

Introduction aux méthodes de Différences Finies

UF « Modélisation et calcul scientifique »
Formation ModIA « Modélisation et Intelligence Artificielle »

Nicolas Bertier (nicolas.bertier@onera.fr)

INSA, 4A

Version du document : 2.7 (dernière modification le 17/11/2022)

Sauf exceptions dûment mentionnées, le contenu de ce cours est sous licence **Creative Commons Attribution - Partage dans les Mêmes Conditions** 4.0 International .

Pour accéder à une copie de cette licence, merci de vous rendre à l'adresse suivante : <http://creativecommons.org/licenses/by-sa/4.0/>

Plan du cours

- Exemples de simulations numérique récentes en CFD
- **Introduction aux méthodes de différences finies**
- Le point sur l'intégration temporelle
- Analyse spectrale et équation équivalente
- Monotonie et limiteurs
- Introduction aux méthodes de volumes finis
- Vers la résolution des équations de Navier-Stokes

Structuration en cours/TD/TP

- 8h45 de cours, 2h30 de TD, 7h30 de TP
- Soit un module de 18h45 au total.

Equation modèle d'advection pure

Forme locale et vectorielle

Soit Ω un ouvert borné régulier de \mathbb{R}^3 et u une fonction réelle régulière, alors $\forall t \in [0, T[, \mathbf{x} \in \Omega$:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{a}u) = 0$$

Ce problème modèle fait intervenir des dérivées partielles par rapport au temps et à l'espace, il est donc nécessaire d'ajouter pour sa complétude :

- Une condition initiale $u(0, \mathbf{x}) \triangleq u^0(\mathbf{x}), \mathbf{x} \in \Omega$.
- Des conditions limites sur le bord du domaine Ω , que l'on note $\partial\Omega$.

Interprétation physique :

Cette équation modélise le transport de la quantité $u(x, t)$ à la vitesse \mathbf{a} , sans aucune dissipation.

Equation d'advection 1D

Forme locale scalaire

On considère une vitesse d'advection constante, uniquement dirigée suivant l'axe \mathbf{e}_x ($\mathbf{a} = a\mathbf{e}_x$) :

$$\frac{\partial u}{\partial t} + a \frac{\partial u}{\partial x} = 0$$

Conditions initiale et aux limites :

- Condition initiale ($t = 0$) : $u(x, 0) = u^0(x)$
- Conditions limites :
 - ▶ en $x = 0$: $u(0, t) = g1(t)$
 - ▶ en $x = L$: $u(L, t) = g2(t)$

Solution de l'équation d'advection 1D

Si $u(x, t)$ est différentiable, alors :

$$du = \frac{\partial u}{\partial x} dx + \frac{\partial u}{\partial t} dt$$

Soit :

$$\frac{du}{dt} = \frac{\partial u}{\partial x} \frac{dx}{dt} + \frac{\partial u}{\partial t}$$

Si on a :

$$\frac{dx}{dt} = a$$

On réinjecte cette expression dans celle de la différentielle de $u(x, t)$:

$$\frac{du}{dt} = \frac{\partial u}{\partial x} a + \frac{\partial u}{\partial t} = 0 \Rightarrow u = u^0(\text{constante})$$

Solution de l'équation d'advection 1D

En intégrant maintenant $dx/dt = a$ on obtient :

$$x = at + \xi \Rightarrow \xi = x - at$$

Ce qui conduit à la solution générale de l'équation :

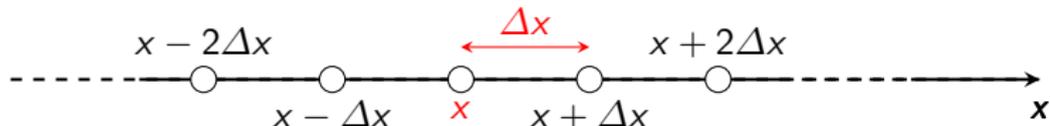
$$u(x, t) = f(\xi) = f(x - at)$$

Quelques remarques

- u est constant le long des lignes telles que $x = at + \xi$, appelées **caractéristiques**
- Cette constante dépend de la caractéristique considérée, et donc de ξ
- La solution générale de l'équation d'advection est $f(x - at)$, pour une fonction f arbitraire,
- Exemples de solutions particulières : $u(x, t) = x - at$,
 $u(x, t) = (x - at)^2$, $u(x, t) = \cos(x - at)$,...

Approximations par Différences Finies

On se donne un **maillage** de m points régulièrement espacés :



Par définition, on peut écrire :

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{u(x + \Delta x) - u(x)}{\Delta x} \approx \frac{u(x + \Delta x) - u(x)}{\Delta x}$$

- l'évaluation de la dérivée se fait par **différences finies** (DF) !
- l'écart entre la dérivée exacte et son approximation discrète **diminue avec** Δx et est appelée **erreur de troncature** : comment l'évaluer ?

Formule de Taylor-Lagrange

Formule de Taylor-Lagrange pour une fonction d'une variable

Soit u une fonction à valeurs réelles de classe C^k sur $I = [a, b]$. Alors
 $\forall n < k, x \in]a, b[, \Delta x \in \mathbb{R}, x + \Delta x \in [a, b]$:

$$\begin{aligned} u(x + \Delta x) &= u(x) + \Delta x \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right) \Big|_x + \frac{(\Delta x)^2}{2!} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right) \Big|_x + \dots \\ &+ \frac{(\Delta x)^n}{n!} \left(\frac{\partial^n u}{\partial x^n} \right) \Big|_x + \mathcal{O}(\Delta x)^{n+1} \end{aligned}$$

- La formule de Taylor-Lagrange constitue la **colonne vertébrale** de la méthode DF.
- $\mathcal{O}(\Delta x)^{n+1}$: **ordre du reste** de la série de Taylor-Lagrange.

Utilisation pratique de la formule de Taylor-Lagrange

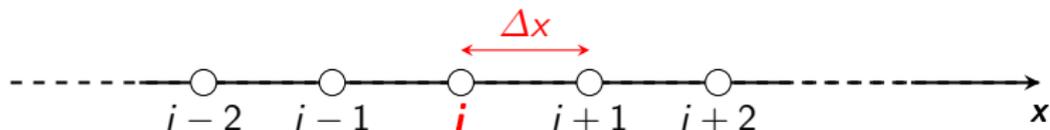
Erreur de troncature de l'approximation DF de $\frac{\partial u}{\partial x}$

$$\begin{aligned}\frac{u(x + \Delta x) - u(x)}{\Delta x} &= \left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_x + \frac{\Delta x}{2!} \left(\left. \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right|_x \right) + \dots + \mathcal{O}(\Delta x)^n \\ &= \left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_x + \mathcal{O}(\Delta x)\end{aligned}$$

- Cette formule DF **est bien** une approximation de $\frac{\partial u}{\partial x}$
- Son erreur de troncature est **en** $\mathcal{O}(\Delta x)$
- Comment juger de l'importance de cette erreur ? Est-il possible de construire de meilleures approximations ? Et comment ?

Notations pour la construction de schémas DF

Soit un **maillage** de m points régulièrement espacés de Δx :



Notations associées au problème discret

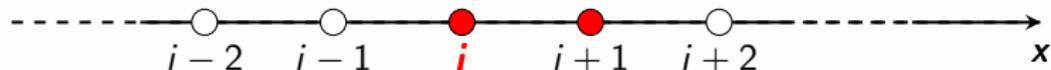
- On considère la résolution d'une équation sur un domaine 1D de longueur L , discrétisé en m points régulièrement espacés.
- On note :

$$\Delta x = \frac{L}{m-1} ; x_i \triangleq i \Delta x ; u_i \triangleq u(x_i)$$

- L'ensemble des points du maillage utilisés pour exprimer les différentes dérivées spatiales est appelé **stencil** ou **signature** du schéma.

Ecriture du schéma décentré aval d'ordre un

Stencil (ou "signature") composé des points u_i et u_{i+1} :



Ecriture du schéma décentré aval d'ordre un

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

Remarque : c'est toujours notre tout premier schéma, écrit cette fois en utilisant les indices de maillage

Construction de nouvelles discrétisations DF de $\frac{\partial u}{\partial x}$

Développement de Taylor-Lagrange à l'ordre trois de u_{i+1} au point i

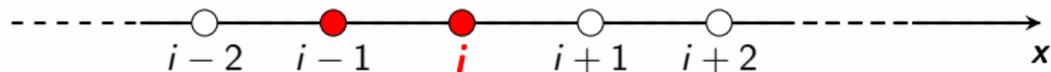
$$u_{i+1} = u_i + \Delta x \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right) \Big|_i + \frac{(\Delta x)^2}{2!} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right) \Big|_i + \frac{(\Delta x)^3}{3!} \left(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \right) \Big|_i + \mathcal{O}(\Delta x)^4$$

Développement de Taylor-Lagrange à l'ordre trois de u_{i-1} au point i (remplacement de Δx par $-\Delta x$)

$$u_{i-1} = u_i - \Delta x \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right) \Big|_i + \frac{(\Delta x)^2}{2!} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right) \Big|_i - \frac{(\Delta x)^3}{3!} \left(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \right) \Big|_i + \mathcal{O}(\Delta x)^4$$

Construction d'un schéma décentré amont d'ordre un

Stencil (ou "signature") composé des points u_i et u_{i-1} :



Ecriture du schéma décentré amont d'ordre un

En utilisant ce stencil, on peut écrire :

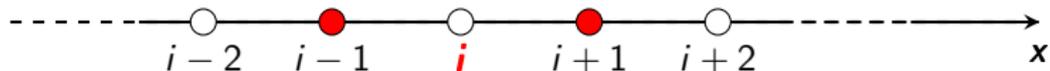
$$\left(\frac{\partial u}{\partial x} \right) \Big|_i = \frac{u_i - u_{i-1}}{\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x)$$

Construction d'un schéma centré d'ordre deux

Motivation : recherche d'une plus grande précision

- On vient de construire deux schémas décentrés d'ordre 1
- Est-il possible d'écrire une discrétisation DF d'ordre supérieur en utilisant le même nombre de points ?

=> Possibilité d'annuler le terme d'erreur d'ordre 1 en retranchant le développement de u_{i-1} de celui de u_{i+1} .



Ecriture du schéma centré d'ordre deux

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

Les schémas DF sont cependant exacts :

- pour des **fonctions linéaires avec un schéma d'ordre 1**, car les dérivées d'ordre supérieur ou égal à 2 sont nulles ;
- pour des **fonctions quadratiques avec un schéma d'ordre 2**, car les dérivées d'ordre supérieur ou égal à 3 sont nulles ;
- pour des **polynômes de degré n avec un schéma d'ordre n** , car les dérivées d'ordre supérieur ou égal à n sont nulles.

⇒ Plus la solution à représenter est complexe et plus il peut être intéressant de monter en ordre pour le schéma DF.

Ecriture du schéma semi-discret en espace

- Lorsque la discrétisation de $\partial u / \partial x$ est choisie, il est possible d'écrire le **schéma semi-discret en espace**.
- Par exemple, le schéma semi-discret obtenu en utilisant la formulation DF centrée peut s'écrire :

$$\frac{du}{dt} = -\frac{a}{2\Delta x} (u_{i+1} - u_{i-1})$$

Remarque : l'équation de départ était une EDP, le schéma semi-discret est une **équation différentielle ordinaire (EDO)**

Discrétisation temporelle

- De la même manière que l'espace a été discrétisé à l'aide d'un maillage, il faut maintenant **discrétiser le temps en n instants** :

$$\Delta t = \frac{T}{n} ; \quad t^n \triangleq n\Delta t ; \quad u_i(t^n) \triangleq u_i^n$$

Enjeux de l'intégration temporelle

L'objectif de l'intégration temporelle est de pouvoir fournir une expression calculable de u_i^{n+1} ce qui implique :

- une discrétisation de la dérivée temporelle du/dt
- le choix du ou des instants utilisés pour l'évaluation du second membre de l'EDO

Remarques :

- Bien qu'il soit possible de **séparer formellement discrétisation spatiale et intégration temporelle** pour de nombreux schémas, ce n'est cependant pas toujours le cas
- Cette propriété permet une intégration plus simple des schémas dans les codes de calcul et facilite leur étude théorique

Schéma d'Euler explicite

Approche la plus directe : le schéma d'Euler explicite

- L'approche la plus naturelle pour discrétiser le terme du/dt est d'utiliser un schéma décentré vers « le futur » :

$$\frac{du}{dt} = \frac{u^{n+1} - u^n}{\Delta t} + \mathcal{O}(\Delta t)$$

- La manière la plus simple d'écrire le second membre est de **l'évaluer à l'instant n**
- Ces choix permettent d'écrire un **schéma discret en espace et en temps** complet :

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} = -\frac{a}{2\Delta x} (u_{i+1}^n - u_{i-1}^n)$$

Schéma discret en espace et en temps SOC-EE

Réécriture du schéma discret en espace et en temps

Expression **explicite** de u_i^{n+1} en fonction de grandeurs **évaluées à un instant antérieur** :

$$u_i^{n+1} = u_i^n - \frac{a\Delta t}{2\Delta x} (u_{i+1}^n - u_{i-1}^n)$$

Nombre de Courant

L'expression du schéma discret en espace et en temps fait apparaître un groupement que l'on peut noter \mathcal{C} :

$$\mathcal{C} = \frac{a\Delta t}{\Delta x}$$

Il s'agit du **nombre de Courant**, également appelé **nombre de Courant-Friedrichs-Lewy** (ou nombre de **CFL**).

Point de terminologie sur le noms des schémas discrets

Acronymes pour désigner les schémas discrets :

- **SOC-EE** : schéma centré d'ordre deux en espace associé à une intégration temporelle d'Euler explicite (Second Order Centered - Explicit Euler)
- **FOB-EE** : schéma décentré amont d'ordre un en espace associé à une intégration temporelle d'Euler explicite (First Order Backward - Explicit Euler)
- **FOF-EE** : schéma décentré aval d'ordre un en espace associé à une intégration temporelle d'Euler explicite (First Order Forward - Explicit Euler)

Ecriture des schémas discrets en espace et en temps

En combinant :

- Les schémas DF présentés depuis le début du cours pour la discrétisation de $\partial u / \partial x$
- Une intégration temporelle d'Euler explicite

On obtient les schémas discrets en espace et en temps :

$$\text{FOF-EE : } u_i^{n+1} = u_i^n - \mathcal{C} (u_{i+1}^n - u_i^n)$$

$$\text{FOB-EE : } u_i^{n+1} = u_i^n - \mathcal{C} (u_i^n - u_{i-1}^n)$$

$$\text{SOC-EE : } u_i^{n+1} = u_i^n - \frac{\mathcal{C}}{2} (u_{i+1}^n - u_{i-1}^n)$$

Remarque : il existe **bien d'autres méthodes d'intégration temporelles** (implicites, multi-pas, multi-évaluations,...) que nous verrons par la suite.

Test des schémas DF FOB-EE et SOC-EE

Description des cas-tests : paramètres physiques

- Pour rester sur un problème simple et ne pas mélanger différentes sources d'erreur, on utilisera une **condition limite** de périodicité :

$$u(0, t) = u(L, t)$$

- On utilisera deux types de **conditions initiales** (CI) :
 - ▶ Evolution sinusoidale de u

$$u(x, 0) = \sin\left(\frac{\theta x 2\pi}{L}\right)$$

où θ est le nombre de périodes sur la longueur L .

- ▶ Distribution de Heavyside, ou « créneau »

$$u(x, 0) = 0 \text{ si } x \leq x_0; u(x, 0) = 1 \text{ si } x > x_0$$

- **Temps final** $Tf = L/a$ (retour à la position initiale)

Test des schémas DF FOB-EE et SOC-EE

Paramètres numériques utilisés

- Nombre de maille m : 50
- Nombre de CFL \mathcal{C} : 0.5

Schéma FOB-EE, CI "créneau"

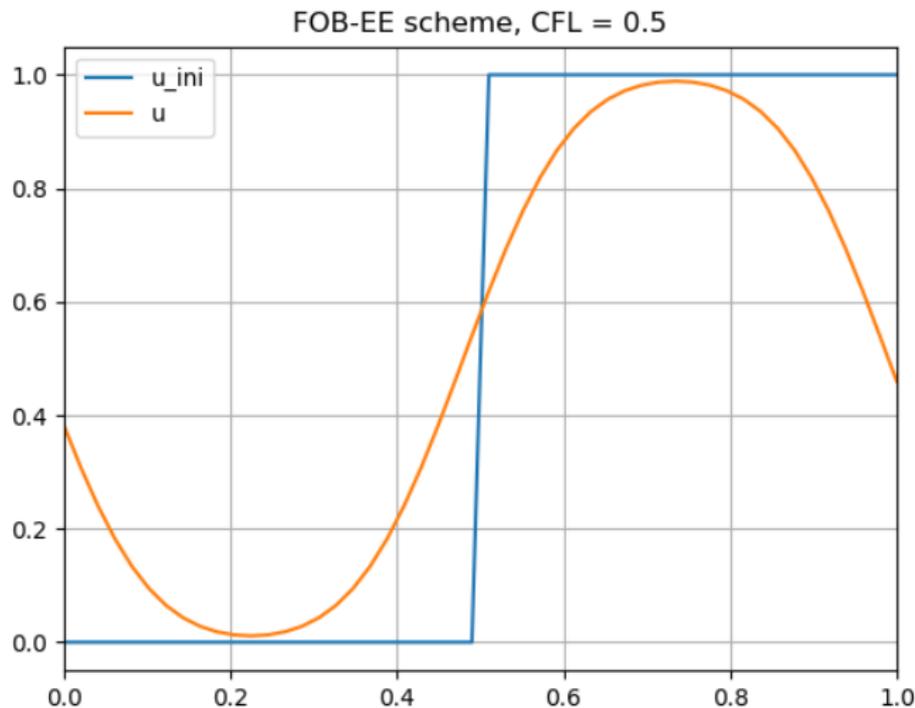


Schéma FOB-EE, CI sinusoïdale $\theta = 1$

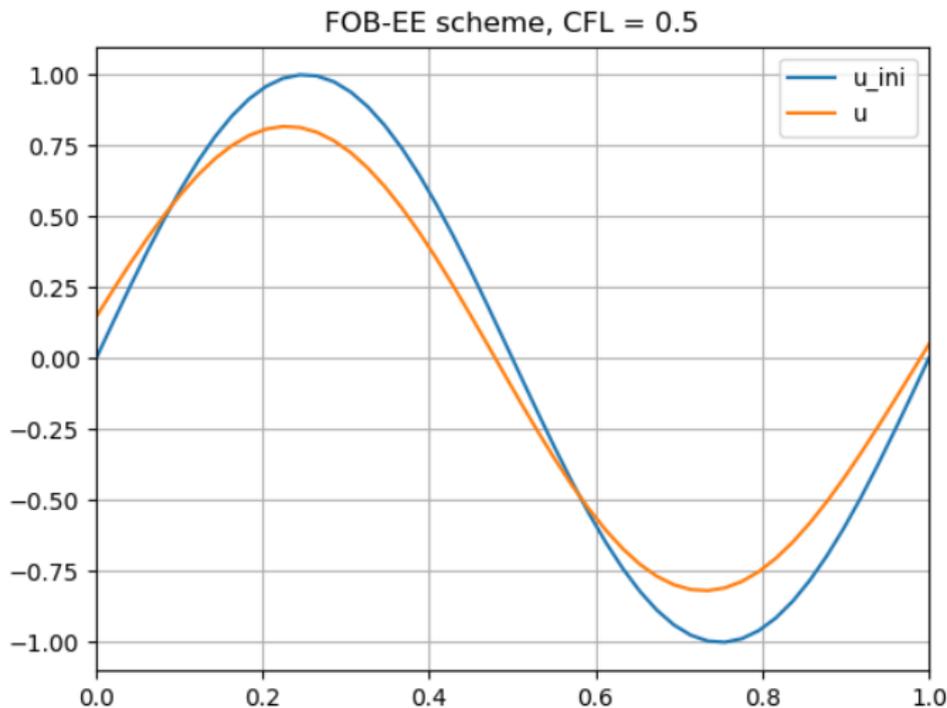


Schéma FOB-EE, CI sinusoïdale $\theta = 2$

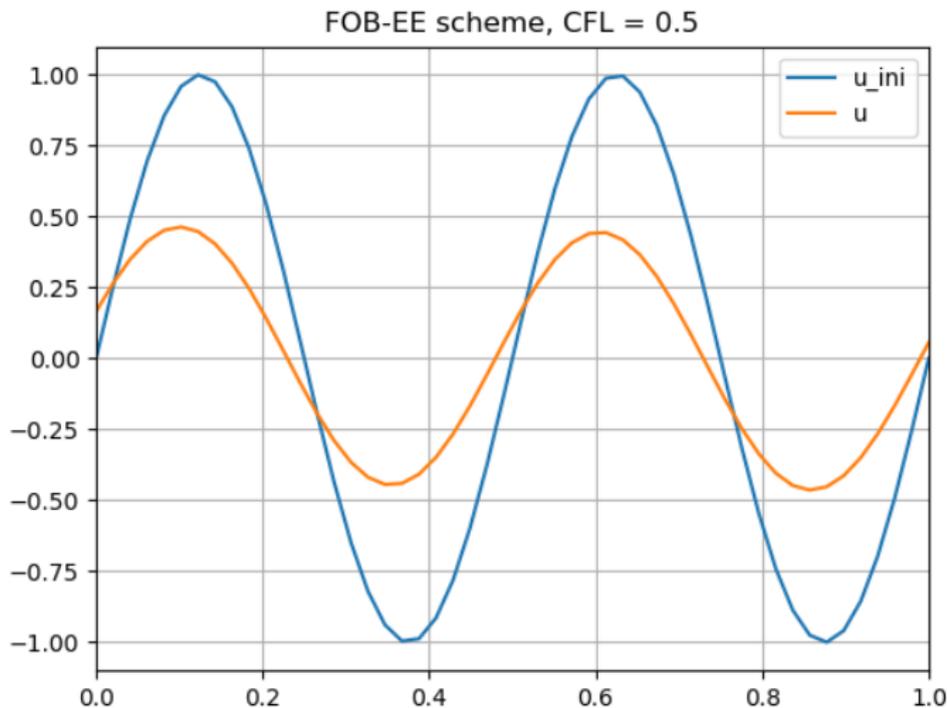


Schéma FOB-EE, CI sinusoïdale $\theta = 3$

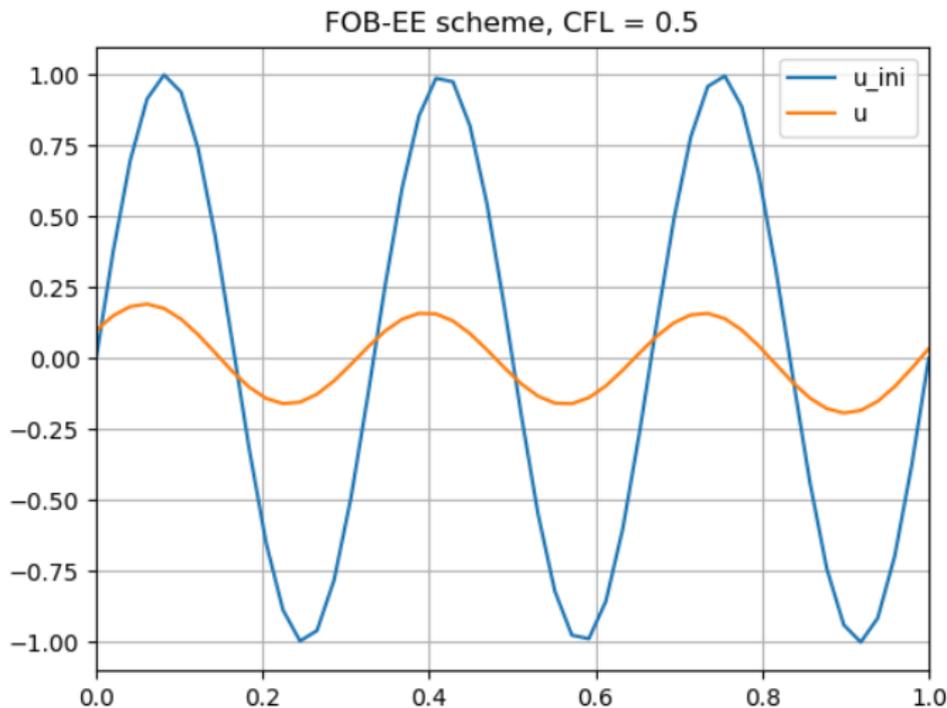


Schéma FOB-EE, CI sinusoïdale $\theta = 4$

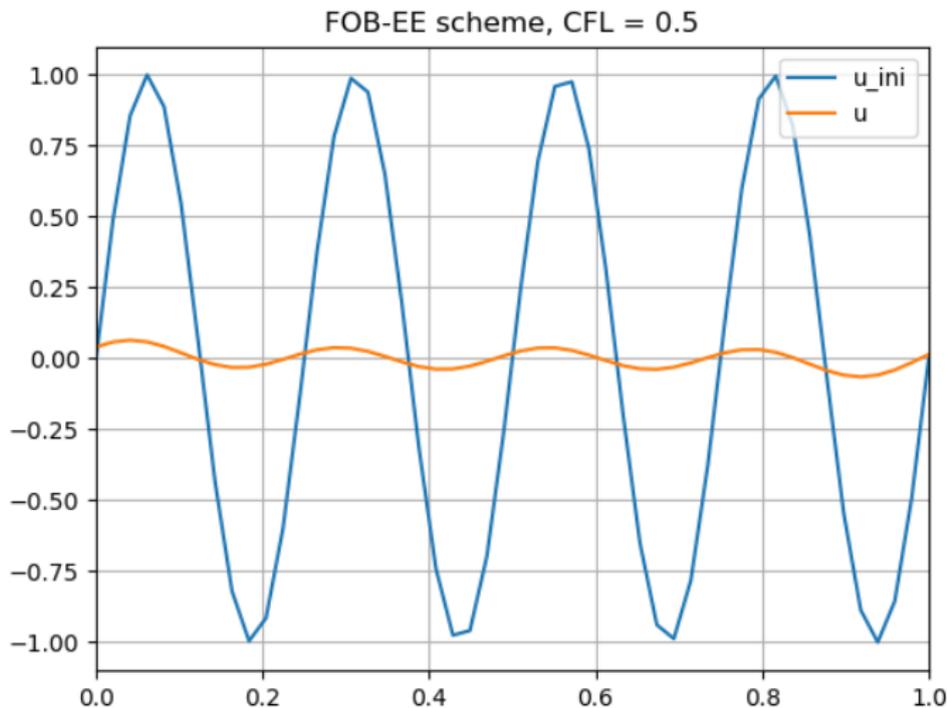
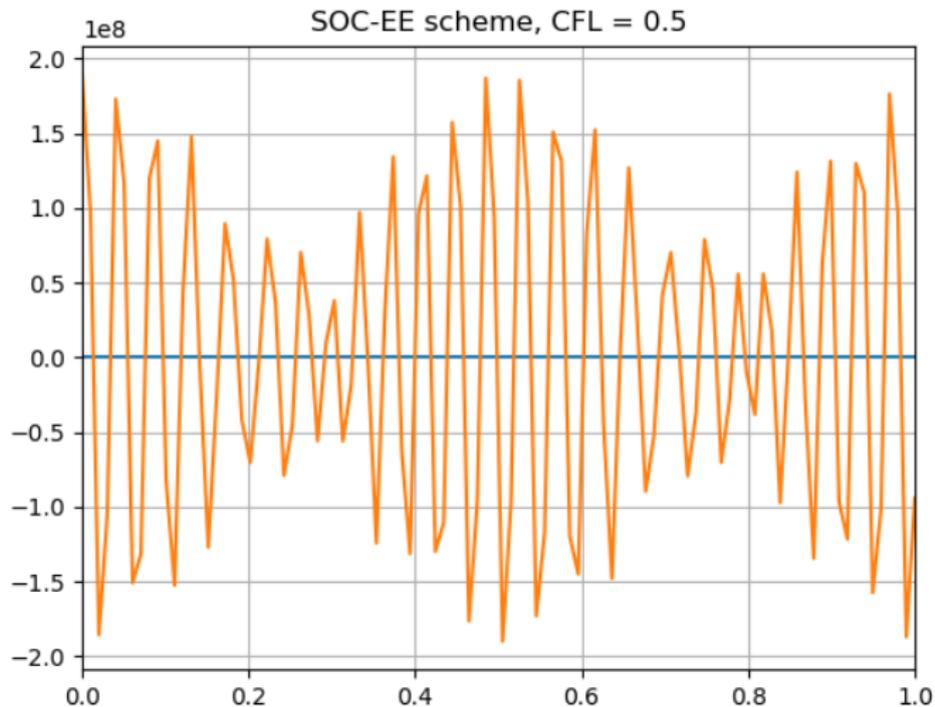


Schéma SOC-EE, CI "créneau"



Niveaux de discrétisation et solutions associées

Equation aux dérivées partielles de départ

Solution exacte (en général non calculable) notée $u(x, t)$.

Equation différentielle semi-discrète en espace

Solution exacte notée $\bar{u}(x, t)$

Equation discrète en espace et en temps

- Solution obtenue numériquement à l'aide d'un code de calcul u_i^n
- Solution exacte \tilde{u}_i^n , uniquement introduite à des fins d'analyse des propriétés du schéma

Simulation ou simulacre ?

Simulation ou simulacre ?

- La solution numérique u_i^n d'une **simulation** doit pouvoir se rapprocher autant que l'on souhaite de la solution exacte évaluée au même point $u(x_i, t^n)$, en un sens que l'on précisera par la suite.
- Si ce n'est pas le cas, le résultat éventuellement obtenu sera celui d'un problème différent de celui posé au départ, il s'agit alors d'un **simulacre**.

Rappel préliminaire : les normes

On rappelle les deux normes classiques :

- La norme L^2 :

$$\|u\|_2(t) = \sqrt{\int_0^L |u(x, t)|^2 dx}$$

- La norme L^∞ :

$$\|u\|_\infty(t) = \max_{x \in [0, L]} |u(x, t)|$$

Remarques :

- Ces normes sont équivalentes car :

$$\|u\|_\infty \leq \|u\|_2$$

- Inégalité de Minkowski (ou « triangulaire ») :

$$\|u + v\| \leq \|u\| + \|v\|$$

Rappel préliminaire : les normes

Leurs équivalents discrets peuvent alors s'écrire :

- La norme L^2 discrète :

$$\|u^n\|_2 = \sqrt{\sum_{i=1}^m \Delta x |u_i^n|^2}$$

- La norme L^∞ discrète :

$$\|u^n\|_\infty = \max_{1 \leq i \leq m} |u_i^n|$$

Remarques :

- Bien noter le facteur Δx dans la définition de la norme L^2 discrète
- La stabilité par rapport à une norme n'implique pas la stabilité vis-à-vis de toutes les normes.

Consistance, stabilité et convergence

Consistance

- Un schéma est dit **consistant** ssi :

$$\lim_{\Delta x, \Delta t \rightarrow 0} \|\tilde{u}_i^n - u(x_i, t^n)\| = 0$$

- En pratique, on prouve qu'un schéma est consistant en vérifiant que son erreur de troncature tend vers 0 lorsque les pas d'espace et de temps tendent vers 0.

La consistance exprime un lien entre la **solution exacte du schéma discret** et la **solution de l'EDP issue de la modélisation physique**.

Consistance, stabilité et convergence

Stabilité

- Un schéma est dit **stable** ssi :

$$\exists \epsilon \in \mathbb{R}^+, \forall n \in \mathbb{N}, \|\tilde{u}_i^n - u_i^n\| \leq \epsilon$$

- Au cours du processus de résolution numérique, les erreurs liées à la représentation finie des nombres en arithmétique des ordinateurs **restent bornées**.
- La stabilité exprime un lien entre les solutions numérique et exacte du schéma discret.

La stabilité reflète un lien entre les solutions **numérique et exacte du schéma discret**.

Consistance, stabilité et convergence

Convergence

- Un schéma est dit **convergent** ssi :

$$\lim_{\Delta x, \Delta t \rightarrow 0} \|u_i^n - u(x_i, t^n)\| = 0$$

- La convergence établit un lien entre la solution exacte de l'EDP et la solution numérique.
- La convergence est une condition nécessaire pour garantir que le résultat obtenu est celui d'une simulation et non d'un simulacre.

Théorème d'équivalence de Lax

Pour un problème linéaire d'évolution bien posé résolu à l'aide d'un schéma discret **consistant**, la **stabilité** est une condition nécessaire et suffisante pour assurer la **convergence**.

Erreurs liées à la représentation machine des nombres

Erreurs liées à l'implémentation des schémas numériques

Implémentation dans un code de calcul \Rightarrow introduction **d'erreurs liées à la représentation machine des nombres réels** :

- sur la spécification de la condition initiale et/ou des conditions limites ;
- lors des différentes opérations arithmétiques de l'algorithme de résolution.

La question de la **stabilité** est celle du comportement du schéma numérique vis-à-vis de l'introduction d'erreurs : va-t-il être « résilient », ou ces erreurs vont-elles **s'accumuler jusqu'à faire diverger l'algorithme de résolution** ?

Erreurs liées à la représentation machine

Notations

- ϵ_i^n l'**erreur numérique** commise en un point x_i et à un instant t^n
- u_i^n la solution numérique, entachée de l'erreur ϵ_i^n
- \widetilde{u}_i^n la **solution exacte du schéma discret**.

Ces trois grandeurs sont liées par la relation :

$$u_i^n = \widetilde{u}_i^n + \epsilon_i^n$$

Définition stabilité

Un schéma est dit **stable** si, lors du déroulement de l'algorithme de résolution, la norme de l'erreur ϵ_i^n reste bornée.

Du comportement de l'erreur à celui de la solution

Pour un schéma **linéaire**, on peut écrire :

$$\mathcal{L}(u_i^n) = \mathcal{L}(\widetilde{u}_i^n) + \mathcal{L}(\epsilon_i^n)$$

Or, par définition de la solution exacte de l'équation discrète :

$$\mathcal{L}(\widetilde{u}_i^n) = 0$$

Soit :

$$\mathcal{L}(u_i^n) = \mathcal{L}(\epsilon_i^n)$$

Par conséquent, il **est équivalent** d'étudier directement le comportement de l'erreur ou celui de la **solution entachée de cette erreur** u_i^n .

Quelques éléments bibliographiques sur Von-Neumann



FIGURE – John von Neumann. [©Los Alamos National Laboratory, <https://www.lanl.gov/resources/web-policies/copyright-legal.php>]

Grandes étapes de sa vie scientifique

John von Neumann (János Lajos Neumann), né le 28 décembre 1903 à Budapest et mort le 8 février 1957 à Washington, est un mathématicien et physicien américano-hongrois.

- Extrêmement précoce, major de sa promotion à l'université de Budapest et à l'École polytechnique fédérale de Zurich.
- Pendant la seconde guerre mondiale, il s'oriente vers les mathématiques appliquées (statistiques, analyse numérique, balistique, détonique, hydrodynamique).
- Il développe la méthode de Monte-Carlo pour faire l'économie de temps de calcul.
- A Los-Alamos, chargé d'évaluer les effets aérodynamiques d'une explosion et des ondes de choc générées.
- Il conçoit les premiers dispositifs électroniques pouvant être programmés pour exécuter des instructions et les stocker dans une mémoire : ce sont les premiers ordinateurs, utilisés pour raccourcir le temps de calcul.

Contributions majeures en analyse et en mécanique des fluides

Concernant sa méthode d'analyse de stabilité :

- Méthode développée durant la seconde guerre mondiale à Los-Alamos dans l'équipe développant le premier dispositif nucléaire.
- Cette méthode est restée classifiée jusqu'à sa description par description par Crank et Nicholson (1947) et sa publication par Charney et al. (1950).

Concernant ses contributions en mécanique des fluides :

- Développement de la première approche permettant la résolution numérique des équations d'Euler.
- Introduction du concept de viscosité artificielle pour la capture de chocs.

Analyse de stabilité de Von-Neumann

Principales caractéristiques de l'analyse de stabilité de Von Neuman :

- Problème périodique (supprime la difficulté d'intégrer les conditions aux limites dans l'analyse)
- Développement de l'erreur en série de Fourier finie (nécessite d'être périodique)

En passant de l'espace physique à l'espace spectral, on introduit le nombre d'onde :

$$k_\alpha = \frac{2\pi}{\mathcal{L}_\alpha}$$

où \mathcal{L}_α est la longueur d'onde associée au mode α . Les m points du maillage permettent de représenter m harmoniques.

Décomposition de la solution en série de Fourier

Longueurs d'ondes représentables sur le domaine de calcul :

- Plus **grande longueur d'onde** de taille L , associée au **plus petit nombre d'onde** $k_{min} = \frac{2\pi}{L}$
- Plus **petite longueur d'onde** de taille $2\Delta x$, associée au **nombre d'onde maximal** $k_{max} = \frac{2\pi}{2\Delta x} = \frac{\pi}{\Delta x}$
- Les m harmoniques sont toutes des multiples de k_{min} :

$$k_{\alpha} = \alpha k_{min} = \alpha \frac{2\pi}{L}, \text{ avec } \alpha \in \left[-\frac{m-1}{2}, \frac{m-1}{2}\right]$$

Remarques : le mode de rang 0 est la moyenne spatiale de la solution et le mode de rang 1 est appelé « fondamental ».

Décomposition de la solution en série de Fourier

- La solution étant périodique, il est possible de mettre en oeuvre une analyse de Fourier
- Partant d'une solution discrète, on utilisera une décomposition en **série de Fourier finie**.
- Dans le cadre de cette analyse, **seule la partie spatiale** sera décomposée dans l'espace des phases

Décomposition de u_i^n en série de Fourier finie par rapport à la variable d'espace

$$u_i^n = \sum_{\alpha=-\frac{m-1}{2}}^{\frac{m-1}{2}} A_{\alpha}^n e^{jk_{\alpha} x_i} = \sum_{\alpha=-\frac{m-1}{2}}^{\frac{m-1}{2}} A_{\alpha}^n e^{jk_{\alpha} i \Delta x}$$

où A^n concentre toute la dépendance au temps de la solution.

Formalisation de la condition de stabilité

Ecriture de la solution pour un angle de phase fixé

- On pose $\varphi_\alpha = k_\alpha \Delta x$, qui est **l'angle de phase**.
- Chaque mode α de la décomposition de la solution u_i^n peut s'écrire :

$$u_{i,\alpha}^n = A_\alpha^n e^{jk_\alpha i \Delta x}$$

Soit, en faisant apparaître l'angle de phase φ :

$$u_{i,\alpha}^n = A_\alpha^n e^{ji\varphi_\alpha}$$

La solution d'une équation d'évolution **linéaire** reste bornée au cours du temps ssi **chaque terme de sa série de Fourier** reste également **borné**.

Définition du facteur d'amplification

- Chaque mode devant rester borné, il est possible d'écrire une condition de stabilité indépendante de α
- Pour un mode α fixé, on peut définir le **facteur d'amplification** comme :

$$\mathcal{G} = \frac{A^{n+1}}{A^n}$$

Condition de stabilité au sens de Von Neumann :

Un schéma est dit **stable au sens de Von Neumann** si le module du facteur d'amplification reste inférieur à l'unité :

$$|\mathcal{G}| \leq 1 \quad \forall \varphi_\alpha = k_\alpha \Delta x, \quad \alpha \in \left[-\frac{m-1}{2}, \frac{m-1}{2}\right]$$

Remarque : \mathcal{G} est un nombre complexe.

Analyse de stabilité du schéma centré

Rappel des expressions utilisées

- Expression du schéma centré :

$$u_i^{n+1} = u_i^n - \frac{C}{2} (u_{i+1}^n - u_{i-1}^n)$$

- Mode α **quelconque** de la décomposition en série de Fourier de u_i^n :

$$u_i^n = A^n e^{ji\varphi}$$

Remplacement du mode dans l'équation du schéma centré

$$A^{n+1} e^{ji\varphi} = A^n e^{ji\varphi} - \frac{C}{2} A^n (e^{j(i+1)\varphi} - e^{j(i-1)\varphi})$$

Soit, en divisant par $e^{ji\varphi}$:

$$A^{n+1} = A^n - \frac{C}{2} A^n (e^{j\varphi} - e^{-j\varphi})$$

Analyse de stabilité du schéma SOC-EE

Facteur d'amplification

$$\begin{aligned}
 \mathcal{G} &= 1 - \frac{\mathcal{C}}{2} (e^{j\varphi} - e^{-j\varphi}) \\
 &= 1 - \frac{\mathcal{C}}{2} \{ \cos \varphi + j \sin \varphi - [\cos(-\varphi) + j \sin(-\varphi)] \} \\
 &= 1 - \frac{\mathcal{C}}{2} [\cos \varphi + j \sin \varphi - (\cos \varphi - j \sin \varphi)] \\
 &= 1 - \frac{\mathcal{C}}{2} \times 2j \sin \varphi \\
 &= 1 - j\mathcal{C} \sin \varphi
 \end{aligned}$$

Norme du facteur d'amplification :

$$|\mathcal{G}| = \sqrt{1^2 + (\mathcal{C} \sin \varphi)^2} = \sqrt{1^2 + \mathcal{C}^2 \sin^2 \varphi} \geq 1$$

Le schéma centré est donc **inconditionnellement instable** !

Analyse de stabilité du schéma décentré amont

Rappel de l'expression du schéma décentré amont

$$u_i^{n+1} = u_i^n - \mathcal{C} (u_i^n - u_{i-1}^n)$$

Injection de l'expression d'un mode dans le schéma décentré

En suivant la même méthodologie que pour le schéma centré, on obtient :

$$A^{n+1} e^{ji\varphi} = A^n e^{ji\varphi} - \mathcal{C} A^n (e^{ji\varphi} - e^{j(i-1)\varphi})$$

Puis, en divisant par $e^{ji\varphi}$:

$$\begin{aligned} A^{n+1} &= A^n - \mathcal{C} A^n (e^0 - e^{-j\varphi}) \\ &= A^n - \mathcal{C} A^n (1 - e^{-j\varphi}) \end{aligned}$$

Analyse de stabilité du schéma FOB-EE

Calcul du facteur d'amplification :

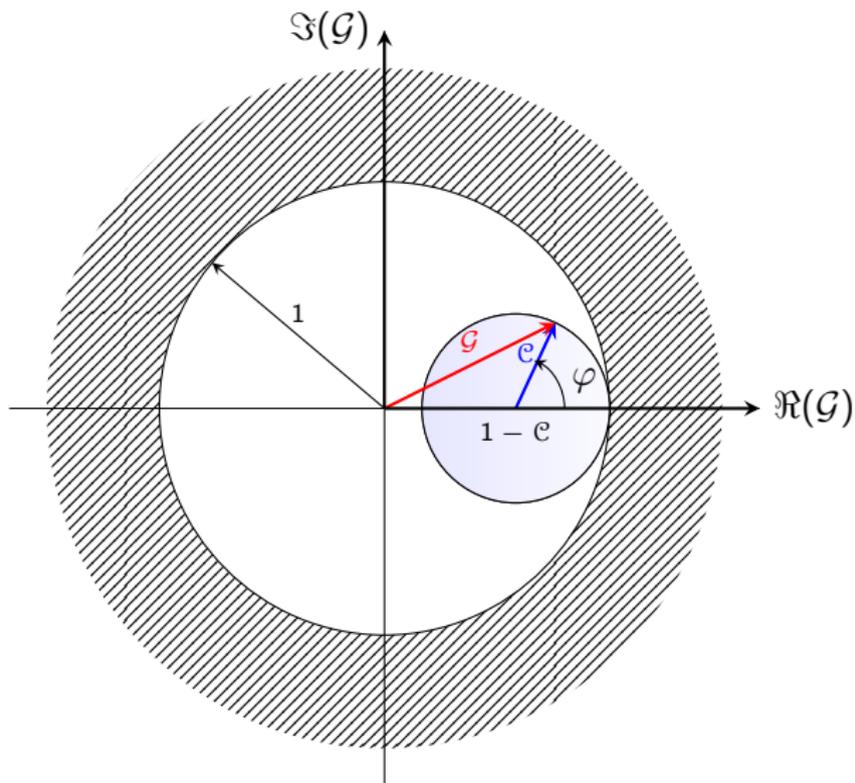
$$\begin{aligned}
 \mathcal{G} &= 1 - \mathcal{C} (1 - e^{-j\varphi}) \\
 &= 1 - \mathcal{C} \{1 - [\cos(-\varphi) + j \sin(-\varphi)]\} \\
 &= 1 - \mathcal{C} [1 - (\cos \varphi - j \sin \varphi)] \\
 &= 1 - \mathcal{C} + \mathcal{C} \cos \varphi - j \mathcal{C} \sin \varphi
 \end{aligned}$$

Décomposition de \mathcal{G} en parties réelle / imaginaire :

$$\begin{aligned}
 \Re(\mathcal{G}) &= (1 - \mathcal{C}) + \mathcal{C} \cos \varphi \\
 \Im(\mathcal{G}) &= -\mathcal{C} \sin \varphi
 \end{aligned}$$

C'est l'équation paramétrique d'un cercle dans le plan complexe, centré en $(1 - \mathcal{C})$ et de rayon \mathcal{C} .

Stabilité du schémas FOB-EE dans le plan complexe



Analyse de stabilité du schéma FOB-EE

Etude de la stabilité en fonction de \mathcal{C}

Par définition, le module de \mathcal{G} s'écrit :

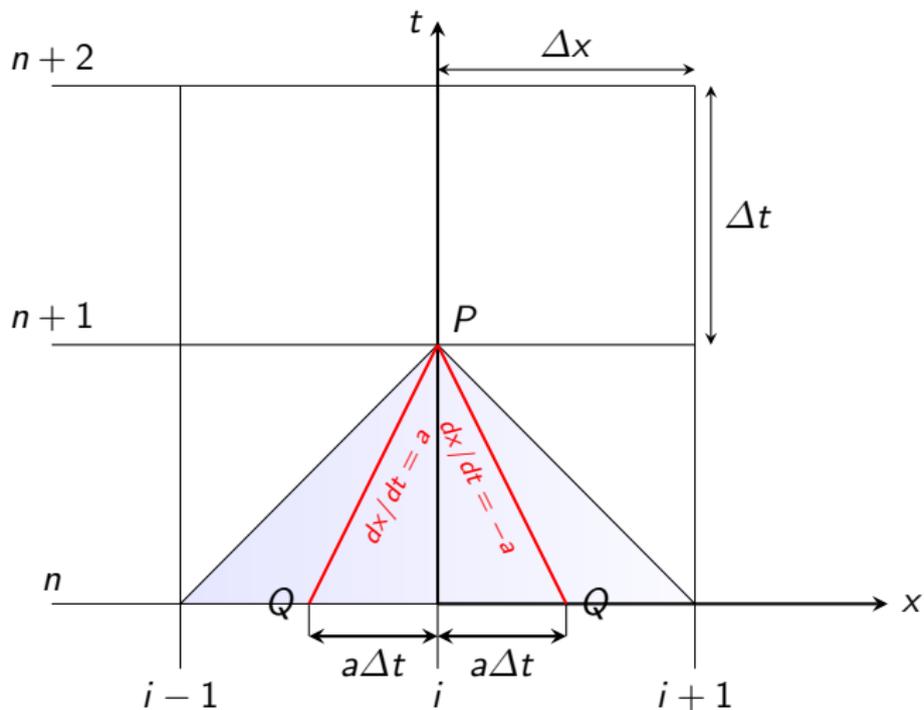
$$|\mathcal{G}| = \sqrt{\Re(\mathcal{G})^2 + \Im(\mathcal{G})^2}$$

Pour que le schéma soit stable, ce module doit rester inférieur à l'unité, or :

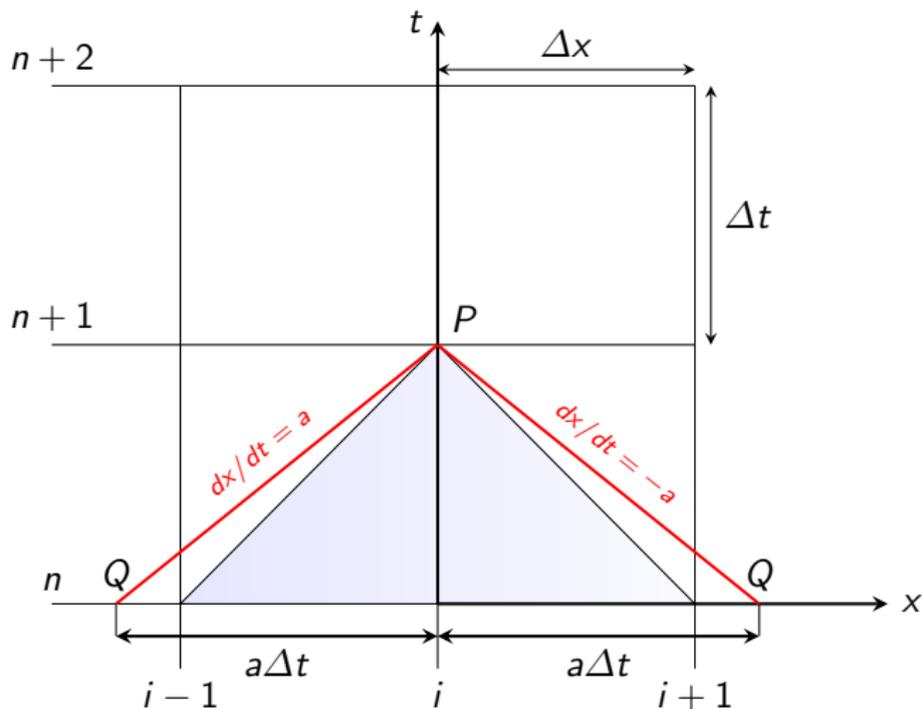
- Dans le plan complexe, le lieu des points \mathcal{G} en fonction du nombre d'ondes réduit φ est un cercle de rayon \mathcal{C} et de centre $1 - \mathcal{C}$.
- Par conséquent, la condition à vérifier pour que, $\forall \varphi$, $|\mathcal{G}| \leq 1$ est $0 \leq \mathcal{C} \leq 1$

On dit que ce schéma décentré amont est **conditionnellement stable**.

Configuration $\mathcal{C} \leq 1$



Configuration $\mathcal{C} \geq 1$



Interprétation géométrique de la stabilité

Lien entre \mathcal{C} et domaines de dépendance des équations modèle et discrète

- Pour que le schéma reste stable, il faut choisir \mathcal{C} tel que le **domaine de dépendance de l'EDP modèle** (délimité par les lignes caractéristiques rouges) soit entièrement inclu dans le **domaine de dépendance de l'équation discrète** (triangle bleu).
- Lorsque $\mathcal{C} \leq 1$, le **schéma numérique a accès toute l'information provenant de l'équation physique modèle** influant sur l'état u_i^{n+1} .
- Par analogie avec la terminologie utilisée en mécanique des fluides, on peut dire que l'information physique utile pour l'équation de convection provient toujours de l'**amont** (schéma « **upwind** »).
- Dans le cas contraire, de l'information va manquer au schéma numérique et l'erreur entre la solution exacte $u(x_i, t^n)$ de l'EDP et la solution discrète u_i^n risque de s'amplifier au cours du temps, menant à un comportement **instable**.

Le schéma upstream FOU-EE

Si on se place dans le cas $a > 0$:

- Le schéma FOF-EE allant dans ce cas chercher toute l'information en aval, il sera **inconditionnellement instable**.
- Le schéma FOB-EE va bien chercher l'information en prenant en compte son sens de propagation et sera **conditionnellement stable**.

Point de nomenclature

- Dans les exemples pris jusqu'à maintenant $a > 0$: le schéma FOB-EE peut être qualifié de « upwind » et désigné par l'acronyme FOU-EE (First Order Upwind Explicit Euler).
- Si on avait eu $a < 0$, alors ce serait le schéma FOF-EE qui aurait été qualifié d'« upwind » et désigné par FOU-EE.

Dans la littérature, les schémas d'ordre un décentrés par rapport au sens de propagation de l'écoulement sont souvent désignés par « FOU ».

Construction du schéma de Lax-Wendroff

Objectif : construire un schéma stable d'ordre deux

Idée de base :

- Partir d'un **schéma centré**, précis à l'ordre 2 mais instable
- Ajouter un terme dissipatif **stabilisateur**

Méthodologie

Développement de Taylor-Lagrange à l'ordre 3 en temps de la solution :

$$u_i^{n+1} = u_i^n + \Delta t \left(\frac{\partial u}{\partial t} \right) \Big|_i + \frac{(\Delta t)^2}{2!} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \right) \Big|_i + \mathcal{O}(\Delta t)^3$$

Il faut alors remplacer les dérivées partielles par rapport au temps par leur contrepartie spatiale.

Construction du schéma de Lax-Wendroff

Dérivées temporelles en fonction des dérivées spatiales

- Dérivée première par rapport au temps :

$$\frac{\partial u}{\partial t} + a \frac{\partial u}{\partial x} = 0 \Rightarrow \frac{\partial u}{\partial t} = -a \frac{\partial u}{\partial x}$$

- Dérivée seconde par rapport au temps :

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + a \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right) = 0$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + a \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial u}{\partial t} \right) = 0$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + a \frac{\partial}{\partial x} \left(-a \frac{\partial u}{\partial x} \right) = 0$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - a^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0$$

Construction du schéma de Lax-Wendroff

Dérivées temporelles en fonction des dérivées spatiales

On vient d'établir les expressions suivantes :

$$\begin{aligned}\frac{\partial u}{\partial t} &= -a \frac{\partial u}{\partial x} \\ \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} &= a^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\end{aligned}$$

Remplacement de ces expressions dans le développement de Taylor-Lagrange en temps à l'ordre 3 de u_i^{n+1} :

$$u_i^{n+1} = u_i^n - a\Delta t \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{a^2 \Delta t^2}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \mathcal{O}(\Delta t)^3$$

$$u_i^{n+1} = u_i^n - a\Delta t \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{a^2 \Delta t^2}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \mathcal{O}(\Delta t)^3$$

Construction du schéma de Lax-Wendroff

Discrétisation des dérivées spatiales

- Pour la dérivée première on reprend la formule centrée déjà établie :

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{u_{i+1}^n - u_{i-1}^n}{2\Delta x}$$

- La dérivée seconde utilise également une formule centrée (cf. TD) :

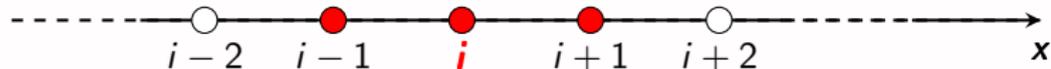
$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n}{2(\Delta x)^2}$$

Schéma de Lax-Wendroff

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} = -a \left(\frac{u_{i+1}^n - u_{i-1}^n}{2\Delta x} \right) + a^2 \Delta t \left(\frac{u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n}{2(\Delta x)^2} \right)$$

Schéma de Lax-Wendroff : synthèse

Stencil et écriture alternative



On peut également écrire le schéma de Lax-Wendroff sous la forme :

$$u_i^{n+1} = u_i^n - \frac{c}{2} (u_{i+1}^n - u_{i-1}^n) + \frac{c^2}{2} (u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n)$$

Quelques remarques...

- Le schéma de Lax-Wendroff a été **très largement utilisé pour réaliser des études d'aérodynamique** dans les années 90-2000
- Ce schéma fait intervenir de **manière intriquée l'espace et le temps** : il n'est pas possible de distinguer formellement les étapes de discrétisation spatiale et d'intégration temporelle.

Schéma Lax-Wendroff, CI "créneau"

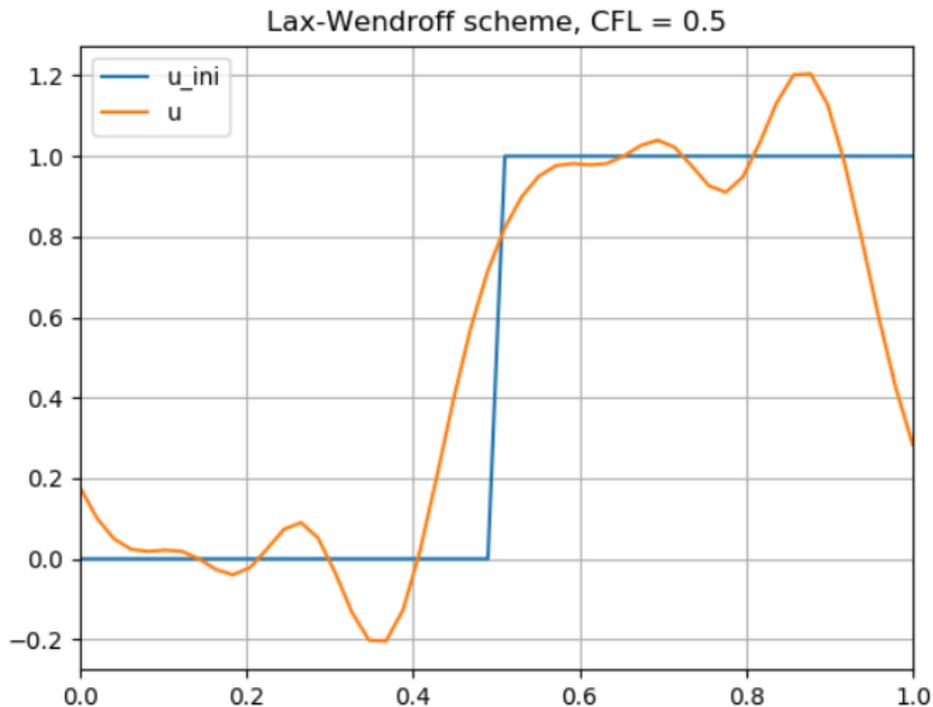


Schéma Lax-Wendroff, CI sinusoidale $\theta = 1$

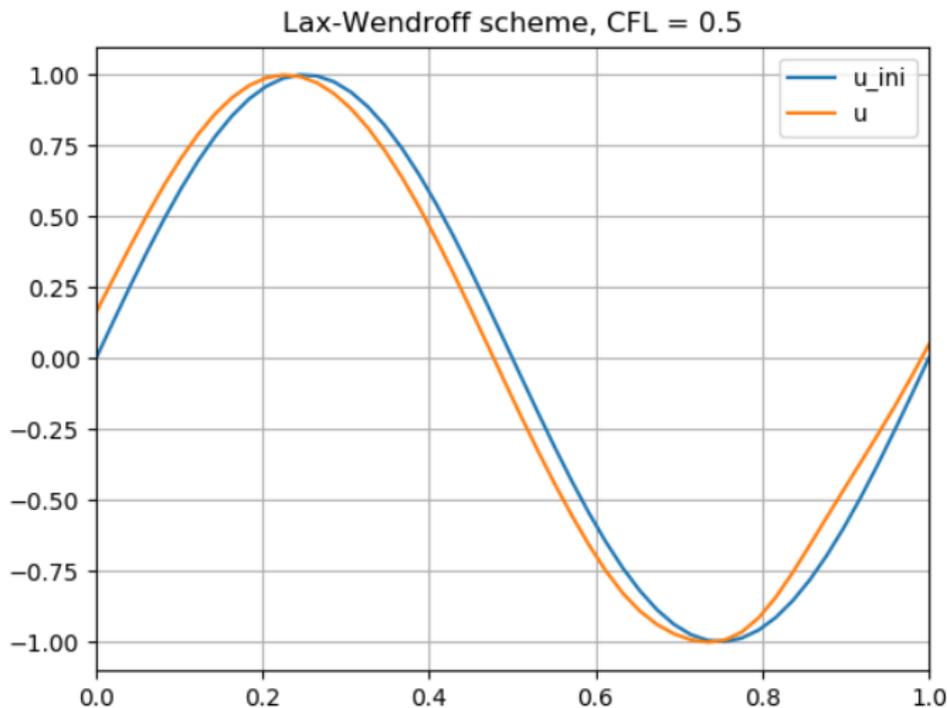


Schéma Lax-Wendroff, CI sinusoidale $\theta = 2$

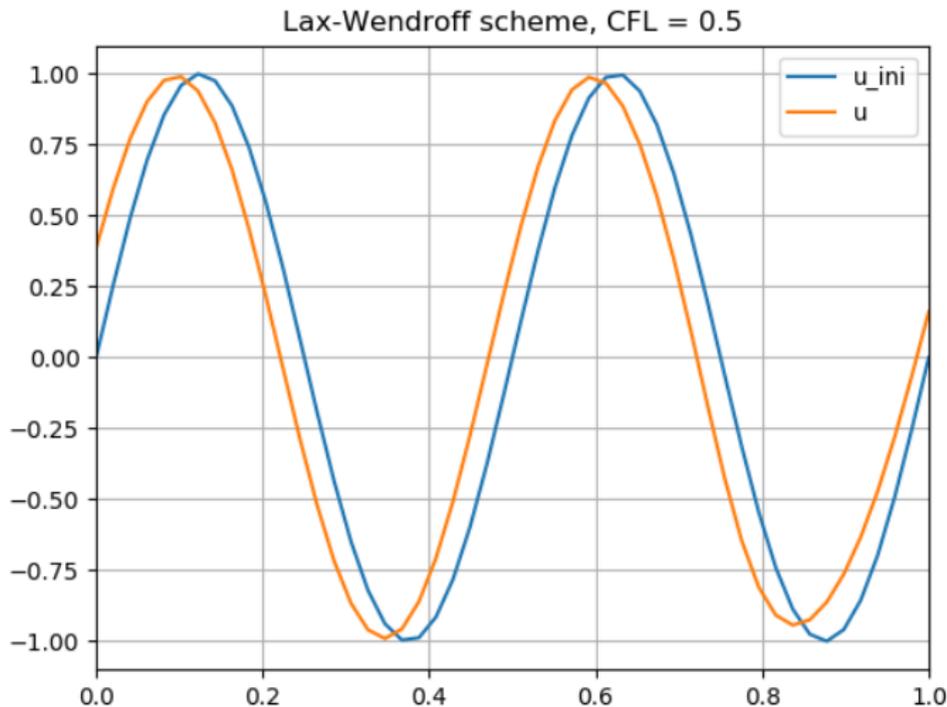


Schéma Lax-Wendroff, CI sinusoidale $\theta = 3$

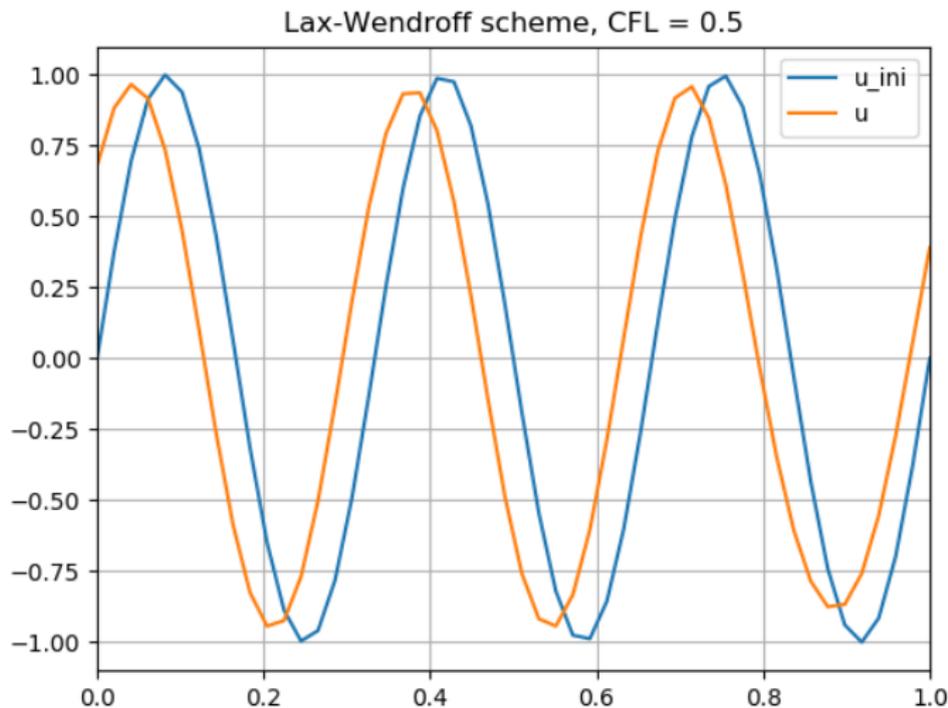
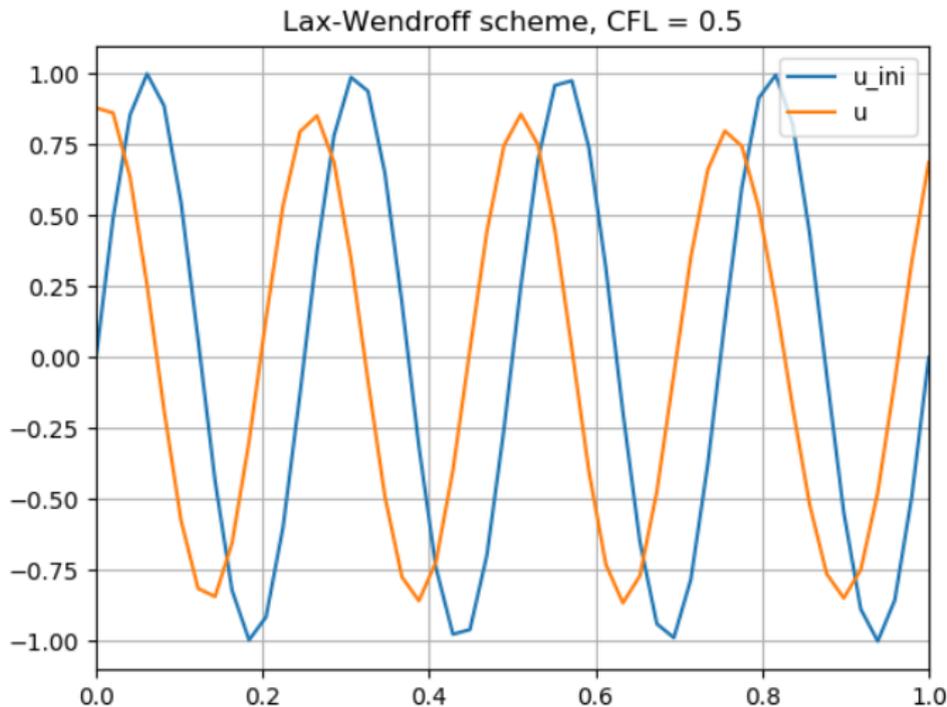
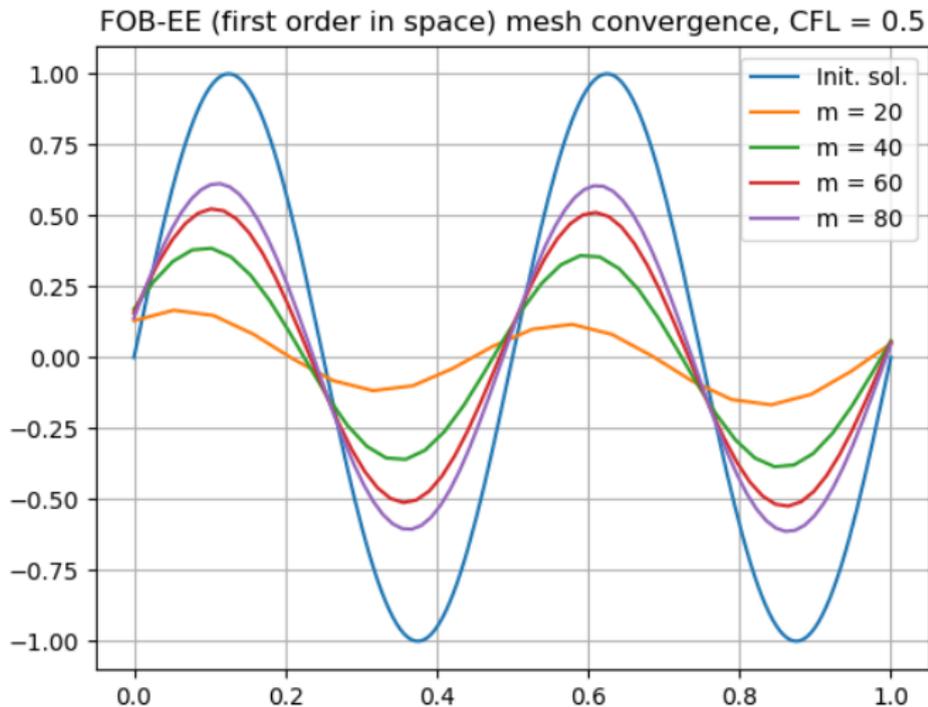


Schéma Lax-Wendroff, CI sinusoidale $\theta = 4$

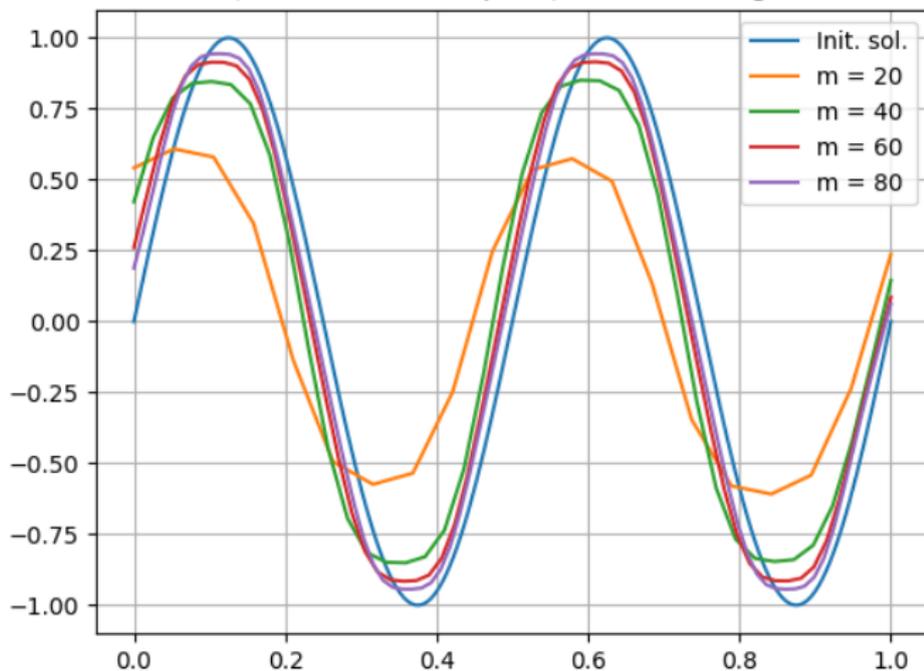


Ordre en espace et convergence en maillage



Ordre en espace et convergence en maillage

Lax-Wendroff (second order in space) mesh convergence, CFL = 0.5



Quelques observations sur les effets de l'ordre en espace des schémas sur la solution

Vitesse de convergence

- La vitesse de convergence du schéma est **bien plus rapide à l'ordre deux** (quadratique) qu'à l'ordre un (linéaire).

Lien entre ordre et type d'erreur

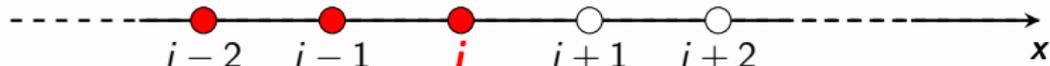
- Schéma d'**ordre un** : l'erreur dominante consiste en un **amortissement** de la solution, analogue à ce qui pourrait se passer si l'on ajoutait à l'équation un terme de diffusion physique.
- Schéma d'**ordre deux** : l'erreur dominante sur les solutions sinusoïdales est un **déphasage** de la solution. Sur le créneau, on observe la présence d'**oscillations** marquées lors des variations brusques de la solution.
- Avec les deux schémas, les erreurs **affectent davantage les petites longueurs d'ondes** que les grandes.

Schéma de Beam-Warming

Construction du schéma

- Le schéma de Beam-Warming (1976) reprend globalement le **même principe de construction que le schéma de Lax-Wendroff**
- les discrétisations centrées sont simplement remplacées par des discrétisations **décentrées**.

Stencil et écriture du schéma



On peut écrire le schéma de Beam-Warming sous la forme :

$$u_i^{n+1} = u_i^n - \frac{c}{2} (3u_i^n - 4u_{i-1}^n + u_{i-2}^n) + \frac{c^2}{2} (u_i^n - 2u_{i-1}^n + u_{i-2}^n)$$

Schéma Beam-Warming, CI "créneau"

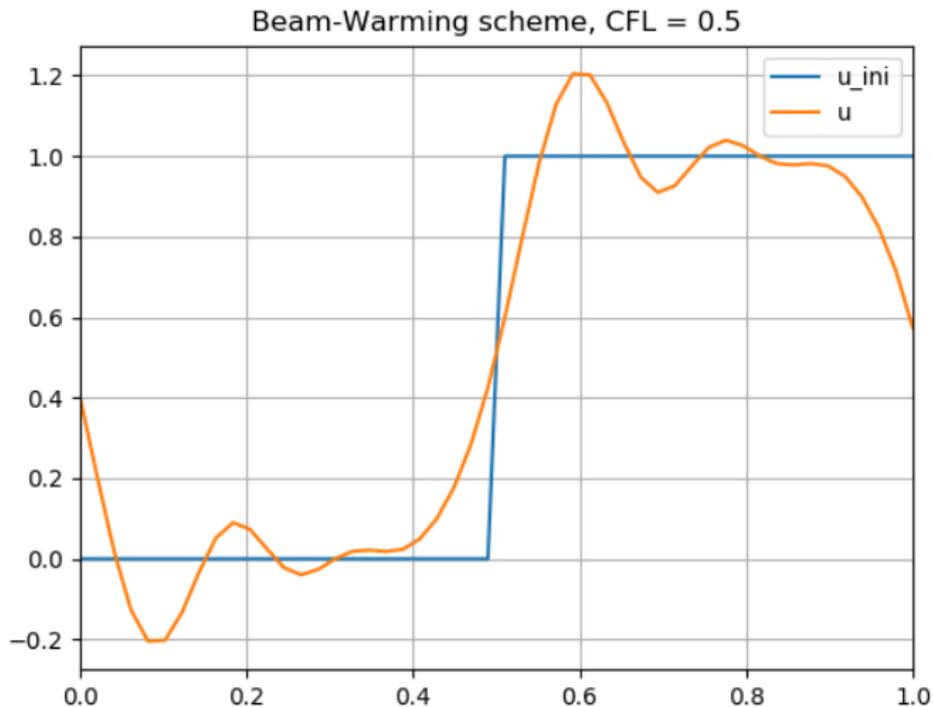
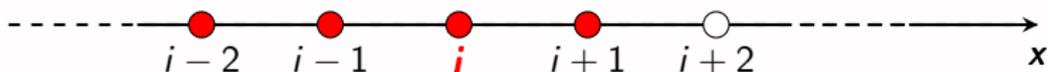


Schéma UPO2VF

Construction et caractéristiques

- Ce schéma d'ordre deux en espace peut s'écrire de manière indépendante de l'intégration temporelle
- C'est l'expression DF d'un schéma VF upwind très classique (étudié plus tard dans ce cours)

Stencil et écriture du schéma

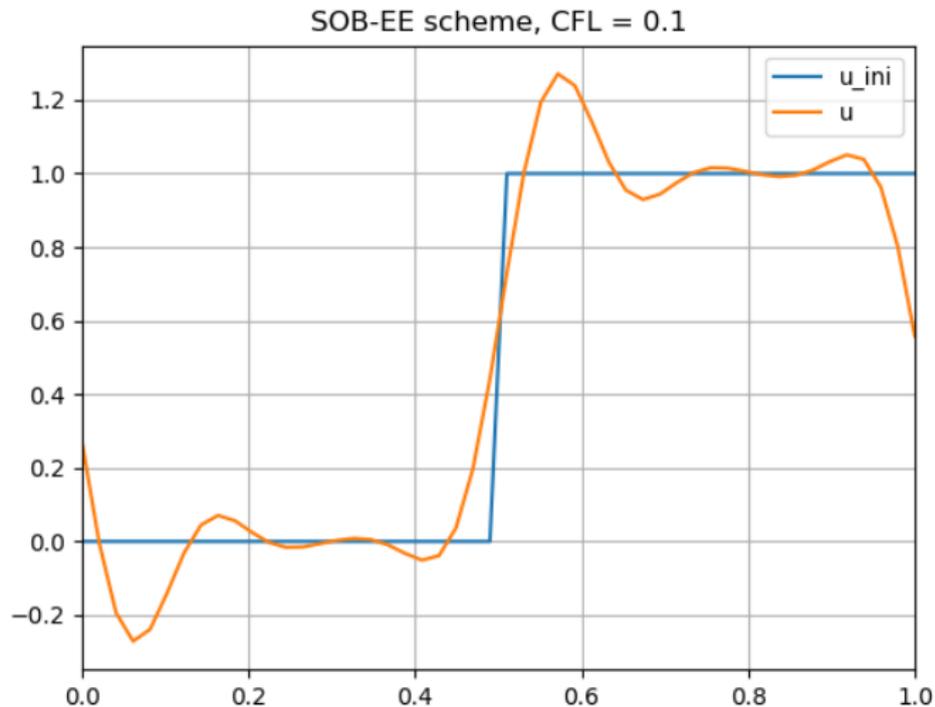


$$\left(\frac{\partial u}{\partial x} \right) \Big|_i = -\frac{1}{4\Delta x} (u_{i+1} + 3u_i - 5u_{i-1} + u_{i-2})$$

Avec une intégration Euler explicite, on obtient le schéma UPO2VF-EE :

$$u_i^{n+1} = u_i^n - \frac{C}{4} (u_{i+1}^n + 3u_i^n - 5u_{i-1}^n + u_{i-2}^n)$$

Schéma UPO2VF-EE ($C=0.1!$), CI "créneau"



Synthèse 1/2

Notions générales

- Développements de Taylor-Lagrange, stencils quelconques \Rightarrow combinatoire potentiellement infinie de schémas DF.
- Pour obtenir une simulation et non un simulacre, le schéma doit :
 - ▶ être convergent (consistance + stabilité, théorème de Lax pour les schémas linéaires)
 - ▶ être "suffisamment précis" (dépend du pb. physique et param. numériques)

\Rightarrow nbr. réduit de schémas vraiment utilisables en pratique !

- L'étude de la stabilité des schémas peut se faire à l'aide de la puissante méthode de Von-Neumann
- La stabilité des schémas utilisés pour discrétiser l'équation de convection est conditionnée au respect de la propagation de l'information (via valeur du nombre de CFL, \mathcal{C})

Synthèse 2/2

Bilan des schémas DF étudiés

- Schéma FOU-EE est CS mais très dissipatif (ordre un en espace)
- Les schémas de LW et BM sont CS et plus précis (ordre deux en espace). Dans ces schémas, discrétisation spatiale et intégration temporelle ne peuvent être formellement séparées.
- Le schéma UPO2VF-EE est CS, d'ordre deux en espace et permet de traiter séparément discrétisation spatiale et intégration temporelle. La condition de stabilité de ce schéma est cependant plus sévère que pour LW et BW.
- Tous les schémas d'ordre deux étudiés font apparaître des oscillations de la solution, ce qui peut se révéler problématique pour certaines applications.

Perspectives

Quelques questions qui peuvent se poser à la fin de cette première partie...

- Est-il possible d'élargir le domaine de stabilité des schémas présentés (en particulier UPO2VF) ?
- D'où viennent les oscillations observées sur les solutions d'ordre deux ? Est-il possible de les supprimer ?
- Plus généralement, est-il possible d'expliquer de manière rigoureuse les erreurs observées sur les solutions ?

... qui trouveront leurs réponses dans la suite du cours !

- Présentation de quelques schémas d'intégration temporelle classiques.
- Etude spectrale des schémas semi-discrets et discrets, introduction de la notion d'équation équivalente.
- Introduction des notions de monotonie et de limiteurs.