Revue d'histoire des mathématiques,
4 (1998), p. 5–72.

L'ORIGINE DES MÉTHODES MULTIPAS POUR L'INTÉGRATION NUMÉRIQUE DES ÉQUATIONS DIFFÉRENTIELLES ORDINAIRES

Dominique TOURNÈS (*)

RÉSUMÉ. — L'histoire des méthodes multipas pour l'intégration numérique des équations différentielles ordinaires a été peu étudiée. Ces méthodes peuvent être rattachées à la formule de quadrature de Gregory-Newton, qui a été appliquée pour la première fois à un système différentiel par Clairaut, en 1759, à l'occasion du retour de la comète de Halley. Les méthodes multipas proprement dites sont ensuite inventées à plusieurs reprises et de façon indépendante par J.C. Adams (1855), G.H. Darwin (1897), W.F. Sheppard (1899) et C. Størmer (1907). Elles donnèrent lieu à de gigantesques calculs de tables numériques pour répondre à des problèmes complexes de mathématiques appliquées. Fruit du savoir-faire des astronomes britanniques, ces méthodes marquent l'apogée d'une époque de l'histoire de l'analyse numérique.

ABSTRACT. — THE RISE AND DEVELOPMENT OF MULTISTEP METHODS FOR THE NUMERICAL INTEGRATION OF ORDINARY DIFFERENTIAL EQUATIONS . — The story of the rise and development of multistep methods to integrate ordinary differential equations has been somewhat neglected so far.These methods may be viewed as originally stemming from the Gregory-Newton formula, involving quadratures, this being applied first by Clairaut to a system of differential equations, in his calculations of the motion of Halley's comet on its return in 1759. This pointed the way for the rise of multistep methods proper, these subsequently being arrived at independently at various times, by J.C. Adams (1855), G.H. Darwin (1897), W.F. Sheppard (1899), and C. Størmer (1907). These methods called for the computation of massive numerical tables, to cater for the requirements of highly involved problems in applied mathematics. These methods, originating as they did in the mathematical skills of British astronomers, stand out as the apogee of one era in the history of numerical analysis.

INTRODUCTION

Soit à calculer approximativement la valeur, en un point x, de la

(*) Texte reçu le 31 août 1997, révisé le 12 avril 1998.
Dominique TOURNÈS, IUFM de La Réunion, allée des Aigues Marines, Bellepierre, 97487 Saint-Denis CEDEX (France). Courrier électronique : tournes@univ-reunion.fr.

solution y du « problème de Cauchy » $\mathrm{d}y/\mathrm{d}x = f(x,y)$ et $y(x_0) = y_0$. Dans la *méthode des différences finies à pas séparés* ou *à un pas*, on considère une subdivision $(x_0, x_1, \ldots, x_n = x)$ et on remplace, sur chaque intervalle, l'équation différentielle par une équation aux différences finies ne faisant intervenir que les différences premières. Il en résulte que la détermination des $y_i = y(x_i)$ se fait progressivement et de façon indépendante jusqu'à $y_n = y(x)$: à chaque pas, le calcul de y_{i+1} n'utilise que la valeur y_i précédemment calculée. Déjà présente en substance chez les fondateurs du calcul infinitésimal, la méthode à pas séparés a été principalement développée par Euler puis, vers la fin du XIX$^{\text{e}}$ siècle, par les mathématiciens allemands C. Runge, K. Heun et W. Kutta.

Au contraire, dans la *méthode des différences finies à pas liés* ou *multipas*, le calcul de y_{i+1} fait intervenir plusieurs des valeurs précédemment calculées, avec leurs différences finies d'ordre supérieur. Les variantes de la méthode multipas sont souvent évoquées dans la littérature spécialisée actuelle sous le terme générique de « méthodes d'Adams », du nom de celui qui a, semble-t-il, mis en œuvre pour la première fois l'idée des pas liés. Bien que recevant généralement les faveurs des calculateurs, ces méthodes ont mis beaucoup de temps à être connues et à s'imposer. On peut situer leur origine dans les travaux de l'école anglaise, en particulier de Newton, sur le calcul des différences finies, l'interpolation polynomiale et l'application au calcul approché des intégrales. Les techniques de quadrature ainsi dégagées ont été régulièrement pratiquées aux XVIII$^{\text{e}}$ et XIX$^{\text{e}}$ siècles, notamment par les astronomes : ce sont ces techniques de quadrature qui permettaient de concrétiser, sous forme numérique, l'idée des approximations successives. Cela dit, les méthodes multipas naissent très précisément d'une transformation de la version numérique des approximations successives en une nouvelle méthode de calcul des courbes intégrales par arcs successifs, susceptible de rivaliser avec la méthode des différences finies à pas séparés. Plusieurs savants réalisent cette transformation, à peu près indépendamment les uns des autres, au cours de la période 1850–1910. On peut citer, par ordre d'entrée en scène, J.C. Adams vers 1855, G.H. Darwin [1897], W.F. Sheppard [1899] et C. Størmer [1907].

Les techniques multipas appartiennent en totalité aux mathématiques appliquées. Créées par des physiciens et des astronomes, elles n'ont pas été publiées pour elles-mêmes dans des revues mathématiques, mais sont apparues en tant qu'outils dans des textes dont l'objet principal était toujours l'étude d'un phénomène physique. Ceci explique sans doute que chacune d'elles, conçue pour répondre à un besoin précis et spécifique, soit ensuite passée inaperçue auprès de la communauté mathématique. Un fait significatif le confirme : dans l'article de l'*Encyklopädie der mathematischen Wissenschaften* consacré à l'intégration numérique et graphique des équations différentielles, modèle d'érudition s'appuyant sur environ cent trente références bibliographiques, Runge et Willers [1915] ignorent totalement les méthodes multipas. Parmi les quatre savants que nous avons mentionnés ci-dessus, ils ne citent que Sheppard, en rattachant à tort son article de 1899 aux méthodes à pas séparés de Runge, Heun et Kutta !

Cette méconnaissance a perduré jusqu'à nos jours. Quelques travaux récents ([Goldstine 1977], [Kiro et Chal'tseva 1981], [Gear et Skeel 1990], [Hairer, Nørsett et Wanner 1993], [Chabert *et al.* 1994]) permettent d'esquisser une histoire des méthodes multipas mais ils sont loin d'avoir épuisé le sujet. Face à cette situation, il nous a semblé utile de reprendre la question de façon systématique.

1. LES QUADRATURES NUMÉRIQUES UTILISANT LES DIFFÉRENCES FINIES [1]

Rappelons brièvement certaines techniques d'interpolation utilisées à partir du XVII^e siècle pour calculer numériquement l'intégrale

$$y(x) = y_0 + \int_{x_0}^{x} f(u)\,\mathrm{d}u,$$

c'est-à-dire, en fait, pour intégrer de façon approchée l'équation différentielle la plus simple $\mathrm{d}y/\,\mathrm{d}x = f(x)$, avec la condition initiale $y(x_0) = y_0$.

1.1. Les formules de Gregory-Newton

Supposons qu'on connaisse les valeurs de f en $x_0, x_1, \ldots, x_n, \ldots$ Dans la pratique, ces valeurs peuvent être calculées au moyen d'une formule

[1] Cette première partie n'a pas pour but de présenter l'histoire de ces quadratures. Pour cela, on pourra se reporter à Goldstine [1977] ou à Chabert [1994]. Notre intention est simplement de rappeler la terminologie, les résultats mathématiques essentiels et quelques repères chronologiques de façon à faciliter la compréhension de l'exposé historique qui suit.

analytique, lues dans une table ou issues de mesures expérimentales. À partir de ces données, le problème est de construire une table analogue pour la primitive y, autrement dit de calculer des valeurs approchées de y aux points x_i.

Le cas le plus simple et le plus fréquent est celui de valeurs équidistantes de la variable. Si h désigne le pas utilisé, on a alors $x_i = x_0 + ih$ pour $i = 0, 1, 2, \ldots$ En posant $f_i = f(x_i)$, on peut former le tableau des différences finies *progressives*

$$\begin{array}{ccccccccccc}
f_0 & & f_1 & & f_2 & & f_3 & & f_4 & & \cdots \\
& \Delta f_0 & & \Delta f_1 & & \Delta f_2 & & \Delta f_3 & & \cdots & \\
& & \Delta^2 f_0 & & \Delta^2 f_1 & & \Delta^2 f_2 & & \cdots & & \\
& & & \Delta^3 f_0 & & \Delta^3 f_1 & & \cdots & & & \\
& & & & \Delta^4 f_0 & & \cdots & & & &
\end{array}$$

Ces différences sont définies, de proche en proche, par $\Delta f_i = f_{i+1} - f_i$ et $\Delta^m f_i = \Delta^{m-1} f_{i+1} - \Delta^{m-1} f_i$.

Une des premières formules d'interpolation, utilisée dès le XVII^e^ siècle, est la *formule de Gregory-Newton progressive*. En posant $t = (x - x_0)/h$, elle s'écrit

$$f(x) = f_0 + t\Delta f_0 + \frac{t(t-1)}{2\,!}\Delta^2 f_0 + \frac{t(t-1)(t-2)}{3\,!}\Delta^3 f_0 + \cdots.$$

Remarquons que, par troncature au rang n, on obtient l'approximation

$$\begin{aligned} f(x) \approx P_n(x) = f_0 + \frac{x-x_0}{1\,!\,h}\Delta f_0 + \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{2\,!\,h^2}\Delta^2 f_0 \\ + \cdots + \frac{(x-x_0)\cdots(x-x_{n-1})}{n\,!\,h^n}\Delta^n f_0, \end{aligned}$$

où P_n est le polynôme de degré au plus n qui coïncide avec f en les $n+1$ points $x_0, x_1, \ldots, x_n$. Ce n'est rien d'autre que le polynôme d'interpolation redécouvert plus tard, sous une autre forme, par Lagrange.

La valeur de y en x_1, soit y_1, s'obtient alors par intégration terme à terme de la série

$$\begin{aligned} y_1 &= y_0 + \int_{x_0}^{x_1} f(x)\,\mathrm{d}x = y_0 + h\int_0^1 f(x_0 + ht)\,\mathrm{d}t \\ &= y_0 + hf_0 + h\int_0^1 t\,\mathrm{d}t\,\Delta f_0 + h\int_0^1 \frac{t(t-1)}{2\,!}\,\mathrm{d}t\,\Delta^2 f_0 \\ &\qquad + h\int_0^1 \frac{t(t-1)(t-2)}{3\,!}\,\mathrm{d}t\,\Delta^3 f_0 + \cdots \\ &= y_0 + h\Big\{f_0 + \tfrac{1}{2}\Delta f_0 - \tfrac{1}{12}\Delta^2 f_0 + \tfrac{1}{24}\Delta^3 f_0 - \tfrac{19}{720}\Delta^4 f_0 + \tfrac{3}{160}\Delta^5 f_0 - \cdots\Big\}. \end{aligned}$$

On peut recommencer à partir de y_1 pour calculer y_2, et ainsi de suite. Les calculs peuvent être organisés dans une seule table.

Peut-on adapter cette méthode de quadrature numérique à une équation différentielle générale $\mathrm{d}y/\,\mathrm{d}x = f(x,y)$, avec la condition initiale $y(x_0) = y_0$? Pour un calcul analogue de $y_1 = y_0 + \int_{x_0}^{x_1} f(u, y(u))\,\mathrm{d}u$ par différences finies d'ordre n, il faudrait connaître $f(x_0,y_0), f(x_1,y_1), \ldots, f(x_n,y_n)$, autrement dit les valeurs $y_1,\ldots,y_n$ que l'on souhaite précisément calculer. On voit aussitôt l'obstacle majeur qui a sans doute dissuadé nombre de mathématiciens de poursuivre dans cette voie, si du moins ils en eurent un jour l'intention.

Une version de la formule de Gregory-Newton progressive fut d'abord énoncée sans justification par James Gregory, vers 1670, comme un procédé destiné à un double usage : interpoler entre les valeurs d'une table numérique et quarrer n'importe quelle figure. De son côté, Newton a abordé la théorie de l'interpolation et des différences finies à plusieurs reprises, à partir de 1675, dans le cadre plus général de valeurs non équidistantes de la variable. Outre la formule de Gregory, Newton a mis en évidence de nombreuses autres techniques d'interpolation d'une courbe par des « lignes paraboliques » (courbes représentatives de fonctions polynomiales), à tel point qu'on peut le considérer comme le véritable fondateur de la théorie de l'interpolation polynomiale. Supposons désormais qu'on connaisse les valeurs de la fonction f en des points $\ldots, x_{-n}, \ldots, x_{-1}, x_0$, précédant x_0, et qu'on veuille encore calculer la valeur de y en x_1 (il s'agit, cette fois, d'un processus d'extrapolation). On peut définir, par récurrence, des différences finies *régressives*, en posant $\nabla f_i = f_i - f_{i-1}$ et $\nabla^m f_i = \nabla^{m-1} f_i - \nabla^{m-1} f_{i-1}$, de manière à obtenir un tableau illimité vers la gauche

$$\begin{array}{ccccccccc}
\cdots\ f_{-4} & & f_{-3} & & f_{-2} & & f_{-1} & & f_0 \\
& \cdots\ \nabla f_{-3} & & \nabla f_{-2} & & \nabla f_{-1} & & \nabla f_0 & \\
& & \cdots\ \nabla^2 f_{-2} & & \nabla^2 f_{-1} & & \nabla^2 f_0 & & \\
& & & \cdots\ \nabla^3 f_{-1} & & \nabla^3 f_0 & & & \\
& & & & \cdots\ \nabla^4 f_0. & & & &
\end{array}$$

En posant toujours $t = (x - x_0)/h$, la *formule de Gregory-Newton régressive* s'écrit

$$f(x) = f_0 + t\nabla f_0 + \frac{t(t+1)}{2\,!}\nabla^2 f_0 + \frac{t(t+1)(t+2)}{3\,!}\nabla^3 f_0 + \cdots,$$