

Thème 4: résolution numérique des EDP linéaires Problèmes statiques et dynamiques

Université Pierre et Marie CURIE
MNCS
Méthodes numériques et calcul scientifique

2 et 3 mars 2017

Contexte

- Équations différentielles ordinaires (EDO) : une variable indépendante
- **Équations aux dérivées partielles (EDP)** : plusieurs variables indépendantes

Les équations aux dérivées partielles (EDP) interviennent dans la description de très nombreux problèmes de physique, chimie, sciences de la Terre, biologie : mécanique des fluides, propagation des ondes, électromagnétisme, phénomènes de diffusion...

Nous nous limitons ici à des EDP *linéaires* relatives à un champ *scalaire* $u(\vec{r}, t)$. Les généralisations vectorielles sont bien sûr possibles, et techniquement analogues.

Résolution numérique par la **méthode des différences finies** avec un maillage régulier.

Mais il existe d'autres méthodes, **éléments finis** par exemple, mieux adaptées dans le cas de domaines à géométrie complexe.

Sommaire

- 1 Introduction
 - Généralités
 - Conditions aux limites
 - Problèmes statiques et dynamiques
- 2 Exemple de problème statique linéaire : l'équation de Laplace
 - Discrétisation du problème
 - Reformulation vectorielle de la solution
 - Solution du problème
- 3 Problèmes dynamiques
 - Discrétisation de l'espace et du temps
 - Algorithme explicite du premier ordre en temps
 - Algorithme implicite du premier ordre en temps
 - Algorithme de Crank–Nicolson
- 4 Équation des ondes

Exemples d'EDP scalaires les plus connues

- 1 L'équation des ondes ou « de d'Alembert »

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - c^2 \Delta u = 0 \quad (1)$$

- 2 L'équation de Schrödinger

$$i \frac{\partial u}{\partial t} = -\frac{1}{2} \Delta u + V u \quad (2)$$

- 3 L'équation de diffusion

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \operatorname{div}[D \overrightarrow{\operatorname{grad}} u] = D \Delta u \quad \text{si } D \text{ est uniforme} \quad (3)$$

- 4 Les équations de Poisson et de Laplace

$$\Delta u = \rho \quad \Delta u = 0 \quad (4)$$

⚠ Les équations de **Navier-Stokes** en mécanique des fluides sont en général non-linéaires à cause du terme d'advection.

Équation des ondes

L'équation des ondes ou « de d'Alembert » :

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - c^2 \Delta u = 0 \quad (5)$$

où $u = u(\vec{r}, t)$ est un champ scalaire fonction de la position \vec{r} et du temps t , comme la pression d'un gaz dans le cas du son.

La constante c est la vitesse de propagation des ondes et Δ le Laplacien scalaire :

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \quad \text{dans le plan en coordonnées cartésiennes} \quad (6)$$

Équation de la diffusion

L'équation de diffusion

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{J} = 0 \quad \text{avec} \quad \vec{J} = -D \overrightarrow{\operatorname{grad}} u$$

Ici \vec{J} est le flux (de u) par unité de surface et D le coefficient de diffusion (m^2s^{-1}), ce qui donne, dans le cas où D est homogène :

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D \Delta u \quad (8)$$

Cette équation décrit :

- les transferts de chaleur par conduction dans un milieu continu ; elle est alors appelée *équation de la chaleur* et $u \equiv T$ et $D \equiv \lambda/C_p$.
- la diffusion des particules d'un fluide dans un autre (équation de Fick).

Équation de Schrödinger

L'équation de Schrödinger :

$$i \frac{\partial u}{\partial t} = -\frac{1}{2} \Delta u + V u \quad (7)$$

qui décrit en mécanique quantique la fonction d'onde d'une particule massive dans un potentiel V .

En remplaçant t par z , elle représente aussi la propagation selon z d'une onde harmonique à la limite paraxiale, dans un milieu de permittivité $\epsilon = n^2 = V + 1$.

Équations de Poisson et de Laplace

Des cas particuliers sont les équations de Poisson et de Laplace, qui peuvent être vues comme des cas limites lorsque la dépendance en temps est supprimée, ou remplacée par une dépendance harmonique.

L'équation de Poisson

$$\Delta u = \rho$$

est en électrostatique celle qui régit le potentiel $\Phi(\vec{r})$ créé par la densité de charges $\rho(\vec{r})$.

L'équation de Laplace est un cas particulier où la charge est nulle :

$$\Delta u = 0 \quad (9)$$

On va notamment la retrouver comme solution stationnaire de l'équation de la chaleur.

Équations elliptiques/paraboliques/hyperboliques

L'étude théorique des EDP est un vaste domaine en mathématiques qui est hors du cadre de ce cours.

Les EDP *linéaires* du second ordre évoquées plus haut sont classées selon la forme des coefficients figurant devant les dérivées partielles :

$$\alpha \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \beta \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} + \gamma \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = \dots$$

- $\beta^2 - 4\alpha\gamma > 0$ hyperboliques : équation des ondes
- $\beta^2 - 4\alpha\gamma = 0$ paraboliques : diffusion ou Schrödinger
- $\beta^2 - 4\alpha\gamma < 0$ elliptiques : équations de Laplace, Poisson, Helmholtz

Elles ont des propriétés mathématiques différentes, et leur résolution par des techniques numériques requiert parfois des méthodes distinctes.

Dans la pratique, nous nous concentrerons sur une méthode de résolution approchée par des méthodes numériques, dans le cas principalement de l'équation de la chaleur.

Problèmes statiques et dynamiques

Selon que la variable temps est ou non présente, deux classes de problèmes doivent être distinguées :

- **Problèmes dynamiques** : il s'agit de déterminer $u(\vec{r}, t)$ dans un domaine \mathcal{D} , sur un certain intervalle de temps, en fonction des CL spatio-temporelles :
 - CI (conditions initiales) : $u(\vec{r}, t = 0) = \dots$
 - CL (conditions aux limites) : $u(\vec{r} = \cdot, t) = \dots$
- **Problèmes statiques** : le temps n'intervient pas, il s'agit de déterminer $u(\vec{r})$ en fonction des seules CL ; cela correspond en général à un régime stationnaire atteint après un temps d'évolution assez long.

Conditions aux limites

On doit se donner des « conditions aux limites » (CL). L'équation étant vérifiée dans un domaine \mathcal{D} de l'espace (ou espace-temps), on distingue des conditions de 2 types :

- **Conditions de Dirichlet** : on impose la valeur de u sur la bordure de \mathcal{D} . Dans le cas où on étudie un problème dépendant du temps, cela inclut des conditions « initiales »
- **Conditions de Neumann** : c'est la valeur de la dérivée normale $\partial u / \partial n = \overrightarrow{\text{grad}} u \cdot \vec{n}$ que l'on impose.
- **Robin** : plus général, combinaison linéaire des deux.
- Dans le cas général, on a une combinaison des deux selon différentes parties de la bordure.

À titre d'exemple pour l'équation de la chaleur :

- Des CL de Dirichlet correspondent à des parois isothermes, qui imposent leur température.
- Des CL de Neumann avec $\overrightarrow{\text{grad}} u \cdot \vec{n} = 0$ annulent le transfert de chaleur : parois adiabatiques.

Problèmes statiques

Nous nous intéresserons en premier lieu aux **problèmes statiques**.

Il s'agit de problèmes où l'on cherche la solution d'une EDP où le temps n'intervient pas. C'est par exemple la solution d'équilibre de l'équation de diffusion qui sera asymptotiquement atteinte quand $t \rightarrow \infty$, et qui doit donc vérifier l'équation de Laplace.

Dans ce cas u représente un champ de température $T(x, y)$ (avec une origine arbitraire) et on a dans le plan en coordonnées cartésiennes :

$$\Delta T = \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} = 0. \quad (10)$$

Problèmes dynamiques

Puis, dans une deuxième partie, nous considérerons les **problèmes dynamiques**.

Deux méthodes simples seront exposées et analysées sur l'exemple de l'équation de diffusion à 1-D :

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (11)$$

avec diverses conditions initiales.

Résolution de l'équation de Laplace dans un rectangle

Nous cherchons une solution numérique approchée de $\Delta T = 0$ à l'intérieur d'un domaine \mathcal{D} que pour simplifier nous supposons rectangulaire, de côtés Δx et Δy (voir figure 1).

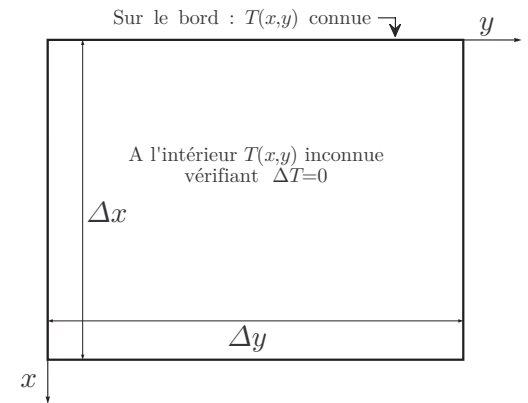


FIGURE 1 – Géométrie du problème de l'équation de Laplace : noter le choix inhabituel de l'orientation des axes x et y .

Exemple de carte d'isothermes

Nous supposons en outre que les parois ont des températures imposées de l'extérieur (CL de Dirichlet).

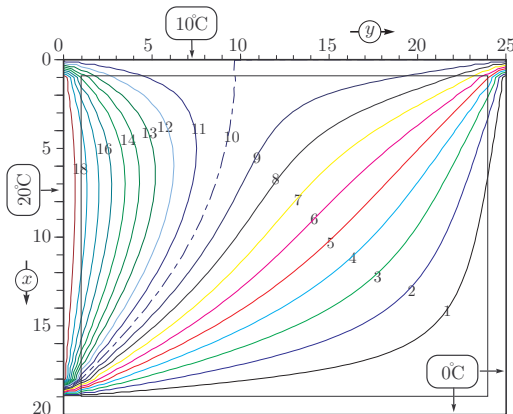


FIGURE 2 – Exemple de solution de l'équation $\Delta T = 0$, dans le cas où une paroi est maintenue à 20°C , une autre adjacente est à 10°C et les deux autres parois sont à $T = 0^\circ\text{C}$.

Les lignes indexées de 1 à 18 représentent les isothermes.

Discretisation du domaine

Nous procédons à une discrétisation du domaine \mathcal{D} : la température sera calculée en un nombre fini de points. Pour simplifier, le maillage choisi est une grille de pas $dx = dy = p$ comme représenté sur les figures 3 et 4.

On a $nl = \Delta x/p - 1$ lignes et $nc = \Delta y/p - 1$ colonnes.

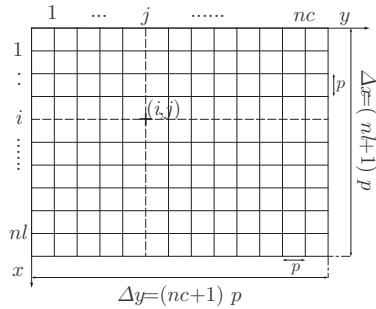
Maillage du domaine \mathcal{D} 

FIGURE 3 –

Chaque point de la grille est repéré par un couple (i, j) où i repère la ligne et j la colonne. L'intérieur du domaine est numéroté de $i = 1$ à nl et de $j = 1$ à nc .

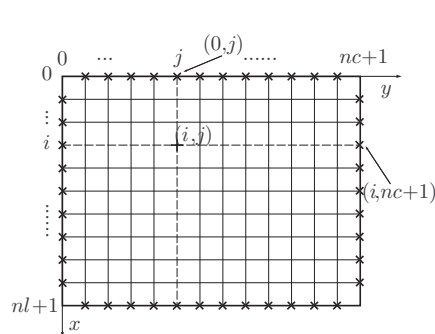


FIGURE 4 – Les bords du domaine (C.L.) sont numérotés : $i = 0$ pour le haut, $i = nl + 1$ pour le bas, $j = 0$ pour la gauche, $j = nc + 1$ pour la droite.

Indexation 2D du domaine

À l'intérieur de la grille, on a :

- $nl = \Delta x/p - 1$ lignes horizontales.
- $nc = \Delta y/p - 1$ colonnes verticales

Chaque point est repéré par un couple d'indices (i, j) où le premier indice note le numéro de la ligne et le second celui de la colonne.

On note $T_{i,j}$ la température en ce point, de coordonnées

$$x_i = i \times p, \quad y_j = j \times p.$$

Les inconnues du problème sont les $n = nl \times nc$ valeurs de $T_{i,j}$ où $1 \leq i \leq nl$, $1 \leq j \leq nc$.

Elles seront déduites des $2(nl + nc)$ valeurs de $T_{i,j}$ imposées aux bords

$$\begin{aligned} i = 0 \text{ (nord) ou } i = nl + 1 \text{ (sud)} \\ j = 0 \text{ (ouest) ou } j = nc + 1 \text{ (est)}. \end{aligned}$$

Différences finies

Les dérivées partielles sont approchées par des **différences finies**, basées sur des développements de Taylor. Le développement de Taylor :

$$T(x \pm p) = T(x) \pm p \frac{\partial T}{\partial x} + \frac{p^2}{2} \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \pm \frac{p^3}{3!} \frac{\partial^3 T}{\partial x^3} + O(p^4) \quad (12)$$

montre que :

$$T(x + p) + T(x - p) = 2T(x) + p^2 \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}(x) + O(p^4) \quad (13)$$

d'où :

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}(x) = \frac{T(x + p) + T(x - p) - 2T(x)}{p^2} + O(p^2) \quad (14)$$

ce qui conduit à :

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}(x_i, y_j) = \frac{T_{i+1,j} + T_{i-1,j} - 2T_{i,j}}{p^2} + O(p^2) \quad (15)$$

dont la précision est du deuxième ordre en p .

Différences finies (suite)

On note que cette approximation peut s'obtenir de façon alternative à partir de :

$$\frac{\partial T}{\partial x} \left(x \pm \frac{p}{2} \right) \approx \pm \frac{T(x \pm p) - T(x)}{p} \quad (16)$$

qui conduit à :

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}(x_i, y_j) \approx \frac{1}{p} \left[\frac{\partial T}{\partial x} \left(x_i + \frac{p}{2}, y_j \right) - \frac{\partial T}{\partial x} \left(x_i - \frac{p}{2}, y_j \right) \right] \quad (17)$$

soit encore :

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}(x_i, y_j) = \frac{T_{i+1,j} + T_{i-1,j} - 2T_{i,j}}{p^2} + O(p^2) \quad (18)$$

Différences finies : Laplacien 2D

On obtient ainsi le **Laplacien 2D discrétisé à l'ordre 2** :

$$\Delta T_{i,j} = \frac{T_{i+1,j} + T_{i-1,j} + T_{i,j+1} + T_{i,j-1} - 4T_{i,j}}{p^2} + O(p^2) \quad (19)$$

L'équation de Laplace se traduit alors par un système linéaire de N équations reliant les valeurs de $T_{i,j}$ aux 4 points voisins :

$$T_{i+1,j} + T_{i-1,j} + T_{i,j+1} + T_{i,j-1} - 4T_{i,j} = 0 \quad (20)$$

où $2 \times (nl + nc)$ températures sont connues (celles sur les points aux bords indiqués par des croix sur la figure 4) et $N = nl \times nc$ sont à déterminer.

Système non homogène car certains points intérieurs ont des voisins sur les parois avec des températures imposées qui vont constituer le **2^d membre**.
 Noter que le pas p n'intervient plus.

Formulation vectorielle

Pour un point sans contact avec les bords du domaine, l'équation (20) s'écrit :

$$Z_{k-nc} + Z_{k-1} - 4Z_k + Z_{k+1} + Z_{k+nc} = 0 \quad (22)$$

Ne pas croire que le second membre du système linéaire est nul !

Pour un point en contact avec un bord, cette équation fait intervenir des températures imposées : par exemple celles du bord Nord si $i = 1$.

$$T_{2N} + Z_1 - 4Z_2 + Z_3 + Z_{2+nc} = 0 \quad \text{pour } j = 2$$

⇒ passer ces termes dans le second membre du système

- Les CL de Dirichlet des bords créent le second membre
- Chaque changement de membre d'une température imposée annule un des coefficients des $Z_{k'}$.

Réindexation 1-D du domaine (en RowMajor)

On ré-indexe les points à l'intérieur de la grille par un seul indice k :

$$k = (i - 1)nc + j \quad (21)$$

qui fait correspondre (cf fig. 5) au tableau 2-D des $T_{i,j}$ à calculer, le **vecteur** à $N = nl \times nc$ composantes Z_k .

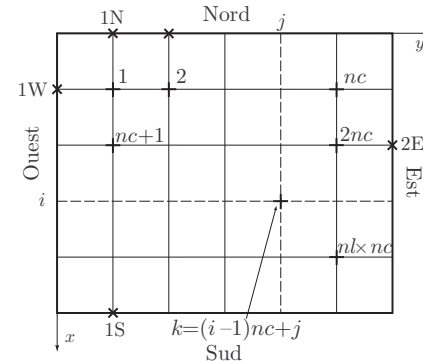


FIGURE 5 – Renumerotation des points de grille pour représenter la solution sous la forme d'un vecteur : le domaine est ré-indexé ligne par ligne de la gauche vers la droite, puis de haut en bas (comme une image numérique) donc en **RowMajor**.

Les voisins au Nord et au Sud sont alors **espacés de nc** dans Z .

Matrice L_{2D}

En plaçant à droite du signe égal les températures imposées sur les bords, on constitue, à partir des CL, le second membre du système qui prend alors la forme :

$$A Z = B \quad (23)$$

où $A = L_{2D}$ est une matrice carrée $N \times N$ comportant $nl \times nl$ blocs carrés de dimension $nc \times nc$.

L_{2D} est symétrique **tridiagonale par blocs** :

- 1 blocs de type L_{1D} avec -4 au lieu de -2 sur la diagonale ;
- 2 blocs de type identité sur la sous-diagonale et la sur-diagonale.

Chaque ligne et chaque colonne contient 5 termes non-nuls comme (22) le prévoit, sauf celles de numéro $i \times nc$ et $i \times nc + 1$, où apparaissent les **0**, (bords latéraux), ainsi que celles associées au premier et dernier bloc (bords haut et bas).

Solution du système linéaire

Plusieurs méthodes permettent de résoudre le système linéaire (23), $L_{2D}Z = B$, par exemple :

- ① Les méthodes les plus générales de résolution numérique des systèmes linéaires, telles que la méthode d'élimination de Gauss-Jordan, la décomposition « LU »¹ ;
- ② Des méthodes adaptées au cas où A est une matrice « creuse », bande, symétrique...
- ③ Des méthodes de relaxation qui s'apparentent, dans le cas d'une équation telle que l'équation de Laplace, à la résolution temporelle de l'équation de la chaleur.
- ④ L'utilisation des transformées de Fourier.

1. La factorisation « LU » exprime la matrice comme produit d'une matrice triangulaire inférieure (Lower) par une matrice triangulaire supérieure (Upper).

Résolution du système linéaire à l'aide de Lapack

Les méthodes générales, comme Gauss-Jordan ou LU demandent un nombre d'opérations en N^3 pour résoudre un système de N équations².

Dans le cas présent, avec au plus 5 coefficients non nuls par ligne, on devrait exploiter le caractère « creux » de la matrice, et descendre à un nombre d'opérations proportionnel à N .

En TE, nous utiliserons la bibliothèque Blas/Lapack optimisée, et on pourra donc explorer des régimes de tailles relativement intéressants, de l'ordre de 1000 à 10000 points.

On commencera avec la fonction Lapack xGESV pour les matrices générales.

2. Pour une matrice symétrique positive la factorisation de Choleski permet une résolution en $\sim N^2$

Résolution du système par méthode de relaxation

La méthode de relaxation est une méthode itérative qui utilise exclusivement l'équation (20) satisfaite par les températures aux points de la grille pour calculer $T_{i,j}$, en fonctions de ses 4 voisins.

Cela revient à séparer L_{2D} en sa partie diagonale $D = -4\mathbb{1}$ et sa partie non diagonale N . On recherche la solution de l'équation $NZ - B = -DZ = 4Z$ en partant d'une valeur quelconque Z^0 , et calculant par récurrence :

$$Z^{n+1} = (NZ^n - B)/4 \quad \text{dont le point fixe est la solution } Z \text{ recherchée}$$

On se convainc aisément que cette méthode est convergente en écrivant :

$$Z^{n+1} - Z = \frac{N}{4}(Z^n - Z)$$

et en montrant que la valeur absolue des valeurs propres de N est toujours inférieure à 4 (rayon spectral inférieur à 4).

Cette méthode (et ses variantes plus rapidement convergentes) est aisée à coder et s'adapte aisément à des géométries plus complexes.

Amélioration de l'efficacité

On peut améliorer l'efficacité en tirant partie des propriétés de la matrice à inverser

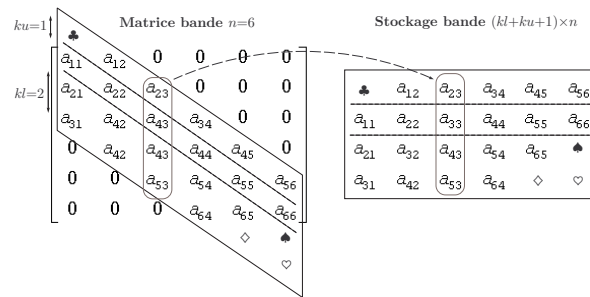
- Par exemple on peut observer que $-L_{2D}$ est *définie positive*, et recourir à la procédure xPOSV.
- On peut aussi s'appuyer sur fait qu'elle est *symétrique*, et utiliser la procédure correspondante xSYSV.
- Plus utilement, on remarquera que $-L_{2D}$ est une « *matrice bande* », et une amélioration significative sera obtenue avec la fonction xSBSV adaptée aux matrices symétriques-bandes.
- Si enfin on tient compte de toutes ces propriétés, on utilisera avec profit la procédure xPBSV.

Stockage bande

Les deux dernières fonctions (xSBSV et xPBSV) requièrent un stockage spécifique de la matrice, appelé « stockage bande », où on ne fournit que les sur/sous-diagonales significatives (cf le « guide Lapack »).

Cette matrice réduite peut être construite directement en écrivant successivement les (sous)-diagonales pertinentes.

En C, pour simplifier son obtention à partir de la matrice complète aplatie, on pourra recourir à la procédure matfu112band fournie.



Introduction aux problèmes dynamiques

Comme indiqué dans l'introduction générale, les problèmes dynamiques sont ceux où l'on suit l'évolution temporelle à partir d'un état « hors d'équilibre », ou plus généralement où l'on s'intéresse à des phénomènes de propagation.

Ils seront donc caractérisés par des « conditions initiales », et des « conditions aux limites » susceptibles de dépendre du temps. Dans ce dernier cas, on pourra étudier un système « forcé », qui, comme pour les systèmes linéaires décrits par une EDO, donne lieu à un transitoire suivi d'un régime permanent forcé à la fréquence d'excitation.

Comme précédemment, nous allons nous concentrer sur le problème de l'équation de la chaleur, et pour simplifier, réduire la dimensionnalité de l'espace à une dimension.

Équation de diffusion 1-D

On cherche la solution numérique $u(x, t)$ de l'équation de diffusion à 1-D, où le coefficient de diffusion D , nécessairement positif, est supposé uniforme et constant :

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (25)$$

dans le domaine spatial $x \in [0, L]$, et temporel $t \in [0, T]$, avec des conditions initiales (CI) :

$$u(x, 0) = u_0(x) \quad \forall x \quad (26)$$

et des conditions aux limites (CL) :

$$u(0, t) = u_g(t) \quad \text{et} \quad u(L, t) = u_d(t) \quad \forall t \quad (27)$$

Il est à noter que l'espace et le temps jouent ici des rôles dissymétriques, pas seulement à cause des CL/CI mais surtout à cause du degré différent des dérivées partielles.

Discrétisation du domaine $[0, L] \times [0, T]$

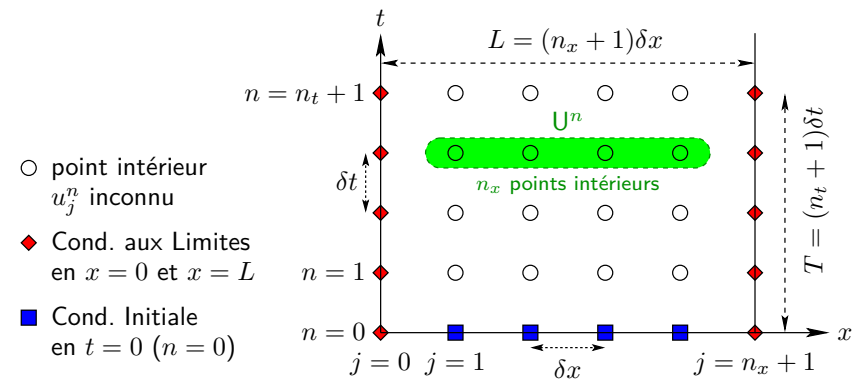


FIGURE 6 – Discrétisation du domaine $[0, L] \times [0, T]$

NB : visualisation ultérieure avec les 2 bords
 ⇒ à chaque temps, écrire U^n (n_x points)
 plus les CL (2 points) : $n_x + 2$ points

Discrétisation du domaine

Il faut discrétiser les deux dimensions :

Espace : $[0, L]$ est divisé en $n_x + 1$ pas de largeur $\delta x = \frac{L}{n_x + 1}$.
 n_x points intérieurs + 2 bords

Temps : $[0, T]$ est subdivisé en $n_t + 1$ pas de largeur $\delta t = \frac{T}{n_t + 1}$.

On note u_j^n , la valeur numérique de $u(x, t)$ pour $x = j \delta x$ et $t = n \delta t$.

- Les CL fixent donc les $u_0^n \equiv u_g^n$ et les $u_{n_x+1}^n \equiv u_d^n$ pour $1 \leq n \leq n_t + 1$.
- Les CI fixent quant à elles les u_j^0 pour $1 \leq j \leq n_x$.

La méthode de résolution sera fondamentalement itérative, chaque pas de temps nécessitant de calculer les n_x valeurs de u_j^{n+1} aux points intérieurs à l'aide de u_j^n et des conditions aux limites u_g^{n+1} et u_d^{n+1} .

Discrétisation des opérateurs : différences finies

Pour le Laplacien, nous utilisons la même expression que pour le problème statique, qui est précise au deuxième ordre en δx :

$$\Delta u \approx \frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{(\delta x)^2}$$

Pour la dérivée du premier ordre par rapport au temps, nous devons choisir une expression, qui peut être :

- vers l'avant, impliquant $(u_j^{n+1} - u_j^n)/\delta t$ (cf Euler forward)
- vers l'arrière, avec $(u_j^n - u_j^{n-1})/\delta t$ (cf Euler backward)
- ou centrée avec $(u_j^{n+1} - u_j^{n-1})/2\delta t$

Le choix que nous allons faire détermine l'ordre de l'évaluation en δt , mais aussi et surtout le caractère **explicite** ou **implicite** de la méthode.

Algorithme explicite du premier ordre en temps

L'algorithme le plus simple et le plus naturel consiste à utiliser la dérivée vers l'avant et donc à remplacer l'équation différentielle (25) par l'équation aux différences finies :

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\delta t} = D \left[\frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{(\delta x)^2} \right] \quad \text{pour } 1 \leq j \leq n_x \quad (28)$$

Du point de vue temporel, cette approche peut être vue comme une extension de la méthode d'Euler explicite (progressive) étudiée sur les EDO.

Nous faisons ainsi apparaître le paramètre caractéristique sans dimension :

$$\alpha = \frac{D \delta t}{\delta x^2} \quad (29)$$

qui joue un rôle essentiel dans toute la discussion qui va suivre.

Système d'équations linéaires (algorithme explicite)

On peut alors écrire :

$$u_j^{n+1} = \alpha u_{j+1}^n + (1 - 2\alpha) u_j^n + \alpha u_{j-1}^n \quad \text{pour } 1 \leq j \leq n_x \quad (30)$$

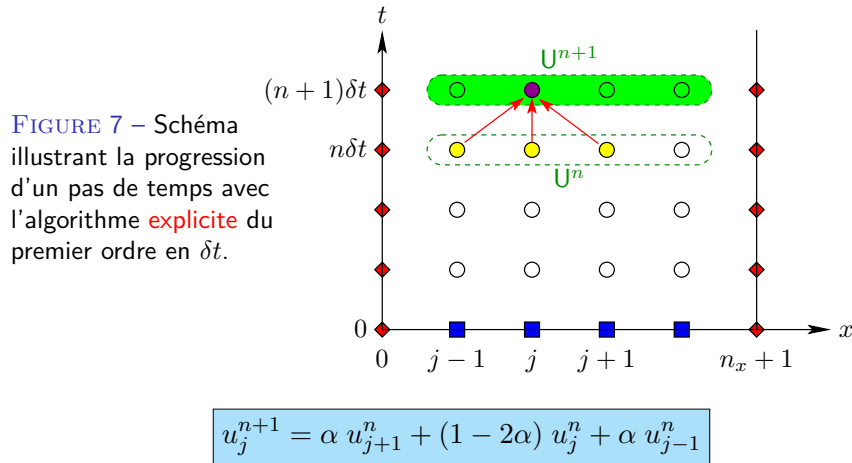
qui met clairement en évidence le caractère **explicite** puisque les u_j^{n+1} s'obtiennent directement en fonction des valeurs des u_k^n à l'instant initial du pas de temps considéré.

Lorsque l'un des u_{j-1}^n ou αu_{j+1}^n n'est pas intérieur, c'est à dire que $j = 1$ ou $j = n_x$, on retrouve une condition de bord, et $u_0^n \equiv u_g^n$ ou $u_{n_x+1}^n \equiv u_d^n$ apparaîtront comme un terme additionnel, avec un poids α .

Notons que la méthode de relaxation évoquée dans la première partie, si on l'applique à une dimension, est exactement équivalente au cas où $\alpha = \frac{1}{2}$.

Schéma de progression explicite

Il est utile de représenter cette situation par un schéma de progression :



Explicite : Formulation matricielle

En considérant le vecteur $U^n = (u_1^n, \dots, u_{n_x}^n)$ des solutions à $t = n\delta t$ pour les n_x points intérieurs, le système d'équations linéaires prend la forme :

$$U^{n+1} = M(-\alpha) U^n + \alpha V^n,$$

où $V^n = (u_g^n, 0, \dots, 0, u_d^n)$ est le vecteur des conditions aux limites, et la matrice est

$$M(-\alpha) = \mathbf{1} + \alpha L_{1D}$$

où L_{1D} est la matrice tridiagonale représentant le laplacien à une dimension :

$$L_{1D} = \begin{pmatrix} -2 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 1 & -2 & 1 & \dots & \vdots \\ 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ \vdots & \dots & \dots & -2 & 1 \\ 0 & \dots & 0 & 1 & -2 \end{pmatrix} \rightarrow M(-\alpha) = \begin{pmatrix} 1-2\alpha & \alpha & 0 & \dots & 0 \\ \alpha & 1-2\alpha & \alpha & \dots & \vdots \\ 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ \vdots & \dots & \dots & 1-2\alpha & \alpha \\ 0 & \dots & 0 & \alpha & 1-2\alpha \end{pmatrix} \quad (31)$$

Explicite : stabilité

Un problème important auquel on est confronté dans ce type de résolution est l'instabilité de la méthode explicite pour un pas de temps « un peu trop grand » ($\alpha > 0.5$) :

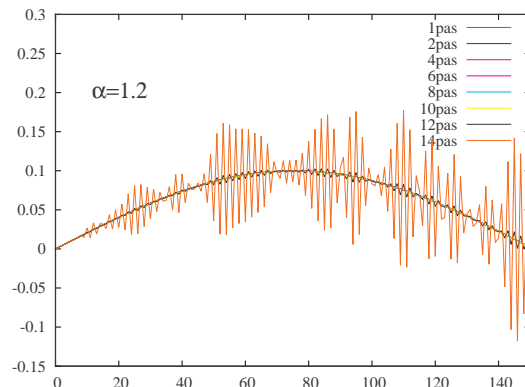


FIGURE 8 – Résolution explicite avec $\alpha = 1.2 > 0.5$.

Explicite : analyse de stabilité de Fourier–von Neumann

Étudions la stabilité d'une onde stationnaire :

$$u(x, t) = A(t) \sin(kx) \Rightarrow u_j^n = A^{(n)} \sin(kj\delta x), \quad (32)$$

c'est une solution exacte pour les CL $u_g = u_d = 0$, si $k = p\pi/L$ (p entier) et si $A(t)$ vérifie $dA/dt = -Dk^2 A(t)$ donc $A(t) = A(0) \exp(-Dk^2 t)$

Or l'algorithme explicite (28) donne, après division par u_j^n :

$$\frac{A^{(n+1)} - A^{(n)}}{A^{(n)}} = \frac{A^{(n+1)}}{A^{(n)}} - 1 = \alpha \left[\frac{\sin(k(j+1)\delta x)}{\sin(kj\delta x)} - 2 + \frac{\sin(k(j-1)\delta x)}{\sin(kj\delta x)} \right]$$

en développant les numérateurs $= \alpha [2 \cos(k\delta x) - 2] = -4\alpha \sin^2\left(\frac{k\delta x}{2}\right)$.

soit une suite géométrique $A^{(n)} = A_0 \theta^n$ de raison réelle $\theta = 1 - 4\alpha \sin^2\left(\frac{k\delta x}{2}\right)$

L'algorithme explicite est stable si $|\theta| \leq 1$ quel que soit le mode p , soit

$$0 \leq \alpha \leq 1/2 \quad \text{c-à-d} \quad \delta t \leq \delta x^2 / 2D$$

Stabilité de l'explicite : lien avec le spectre de L_{1D}

La p -ième valeur propre de la matrice L_{1D} , en dimension n , s'écrit en fonction de $\beta = \pi/2(n+1) = \pi\delta x/2L$:

valeur propre : $-4 \sin^2(p\beta)$; vecteur propre : $u_m^{(p)} = \sin(m p \beta)$

On en déduit celles de la matrice $M(-\alpha)$:

$$M(-\alpha) = \mathbf{1} + \alpha L_{1D} \quad \rightarrow \quad 1 - 4\alpha \sin^2\left(\frac{p\pi\delta x}{2L}\right).$$

La condition de stabilité traduit donc simplement le fait que ces valeurs propres sont de module inférieur à 1, c'est-à-dire que son rayon spectral est inférieur à 1.

La relation de dispersion, $i\omega = Dk^2$ déduite de l'équation de la diffusion est remplacée par :

$$2i \sin\left(\frac{\omega\delta t}{2}\right) \exp\left(i\frac{\omega\delta t}{2}\right) = 4\alpha \sin^2\left(\frac{k\delta x}{2}\right) \quad (33)$$

qui n'a de solution ω à partie imaginaire négative (stable) que si $4\alpha \leq 2$.

Avant d'aller plus loin dans l'analyse numérique, voici quelques exemples.

Exemple : Diffusion d'une distribution en « marche »

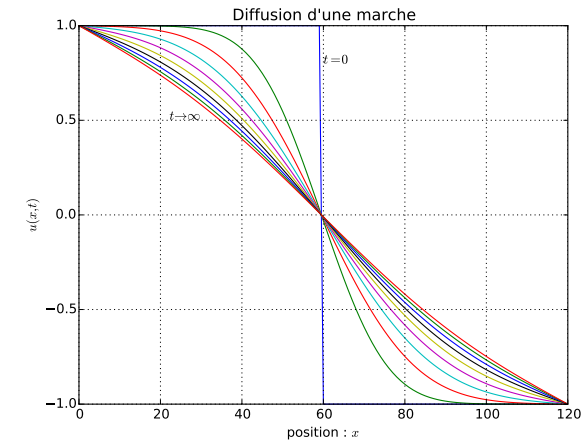


FIGURE 9 – Diffusion d'une marche avec des CL fixes $+1$ à gauche et -1 à droite : $u(x, t)$ tend vers une droite si $t \rightarrow \infty$

Exemple : Diffusion d'une superposition de 2 modes

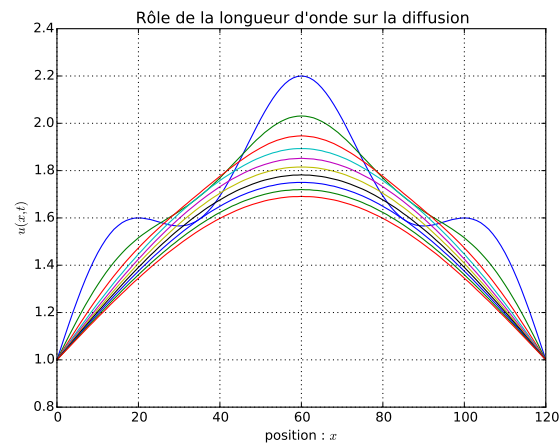


FIGURE 10 – Amortissement du mode 5 plus rapide que celui du mode 1 mais pour $t \rightarrow \infty$, on obtiendrait une droite.

Solution au problème de stabilité : méthode rétrograde

L'algorithme explicite est simple mais la condition de stabilité oblige à faire de très petits pas...

On a vu, avec les EDO, que ces problèmes peuvent être résolus en utilisant un algorithme **implicite**. C'est ce que nous faisons ici en choisissant la dérivée temporelle « vers l'arrière », introduisant les nouvelles équations :

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\delta t} = D \left[\frac{u_{j+1}^{n+1} - 2u_j^{n+1} + u_{j-1}^{n+1}}{(\delta x)^2} \right] \quad (34)$$

Les u_j^{n+1} ($j \in [1, n_x]$) s'obtiennent alors en fonction des u_j^n ($j \in [0, n_x + 1]$) en résolvant le système de n_x équations linéaires :

$$-\alpha u_{j-1}^{n+1} + (1 + 2\alpha) u_j^{n+1} - \alpha u_{j+1}^{n+1} = u_j^n \quad \text{pour } j \in [1, n_x] \quad (35)$$

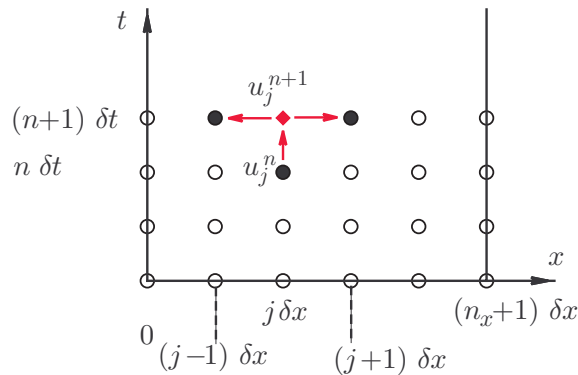
sauf pour $j = 1$ et $j = n_x$ où interviennent les CL.

Soulignons le parallèle avec la méthode d'Euler implicite (rétrograde).

Schéma de progression implicite

Cette méthode met en œuvre le schéma de progression suivant :

FIGURE 11 – Schéma illustrant la progression d'un pas de temps avec l'algorithme implicite du premier ordre en δt .



$$-\alpha u_{j-1}^{n+1} + (1 + 2\alpha) u_j^{n+1} - \alpha u_{j+1}^{n+1} = u_j^n$$

Stabilité de l'algorithme implicite

On cherche à nouveau les modes propres définis par (32).

Si on reporte leur expression dans la nouvelle équation aux différences finies (34), on obtient la raison de la suite géométrique :

$$\theta = \frac{1}{1 + 4\alpha \sin^2\left(\frac{k\delta x}{2}\right)} \leq 1 \quad (37)$$

qui montre que l'algorithme implicite est **toujours stable** quel que soit le choix des pas δx et δt .

On obtient plus simplement le même résultat à partir des valeurs propres de $M(\alpha)^{-1} = (\mathbf{1} - \alpha L_{1D})^{-1}$, inverses de $1 + 4\alpha \sin^2\left(\frac{p\pi\delta x}{2L}\right)$.

Toutefois, cet algorithme étant basé sur une approximation du premier ordre en δt seulement, une description précise de la solution transitoire requiert le choix d'un δt assez petit.

Formulation matricielle

Ce système peut être écrit de façon matricielle sous la forme :

$$M(\alpha) U^{n+1} = U^n + \alpha V^{n+1}$$

avec les mêmes notations que précédemment, et notamment :

$$M(\alpha) = \mathbf{1} - \alpha L_{1D} = \begin{pmatrix} 1+2\alpha & -\alpha & 0 & \cdots & 0 \\ -\alpha & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & -\alpha \\ 0 & \cdots & 0 & -\alpha & 1+2\alpha \end{pmatrix} \quad (36)$$

Notons que si M est tridiagonale, son **inverse** est au contraire une **matrice dense**. Ainsi u_j^{n+1} dépend de tous les autres éléments, mais d'autant moins qu'ils sont plus éloignés. Bien sûr, lorsque $\alpha \rightarrow 0$, $M(\alpha)^{-1} \rightarrow M(-\alpha)$ ce qui signifie que cette dépendance tend à disparaître et on retrouve alors l'algorithme explicite.

Principe de l'algorithme de Crank–Nicolson

Pour accroître la précision, il faut donc améliorer l'approximation en différences finies du terme de dérivée partielle temporelle. Plutôt que de modifier celui-ci directement, on utilise la même stratégie que pour la « méthode d'Euler modifiée » pour les EDO, qui est du 2nd ordre en temps.

On fait donc la **moyenne** des seconds membres des deux algorithmes précédents. On obtient l'algorithme de Crank–Nicolson :

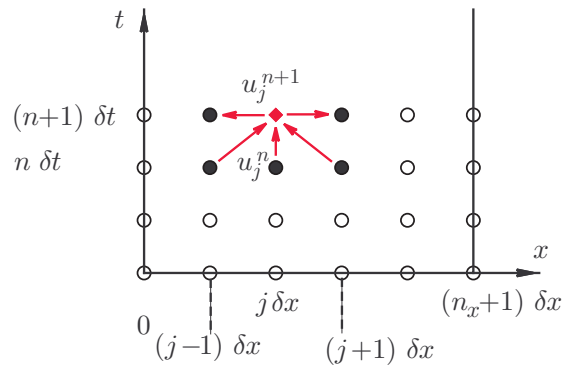
$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\delta t} = \frac{D}{2} \left[\frac{(u_{j+1}^{n+1} - 2u_j^{n+1} + u_{j-1}^{n+1}) + (u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n)}{(\delta x)^2} \right], \quad (38)$$

qui est du deuxième ordre en δt comme en δx .

Schéma de progression de Crank–Nicolson

Le schéma de progression est désormais le suivant :

FIGURE 12 – Schéma illustrant la progression d'un pas de temps avec l'algorithme de Crank–Nicolson.



$$-\frac{\alpha}{2}u_{j-1}^{n+1} + (1 + \alpha)u_j^{n+1} - \frac{\alpha}{2}u_{j+1}^{n+1} = \frac{\alpha}{2}u_{j-1}^n + (1 - \alpha)u_j^n + \frac{\alpha}{2}u_{j+1}^n$$

Formulation matricielle

Les u_j^{n+1} s'obtiennent désormais en fonction des u_j^n en résolvant le système d'équations linéaires (pour $j \in [1, n_x]$) :

$$-\frac{\alpha}{2}u_{j-1}^{n+1} + (1 + \alpha)u_j^{n+1} - \frac{\alpha}{2}u_{j+1}^{n+1} = \frac{\alpha}{2}u_{j-1}^n + (1 - \alpha)u_j^n + \frac{\alpha}{2}u_{j+1}^n \quad (40)$$

sauf pour $j = 1$ et $j = n_x$ où interviennent les CL.

Ce système peut être écrit de façon matricielle sous la forme :

$$\mathbf{M} \begin{pmatrix} \alpha \\ 2 \end{pmatrix} \mathbf{U}^{n+1} = \mathbf{M} \begin{pmatrix} -\alpha \\ 2 \end{pmatrix} \mathbf{U}^n + \frac{\alpha}{2} [\mathbf{V}^n + \mathbf{V}^{n+1}] \quad (41)$$

avec les mêmes notations que pour les deux autres algorithmes.

Stabilité de l'algorithme de Crank–Nicolson

L'étude de stabilité de von Neumann peut être reprise pour ce nouvel algorithme et conduit à une décroissance géométrique des modes avec une raison :

$$\theta = \frac{1 - 2\alpha \sin^2\left(\frac{k\delta x}{2}\right)}{1 + 2\alpha \sin^2\left(\frac{k\delta x}{2}\right)} \quad (39)$$

ce qui permet de montrer que cet algorithme est lui aussi *inconditionnellement stable* (i.e. quel que soit le choix de δt).

$$\theta_{\text{CN}}(\alpha) = \theta_{\text{explicite}}\left(\frac{\alpha}{2}\right) \times \theta_{\text{implicite}}\left(\frac{\alpha}{2}\right)$$

Équation des ondes : différences finies

Évoquons brièvement la résolution de l'équation de d'Alembert :

- On discrétise le domaine comme pour l'équation de la chaleur ;
- On se donne des conditions initiales arbitraires $u(x, 0)$ et $\partial u / \partial t(x, 0)$;
- On se fixe pour simplifier des conditions aux limites de Dirichlet, ou de Neumann homogènes ;
- On essaye le schéma de différences finies « naturel » :

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = c^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Rightarrow \frac{u_j^{n+1} + u_j^{n-1} - 2u_j^n}{(\delta t)^2} = c^2 \frac{u_{j+1}^n + u_{j-1}^n - 2u_j^n}{(\delta x)^2} \quad (42)$$

qui est bien sûr du deuxième ordre en x et en t , et restaure une certaine symétrie entre le temps et l'espace.

Algorithme explicite

En posant $\alpha = c \frac{\delta t}{\delta x}$, on obtient les équations **explicites** à trois niveaux de temps :

$$u_j^{n+1} = \alpha^2(u_{j+1}^n + u_{j-1}^n) + 2(1 - \alpha^2)u_j^n - u_j^{n-1}. \quad (43)$$

soit, sous forme matricielle :

$$U^{n+1} = (2\mathbf{1} + \alpha^2 L_{1D}) U^n - U^{n-1} + \alpha^2 L_{1D} V^n$$

où V représente à nouveau les conditions aux limites sur les bords.

Ce schéma est appelé “**leap-frog**” en anglais, singulièrement traduit en « saute-mouton ».

Ordre deux en temps \Rightarrow 2 CI : $u(x, 0)$ et $\partial u / \partial t(x, 0)$,
ou 2 temps : $u(x, 0)$ et $u(x, \delta t)$.

Critère CFL

Ce schéma « saute-mouton » donne une relation de dispersion (à 1D) :

$$\sin^2\left(\frac{\omega \delta t}{2}\right) = \alpha^2 \sin^2\left(\frac{k \delta x}{2}\right) \quad (44)$$

Si $\alpha \leq 1$, on a des solutions réelles (ie non divergentes). C'est le **critère de Courant–Friedrichs–Lewy** prescrivant que α doit être « assez petit » pour que la méthode soit stable. La valeur précise de la borne dépend de la méthode de discrétisation de l'équation, de la dimension de l'espace, et éventuellement de la direction de propagation.

De plus, la valeur $\alpha = 1$ réalise la relation de dispersion exacte, et fait aussi disparaître u_j^n de l'expression (43) de u_j^{n+1} .

Critère CFL

L'idée générale est néanmoins toujours la même et peut être formulée des 3 façons équivalentes :

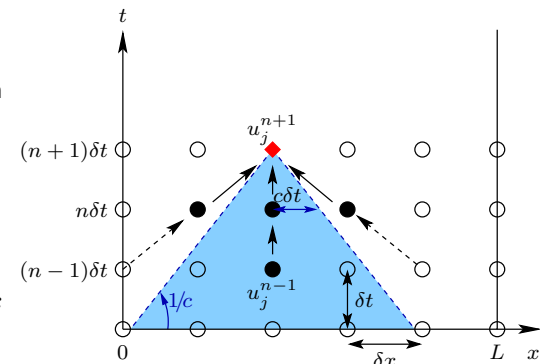
- Le pas de temps δt doit être inférieur au temps mis par l'onde (à la célérité c) pour traverser un pas d'espace δx .
- Le pas d'espace doit être supérieur à la distance parcourue par l'onde durant δt .
- La vitesse de « diffusion de l'information » $\delta x / \delta t$ entre les noeuds de la grille doit être **supérieure** à la célérité de l'onde.

Schéma de progression et critère CFL

Le schéma explicite « saute-mouton » est désormais le suivant :

FIGURE 13 – Progression d'un pas de temps dans l'algorithme explicite du second ordre en temps et espace pour l'équation des ondes de d'Alembert

Critère CFL : $c \delta t < \delta x$



Le critère CFL se traduit (dans ce cas simple 1D) par le fait que des points intervenant dans la progression doivent être **hors** du cône de lumière, pour laisser à l'onde « le temps de se propager ».