chaque direction Δx et Δy sont constants. La température discrète au noeud (x_i, y_j) sera notée $T_{ij} = T(x_i, y_j)$.

Nous utilisons un schéma centré d'ordre 2 pour approximer les dérivées secondes en espace :

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \right)_{ij} &= \frac{T_{i+1,j} - 2T_{i,j} + T_{i-1,j}}{\Delta x^2} \\ \left(\frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right)_{ij} &= \frac{T_{i,j+1} - 2T_{i,j} + T_{i,j-1}}{\Delta y^2} \end{aligned}$$

La formulation discrétisée est alors, pour i variant de 1 à $N-1$ et j variant de 1 à $P-1$:

$$\Delta y^2 (T_{i+1,j} + T_{i-1,j}) + \Delta x^2 (T_{i,j+1} + T_{i,j-1}) - 2(\Delta x^2 + \Delta y^2) T_{i,j} = 0$$

Soit sous forme matricielle, pour $N = P = 4$, en posant $A = \Delta x^2 + \Delta y^2$:

$$\begin{bmatrix} -2A & \Delta y^2 & 0 & \Delta x^2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \Delta y^2 & -2A & \Delta y^2 & 0 & \Delta x^2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \Delta y^2 & -2A & 0 & 0 & \Delta x^2 & 0 & 0 & 0 \\ \Delta x^2 & 0 & 0 & -2A & \Delta y^2 & 0 & \Delta x^2 & 0 & 0 \\ 0 & \Delta x^2 & 0 & \Delta y^2 & -2A & \Delta y^2 & 0 & \Delta x^2 & 0 \\ 0 & 0 & \Delta x^2 & 0 & \Delta y^2 & -2A & 0 & 0 & \Delta x^2 \\ 0 & 0 & 0 & \Delta x^2 & 0 & 0 & -2A & \Delta y^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \Delta x^2 & 0 & \Delta y^2 & -2A & \Delta y^2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \Delta x^2 & 0 & \Delta y^2 & -2A \end{bmatrix} \begin{bmatrix} T_{11} \\ T_{21} \\ T_{31} \\ T_{12} \\ T_{22} \\ T_{32} \\ T_{13} \\ T_{23} \\ T_{33} \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} \Delta x^2 T_b + \Delta y^2 T_g \\ \Delta x^2 T_b \\ \Delta x^2 T_b + \Delta y^2 T_d \\ \Delta y^2 T_g \\ 0 \\ \Delta y^2 T_d \\ \Delta x^2 T_h + \Delta y^2 T_g \\ \Delta x^2 T_h \\ \Delta x^2 T_h + \Delta y^2 T_d \end{bmatrix}$$

Dans le cas où les pas d'espace sont identiques $\Delta x = \Delta y$, la formulation devient, pour i variant de 1 à $N-1$ et j variant de 1 à $P-1$:

$$T_{i+1,j} + T_{i,j-1} + T_{i-1,j} + T_{i,j+1} - 4T_{i,j} = 0$$

Soit sous forme matricielle, pour $N = P = 4$:

$$\begin{bmatrix} -4 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & -4 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -4 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & -4 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & -4 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & -4 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & -4 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & -4 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & -4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} T_{11} \\ T_{21} \\ T_{31} \\ T_{12} \\ T_{22} \\ T_{32} \\ T_{13} \\ T_{23} \\ T_{33} \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} T_b + T_g \\ T_b \\ T_b + T_d \\ T_g \\ 0 \\ T_d \\ T_h + T_g \\ T_h \\ T_h + T_d \end{bmatrix}$$

Notons I la matrice identité d'ordre 3 et D la matrice de dimension 3 définie par :

$$D = \begin{bmatrix} -4 & 1 & 0 \\ 1 & -4 & 1 \\ 0 & 1 & -4 \end{bmatrix}$$

Notons T_1, T_2 et T_3 les vecteurs à 3 composantes définis par :

$$T_1 = \begin{bmatrix} T_{11} \\ T_{21} \\ T_{31} \end{bmatrix} \quad T_2 = \begin{bmatrix} T_{12} \\ T_{22} \\ T_{32} \end{bmatrix} \quad T_3 = \begin{bmatrix} T_{13} \\ T_{23} \\ T_{33} \end{bmatrix}$$

Le système peut s'écrire sous la forme matricielle bloc suivante :

$$\begin{bmatrix} D & I & 0 \\ I & D & I \\ 0 & I & D \end{bmatrix} \begin{bmatrix} T_1 \\ T_2 \\ T_3 \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} B_1 \\ B_2 \\ B_3 \end{bmatrix}$$

La matrice obtenue est tridiagonale et chacun de ses blocs est tridiagonal. La résolution du système peut s'effectuer par une méthode de Thomas matriciel où une méthode itérative matricielle (méthode de Gauss-Seidel).

3.2 Algorithme de Thomas matriciel

Cet algorithme est utilisé pour la résolution d'un système avec une matrice tridiagonale par bloc faisant intervenir un vecteur d'inconnues discrètes X_i , de la forme :

$$A_i X_{i-1} + B_i X_i + C_i X_{i+1} = D_i \quad i \text{ variant de } 1 \text{ à } N-1$$

où A_i, B_i, C_i sont des matrices et D_i un vecteur. Sous forme matricielle :

$$\begin{bmatrix} B_1 & C_1 & 0 & \cdots & 0 \\ A_2 & B_2 & C_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & A_{N-2} & B_{N-2} & C_{N-2} \\ 0 & 0 & 0 & A_{N-1} & B_{N-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} X_1 \\ X_2 \\ \vdots \\ X_{N-2} \\ X_{N-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} D_1 - A_1 X_0 \\ D_2 \\ \vdots \\ D_{N-2} \\ D_{N-1} - C_{N-1} X_n \end{bmatrix}$$

On introduit la matrice α_i et le vecteur β_i évalués par les relations de récurrence suivantes :

$\alpha_i = (B_i + C_i \alpha_{i+1})^{-1} A_i$ et $\beta_i = (B_i + C_i \alpha_{i+1})^{-1} \times (D_i - C_i \beta_{i+1})$ pour i variant de $N-1$ à 1 avec $\alpha_N = 0$ et $\beta_N = X_N$ (où X_N exprime une condition aux limites).

La deuxième étape détermine les inconnues, pour i variant de 1 à $N-1$: $X_i = \alpha_i X_{i-1} + \beta_i$.

Remarque : Avec une condition de Neumann sur l'un des bords du domaine, par exemple en $y = 0$ un flux de chaleur égale à ϕ_b , il faudrait ajouter à la formulation précédente la discrétisation de cette condition au bord.

Ceci a pour conséquence l'ajout de $N-1$ inconnues supplémentaires à savoir les valeurs de la température au bord ($j = 0$ et i variant de 1 à $N-1$).

Par exemple utilisons un schéma d'ordre 1 pour évaluer le flux de chaleur :

$$-\lambda \left(\frac{\partial T}{\partial y} \right)_{i,0} = \frac{T_{i,1} - T_{i,0}}{\Delta y} = \phi_b$$

Soit sous forme matricielle, dans le cas où $\Delta x = \Delta y$ et pour $N = P = 4$:

$$\begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & -4 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & -4 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & -4 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & -4 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & -4 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & -4 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & -4 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & -4 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & -4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} T_{10} \\ T_{20} \\ T_{30} \\ T_{11} \\ T_{21} \\ T_{31} \\ T_{12} \\ T_{22} \\ T_{32} \\ T_{13} \\ T_{23} \\ T_{33} \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} \phi_b \Delta x / \lambda \\ \phi_b \Delta x / \lambda \\ \phi_b \Delta x / \lambda \\ T_g \\ 0 \\ T_d \\ T_g \\ 0 \\ T_d \\ T_h + T_g \\ T_h \\ T_h + T_d \end{bmatrix}$$

4 Méthode numériques

Les équations différentielles ordinaires (EDO) apparaissent très souvent dans la modélisation de la physique et des sciences de l'ingénieur. Trouver la solution d'une EDO ou d'un système d'EDO est ainsi un problème courant, souvent difficile ou impossible à résoudre de façon analytique. Il est alors nécessaire de recourir à des méthodes numériques pour résoudre ces équations différentielles.

Soit une fonction $y(x)$ définie sur un intervalle de $\mathcal{R}$ et de classe C_p (continûment dérivable d'ordre p). On appelle équation différentielle d'ordre p une équation de la forme :

$$F(x, y, y', y'', \dots, y^{(p)}) = 0$$

On appelle forme canonique d'une EDO une expression du type :

$$y^{(p)} = f(x, y, y', y'', \dots, y^{(p-1)})$$

Seul ce type d'équations sera considéré dans ce chapitre.

Toute équation différentielle canonique peut être écrite comme un système d'équations différentielles du premier ordre en introduisant $p - 1$ fonctions définies comme :

$$\begin{cases} y_1 = y \\ y_2 = y' \\ \dots \\ y_p = y^{(p-1)} \end{cases}$$

L'équation canonique se met sous la forme du système d'EDO d'ordre 1 suivant :

4.1 Le problème de Cauchy

On appelle problème de Cauchy ou problème à la valeur initiale le problème qui consiste à trouver une fonction $y(x)$ définie sur l'intervalle $[a, b]$ telle que :

$$\begin{cases} y'(x) = f(x, y(x)) & ; \quad \forall x \in [a, b] \\ y(a) = y_0 \end{cases}$$

Si la fonction f est continue et vérifie une condition de Lipschitz par rapport à la deuxième variable alors le problème admet une solution unique. On dit que le problème est bien posé.

Attention : un problème bien posé ne signifie pas qu'il peut se résoudre numériquement !

4.2 Principe général des méthodes numériques

Pour obtenir une approximation numérique de la solution $y(x)$ sur l'intervalle $[a, b]$, nous allons estimer la valeur de cette fonction en un nombre fini de points x_i , pour $i = 0, 1, \dots, n$, constituant les noeuds du maillage. La solution numérique discrète obtenue aux points x_i est notée $y_i = y(x_i)$.

L'écart entre deux abscisses, noté h , est appelé pas de discrétisation. Ce pas, dans les méthodes les plus simples, est constant, mais il peut être judicieux de travailler avec un pas variable $h_i = x_i - x_{i-1}$. Le choix du maillage et de la répartition des noeuds peuvent s'avérer crucial.

Les techniques de résolution des EDO sont basées sur :

- ✕ l'approximation géométrique de la fonction
- ✕ les formules d'intégration numérique (rectangle, trapèze, Simpson...)
- ✕ les développements de Taylor au voisinage de x_i

4.3 Propriétés des méthodes numériques

Plusieurs notions mathématiques sont introduites lors de la résolution d'EDO au moyen de leurs équivalents discrétisés. Les trois principales sont la convergence, la stabilité et la consistance (cf. cours sur la discrétisation des EDP), permettant de relier la solution exacte des équations continues à la solution exacte des équations discrétisées et à la solution numérique obtenue.

A ces propriétés, il convient d'ajouter la notion de précision ainsi que des aspects informatiques comme la facilité de mise en oeuvre, les coûts CPU et mémoire.

4.3.1 Consistance d'une méthode

La consistance est la propriété qui assure que la solution exacte de l'équation discrétisée tende vers la solution exacte de l'équation continue lorsque le pas de discrétisation h tend vers 0.

4.3.2 Stabilité d'une méthode

C'est la propriété qui assure que la différence entre la solution numérique obtenue et la solution exacte des équations discrétisées reste bornée. La stabilité indique si l'erreur augmente ou non au cours du calcul.

Une méthode peut être stable sous condition (elle sera dite conditionnellement stable) ou toujours stable (elle sera dite inconditionnellement stable).

4.3.3 Ordre de précision d'une méthode

L'erreur de troncature ε est définie comme la différence entre la solution exacte $\tilde{y}$ et l'approximation numérique obtenue y_n , soit : $\varepsilon_n = |\tilde{y}(x_n) - y_n| = \mathcal{O}(h^p)$. L'ordre de précision de la méthode est donnée par l'entier p .

Convergence

Une méthode est convergente si, lorsque le pas de discrétisation tend vers 0, la solution numérique tend vers la solution exacte de l'équation continue.

Une méthode est convergente à l'ordre l ssi : $\lim_{n \rightarrow \infty} \max_i |\varepsilon_i| = \mathcal{O}(h^l)$

Résultat théorique : Une méthode stable et consistante est convergente.

4.4 Méthodes numériques

Les principales méthodes de résolution numérique des EDO sont séparées en deux grands types :

- ✕ Les méthodes à un pas
- ✕ Les méthodes à pas multiples

Pour la suite, on s'intéressera aux méthodes à un pas : Pour ces méthodes, le calcul de la valeur discrète y_{n+1} au noeud x_{n+1} fait intervenir la valeur y_n obtenue à l'abscisse précédente. Les principales méthodes sont :

- ✕ Méthodes d'Euler explicite et implicite
- ✕ Méthode d'Euler amélioré (ou Euler asymétrique)
- ✕ Méthode d'Euler-Cauchy
- ✕ Méthode de Crank-Nicholson
- ✕ Méthodes de Runge et Kutta

Pour la suite, on s'intéressera à la méthode d'Euler et Runge-Kutta (RK)

5 Méthodes à un pas

5.1 Principe

La formulation générale des méthodes à un pas explicite est :

$$\begin{cases} y_0 \text{ donné} \\ y_{n+1} = y_n + \phi(x_n, y_n, h) \end{cases}$$

où la fonction ϕ définit la méthode utilisée.

La formulation générale des méthodes à un pas implicite est :

$$\begin{cases} y_0 \text{ donné} \\ y_{n+1} = y_n + \phi(x_n, y_n, y_{n+1}, h) \end{cases}$$

L'obtention de la solution à chaque abscisse nécessite la résolution d'une équation.

Ces méthodes sont obtenues en intégrant l'équation différentielle et en utilisant des formules d'intégration numérique pour le second membre. L'ordre du schéma est égal au degré du polynôme pour lequel l'intégration est exacte +1.

Résultats théoriques :

1. Si la fonction ϕ est lipschitzienne par rapport à la deuxième variable alors les méthodes explicites sont stables.
2. Les méthodes implicites sont toujours stables.
3. Les méthodes sont consistantes ssi $\forall x \in [a, b], \phi(x, y, 0) = f(x, y)$.

5.2 Méthodes d'Euler explicite et implicite

Méthode explicite, d'ordre 1, dont l'algorithme est :

$$\begin{cases} y_0 \text{ donné} \\ y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n) \end{cases}$$

La méthode peut s'interpréter de plusieurs manières :

1. Via les formules d'intégration numérique : la méthode est le résultat de l'application de la formule des rectangles basée au point x_n .
2. Géométriquement : la méthode revient à remplacer localement en chaque point x_n la courbe solution par sa tangente.
3. Via les développements de Taylor : la méthode provient du développement de Taylor d'ordre 1 de la fonction y au voisinage de x_n .

Méthode implicite, d'ordre 1, dont l'algorithme est :

$$\begin{cases} y_0 \text{ donné} \\ y_{n+1} = y_n + hf(x_{n+1}, y_{n+1}) \end{cases}$$

5.3 Méthode d'Euler amélioré

Méthode explicite dont l'algorithme est :

$$\begin{cases} y_0 \text{ donné} \\ y_{n+1}^* = y_n + \frac{h}{2} f(x_n, y_n) \\ y_{n+1} = y_n + hf\left(x_n + \frac{h}{2}, y_{n+1}^*\right) \end{cases}$$

Géométriquement, la méthode consiste à remplacer dans la méthode d'Euler la pente de la tangente en (x_n, y_n) par la valeur corrigée au milieu de l'intervalle $[x_n, x_{n+1}]$.

5.4 Méthodes de Runge et Kutta

5.4.1 Principe

Ce sont des méthodes d'ordre élevé, obtenues à partir des formules d'intégration numérique plus précises que la formule des rectangles.

Une méthode explicite, d'ordre 2, peut être obtenue par l'utilisation de la formule des trapèzes. L'algorithme, noté RK2, s'écrit :

$$\begin{cases} y_0 \text{ donné} \\ y_{n+1}^* = y_n + hf(x_n, y_n) \\ y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2} [f(x_n, y_n) + f(x_{n+1}, y_{n+1}^*)] \end{cases}$$

Une méthode explicite, d'ordre 4, peut être obtenue par l'utilisation de la formule de Simpson. L'algorithme, noté RK4, s'écrit :

$$\begin{cases} y_0 \text{ donné} \\ k_1 = hf(x_n, y_n) \\ k_2 = hf\left(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{k_1}{2}\right) \\ k_3 = hf\left(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{k_2}{2}\right) \\ k_4 = hf(x_n + h, y_n + k_3) \\ y_{n+1} = y_n + \frac{1}{6} (k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \end{cases}$$

5.4.2 Forme générale des méthodes de Runge et Kutta

On cherche à résoudre le problème de Cauchy suivant :

$$\begin{cases} y'(x) = f(x, y(x)) & ; \quad \forall x \in [0, 1] \\ y(0) = y_0 \end{cases}$$

Introduisons q points intermédiaires dans chaque intervalle $[x_n, x_{n+1}]$ notés $x_{n,1}, x_{n,2}, \dots, x_{n,q}$. On se donne $c_1, c_2, \dots, c_q$ réels dans l'intervalle $[0, 1]$ et on pose $x_{n,i} = x_n + c_i h$ pour $i = 1$ à q .

La valeur discrète $y_{x_{n,i}}$ vérifie :

$$\begin{aligned} y_{x_{n,i}} &= y(x_n) + \int_{x_n}^{x_{n,i}} f(t, x(t)) dt \\ &= y(x_n) + h \int_0^{c_i} f(x_n + \tau h, y(x_n + \tau h)) d\tau \\ y_{x_{n+1}} &= y(x_n) + h \int_0^1 f(x_n + \tau h, y(x_n + \tau h)) d\tau \end{aligned}$$

On choisit $q + 1$ méthodes d'intégration à q points pour approximer ces intégrales. Ce qui revient à se donner $q(q + 1)$ paramètres :

$$(a_{ij})_{1 \leq i, j \leq q}$$

et :

$$(b_i)_{1 \leq i \leq q}$$

tels que :

$$\begin{aligned} \int_0^{c_i} f(x_n + \tau h, y(x_n + \tau h)) d\tau &\rightarrow \sum_{j=1}^q a_{ij} f(x_n + c_j h, y(x_n + c_j h)) \\ \int_0^1 f(x_n + \tau h, y(x_n + \tau h)) d\tau &\rightarrow \sum_{i=1}^q b_i f(x_n + c_i h, y(x_n + c_i h)) \end{aligned}$$

Au bilan la formulation de la méthode est :

$$\begin{cases} y_0 \text{ donné} \\ y_{n,i} = y_n + h \sum_{j=1}^q a_{ij} f(x_{n,j}, y_{n,j}) \\ y_{n+1} = y_n + h \sum_{i=1}^q b_i f(x_{n,i}, y_{n,i}) \end{cases}$$

La méthode se caractérise par les paramètres :

$$(a_{ij}), (b_i)$$

et :

$$(c_i)$$

On construit le tableau qui rassemble ces paramètres :

c_1	a_{11}	a_{12}	$\cdots$	a_{1q}
c_1	a_{21}	a_{22}	$\cdots$	a_{2q}
$\vdots$	$\vdots$			$\vdots$
c_q	a_{q1}	a_{q2}	$\vdots$	a_{qq}
	b_1	b_2	$\cdots$	b_q

Par exemple, les paramètres de deux méthodes d'ordre 4 (dont l'algorithme RK4) :

0	0	0	0	0
1/3	1/3	0	0	0
2/3	-1/3	1	0	0
1	1	-1	1	0
	1/8	3/6	3/6	1/8
0	0	0	0	0
1/2	1/2	0	0	0
1/2	0	1/2	0	0
1	0	0	1	0
	1/6	2/6	2/6	1/6

Résultat théorique : Si $\sum_{i=1}^q b_i = 1$ alors la méthode est consistante.

5.4.3 Méthodes de Runge et Kutta implicites

Des méthodes de Runge et Kutta implicites (ou méthodes de Radau) peuvent aussi être construites à partir des techniques d'intégration numériques.

Une méthode implicite, d'ordre 3, peut être obtenue :

$$\left\{ \begin{array}{l} y_0 \text{ donné} \\ k_1 = hf \left(x_n + \frac{h}{3}, y_n + \frac{h}{12} (5k_1 - k_2) \right) \\ k_2 = hf \left(x_n + h, y_n + \frac{h}{4} (3k_1 + k_2) \right) \\ y_{n+1} = y_n + \frac{1}{4} (3k_1 + k_2) \end{array} \right.$$

Il est nécessaire de résoudre un système linéaire pour évaluer k_1 et k_2 .

Par exemple, les paramètres (a_{ij}) , (b_i) et (c_i) pour les méthodes d'ordre 3 et 5 sont :

1/3	5/12	-1/12
1	3/4	1/4
	3/4	1/4

$\frac{4-\sqrt{6}}{10}$	$\frac{88-7\sqrt{6}}{360}$	$\frac{296-169\sqrt{6}}{1800}$	$\frac{-2+3\sqrt{6}}{225}$
$\frac{4-\sqrt{6}}{10}$	$\frac{296+169\sqrt{6}}{1800}$	$\frac{88+7\sqrt{6}}{360}$	$\frac{-2-3\sqrt{6}}{225}$
1	$\frac{16-\sqrt{6}}{36}$	$\frac{16+\sqrt{6}}{36}$	$\frac{1}{9}$
	$\frac{16-\sqrt{6}}{36}$	$\frac{16+\sqrt{6}}{36}$	$\frac{1}{9}$

5.4.4 Application à un système

Considérons le systèmes d'EDO aux valeurs initiales suivant :

$$\left\{ \begin{array}{l} y'(x) = f(x, y(x), z(x)) \quad ; \quad x, z \in [a, b] \\ z'(x) = g(x, y(x), z(x)) \\ y(a) = y_0 \text{ et } z(a) = z_0 \end{array} \right.$$

L'algorithme de Runge-Kutta RK2 s'écrit, pour ce système :

$$\left\{ \begin{array}{l} y_0, z_0 \text{ donnés} \\ y_{n+1}^* = y_n + hf(x_n, y_n, z_n) \\ z_{n+1}^* = z_n + hg(x_n, y_n, z_n) \\ y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2} (f(x_n, y_n, z_n) + f(x_n, y_{n+1}^*, z_{n+1}^*)) \\ z_{n+1} = z_n + \frac{h}{2} (g(x_n, y_n, z_n) + g(x_n, y_{n+1}^*, z_{n+1}^*)) \end{array} \right.$$

L'algorithme de Runge-Kutta RK4 s'écrit, pour ce système :

$$\left\{ \begin{array}{ll} y_0, z_0 \text{ donnés} & \\ k_1 = hf(x_n, y_n, z_n) & \\ k_2 = hf\left(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{k_1}{2}, z_n + \frac{l_1}{2}\right) & l_1 = hg(x_n, y_n, z_n) \\ k_3 = hf\left(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{k_2}{2}, z_n + \frac{l_2}{2}\right) & l_2 = hg\left(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{k_1}{2}, z_n + \frac{l_1}{2}\right) \\ k_4 = hf(x_n + h, y_n + k_3, z_n + l_3) & l_3 = hg\left(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{k_2}{2}, z_n + \frac{l_2}{2}\right) \\ y_{n+1} = y_n + \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) & l_4 = hg(x_n + h, y_n + k_3, z_n + l_3) \end{array} \right.$$