

Méthodes d'Euler, méthode de Verlet

Judicaël Courant

28 août 2016

1 Introduction

1.1 Cadre

Dans tout ce texte, on s'intéresse à la résolution numérique d'une équation différentielle ordinaire d'ordre 2 sur une fonction à valeurs dans $\mathbb{R}^d$ de la forme

$$x''(t) = F(x(t)) \quad (1)$$

où d est un entier, $x : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^d$ et $F : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$. On supposera F de classe $\mathcal{C}^\infty$ pour simplifier : Les solutions cherchées seront alors toutes de classe $\mathcal{C}^\infty$.

Notons qu'on ne suppose pas F linéaire : il ne s'agit donc pas nécessairement d'une équation linéaire.

C'est une équation typique de ce qu'on retrouve en physique, dans le cas d'un système conservatif. Si le système conservatif est l'étude d'un unique point matériel, $x(t)$ désigne les coordonnées du point au temps t et on a $d \leq 3$. S'il s'agit d'un système plus complexe, par exemple un ensemble de k molécules assimilées à k points matériels, $x(t)$ peut désigner les $3k$ coordonnées de ces k molécules, et alors $d = 3k$.

1.2 Se ramener à l'ordre 1

Cette équation différentielle est équivalente, dans un sens que nous allons préciser, à l'équation d'ordre 1 suivante :

$$X'(t) = G(X(t)) \quad (2)$$

où $X : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^{2d}$ et $G : \mathbb{R}^{2d} \rightarrow \mathbb{R}^{2d}$ est l'application définie comme suit : pour tout $u_1 \in \mathbb{R}^d$ et tout $u_2 \in \mathbb{R}^d$, $G(u_1, u_2) = (u_2, F(u_1))$.

Précisons en quel sens nous disons que ces deux équations sont équivalentes :

- Pour toute solution x de l'équation (1), l'application $X : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^{2d}$ définie par $\forall t \in \mathbb{R} \ X(t) = (x(t), x'(t))$ est solution de (2). On l'appellera solution de (2) associée à x .
- Réciproquement, pour toute solution X de (2), l'application $x : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^d$ obtenue en prenant les d premières coordonnées de X est solution de (1).

Dans la suite, on s'intéresse à une solution x de l'équation (1) et à la solution associée X de l'équation (2).

On se donne un pas $h > 0$ et on cherche à calculer des approximations de x ou X aux temps $t_n = nh$ pour $n \in \mathbb{N}$.

On notera en général x_n, v_n, a_n, X_n les approximations respectives de x, x', x'' et X à l'instant t_n , pour $n \in \mathbb{N}$.

2 Méthodes d'Euler

2.1 La méthode d'Euler explicite

La méthode d'Euler explicite consiste à dire qu'on a

$$X(t_{n+1}) = X(t_n + h) \quad (3)$$

$$X(t_{n+1}) = X(t_n) + hX'(t_n) + O(h^2) \quad (4)$$

$$= X(t_n) + hG(X(t_n)) + O(h^2) \quad (5)$$

Ce qui conduit à définir la suite (X_n) par

$$\forall n \in \mathbb{N} \quad X_{n+1} = X_n + hG(X_n) \quad (6)$$

Les approximations x_n et v_n sont alors définies par $(x_n, v_n) = X_n$ pour $n \in \mathbb{N}$ (où x_n est constitué des d premières coordonnées de X_n et v_n des d autres).

On a alors

$$x_{n+1} = x_n + hv_n \quad (7)$$

$$v_{n+1} = v_n + hF(x_n) \quad (8)$$

2.2 La méthode d'Euler implicite

La méthode d'Euler implicite consiste à «renverser le sens du temps», c'est-à-dire à écrire :

$$X(t_n) = X(t_{n+1} - h) \quad (9)$$

$$X(t_n) = X(t_{n+1}) - hX'(t_{n+1}) + O(h^2) \quad (10)$$

On en déduit :

$$X(t_{n+1}) = X(t_n) + hX'(t_{n+1}) + O(h^2) \quad (11)$$

$$= X(t_n) + hG(X(t_{n+1})) + O(h^2) \quad (12)$$

Ce qui conduit à «définir» la suite (X_n) par

$$\forall n \in \mathbb{N} \quad X_{n+1} = X_n + hG(X_{n+1}) \quad (13)$$

Malheureusement, cette équation n'est pas une vraie définition par récurrence puisque X_{n+1} est exprimé en fonction de X_n et de X_{n+1} . On va voir plus bas comment résoudre ce problème.

On a alors

$$x_{n+1} = x_n + hv_{n+1} \quad (14)$$

$$v_{n+1} = v_n + hF(x_{n+1}) \quad (15)$$

Là encore cela ne permet pas de calculer directement les termes des suites (x_n) et (v_n) par récurrence.

Cependant, lorsque les choses se passent bien, on peut résoudre ces équations et obtenir une vraie définition (on verra comment avec la méthode d'Euler en SI).

2.3 La méthode d'Euler en SI

En SI, on veut en général mesurer les caractéristique d'un système à un instant donné. Ainsi à l'instant t_n , on pourra connaître la position x_n du système ainsi que ses positions précédentes x_{n-1} , x_{n-2} , ... Si on veut estimer x' (la vitesse du système), la seule possibilité sera d'utiliser l'approximation $x'(t_n) \approx \frac{x(t_n) - x(t_{n-1})}{h}$. Cela conduit à poser $v_n = \frac{x_n - x_{n-1}}{h}$ pour tout $n \geq 1$.

Si on veut estimer x'' (l'accélération du système) à l'instant t_n , on prendra de la même façon la valeur $\frac{v_n - v_{n-1}}{h}$ pour $n \geq 1$.

Pour résoudre l'équation (1), on remplace alors brutalement x et x'' par ces approximations ce qui donne successivement

$$\frac{v_n - v_{n-1}}{h} = F(x_n) \quad \text{pour } n \geq 1 \quad (16)$$

$$v_n = v_{n-1} + hF(x_n) \quad \text{pour } n \geq 1 \quad (17)$$

$$v_{n+1} = v_n + hF(x_{n+1}) \quad \text{pour } n \in \mathbb{N} \quad (18)$$

Et comme on a $v_n = \frac{x_n - x_{n-1}}{h}$ pour tout $n \geq 1$, on a, pour tout $n \in \mathbb{N}$:

$$x_{n+1} = x_n + hv_{n+1} \quad (19)$$

Les équations (19) et (18) sont exactement les équations (14) et (15) de la méthode d'Euler implicite : la méthode utilisée en SI est donc en fait une méthode d'Euler implicite.

Voyons maintenant comment résoudre ces équations. Le principe est simple, il suffit de repartir de l'équation (16) et de remplacer v_n et v_{n-1} par leurs estimations. On obtient successivement :

$$\frac{\frac{x_n - x_{n-1}}{h} - \frac{x_{n-1} - x_{n-2}}{h}}{h} = F(x_n) \quad \text{pour } n \geq 2 \quad (20)$$

$$\frac{x_n - 2x_{n-1} + x_{n-2}}{h^2} = F(x_n) \quad \text{pour } n \geq 2 \quad (21)$$

$$x_n - h^2 F(x_n) = 2x_{n-1} - x_{n-2} \quad \text{pour } n \geq 2 \quad (22)$$

Il ne reste plus qu'à être en mesure de résoudre cette équation pour exprimer x_n en fonction de x_{n-1} et x_{n-2} .

Regardons cela sur un exemple : supposons que l'équation initiale (1) soit de la forme

$$x''(t) = -\omega^2 x(t) \quad (23)$$

Alors, on obtient successivement :

$$x_n + h^2 \omega^2 x_n = 2x_{n-1} - x_{n-2} \quad \text{pour } n \geq 2 \quad (24)$$

$$x_n = \frac{2x_{n-1} - x_{n-2}}{1 + h^2 \omega^2} \text{ pour } n \geq 2 \quad (25)$$

On peut alors facilement calculer les termes de la suite (x_n) (en général, $x(t_0)$ et $x'(t_0)$ sont donnés et on pose $x_0 = x(t_0)$ et $x_1 = x(t_0) + hx'(t_0)$).

2.4 Remarque générale sur les méthodes d'Euler

Les méthodes d'Euler sont des méthodes d'ordre 1, c'est-à-dire que l'erreur commise globalement pour estimer X en un point arbitraire connaissant sa valeur en 0 est un $O(h)$ où h est le pas de la méthode. Cela découle du fait que localement, l'erreur commise est d'ordre 2, c'est-à-dire qu'à chaque étape, l'erreur commise sur X_{n+1} , en supposant que X_n est la vraie valeur de $X(t_n)$, est un $O(h^2)$.

3 La méthode de Verlet

Cette méthode est attribuée à Loup Verlet, un physicien français pionnier des modèles numériques de la dynamique moléculaire. Elle se décline en plusieurs algorithmes.

3.1 Algorithme saute-mouton

La méthode d'Euler explicite (resp implicite) est fondée sur le fait que $\frac{x(t_{n+1}) - x(t_n)}{h}$ est une approximation de $x'(t_n)$ (resp. $x'(t_{n+1})$) avec une erreur en $O(h)$ près.

Il est intéressant de noter que c'est aussi une approximation de $x'(t_{n+1/2})$, où $t_{n+1/2} = (n + 1/2)h$ mais avec une erreur plus petite. Pour voir cela, remarquons que pour tout réel a et tout k au voisinage de 0, on a successivement :

$$x(a+k) - x(a-k) = x(a) + kx'(a) + \frac{k^2}{2}x''(a) + O(k^3) \quad (26)$$

$$- (x(a) - kx'(a) + \frac{k^2}{2}x''(a) + O(k^3)) \quad (27)$$

$$= 2kx'(a) + O(k^3) \quad (28)$$

$$\frac{x(a+k) - x(a-k)}{2k} = x'(a) + O(k^2) \quad (29)$$

$$(30)$$

D'où, en posant $a = t_{n+1/2}$ et $k = h/2$:

$$\frac{x(t_{n+1/2} + h/2) - x(t_{n+1/2} - h/2)}{h} = x'(t_{n+1/2}) + O(h^2) \quad (31)$$

L'erreur commise sur $x'(t_{n+1/2})$ est donc en $O(h^2)$ et non plus seulement en $O(h)$. Ce résultat peut aussi s'écrire :

$$x(t_{n+1}) = x(t_n) + hx'(t_{n+1/2}) + O(h^3) \quad (32)$$

On est donc conduit à s'intéresser à x' (la vitesse) non plus aux temps t_n mais aux temps $t_{n+1/2}$, pour $n \in \mathbb{N}$. On notera $v_{n+1/2}$ l'approximation de la vitesse que nous ferons à l'instant t_n .

En reprenant l'équation (7), on est donc conduit à poser, pour $n \in \mathbb{N}$:

$$x_{n+1} = x_n + hv_{n+1/2} \quad (33)$$

Reste à voir comment déterminer les $v_{n+1/2}$. Pour cela, on va de la même façon remarquer qu'on a

$$x'(t_{n+3/2}) = x'(t_{n+1/2}) + hx''(t_{n+1}) + O(h^3) \quad (34)$$

Et comme $x''(t_{n+1}) = F(x(t_n))$, on est conduit à définir des approximations (x_n) , $(v_{n+1/2})$ et (a_n) pour $n \in \mathbb{N}$ de la façon suivante :

$$x_{n+1} = x_n + hv_{n+1/2} \quad (35)$$

$$a_{n+1} = F(x_{n+1}) \quad (36)$$

$$v_{n+3/2} = v_{n+1/2} + ha_{n+1} \quad (37)$$

À partir du moment où on connaît x_0 et $v_{1/2}$, on pose $a_0 = F(x_0)$ et on peut successivement calculer la position à l'instant t_1 en utilisant la vitesse à l'instant $t_{1/2}$, puis calculer la vitesse à l'instant $t_{3/2}$ en utilisant la position à l'instant t_1 , puis la position à l'instant t_2 en utilisant la vitesse à l'instant $t_{3/2}$, etc.

Les approximations de x_n et v_n se calculent donc de proche en proche par un jeu de saute-mouton, d'où le nom de la méthode : méthode de Verlet saute-mouton (en anglais, *leapfrog*¹).

L'erreur commise sur x_{n+1} et $v_{n+3/2}$, en supposant que x_n et $v_{n+1/2}$ sont les vraies valeurs de $x(t_n)$ et $x'(t_{n+1/2})$, est un $O(h^3)$. On peut montrer que cela conduit l'erreur globale à être un $O(h^2)$, ce qui fait de la méthode de Verlet une méthode d'ordre 2.

Reste à savoir quelles valeurs prendre pour x_0 et $v_{1/2}$. En général, les conditions initiales qui sont données portent sur $x(t_0)$ et $x'(t_0)$. En posant $v_0 = x'(t_0)$ et $a_0 = F(x(t_0))$, on peut assez naturellement estimer $x'(t_{1/2})$ grâce à l'égalité :

$$x'(t_{1/2}) = x'(t_0) + \frac{h}{2}x''(t_0) + O(h^2) \quad (38)$$

1. Les enfants anglophones ne jouent pas à saute-mouton mais à saute-grenouille, ce qui est nettement moins surréaliste.

Ce qui conduit à poser

$$v_{1/2} = v_0 + hF(x_0) \quad (39)$$

(on commet alors une erreur d'ordre $O(h^2)$; cette erreur n'étant commise qu'une fois dans l'algorithme, cela ne remet pas en cause le fait que la méthode de Verlet commet une erreur globale en $O(h^2)$ donc est d'ordre 2).

3.2 Algorithme en un pas

Il est en fait souvent utile de pouvoir avoir des approximations de la vitesse au même instant que la position, donc aux instants t_n , pour $n \in \mathbb{N}$. Par exemple, si l'on veut regarder l'énergie totale du système à différents instants (énergie cinétique plus énergie potentielle).

La méthode de Verlet en un pas consiste à reprendre la méthode d'Euler explicite. En notant $a_n = F(x_n)$, on pourrait améliorer l'erreur sur l'équation (7) en posant non plus $x_{n+1} = x_n + hv_n$ mais

$$x_{n+1} = x_n + hv_n + \frac{h^2}{2}a_n \quad (40)$$

ce qui physiquement revient à remplacer une approximation de mouvement rectiligne uniforme par une approximation de mouvement uniformément accéléré.

On peut améliorer l'erreur sur la seconde en posant

$$v_{n+1} = v_n + h\frac{a_n + a_{n+1}}{2} \quad (41)$$

Ces deux équations permettent de calculer des approximations successives x_n , a_n et v_n pour tout n , à partir de valeurs initiales x_0 et v_0 , et après avoir posé $a_0 = F(x_0)$:

$$x_{n+1} = x_n + hv_n + \frac{h^2}{2}a_n \quad (42)$$

$$a_{n+1} = F(x_{n+1}) \quad (43)$$

$$v_{n+1} = v_n + h\frac{a_n + a_{n+1}}{2} \quad (44)$$

Quel est le rapport entre cette méthode et la méthode saute-mouton ? Elles sont juste des façons différentes de calculer les mêmes approximations !

Plus exactement, on peut montrer par une récurrence sans difficulté que si l'on se donne x_0 et v_0 et qu'on appelle x_n^1 , a_n^1 et v_n^1 les approximations obtenues avec la méthode en un pas et x_n^s , a_n^s et $v_{n+1/2}^s$ celles obtenues avec la méthode saute-mouton, on a pour tout $n \in \mathbb{N}$, $x_n^1 = x_n^s$, donc $a_n^1 = a_n^s$ et $v_{n+1/2}^s = v_n^1 + hF(x_n^1)$.

3.3 Velocity Verlet

On peut combiner les deux variantes précédentes en une seule en posant, à partir de x_0 et v_0 , $a_0 = F(x_0)$ et pour $n \in \mathbb{N}$:

$$v_{n+1/2} = v_n + \frac{h}{2}a_n \quad (45)$$

$$x_{n+1} = x_n + hv_{n+1/2} \quad (46)$$

$$a_{n+1} = F(x_{n+1}) \quad (47)$$

$$v_{n+1} = v_{n+1/2} + \frac{h}{2}a_{n+1} \quad (48)$$

on obtient exactement les mêmes valeurs qu'avec les deux algorithmes précédents. Cette version est appelée *velocity Verlet* [You14].

3.4 Position Verlet

Au lieu de chercher à approcher la vitesse aux instants t_n , on pourrait chercher à approcher la position aux instants $t_{n+1/2}$. On obtient alors un algorithme appelé *position Verlet*, détaillé dans [You14].

3.5 Algorithme en deux pas

Dans les algorithmes précédents, on a, pour $n \in \mathbb{N}$:

$$x_{n+2} = x_{n+1} + hv_{n+3/2} \quad (49)$$

$$= x_{n+1} + h(v_{n+1/2} + ha_{n+1}) \quad (50)$$

$$= x_{n+1} + hv_{n+1/2} + h^2a_{n+1} \quad (51)$$

$$= x_{n+1} + (x_{n+1} - x_n) + h^2a_{n+1} \quad (52)$$

$$= 2x_{n+1} - x_n + h^2a_{n+1} \quad (53)$$

Si l'on n'est pas intéressé par les valeurs de (v_n) mais seulement par celles de (x_n) , on peut donc les calculer en définissant la suite (x_n) par la relation

$$\forall n \in \mathbb{N} \quad x_{n+2} = 2x_{n+1} - x_n + h^2F(x_{n+1}) \quad (54)$$

Cet algorithme est appelé algorithme de Verlet en deux pas [Rou14].

Notons qu'il présente numériquement un inconvénient : si les valeurs des x_n sont importantes, il conduit à faire la différence entre de grandes valeurs, ce qui risque de conduire à des erreurs d'arrondi importantes.

3.6 Remarques sur la méthode de Verlet

À chaque étape, l'erreur commise sur x_{n+1} et $v_{n+3/2}$, en supposant que x_n et $v_{n+1/2}$ sont les vraies valeurs de $x(t_n)$ et $x'(t_{n+1/2})$, est un $O(h^3)$. L'erreur globale est donc un $O(h^2)$ ce qui fait de la méthode de Verlet une méthode d'ordre 2. Elle est donc plus précise que celle d'Euler mais moins que la méthode RK4.

Cependant, elle possède de bonnes propriétés de stabilité, meilleures que celles de la méthode d'Euler et que RK4 [You14]. C'est pourquoi il est parfois préférable d'utiliser la méthode de Verlet que RK4.

4 Pour aller plus loin

On pourra consulter la page Wikipedia (en anglais) sur le sujet pour en savoir plus. [Rou14] propose des animations intéressantes comparant méthode d'Euler, méthode de Verlet et méthode RK4. [You14] aborde de façon plus mathématique les questions de stabilité.

En cas de disparition des documents cités dans la bibliographie, vous devriez pouvoir les retrouver sur <https://archive.org>.

Références

- [Rou14] Jimmy Roussel. La méthode de verlet. Site web, jul 2014. http://femto-physique.fr/omp/methode_de_verlet.php, consultée le 4 avril 2016.
- [You14] Peter Young. The leapfrog method and other “symplectic” algorithms for integrating newton’s laws of motion. <http://young.physics.ucsc.edu/115/leapfrog.pdf>, apr 2014. Notes du cours *Computational Physics*.