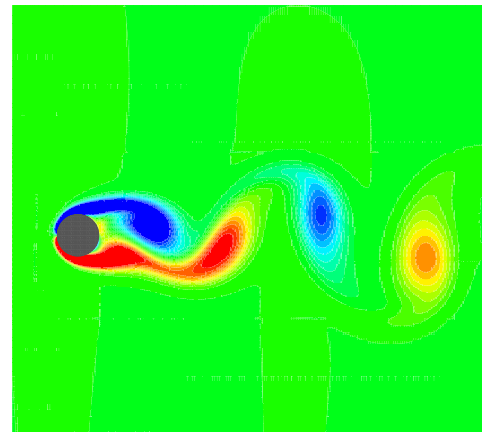
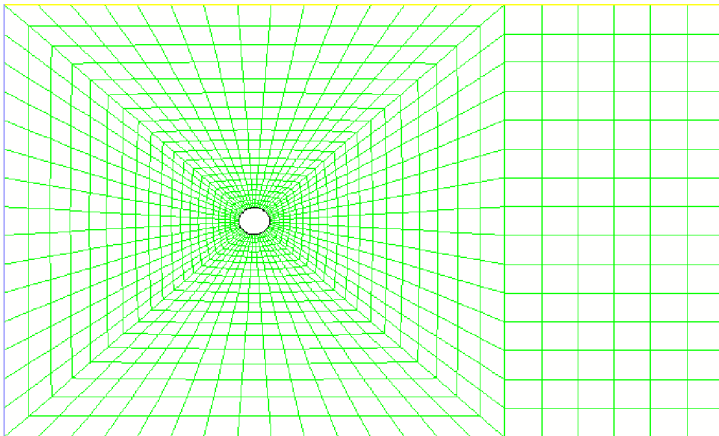




Méthodes Numériques pour la Mécanique

POLYCOPE DE COURS / TD - UE 703 M1 Energie



Olivier BOTELLA

LEMTA - Université de Lorraine - CNRS
2 avenue de la Forêt de Haye, TSA 60604
54518 Vandoeuvre (France)

Email : Olivier.Botella@univ-lorraine.fr

Lectures web page : <https://arche.univ-lorraine.fr/course/view.php?id=6745>

Différences finies

3 Introduction naïve aux différences finies

3.1 Exemple : fléchissement d'une poutre

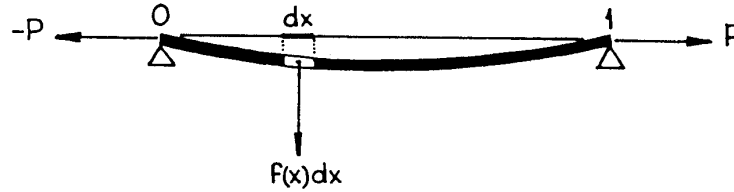


Fig. 3.1. Fléchissement d'une poutre.

Considérons le problème représenté sur la figure 3.1, et que l'on retrouve dans de nombreux bouquins (e.g. [2, 10]) : une poutre de longueur $l = 1$, étirée selon son axe par une force P et simplement appuyée à ses extrémités 0 et 1, est soumise à une charge transversale $f(x)$ par unité de longueur dx . La théorie des poutres nous dit que le déplacement $u(x)$ au point x est solution du *problème aux limites* :

$$-u''(x) + c(x)u(x) = f(x), \quad \text{dans } \Omega =]0, 1[, \quad (3.1a)$$

$$u(0) = 0, \quad u(1) = 0. \quad (3.1b)$$

avec $c(x) = P/EI(x)$, où E est le module d'Young de la poutre et $I(x)$ le moment principal d'inertie de la section de la poutre au point x .

Sauf dans de très rares situations, on ne connaît pas de solution analytique à un problème aux limites. Les méthodes d'approximation numériques, et en particulier la méthode des différences finies, permettent d'approcher les valeurs de la solution d'aussi près qu'on veut.

3.2 Résolution par la méthode des différences finies

Afin de *discrétiser* le problème (3.1), on définit l'ensemble

$$\Omega_h = \{x_i = (i-1)h, i = 1, \dots, N\}, \quad \text{avec } h = \frac{1}{N-1}, \quad (3.2)$$

comme le *maillage* de Ω dont le *pas de maillage*, ou *taille* de la maille, est h . Ce maillage est représenté sur la figure 3.2 ; les points x_i sont appelés les *nœuds* du maillage.

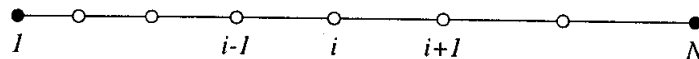


Fig. 3.2. Maillage utilisé pour le problème de la poutre. Le symbole $\circ$ désigne les nœuds *intérieurs* et $\bullet$ désigne les nœuds de la frontière.

La valeur du pas h est destinée à tendre vers 0. La méthode des différences finies est une façon d'obtenir une approximation $\{u_i, i = 1, \dots, N\}$ de la solution $u(x_i)$ aux nœuds x_i . D'après les conditions aux limites (3.1b), on a $u_1 = u_N = 0$, et il reste à chercher le vecteur

$$U = \begin{pmatrix} u_2 \\ \vdots \\ u_{N-1} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{N-2}, \quad (3.3)$$

tel que les u_i soit une “bonne” approximation de la solution $u(x_i)$ aux points *intérieurs* du maillage. De plus, la qualité de l’approximation aux différences finies sera d’autant meilleure que $h \rightarrow 0$, *i.e.* que le nombre de points N du maillage est grand.

Pour cela, on va établir une approximation par différences finies de l’opérateur $L = -d^2/dx^2 + c(x)$ par application de la formule de Taylor :

$$u(x_i + h) = u(x_i) + hu'(x_i) + \frac{h^2}{2!}u''(x_i) + \frac{h^3}{3!}u'''(x_i) + \frac{h^4}{4!}u^{(4)}(x_i) + \frac{h^5}{5!}u^{(5)}(x_i + \theta_i^+ h), \quad (3.4a)$$

$$u(x_i - h) = u(x_i) - hu'(x_i) + \frac{h^2}{2!}u''(x_i) - \frac{h^3}{3!}u'''(x_i) + \frac{h^4}{4!}u^{(4)}(x_i) - \frac{h^5}{5!}u^{(5)}(x_i + \theta_i^- h), \quad (3.4b)$$

avec $\theta_i^+, \theta_i^- \in]0, 1[$. En combinant ces deux expressions pour éliminer $u'(x_i)$, on obtient l’expression :

$$u''(x_i) = \underbrace{\frac{u(x_i + h) - 2u(x_i) + u(x_i - h)}{h^2}}_{\text{formule aux différences finies}} + \underbrace{\frac{h^2 R(x_i)}{h^2}}_{\text{Reste ou résidu}}, \quad (3.5a)$$

tel que

$$R(x_i) = \frac{-1}{12}u_i^{(4)} + \frac{h}{120}(u^{(5)}(x_i + \theta_i^+ h) - u^{(5)}(x_i - \theta_i^- h)). \quad (3.5b)$$

On rappelle les définitions suivantes :

Définition 3.1 (Grand “Oh” et petit “oh”).

On dit qu’une fonction f est telle que $f = \mathcal{O}(g)$ s’il existe $K \geq 0$ tel que

$$\frac{|f|}{|g|} \leq K \quad \text{lorsque } h \rightarrow 0.$$

D’autre part, $f = o(g)$ si

$$\frac{|f|}{|g|} \rightarrow 0 \quad \text{lorsque } h \rightarrow 0.$$

On utilisera essentiellement les grands “Oh” dans la suite du cours.

D’après ces définitions, $R(x_i) = -u^{(4)}/12 + \mathcal{O}(h)$, donc le résidu est une fonction bornée. On pourrait aussi écrire que

$$u''(x_i) = \frac{u(x_i + h) - 2u(x_i) + u(x_i - h)}{h^2} + \mathcal{O}(h^2). \quad (3.6)$$

Il ne reste plus qu’à reporter la formule (3.5a) dans l’équation différentielle (3.1a). En tenant compte des conditions aux limites (3.1b), soit $u_1 = u_N = 0$, on obtient le système linéaire

$$\begin{cases} \frac{2u_2 - u_3}{h^2} + c_2 u_2 = f_2 + h^2 R_2, \\ \frac{-u_{i-1} + 2u_i - u_{i+1}}{h^2} + c_i u_i = f_i + h^2 R_i, & \text{pour } i = 3, \dots, N-2, \\ \frac{-u_{N-2} + 2u_{N-1}}{h^2} + c_{N-1} u_{N-1} = f_{N-1} + h^2 R_{N-1}, \end{cases} \quad (3.7)$$

dans lequel on a posé $c_i = c(x_i)$, $f_i = f(x_i)$, et $R_i = R(x_i)$. Ce système s’écrit sous la forme matricielle

$$\mathcal{A}_h U = F + \tau_h, \quad (3.8a)$$

où $\mathcal{A}_h$ est la matrice tridiagonale définie par

$$\mathcal{A}_h = \frac{1}{h^2} \begin{pmatrix} 2 + c_2 h^2 & -1 & & & & \\ -1 & 2 + c_3 h^2 & -1 & & & \\ & \cdot & \cdot & \cdot & & \\ & & -1 & 2 + c_i h^2 & -1 & \\ & & & \cdot & \cdot & \cdot \\ & & & & -1 & 2 + c_{N-2} h^2 & -1 \\ & & & & & -1 & 2 + c_{N-1} h^2 \end{pmatrix}, \quad (3.8b)$$

et en posant

$$F = \begin{pmatrix} f_2 \\ \vdots \\ f_{N-1} \end{pmatrix}, \quad \tau_h = h^2 \begin{pmatrix} R_2 \\ \vdots \\ R_{N-1} \end{pmatrix}. \quad (3.8c)$$

Le vecteur τ_h , qui tend vers 0 lorsque $h \rightarrow 0$, est naturellement conduit à être négligé : on aura donc remplacé la résolution du problème aux limites linéaire (3.1) par le système algébrique linéaire

$$\mathcal{A}_h U = F. \quad (3.9)$$

Ce système correspond à la *discrétisation* du problème (3.1) par la méthode des différences finies. Il est souvent appelé *schéma aux différences finies*.

Le vecteur τ_h est appelé *résidu* ou erreur de *troncature* du schéma. En pratique, il est toujours négligé dans l'expression du schéma. Néanmoins, il donne des renseignements sur la qualité de l'approximation obtenue : ici $\tau_h = \mathcal{O}(h^2)$, on dit alors que le schéma est précis au second ordre. Ces notions seront énoncées de manière plus formelle dans le paragraphe 5.4.

Exercice 3.2 (Trigonométrie pénible mais résultat important). On considère la matrice tridiagonale de taille $N \times N$:

$$\mathcal{K} = \begin{pmatrix} 2 & -1 & & & \\ -1 & 2 & -1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -1 & 2 & -1 \\ & & & -1 & 2 \end{pmatrix}. \quad (3.10)$$

1. On pose $h = 1/(N+1)$. Montrez que¹ les valeurs propres de $\mathcal{K}$ sont données par :

$$\lambda_k = 2 - 2 \cos k\pi h, \quad \text{pour } k = 1, \dots, N, \quad (3.12a)$$

dont le vecteur propre associé est

$$\mathbf{x}_k = (\sin jk\pi h, j = 1, \dots, N)^T. \quad (3.12b)$$

2. En remarquant que :

$$\cos N\pi h = -\cos \pi h,$$

déduire de la question précédente que le nombre de conditionnement de $\mathcal{K}$ s'écrit

$$\chi(\mathcal{K}) = \frac{1 + \cos \pi h}{1 - \cos \pi h},$$

et que, lorsque $h \rightarrow 0$,

$$\chi(\mathcal{K}) \simeq \frac{4}{\pi^2 h^2}.$$

3. Que pouvez-vous déduire de ces questions sur la performance des méthodes du gradient appliquées à la résolution du système linéaire issu de l'approximation par différences finies du problème (3.1) avec $c(x) \equiv 0$?
4. Question subsidiaire : plus généralement, on considère la matrice de taille $N \times N$:

$$\begin{pmatrix} b & c & & & \\ a & b & c & & \\ & \cdot & \cdot & \cdot & \\ & & a & b & c \\ & & & \cdot & \cdot & \cdot \\ & & & & a & b & c \\ & & & & & a & b \end{pmatrix}$$

¹ On rappelle à ce sujet les formules

$$\begin{aligned} \sin(a \pm b) &= \sin a \cos b \pm \cos a \sin b, \\ \cos(a \pm b) &= \cos a \cos b \mp \sin a \sin b, \\ \sin(a - b) + \sin(a + b) &= 2 \sin a \cos b. \end{aligned}$$

Montrez que, pour $k = 1, 2, \dots, N$, la $k^{\text{ième}}$ valeur propre est :

$$\lambda_k = b - 2(a c)^{1/2} \cos \lambda_k, \quad \alpha_k = \frac{k\pi}{N+1},$$

de vecteur propre associé :

$$\mathbf{x}_k = \left(\left(\frac{a}{c} \right)^{\frac{j-1}{2}} \sin j \alpha_k, \ j = 1, \dots, N. \right)$$

4 Notions sur les équations aux dérivées partielles (EDP)

4.1 Les équations de bilan de la mécanique

On rappelle que Ω désigne le domaine physique (ou de calcul), qui est un sous-domaine de $\mathbb{R}^2$ ou $\mathbb{R}^3$. On désignera sa frontière par $\partial\Omega$, Γ , ou S .

Le but de cette partie est d'établir la loi de bilan d'une propriété ϕ quelconque d'une particule de matière fluide ou solide, par exemple $\phi = T$ sa température. On supposera que ϕ est définie par unité de masse, et ρ désigne la masse volumique. La loi de bilan pour ϕ est traditionnellement exprimée pour un volume $V \subset \Omega$ constitué des mêmes particules matérielles, et qui évolue dans Ω avec la vitesse $\mathbf{v}$. On aura besoin de la relation *fondamentale* suivante, énoncée sous la forme d'un théorème :

Théorème 4.1 (Théorème du transport de Reynolds).

$$\forall V \subset \Omega, \quad \frac{d}{dt} \int_V \rho \phi \, dV = \int_V \left(\frac{\partial \rho \phi}{\partial t} + \nabla \cdot \rho \phi \mathbf{v} \right) dV. \quad (4.1)$$

Dans le volume matériel V , la loi de conservation exprime que ϕ peut uniquement varier sous les effets d'échange entre les particules matérielles et la présence de sources (ou puits) externes. La loi de bilan pour la quantité ϕ peut alors s'exprimer comme :

$$\text{Taux de variation} = \text{Echanges} + \text{Sources},$$

qui s'écrit sous forme mathématique :

$$\underbrace{\frac{d}{dt} \int_V \rho \phi \, dV}_{I_1} = \underbrace{\int_S \mathbf{t} \cdot \mathbf{n} \, dS}_{I_2} + \underbrace{\int_V q \, dV}_{I_3}, \quad (4.2)$$

tel que

- I_1 représente la variation de la grandeur physique au cours du temps.
- I_2 désigne le flux au travers de la surface S , dues aux forces de pression ou aux contraintes agissant sur le volume V , qui sont représentées par le vecteur $\mathbf{t}$.
- I_3 représente la production ou dissipation à l'intérieur de V , dues à des forces extérieures q (*e.g.* gravité $q \equiv \rho g$, forces centrifuges ou électromagnétiques, ...) agissant sur V .

En utilisant le théorème du transport 4.1, on obtient la *forme intégrale* d'une loi de bilan :

$$\int_V \frac{\partial \rho \phi}{\partial t} + \int_S (\rho \phi \mathbf{v} - \mathbf{t}) \cdot \mathbf{n} \, dS = \int_V q \, dV. \quad (4.3)$$

De plus, il est possible de transformer l'intégrale de surface en intégrale de volume en utilisant le théorème de Gauss :

Théorème 4.2 (Théorème de la divergence de Gauss).

Pour tout volume V dont la surface S est fermée, nous avons pour tout vecteur $\mathbf{u}$:

$$\int_V \nabla \cdot \mathbf{u} \, dV = \int_S \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} \, dS, \quad (4.4)$$

où $\mathbf{n}$ désigne la normale extérieure unitaire de S .

On obtient alors l'expression :

$$\int_V \left[\frac{\partial \rho \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \phi \mathbf{v} - \mathbf{t}) \right] dV = \int_V q \, dV, \quad (4.5)$$

d'où on déduit la *forme locale*¹ d'une loi de bilan, valable en tout point x de V :

¹ Cette forme est aussi qualifiée de "conservative", pour mettre en avant le lien avec la forme globale (4.3) qui est exprimée par le théorème de la divergence.

$$\frac{\partial \rho \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \phi \mathbf{v} - \mathbf{t}) = q, \quad (4.6)$$

qui prends alors la forme d'une *équation aux dérivées partielles (EDP)*.

Les formes intégrale (4.3) ou locale (4.6) représentent les formes génériques des équations de bilan de la mécanique.

Exemple 4.3 (Equation de conservation de la masse). L'équation de continuité en mécanique des fluides s'obtient en posant $\phi \equiv 1$, $\mathbf{t} \equiv \mathbf{0}$, et $q \equiv 0$ dans (4.6), soit :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0, \quad (4.7)$$

et dans le cas où la masse volumique est constante, on retrouve la contrainte d'incompressibilité :

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0.$$

Exemple 4.4 (Equation de Navier-Stokes). Pour la conservation de la quantité de mouvement d'un fluide Newtonien, on prend $\phi \equiv \mathbf{v}$ dans (4.6) et, par exemple, $q \equiv 0$. Lorsque $\mathbf{t}$ prend la forme du tenseur de Cauchy :

$$\mathbf{t} = -p\mathbf{I} + \boldsymbol{\tau}, \quad (4.8)$$

où $\mathbf{I}$ est l'identité et $\boldsymbol{\tau}$ le tenseur des contraintes visqueuses défini en (11.5), on obtient l'équation de Navier-Stokes

$$\frac{\partial \rho \mathbf{v}}{\partial t} + \nabla \cdot \rho \mathbf{v} \mathbf{v} = -\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}. \quad (4.9)$$

Exemple 4.5 (Equation de température). Pour des phénomènes de diffusion de la chaleur, le tenseur $\mathbf{t}$ suit la loi de Fourier

$$\mathbf{t} = \kappa \nabla T,$$

où T est la température et κ la conductivité thermique. En prenant $q \equiv 0$ et $\phi \equiv c_p T$, tel que c_p est la chaleur spécifique à pression constante, on obtient l'équation

$$\rho c_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{v} T) \right) = \kappa \nabla^2 T, \quad (4.10)$$

si l'on suppose que les divers coefficients prennent des valeurs constantes.

4.2 Une équation générique : l'équation d'advection-diffusion

Le principal objectif de la section précédente est de montrer que les équations fondamentales de la mécanique, qu'elles concernent la masse, l'énergie, la quantité de mouvement, *etc* ..., ont la même structure. Il est alors possible de développer des méthodes numériques générales pour résoudre (4.3) ou (4.6). Précisons que la forme locale (4.6) est plus particulièrement utilisée dans la méthode des *différences finies*. La forme intégrale (4.3) est à l'origine de la méthode des *volumes finis* et, dans une certaine mesure, des *éléments finis*.

Afin de simplifier notre présentation des méthodes numériques, on considérera dans un premier temps l'équation d'advection-diffusion² multidimensionnelle :

$$\frac{\partial \rho \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \phi \mathbf{v}) = \nabla \cdot (\nu \nabla \phi) + q, \quad (4.11)$$

qui est un modèle linéaire de la loi de bilan locale (4.6) pour la loi de Fick $\mathbf{t} = \nu \nabla \phi$, où ν est un coefficient de diffusion de signe positif strictement. Le terme de gauche représente le transport de ϕ par *advection* le long de l'écoulement, et le premier terme à droite représente le transport par *diffusion*.

Exercice 4.6. Déterminez la forme globale équivalente de (4.11).

Afin de simplifier encore plus le problème, nous allons considérer la version unidimensionnelle linéaire de cette équation, en posant $\rho \equiv 1$, $\phi \equiv u(x, t)$ et $\mathbf{v} \equiv a$, telle que a est une constante d'advection de signe quelconque, et $\nu > 0$ est supposé constant. L'équation d'advection prend alors la forme :

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \underbrace{a \frac{\partial u}{\partial x}}_{\text{Advection}} - \underbrace{\nu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}}_{\text{Diffusion}} = q. \quad (4.12)$$

² Elle est aussi connue sous le nom d'équation de *convection-diffusion*. A ne pas confondre avec l'équation de réaction-diffusion utilisée en combustion.

Une grande partie de la dynamique des solutions de problèmes de mécanique est présente dans cette simple équation linéaire. Par exemple, cherchons une solution de l'équation (4.12), sans terme de force ($q \equiv 0$), sous la forme du mode de Fourier

$$u(x, t) = \hat{u}(t) e^{ikx}, \quad i^2 = -1. \quad (4.13)$$

L'équation devient

$$\frac{d\hat{u}}{dt} + iak\hat{u} + \nu k^2 \hat{u} = 0,$$

soit

$$\hat{u}(t) = \hat{u}_0 e^{-(iak + \nu k^2)t},$$

où $\hat{u}_0$ est une condition initiale donnée. On obtient finalement la solution

$$u(x, t) = \hat{u}_0 \underbrace{e^{-\nu k^2 t}}_I \underbrace{e^{ik(x - at)}}_{II}, \quad (4.14)$$

telle que :

- I est un terme de diffusion ou *dissipation*, strictement décroissant en temps.
- II est un terme de propagation.

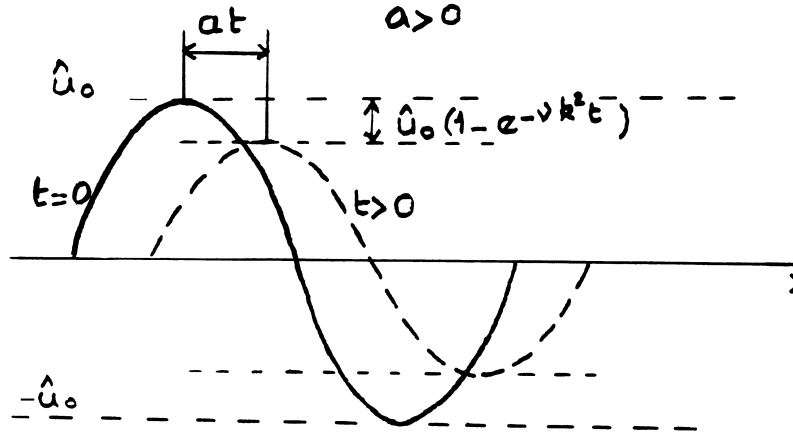


Fig. 4.1. Solution de l'équation d'advection-diffusion au temps initial (traits pleins) et au temps $t > 0$ (traits pointillés).

Le graphe de cette solution est représenté sur la figure 4.1. Deux cas particuliers sont à noter :

Remarque 4.7. Dans le cas $a \equiv 0$, Eq. (4.12) devient

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \nu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0, \quad (4.15)$$

et la solution s'écrit

$$u(x, t) = \hat{u}_0 e^{-\nu k^2 t} e^{ikx}. \quad (4.16)$$

La caractéristique principale de cette solution est son amortissement exponentiel dans le temps, dû à la présence de la viscosité $\nu > 0$:

$$\lim u(x, t) = 0 \quad \text{quand} \quad t \rightarrow \infty.$$

L'équation (4.15) est connue sous le nom de *l'équation de la chaleur*. Comme il sera vu dans la section suivante, ce problème représente le prototype des équations *paraboliques*.

Remarque 4.8. Dans le cas $\nu = 0$ et $a > 0$, Eq. (4.12) devient

$$\frac{\partial u}{\partial t} + a \frac{\partial u}{\partial x} = 0. \quad (4.17)$$

Elle prend le nom d'*équation d'advection*, prototype des équations *hyperboliques*, et la solution s'écrit

$$u(x, t) = \hat{u}_0 e^{ik(x - at)}. \quad (4.18)$$

Cette solution prend la forme d'une onde qui se translate à la vitesse constante a , sans déformation ou amortissement : *phénomène de propagation*.

4.3 EDP : le point de vue mathématique

La résolution numérique des équations aux dérivées partielles nécessite, au préalable, un minimum de connaissance sur leurs propriétés analytiques. Dans la suite du cours, les EDP seront souvent représentées sous la forme générique

$$Au = f,$$

où A désigne un opérateur aux dérivées partielles quelconque, et f est un terme de force donné. La solution de ce problème prends la forme

$$u(t, \mathbf{x}) : [0, T] \times \Omega \rightarrow \mathbb{R}.$$

On fait souvent la distinction entre la variable t qui est associée au temps et la variable spatiale $\mathbf{x}$ qui appartient au domaine physique Ω , sous-ensemble de $\mathbb{R}^2$ ou $\mathbb{R}^3$. La frontière de Ω est souvent notée Γ ou $\partial\Omega$.

4.3.1 Classification des EDP

Les EDP sont mathématiquement classées en plusieurs groupes, ou classes. Les problèmes relevant de chacune de ces classes possèdent des caractéristiques physiques et mathématiques communes. L'intérêt de cette classification est que l'étude de problèmes types relevant de chacune de ces classes permet alors de développer des méthodes numériques universelles.

Plus précisément, les EDP linéaires du second ordre sont regroupées en trois classes distinctes : *parabolique*, *elliptique*, et *hyperbolique*. Les problèmes physiques qui présentent une évolution au cours du temps sont gouvernés par des équations paraboliques ou hyperboliques, dont les exemples types sont :

- L'équation de la chaleur,

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \nu \nabla^2 u = f, \quad \nu > 0, \quad (4.19)$$

de solution $u(t, \mathbf{x}) : [0, T] \times \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ est représentative des problèmes *paraboliques*.

- L'équation des ondes,

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - c^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = f, \quad (4.20)$$

et l'équation d'advection,

$$\frac{\partial u}{\partial t} - c \frac{\partial u}{\partial x} = f, \quad (4.21)$$

de solution

$$u(t, \mathbf{x}) : [0, T] \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R},$$

sont des exemples importants de problèmes *hyperboliques*.

Les problèmes physiques stationnaires sont généralement décrits par des équations *elliptiques*. L'équation de Laplace,

$$-\nabla^2 u = f \quad \text{avec} \quad u(\mathbf{x}) : \Omega \rightarrow \mathbb{R}, \quad (4.22)$$

est le prototype de cette classe de problèmes.

Remarque 4.9. L'équation d'advection-diffusion (4.12) est parabolique pour $\nu > 0$; si $\nu = 0$ elle est hyperbolique. Pour plus d'info, cf. Chap. 9.

4.3.2 Conditions initiales et aux limites, problèmes bien posés

Afin de définir un *problème aux limites* bien posé (existence et unicité de la solution), il faut imposer des conditions initiales et des conditions de bords à la solution.

Conditions aux limites

Les conditions que l'on impose sur la frontière $\partial\Omega$ sont de plusieurs types. Un premier type consiste à imposer la valeur de u sur la paroi. Ce type de conditions aux limites est appelé *conditions de Dirichlet* :

$$u(t, \cdot)|_{\partial\Omega} = g(t, \cdot), \quad \forall t \in [0, T], \quad (4.23)$$

où $g : [0, T] \times \partial\Omega \rightarrow \mathbb{R}$ est une donnée du problème. Par exemple, si u désigne la vitesse d'un fluide, alors (4.23) avec $g \equiv 0$ exprime la condition d'adhérence du fluide à la paroi.

Un autre type important consiste à imposer la composante normale du gradient de u à la frontière. Il s'agit de *conditions de Neumann* :

$$\left. \frac{\partial u}{\partial \mathbf{n}}(t, \cdot, \cdot) \right|_{\partial \Omega} \equiv (\nabla u \cdot \mathbf{n})|_{\partial \Omega} = g(t, \cdot, \cdot), \quad \forall t \in [0, T], \quad (4.24)$$

où $\mathbf{n}$ désigne la normale extérieure, et g est une fonction connue. Par exemple, si u désigne la température d'un matériau, alors (4.24) avec $g = 0$ revient à imposer une condition de flux nul à la paroi.

Citons aussi les conditions de *Robin*, utilisées notamment en thermique :

$$\left. \frac{\partial u}{\partial \mathbf{n}}(t, \cdot, \cdot) \right|_{\partial \Omega} + \lambda u(t, \cdot, \cdot)|_{\partial \Omega} = g(t, \cdot, \cdot), \quad \forall t \in [0, T], \quad (4.25)$$

où λ et g sont connues. Enfin, précisons qu'il est possible de combiner ces différents types de conditions aux limites. Si $\partial \Omega$ se décompose en deux parties disjointes³ $\partial \Omega_1$ et $\partial \Omega_2$, on peut alors imposer, par exemple, des conditions de Dirichlet sur $\partial \Omega_1$ et des conditions de Neumann sur $\partial \Omega_2$. Il s'agit alors de *conditions mixtes* de Dirichlet-Neumann.

Remarque 4.10. Un peu de vocabulaire : on qualifie d'homogènes des conditions aux limites où la donnée g est identiquement nulle.

Conditions initiales

Il faut aussi imposer des conditions initiales à un problème d'évolution. Le nombre de conditions initiales est généralement égal à l'ordre de différentiation en temps de l'EDP. Pour l'équation de la chaleur (4.19) et l'équation d'advection (4.21), une seule condition suffit :

$$u(t = 0, \mathbf{x}) = u_0(\mathbf{x}) \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega, \quad (4.26)$$

où $u_0(\mathbf{x})$ est une donnée du problème. Pour l'équation des ondes (4.20), il faut formuler une condition supplémentaire sur $\partial u / \partial t$ à l'instant initial.

Problème bien posé

Pour que la solution d'un problème aux limites possède un sens physique, il est nécessaire que le problème soit mathématiquement *bien posé*, c.à.d.

- la solution doit exister,
- la solution doit être unique,
- la solution doit être stable au sens de Hadamard : elle doit dépendre continument des données⁴.

On ne peut arbitrairement imposer n'importe quel type de conditions aux limites. L'intuition physique, suivie d'une analyse mathématique, doivent servir de guide pour choisir les conditions adéquates, conduisant à un problème bien posé. Ces conditions dépendent essentiellement de la classe de l'EDP considérée.

Exemple 4.11. L'équation de Laplace (4.22) est bien posée avec :

1. les conditions de Dirichlet (4.23), ou
2. les conditions de Neumann (4.24) si les données du problème vérifient la condition de compatibilité :

$$\int_S g \, dS + \int_V f \, dV = 0,$$

qui s'obtient en appliquant le théorème de la divergence 4.2 à l'équation (4.22). Cette condition exprime un principe physique de conservation : le flux au travers de la frontière s'équilibre avec la production à l'intérieur de Ω . Dans ce cas, la solution est connue à une constante (additive) près.

Dans la suite du cours, nous admettrons que tous les problèmes aux limites que nous considérons sont bien posés.

³ C'est-à-dire : $\partial \Omega = \partial \Omega_1 \cup \partial \Omega_2$, $\partial \Omega_1 \cap \partial \Omega_2 = \emptyset$.

⁴ C'est-à-dire que si on perturbe quelque peu les données du problème, l'écart entre la solution originale et la solution perturbée doit rester commensurable aux perturbations, et ne peut s'amplifier de manière dramatique. Un système chaotique est-il, *a priori*, stable au sens de Hadamard ?

5 Concepts de base des différences finies

5.1 Introduction

L'approximation par différences finies d'un problème aux limites comprend les étapes suivantes :

1. Générer un maillage du domaine physique Ω , par exemple $\Omega_h = \{(x_i, y_j)\}$ où (x_i, y_j) est un *nœud* en lequel une approximation de la solution sera calculée.
2. Discrétiser le problème sur la grille calcul Ω_h . Cela est effectué lors des étapes suivantes :
 - a) Substituer les dérivées de l'*EDP* par un *schéma* de différences finies. L'idée derrière cette approximation vient directement de la définition d'une dérivée, *p. ex.* :

$$\frac{du}{dx}(x_i) = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{u(x_i + \Delta x) - u(x_i)}{\Delta x}.$$

- b) Implémenter les conditions aux limites du problème.

L'*EDP*, que nous supposons linéaire, est alors transformée en un système algébrique d'équations linéaires¹.

3. S'assurer de la validité du schéma utilisé. Cela suppose d'effectuer une analyse des erreurs du schéma numérique.
4. Résoudre le système discret par une méthode directe (pivot de Gauss, ...), itérative (Jacobi, Gauss-Seidel, Gradient conjugué, ...), ou multigrille (*cf.* [8]).
5. Implémenter le programme sur un ordinateur et le déboguer !

5.2 Grilles de calcul pour les différences finies

5.2.1 Premières notions sur les maillages

Les méthodes de différences finies sont particulièrement adaptées aux géométries simples de $\mathbb{R}^2$ (ou $\mathbb{R}^3$), telles que le domaine Ω peut s'écrire dans un système de coordonnées (x, y)

$$\Omega = [a_x, b_x] \times [a_y, b_y].$$

Par exemple, si Ω est un rectangle, alors (x, y) sont les coordonnées cartésiennes, pour un domaine annulaire alors $(x, y) = (r, \theta)$, les coordonnées polaires. Ce type de maillages est appelé *maillage cartésien*. Une discussion plus approfondie sur les différents types de maillage utilisés en pratique sera effectuée dans le chapitre 10.

En deux dimensions (2D), le maillage ou *grille de calcul* Ω_h est défini par

$$\Omega_h = \{(x_i, y_j), i = 1, \dots, N_x; j = 1, \dots, N_y\} \subset \Omega. \quad (5.1)$$

Un exemple est représenté sur la figure 5.1. Le pas de maillage suivant la direction x est noté Δx_i , défini par

$$\Delta x_i = x_i - x_{i-1}.$$

Le maillage est *uniforme* dans la direction x si :

$$\forall i = 2, \dots, N_x, \quad \Delta x_i = h = 1/(N_x - 1). \quad (5.2)$$

De même, dans la direction y , le pas de maillage est noté Δy_j .

¹ Une *EDP* non-linéaire est transformée en un système algébrique d'équations non-linéaires, à résoudre par méthodes itératives de Newton et ses variantes, *cf.* [10, 9].

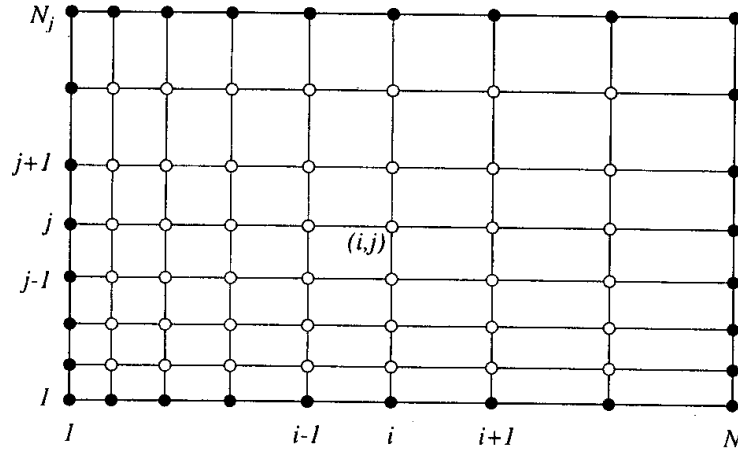


Fig. 5.1. Un exemple de maillage cartésien bidimensionnel. Le symbole $\circ$ désigne les nœuds intérieurs et $\bullet$ désigne les nœuds de la frontière. Noter que le pas de maillage est non-uniforme dans les deux directions.

5.2.2 Notions sur la discrétisation temporelle

Lorsqu'on veut calculer des problèmes aux limites instationnaires, une dimension supplémentaire doit être prise en considération : *le temps*. De même que le domaine spatial a été discrétisé par un maillage, le domaine temporel, *e.g.* $[0, T]$, doit lui aussi être représenté par une “grille” temporelle :

$$\{t_n = n\Delta t, n = 0, 1, \dots\}, \quad (5.3)$$

où Δt représente le *pas de temps*.

La majeure différence entre le temps et l'espace est que la solution au temps $(n+1)\Delta t$ est uniquement influencée par la solution aux instants précédents : l'information ne peut voyager dans le passé ! C'est pour cela que la plupart des schémas de différences finies utilisent des méthodes classiques pour les problèmes aux valeurs initiales² des *équations aux dérivées ordinaires (EDO)*, de la forme :

$$\begin{cases} y'(t) = f(t, y(t)), \\ y(0) = y^0. \end{cases} \quad (5.4)$$

Par la suite, nous utiliserons essentiellement des méthodes à un pas, telles la méthode d'Euler *progressive*,

$$y^{n+1} = y^n + \Delta t f^n, \quad (5.5a)$$

la méthode d'Euler *rétrograde*,

$$y^{n+1} = y^n + \Delta t f^{n+1}, \quad (5.5b)$$

et la méthode du *trapèze* ou de *Crank-Nicolson*,

$$y^{n+1} = y^n + \frac{\Delta t}{2} (f^n + f^{n+1}). \quad (5.5c)$$

Les applications de ces méthodes aux différences finies sont présentées dans les paragraphes 5.4.3 et 6.3.2. Des perspectives sur l'utilisation de schémas plus sophistiqués, comme les méthodes de Runge-Kutta, sont présentées dans le paragraphe 6.2. Pour plus de renseignements sur les schémas pour *EDO*, consulter [9].

Certaines approximations par différences finies, comme les schémas *ADI* ou de Lax-Wendroff, n'ont pas de lien avec les méthodes pour *EDO*. Ces schémas sont présentés dans les paragraphes 8.4 et 9.6 respectivement.

5.2.3 Notation compacte de la solution

Pour représenter la solution sur la grille de calcul, on utilise la notation compacte de u :

$$u_{i,j}^n \equiv u(x_i, y_j, t_n), \quad (5.6a)$$

et de ses dérivées, *e.g.* la dérivée première :

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{i,j}^n \equiv \frac{\partial u}{\partial x}(x_i, y_j, t_n). \quad (5.6b)$$

² aussi appelés *problèmes de Cauchy*.

5.3 Construction de formules aux différences finies

Le concept d'une formule de différences finies provient directement de la définition d'une dérivée, par exemple :

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_i = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{u(x_i + \Delta x) - u(x_i)}{\Delta x}, \quad (5.7)$$

et leur construction repose sur l'utilisation de développements de Taylor du type

$$u(x + h) = \sum_{k \geq 0} \frac{h^k}{k!} u^{(k)}(x). \quad (5.8)$$

Dans le cas d'une fonction $u(x, t)$ sur maillage uniforme de pas Δx , nous pouvons écrire les développements en espace

$$u_{i+1}^n \equiv u(x_i + \Delta x, t_n) = u_i^n + \Delta x \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_i^n + \frac{\Delta x^2}{2} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_i^n + \frac{\Delta x^3}{6} \left(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\right)_i^n + \mathcal{O}(\Delta x^4), \quad (5.9a)$$

$$u_{i-1}^n \equiv u(x_i - \Delta x, t_n) = u_i^n - \Delta x \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_i^n + \frac{\Delta x^2}{2} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_i^n - \frac{\Delta x^3}{6} \left(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\right)_i^n + \mathcal{O}(\Delta x^4), \quad (5.9b)$$

mais aussi en temps

$$u_i^{n+1} \equiv u(x_i, t_n + \Delta t) = u_i^n + \Delta t \left(\frac{\partial u}{\partial t}\right)_i^n + \frac{\Delta t^2}{2} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}\right)_i^n + \frac{\Delta t^3}{6} \left(\frac{\partial^3 u}{\partial t^3}\right)_i^n + \mathcal{O}(\Delta t^4). \quad (5.9c)$$

Il est bien sûr possible de combiner des développements en espace et en temps dans une même formule. Ces développements vont servir à construire des formules aux différences pour les opérateurs différentiels usuels. Pour un même opérateur, il est possible de construire un grand nombre de schémas de différences finies. Ces formules diffèrent essentiellement par les nœuds qui sont utilisés, et leur *erreur de troncature*, i.e. le premier terme négligé dans le développement de Taylor. Les formules les utilisées pour les opérateurs spatiaux usuels sont décrites dans les paragraphes suivants.

5.3.1 Approximation de la dérivée première

Pour l'opérateur $L = d/dx$, on tire de l'Eq. (5.9a) :

$$\frac{u_{i+1} - u_i}{\Delta x} = \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_i + \tau_i, \quad (5.10a)$$

avec τ_i l'erreur d'approximation ou *erreur de troncature*, déjà rencontrée dans le chapitre 3, qui s'écrit :

$$\tau_i = \frac{\Delta x}{2} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_i + \mathcal{O}(\Delta x^2). \quad (5.10b)$$

D'une manière similaire, l'équation (5.9b) donne

$$\frac{u_i - u_{i-1}}{\Delta x} = \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_i - \frac{\Delta x}{2} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_i + \mathcal{O}(\Delta x^2). \quad (5.11)$$

Pour ces deux formules aux différences, le terme dominant de l'erreur de troncature est proportionnel à Δx : on dit que ces formules sont *au premier ordre*. L'erreur de troncature mesure la précision de l'approximation et détermine le taux de décroissance de l'erreur lorsque l'espacement des points Δx diminue. Une présentation plus formelle des notions de troncature et de convergence est effectuée dans le paragraphe 5.4.

Il est possible d'obtenir des approximations de la dérivée première d'ordre supérieur à 1. En effet, la combinaison des Eqs. (5.9a) et (5.9b) donne

$$\frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2\Delta x} = \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_i + \frac{\Delta x^2}{6} \left(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\right)_i + \mathcal{O}(\Delta x^3). \quad (5.12)$$

Cette approximation est au second-ordre, et elle est formellement plus précise que (5.10) ou (5.11).

Les formules de différences finies sont maintenant obtenues en négligeant l'erreur de troncature. On obtient alors :

Définition 5.1 (Approximations usuelles de la dérivée première).

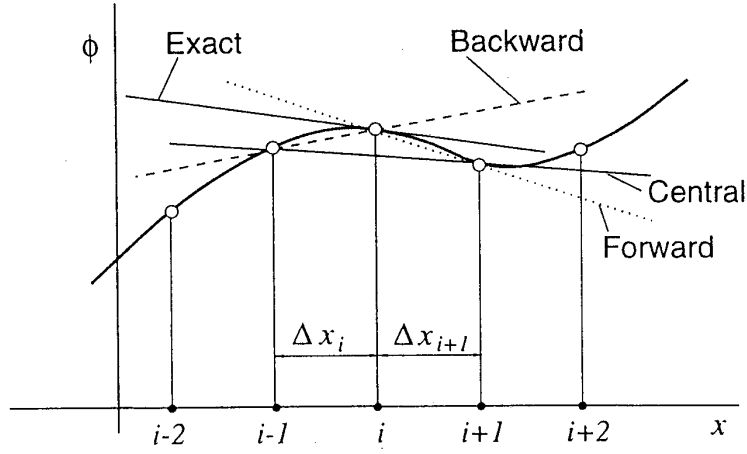


Fig. 5.2. Approximations usuelles de la dérivée première au nœud x_i .

- Schéma décentré amont (“upwind”, ou “backward”), en $\mathcal{O}(\Delta x)$:

$$\delta_x^- u_i \equiv \frac{u_i - u_{i-1}}{\Delta x}, \quad (5.13)$$

- Schéma décentré aval (“forward”), en $\mathcal{O}(\Delta x)$:

$$\delta_x^+ u_i \equiv \frac{u_{i+1} - u_i}{\Delta x}, \quad (5.14)$$

- Schéma centré (“central”), en $\mathcal{O}(\Delta x^2)$:

$$\delta_x^0 u_i \equiv \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2\Delta x}. \quad (5.15)$$

Une interprétation géométrique de ces formules est présentée sur la figure 5.2. Il est évident d’après cette figure que certaines formules sont meilleures que d’autres. Les propriétés de chacune de ces approximations seront mises en évidence dans le chapitre 9.

5.3.2 Approximation de la dérivée seconde

L’approximation usuelle de la dérivée seconde est la formule centrée à trois points, déjà présentée dans le paragraphe 3.1 :

$$\frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{\Delta x^2} = \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_i + \frac{\Delta x^2}{12} \left(\frac{\partial^4 u}{\partial x^4} \right)_i + \mathcal{O}(\Delta x^3). \quad (5.16)$$

Définition 5.2 (Approximation de la dérivée seconde). L’approximation usuelle est la formule centrée à trois points :

$$\delta_{xx}^0 u_i \equiv \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{\Delta x^2}. \quad (5.17)$$

dont l’erreur de troncature est en $\mathcal{O}(\Delta x^2)$.

Remarque 5.3. Il est possible de construire des schémas pour les dérivées secondes (ou d’ordre plus élevé) à partir de formules pour les dérivées d’ordre inférieur. Par exemple,

$$\delta_{xx}^0 u_i = \delta_x^+ (\delta_x^- u_i) = \delta_x^- (\delta_x^+ u_i) = \frac{1}{\Delta x} (\delta_x^+ - \delta_x^-) u_i,$$

par contre

$$\delta_x^0 \delta_x^0 u_i = \frac{u_{i+2} - 2u_i + u_{i-2}}{(2\Delta x)^2} \neq \delta_{xx}^0 u_i.$$

5.3.3 Technique générale

Il existe des manières plus systématiques pour obtenir des formules aux différences. Par exemple, pour obtenir une approximation la dérivée première de $u(x)$ au point x_i qui utilise les valeurs aux nœuds $i-1$, i et $i+1$, on écrit

$$a u_{i+1} + b u_i + c u_{i-1} = \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_i + \tau_i, \quad (5.19)$$

où a , b et c sont les coefficients à déterminer et τ_i est le terme de troncature indiquant la précision de la formule. La substitution de développements de Taylor dans (5.19) conduit à :

$$\tau_i = (a + b + c) u_i + \left(a - c - \frac{1}{\Delta x} \right) \Delta x \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_i + (a + c) \frac{\Delta x^2}{2} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_i + (a - c) \frac{\Delta x^3}{6} \left(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \right)_i + \mathcal{O}(\Delta x^4), \quad (5.20)$$

en ordonnant le second-membre en puissances croissantes de Δx . Pour obtenir la formule la plus précise, il faut annuler autant de termes que possible dans l'erreur de troncature. Puisque nous disposons de trois coefficients, il est possible de mettre les trois premiers termes de (5.20) à zéro, ce qui conduit à :

$$a + b + c = 0, \quad a - c = \frac{1}{\Delta x}, \quad a + c = 0.$$

Ce système linéaire possède l'unique solution :

$$a = \frac{1}{2\Delta x}, \quad b = 0, \quad c = -\frac{1}{2\Delta x},$$

et la substitution de ces valeurs dans (5.20) conduit à

$$\tau_i = \frac{\Delta x^2}{6} \left(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \right)_i + \mathcal{O}(\Delta x^4).$$

On aura bien sûr reconnue l'approximation centrée δ_x^0 (Eq. (5.12)).

Cette technique permet de construire des formules de différences finies dont l'ordre de précision est arbitraire. Elle est très utilisée pour construire des formules d'ordre élevé³, mais aussi pour construire des formules sur maillages non-uniformes.

Exercice 5.4. Utilisez la technique générale pour retrouver les formules et erreurs de troncature des sections 5.3.1 et 5.3.2.

Exercice 5.5. Déterminez la formule *décentrée* du second ordre qui exprime $(\partial u / \partial x)_i$ en fonction de u_i , u_{i+1} , et u_{i+2} . Montrez que l'erreur de troncature s'écrit :

$$\tau_i = -\frac{\Delta x^2}{3} \left(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \right)_i.$$

Exercice 5.6. Montrez que sur un maillage non-uniforme, la technique générale permet de construire la formule centrée suivante pour la dérivée première :

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_i = \frac{(\Delta x_i)^2}{D} u_{i+1}^n + \frac{(\Delta x_{i+1})^2 - (\Delta x_i)^2}{D} u_i^n - \frac{(\Delta x_{i+1})^2}{D} u_{i-1}^n - \frac{\Delta x_{i+1} \Delta x_i}{6} \left(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \right)_i^n,$$

avec $D = \Delta x_{i+1} \Delta x_i (\Delta x_{i+1} + \Delta x_i)$ et Δx_i défini en (5.2). Retrouvez l'expression de la dérivée première centrée dans le cas particulier d'un maillage uniforme.

Exercice 5.7. Montrez que la formule donnée en (7.21) est bien du quatrième ordre.

5.4 Analyse des schémas aux différences

Considérons que, pour résoudre le problème aux limites générique

$$A u(t, x) = f(t, x), \quad (5.21)$$

les paragraphes précédents ont permis de construire un schéma aux différences que nous écrivons en toute généralité sous sa forme *nodale* :

$$A_h u_i^n = f_i^n. \quad (5.22)$$

³ On qualifie traditionnellement d'«ordre élevé» toute méthode dont l'ordre de précision est strictement supérieur à 2.

Ce schéma peut s'écrire sous la forme du système linéaire (cf. Chap. 3) :

$$\mathcal{A}_h U^n = F^n, \quad (5.23)$$

avec $U^n = (u_i^n, i = 1, \dots, N)$ et $F^n = (f_i^n, i = 1, \dots, N)$, et $\mathcal{A}_h$ la représentation matricielle du schéma A_h .

La solution discrète u_i^n est une approximation de la solution exacte $u(t_n, x_i)$ aux nœuds du maillage, *i.e.* :

$$u_i^n \cong u(t_n, x_i),$$

et on a bien sûr pour le second membre $f_i^n = f(t_n, x_i)$. La question centrale de l'analyse du schéma (5.22) est la suivante : comment se convaincre qu'il nous donnera une "bonne" solution u_i^n , qui *convergera* vers la solution exacte lorsque les pas de discrétisation $\Delta t, \Delta x$ tendent vers zéro, si on ne connaît pas la solution exacte ? Nous verrons dans ce paragraphe que le *théorème de Lax* permet d'assurer la convergence du schéma vers la bonne solution dès que :

- le schéma est "correct" ou *consistant*, *i.e.* il représente la bonne *EDP*, et
- il est *stable*, *i.e.* une petite perturbation, ou erreur, dans les données initiales ne va pas s'amplifier de façon incontrôlée. Ceci est surtout pertinent pour les *EDP* instationnaires.

Mais avant tout, ce paragraphe va introduire un certain nombre de concepts fondamentaux tels la *consistance* et la *stabilité*, qui permettront d'évaluer la qualité d'un schéma numérique avant de le programmer sur un ordinateur, et d'éviter de mauvaises surprises quand on se rend compte qu'il est inefficace pour le problème qui nous intéresse !

5.4.1 Consistance d'un schéma numérique

Puisque A_h représente une approximation tronquée de A , la solution discrète u_i^n ne peut être strictement égale à la solution exacte $u(t_n, x_i)$. Comme dans l'exemple de la poutre (Eq. 3.8), on définit alors

$$A_h u(t_n, x_i) = f_i^n + \tau_i^n, \quad (5.24)$$

où τ_i^n est l'*erreur de troncature* en chaque nœud (t_n, x_i) du maillage. Puisque $f_i^n = A u(t_n, x_i)$ d'après (5.21), on obtient :

$$A_h u(t_n, x_i) = A u(t_n, x_i) + \tau_i^n.$$

On définit alors :

Définition 5.8 (Erreur de troncature d'un schéma). L'erreur de troncature locale τ_i^n , est la différence entre le schéma numérique et l'équation à résoudre, soit :

$$\tau_i^n = \underbrace{A_h u(t_n, x_i) - f_i^n}_{\text{Schéma numérique}} - \underbrace{(A u(t_n, x_i) - f(t_n, x_i))}_{\text{Equation en } (t_n, x_i)}. \quad (5.25)$$

Cette erreur est définie uniquement aux nœuds de discrétisation (t_n, x_i) .

L'erreur de troncature va nous servir à évaluer la capacité d'un schéma à représenter correctement l'équation à résoudre. En effet, il est naturel de s'attendre à ce que pour un schéma "correct", ou *consistant*, l'erreur τ_i^n soit petite. La consistance d'un schéma, qui est la propriété de représenter "correctement" une *EDP*, est définie de la manière suivante :

Définition 5.9 (Consistance d'un schéma).

Un schéma est dit consistant si l'erreur de troncature tend vers zéro lorsque tous les pas de discrétisation tendent vers zéro, *i.e.*

$$\tau_i^n \longrightarrow 0 \quad \text{pour} \quad \Delta t, \Delta x \longrightarrow 0. \quad (5.26)$$

De plus, on dira qu'un schéma est consistant d'ordre p en temps et d'ordre q en espace si l'erreur de troncature vérifie

$$\tau_i^n = \mathcal{O}(\Delta t^p) + \mathcal{O}(\Delta x^q). \quad (5.27)$$

5.4.2 Analyse des schémas stationnaires

Reprenons l'exemple du fléchissement de poutre du chapitre 3. La discrétisation de l'équation (3.1a) avec $c(x) = 0$ par le schéma centré à trois points s'écrit :

$$-\delta_{xx}^0 u_i = f_i. \quad (5.28)$$

L'erreur de troncature du schéma est :

$$\tau_i = \underbrace{\left(-\delta_{xx}^0 u(x_i) - f_i\right)}_{\text{Schéma numérique}} - \underbrace{\left(-\frac{d^2 u}{dx^2}(x_i) - f(x_i)\right)}_{\text{Equation en } x_i} \quad (5.29)$$

$$= -\frac{\Delta x^2}{12} \frac{\partial^4 u}{\partial x^4}(x_i) + \mathcal{O}(\Delta x^3), \quad (5.30)$$

en utilisant (5.16). L'erreur de troncature est donc de la forme $\tau_i = \mathcal{O}(\Delta x^2)$, ce qui montre que le schéma centré est consistant au second ordre.

Cette propriété de consistance va nous servir à montrer que le schéma est *convergent*, c.à.d. :

$$|u_i^n - u(t_n, x_i)| \longrightarrow 0 \quad \text{lorsque } \Delta x \longrightarrow 0,$$

en tout point x_i du maillage. Pour cela, remarquons que :

$$\begin{aligned} A_h u_i - A_h u(x_i) &= f_i - A_h u(x_i), \\ &= A_h u(x_i) - \tau_i - A_h u(x_i) \quad \text{d'après (5.24),} \\ &= -\tau_i. \end{aligned}$$

On en déduit l'inégalité vectorielle :

$$\|E\|_2 \leq \|A_h^{(-1)}\|_2 \|\tau\|_2, \quad (5.31)$$

où $E = (u_i - u(x_i), i = 1, \dots, N)$ désigne l'erreur aux nœuds du maillage. Il suffit maintenant de montrer que la norme de $A_h^{(-1)}$ reste bornée pour Δx petit, soit :

$$\exists C > 0 \quad \text{tel que} \quad \|A_h^{(-1)}\|_2 \leq C \quad \text{lorsque} \quad \Delta x \longrightarrow 0. \quad (5.32)$$

pour que (5.31) devienne pour Δx petit :

$$\|E\|_2 \leq C \|\tau\|_2. \quad (5.33)$$

Si le schéma est consistant, alors $\|\tau\| \longrightarrow 0$ et la solution numérique convergera vers la solution exacte. La propriété (5.32) est la *stabilité* d'un schéma numérique ; on aura ainsi démontré pour cet exemple simple que :

$$\text{consistance} + \text{stabilité} \implies \text{convergence},$$

qui est l'essence du *théorème de Lax*, qui est un des théorèmes fondamentaux de l'analyse des schémas numériques.

Vérifier la consistance d'un schéma est la partie aisée de l'analyse de convergence. La stabilité est la partie difficile. Pour cet exemple simple, montrons-la dans le cas des conditions de Dirichlet (3.1b). D'après les résultats de l'exercice 3.2, on a :

$$\|A_h^{(-1)}\|_2 = \frac{1}{\rho(A_h)} = \frac{\Delta x^2}{\min_{k=1, \dots, N} \lambda_k}.$$

où les λ_k sont donnés par (3.12a). On obtient alors

$$\|A_h^{(-1)}\|_2 = \frac{\Delta x^2}{1 - \cos \pi h} \cong \frac{1}{\pi^2},$$

lorsque $\Delta x \rightarrow 0$. L'estimation d'erreur (5.31) devient donc :

$$\|E\|_2 \leq \frac{\|\tau\|}{\pi^2} = \mathcal{O}(\Delta x^2). \quad (5.34)$$

Le schéma est donc convergent au second ordre pour des conditions de Dirichlet. Le cas des conditions de Neumann sera abordé dans la section 7.2.

5.4.3 Analyse des schémas d'évolution

Intéressons-nous maintenant aux problèmes instationnaires, en considérant l'équation (parabolique) de la chaleur

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \nu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = f(t, x). \quad \nu \geq 0. \quad (5.35)$$

La première étape de l'approximation par différences finies de cette EDP consiste à discrétiser uniquement la partie spatiale de l'EDP. L'utilisation du schéma centré δ_{xx}^0 conduit à

$$\frac{du_i}{dt}(t) - \nu \delta_{xx}^0 u_i(t) = f_i(t). \quad (5.36)$$

Cette étape intermédiaire, qui est habituellement appelée *semi-discrétisation*, vient de transformer l'EDP (5.35) en un système d'équations différentielles linéaires. Il est alors possible d'utiliser les schémas classiques d'intégration des équations différentielles ordinaires.

Un exemple de schémas d'évolution : les schémas d'Euler

Dans la suite, nous allons appliquer les méthodes d'Euler (5.5a) et (5.5b), qui sont certainement parmi les plus simples que l'on puisse considérer. Ces schémas peuvent aussi être utilisés pour l'équation d'advection-diffusion générale (4.11).

Exemple 5.10 (Schéma d'Euler progressif).

Lorsqu'on applique le schéma temporel (5.5a) à la sémi-discretisation (5.36), on obtient simplement :

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} - \nu \delta_{xx}^0 u_i^n = f_i^n. \quad (5.37)$$

Pour établir l'erreur de troncature de ce schéma de façon pratique, il faut porter le développement de Taylor (5.9c) et la formule (5.16) dans (5.37) pour obtenir

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} - \nu \delta_{xx}^0 u_i^n = \left(\frac{\partial u}{\partial t} \right)_i^n - \nu \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_i^n + \tau_i^n,$$

avec

$$\begin{aligned} \tau_i^n &= \frac{\Delta t}{2} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \right)_i^n - \nu \frac{\Delta x^2}{12} \left(\frac{\partial^4 u}{\partial x^4} \right)_i^n + \mathcal{O}(\Delta t^2, \Delta x^3), \\ &= \mathcal{O}(\Delta t, \Delta x^2). \end{aligned}$$

Le schéma d'Euler progressif (5.37) est donc consistant au premier ordre en temps, et au second ordre en espace.

Afin d'utiliser ce schéma dans un programme informatique, il est intéressant de le mettre sous sa forme "itérative"

$$u_i^{n+1} = \frac{\nu \Delta t}{\Delta x^2} u_{i+1}^n + \left(1 - \frac{2\nu \Delta t}{\Delta x^2} \right) u_i^n + \frac{\nu \Delta t}{\Delta x^2} u_{i-1}^n + \Delta t f_i^n, \quad (5.38)$$

soit, matriciellement,

$$U^{n+1} = \mathcal{B} U^n + G, \quad (5.39a)$$

avec

$$\mathcal{B} = \mathcal{I} + \nu \Delta t \mathcal{H}_h, \quad G = \Delta t F^n. \quad (5.39b)$$

De plus, $\mathcal{I}$ désigne la matrice identité et $\mathcal{H}_h$ est définie par

$$\mathcal{H}_h = \frac{1}{\Delta x^2} \begin{pmatrix} 1 & -2 & 1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & 1 & -2 & -1 \end{pmatrix}. \quad (5.40)$$

Le calcul de U^{n+1} , solution du problème au temps t_{n+1} , est obtenu en fonction de U^n . Ce calcul par récurrence, ou *avancement en temps*, de la solution aux instants successifs $t_0, t_1, \dots, t_n$ ne nécessite pas l'inversion de systèmes linéaires. On dit que le schéma d'Euler progressif est *explicite* en temps.

Remarque 5.11. La matrice tridiagonale $\mathcal{H}_h$ est la discrétisation de l'opérateur d^2/dx^2 par le schéma centré du second ordre. On a déjà rencontré cette matrice dans l'exemple de la poutre (Eq. (3.8), avec $c_i = 0$ et si on "oubliait" les conditions aux limites).

Définition 5.12 (Schémas multiniveaux).

Plus généralement, un schéma aux différences finies pour une équation d'évolution qui s'écrit sous la forme itérative :

$$\mathcal{B}_1 U^{n+1} = \mathcal{B}_2 U^n + \dots + \mathcal{B}_l U^{n+2-l} + G, \quad (5.41)$$

est un schéma à l niveaux de temps. Si $\mathcal{B}_1 = \mathcal{I}$, le schéma est dit explicite. Sinon, le schéma est implicite, et le calcul de U^{n+1} nécessite l'inversion d'un système linéaire.

Exemple 5.13 (Schéma d'Euler rétrograde).

Le schéma temporel (5.5b) appliqué à la semi-discrétisation (5.36) conduit à :

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} - \nu \delta_{xx}^0 u_i^{n+1} = f_i^{n+1}. \quad (5.42)$$

L'étude de sa consistance est laissée en exercice (comparer avec le schéma (5.37)). Il s'écrit matriciellement

$$(\mathcal{I} - \nu \Delta t \mathcal{H}_h) U^{n+1} = U^n + \Delta t F^{n+1}. \quad (5.43)$$

Il est donc de la forme (5.41) avec

$$\mathcal{B}_1 = \mathcal{I} - \nu \Delta t \mathcal{H}_h, \quad \mathcal{B}_2 = \mathcal{I}, \quad G = \Delta t F^{n+1}.$$

C'est donc un schéma implicite à deux niveaux de temps.

Les schémas d'Euler progressif et rétrograde sont tous deux des schémas à deux niveaux de temps dont l'ordre de troncature est $\mathcal{O}(\Delta t, \Delta x^2)$. Le premier, de type explicite, est moins coûteux en temps de calcul puisqu'il ne nécessite pas la résolution de systèmes linéaires. Il paraît donc plus avantageux sur le plan algorithmique. Il y a néanmoins un prix à payer pour pouvoir l'utiliser : la stabilité *conditionnelle* de la solution calculée.

Stabilité d'un schéma d'évolution

Pour un problème d'évolution, la stabilité est la propriété du schéma à fournir une solution numérique qui reste bornée, sur un maillage donné, quand $t \rightarrow \infty$ (Δt fixé) ou quand $\Delta t \rightarrow 0$ (à t fixé).

Tous les schémas d'évolution, même les schémas multiniveaux de la forme (5.41) (cf. TD), peuvent se réécrire sous la forme itérative :

$$U^{n+1} = \mathcal{B} U^n + G, \quad (5.44)$$

où $\mathcal{B}$ est la matrice d'itération du schéma. Par exemple, la forme itérative du schéma d'Euler progressif (5.37) est donnée par (5.39).

Lorsqu'on enlève le terme de force ($G \equiv 0$), le schéma (5.44) prend la forme équivalente :

$$U^{n+1} = \mathcal{B}^{(n+1)} U^0,$$

dont on déduit les inégalités

$$\|U^{n+1}\| \leq \|\mathcal{B}^{(n+1)}\| \|U^0\| \leq \|\mathcal{B}\|^{(n+1)} \|U^0\|. \quad (5.45)$$

Pour que la solution reste bornée à tout temps et que les erreurs initiales ne s'amplifient pas, on énonce la définition :

Définition 5.14 (Stabilité d'un schéma). Le schéma (5.44) est stable si pour Δt et Δx suffisamment petits sa matrice d'itération vérifie :

$$\|\mathcal{B}\| \leq 1. \quad (5.46)$$

Le schéma est inconditionnellement stable si (5.46) est vraie pour toute valeur de Δt . Le schéma est conditionnellement stable si (5.46) est vraie pour certaines valeurs de Δt seulement. Dans ce dernier cas, une condition de stabilité, analogue à celle qu'on trouve pour les EDO, restreint les valeurs que Δt peut prendre.

Dans la pratique, nous utiliserons l'étude de stabilité la plus usuelle, qui est celle de *Von Neumann*. La présentation de cette méthode, et son application concrète aux schémas d'Euler du paragraphe 5.4.3, sera effectuée dans le chapitre 6 consacré aux équations paraboliques.

5.4.4 Convergence d'un schéma aux différences

Dans le paragraphe 5.4.2, nous avons observé que pour un exemple stationnaire simple, on avait

$$\text{consistance} + \text{stabilité d'un schéma} \implies \text{convergence}.$$

Ces notions vont être maintenant formalisées et étendues au cas d'un problème d'évolution.

Le point de vue formel

La convergence d'un schéma est la caractéristique principale de la qualité de l'approximation discrète u_i^n par rapport à la solution exacte $u(t_n, x_i)$. Plus précisément :

Définition 5.15 (Convergence).

Soit $U_e^n = (u(t_n, x_i), i = 1, \dots, N)$ le vecteur représentant la solution exacte aux nœuds du maillage. Un schéma est dit convergent si

$$\forall n, \quad \|U^n - U_e^n\| \longrightarrow 0 \quad \text{pour } \Delta t, \Delta x \rightarrow 0.$$

Un schéma est dit convergent d'ordre p en temps et d'ordre q en espace si

$$\forall n, \quad \|U^n - U_e^n\| = \mathcal{O}(\Delta t^p) + \mathcal{O}(\Delta x^q).$$

La convergence d'un schéma est, en général, très difficile à démontrer mathématiquement. Néanmoins, on dispose du théorème suivant :

Théorème 5.16 (Lax).

Pour un problème aux limites bien posé et un schéma aux différences qui possède la propriété de consistance, la stabilité est la seule condition nécessaire et suffisante pour assurer sa convergence.

Preuve. De la même manière qu'en (5.24), la solution exacte satisfait l'équation

$$U_e^{n+1} = \mathcal{B} U_e^n + G^n + \Delta t \tau^n, \quad (5.47)$$

où τ^n désigne l'erreur de troncature du schéma (5.44). Soustraire (5.47) à (5.44) donne l'équation vérifiée par l'erreur $E^n = U^n - U_e^n$:

$$E^{n+1} = \mathcal{B} E^n - \Delta t \tau^n.$$

Par induction, on obtient :

$$E^n = \mathcal{B}^{(n)} E^0 - \Delta t \sum_{k=1}^n \mathcal{B}^{(n-k)} \tau^{k-1},$$

dont on déduit,

$$\begin{aligned} \|E^n\| &\leq \|\mathcal{B}\|^{(n)} \|E^0\| + \Delta t \sum_{k=1}^n \|\mathcal{B}\|^{(n-k)} \|\tau^{k-1}\|, \\ &\leq \|\mathcal{B}\|^{(n)} \|E^0\| + t_n \max_{k=1, \dots, n} \left\{ \|\mathcal{B}\|^{(n-k)} \|\tau^{k-1}\| \right\}, \end{aligned}$$

avec $t_n = n\Delta t$. Si la méthode est consistante (*i.e.* $\|\tau^{k-1}\| \rightarrow 0$ pour $k = 1, \dots, n$) et si elle est stable ($\|\mathcal{B}\|^{(n)} \rightarrow 0$ pour $n \rightarrow \infty$), alors la convergence est assurée.

L'importance de ce théorème est grande, car il est bien plus aisé de vérifier la consistance et la stabilité d'un schéma que la convergence de son approximation. Néanmoins, ce théorème a ses limitations. Les EDP de la mécanique sont très souvent non-linéaires et possèdent des conditions aux limites complexes, et dans ces conditions il est difficile d'appliquer le théorème de Lax rigoureusement. On doit l'interpréter comme si les propriétés de stabilité et de convergence sont des modes de sélection des schémas que l'on construit.

Un exemple mathématique

Pour l'équation (3.1) avec $c(x) = 0$, discrétisée par le schéma centré (3.9), voici le type d'estimation d'erreur que l'on peut trouver dans la littérature mathématique (*cf.* [11]) :

Proposition 5.17. Si on suppose que la solution $u(x)$ est dans $C^4([0, 1])$, on dispose alors de la majoration d'erreur suivante :

$$\|u(x_i) - u_i\|_{l^\infty} \leq \frac{\Delta x^2}{96} \max_{x \in [0, 1]} |u^{(4)}(x)|. \quad (5.48)$$

Un résultat similaire a été obtenu dans la section 5.4.2.

La proposition 5.48 établit la convergence au second ordre de la solution sous l'hypothèse que la solution soit suffisamment régulière⁴. L'estimation d'erreur (5.48) introduit la *norme discrète* $\|\cdot\|_{l^\infty}$, définie sur la grille de calcul $\Omega_h = \{x_i, i = 1, \dots, N\}$ comme :

$$\|\phi\|_{l^\infty} = \max_{x_i \in \Omega_h} |\phi(x_i)|. \quad (5.49a)$$

Une autre norme utilisée en pratique est la norme discrète l^2 , définie par :

$$\|\phi\|_{l^2} = \left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N |\phi(x_i)|^2 \right)^{1/2}. \quad (5.49b)$$

On remarquera que ces normes sont des approximations *ad hoc* des *normes de Sobolev* continues :

$$\|\phi\|_{L^\infty(\Omega)} = \max_{x \in \Omega} |\phi(x)|, \quad (5.50a)$$

$$\|\phi\|_{L^2(\Omega)} = \left(\int_{\Omega} |\phi(x)|^2 dx \right)^{1/2}. \quad (5.50b)$$

Un exemple concret

Comme illustration de ce paragraphe, on considère la résolution du problème d'Helmholtz dans $\Omega =]-1, 1[$

$$-\nu u''(x) + u(x) = 1, \quad \nu = 10^{-2}, \quad (5.51a)$$

$$u(-1) = 1, \quad u(1) = 0, \quad (5.51b)$$

dont la solution est C^∞ , avec les méthodes numériques suivantes :

1. Différences finies centrées du second ordre,
2. Différences finies compactes du sixième ordre (*cf. e.g.* [7, 9]),
3. Méthode de collocation-Tchebychev [6].

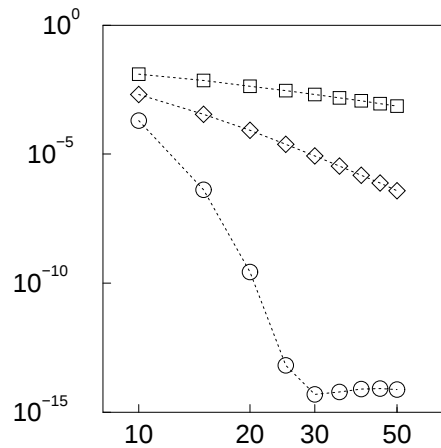


Fig. 5.3. Erreur l^2 en fonction du nombre de points N (coordonnées logarithmiques) pour le problème (5.51) résolu par différentes méthodes numériques; □ : différences finies centrées; ◇ : différences finies compactes; ○ : collocation-Tchebychev.

La figure 5.3 montre que, pour les schémas aux différences finies 1. et 2., une erreur du second et sixième ordre est asymptotiquement obtenue en accord avec les estimations d'erreur théoriques. La méthode de collocation-Tchebychev démontre pour ce problème très régulier une convergence exponentielle : ce type de convergence est typique des méthodes *spectrales* (*e.g.* : séries de Fourier).

⁴ Ici $u \in C^4([0, 1])$, *i.e.* la dérivée quatrième de $u(x)$ existe et est continue dans $]0, 1[$.

6 Les problèmes paraboliques

6.1 Généralités

Les problèmes d'évolution temporelle qui sont de nature *dissipative* sont gouvernés par des équations aux dérivées partielles paraboliques.

Le prototype de ce type de problèmes est l'équation de la chaleur pour la température $T(t, \mathbf{x})$

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} - \kappa \nabla \cdot \kappa \nabla T = q, \quad \forall t \in [0, t_{\max}], \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega \subset \mathbb{R}^2, \quad (6.1)$$

où c_p désigne la chaleur spécifique à pression constante, $\kappa > 0$ la conductivité thermique et q une source de chaleur. On adjoint à cette équation une condition initiale de la forme

$$T(0, \mathbf{x}) = T_0(\mathbf{x}), \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega, \quad (6.2)$$

et on considère généralement deux types de conditions sur la paroi $\partial\Omega$.

- Condition de Dirichlet :

$$\forall t, \quad T(t, \mathbf{x}) = T_w(t, \mathbf{x}), \quad \forall \mathbf{x} \in \partial\Omega, \quad (6.3)$$

où T_w est une température prescrite à la paroi.

- Condition de Neumann :

$$\forall t, \quad -h \frac{\partial T}{\partial \mathbf{n}}(t, \mathbf{x}) = q_w, \quad \forall \mathbf{x} \in \partial\Omega, \quad (6.4)$$

où h est le coefficient de transfert thermique et q_w le flux de chaleur à travers la paroi. Cette condition aux limites modélise la quantité de chaleur qui est échangée aux frontières du domaine. Lorsque $q_w = 0$, cette condition aux limites est appelée *adiabatique*, et énonce qu'aucun flux de chaleur ne traverse la paroi.

Sur le plan mathématique, ce problème aux limites est bien posé pour tout $\kappa > 0$.

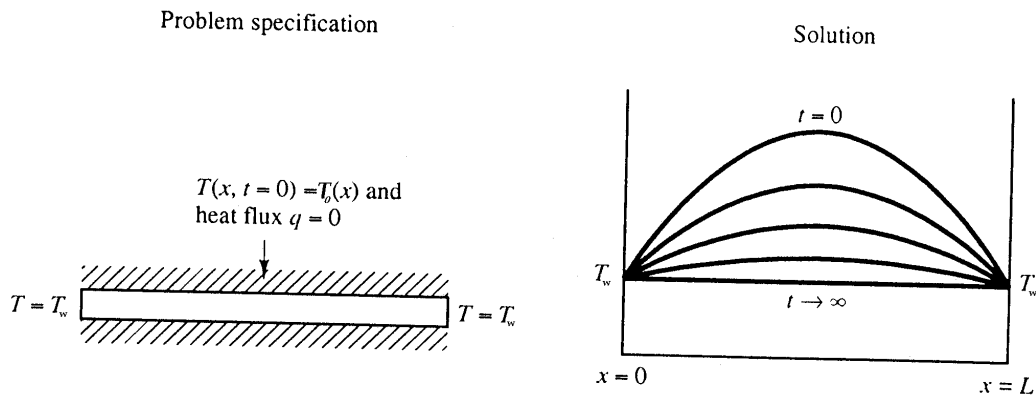


Fig. 6.1. Distribution instantanée de la température dans une barre de métal.

Exemple 6.1. Considérons le problème représenté sur la figure 6.1, qui concerne la distribution instantanée de la chaleur dans une barre de métal qui a été portée à la température T_0 sous l'effet d'une source extérieure, qui a ensuite été désactivée au temps $t = 0$. La température au temps initial est donc $T(x, 0) = T_0(x)$ et, pour $t > 0$, les extrémités $x = 0$ et $x = L$ de la barre sont maintenues à la température constante T_w . Ce problème est gouverné par l'EDP

$$\frac{\partial T}{\partial t} - \kappa \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = 0. \quad (6.5)$$

L'évolution temporelle de la solution est représentée sur la figure 6.1 (droite). Comme il a été observé dans le paragraphe 4.2, on observe une décroissance exponentielle de la condition initiale jusqu'à obtenir une distribution uniforme $T(x) = T_w$ dans la barre lorsque $t \rightarrow \infty$. Cette solution stationnaire est, en fait, solution de l'EDP

$$-\kappa \frac{d^2 T}{dx^2} = 0, \quad (6.6)$$

qui est de nature *elliptique*. Cette dernière équation est obtenue en posant $\partial T / \partial t = 0$ dans (6.5).

Cette exemple illustre le lien entre les EDP paraboliques et elliptiques. Il est donc naturel d'utiliser les mêmes opérateurs de différences finies pour la partie spatiale de ces problèmes, en particulier les schéma centrés δ_x^0 et δ_{xx}^0 du paragraphe 5.3. Le présent chapitre porte essentiellement sur l'approximation temporelle dans les équations paraboliques. Les conditions aux limites s'implémentent de la même manière que pour les équations elliptiques, et sont traitées dans le chapitre 7. Les extensions multidimensionnelles seront traitées dans le chapitre 8.

6.2 Semi-discrétisation et lien avec les équations différentielles

Considérons, pour simplifier, l'équation de la chaleur 1D

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \nu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = f(x, t), \quad \nu > 0. \quad (6.7)$$

Si on discrétise la partie spatiale de l'opérateur uniquement par un schéma aux différences finies quelconque $\mathcal{A}_h$, on obtient matriciellement

$$\frac{dU}{dt}(t) - \nu \mathcal{A}_h U(t) = F(t), \quad (6.8)$$

avec $U(t) = (u_i(t), i = 1, \dots, N)$.

On vient de réduire l'EDP (6.7) à un système d'équations aux dérivées ordinaires pour le vecteur U , qui ne dépend que du temps. Il est alors possible d'utiliser les schémas d'intégration classique pour EDO (Euler, Runge-Kutta, ... cf. [10, 9]), pour construire un schéma de discrétisation complet. Dans la section 5.4.3, le principe de semi-discrétisation a été appliquée à la construction des schémas d'Euler progressif et rétrograde pour l'équation de la chaleur.

Cette méthode de construction, très générale, est indépendante du schéma de discrétisation spatial A , et est utilisable pour d'autres équations d'évolution, comme par exemple les équations hyperboliques. Elle applicable pour d'autre discrétisations que les différences finies (*e.g.* volumes finis, éléments finis, ...). Une fois le schéma construit, il reste néanmoins essentiel de s'assurer de sa stabilité.

6.3 L'étude de stabilité de Von Neumann

D'après la section 5.4.3, la stabilité d'un schéma numérique écrit sous sa forme itérative :

$$U^{n+1} = \mathcal{B}^{(n+1)} U^0,$$

est la propriété à donner une solution U^{n+1} qui reste bornée lorsque $n \rightarrow \infty$. La définition 5.14 enonce comme condition nécessaire de stabilité de la solution numérique :

$$|||\mathcal{B}||| \leq 1. \quad (6.9)$$

L'étude de stabilité d'un schéma revient à déterminer les valeurs de Δt pour que (6.9) soit vérifiée et que le calcul n'explose pas. Ce critère dépend de la norme matricielle utilisée. Le plus souvent, on utilise la norme $||| \cdot |||_2$ qui pour une matrice symétrique s'écrit (*cf.* Sect. 1.3.1) :

$$|||\mathcal{B}|||_2 = \rho(\mathcal{B}), \quad (6.10)$$

où $\rho \geq 0$ est le *rayon spectral*, défini par :

$$\rho(\mathcal{B}) = \max \{ |\lambda_i|, i = 1, \dots, N \}, \quad (6.11)$$

tel que les λ_i sont les valeurs propres de $\mathcal{B}$.

Cette étude peut néanmoins se révéler fastidieuse pour un maillage non-uniforme et des conditions aux limites compliquées. Dans la pratique, l'analyse de stabilité est effectuée dans le cas d'un maillage uniforme, en "oubliant" les conditions aux limites : en toute rigueur, cela équivaut à considérer des conditions de périodicité. Une analyse de Fourier est alors possible et les conditions de stabilité du schéma sont facilement obtenues : c'est la *méthode de Von Neumann*.

6.3.1 Présentation formelle

Pour un problème non forcé ($f \equiv 0$), nous allons considérer sans perte de généralité le schéma à deux niveaux sous forme itérative :

$$\mathcal{B}_1 U^{n+1} = \mathcal{B}_2 U^n. \quad (6.12)$$

Cherchons une solution à cette équation sous la forme du mode de Fourier

$$u_i^n = \hat{u}^n e^{ikx_i}, \quad (6.13)$$

avec $i^2 = -1$ et $x_i = i\Delta x$. L'équation (6.12) devient donc

$$\mathcal{G}_1 \hat{u}^{n+1} = \mathcal{G}_2 \hat{u}^n, \quad (6.14a)$$

qu'on réécrit sous la forme

$$\hat{u}^{n+1} = \mathcal{G} \hat{u}^n, \quad (6.14b)$$

où $\mathcal{G} = (\mathcal{G}_1)^{-1} \mathcal{G}_2$ est appelée *matrice d'amplification*. La définition suivante énonce simplement que $\hat{u}^{n+1}$ reste bornée dans la limite $n \rightarrow \infty$ lorsque les valeurs propres de $\mathcal{G}$ sont de module inférieur à 1 :

Définition 6.2 (Stabilité au sens de Von Neumann).

Le schéma (6.12) est stable si

$$\rho(\mathcal{G}) \leq 1, \quad \forall k \text{ tel que } -\pi \leq k\Delta x \leq \pi, \quad (6.15)$$

où $\rho(\mathcal{G})$ est le rayon spectral de la matrice d'amplification.

Remarque 6.3. Dans le cas particulier d'un schéma 1D possédant 2 niveaux de temps, la matrice $\mathcal{G}$ se réduit au nombre $g = g_2/g_1$, appelé *facteur d'amplification*, qui peut prendre des valeurs complexes. La condition de Von Neumann (6.15) se réduit alors à

$$|g| \leq 1, \quad \forall k \text{ tel que } -\pi \leq k\Delta x \leq \pi. \quad (6.16)$$

Remarque 6.4. Si le schéma à analyser possède plus de 2 niveaux de temps, il est toujours possible de se ramener à une expression du type (6.12) en introduisant des variables auxiliaires (*cf.* TD).

6.3.2 Application aux schémas d'Euler

Dans cette partie, on va utiliser la méthode de Von Neumann pour étudier la stabilité des schémas d'Euler du paragraphe 5.4.3.

Exemple 6.5 (Suite de l'exemple 5.10). On a vu précédemment que le schéma d'Euler explicite (5.37) pour l'équation de la chaleur (avec $f \equiv 0$) peut s'écrire sous la forme itérative (5.38), soit :

$$u_i^{n+1} = r u_{i+1}^n + (1 - 2r) u_i^n + r u_{i-1}^n, \quad (6.17)$$

avec

$$r = \frac{\nu \Delta t}{\Delta x^2}. \quad (6.18)$$

En utilisant (6.13), l'Eq. (6.17) s'écrit

$$\hat{u}^{n+1} = g \hat{u}^n, \quad (6.19)$$

avec le facteur d'amplification

$$g = (1 - 2r) + 2r \cos k\Delta x. \quad (6.20)$$

Il est souvent pratique d'utiliser la variable auxiliaire

$$\xi = \sin^2 \frac{k\Delta x}{2} = \frac{1 - \cos k\Delta x}{2}, \quad (6.21a)$$

qui vérifie $\xi \geq 0$. Notez qu'une autre relation utile pour la suite est

$$\sin^2 k\Delta x = 4\xi(1 - \xi). \quad (6.21b)$$

Le facteur d'amplification g devient alors

$$g = 1 - 4r\xi. \quad (6.22)$$

La condition de Von Neuman (6.16) s'écrit alors

$$|g| \leq 1 \quad (\Longleftrightarrow |g|^2 \leq 1) \quad \text{pour } \xi \in [0, 1]. \quad (6.23)$$

Après quelques calculs¹, cette condition s'écrit

$$r\xi(2r\xi - 1) \leq 0, \quad \forall \xi \in [0, 1], \quad (6.24a)$$

qui devient, puisque $\xi \geq 0$ et $r \geq 0$

$$2r\xi \leq 1, \quad \forall \xi \in [0, 1]. \quad (6.24b)$$

Puisque le membre de gauche de l'inégalité est une fonction convexe de ξ , la condition (6.24b) est vraie dès que l'inégalité est vérifiée en $\xi = 0$ et $\xi = 1$, soit

$$r \leq \frac{1}{2}. \quad (6.24c)$$

On en déduit finalement la condition de stabilité du schéma d'Euler progressif :

$$\Delta t \leq \frac{1}{2\nu} \Delta x^2. \quad (6.25)$$

Ce schéma est donc *conditionnellement stable*.

Exemple 6.6 (Suite de l'exemple 5.13).

Le schéma d'Euler implicite (5.42) sans terme force peut s'écrire sous la forme itérative :

$$-r u_{i+1}^{n+1} + (1 + 2r) u_i^{n+1} - r u_{i-1}^{n+1} = u_i^n, \quad (6.26)$$

Son facteur d'amplification est

$$g = \frac{1}{1 + 4r\xi}. \quad (6.27)$$

Comme le module de g est toujours inférieur à l'unité, ce schéma est *stable sans condition*.

6.3.3 Bilan des courses

- **Schéma explicite**

- *Avantage* : Facile à mettre en œuvre.
- *Désavantage* : Limitation de la forme $\Delta t \leq f(\Delta x)$. En pratique, on peut être amené à utiliser un pas de temps très petit pour maintenir la stabilité du calcul, ce qui entraîne un très long temps de calcul² pour aller de $t = 0$ à $t = T$.

- **Schema implicite**

- *Avantage* : Très bonne stabilité : autorise des Δt beaucoup plus grand qu'un schéma explicite.
- *Désavantage* : Entraîne la résolution d'un système linéaire (*e.g.* Eq. (5.43)) à chaque niveaux de temps. En conséquence, il faut utiliser des algorithmes de résolution de systèmes linéaires très performants (le plus souvent des algorithmes itératifs) pour minimiser le coût *CPU* par cycle de temps.

¹ Conseil : élever (6.22) au carré.

² Aussi appelé temps *CPU*.

7 Les problèmes elliptiques

7.1 Généralités

Les problèmes de mécanique qui décrivent des phénomènes physiques à l'état d'équilibre, où le temps n'intervient pas, sont souvent gouvernés par des *EDP* elliptiques. Parmi ces problèmes, citons la distribution de température dans une barre de métal (*cf.* Fig. 7.1), la distribution des contraintes dans un solide soumis à une déformation, ainsi que de nombreux problèmes d'écoulements de fluides. Le prototype des problèmes elliptiques est l'équation de Laplace, qui s'écrit en $2D$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0,$$

et qui décrit aussi bien l'écoulement irrotationnel d'un fluide incompressible, que le transfert de chaleur stationnaire.

Exemple 7.1 (Les équations de l'élasticité linéaire).

$$\nabla \cdot [\boldsymbol{\sigma}] + \rho \mathbf{f} = 0, \quad (7.1a)$$

$$[\boldsymbol{\sigma}] = \lambda \operatorname{tr} [\boldsymbol{\epsilon}] + 2\mu [\boldsymbol{\epsilon}], \quad (7.1b)$$

où $[\boldsymbol{\sigma}]$ est le tenseur des contraintes et $[\boldsymbol{\epsilon}]$ le tenseur des déformations qui a pour composantes :

$$\epsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right), \quad (7.1c)$$

forment un système elliptique de 3 équations pour le déplacement $\mathbf{u}$. En $1D$, on obtient :

$$\frac{\partial}{\partial x} \left((\lambda + 2\mu) \frac{\partial u}{\partial x} \right) = -\rho f. \quad (7.2)$$

Les équations de l'élasticité linéaire sont des problèmes elliptiques du second ordre puisque des dérivées secondes au plus interviennent dans les équations.

Exemple 7.2. Un petit peu de vocabulaire : considérons l'équation aux dérivées partielles générique

$$-\nabla^2 u + \lambda u = f, \quad \text{avec } \lambda \geq 0. \quad (7.3)$$

- Si $\lambda \equiv 0$ et $f \equiv 0$, elle est appelée *équation de Laplace*,
- Si $\lambda \equiv 0$ et $f \not\equiv 0$: c'est l'*équation de Poisson*,
- Si $\lambda > 0$: c'est l'*équation de Helmholtz*.

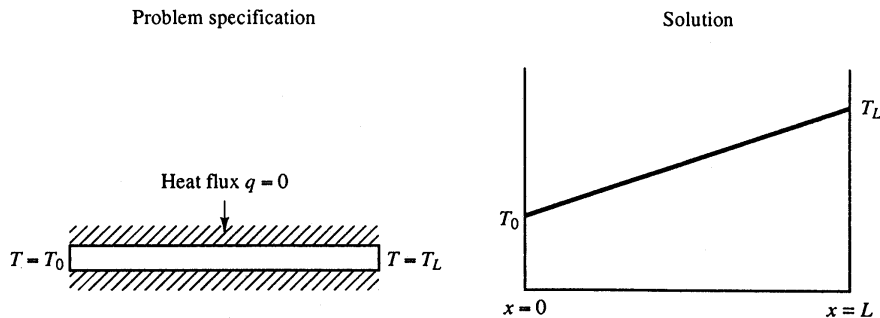


Fig. 7.1. Distribution de température dans une barre de métal à l'équilibre.

Un exemple très simple de phénomène d'équilibre est le problème de conduction de chaleur stationnaire dans une barre de métal représenté sur la figure 7.1, dont les extrémités $x = 0$ et $x = L$ sont portées à des températures constantes T_0 et T_L , telles que $T_L > T_0$. Ce problème est gouverné par l'équation de Laplace 1D

$$\kappa \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = 0.$$

La solution de ce problème est, bien sûr, la droite représentée sur la figure 7.1.

Une caractéristique importante des équations elliptiques est qu'une perturbation de la solution en un point du domaine, par exemple un changement de la température dû à l'apparition d'une source de chaleur ponctuelle, entraîne un changement de la solution dans le domaine *tout entier*. C'est particulièrement évident si on perturbe les conditions aux limites du problème de la figure 7.1.

L'impact de ce phénomène sur l'imposition des $C. L.$ dans un schéma numérique sera illustré dans la section 7.2. Une autre conséquence importante est que les schémas numériques doivent permettre à la solution en un nœud d'être influencée par ses voisins, de manière que l'information se propage dans toutes les directions. C'est la raison pour laquelle les formules centrées (5.15), (5.17) et (8.3) sont particulièrement utilisées pour les problèmes elliptiques.

7.2 Implémentation des conditions aux limites, et leur influence sur la précision globale du schéma

Cette partie est consacrée à l'implémentation pratique des conditions aux limites dans un schéma aux différences. Elle donne aussi un aperçu des problèmes que peut poser le traitement des frontières, et présente des notions sur l'utilisation de schémas décentrés spéciaux près des bords. On montre aussi la chute de la précision globale de la solution qui peut être observée si on n'est pas rigoureux dans l'implémentation des schémas de bords.

Considérons le problème de Helmholtz unidimensionnel

$$\lambda u(x) - u''(x) = f(x) \quad \text{dans } \Omega =]0, 1[, \quad (7.4a)$$

avec les conditions aux limites de Neumann-Dirichlet non homogènes

$$u'(0) = g_- \quad \text{et} \quad u(1) = g_+. \quad (7.4b)$$

Introduisons le maillage

$$\Omega_h = \{x_i = (i-1)h, 1 \leq i \leq N\} \quad \text{avec} \quad h = 1/(N-1). \quad (7.5)$$

On a donc N inconnues, les u_i . Afin d'écrire un système discret complet, il faut disposer de N équations. En règle générale :

- $(N-2)$ équations sont obtenues à partir de l'EDP (7.4a) aux points intérieurs $i = 2, \dots, N-1$.
- 2 équations sont obtenues à partir des conditions aux limites (7.4b).
- On combine ces équations de manière à éliminer les valeurs au bord u_1 et u_N : on obtient alors un système linéaire de taille $N-2 \times N-2$ pour les inconnues $u_2, \dots, u_{N-1}$ aux points intérieurs.

Au point courant x_i , $i = 2, \dots, N-1$, l'approximation par différences finies de (7.4a) s'écrit

$$\lambda u_i - \delta_{xx}^0 u_i = f_i, \quad (7.6)$$

où δ_{xx}^0 est l'opérateur centré défini par (5.17). Cette formule est en $\mathcal{O}(h^2)$, et fait intervenir toutes les inconnues $u_1, \dots, u_N$. Afin d'éliminer u_1 et u_N du système, il faut combiner cette équation avec les conditions aux limites.

Discretisation de la condition de Dirichlet

Commençons par le plus facile : en $i = N-1$, Eq. (7.6) s'écrit

$$\lambda u_{N-1} - \frac{u_{N-2} - 2u_{N-1} + u_N}{h^2} = f_{N-1}, \quad (7.7)$$

et la condition aux limites (7.4b) en $x = 1$ donne

$$u_N = g_+. \quad (7.8)$$

On peut donc éliminer u_N de (7.7) qui devient

$$\lambda u_{N-1} - \frac{u_{N-2} - 2u_{N-1}}{h^2} = f_{N-1} + \frac{g_+}{h^2}. \quad (7.9)$$

Il est aisé de vérifier que cette formule est en $\mathcal{O}(h^2)$. L'imposition de conditions de Dirichlet ne modifie donc pas l'erreur de troncature locale en $i = N-1$. Comme on l'a vu dans la section 5.4.2 pour le cas $\lambda = 0$, le schéma démontrerait une précision globale en $\mathcal{O}(h^2)$ si des conditions de Dirichlet étaient imposées à chacun des deux bords.

Discrétisation de la condition de Neumann

La présence d'une condition de Neumann en $x = 0$ présente quelques difficultés. En $i = 2$, Eq. (7.6) s'écrit

$$\lambda u_2 - \frac{u_3 - 2u_2}{h^2} = f_2 + \frac{u_1}{h^2}. \quad (7.10)$$

Maintenant, pour connaître u_1 , il va falloir discrétiser la condition de Neumann (7.4b) en $x = 0$ par différences finies. On ne peut utiliser de formule centrée en $x = 0$ puisque cela ferait intervenir un nœud qui sort du domaine Ω (cf. Fig 7.2). On va donc utiliser des formules décentrées.

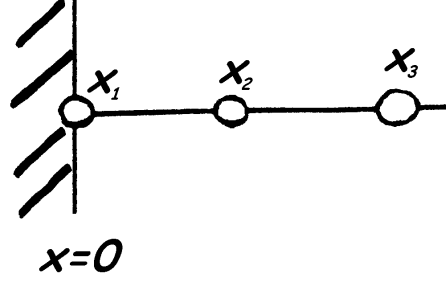


Fig. 7.2. Maillage près de la frontière $x = 0$.

Exemple 7.3 (Condition de Neumann en $\mathcal{O}(h)$).

Une première méthode utilise la formule

$$u'(0) = \frac{u_2 - u_1}{h}, \quad (7.11)$$

qui possède une erreur de troncature en $\mathcal{O}(h)$, et d'où on tire

$$u_1 = u_2 - h g_-. \quad (7.12)$$

L'équation (7.10) devient alors

$$\lambda u_2 - \frac{u_3 - u_2}{h^2} = f_2 - \frac{g_-}{h}. \quad (7.13)$$

Le schéma complet s'écrit donc :

- Pour $u_2, \dots, u_{N-1}$: résoudre Eq. (7.6) pour $i = 3, \dots, N-2$, Eq. (7.9) et Eq. (7.13).
- Ensuite, u_1 et u_N sont donnés respectivement par Eqs. (7.12) et (7.8).

On a ainsi éliminé u_1 du système avec une formule de bord du premier ordre. Que devient l'erreur de troncature du schéma, en particulier au point $i = 2$? D'après la définition 5.8, cette erreur s'écrit

$$\tau_2 = (\text{Eq. (7.13)}) - (\lambda u_2 - u_2'' - f_2), \quad (7.14a)$$

$$= \frac{-u_3 + u_2 + h g_- + h^2 u_2''}{h^2}. \quad (7.14b)$$

En utilisant les développements limités au nœud $i = 2$:

$$u_3 = u_2 + h u_2' + \frac{h^2}{2} u_2'' + \frac{h^3}{6} u_2^{(3)} + \mathcal{O}(h^4), \quad (7.15a)$$

$$g_- \equiv u_1' = u_2' - h u_2'' + \frac{h^2}{2} u_2^{(3)} + \mathcal{O}(h^3), \quad (7.15b)$$

l'erreur de troncature devient

$$\tau_2 = -\frac{u_2''}{2} + \mathcal{O}(h), \quad (7.16)$$

ce qui montre que le schéma n'est pas consistant en $i = 2$!

En conséquence, même si le schéma démontre une consistance du second ordre aux autres points du maillage, on observe une perte de la précision globale du schéma. Il s'agit là d'une manifestation d'un phénomène caractéristique des équations elliptiques qui a été énoncé dans le paragraphe 7.1, *c.à.d.* une perturbation de la solution en un point entraîne un changement de la solution dans la totalité du domaine. On observe alors que la solution est seulement précise en $\mathcal{O}(h)$ dans la norme l^2 , définie par (5.49b). Pour cet exemple simple, ce dernier résultat peut être démontré mathématiquement, *cf.* [11] pour le cas $\lambda = 0$. Nous nous contenterons de le vérifier numériquement en TD.

Exemple 7.4 (Condition de Neumann en $\mathcal{O}(h^2)$).

La perte de précision de la méthode est une conséquence de l'utilisation de la formule au premier ordre (7.11). Pour y remédier, on peut utiliser la formule suivante,

$$u'(0) = \frac{-u_3 + 4u_2 - 3u_1}{2h}, \quad (7.17)$$

qui est une formule *décentrée* au second ordre, qui ne fait intervenir que des points de Ω_h (*cf.* Exercice 5.5). La discrétisation de la condition de Neumann (7.4b) donne

$$u_1 = \frac{1}{3} (4u_2 - u_3 - 2hg_-). \quad (7.18)$$

Au point $i = 2$, la formule courante (7.6) devient

$$\lambda u_2 - \frac{2}{3h^2} (u_3 - u_2) = f_2 - \frac{2}{3h} g_-. \quad (7.19)$$

Le schéma complet s'écrit maintenant :

- Pour $u_2, \dots, u_{N-1}$: résoudre Eq. (7.6) pour $i = 3, \dots, N-2$, Eq. (7.9) et Eq. (7.19).
- Ensuite, u_1 et u_N sont respectivement donnés par Eqs. (7.18) et (7.8).

Examinons, comme pour l'exemple précédent, la consistance en $i = 2$:

$$\tau_2 = \frac{2}{3h^2} \left(-u_3 + u_2 + hg_- + \frac{3}{2}h^2 u_2'' \right), \quad (7.20a)$$

$$= \frac{2}{9} u_2^{(3)} h + \mathcal{O}(h^2), \quad (7.20b)$$

en utilisant les développements limités (7.15). Le schéma est maintenant consistant au premier ordre en $i = 2$. Les calculs numériques montrent que la solution est globalement au second ordre dans la norme l^2 .

Sur cet exemple simple, on voit le problème posé par l'implémentation des conditions aux limites, qui peuvent nécessiter l'utilisation de schémas décentrés près du bord. Pour le schéma centré au second ordre (7.6), seule la condition de Neumann a posé problème. Néanmoins, des difficultés analogues peuvent se poser si on veut utiliser des schémas aux différences plus précis, par exemple :

$$\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_i = \frac{-u_{i+2} + 16u_{i+1} - 30u_i + 16u_{i-1} - u_{i-2}}{12h^2}, \quad (7.21)$$

qui est précis en $\mathcal{O}(h^4)$, mais fait intervenir 5 voisins ! L'utilisation de cette formule nécessiterait de construire des schémas spéciaux près des bords. Ces schémas de bord influent sur la précision globale du schéma, mais peuvent aussi influencer sur la stabilité de la solution pour les problèmes d'évolution.

7.3 Résolution de l'équation d'Helmholtz unidimensionnelle par l'algorithme de Thomas

Le schéma complet de l'exemple 7.3 s'écrit

$$\left(\lambda + \frac{1}{h^2} \right) u_2 - \frac{1}{h^2} u_3 = f_2 - \frac{g_-}{h}, \quad (7.22a)$$

$$-\frac{1}{h^2} u_{i-1} + \left(\lambda + \frac{2}{h^2} \right) u_i - \frac{1}{h^2} u_{i+1} = f_i, \quad \text{pour } i = 3, \dots, N-2, \quad (7.22b)$$

$$-\frac{1}{h^2} u_{N-2} + \left(\lambda + \frac{2}{h^2} \right) u_{N-1} = f_{N-1} + \frac{g_+}{h^2}, \quad (7.22c)$$

après avoir éliminé les valeurs au bord :

$$u_1 = u_2 - hg_-, \quad (7.23a)$$

$$u_N = g_+. \quad (7.23b)$$

Le système (7.22) s'écrit en toute généralité sous la forme

$$a_i u_{i-1} + b_i u_i + c_i u_{i+1} = d_i, \quad \text{pour } i = 2, \dots, N-1, \quad (7.24)$$

soit, matriciellement

$$\begin{pmatrix} b_2 & c_2 & & & & \\ a_3 & b_3 & c_3 & & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & a_i & b_i & c_i & \\ & & & \ddots & \ddots & \\ & & & & a_{N-2} & b_{N-2} & c_{N-2} \\ & & & & a_{N-1} & b_{N-1} & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_2 \\ u_3 \\ \vdots \\ u_i \\ \vdots \\ u_{N-2} \\ u_{N-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d_2 \\ d_3 \\ \vdots \\ d_i \\ \vdots \\ d_{N-2} \\ d_{N-1} \end{pmatrix}. \quad (7.25)$$

Le système de l'exemple 7.4 peut aussi se mettre sous cette forme.

Ce système tridiagonal peut se résoudre de manière très efficace (et très simple à programmer) par l'algorithme de Thomas, qui est un cas particulier de l'algorithme de factorisation LU pour les systèmes tridiagonaux. Cette méthode directe s'effectue en deux étapes successives :

- **Première étape** (forward sweep) : On effectue une élimination de Gauss, dans le sens des i croissants, pour éliminer les a_i et mettre les b_i égaux à 1 : le système (7.25) devient

$$\begin{pmatrix} 1 & c'_2 & & & & \\ 0 & 1 & c'_3 & & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & 0 & 1 & c'_i & \\ & & & \ddots & \ddots & \\ & & & & 0 & 1 & c'_{N-2} \\ & & & & & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_2 \\ u_3 \\ \vdots \\ u_i \\ \vdots \\ u_{N-2} \\ u_{N-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d'_2 \\ d'_3 \\ \vdots \\ d'_i \\ \vdots \\ d'_{N-2} \\ d'_{N-1} \end{pmatrix} \quad (7.26)$$

avec

$$c'_2 = \frac{c_2}{b_2}, \quad d'_2 = \frac{d_2}{b_2}, \quad (7.27a)$$

et, pour $i = 3 \nearrow N-1$ croissants :

$$c'_i = \frac{c_i}{\text{pivot}(i)}, \quad d'_i = \frac{d_i - a_i d'_{i-1}}{\text{pivot}(i)}, \quad (7.27b)$$

avec

$$\text{pivot}(i) = b_i - a_i c'_{i-1}. \quad (7.27c)$$

- **Seconde étape** (backward sweep) : après la première étape, la dernière ligne du système s'écrit

$$u_{N-1} = d'_{N-1}. \quad (7.28a)$$

On peut alors remonter le système dans le sens des i décroissants pour calculer la solution u_i de proche en proche. Cette récurrence inverse est donnée par la formule

$$u_i = d'_i - u_{i+1} c'_i, \quad (7.28b)$$

pour $i = N-2 \searrow 2$ décroissants.

Cet algorithme, particulièrement peu coûteux en temps de calcul, est énormément utilisé en *CFD*, car il est à la base de bon nombre d'algorithmes de résolution d'*EDP* multidimensionnelles sur maillages cartésiens.

8 Notions sur les schémas numériques multidimensionnels

8.1 Le schéma à 5 points pour l'opérateur d'Helmholtz

On considère la résolution de l'équation de Helmholtz

$$\lambda u - \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) = f(x, y), \quad \lambda \geq 0, \quad (8.1)$$

dans le domaine bidimensionnel $\Omega =]0, 1[^2$ par la méthode des différences finies. Dans ce but, on introduit le maillage

$$\Omega_h = \{ (x_i, y_j), 1 \leq i \leq N_x, 1 \leq j \leq N_y \}, \quad (8.2a)$$

dont les nœuds sont définis par

$$x_i = (i - 1)\Delta x, \quad y_j = (j - 1)\Delta y, \quad (8.2b)$$

avec les pas de discrétisation

$$\Delta x = \frac{1}{N_x - 1}, \quad \Delta y = \frac{1}{N_y - 1}. \quad (8.2c)$$

Au point courant (i, j) , on définit le schéma à 5 points pour (8.1) comme

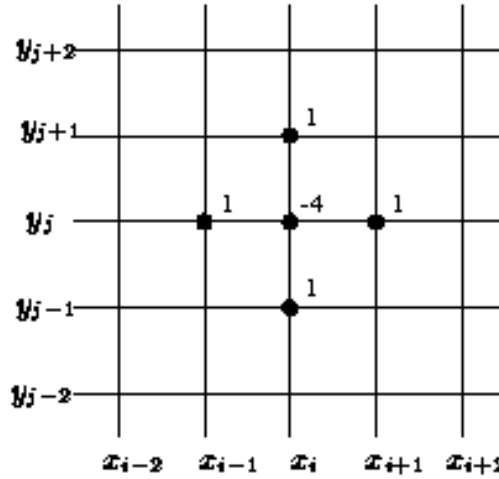


Fig. 8.1. Le schéma à 5 points pour un maillage régulier.

$$\lambda u_{ij} - (\delta_{xx}^0 u_{ij} + \delta_{yy}^0 u_{ij}) = f_{ij}, \quad (8.3)$$

où δ_{xx}^0 et δ_{yy}^0 sont les opérateurs de différences finies 1D définis en (5.17), pour $\partial/\partial x^2$ et $\partial/\partial y^2$ respectivement. Le schéma s'écrit aussi

$$\lambda u_{ij} - \left(\frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{\Delta x^2} + \frac{u_{i,j+1} - 2u_{i,j} + u_{i,j-1}}{\Delta y^2} \right) = f_{ij}. \quad (8.4)$$

Il est appelé schéma à 5 points car il fait intervenir le nœud courant (i, j) et ses 4 voisins le long des lignes du maillage (cf. Fig. 8.1). Ce schéma possède une erreur de troncature en $\mathcal{O}(\Delta x^2, \Delta y^2)$.

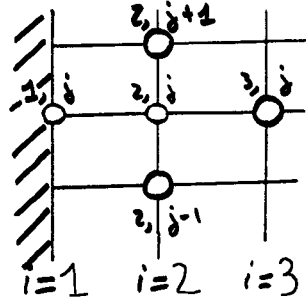


Fig. 8.2. Détail du maillage près de la paroi $x = 0$.

Les conditions aux limites se traitent de manière analogue au cas $1D$. Considérons, par exemple, la condition de Neumann

$$\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{x=0} = g^-(y), \quad (8.5)$$

sur la paroi gauche du domaine Ω (cf. Fig. 8.2). Au nœud $(2, j)$, il faut utiliser un schéma special pour $\delta_{xx}^0 u_{2,j}$. En utilisant la méthode décrite dans l'exemple 7.4, le schéma à 5 points s'écrit au point $(2, j)$:

$$\lambda u_{2,j} - \frac{2u_{3,j} - 2u_{2,j}}{3\Delta x^2} - \delta_{yy}^0 u_{2,j} = f_{2,j} - \frac{2}{3\Delta x} g_j^-. \quad (8.6)$$

Pour un nœud courant (i, j) , il est commode d'introduire les notations géographiques du schéma à 5 points, représentées sur la figure 8.3, avec $P = (i, j)$, $N = (i, j + 1)$ (North), etc Le schéma (8.4) s'écrit alors pour un nœud suffisamment loin des bords :

$$a_S u_S + a_W u_W + a_P u_P + a_E u_E + a_N u_N = f_P, \quad (8.7)$$

avec

$$a_S = -\frac{1}{\Delta y^2}, \quad a_W = -\frac{1}{\Delta x^2}, \quad a_P = \frac{2}{\Delta x^2} + \frac{2}{\Delta y^2} + \lambda, \quad (8.8a)$$

$$a_E = -\frac{1}{\Delta x^2}, \quad a_N = -\frac{1}{\Delta y^2}, \quad f_P = f_{ij}. \quad (8.8b)$$

Cette notation sera utile pour décrire la résolution itérative du schéma à 5 points dans le paragraphe 8.5.

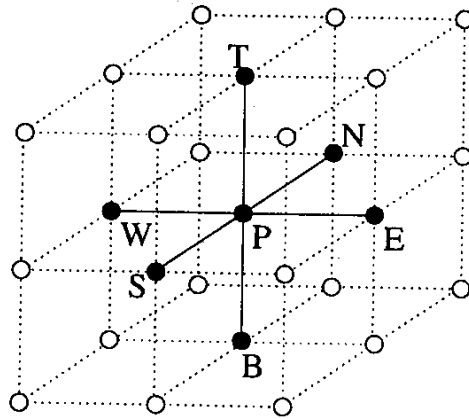


Fig. 8.3. Notations géographiques en trois dimensions.

8.2 Les schémas implicites pour les équations paraboliques : lien avec l'équation de Helmholtz

On considère, par exemple, l'équation de la chaleur $2D$:

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \nu \nabla^2 u = f, \quad (8.9)$$

résolue par le schéma d'Euler implicite (ou rétrograde, *cf.* Chap. 6)

$$\frac{u_{ij}^{n+1} - u_{ij}^n}{\Delta t} - \nu (\delta_{xx}^0 u_{ij}^{n+1} + \delta_{yy}^0 u_{ij}^{n+1}) = f_{ij}^{n+1}. \quad (8.10)$$

En regroupant au second membre les termes déjà connus à l'instant $t = (n+1)\Delta t$, on est alors amené à résoudre le système linéaire

$$\frac{1}{\nu \Delta t} u_{ij}^{n+1} - (\delta_{xx}^0 u_{ij}^{n+1} + \delta_{yy}^0 u_{ij}^{n+1}) = \frac{1}{\nu} \left(f_{ij}^{n+1} + \frac{u_{ij}^n}{\Delta t} \right), \quad (8.11)$$

qui est une équation de Helmholtz (discrète) de type (8.1) avec $\lambda = 1/(\nu \Delta t)$. Ainsi, à chaque niveau de temps, l'utilisation du schéma d'Euler implicite conduit à la résolution d'une équation elliptique de type Helmholtz.

Remarque 8.1. Une discrétisation de (8.9) par le schéma de Crank-Nicolson (*cf.* TD), ou plus généralement tout schéma implicite, conduit à la résolution d'un problème de Helmholtz analogue à (8.11).

8.3 Perspectives sur la résolution numérique du schéma à 5 points

Afin de résoudre le système (8.3), il est intéressant de remarquer qu'il peut s'écrire comme un système linéaire lorsqu'on a arrangé les inconnues aux nœuds,

$$\{u_{ij}; i = 1, \dots, N_x, j = 1, \dots, N_y\} \quad (8.12)$$

sous la forme du vecteur

$$\mathbf{u} = \{U_l, l = 1, \dots, N_x N_y\}, \quad (8.13a)$$

en posant

$$U_l = u_{ij}, \quad \text{avec } l = (j-1)N_x + i. \quad (8.13b)$$

On fait de même pour le second membre $\mathbf{f} = \{f_l\}$. Cet arrangement des inconnues est connu sous le nom d'*ordre lexicographique*, et il correspond à faire un balayage du domaine ligne par ligne dans le sens des i croissants (*cf.* Fig. 8.4). Le schéma (8.3) peut alors s'écrire sous la forme matricielle

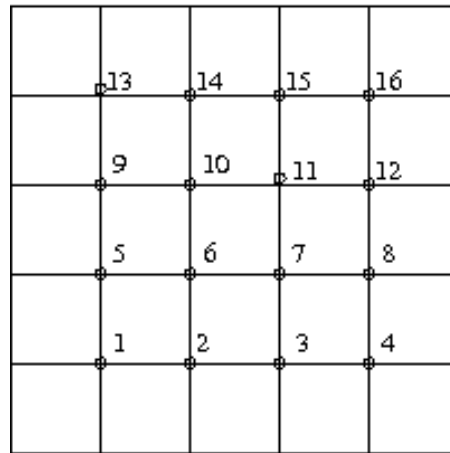


Fig. 8.4. Ordre lexicographique pour les nœuds intérieurs d'un maillage cartésien.

$$\mathcal{A} \mathbf{u} = \mathbf{f}, \quad (8.14)$$

où $\mathcal{A}$ est une matrice de taille $N_x N_y \times N_x N_y$ très *creuse*, puisqu'elle ne comporte que 5 éléments non nuls par lignes. En reprenant les notations géographiques de la section 8.2, le système (8.14) est représenté sur la figure 8.5.

La résolution efficace de systèmes linéaires qui sont issus, tels (8.14), de la discrétisation des EDP est un point crucial de l'efficacité d'une méthode numérique. En effet, la résolution de ces systèmes est une des

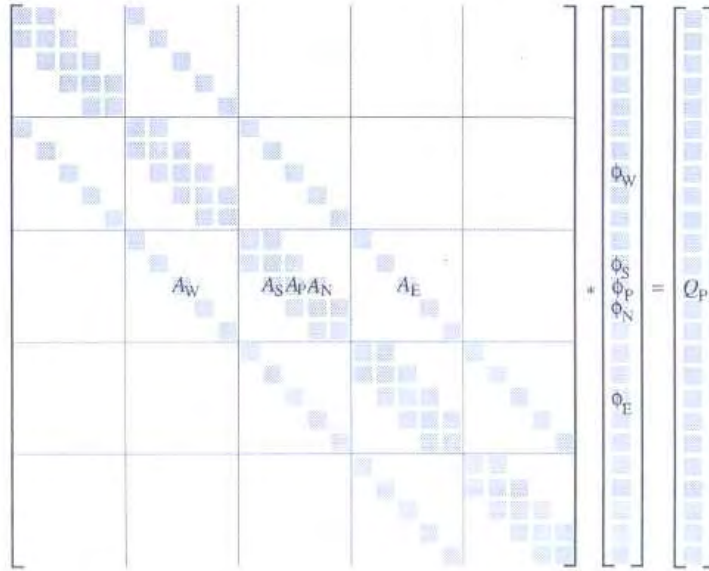


Fig. 8.5. Système linéaire correspondant au schéma à 5 points (8.3) ordonné lexicographiquement. Les 5 diagonales hachurées représentent les éléments non nuls de la matrice.

parties de l'algorithme les plus coûteuses en temps de calcul : par exemple, on observe que dans une simulation d'écoulements de fluides incompressibles, la résolution de système linéaires occupe *au mieux* 60% du temps de calcul, et qu'une résolution mal adaptée ou peu optimisée peut faire multiplier ce temps de calcul par 10 !

On peut diviser les méthodes de résolutions de systèmes linéaires issus de la mécanique en trois catégories :

- A) Les méthodes directes : elles comprennent les méthodes bien connues de Gauss et de factorisation LU , dont l'algorithme de Thomas (*cf.* section 7.3) est un cas particulier adapté aux matrices tridiagonales.
- B) Les méthodes itératives, qu'elles soient de base comme les algorithmes de Jacobi, Gauss-Seidel, $S.O.R.$, etc ..., qui seront présentées dans le paragraphe 8.5), ou plus sophistiquées, comme celles issues de la théorie de l'optimisation telle la méthode du gradient conjugué du chapitre 2.
- C) On rappelle que le système (8.14) est de taille $N_x N_y \times N_x N_y$. Son équivalent en 3D serait de taille $N_x N_y N_z \times N_x N_y N_z$. Pour des problèmes de grandes taille (*i.e.* grilles très fines, *i.e.* $N_x N_y N_z$ très grands), on ne peut stocker la totalité de la matrice $\mathcal{A}$ dans la mémoire de l'ordinateur. On doit alors se ramener à ne garder uniquement que les éléments non-nuls de $\mathcal{A}$ et leur emplacement dans cette matrice : il s'agit de méthodes de *stockage de systèmes creux*. Ce type d'adressage indirect complique la programmation et dégrade les performances des supercalculateurs.

Dans de nombreux cas, il est intéressant d'exploiter les caractéristiques de l'EDP (*i.e.* séparabilité des opérateurs) et du maillage (*i.e.* maillage cartésien ou structuré) pour se ramener à ne résoudre qu'une série de problèmes unidimensionnels. Ces problèmes 1D sont typiquement résolus par l'algorithme direct de Thomas. Parmi ces méthodes de résolution, on cite :

- Les méthodes du type "solveur de Poisson rapide" (hors programme)
- Les méthodes de "splitting" du type ADI, qui seront présentées dans le paragraphe 8.4.

Ces dernières méthodes sont bien adaptées aux EDP en géométries simples, telle l'équation de la chaleur (8.9) dans un domaine rectangulaire.

8.4 La méthode ADI pour les équations paraboliques

8.4.1 Présentation de la méthode

La méthode ADI ("Alternating Direction Implicit") et ses variantes sont des méthodes très répandues pour résoudre les équations de type advection-diffusion en géométrie simple. Dans cette partie, la méthode ADI sera décrite pour l'équation parabolique de la chaleur (8.9) dans $\Omega =]0, 1[^2$. Elle peut aussi être interprétée comme une méthode de résolution de l'équation de Poisson

$$-\nu \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) = f,$$

lorsque $t \rightarrow \infty$: lorsque la solution est stationnaire, le processus d'évolution temporel peut être assimilé à un processus itératif.

Dans le paragraphe 8.2, on a vu que la résolution de (8.9) par le schéma d'Euler implicite entraînait la résolution du problème d'Helmholtz $2D$:

$$\frac{u_{ij}^{n+1} - u_{ij}^n}{\Delta t} - \nu (\delta_{xx}^0 u_{ij}^{n+1} + \delta_{yy}^0 u_{ij}^{n+1}) = f_{ij}^{n+1}. \quad (8.15)$$

pour passer du temps $t_n = n\Delta t$ au temps $t_{n+1} = (n+1)\Delta t$. On est alors amené à résoudre un système linéaire $2D$ de la forme (8.14), car tous les termes de l'opérateur de Laplace $\nabla^2 u = \partial^2 u / \partial x^2 + \partial^2 u / \partial y^2$ sont pris de manière implicite.

En contraste, la méthode ADI permet de découpler en deux étapes l'opération $t_n \rightarrow t_{n+1}$ de manière que, à chaque étape, seuls les termes associés à une direction spatiale particulière sont traités implicitement. De cette façon, on se ramène à calculer uniquement des problèmes de Helmholtz $1D$, qui sont usuellement résolus par l'algorithme de Thomas, cf. paragraphe 7.3. Ces étapes successives sont schématisées par :

A) **Première étape**, $t_n \rightarrow t_{n+\frac{1}{2}} = (n+\frac{1}{2})\Delta t$: schéma implicite en x , et explicite en y ,

$$\frac{u_{ij}^{n+\frac{1}{2}} - u_{ij}^n}{\Delta t/2} - \nu (\delta_{xx}^0 u_{ij}^{n+\frac{1}{2}} + \delta_{yy}^0 u_{ij}^n) = f_{ij}^n. \quad (8.16)$$

B) **Deuxième étape**, $t_{n+\frac{1}{2}} \rightarrow t_{n+1}$: schéma explicite en x , et implicite en y ,

$$\frac{u_{ij}^{n+1} - u_{ij}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta t/2} - \nu (\delta_{xx}^0 u_{ij}^{n+\frac{1}{2}} + \delta_{yy}^0 u_{ij}^{n+1}) = f_{ij}^{n+1}. \quad (8.17)$$

Examinons l'ordre de consistance du schéma ADI : en formant $\frac{1}{2}$ Eq. (8.16) + $\frac{1}{2}$ Eq. (8.17), on obtient

$$\frac{u_{ij}^{n+1} - u_{ij}^n}{\Delta t} - \nu \left(\delta_{xx}^0 u_{ij}^{n+\frac{1}{2}} + \frac{1}{2} \delta_{yy}^0 (u_{ij}^{n+1} + u_{ij}^n) \right) = \frac{1}{2} (f_{ij}^{n+1} + f_{ij}^n). \quad (8.18)$$

En utilisant les développements suivants au temps $(n+\frac{1}{2})\Delta t$:

$$\begin{aligned} u^n &= u^{n+\frac{1}{2}} - \frac{\Delta t}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial t} \right)^{n+\frac{1}{2}} + \frac{1}{2!} \left(\frac{\Delta t}{2} \right)^2 \left(\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \right)^{n+\frac{1}{2}} - \frac{1}{3!} \left(\frac{\Delta t}{2} \right)^3 \left(\frac{\partial^3 u}{\partial t^3} \right)^{n+\frac{1}{2}} + \mathcal{O}(\Delta t^4), \\ u^{n+1} &= u^{n+\frac{1}{2}} + \frac{\Delta t}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial t} \right)^{n+\frac{1}{2}} + \frac{1}{2!} \left(\frac{\Delta t}{2} \right)^2 \left(\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \right)^{n+\frac{1}{2}} + \frac{1}{3!} \left(\frac{\Delta t}{2} \right)^3 \left(\frac{\partial^3 u}{\partial t^3} \right)^{n+\frac{1}{2}} + \mathcal{O}(\Delta t^4), \end{aligned}$$

on obtient

$$\frac{u^{n+1} - u^n}{\Delta t} = \left(\frac{\partial u}{\partial t} \right)^{n+\frac{1}{2}} + \frac{\Delta t^2}{24} \left(\frac{\partial^3 u}{\partial t^3} \right)^{n+\frac{1}{2}} + \mathcal{O}(\Delta t^3),$$

et pour $\phi = u_{ij}$, f_{ij} ,

$$\frac{1}{2} (\phi^{n+1} + \phi^n) = \phi^{n+\frac{1}{2}} + \frac{\Delta t^2}{8} \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} \right)^{n+\frac{1}{2}} + \mathcal{O}(\Delta t^3).$$

Maintenant, en sachant que le schéma à 5 points est précis en $\mathcal{O}(\Delta x^2, \Delta y^2)$, l'équation de troncature (8.18) s'écrit :

$$\left(\frac{\partial u}{\partial t} \right)_{ij}^{n+\frac{1}{2}} - \nu \left(\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_{ij}^{n+\frac{1}{2}} + \left(\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right)_{ij}^{n+\frac{1}{2}} \right) = f_{ij}^{n+\frac{1}{2}} + \mathcal{O}(\Delta t^2, \Delta x^2, \Delta y^2). \quad (8.20)$$

Le schéma ADI est consistant à l'ordre 2 en *espace* et en *temps*. Une étude de stabilité montrerait que ce schéma est *inconditionnellement stable*.

8.4.2 L'algorithme de la méthode ADI

Pour la première étape, l'équation (8.16) peut s'écrire

$$u_{ij}^{n+\frac{1}{2}} - \frac{\nu \Delta t}{2} \delta_{xx}^0 u_{ij}^{n+\frac{1}{2}} = u_{ij}^n + \frac{\nu \Delta t}{2} \delta_{yy}^0 u_{ij}^n + \frac{\Delta t}{2} f_{ij}^n. \quad (8.21)$$

Cela correspond à résoudre, pour chaque *ligne* J du maillage, $J \in \{j / j = 2, \dots, N_y - 1\}$, cf. Fig. 8.6, le problème de Helmholtz $1D$:

$$\mathbf{u}_J^{n+\frac{1}{2}} - \frac{\nu\Delta t}{2} \mathcal{H} \mathbf{u}_J^{n+\frac{1}{2}} = \mathbf{u}_J^n + \frac{\nu\Delta t}{2} [\mathbf{u}_J^{yy}]^n + \frac{\Delta t}{2} \mathbf{f}_J^n, \quad (8.22a)$$

où la matrice $\mathcal{H}$ est donnée par (5.40), et

$$\mathbf{u}_J = \begin{pmatrix} u_{1,J} \\ \vdots \\ u_{N_x,J} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{f}_J = \begin{pmatrix} f_{1,J} \\ \vdots \\ f_{N_x,J} \end{pmatrix}. \quad (8.22b)$$

Le vecteur $[\mathbf{u}_J^{yy}]^n = (u_J^{yy}(i), i = 1, \dots, N_x)$ représente la dérivée seconde de $\mathbf{u}^n$ par rapport à y , qui est calculée colonne par colonne, *i.e.*

$$u_J^{yy}(i) \equiv \delta_{yy}^0 u_{i,J} = \frac{u_{i,J+1} - 2u_{i,J} + u_{i,J-1}}{\Delta y^2}. \quad (8.22c)$$

Enfin, on n'oublie pas d'associer à (8.22a) les conditions de Dirichlet sur les bords gauche ($x = 0$) et droit ($x = 1$) du domaine :

$$u_{1,J}^{n+\frac{1}{2}} = g_J^W, \quad u_{N_x,J}^{n+\frac{1}{2}} = g_J^E. \quad (8.22d)$$

De même, pour la seconde étape, Eq. (8.17) s'écrit

$$u_{ij}^{n+1} - \frac{\nu\Delta t}{2} \delta_{yy}^0 u_{ij}^{n+1} = u_{ij}^{n+\frac{1}{2}} + \frac{\nu\Delta t}{2} \delta_{xx}^0 u_{ij}^{n+\frac{1}{2}} + \frac{\Delta t}{2} f_{ij}^{n+1}. \quad (8.23)$$

Cela correspond à résoudre $N_x - 2$ problèmes d'Helmholtz $1D$ sur chaque colonne du maillage, avec conditions de Dirichlet sur les parois supérieure et inférieure du domaine.

Fig. 8.6. La méthode ADI.

8.5 Les méthodes itératives de base pour le schéma à 5 points

On va s'intéresser à la résolution du système linéaire

$$\mathcal{A} \mathbf{u} = \mathbf{f}, \quad (8.24)$$

correspondant à la discrétisation de l'équation de Helmholtz $2D$ par le schéma à 5 points (*cf.* section 8.1). On va décrire les méthodes stationnaires de Jacobi, Gauss-Seidel et *S.O.R.*, qui utilisent la décomposition suivante de $\mathcal{A}$:

$$\mathcal{A} = \mathcal{D} - \mathcal{L} - \mathcal{U}, \quad (8.25)$$

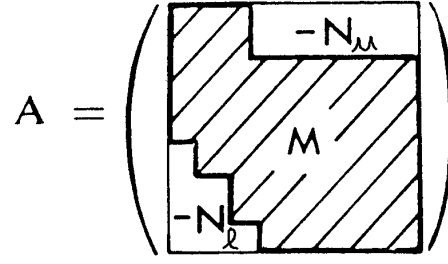


Fig. 8.7. Décomposition de la matrice $\mathcal{A}$ en trois sous-matrices disjointes $-\mathcal{N}_l$, $\mathcal{M}$, et $-\mathcal{N}_u$. Le principe des méthodes itératives de ce paragraphe est de n'inverser que la sous-partie $\mathcal{M}$ de $\mathcal{A}$: $\mathcal{M}$ doit donc être une matrice "facile" à inverser. Dans la décomposition LU que nous utilisons, $\mathcal{M}$ est la diagonale principale de $\mathcal{A}$, qui est triviale à inverser.

où $\mathcal{D}$, $\mathcal{L}^1$ et $\mathcal{U}^2$ sont les sous-matrices de A contenant respectivement les termes diagonaux, supérieurs et inférieurs par rapport à la diagonale principale (cf. Fig 8.7). Dans le cas du schéma à 5 points, cette décomposition appliquée à l'équation (8.7) s'écrit :

$$\underbrace{a_S u_S + a_W u_W}_{-\mathcal{L}u} + \underbrace{a_P u_P}_{\mathcal{D}u} + \underbrace{a_E u_E + a_N u_N}_{-\mathcal{U}u} = f_P. \quad (8.26)$$

La plus simple (simpliste ?) des méthodes itératives est la *méthode de Jacobi*, qui s'écrit

$$\mathcal{D}u^{m+1} = f + (\mathcal{L} + \mathcal{U})u^m, \quad (8.27)$$

où l'indice m se réfère au nombre d'itérations de la méthode. Dans le cas d'un maillage cartésien, une itération $m \rightarrow m+1$ correspond à un balayage (sweep) du maillage dans l'ordre lexicographique (cf. section 8.3). Lorsqu'elle est appliquée à l'équation (8.26), la méthode de Jacobi s'écrit

$$u_P^{m+1} = \frac{1}{a_P} [f_P - (a_S u_S^m + a_W u_W^m) - (a_E u_E^m + a_N u_N^m)]. \quad (8.28)$$

Cette méthode est aujourd'hui très peu utilisée car elle se révèle très coûteuse en temps *CPU* : elle se révèle être moins efficace qu'une méthode directe.

Une amélioration de la méthode de Jacobi consiste à utiliser les valeurs de u^{m+1} dans le second membre *dès qu'elles* sont disponibles : c'est la *méthode de Gauss-Seidel*, qui s'écrit :

$$\mathcal{D}u^{m+1} = f + \mathcal{L}u^{m+1} + \mathcal{U}u^m, \quad (8.29)$$

soit, pour le schéma à 5 points,

$$u_P^{m+1} = \frac{1}{a_P} [f_P - (a_S u_S^{m+1} + a_W u_W^{m+1}) - (a_E u_E^m + a_N u_N^m)], \quad (8.30)$$

car, lorsqu'à l'itéré $m+1$ on arrive au point P , les valeurs u_S^{m+1} et u_W^{m+1} sont déjà connues, mais pas encore u_E^m et u_N^m . La méthode de Gauss-Seidel assure en général une convergence deux fois plus rapide que la méthode de Jacobi.

La méthode *S.O.R.*³ apporte une amélioration significative de la méthode de Gauss-Seidel en évaluant u^{m+1} comme la moyenne pondérée de u^m et $(u^{m+1})_{GS}$, cette dernière quantité étant le résultat de l'itération de Gauss-Seidel (8.30). La méthode *S.O.R.* s'écrit

$$u_P^{m+1} = (1 - \omega) u_P^m + \omega (u_P^{m+1})_{GS}, \quad (8.31a)$$

soit

$$u_P^{m+1} = (1 - \omega) u_P^m + \frac{\omega}{a_P} [f_P - (a_S u_S^{m+1} + a_W u_W^{m+1}) - (a_E u_E^m + a_N u_N^m)]. \quad (8.31b)$$

dire un mot sur ω .

¹ L : Lower (inférieur).

² U : Upper (supérieur).

³ Successive Over-Relaxation.

9 Les problèmes hyperboliques

9.1 Généralités

Reprenons le modèle des équations de bilan de la mécanique du paragraphe 4.2, *c.à.d.* l'équation d'advection-diffusion :

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \underbrace{a \frac{\partial u}{\partial x}}_{a \neq 0, \text{ advection}} - \underbrace{\nu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}}_{\nu \geq 0, \text{ diffusion}} = 0. \quad (9.1)$$

On rappelle que dans le cas $\nu \neq 0$, cette équation est de type parabolique, et pour $\nu = 0$ elle prends la forme de l'équation d'advection, ou de transport :

$$\frac{\partial u}{\partial t} + a \frac{\partial u}{\partial x} = 0. \quad (9.2)$$

qui est de type *hyperbolique*. Comme il a été vu dans le paragraphe 4.2, une solution de Fourier de cette équation s'écrit

$$u(x, t) = \hat{u}_0 e^{ik(x-at)},$$

ce qui correspond à une propagation de la condition initiale à la vitesse a sans *déformation* ou *dissipation* visqueuse.

Remarque 9.1. Revenons au cas $\nu \neq 0$, en introduisant le nombre de Péclet :

$$\text{Pe} = \frac{|a|}{\nu}, \quad (9.3)$$

qui exprime le rapport entre les forces d'advection et de diffusion, et qui est à rapprocher du nombre de Reynolds Re des équations de Navier-Stokes. Lorsque $\text{Pe} \gg 1$ (ou $|a| \gg \nu$), c'est-à-dire lorsque la dissipation est très faible, des effets hyperboliques apparaissent dans la solution, même si l'équation (9.1) est, *stricto sensu*, de type parabolique. Ce mélange de comportement parabolique et hyperbolique est typique de l'équation d'advection-diffusion et, plus généralement, des équations de la mécanique des fluides. C'est la raison pour laquelle les méthodes du chapitre 6 pour les problèmes paraboliques deviennent moins performantes dans le cas $\text{Pe} \gg 1$ (ou $\text{Re} \gg 1$), et que certaines des méthodes pour les équations hyperboliques que nous verrons ci-après, sont utilisées en *CFD* pour résoudre les équations de Navier-Stokes.

Exemple 9.2. Les équations d'Euler instationnaires pour la dynamique des gaz (non visqueux). En aéronautique, on fait souvent l'hyp que le fluide est non-visqueux ... Pour calculer les écoulements autour d'ailes d'avion, on applique généralement une variante des schémas qui seront discutés dans ce chapitre à la résolution des équations d'Euler, qui sont *non-linéaires*.

Exemple 9.3 (Vibration de torsion d'une poutre de section circulaire). Les équations hyperboliques sont om-

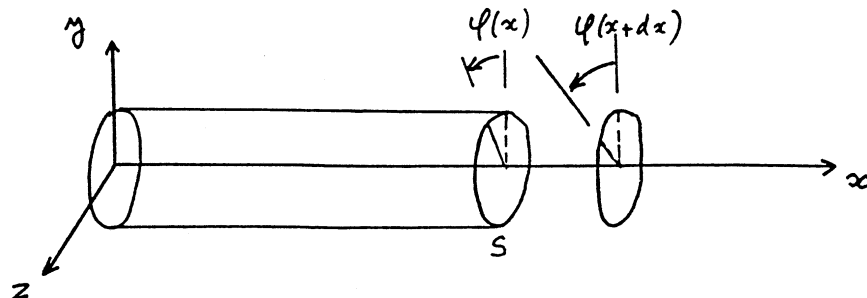


Fig. 9.1. Torsion d'une poutre de section S .

niprésentes dans les problèmes de vibrations mécaniques. Par exemple, si on considère le problème de torsion représenté sur la figure 9.1, l'équation vérifiée par l'angle de rotation φ de la section S est

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2} - c^2 \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} = 0, \quad \text{avec } c^2 = \frac{\mu}{\rho}, \quad (9.4)$$

où μ est le coefficient de Lamé et ρ la masse volumique de la poutre. Cette équation, appelée *équation des ondes*, est de nature hyperbolique, et $c = \pm\sqrt{\mu/\rho}$ est la célérité des ondes de torsion.

Plus généralement, les équations de la mécanique qui modélisent des phénomènes de conservation sont de nature hyperbolique, et *non-linéaires*. Leur solution est caractérisée par des paquets d'ondes qui se propagent sans perte d'amplitude ni de phase. La résolution numérique de ces problèmes est délicate car il est important d'utiliser un schéma numérique dont les erreurs altèrent le moins possible l'amplitude de ces ondes (phénomène de *dissipation numérique*), et leur célérité (phénomène de *dispersion numérique*).

Afin de se familiariser à la résolution de problèmes hyperboliques, nous allons examiner une variété de schémas explicites pour l'équation de transport (9.2) tels qu'ils ont été historiquement proposés, et examiner leurs performances. Ces considérations plus ou moins théoriques seront approfondies (et éclaircies !) en *TP* et *TD*.

Les notions de stabilité (analyse de Von Neumann, paragraphe 6.3) et de consistance (paragraphe 5.4.1) sont, bien sûr, toujours valides pour les équations hyperboliques.

9.2 Solution générale et lignes caractéristiques

On considère donc, dans la suite de ce chapitre, l'équation de transport

$$\frac{\partial u}{\partial t} + a \frac{\partial u}{\partial x} = 0. \quad (9.5)$$

avec $a > 0$, et la condition initiale à $t = 0$

$$u(x, 0) = u_0(x). \quad (9.6)$$

Il est aisé de vérifier qu'une solution générale de (9.5) s'écrit sous la forme :

$$u(x, t) = f(x - at) = f(\xi), \quad (9.7)$$

avec $\xi = x - at$, et f une fonction pour l'instant quelconque. Une conséquence importante est que la solution $u(x, t)$ reste constante sur la droite d'équation $x - at = C^{\text{te}}$, appelée *ligne caractéristique* dans la théorie des *EDP*.

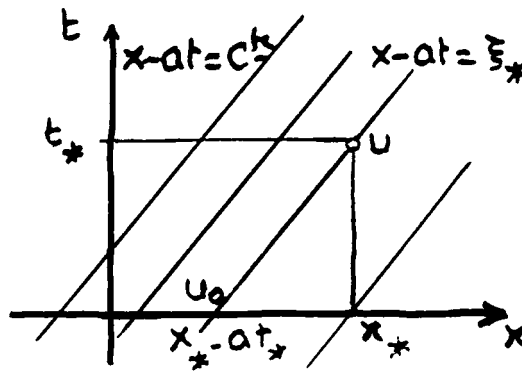


Fig. 9.2. Lignes caractéristiques pour l'équation d'advection (9.5).

Il est possible de déterminer complètement la solution en utilisant la condition initiale (9.6). Soit $\xi_* > 0$ et plaçons nous sur la ligne caractéristique d'équation

$$x - at = \xi_*,$$

représentée sur la figure 9.2. Le point courant (x_*, t_*) tel que $x_* - at_* = \xi_*$ est sur cette ligne de même que, au temps initial $t = 0$, le point $(\xi_* = x_* - at_*, 0)$. La solution vérifie donc

$$u(x_*, t_*) = u(x_* - at_*, 0) \equiv u_0(x_* - at_*),$$

ce qui signifie que l'information se propage à partir de l'état initial u_0 le long des caractéristiques, et le problème (9.5)-(9.6) admet finalement pour solution

$$u(x, t) = u_0(x - at). \quad (9.8)$$

9.3 Le schéma explicite centré est-il stable ?

Le schéma le plus simple que l'on pourrait utiliser pour résoudre l'équation de transport (9.5), avec a de signe quelconque, est le *schéma explicite centré* défini par

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} + a \delta_x^0 u_i^n = 0, \quad (9.9)$$

où l'opérateur δ_x^0 est défini en (5.15). Il est facile de vérifier que l'erreur de troncature de ce schéma est en $\mathcal{O}(\Delta t, \Delta x^2)$.

Exercice 9.4. Montrez que le facteur d'amplification g du schéma (9.9) s'exprime comme

$$g = 1 - i C \sin k \Delta x,$$

= où C est le *nombre de Courant* C , défini par

$$C = a \frac{\Delta t}{\Delta x}. \quad (9.10)$$

Le schéma explicite est-il stable ?

9.4 Le schéma “upwind” (décentré) et la condition CFL

Un premier remède à l'instabilité du schéma (9.9) consiste à *décentrer* l'approximation de la partie spatiale de l'équation de transport suivant le sens de propagation de l'information (*i.e.* signe de a). Ce principe est commun à tous les schémas dits “upwind” pour les problèmes hyperboliques.

- Cas $a > 0$: schéma décentré amont (“upwind”)

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} + a \delta_x^- u_i^n = 0, \quad (9.11a)$$

avec $\delta_x^- u_i^n$ défini en (5.13). Ce schéma s'écrit aussi

$$u_i^{n+1} = u_i^n - C (u_i^n - u_{i-1}^n), \quad (9.11b)$$

avec C le nombre de Courant (9.10).

- Cas $a < 0$: schéma décentré aval (“downwind”)

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} + a \delta_x^+ u_i^n = 0, \quad (9.12a)$$

avec $\delta_x^+ u_i^n$ défini en (5.14). Ce schéma s'écrit aussi

$$u_i^{n+1} = u_i^n - C (u_{i+1}^n - u_i^n), \quad (9.12b)$$

Ces deux schémas sont du premier ordre en espace et en temps. Une étude de la stabilité du schéma (9.11) pour le cas $a > 0$ montre que le facteur d'amplification s'écrit

$$g = 1 - C (1 - \cos k \Delta x) - i C \sin k \Delta x. \quad (9.13)$$

La condition de Von Neumann $|g|^2 \leq 1$ est vérifiée lorsque

$$C(1 - C)(1 - \cos k \Delta x) \geq 0.$$

Comme

$$C = \frac{a \Delta t}{\Delta x} \geq 0 \quad \text{et} \quad 1 - \cos k \Delta x \geq 0,$$

la condition de stabilité devient

$$1 - C \geq 0,$$

soit

$$C = a \frac{\Delta t}{\Delta x} \leq 1. \quad (9.14)$$

Remarque 9.5. Si a était négatif, la condition de Von Neumann ne serait pas vérifiée, et le schéma (9.11) serait inconditionnellement instable.

Remarque 9.6. Pour le cas $a < 0$, la condition de stabilité du schéma (9.12) est :

$$-a \frac{\Delta t}{\Delta x} \leq 1. \quad (9.15)$$

En conclusion, les schémas décentrés (9.11) et (9.12) sont stables sous la condition *CFL* (Courant-Friedrich-Levy, 1928) :

$$|C| = |a| \frac{\Delta t}{\Delta x} \leq 1. \quad (9.16)$$

Cette condition de stabilité est *omniprésente* pour les schémas hyperboliques explicites. On la retrouve aussi énormément dans les méthodes numériques pour les écoulements de fluides, où les termes de convection (hyperboliques) sont très souvent pris en compte explicitement, cf. le logiciel *FLUENT*.

9.5 Schémas décentrés et dissipation numérique

Dans le paragraphe 9.3, il a été observé que le schéma explicite centré est inconditionnellement instable. S'il était utilisé dans un calcul numérique, on observerait au cours de l'intégration en temps des oscillations parasites de la solution qui iraient en s'amplifiant, jusqu'à atteindre des amplitudes "infinies" pour l'ordinateur (phénomène d'"overflow"). Ces oscillations sont amplifiées car il n'y a pas de termes paraboliques (dissipatifs) pour les amortir. Cette instabilité est due à l'approximation centrée du terme $a \partial u / \partial x$, et elle est éliminée lorsqu'on utilise les schémas upwind (9.11) ou (9.12) et que la condition *CFL* est vérifiée.

Dans le cas $a > 0$, par exemple, on peut interpréter l'effet de décentrage amont en écrivant $\delta_x^- u_i$ comme :

$$\delta_x^- u_i \equiv \frac{u_i - u_{i-1}}{\Delta x} = \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2\Delta x} - \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{2\Delta x}, \quad (9.17a)$$

$$= \delta_x^0 u_i - \frac{\Delta x}{2} \delta_{xx}^0 u_i. \quad (9.17b)$$

Le schéma upwind (9.11) s'écrit alors :

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} + a \delta_x^0 u_i^n - \underbrace{\epsilon \delta_{xx}^0 u_i^n}_{\text{terme dissipatif}} = 0, \quad (9.18a)$$

avec

$$\epsilon = a \frac{\Delta x}{2} > 0. \quad (9.18b)$$

Le schéma upwind s'interprète alors comme le schéma explicite centré (9.9) auquel on ajoute (artificiellement) un terme dissipatif qui va stabiliser la solution numérique, tout en préservant la consistance du schéma. Une des conséquences de la présence de ce terme dissipatif est l'amortissement au cours du temps de la solution numérique, qui est un effet non observé par la solution exacte. Le terme $\epsilon > 0$ est appelé *viscosité artificielle* (ou *numérique*) par analogie à la mécanique des fluides (terme dissipatif : $\nu \nabla^2 \mathbf{u}$).

Remarque 9.7. La notion de dissipation numérique est valable pour d'autres schémas (cf. *TP*, *TD*). On l'observe lors de la résolution numérique de toutes les *EDP* de la mécanique, mais elle est essentiellement prononcée pour les *EDP* à haut caractère hyperbolique, par exemple l'équation d'advection diffusion (9.1) à haut nombre de Péclet.

Remarque 9.8. Cette notion de dissipation numérique sera approfondie en *TD*. On introduira aussi la notion de *dispersion numérique*.

9.6 Un schéma explicite du second ordre : le schéma de Lax-Wendroff

D'après la section précédente, une technique de stabilisation du schéma explicite centré (9.9) consiste à lui rajouter un terme de dissipation numérique. Or, les essais numériques montrent que la dissipation artificielle des schémas décentrés (9.11) et (9.12), qui sont du premier ordre, peut diminuer de façon excessive la précision de la solution calculée (cf. *TP*, *TD*). Lax & Wendroff (1960) ont proposé une autre stabilisation du schéma explicite centré, construit de la manière suivante :

On effectue premièrement un développement en temps de la solution, soit

$$u(x_i, t_n + \Delta t) = u(x_i, t_n) + \Delta t \frac{\partial u}{\partial t}(x_i, t_n) + \frac{\Delta t^2}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}(x_i, t_n) + \mathcal{O}(\Delta t^3). \quad (9.19a)$$

D'après (9.5), on a

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x, t) = -a \frac{\partial u}{\partial x}(x, t), \quad \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}(x, t) = a^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x, t). \quad (9.19b)$$

On reporte ces expressions dans (9.19a) pour obtenir

$$u(x_i, t_n + \Delta t) = u(x_i, t_n) - a \Delta t \frac{\partial u}{\partial x}(x_i, t_n) + a^2 \frac{\Delta t^2}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_i, t_n) + \mathcal{O}(\Delta t^3). \quad (9.19c)$$

En tronquant ce développement au second-ordre et en approchant les dérivées spatiales par différences finies centrées, on obtient :

$$u_i^{n+1} = u_i^n - a \Delta t \delta_x^0 u_i^n + a^2 \frac{\Delta t^2}{2} \delta_{xx}^0 u_i^n. \quad (9.19d)$$

Le schéma de Lax-Wendroff s'écrit alors, pour $a > 0$ ou $a < 0$,

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} + a \underbrace{\delta_x^0 u_i^n - \frac{a^2 \Delta t}{2} \delta_{xx}^0 u_i^n}_{\epsilon > 0 : \text{viscosité numérique}} = 0. \quad (9.20)$$

Son facteur d'amplification a pour expression :

$$g = 1 - 2C^2 \sin^2 k \frac{\Delta x}{2} - i C \sin k \Delta x. \quad (9.21)$$

On déduit facilement que, quelque soit le signe de a , le schéma est stable sous la condition CFL (9.16). Il est aisé de vérifier que l'erreur de troncature de ce schéma est en $\mathcal{O}(\Delta t^2, \Delta x^2)$.

Historiquement, lorsqu'il fut appliqué aux équations d'Euler, il fut le premier schéma qui a permis le calcul précis d'écoulements autour d'ailes d'avion.

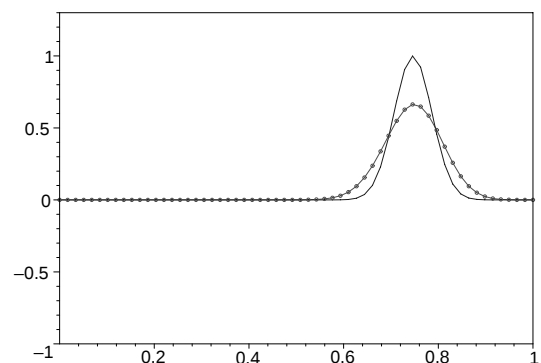
9.7 Commentaires et perspectives

Il existe, bien sûr, d'autres schémas explicites au second ordre que le schéma de Lax-Wendroff (*ex* : le schéma saute-mouton, *etc* ...). Pour des solutions *régulières*, les essais numériques montrent que le schéma de Lax-Wendroff donne les résultats les plus satisfaisants.

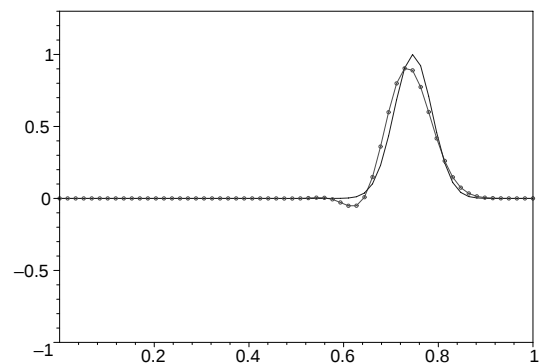
Néanmoins, dans certaines circonstances, les problèmes hyperboliques ont la particularité de posséder des solution discontinues (appelées *chocs* ou *ondes de choc*). Pour les équations linéaires comme celles considérées dans ce chapitre, les chocs sont uniquement présents lorsque la condition initiale est discontinue : ils se propagent alors le long des caractéristiques.

Par contre, les équations non-linéaires peuvent présenter des chocs même si les données (*i.e.* conditions initiales et aux limites) sont régulières. Par exemple, en mécanique des fluides compressibles, dans les écoulements régis par les équations d'Euler, des ondes de discontinuité sont générées par un avion en vol supersonique.

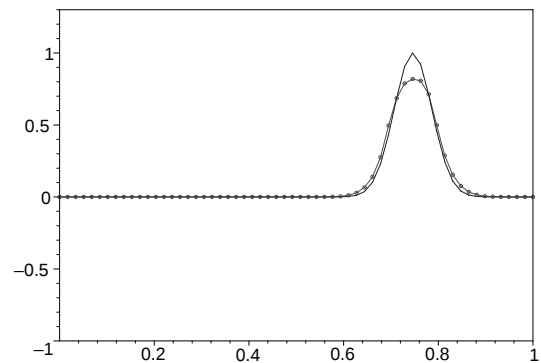
En présence de chocs, les schémas présentés dans ce chapitre montrent leurs faiblesses : en particulier, le schéma de Lax-Wendroff exhibe de nombreuses oscillations au voisinage de la discontinuité...



(a) Schéma Upwind

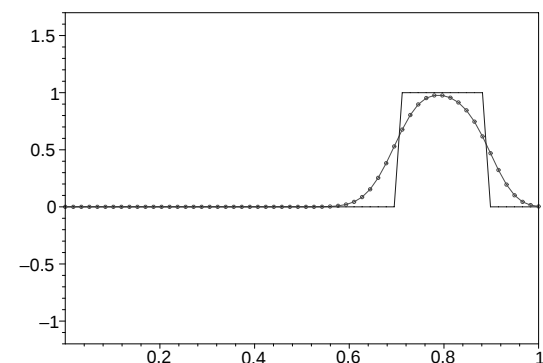


(b) Schéma de Lax-Wendroff

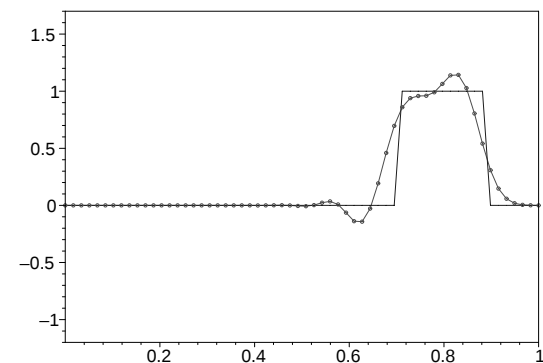


(c) Schéma MinMod

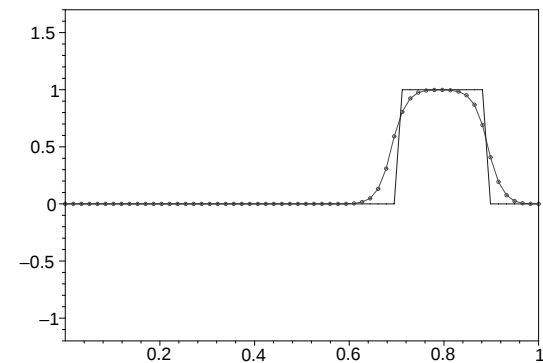
Figure 1:



(a) Schéma Upwind



(b) Schéma de Lax-Wendroff



(c) Schéma MinMod

Figure 2:

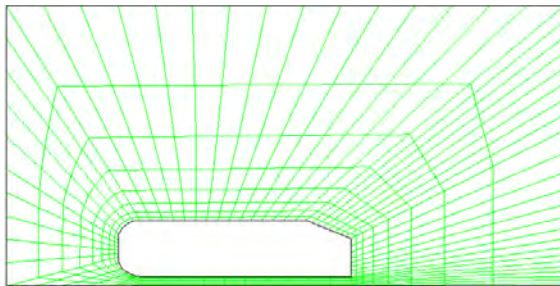
1. Motivations & Objectifs (1/2)

👉 **Motivation de ce travail** : Solveur précis & efficace pour géométries complexes (écoulement visqueux incompressible, méthode volumes/différences fini(e)s)

👉 **(Un des) enjeux majeurs** : Génération de grille pour géométries complexes

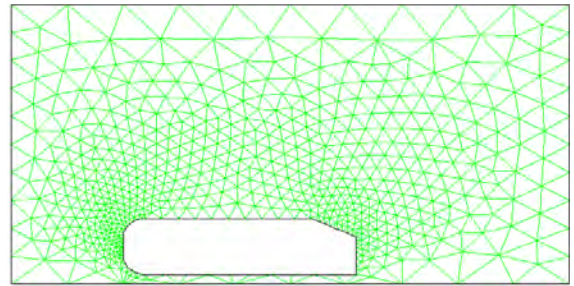
🔴 **Grilles conformes** : qui épousent la frontière des géométries complexes

🟢 **Maillage curviligne**



- ✓ Maturité des solveurs structurés
- ✓ Contrôle aisé de la densité de maillage
- ✗ Génération de grille «chronophage» en terme de main d'œuvre

🟢 **Maillage non-structuré**

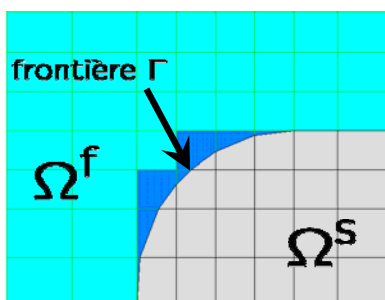
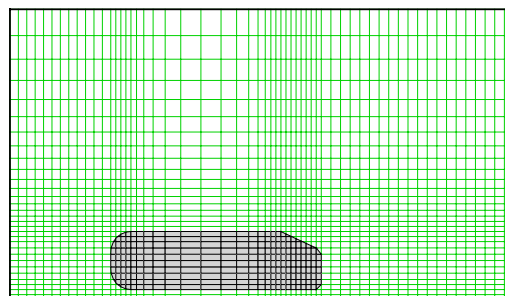


- ✓ Génération de maillage très automatisée
- ✓ Utilisation sur de nombreux types de géométries
- ✗ Absence de données structurées
⇒ coût CPU élevé

1. Motivations & Objectifs (2/2)

🔴 **Grilles non-conformes** : **méthodes aux frontières immergées (IB)**

🟢 **Méthodes cartésiennes** : Frontières non-alignées avec la grille



Cellules solides $\in \Omega^s$

⇒ Pas de discrétisation

Cellules fluides $\in \Omega^f$

⇒ Discrétisation cartésienne habituelle

Cellules mixtes (ou « Cut-cells »)

⇒ IB prise en compte dans la discrétisation



Point central des méthodes IB : Discrétisation dans les **cut-cells**

Les éléments finis

10 Introduction à la méthode des éléments finis

10.1 Introduction et motivation

10.1.1 La méthode des résidus pondérés

Les méthodes de différences finies pour résoudre une E.D.P consistent à approcher les opérateurs différentiels de l'équation avec une formule aux différences et à chercher une approximation de la solution aux nœuds du maillage. En tout rigueur, la solution n'est définie qu'aux points de ce maillages.

Au contraire, les méthodes de résidus pondérés supposent que la solution $u(t, \mathbf{x})$ d'une EDP peut être représentée sous la forme analytique :

$$u(t, \mathbf{x}) \cong u_h(t, \mathbf{x}) \equiv \sum_{j=1}^N a_j(t) \varphi_j(\mathbf{x}), \quad (10.1)$$

où les $a_j(t)$ sont des coefficients à déterminer et les $\varphi(\mathbf{x})$ sont des fonctions analytiques connues. Les $\varphi(\mathbf{x})$ sont appelées *fonctions de base*.

Considérons l'approximation de l'EDP générique :

$$\frac{\partial u}{\partial t} - L(u) - f = 0, \quad (10.2)$$

où L est un opérateur différentiel spatial¹ et f un second-membre donné. Pour déterminer les N coefficients $a_j(t)$, on a besoin de construire N équations à partir de l'EDP (10.2). Pour cela, nous injectons l'approximation de la solution (10.1) dans (10.2) et obtenons :

$$\frac{\partial u_h}{\partial t} - L(u_h) - f \equiv R(u_h), \quad (10.3)$$

où R est le résidu de l'équation, que l'on va entreprendre d'annuler ou, du moins, rendre aussi petit que possible. Pour cela, nous allons exprimer que l'intégrale du résidu sur tout le domaine, pondéré par des *fonctions test* $\tilde{\varphi}(\mathbf{x})$, soit nulle :

$$\int_{\Omega} R(u_h) \tilde{\varphi}_i \, dV = 0, \quad \text{pour } i = 1, \dots, N, \quad (10.4)$$

ce qui nous fournit les N équations permettant de déterminer les coefficients $a_j(t)$, $j = 1, \dots, N$ de la solution approchée (10.1).

L'équation (10.4) est appelée *formulation faible* (ou variationnelle) de l'EDP (10.2). Suivant la forme des fonctions test $\tilde{\varphi}$, on obtient différents types de méthodes, notamment :

A) Méthodes des sous-domaines (volumes finis)

Considérons une partition du domaine Ω en N sous-domaines (ou mailles) Ω_i , $i = 1, \dots, N$. Si les fonctions test sont choisies comme :

$$\tilde{\varphi}_i = \begin{cases} 1 & \text{dans } \Omega_i, \\ 0 & \text{en dehors,} \end{cases} \quad (10.5)$$

alors Eq. (10.4) s'écrit :

$$\int_{\Omega_i} \left(\frac{\partial u_h}{\partial t} - L(u_h) - f \right) dV = 0, \quad \text{pour } i = 1, \dots, N, \quad (10.6)$$

et exprime la conservation des quantités transportées dans une maille Ω_i . C'est le point de départ de la méthode des volumes finis, où Ω_i est souvent appelé *volume de contrôle*.

¹ Par exemple, $L = -\nabla^2$.

B) *Méthode Galerkin (Eléments finis)*

Si les fonctions test sont choisies égales aux fonctions de base, *i.e.*

$$\tilde{\varphi}_j = \varphi_j,$$

on obtient alors la méthode de Galerkin. Cette méthode exprime que le résidu soit orthogonal à chaque fonction test φ_j dans le produit scalaire $L^2(\Omega)$, *c.à.d.* orthogonal à l'espace

$$V_h = \{\varphi_j, j = 1, \dots, N\},$$

formé par les fonctions de base. Lorsque $N \rightarrow \infty$ et que

$$V_h \rightarrow V,$$

où V représente l'espace fonctionnel des solutions de l'EDP (10.2), alors la méthode de Galerkin exprime que

$$u_h \rightarrow u,$$

la solution exacte de l'EDP.

C) Il existe d'autres méthodes de résidus pondérés, en particulier la méthode de *collocation* (hors programme).

Les approximations par sous-domaines et de Galerkin sont à l'origine des méthodes de volumes finis et des éléments finis respectivement. Leur principal avantage sur les différences finies est de pouvoir s'appliquer à des géométries arbitrairement complexes (*cf.* paragraphe suivant).

Lorsqu'on considère un maillage de type cartésien comme ceux que nous avons vu pour les différences finies (*i.e.* Fig. 5.1), la méthode de volumes finis est très semblable aux différences finies.

Par contre, la méthode des éléments finis repose sur des techniques très spécifiques qui seront présentées dans la suite de ce chapitre, et notamment :

- La construction de la formulation variationnelle (10.4) par méthode de Galerkin, permettant de fixer les conditions aux limites et de déterminer l'espace fonctionnel V où chercher sa solution.
- La construction de l'espace d'éléments finis V_h tel que $V_h \cong V$, qui permet de représenter la solution discrète (10.1) dans sa base d'éléments finis.
- La construction du problème discret à partir de la formulation variationnelle.

10.1.2 Les limitations d'un maillage de différences finies

On considère, par exemple, l'écoulement autour d'une aile d'avion représenté sur la figure 10.1.

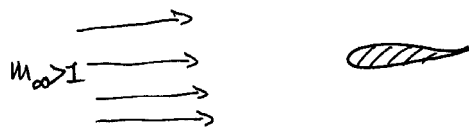


Fig. 10.1. Ecoulement supersonique autour d'un profil d'aile d'avion. Dans cette approximation on considère un fluide non visqueux compressible, modélisé par les équations d'Euler.

Maillage structuré (Différences finies)

Pour ce type de géométries, on considère un maillage structuré représenté sur la figure 10.2. Il est possible de trouver un changement de variable

$$(\xi, \eta) = f(x, y), \quad (10.7)$$

entre le *domaine physique* (x, y) et le *domaine de calcul* (ξ, η) tel que, dans ce dernier repère, le maillage soit de la forme représenté sur la figure 10.3.

Il n'est néanmoins pas très aisé de contrôler la distribution des nœuds du maillage, par exemple si on veut mettre beaucoup de points dans la couche limite ou le sillage de l'aile. Ces maillages structurés sont donc limités à des géométries relativement simples, où il est possible de trouver, analytiquement ou numériquement, une relation du type (10.7).

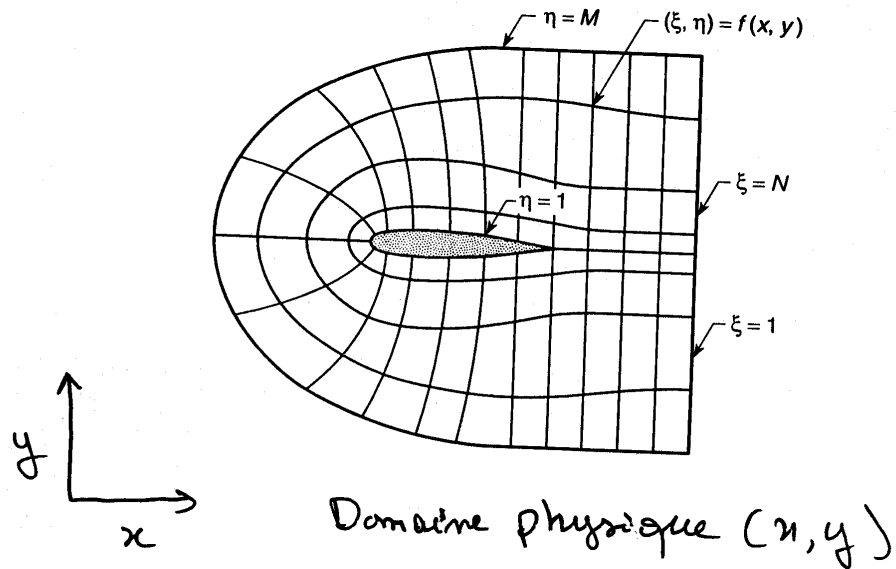


Fig. 10.2. Maillage curviligne utilisé pour l'écoulement autour d'une aile d'avion.

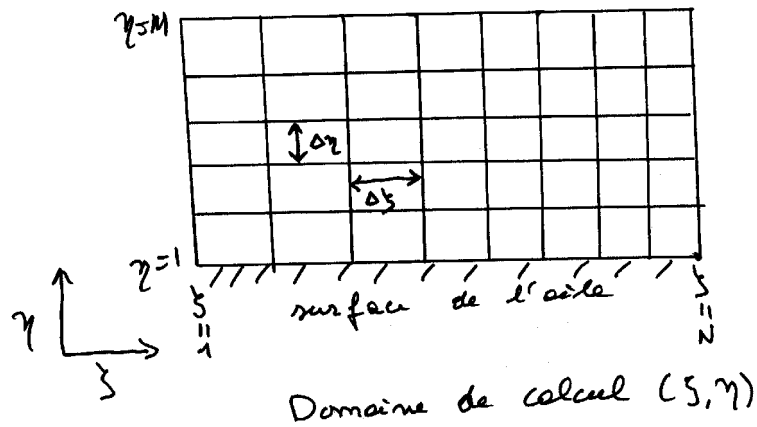


Fig. 10.3. Représentation du maillage curviligne dans le domaine de calcul (ξ, η) .

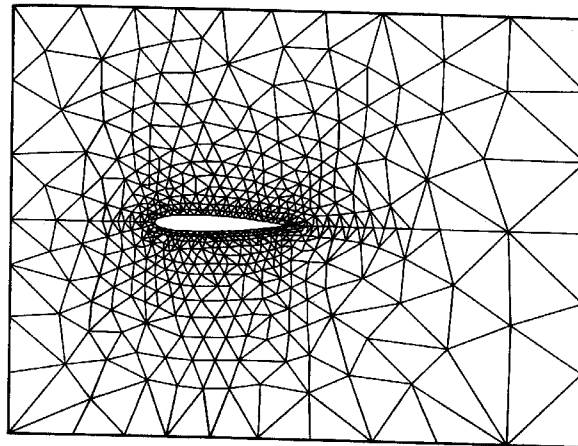


Fig. 10.4. Maillage non-structuré (triangulation) pour l'écoulement autour d'une aile d'avion.

Les maillage non-structurés

Ce type de maillage est très bien adapté aux approximations par éléments finis ou volumes finis. Dans l'exemple de la figure 10.4, par l'utilisation d'éléments triangulaires, il est possible d'augmenter la densité du maillage dans la couche limite de l'aile, sans mettre beaucoup d'éléments dans les zones éloignées du profil ou rien d'important n'apparaît.

Ce type de maillages est réalisé de manière (semi)-automatique par un logiciel de maillage appelé *mailleur*, par exemple *GAMBIT* est le mailleur utilisé par le logiciel *FLUENT*. Avec quelques semaines de travail, vous pouvez arriver à mailler le type de géométries représenté sur la figure 10.5.

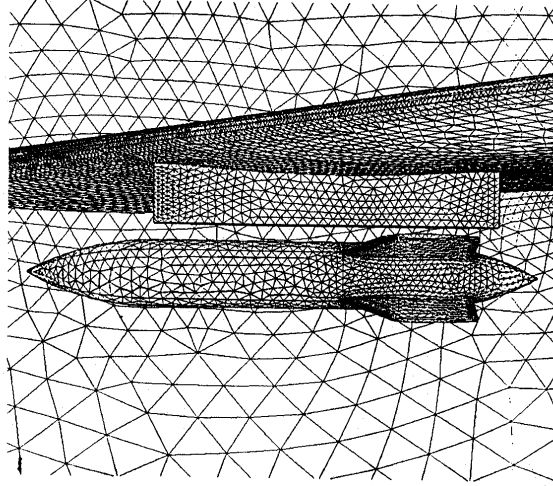


Fig. 10.5. Maillage non-structuré (héxaédral) pour une géométrie complexe tridimensionnelle (skud).

10.2 Les bases d'éléments finis

10.2.1 L'élément fini $\mathbb{P}_1$ en une dimension

Un espace d'éléments finis V_h est une base de *polynômes par morceaux* permettant de représenter des fonctions continues sur le domaine Ω . On prendra dans cet exemple $\Omega =]0, 1[$.

Nous allons définir au préalable ce qu'est un polynôme par morceaux. Considérons d'abord le maillage de Ω , tel que :

$$\Omega_h = \{x_i \in \Omega, i = 1, \dots, N\}, \quad (10.8a)$$

avec

$$0 = x_1 < x_2 < \dots < x_{N-1} < x_N = 1. \quad (10.8b)$$

Un polynôme par morceaux $p(x)$ sur Ω_h est tel que :

- p est un polynôme sur $[x_i, x_{i+1}]$,
- p est continu aux nœuds x_i .

L'espace V_h^1 des éléments finis $\mathbb{P}_1$ est l'ensemble des polynômes par morceaux définis par

$$V_h^1 = \{p, \text{ tel que } p \in C^0(0, 1), \text{ et } p|_{[x_i, x_{i+1}]} \in \mathbb{P}_1 \text{ pour } 1 \leq i \leq N-1. \} \quad (10.9)$$

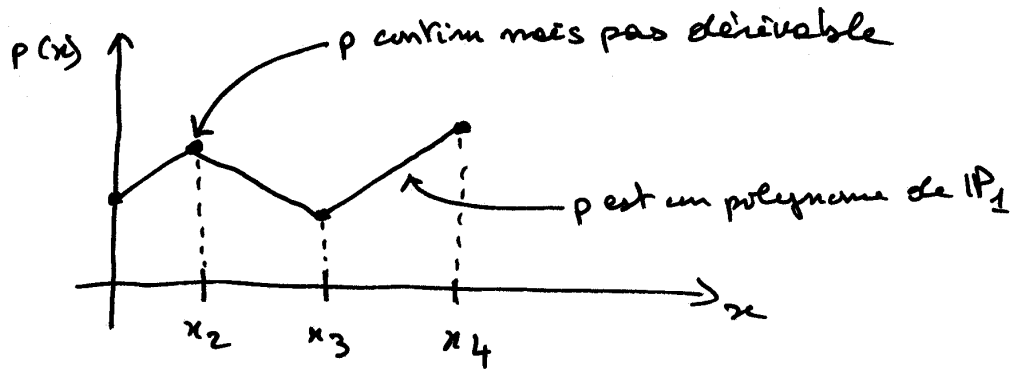
On a utilisé les définitions suivantes :

- $\mathbb{P}_1$ est l'espace des polynômes de degré inférieur ou égal à 1 (*i.e.* , de la forme $ax + b$).
- $C^0(0, 1)$ est l'espace des fonctions continues sur $]0, 1[$.

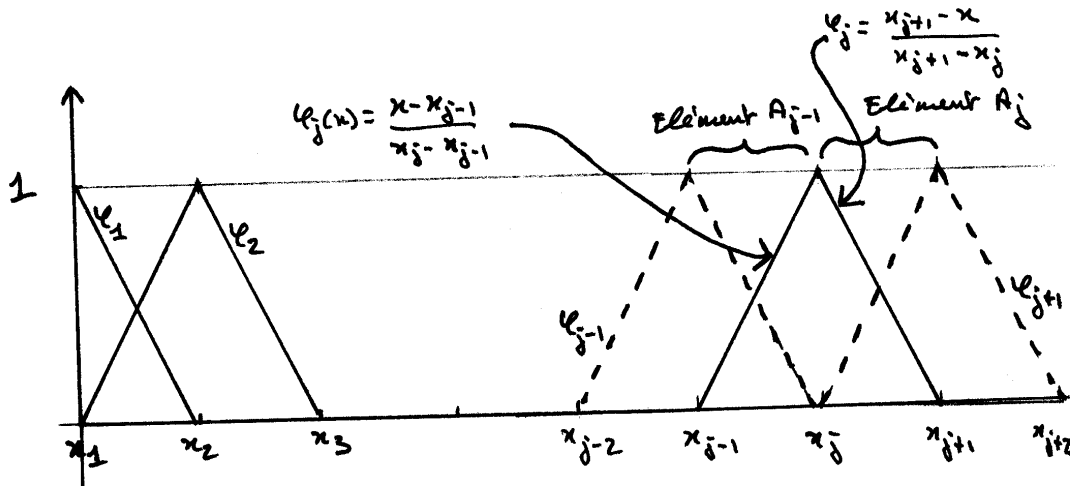
Un exemple de fonction de V_h^1 est représenté sur la figure 10.6. L'espace V_h^1 est un espace vectoriel de dimension N . Il est alors très commode de représenter ses éléments dans la base canonique de Lagrange :

$$\{\varphi_j(x) \in V_h^1, j = 1, \dots, N\}, \quad (10.10)$$

définie par :

Fig. 10.6. Polynôme par morceaux appartenant à V_h^1 .

$$\varphi_j(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x \leq x_{j-1}, \\ \frac{x - x_{j-1}}{x_j - x_{j-1}} & \text{pour } x \in [x_{j-1}, x_j], \\ \frac{x_{j+1} - x}{x_{j+1} - x_j} & \text{pour } x \in [x_j, x_{j+1}], \\ 0 & \text{si } x \geq x_{j+1}. \end{cases} \quad (10.11)$$

Fig. 10.7. Représentation de la base de Lagrange de V_h^1 .

Cette base est représentée sur la figure 10.7. Clairement, une fonction de base vérifie

$$\phi_j(x_i) = \delta_{ij}, \quad i = 1, \dots, N,$$

et un élément p de V_h^1 s'écrit dans cette base comme

$$p(x) = \sum_{j=1}^N p(x_j) \varphi_j(x). \quad (10.12)$$

c'est-à-dire que les coefficients du polynôme par morceaux sont égaux à la valeur de p aux nœuds du maillage. Puisque $\varphi_j(x)$ est non-nulle dans l'intervalle $[x_{j-1}, x_{j+1}]$ uniquement, elle s'exprime très facilement dans les éléments $A_{j-1} = [x_{j-1}, x_j]$ et $A_j = [x_j, x_{j+1}]$ comme :

$$p(x) = p(x_{j-1})\varphi_{j-1}(x) + p(x_j)\varphi_j(x), \quad \text{dans } A_{j-1},$$

et

$$p(x) = p(x_j)\varphi_j(x) + p(x_{j+1})\varphi_{j+1}(x), \quad \text{dans } A_j.$$

C'est dû au caractère local de la représentation dans la base canonique que l'approximation des opérateurs par éléments finis est creuse (plus particulièrement, en 1D, les matrices sont bandes).

10.2.2 Approximation par éléments finis et espaces de Sobolev

Il est possible de représenter une fonction continue quelconque $v(x)$ par son approximation polynômiale $v_h(x) \in V_h^1$, telle que

$$v_h(x) = \sum_{j=1}^N v(x_j)\varphi_j(x). \quad (10.13)$$

On note parfois l'interpolant v_h sous la forme :

$$v_h = \Pi_h^1 v.$$

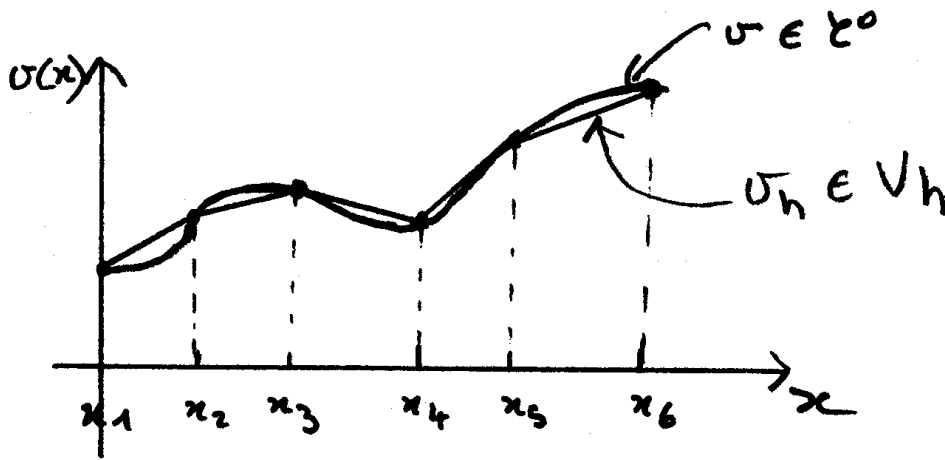


Fig. 10.8. Interpolation par éléments finis P_1 d'une fonction C^0 .

Un exemple d'interpolation de fonction continue est représenté sur la figure 10.8. Il est important de mesurer la qualité de cette approximation polynômiale (*i.e.*, l'ordre de convergence de cette approximation). Ces mesures sont effectuées dans les espaces de Sobolev $L^2(\Omega)$ et $H^1(\Omega)$.

Rappels sur les espaces de Sobolev

Soit f une fonction de $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ à valeur dans $\mathbb{R}$. L'espace vectoriel $L^2(\Omega)$ est l'ensemble des fonctions de carré intégrables, *i.e.*

$$L^2(\Omega) = \left\{ f \text{ tel que } \int_{\Omega} |f|^2 dV < +\infty \right\},$$

qui admet pour produit scalaire

$$(f, g) = \int_{\Omega} fg dV,$$

et pour norme

$$\|f\|_{L^2(\Omega)} = (f, f)^{1/2}.$$

L'espace vectoriel $H^1(\Omega)$ est l'ensemble des fonctions admettant des dérivées de carré intégrable

$$H^1(\Omega) = \left\{ f \text{ tel que } f \in L^2(\Omega) \text{ et } \nabla f \in (L^2(\Omega))^n \right\}.$$

L'espace $H^1(\Omega)$ ne possède pas de produit scalaire, mais possède une norme, définie par :

$$\|f\|_{H^1(\Omega)} = \left(\|f\|_{L^2(\Omega)}^2 + \|\nabla f\|_{(L^2(\Omega))^n}^2 \right)^{1/2}.$$

Les fonctions de $H^1(\Omega)$ sont par définition plus régulières que celle de $L^2(\Omega)$, car les dérivées d'une fonction de L^2 peuvent être des *distributions* (*i.e.*, des éléments de $H^{-1}(\Omega)$) ! On a en particulier l'inclusion

$$H^1(\Omega) \subset L^2(\Omega).$$

Une conséquence de cette plus grande régularité est qu'on peut, contrairement aux fonctions L^2 , définir la valeur au bord $\partial\Omega$ (i.e., la trace) des fonctions de $H^1(\Omega)$. Un sous-espace de $H^1(\Omega)$ très utile pour imposer les conditions aux limites de Dirichlet dans la méthode des éléments finis est :

$$H_0^1(\Omega) = \left\{ f \in H^1(\Omega) \quad \text{tel que} \quad f|_{\partial\Omega} = 0 \right\}. \quad (10.14)$$

Précision de l'interpolation $\mathbb{P}_1$

Les fonctions de base $\varphi_j(x)$ sont dérivables *une fois seulement* et on a $\varphi_j' \in L^2(\Omega)$. Donc φ_j appartient à $H^1(\Omega)$ et on a l'inclusion :

$$V_h^1 \subset H^1(\Omega).$$

On dispose en plus du résultat de convergence suivant :

Théorème 10.1. *Soit $v \in L^2(\Omega)$, avec $\Omega =]0, 1[$, telle que v' et v'' sont aussi dans $L^2(\Omega)$. Alors on dispose des estimations d'erreur suivantes :*

$$\begin{aligned} \|v - v_h\|_{L^2(\Omega)} &\leq h^2 \|v''\|_{L^2(\Omega)}, \\ \|v - v_h\|_{H^1(\Omega)} &\leq h \|v''\|_{L^2(\Omega)}, \end{aligned}$$

avec $h = \max_i |x_{i+1} - x_i|$, c.à.d. h est la taille maximale d'un élément du maillage.

En langage clair, ce théorème exprime que pour tout v dans H^1 , l'approximation polynomiale v_h converge en $\mathcal{O}(h^2)$ vers v et en $\mathcal{O}(h)$ pour ses dérivées. Ce théorème indique que V_h^1 est une bonne approximation polynômiale de H^1 , et qu'on peut raisonnablement représenter la solution $u \in H^1$ d'une EDP par sa représentation de type éléments finis u_h . On qualifie couramment V_h^1 comme une *approximation interne* de $H^1(\Omega)$.

Remarque 10.2. Les éléments finis $\mathbb{P}_1$ donnent une précision sur la solution du même ordre que les différences finies centrées. Des rapprochements entre ces deux méthodes seront énoncées en TD.

10.2.3 D'autres éléments finis

On peut généraliser le théorème 10.1 en énonçant un résultat classique de l'approximation polynomiale, qui dit qu'une approximation de polynômes par morceaux de degré k est précise en $\mathcal{O}(h^{k+1})$.

Ainsi, pour augmenter la précision des méthodes d'éléments finis, on utilise généralement des polynômes par morceaux de degré plus élevé, par exemple l'élément $\mathbb{P}_2$ qui engendre l'espace :

$$V_h^2 = \left\{ p, \quad \text{tel que} \quad p \in C^0(0, 1), \quad \text{et} \quad p|_{[x_i, x_{i+1}]} \in \mathbb{P}_2 \text{ pour } 1 \leq i \leq N-1 \right\},$$

est précis en $\mathcal{O}(h^3)$.

On peut aussi utiliser des polynômes par morceaux moins réguliers. Par exemple, une approximation interne de $L^2(\Omega)$ est l'espace V_h^0

$$V_h^0 = \left\{ p, \quad \text{tel que} \quad p \in C^0(0, 1), \quad \text{et} \quad p|_{[x_i, x_{i+1}]} \in \mathbb{P}_0 \text{ pour } 1 \leq i \leq N-1 \right\},$$

qui représente les fonctions constantes par morceaux. Les éléments de la base canonique de V_h^0 sont les fonctions en escalier. Cet espace est un espace vectoriel de dimension $N-1$.

10.3 Formulation variationnelle d'un problème aux limites

Nous allons considérer comme équation modèle le problème (elliptique) de Helmholtz :

$$\lambda u - u'' = f, \quad \text{dans } \Omega =]0, 1[, \quad (10.15)$$

avec les conditions de Dirichlet :

$$u(0) = u(1) = 0, \quad (10.16)$$

ou les conditions de Neumann

$$u'(0) = u'(1) = 0. \quad (10.17)$$

Dans la suite, nous allons considérer le problème (10.15) avec $\lambda = 0$, i.e. l'équation de Poisson. Le cas important $\lambda \neq 0$ sera vu en TD.

10.3.1 Cas de conditions de Dirichlet

Nous considérons ici le problème (10.15),(10.16) avec $\lambda = 0$. L'équation (10.15) devient alors

$$-u'' = f, \quad \text{dans } \Omega =]0, 1[, \quad (10.18)$$

avec $u \in V$, un espace fonctionnel qui est pour l'instant indéterminé. L'espace de travail V n'est pas une simple coquetterie mathématique. C'est lui qui va indiquer quel approximation interne V_h utiliser², mais il va aussi servir à imposer les conditions aux limites du problème.

En multipliant (10.18) par une fonction test $v \in V$ et en intégrant sur tout le domaine, on obtient :

$$-\int_{\Omega} u'' v \, dx = \int_{\Omega} f v \, dx, \quad \forall v \in V. \quad (10.19)$$

Le but de la *formulation variationnelle* est d'approcher la solution de (10.19) par des éléments de V_h^1 . Or ces éléments ne sont dérivables qu'une fois. Nous allons donc réécrire (10.19) en ne faisant intervenir que des dérivées premières.

En utilisant la formule d'intégration par parties :

$$\int_a^b f' g \, dx = [f g]_a^b - \int_a^b f g' \, dx,$$

l'équation (10.19) devient :

$$[u'v]_0^1 + \int_{\Omega} u' v' \, dx = \int_{\Omega} f v \, dx, \quad \forall v \in V.$$

En imposant que les fonctions tests vérifient les conditions aux limites (10.16), on obtient :

$$\int_{\Omega} u' v' \, dx = \int_{\Omega} f v \, dx, \quad \forall v \in V. \quad (10.20)$$

On peut maintenant déterminer l'espace V dans lequel vivent u et v . Pour que (10.20) ait un sens, on doit avoir au moins

$$u', v' \in L^2(\Omega), \quad v \in L^2(\Omega),$$

et, de plus, u et v doivent vérifier les C. L. homogènes (10.16). On en déduit aisément que :

$$V = H_0^1(\Omega),$$

où $H_0^1(\Omega)$ est le sous-espace de $H^1(\Omega)$ défini par (10.14). Pour que (10.20) ait un sens, on doit aussi avoir la condition sur le second-membre :

$$f \in L^2(\Omega).$$

En conclusion, si $f \in L^2(\Omega)$, le problème (10.18),(10.17) admet pour formulation variationnelle :

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Trouver } u \in V = H_0^1(\Omega) \text{ tel que} \\ a(u, v) = L(v), \quad \forall v \in V = H_0^1(\Omega), \end{array} \right. \quad (10.21)$$

avec $a(\cdot, \cdot)$ la forme bilinéaire définie par :

$$\begin{aligned} a : V \times V &\longrightarrow \mathbb{R} \\ (u, v) &\longmapsto \int_{\Omega} u' v' \, dx, \end{aligned}$$

et la forme linéaire

$$\begin{aligned} L : V &\longrightarrow \mathbb{R} \\ v &\longmapsto \int_{\Omega} f v \, dx. \end{aligned}$$

² pour briser le suspense, on utilisera $V_h = V_h^1$ l'espace des éléments finis $\mathcal{P}_1$.

10.3.2 Quelques propriétés importantes des formulations variationnelles

- On rappelle que $a(\cdot, \cdot)$ est une forme bilinéaire si et seulement si pour tout $v \in V$, les applications $u \mapsto a(u, v)$ et $u \mapsto a(v, u)$ sont des formes linéaires.
- Il y a (généralement) équivalence entre la formulation *forte* et *faible* d'un problème : on peut montrer que, au sens des distributions :

$$u \text{ solution du problème fort (10.18),(10.17)} \iff u \text{ solution du problème faible (10.21)}.$$

- La forme bilinéaire $a(\cdot, \cdot)$ est *symétrique* :

$$\forall u, v \in V, \quad a(u, v) = a(v, u).$$

- La forme bilinéaire $a(\cdot, \cdot)$ est *positive* :

$$\forall v \in V, \quad a(v, v) \geq 0.$$

Ces deux dernières propriétés remarquables permettent de démontrer que la formulation faible (10.21) est équivalente à un problème d'optimisation. Soit J la fonctionnelle définie par :

$$J : V \longrightarrow \mathbb{R}$$

$$u \longmapsto J(u) = \frac{1}{2} a(u, u) - (f, u),$$

et considérons le problème d'optimisation

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Trouver } u \in V \text{ tel que :} \\ J(u) = \inf_{v \in V} J(v). \end{array} \right.$$

On peut montrer que ce problème d'optimisation est équivalent à la formulation faible (10.21)³. En particulier, les algorithmes issus de l'optimisation (par exemple, la méthode du gradient conjugué) sont bien adaptés aux problèmes issus des éléments finis.

10.3.3 Cas des conditions de Neumann

D.I.Y.

³ Indication : former l'équation d'Euler du problème à minimiser (cf. section 1.4).

10.4 Discrétisation par éléments finis $\mathcal{P}_1$ du problème variationnel

On va maintenant considérer la discrétisation du problème variationnel (10.21) par les éléments finis $\mathcal{P}_1$. Ce problème est bien posé dans l'espace fonctionnel $H_0^1(\Omega)$ de dimension infinie. Pour obtenir une solution discrète u_h de (10.21), nous allons utiliser un espace polynômial V_h tel que :

$$V_h \cong V = H_0^1(\Omega).$$

Cet espace sera construit à partir de l'espace d'éléments finis V_h^1 défini dans la section 10.2 :

$$V_{0h}^1 = \left\{ v \in V_h^1, \quad v(0) = v(1) = 0 \right\}. \quad (10.22)$$

10.4.1 Le problème variationnel discret

L'approximation par éléments finis de (10.21) s'écrit alors :

$$\begin{cases} \text{Trouver } u_h \in V_{0h}^1 \text{ tel que} \\ a(u_h, v_h) = L(v_h), \quad \forall v_h \in V_{0h}^1. \end{cases} \quad (10.23)$$

D'après les définitions de $a(\cdot, \cdot, \cdot)$ et de L , ce problème s'écrit aussi :

$$\text{Trouver } u_h \in V_{0h}^1 \text{ tel que : } \int_{\Omega} u_h' v_h' dx = \int_{\Omega} f v_h dx, \quad \forall v_h \in V_{0h}^1.$$

Afin de représenter (10.23) sous forme matricielle, nous avons besoin de déterminer la base canonique de V_{0h}^1 , qui s'écrit :

$$\{\varphi_j(x) \in V_h^1, \quad j = 2, \dots, N-1\}, \quad (10.24)$$

et qui correspond à la base de V_h^1 (Eq. (10.10)) à laquelle on a retiré les fonctions $\varphi_0(x)$ et $\varphi_N(x)$ de manière à ce que les éléments de V_{0h}^1 prennent une valeur nulle aux bords.

En écrivant la solution discrète dans la base canonique

$$u_h(x) = \sum_{j=2}^{N-1} u_j \varphi_j(x), \quad (10.25)$$

et en choisissant les fonctions test v_h comme les éléments de la base canonique de V_{0h}^1 , i.e.

$$v_h(x) = \varphi_i(x), \quad i = 2, \dots, N-1, \quad (10.26)$$

alors le problème (10.23) s'écrit :

$$\begin{cases} \text{Trouver } (u_2, \dots, u_{N-1}) \in \mathbb{R}^{N-2} \text{ tel que} \\ \sum_{j=2}^{N-1} a(\varphi_i, \varphi_j) u_j = L(\varphi_i), \quad \forall i = 2, \dots, N-1, \end{cases} \quad (10.27)$$

en utilisant la bilinéarité de $a(\cdot, \cdot)$. Ce problème prend la forme matricielle

$$\mathcal{K}U = F, \quad (10.28)$$

avec

$$U = (u_2, \dots, u_{N-1})^T,$$

le vecteur solution (les C.L. ont servi pour déterminer $u_1 = u_N = 0$). Le second membre F est souvent appelé *vecteur charge*, et il a pour expression :

$$F = (L(\varphi_j))_{j=2, \dots, N-2} = \left(\int_{\Omega} f \varphi_2 dx, \dots, \int_{\Omega} f \varphi_{N-1} dx \right)^T.$$

La matrice $\mathcal{K}$ de taille $N-2 \times N-2$ est appelée *matrice de rigidité*. Elle correspond à la discrétisation par éléments finis de l'opérateur $-d^2/dx^2$ avec conditions aux limites de Dirichlet ; ses composantes sont :

$$\mathcal{K}_{ij} = a(\varphi_i, \varphi_j) = \int_{\Omega} \varphi_i' \varphi_j' dx. \quad (10.29)$$

On vient de montrer que le problème variationnel discret (10.23) peut se formuler en un système linéaire. Puisque la matrice de rigidité $\mathcal{K}$ est symétrique, définie positive (c'est une des conséquences des propriétés énoncées dans la section 10.3.2), ce problème possède une unique solution et la méthode du gradient conjugué est très bien adapté à sa résolution.

10.4.2 Explicitation du système discret pour un maillage uniforme

La détermination des composantes de la matrice de rigidité $\mathcal{K}$ et du vecteur charge F nécessitent l'évaluation des intégrales où apparaissent les fonctions de base φ_j et le second membre f .

Pour cet exemple $1D$, il est facile de calculer de manière exacte les éléments de $\mathcal{K}$, en remarquant que, d'après la figure 10.7, pour tout $i = 2, \dots, N-1$,

$$\mathcal{K}_{ij} = \int_{\Omega} \varphi'_i \varphi'_j \, dx \neq 0 \quad \text{pour } j = i-1, i, i+1 \text{ uniquement.}$$

La matrice $\mathcal{K}$ est donc tridiagonale symétrique. Dans le cas d'un maillage uniforme, puisque les φ_j sont identiques à une translation près, il suffit de calculer $\mathcal{K}_{i,i-1}$ et $\mathcal{K}_{ii}$, puis de poser par arguments de symétrie et de translation

$$\mathcal{K}_{i,i+1} = \mathcal{K}_{i,i-1},$$

pour déterminer $\mathcal{K}$ complètement.

En posant

$$h = \frac{b-a}{N-1} = \frac{1}{x_j - x_{j-1}},$$

les fonctions de base s'écrivent, d'après (10.11) :

$$\varphi_j(x) = \begin{cases} \frac{x - x_{j-1}}{h} & \text{pour } x \in [x_{j-1}, x_j], \\ \frac{x_{j+1} - x}{h} & \text{pour } x \in [x_j, x_{j+1}], \end{cases}$$

et leur dérivée

$$\varphi'_j(x) = \begin{cases} \frac{1}{h} & \text{pour } x \in [x_{j-1}, x_j], \\ -\frac{1}{h} & \text{pour } x \in [x_j, x_{j+1}]. \end{cases}$$

Pour $j = i-1$, on a

$$\mathcal{K}_{i,i-1} = \int_{\Omega} \varphi'_i \varphi'_{i-1} \, dx,$$

qui s'écrit, en utilisant le fait que le produit $\varphi'_i \varphi'_{i-1}$ a support dans $[x_{i-1}, x_i]$ uniquement :

$$\mathcal{K}_{i,i-1} = \int_{x_{i-1}}^{x_i} \varphi'_i \varphi'_{i-1} \, dx = \int_{x_{i-1}}^{x_i} \frac{1}{h} \times \frac{1}{h} \, dx = \frac{1}{h}.$$

De même,

$$\mathcal{K}_{ii} = \int_{\Omega} (\varphi'_i)^2 \, dx = \int_{x_{i-1}}^{x_i} \frac{1}{h^2} \, dx + \int_{x_i}^{x_{i+1}} \frac{1}{h^2} \, dx = \frac{2}{h}.$$

On en déduit que pour des conditions de Dirichlet sur maillage uniforme, la matrice de rigidité $\mathcal{K}$, de taille $N-2 \times N-2$, prend la forme :

$$\mathcal{K} = \frac{1}{h} \begin{pmatrix} 2 & -1 & & \\ -1 & 2 & -1 & \\ & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & -1 & 2 & -1 \\ & & & -1 & 2 \end{pmatrix}, \quad (10.30)$$

qu'on a déjà rencontré en différences finies (section 3.1).

Remarque 10.3 (Conditions de Neumann). Dans le cas des conditions de Neumann (section 10.3.3), la matrice de rigidité est de taille $N \times N$, et elle s'écrit :

$$\mathcal{K} = \frac{1}{h} \begin{pmatrix} 1 & -1 & & \\ -1 & 2 & -1 & \\ & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & -1 & 2 & -1 \\ & & & -1 & 1 \end{pmatrix}. \quad (10.31)$$

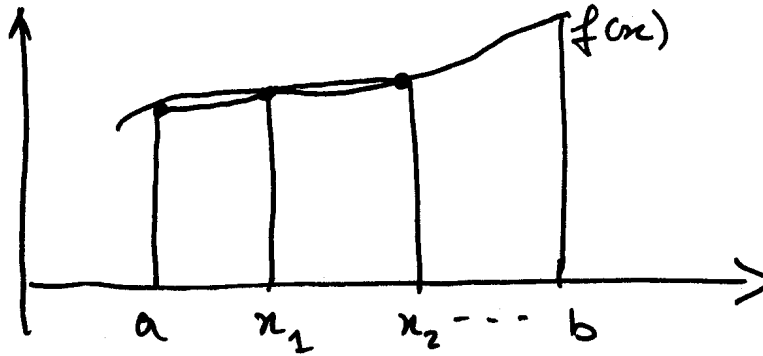


Fig. 10.9. Intégration d'une fonction f par la formule du trapèze.

Le calcul du vecteur charge F fait intervenir le terme analytique $f(x)$, ce qui rend son intégration exacte plus compliquée que précédemment. Pour cela, dans les codes d'éléments finis, on utilise couramment des formules de quadrature numérique (trapèze, Simpson, Gauss, ..., etc). L'une des plus utilisées est la formule du trapèze. Comme représenté sur la figure 10.9, l'intégrale de f sur $[a, b]$ est écrite comme la somme de son aire sur chaque élément du maillage, *i.e.*

$$\int_a^b f(x) \, dx = \sum_{k=1}^{N-1} \int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x) \, dx,$$

et chaque aire élémentaire est évaluée par la formule de quadrature du trapèze :

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x) \, dx \cong I_{x_i}^{x_{i+1}}(f) = \frac{x_{i+1} - x_i}{2} (f(x_{i+1}) + f(x_i)).$$

D'après Quarteroni [9], l'erreur de quadrature de cette approximation s'écrit

$$\bar{E} \equiv \left| \int_a^b f(x) \, dx - I_a^b(f) \right| = \frac{b-a}{12} h^2 f''(\xi), \quad \text{avec } \xi \in [a, b],$$

où, comme précédemment, $h = \max_i |x_{i+1} - x_i|$. Cette formule est donc précise au second-ordre pour $f(x)$ quelconque. De plus, elle est *exacte* pour les polynômes par morceaux de degré 1. Elle peut donc être utilisée pour calculer la matrice de rigidité $\mathcal{K}$ de façon exacte, puisque $\varphi'_i \varphi'_j$ est un polynôme par morceaux de degré 0. Si une formule de quadrature est introduite dans une méthode d'éléments finis pour calculer des termes de façon approchée seulement, on parle alors de *crime variationnel* (cf. TD).

15 La méthode des volumes finis

La méthode des volumes finis est maintenant l'une des plus répandues pour simuler numériquement les écoulements de fluides. Sa principale caractéristique est d'utiliser la formulation intégrale (ou "conservative") des équations de bilan de la mécanique (*cf.* Section 4.1). C'est une différence conceptuelle majeure avec la méthode des différences finies, qui utilise la forme différentielle de ces équations).

Dans la méthode des volumes finis, le domaine physique est subdivisé en un nombre fini de volumes de contrôle (CVs), et les lois de conservation du problème physique sont exprimées à l'intérieur de chaque CV : on obtient alors une équation algébrique par volume de contrôle. Ce principe de discrétisation peut s'appliquer à des CVs de forme arbitraire, et donc à des géométries complexes. C'est une seconde différence majeure avec les différences finies, qui ne sont généralement applicables qu'à des géométries rectangulaires.

Malgré les différences évoquées ci-dessus, ces deux discrétisations ont de nombreux points communs. Pour des applications simples (maillages rectangulaires uniformes, coefficients constants, *etc.*...) les discrétisation par volumes finis centrés en sommets (*cf.* Sect. 15.2.2) et par différences finies sont rigoureusement identiques. Des divergences apparaissent lorsque, par exemple, les coefficients de l'équation à résoudre sont non constants ou discontinus : il est alors recommandé d'utiliser une formulation volume finis.

Les notions de troncature, stabilité, dissipation artificielle, *etc.*..., d'un schéma numérique restent valables pour les volumes finis : les connaissances de base en différences finies se révéleront donc précieuses pour la suite des événements.

Puisque les équations de bilan de la mécanique ont une forme semblable à l'équation de convection-diffusion (*cf.* Chap. 4), la semi-discrétisation (*i.e.* discrétisation spatiale) par volumes finis sera présentée pour cette dernière équation. L'intégration en temps sera abordé ensuite : elle est basée, comme pour les différences finies, sur des schémas pour équations différentielles ordinaires (EDOs). Cette partie reprendra de manière unifiée la plupart des schémas temporels présentés dans la partie II de ces notes.

15.1 Principes de la discrétisation : cas de l'équation de convection-diffusion

Le principe de la discrétisation par volumes finis est présentée pour l'équation de convection-diffusion (4.11) avec $\rho = 1$, soit :

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\phi \mathbf{v}) - \nabla \cdot (\nu \nabla \phi) = q. \quad (15.1)$$

Dans cette équation, le coefficient de diffusion $\nu \geq 0$, le terme source q et la vitesse de convection $\mathbf{v} = (u, v)$ sont donnés. Cette équation sera résolue dans le domaine $\Omega \subset \mathbb{R}^2$, avec des conditions de Dirichlet

$$\phi(t, \mathbf{x}) = f(\mathbf{x}), \quad \forall \mathbf{x} \in \Gamma_D, \quad (15.2a)$$

et/ou de Neumann

$$\frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{n}}(t, \mathbf{x}) = g(\mathbf{x}), \quad \forall \mathbf{x} \in \Gamma_N. \quad (15.2b)$$

Le vecteur $\mathbf{n}$ désigne (comme toujours) la normale extérieure, et les frontières Γ_D et Γ_N sont des parties disjointes ($\Gamma_D \cap \Gamma_N = \emptyset$) de la paroi $\Gamma = \partial\Omega$ du domaine. La condition initiale est :

$$\phi(t = 0, \mathbf{x}) = \phi_0(\mathbf{x}). \quad (15.3)$$

La discrétisation de ce problème repose sur la forme conservative de (15.1), soit :

$$\int_{\Omega} \frac{\partial \phi}{\partial t} dV + \int_{\Gamma} (\mathbf{F}^c - \mathbf{F}^d) \cdot \mathbf{n} d\Gamma = \int_{\Omega} q dV, \quad (15.4)$$

où les vecteurs $\mathbf{F}^c$ et $\mathbf{F}^d$ désignent respectivement les flux convectif et diffusif, soit :

$$\mathbf{F}^c \equiv \phi \mathbf{v}, \quad \mathbf{F}^d \equiv \nu \nabla \phi. \quad (15.5)$$

Le point de départ de la discrétisation par volumes finis consiste à subdiviser Ω en un nombre fini de *volumes de contrôle* (ou *cellules*) notés Ω_l , tels que

$$\Omega = \bigcup_{l=1}^N \Omega_l, \quad (15.6a)$$

et qui sont supposés disjoints :

$$\Omega_l \cap \Omega_m = \emptyset, \quad l \neq m. \quad (15.6b)$$

Cette subdivision est appelée le *maillage* de Ω , et on note Γ_l la frontière de chaque cellule élémentaire Ω_l . La forme conservative (15.4) s'écrit alors dans la cellule Ω_l comme :

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega_l} \phi \, dV + \int_{\Gamma_l} (\mathbf{F}^c - \mathbf{F}^d) \cdot \mathbf{n} \, d\Gamma = \int_{\Omega_l} q \, dV. \quad (15.7)$$

par application du théorème de Reynolds 4.1 pour un volume fixe en temps. Afin d'obtenir un système d'équations algébriques, il est nécessaire de définir les inconnues discrètes $\{\phi_l, l = 1, \dots, N\}$. Ces inconnues sont couramment définies comme la valeur moyenne de ϕ dans la cellule Ω_l , soit

$$\phi_l \equiv \frac{1}{V_l} \int_{\Omega_l} \phi \, dV, \quad (15.8)$$

où V_l désigne le volume de la cellule Ω_l . De même, on définit le second-membre de (15.7) comme

$$q_l \equiv \frac{1}{V_l} \int_{\Omega_l} q \, dV. \quad (15.9)$$

On montrera dans les paragraphes suivants qu'il est possible d'exprimer les intégrales de flux convectif ou diffusif de (15.7) en fonction des inconnues ϕ_l : soit, formellement

$$\int_{\Gamma_l} \mathbf{F} \cdot \mathbf{n} \, d\Gamma \cong V_l F_h(\phi_l), \quad (15.10)$$

où F_h représente une approximation discrète du flux $\mathbf{F}$.

L'approximation par volumes finis de l'équation de convection-diffusion s'écrit alors :

$$\frac{d}{dt} \phi_l + F_h^c(\phi_l) - F_h^d(\phi_l) = q_l, \quad l = 1, \dots, N, \quad (15.11)$$

ce qui correspond à une équation différentielle algébrique. Ce système peut alors être intégré en temps avec tout schéma pour *EDO* convenable.

Les paragraphes suivants vont décrire pas à pas les étapes permettant d'arriver au système discret (15.11), qui comprennent :

1. La définition du maillage de volumes finis,
2. L'approximation des flux convectifs et diffusifs au travers des parois d'une cellule,
3. L'approximation des flux au travers des parois du domaine : *i.e.* l'imposition des conditions aux limites.

15.2 Les maillages de volumes finis

Comme on l'a mentionné dans l'introduction, les volumes de contrôle peuvent avoir une forme arbitraire, et faire donc partie d'un maillage non-structuré. Cependant, dans la suite du cours, on ne considérera que des maillages quadrangulaires.

15.2.1 Maillages centrés en cellules ("cell centered")

Afin de discrétiser le domaine Ω , on choisit en premier lieu une subdivision de Ω par cellules rectangulaires

$$\Omega_{ij} =]x_{i-\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}}[\times]y_{j-\frac{1}{2}}, y_{j+\frac{1}{2}}[,$$

pour $i = 1, \dots, N_x$, $j = 1, \dots, N_y$, qui respecte les propriétés (15.6).

On pose $\Delta x_i = x_{i+\frac{1}{2}} - x_{i-\frac{1}{2}}$ et $\Delta y_j = y_{j+\frac{1}{2}} - y_{j-\frac{1}{2}}$: la cellule Ω_{ij} est donc de taille $V_{ij} = \Delta x_i \times \Delta y_j$. Ce maillage est de type structuré, formé de quadrangles de taille non-uniforme.

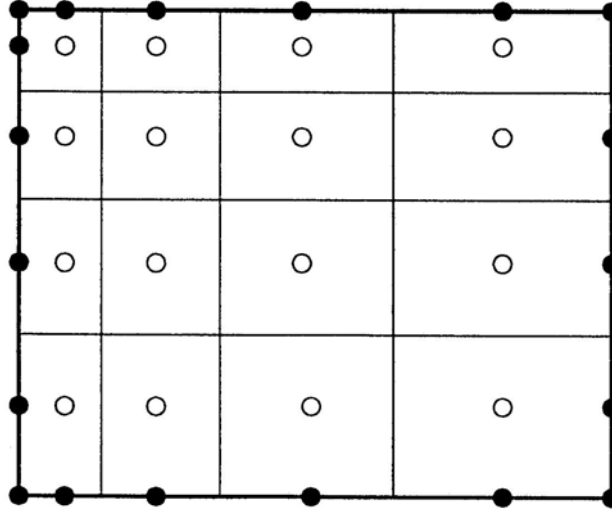


Fig. 15.1. Maillage non-uniforme centré en cellules. Les nœuds ○ sont placés au *centre* de chaque volume de contrôle (ou cellule). Les symboles ● désignent les points où sont interpolées les conditions aux limites (cf. Section 15.3.4).

Ensuite, on place le nœud $\mathbf{x}_{ij} = (x_i, y_j)$ au *centre* de la cellule Ω_{ij} . L'espacement des nœuds dans chaque direction est :

$$x_{i+1} - x_i = \frac{\Delta x_i}{2} + \frac{\Delta x_{i+1}}{2} \equiv \widetilde{\Delta x}_i, \quad (15.12a)$$

$$y_{j+1} - y_j = \frac{\Delta y_j}{2} + \frac{\Delta y_{j+1}}{2} \equiv \widetilde{\Delta y}_j. \quad (15.12b)$$

Une représentation de ce type de maillages est donnée dans la figure 15.1. Notons que dans un maillage centré en cellule, il n'y a pas de nœuds sur la frontière $\Gamma = \partial\Omega$ du domaine de calcul.

Une autre conséquence de cette construction est que les frontières des cellules ne se situent pas à égale distance des nœuds, sauf dans le cas particulier d'un maillage uniforme (*i.e.*, $\Delta x_i = \Delta x_{i+1}$).

Remarque 15.1. Inutile ? : En effet, si on désigne par $x_{i+\frac{1}{2}}$ l'abscisse de la frontière séparant Ω_{ij} de $\Omega_{i+1,j}$, on obtient :

$$x_{i+\frac{1}{2}} \equiv x_i + \frac{\Delta x_i}{2} = x_{i+1} - \frac{\Delta x_{i+1}}{2}.$$

Mais, en utilisant (15.12),

$$\frac{x_i + x_{i+1}}{2} = x_{i+\frac{1}{2}} + \frac{1}{4}(\Delta x_{i+1} - \Delta x_i),$$

ce qui montre que la frontière des cellules est située au milieu des nœuds uniquement dans le cas particulier d'un maillage uniforme.

Pour ce type de maillages, il est possible de relier la valeur moyenne des variables (15.8) aux valeurs nodales : en effet, en utilisant la formule de quadrature du point milieu pour approcher les intégrales de volume, on obtient :

$$\phi_{ij} \equiv \frac{1}{V_{ij}} \int_{\Omega_{ij}} \phi \, dV \cong \phi(\mathbf{x}_{ij}), \quad (15.13)$$

ce qui montre que l'inconnue ϕ_{ij} est une approximation de la valeur de ϕ au *centre* de la cellule. De même, pour le terme source, on obtient

$$q_{ij} \cong q(\mathbf{x}_{ij}). \quad (15.14)$$

15.2.2 Maillages centrés en nœuds (“vertex centered”)

Il existe un autre type de maillage de volumes finis : les maillages centrés en nœuds. Dans cette variante, une distribution de nœuds est créée en premier lieu, comme en différences finies. Ensuite, les volumes de contrôle sont construits en plaçant chaque face au milieu de 2 nœuds voisins (cf. Fig. 15.2).

Ainsi, la différence majeure avec le maillage centré en cellule est qu'il y a des nœuds sur la frontière du domaine, et que les nœuds ne sont plus situés *a priori* au centre des cellules. Cela entraîne des différences mineures sur l'expression des flux discrets, qui disparaissent dans le cas de maillages uniformes, sauf près des bords. Néanmoins, l'ordre de troncature des discrétisations sur maillages centrés en nœuds ou en cellules est globalement similaire, même pour des maillages non-uniformes (cf. [14]).

Enfin, notons que c'est la discrétisation sur maillages centrés en nœuds qui a le plus de point commun avec les différences finies : pour l'équation de convection-diffusion avec coefficients constants, elles sont même rigoureusement identiques.

Dans la suite du cours, nous ne détaillerons pas cette variante des volumes finis.

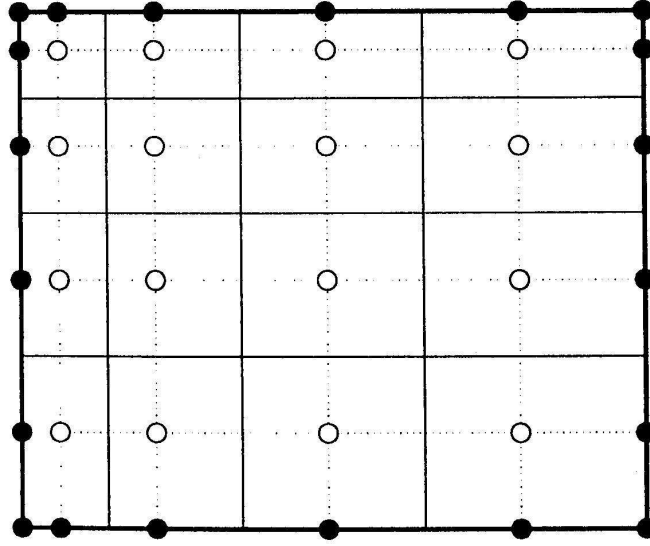


Fig. 15.2. Maillage non-uniforme centré en nœuds. Les volumes de contrôle sont créés en plaçant chacune de leurs faces au milieu des nœuds. Les nœuds (○) sont utilisés pour discrétiser les équations, tandis que les nœuds (●) servent à implémenter les conditions aux limites.

15.3 Approximation des flux sur un maillage centré en cellules

Dans cette partie, nous allons décrire la marche à suivre pour discrétiser les flux convectifs et diffusifs dans le cas de maillages centrés en cellules. Pour cela, il est plus aisé d'utiliser les notations géographiques introduites dans le paragraphe 8.1. Ces notations sont résumées dans la figure 15.3, et on notera en particulier que :

- La cellule Ω_{ij} est renommée Ω_P . Son volume est noté $V_P = \Delta x_P \times \Delta y_P$.
- Ω_P a une frontière (ou "face") commune avec 4 cellules voisines : Ω_S , Ω_W , Ω_N et Ω_E . Le centre de ces cellules est indexé avec une majuscule : par exemple, x_P est le centre de Ω_P .
- La frontière de Ω_P se décompose comme

$$\Gamma_P = \Gamma_s \cup \Gamma_w \cup \Gamma_n \cup \Gamma_e,$$

tel que, par exemple, la frontière Γ_e représente la face 'est' de Ω_P , qui la sépare de Ω_E .

- Le centre des faces est indicé en minuscule : par exemple, x_e est le centre de Γ_e .
- De même, les normales extérieures à la surface de Ω_P sont indexées en minuscule : par exemple, n_e est la normale extérieure sur la face 'est'.

15.3.1 Evaluation des intégrales surfaciques

Soit $\mathbf{F} = (F_x, F_y)$ une fonction de flux convectif ou diffusif. On veut déterminer une approximation du flux $\mathbf{F} \cdot \mathbf{n}$ au travers de la cellule élémentaire Ω_P , soit :

$$\frac{1}{V_P} \int_{\Gamma_P} \mathbf{F} \cdot \mathbf{n} \, d\Gamma = \frac{1}{V_P} \left[\int_{\Gamma_e} \mathbf{F} \cdot \mathbf{n}_e \, dy + \int_{\Gamma_w} \mathbf{F} \cdot \mathbf{n}_w \, dy + \int_{\Gamma_n} \mathbf{F} \cdot \mathbf{n}_n \, dx + \int_{\Gamma_s} \mathbf{F} \cdot \mathbf{n}_s \, dx \right] \quad (15.15a)$$

$$= \frac{1}{\Delta x_P \Delta y_P} \left[\int_{\Gamma_e} F_x \, dy - \int_{\Gamma_w} F_x \, dy + \int_{\Gamma_n} F_y \, dx - \int_{\Gamma_s} F_y \, dx \right]. \quad (15.15b)$$

Pour approcher chacune de ces intégrales, on utilise la formule du point milieu. Par exemple, on obtient sur la face Γ_e :

$$\int_{\Gamma_e} F_x \, dy \cong \Delta y_P (F_x)_e,$$

et on déduit alors l'approximation suivante du flux :

$$\frac{1}{V_P} \int_{\Gamma_P} \mathbf{F} \cdot \mathbf{n} \, d\Gamma \cong F_h \equiv \frac{1}{\Delta x_P} \left[(F_x)_e - (F_x)_w \right] + \frac{1}{\Delta y_P} \left[(F_y)_n - (F_y)_s \right]. \quad (15.16)$$

La fonction F_h est appelée fonction de flux discret. L'approximation du flux en fonction de ses valeurs nodales n'est pas encore achevée, car on vient simplement d'exprimer F_h en fonction des nœuds s, w, n et e de la surface de Ω_P .

Dans une seconde étape, nous allons *interpoler* ces valeurs surfaciques en fonction des valeurs nodales S, W, N, E et P. Pour cela, il convient de distinguer le cas des flux convectifs et diffusifs.

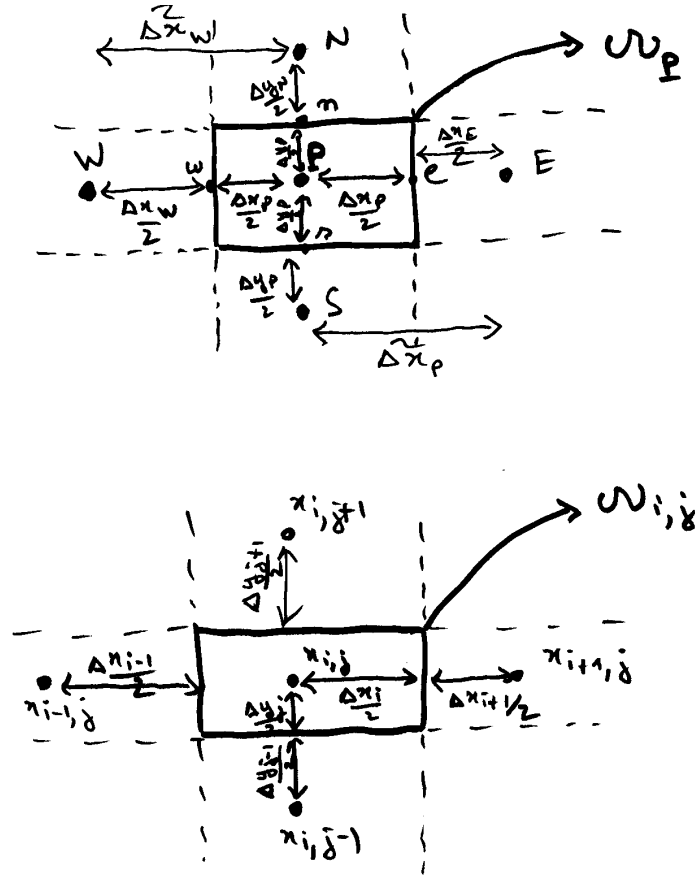


Fig. 15.4. Volume élémentaire Ω_P pour un maillage non-uniforme centré en cellules.

$$F_h^c = \frac{u}{2\Delta x} [\phi_E - \phi_W] + \frac{v}{2\Delta y} [\phi_N - \phi_S], \quad (15.23)$$

et on retrouve la formule centrée des différences finies. L'interpolation (15.19) conduit donc à une approximation centrée du flux convectif¹.

Remarque 15.3. L'ordre de convergence d'un schéma de volumes finis utilisant des interpolations du type (15.19) pour les flux convectifs est au second-ordre, même sur maillage non-uniforme [14].

Néanmoins, l'interpolation (15.19) n'est en toute rigueur précise au second-ordre que sur des maillages uniformes. Notez en effet que la face Γ_e n'est pas située à égale distance des nœuds P et E sur un maillage non-uniforme : son abscisse $x_e \in [x_P, x_E]$ prend la valeur

$$x_e = \lambda_e x_E + (1 - \lambda_e) x_P, \quad (15.24a)$$

avec

$$\lambda_e \equiv \frac{x_e - x_P}{x_E - x_P} = \frac{\Delta x_P}{2\Delta x_P}, \quad \widetilde{\Delta x_P} \equiv \frac{\Delta x_P}{2} + \frac{\Delta x_E}{2}. \quad (15.24b)$$

Il est alors possible d'utiliser cette formule pour améliorer l'erreur de troncature locale de l'interpolation des flux. En effet, le flux sur la face 'e' s'écrit alors :

$$(u\phi)_e = u_e \phi(\lambda_e x_E + (1 - \lambda_e) x_P, y_P), \quad (15.25)$$

et en supposant que ϕ varie linéairement dans $[x_P, x_E]$, on obtient :

$$(u\phi)_e \cong u_e [\lambda_e \phi(x_E, y_P) + (1 - \lambda_e) \phi(x_P, y_P)] \quad (15.26a)$$

$$= \lambda_e u_e \phi_E + (1 - \lambda_e) u_e \phi_P. \quad (15.26b)$$

De même pour la face Γ_w , l'abscisse x_w s'écrit :

¹ Aussi notée *CDS* : "Centered Differencing Scheme".

$$x_W = \lambda_W x_P + (1 - \lambda_W) x_W, \quad \lambda_W \equiv \frac{x_W - x_W}{x_P - x_W} = \frac{\Delta x_W}{2\Delta x_W}, \quad \widetilde{\Delta x_W} \equiv \frac{\Delta x_W}{2} + \frac{\Delta x_P}{2}. \quad (15.27)$$

L'interpolation linéaire entre les nœuds W et P conduit à :

$$(u\phi)_W \cong \lambda_W u_W \phi_P + (1 - \lambda_W) u_W \phi_W. \quad (15.28)$$

Ces approximations se réduisent à (15.20) et (15.21) dans le cas uniforme, et conduisent à une approximation centrée dont l'erreur de troncature reste au second-ordre sur tout type de maillage. Certains auteurs (*cf.* [14]) déconseillent néanmoins l'utilisation de ces formules, en raison de la rupture de symétrie du système algébrique ainsi construit.

Approximations décentrées

Au lieu d'interpoler ϕ_e linéairement entre les valeurs ϕ_P et ϕ_E (Eq. (15.26)), nous allons l'approximer suivant la direction de la convection $\mathbf{v}$ au travers de la face 'e' de la cellule, tel que :

$$\phi_e = \begin{cases} \phi_P & \text{si } (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n})_e \geq 0, \\ \phi_E & \text{si } (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n})_e < 0. \end{cases} \quad (15.29)$$

Des approximations similaires sont utilisées pour les trois autres faces. Comme on le constatera ci-après, cette approximation correspond à un décentrage upwind du terme convectif².

Par exemple, dans le cas où $(\mathbf{v} \cdot \mathbf{n})_e \geq 0$, l'approximation (15.29) conduit à :

$$(u\phi)_e \cong u_e \phi_P.$$

Si $\mathbf{v} \cdot \mathbf{n} \geq 0$ au travers de chaque face de Ω_P , le flux discret s'écrit :

$$F_h^c = \frac{1}{\Delta x_P} [u_e \phi_P - u_W \phi_W] + \frac{1}{\Delta y_P} [v_n \phi_P - v_s \phi_S], \quad (15.30)$$

et si, de plus, on suppose que $\mathbf{v}$ est constante, on obtient :

$$F_h^c = u \delta_x^- \phi_{ij} + v \delta_y^- \phi_{ij}, \quad (15.31)$$

et on reconnaît l'approximation décentrée amont (5.14) des différences finies, valable sur maillages non-uniformes.

Remarque 15.4. Astuce de programmation : la généralisation de (15.31) aux vitesses de convection > 0 ou < 0 s'écrit :

$$F_h^c = \frac{1}{2} \left[(u - |u|) \delta_x^+ + (u + |u|) \delta_x^- \right] \phi_{ij} + \frac{1}{2} \left[(v - |v|) \delta_y^+ + (v + |v|) \delta_y^- \right] \phi_{ij}.$$

Plus généralement, le test (15.29) conduit à l'approximation

$$(u\phi)_e \cong \frac{1}{2} (u_e + |u_e|) \phi_P + \frac{1}{2} (u_e - |u_e|) \phi_E,$$

pour u_e de signe quelconque, et on obtient l'approximation suivante du flux convectif :

$$F_h^c = \frac{1}{\Delta x_P} \left[\frac{1}{2} (u_e - |u_e|) \phi_E + \frac{1}{2} [(u_e + |u_e|) - (u_W - |u_W|)] \phi_P - \frac{1}{2} (u_W + |u_W|) \phi_W \right] \\ + \frac{1}{\Delta y_P} \left[\frac{1}{2} (v_n - |v_n|) \phi_N + \frac{1}{2} [(v_n + |v_n|) - (v_s - |v_s|)] \phi_P - \frac{1}{2} (v_s + |v_s|) \phi_S \right],$$

qui généralise (15.30) aux vitesses de convection quelconques.

On connaît les désavantages de l'approximation upwind (15.30) : elle est précise au premier ordre uniquement, et introduit une forte dissipation numérique. De nombreuses stratégies ont été proposées pour augmenter la précision des formules décentrées. La plus populaire est l'approximation *QUICK*³, qui interpole ϕ_e en utilisant 3 nœuds décentrés suivant la direction de la convection, tel que

$$\phi_e = \begin{cases} \lambda^+ \phi_E + \mu^+ \phi_P + (1 - \lambda^+ - \mu^+) \phi_W & \text{si } (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n})_e > 0, \\ \lambda^- \phi_P + \mu^- \phi_E + (1 - \lambda^- - \mu^-) \phi_{EE} & \text{si } (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n})_e < 0, \end{cases} \quad (15.32)$$

qui est à comparer avec (15.29). Les coefficients d'interpolation $\lambda^{+,-}$ et $\mu^{+,-}$ sont déterminés de façon que ϕ possède un profil parabolique entre les nœuds d'interpolation (*cf.* [4]). Cette approximation est au second-ordre, et dissipe beaucoup moins que l'approximation upwind.

² Aussi notée *UDS* : "Upwind Differencing Scheme".

³ Acronyme de "Quadratic Upwind Interpolation for Convection Kinematics", proposée par Leonard (1979).

Sur maillage uniforme avec $\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}$ constant et positif, le schéma *QUICK* s'écrit

$$F_h^c = u [\delta_x^-]^Q \phi_{ij} + v [\delta_y^-]^Q \phi_{ij}, \quad (15.33a)$$

avec, dans la direction x par exemple

$$[\delta_x^-]^Q \phi_{ij} = \frac{3\phi_{i+1,j} + 3\phi_{i,j} - 7\phi_{i-1,j} + \phi_{i-2,j}}{8\Delta x}. \quad (15.33b)$$

Résumé des courses

L'approximation volumes finis du flux convectif s'écrit :

$$\frac{1}{V_{ij}} \int_{\Omega_{ij}} \nabla \cdot \phi \mathbf{v} \, dV = \frac{1}{V_{ij}} \int_{\Gamma_{ij}} \phi \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} \, d\Gamma \cong F_h^c(\mathbf{v} \phi_{ij}). \quad (15.34a)$$

Pour un maillage uniforme et une vitesse constante, l'interpolation linéaire (CDS) conduit à :

$$F_h^c(\phi_{ij} \mathbf{v}) = u \delta_x^0 \phi_{ij} + v \delta_y^0 \phi_{ij}, \quad (15.34b)$$

où δ_x^0 et δ_y^0 sont les opérateurs de différences finies centrés définis en (5.15). Ainsi, l'interpolation CDS est équivalente à l'approximation centrée en différences finies. Toujours pour un maillage uniforme et une vitesse constante, l'approximation upwind (UDS) s'écrit

$$F_h^c(\phi_{ij} \mathbf{v}) = \frac{1}{2} \left[(u - |u|) \delta_x^+ + (u + |u|) \delta_x^- \right] \phi_{ij} + \frac{1}{2} \left[(v - |v|) \delta_y^+ + (v + |v|) \delta_y^- \right] \phi_{ij}. \quad (15.34c)$$

15.3.3 Interpolation des flux diffusifs

Dans le cas où $\mathbf{F} = \mathbf{F}^d \equiv \nu \nabla \phi$, le flux diffusif discret s'écrit :

$$F_h^d \equiv \frac{1}{\Delta x_P} \left[\left(\nu \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_e - \left(\nu \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_w \right] + \frac{1}{\Delta y_P} \left[\left(\nu \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_n - \left(\nu \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_s \right]. \quad (15.35)$$

Comme précédemment, intéressons-nous à l'interpolation sur la face Γ_e : en faisant de nouveau l'hypothèse de linéarité de ϕ dans $[\mathbf{x}_P, \mathbf{x}_E]$, on obtient :

$$\left(\nu \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_e \cong \nu_e \frac{\phi_E - \phi_P}{x_E - x_P} = \nu_e \frac{\phi_E - \phi_P}{\widetilde{\Delta x_P}}. \quad (15.36)$$

De même, on obtient pour la face Γ_w :

$$\left(\nu \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_w \cong \nu_w \frac{\phi_P - \phi_W}{\widetilde{\Delta x_W}}, \quad (15.37)$$

et on laisse au lecteur la tâche de construire des relations analogues pour les faces Γ_s et Γ_n .

Remarque 15.5. Dans les approximations (15.36) et (15.37), on a considéré le cas général où la viscosité ν dépendait de $\mathbf{x}$. Dans le cadre des équations de Navier-Stokes, cela arrive par exemple lorsqu'on utilise un modèle de turbulence : la viscosité turbulente est alors habituellement calculée au centre des faces. Pour (15.36) par exemple, il se trouve alors nécessaire d'effectuer une interpolation de la forme :

$$\nu_e \cong \lambda_e \nu_E + (1 - \lambda_e) \nu_P,$$

avec $\lambda_e = 1/2$ ou bien déterminé comme dans la remarque 15.3.

Remarque 15.6. Dans le cas du maillage uniforme (15.22) et d'une viscosité constante, le flux diffusif s'écrit :

$$F_h^d = \frac{\nu}{\Delta x^2} [\phi_W - 2\phi_P + \phi_E] + \frac{\nu}{\Delta y^2} [\phi_S - 2\phi_P + \phi_N]. \quad (15.38)$$

qui correspond au schéma de différences finies à 5 points du paragraphe 8.1.

En résumé, l'approximation volumes finis du terme diffusif s'écrit :

$$\frac{1}{V_{ij}} \int_{\Omega_{ij}} \nabla \cdot (\nu \nabla \phi) \, dV = \frac{1}{V_{ij}} \int_{\Gamma_{ij}} \nu \nabla \phi \cdot \mathbf{n} \, d\Gamma \cong F_h^d(\phi_{ij}), \quad (15.39a)$$

avec, sur maillage uniforme et viscosité constante :

$$F_h^d(\phi_{ij}) = \nu [\delta_{xx}^0 \phi_{ij} + \delta_{yy}^0 \phi_{ij}]. \quad (15.39b)$$

où δ_{xx}^0 et δ_{yy}^0 sont les opérateurs de différences finies centrés définis en (5.17).

15.3.4 Implémentation des conditions aux limites

Lorsque la cellule Ω_P se trouve à proximité des parois du domaine, il est nécessaire de tenir compte des conditions aux limites (15.2) pour discrétiser les flux.

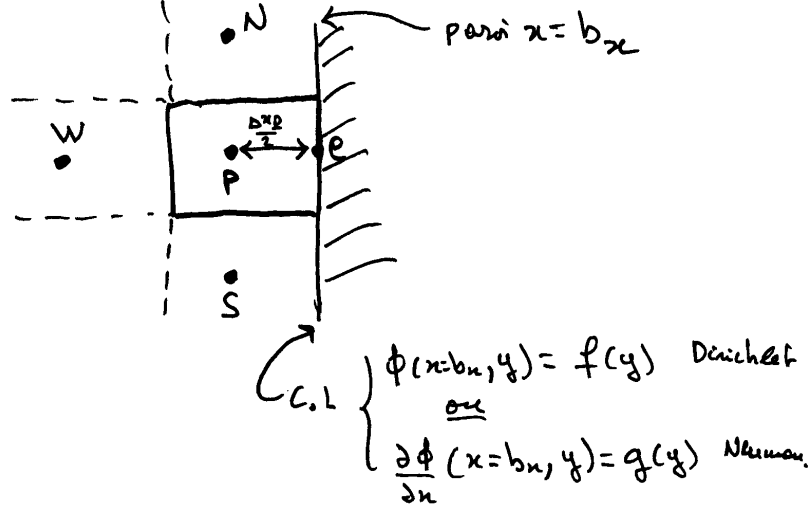


Fig. 15.5. Cas où la cellule Ω_P est proche de la paroi 'est' du domaine.

Considérons la configuration représentée sur la figure 15.5, où Ω_P est la cellule située à la paroi 'est' de Ω : dans ce cas, la face Γ_e fait partie de la paroi, et les conditions de Dirichlet et de Neumann (15.2) s'écrivent respectivement

$$\phi_e = f_e, \quad (15.40a)$$

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_e = g_e, \quad (15.40b)$$

et l'interpolation du flux discret (15.16) doit être modifiée afin de tenir compte de ces conditions aux limites. Plus précisément, les flux au travers de Γ_w , Γ_n , et Γ_s ne nécessitent pas de modification, et sont interpolés comme dans les paragraphes 15.3.2 et 15.3.3. Seule l'interpolation sur la face Γ_e du terme

$$\frac{1}{V_P} \int_{\Gamma_e} F_x \, dy \cong \frac{1}{\Delta x_P} (F_x)_e,$$

nécessite d'être modifiée.

Cas des flux convectifs

Dans le cas où $F_x \equiv u\phi$, la condition de Dirichlet (15.40a) est aisément imposée en remarquant que :

$$(F_x)_e = (u\phi)_e = u_e \phi_e = u_e f_e. \quad (15.41)$$

L'imposition de la condition de Neumann (15.40b) nécessite plus de travail. Dans un premier temps, on effectue le développement de Taylor tronqué au point x_e de la paroi :

$$\phi_P \cong \phi_e - \frac{\Delta x_P}{2} \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_e, \quad (15.42)$$

qui est ensuite utilisé pour obtenir l'interpolation suivante du flux :

$$(F_x)_e = u_e \phi_e \cong u_e \phi_P + u_e \frac{\Delta x_P}{2} g_e. \quad (15.43)$$

Cas des flux diffusifs

Dans le cas où $F_x \equiv \nu \partial \phi / \partial x$, l'imposition d'une condition de Dirichlet repose sur un raisonnement analogue à (15.42), i.e. :

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_e \cong \frac{\phi_e - \phi_P}{\Delta x_P / 2}, \quad (15.44)$$

et le flux s'interpole alors comme :

$$(F_x)_e = \left(\nu \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_e \cong \nu_e \frac{f_e - \phi_P}{\Delta x_P / 2}. \quad (15.45)$$

Le cas d'une condition de Neumann est plus élémentaire :

$$(F_x)_e = \left(\nu \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_e = \nu_e g_e. \quad (15.46)$$

15.3.5 Un mot sur la précision spatiale

Second-ordre, sauf l'approximation upwind du terme convectif qui est au premier ordre.

15.4 Intégration en temps

Une fois complétée la discrétisation de l'équation de convection-diffusion et l'imposition des conditions aux limites, on obtient une équation différentielle algébrique de la forme :

$$\frac{d}{dt} \phi_{ij} + F_h^c(\mathbf{v} \phi_{ij}) - F_h^d(\phi_{ij}) = q'_{ij}, \quad i = 1, \dots, N_x, \quad j = 1, \dots, N_y, \quad (15.47)$$

où q'_{ij} correspond à la discrétisation du second-membre q , augmentée des conditions aux limites. Ce système s'écrit alors sous la forme matricielle :

$$\frac{d}{dt} \Phi(t) + \mathcal{L}_h \Phi(t) = Q(t), \quad (15.48)$$

où Φ représente le vecteur où sont rangées les valeurs nodales ϕ_{ij} , par exemple en utilisant l'ordre lexicographique (cf. Section 8.3), et Q le vecteur second-membre. La matrice $\mathcal{L}_h$ est telle que :

$$\mathcal{L}_h = \mathcal{C}_h(\mathbf{v}) - \mathcal{K}_h, \quad (15.49)$$

où $\mathcal{C}_h(\mathbf{v})$ et $\mathcal{K}_h$ sont les représentations matricielles respectives du flux convectif et diffusif. Par exemple :

$$[\mathcal{C}_h(\mathbf{v})\Phi]_{ij} \equiv F_h^c(\mathbf{v} \phi_{ij}) = u \delta_x^0 \phi_{ij} + v \delta_y^0 \phi_{ij}, \quad (15.50)$$

si on utilise une approximation centrée avec vitesse de convection constante sur un maillage uniforme.

La discrétisation de la condition initiale (15.3) est simplement :

$$[\Phi(0)]_{ij} = \phi_0(\mathbf{x}_{ij}), \quad i = 1, \dots, N_x, \quad j = 1, \dots, N_y. \quad (15.51)$$

L'intégration en temps du système différentiel (15.48) peut alors être effectué par des schémas en temps pour *EDO*.

15.4.1 Schémas explicites et critères de stabilité

La plus simple des intégrations en temps utilise le schéma d'Euler progressif (EP1) :

$$\frac{\Phi^{n+1} - \Phi^n}{\Delta t} + \mathcal{L}_h \Phi^n = Q^n, \quad (15.52)$$

dont l'erreur de troncature temporelle est en $\mathcal{O}(\Delta t)$. Il est qualifié d'explicite car la solution au temps $(n+1)\Delta t$ s'écrit comme :

$$\Phi^{n+1} = \Phi^n + \Delta t (Q^n - \mathcal{L}_h \Phi^n),$$

et ne nécessite par d'inversion de système linéaire, seulement une multiplication matrice-vecteur.

Analyse de stabilité de von Neumann

L'étude de stabilité par la méthode de von Neumann se fait d'une manière analogue au cas *1D* (cf. section 6.3) : on le fait pour un schéma non forcé ($Q \equiv 0$), sur un maillage uniforme ($x_i = i\Delta x$, $y_j = j\Delta y$), sans considérer les conditions aux limites, et en "gelant" les divers coefficients de l'équation : dans le cas de l'équation de convection-diffusion, la viscosité ν et la vitesse de convection $\mathbf{v}$ sont considérées comme constantes. Ainsi, nous nous ramenons à étudier la stabilité des schémas dans le cas où le flux convectif prend la forme (15.34b) ou (15.34c) dans le cas centré *CDS* ou décentré *UDS* respectivement, et la forme centrée (15.39b) pour le flux diffusif.

On considère alors une solution de la forme

$$\phi_{ij}^n = \hat{\phi}_{kl}^n \exp [i(kx_i + ly_j)], \quad (15.53)$$

que l'on porte dans le schéma EP1 de façon à obtenir le facteur d'amplification g défini par :

$$\hat{\phi}^{n+1} = g(k\Delta x, l\Delta y) \hat{\phi}^n. \quad (15.54)$$

Le critère de stabilité de von Neumann s'écrit alors :

$$|g(k\Delta x, l\Delta y)| \leq 1, \quad -\pi \leq k\Delta x, l\Delta y \leq \pi. \quad (15.55)$$

L'étude de stabilité des schémas de convection multidimensionnels est rendue très fastidieuse par la technicité des calculs. Dans la suite, nous nous contenterons d'énoncer sans démonstration le critère de stabilité des schémas importants.

Stabilité du schéma d'Euler progressif

Proposition 15.7. *Le schéma EP1 avec approximation centrée des flux convectif et diffusif est stable si les conditions suivantes sont vérifiées :*

$$2d_x + 2d_y \leq 1, \quad (15.56a)$$

$$\frac{C_x^2}{2d_x} + \frac{C_y^2}{2d_y} \leq 1, \quad (15.56b)$$

avec les nombres de diffusion définis par :

$$d_x \equiv \frac{\nu \Delta t}{\Delta x^2}, \quad d_y \equiv \frac{\nu \Delta t}{\Delta y^2}, \quad (15.57)$$

et les nombres de Courant (unidirectionnels) :

$$C_x \equiv \frac{|u| \Delta t}{\Delta x}, \quad C_y \equiv \frac{|v| \Delta t}{\Delta y}. \quad (15.58)$$

Pour les détails de l'analyse de von Neumann, cf. [14]. Ce critère de stabilité généralise les résultats obtenus précédemment dans le cas unidimensionnel.

Remarque 15.8 (Stabilité de l'équation de la chaleur). Dans le cas purement diffusif (Eq. (15.1) avec $\nu > 0$, et $\mathbf{v} = 0$), à caractère parabolique, la condition (15.56b) est trivialement vérifiée. Dans le cas 1D, obtenu en posant $d_y = 0$ dans (15.56a), on retrouve le critère :

$$\Delta t \leq \frac{\Delta x^2}{2\nu}, \quad (15.59)$$

déjà vu dans la Section 6.3.2. Dans le cas 2D avec $\Delta x = \Delta y = h$, le critère (15.56a) conduit à :

$$\Delta t \leq \frac{h^2}{4\nu}, \quad (15.60)$$

qui est une condition deux fois plus restrictive que dans le cas 1D ! En 3D, on trouve que le critère de stabilité est 6 fois plus restrictif qu'en 1D.

Remarque 15.9 (Stabilité de l'équation de convection). Dans le cas purement convectif ($\nu = 0$, $\mathbf{v} \neq 0$), de nature hyperbolique, le critère (15.56b) ne peut être vérifié. On retrouve là l'instabilité caractéristique du schéma explicite centré appliqué à l'équation de transport, vu dans la section 9.3.

Proposition 15.10. *Dans le cas où l'approximation upwind (15.34c) du terme advectif est utilisée, la condition de stabilité du schéma EP1 s'écrit :*

$$C_x + 2d_x + C_y + 2d_y \leq 1. \quad (15.61)$$

Remarque 15.11 (La condition CFL). Pour la convection pure, on retrouve l'expression multidimensionnelle du critère CFL de la section 9.4, soit :

$$\frac{|u| \Delta t}{\Delta x} + \frac{|v| \Delta t}{\Delta y} \leq 1. \quad (15.62)$$

Dans le cadre d'un calcul pratique, où la vitesse de convection et le maillage ne sont pas uniformes, la condition CFL s'écrit :

$$\max_l (C_x)_l + (C_y)_l \leq 1, \quad l = 1, \dots, N_x N_y, \quad (15.63a)$$

où interviennent les nombres de Courant de la cellule Ω_l définis par :

$$(C_x)_l \equiv \frac{|u_l| \Delta t}{\Delta x_l}, \quad (C_y)_l \equiv \frac{|v_l| \Delta t}{\Delta y_l}. \quad (15.63b)$$

La généralisation de cette condition CFL à l'équation de convection-diffusion s'écrit :

$$\max_l (C_x)_l + 2(d_x)_l + (C_y)_l + 2(d_y)_l \leq 1, \quad l = 1, \dots, N_x N_y,$$

d'après (15.61).

Schémas explicites du second ordre

Une précision du premier ordre se révèle généralement insuffisante pour le calcul de solutions instationnaires, et des schémas du second ou troisième ordre sont couramment employés dans les simulations numériques. Il est possible d'améliorer la précision temporelle du schéma EP1 en augmentant le nombre de niveaux de temps utilisés : ce type de schéma sera appelé schéma *multi-niveaux*.

Une technique générale de construction de schémas multi-niveaux sera présentée dans la section 15.4.4. Un exemple important est le schéma d'Adams-Bashforth (AB2) :

$$\frac{\Phi^{n+1} - \Phi^n}{\Delta t} + \frac{1}{2} (3\mathcal{L}_h \Phi^n - \mathcal{L}_h \Phi^{n-1}) = \frac{1}{2} (3Q^n - Q^{n-1}), \quad (15.64)$$

qui est un schéma explicite en $\mathcal{O}(\Delta t^2)$, possédant 3 niveaux de temps : Φ^{n-1} , Φ^n et Φ^{n+1} . Il nécessite donc du stockage supplémentaire dans la mémoire d'un ordinateur. Les conditions de stabilité de ce schéma sont très compliquées à écrire, *cf.* [14]. Il faut néanmoins retenir que ses propriétés de stabilité sont similaires à celles du schéma EP1, et il se révèle plus attractif pour le calcul d'écoulements visqueux instationnaires.

Pas de temps critique pour un schéma explicite

On définit le pas de temps critique Δt_{cr} comme le pas de temps maximal qui assure la stabilité pour un maillage uniforme $\Delta x = \Delta y = h$ donné. Lorsqu'on exprime Δt_{cr} en fonction de h , cela permet d'évaluer la diminution du pas de temps nécessaire pour la stabilité du calcul lorsque le maillage est raffiné (*i.e.* h est diminué).

Examinons l'ordre de grandeur de Δt_{cr} pour le schéma EP1. Dans le cas de l'équation de convection pure, la condition CFL (15.62) du schéma EP1 upwind s'écrit :

$$(|u| + |v|) \Delta t \leq h,$$

et le pas de temps critique est tel que :

$$\Delta t_{\text{cr}} \sim h.$$

Pour l'équation de diffusion avec approximation spatiale centrée, la remarque 15.8 donne $\Delta t \leq h^2/4\nu$ et donc :

$$\Delta t_{\text{cr}} \sim h^2,$$

ce qui est une restriction beaucoup plus sévère que la condition CFL lorsqu'on diminue h .

Qu'en est-il pour l'équation de convection-diffusion ? Pour l'approximation centrée, en multipliant (15.56b) par $(2d_x + 2d_y)$ et en utilisant (15.56a), on obtient :

$$C_x^2 \left(1 + \frac{d_y}{d_x}\right) + C_y^2 \left(1 + \frac{d_x}{d_y}\right) \leq 2d_x + 2d_y \leq 1,$$

et dans le cas $\Delta x = \Delta y = h$, cette expression devient :

$$2(u^2 + v^2) \Delta t^2 \leq 4\nu \Delta t \leq h^2,$$

et on obtient donc

$$\Delta t_{\text{cr}} \sim h^2.$$

On trouve un résultat similaire pour l'approximation upwind d'après la condition (15.61). Ainsi, la condition de stabilité du schéma EP1 pour l'équation de convection-diffusion est essentiellement dictée par le terme diffusif, et elle est beaucoup plus restrictive que le critère CFL du cas convectif. Ce phénomène est observé par tous les schémas explicites, et on le retrouve pour les équations de Navier-Stokes.

En résumé, l'utilisation de schémas explicites pour l'équation de convection ($\nu = 0$) nécessite de respecter une condition de type CFL, telle que $\Delta t_{\text{cr}} \sim h$. Cette condition n'est pas trop restrictive dans la pratique, et les schémas explicites, tels le schéma de Lax-Wendroff (*cf.* Section 9.6), sont très couramment employés pour les problèmes hyperboliques.

Par contre, en présence de diffusion ($\nu > 0$), le pas de temps critique est tel que $\Delta t_{\text{cr}} \sim h^2$, ce qui peut représenter une contrainte prohibitive en dimensions supérieures à 2, comme l'énonce la remarque 15.8.

15.4.2 Schémas implicites

Afin de se libérer de la sévère contrainte de stabilité que doivent observer les schémas explicites en présence de diffusion, il est intéressant de considérer des schémas implicites, tels le schéma d'Euler rétrograde (ER1) :

$$\frac{\Phi^{n+1} - \Phi^n}{\Delta t} + \mathcal{L}_h \Phi^{n+1} = Q^{n+1}. \quad (15.65)$$

Ces schéma est en $\mathcal{O}(\Delta t)$, et l'analyse de von Neumann montre qu'il est stable sans conditions.

Schémas implicites du second ordre

Une façon simple d'obtenir un schéma implicite du second-ordre est de prendre la demi-somme des schémas ER1 et EP1, ce qui conduit au schéma de Crank-Nicolson (CN) :

$$\frac{\Phi^{n+1} - \Phi^n}{\Delta t} + \frac{1}{2} (\mathcal{L}_h \Phi^{n+1} + \mathcal{L}_h \Phi^n) = \frac{1}{2} (Q^{n+1} + Q^n), \quad (15.66)$$

qui est stable sans condition.

D'une manière totalement différente, on peut améliorer la précision du schéma ER1 en considérant une approximation en $\mathcal{O}(\Delta t^2)$ de la dérivée en temps, ce qui conduit au schéma d'Euler rétrograde du second-ordre (ER2) :

$$\frac{3\Phi^{n+1} - 4\Phi^n + \Phi^{n-1}}{2\Delta t} + \mathcal{L}_h \Phi^{n+1} = Q^{n+1}. \quad (15.67)$$

Ce schéma⁴ possède trois niveaux, et il est stable sans conditions. Voici un nouvel exemple de schéma multi-niveaux, où l'élévation de l'ordre de précision passe par l'ajout de niveaux de temps.

Intérêts et désavantages

On le répète, le principal intérêt des schémas implicites ER1, CN et ER2 est d'être stable sans conditions. Leur grand désavantage est de devoir résoudre au temps $(n+1)\Delta t$ un système linéaire de la forme :

$$(\mathcal{I} + \alpha \Delta t [\mathcal{C}_h(\mathbf{v}) - \mathcal{K}_h]) \Phi^{n+1} = F^{n+1}, \quad (15.68)$$

où α est un réel dépendant du schéma utilisé, et F^{n+1} un vecteur regroupant les termes déjà connus à l'instant $(n+1)\Delta t$. Par exemple, pour le schéma CN :

$$\alpha = \frac{1}{2}, \quad F^{n+1} = \Phi^n + \frac{\Delta t}{2} (Q^{n+1} + Q^n - \mathcal{L}_h \Phi^n).$$

Le système (15.68) peut être très délicat à inverser à cause du terme convectif : dans le cas le plus simple ou la convection est constante et l'approximation centrée (15.34b) est utilisée, la matrice $\mathcal{C}_h(\mathbf{v})$ n'est pas définie positive : cela entraîne des difficultés pour la résolution itérative de (15.68). Dans les application pratiques, *i.e.* les équations de Navier-Stokes, le flux convectif $\mathcal{C}_h(\mathbf{v})\Phi^{n+1}$ est un terme *non-linéaire* : le système (15.68) doit donc être résolu par des méthodes (quasi-)Newton. L'utilisation de schéma implicite peut donc être très pénalisante sur le plan du temps de calcul et de la complexité des méthodes de résolution à utiliser.

Il faut donc trouver un juste milieu entre les questions de stabilité du schéma et l'efficacité du temps de calcul. Ce compromis est représenté par les schémas semi-implicites.

15.4.3 Les schémas semi-implicites

Ces considérations motivent donc le développement de schémas qui combinent la prise en compte implicite du terme diffusif, pour lever la restriction sur la stabilité $\Delta t_{\text{cr}} \sim h^2$, et la prise en compte explicite du terme convectif $\mathcal{C}_h(\mathbf{v})$, pour éviter la résolution de systèmes mal fichus : ce sont les schémas semi-implicites, aussi appelés IMEX (implicites-explicites).

Construction

Il est possible de bâtir des schémas IMEX à partir de schémas implicites, en considérant l'extrapolation :

$$\Phi^{n+1} \cong 2\Phi^n - \Phi^{n-1}, \quad (15.69)$$

qui est précise en $\mathcal{O}(\Delta t^2)$.

⁴ Il est aussi connu sous le nom de schéma de Gear du second-ordre dans le domaine des équations différentielles. En CFD, il est aussi appelé BDF ("Backward Differentiation Formula").

Remarque 15.12. Si on appliquait cette linéarisation à la totalité du schéma CN, on obtiendrait le schéma explicite AB2, Eq. (15.64). En référence à cette remarque, on désignera (15.69) comme l'extrapolation d'Adams-Bashforth dans la suite de ces notes.

Si on applique cette extrapolation au terme convectif *uniquement* du schéma CN, on obtient :

$$\frac{\Phi^{n+1} - \Phi^n}{\Delta t} + \frac{1}{2} (3\mathcal{C}_h(\mathbf{v})\Phi^n - \mathcal{C}_h(\mathbf{v})\Phi^{n-1}) - \frac{1}{2} (\mathcal{K}_h\Phi^{n+1} + \mathcal{K}_h\Phi^n) = \frac{1}{2} (Q^{n+1} + Q^n), \quad (15.70)$$

qui est le schéma IMEX à 3 niveaux connu sous le nom d'Adams-Bashforth/Cranck-Nicolson (AB/CN). Ce schéma conduit à la résolution du système :

$$(\mathcal{I} - \alpha\Delta t\mathcal{K}_h)\Phi^{n+1} = F^{n+1}, \quad (15.71)$$

avec

$$\alpha = \frac{1}{2}, \quad F^{n+1} = \Phi^n + \frac{\Delta t}{2} (Q^{n+1} + Q^n + [\mathcal{K}_h - 3\mathcal{C}_h(\mathbf{v})]\Phi^n + \mathcal{C}_h(\mathbf{v})\Phi^{n-1}).$$

Si on compare avec le système (15.68) du schéma CN, on n'a plus qu'à résoudre une équation de Helmholtz discrète, de type elliptique, et qui correspond donc à un système linéaire défini positif, relativement "facile" à inverser.

Lorsqu'on applique la linéarisation (15.69) à la partie convective du schéma ER2 (15.67), on obtient le schéma AB/ER2 :

$$\frac{3\Phi^{n+1} - 4\Phi^n + \Phi^{n-1}}{2\Delta t} + (2\mathcal{C}_h(\mathbf{v})\Phi^n - \mathcal{C}_h(\mathbf{v})\Phi^{n-1}) - \mathcal{K}_h\Phi^{n+1} = Q^{n+1}, \quad (15.72)$$

qui est précis en $\mathcal{O}(\Delta t^2)$. Comme pour le schéma AB/CN, on se ramène à résoudre un système de Helmholtz de la forme (15.71).

Stabilité

L'une des motivations du développement d'un schéma IMEX est d'essayer de se débarrasser de la contrainte $\Delta t_{\text{cr}} \sim h^2$ du terme diffusif en le considérant implicitement, et récupérer une contrainte du type CFL $\Delta t_{\text{cr}} \sim h$ causée par le caractère explicite du terme convectif. A-t-on atteint ce but avec les schémas AB/ER2 et AB/CN ?

C'est compliqué, et les résultats précis sont fragmentaires. Dans la pratique, on essaie simplement d'utiliser un pas de temps tel que la condition CFL (15.63) est satisfaite.

On montre néanmoins que, lorsque des approximations centrées sont utilisées :

$$\Delta t_{\text{cr}}(\text{AB/CN}) < \Delta t_{\text{cr}}(\text{AB/ER2}) < \Delta t_{\text{cr}}(\text{LF/CN}),$$

avec $\Delta t_{\text{cr}}(\text{LF/CN}) = \text{CFL}$, *c.à.d.* que le pas de temps critique du schéma LF/CN (défini dans la section suivante) est donné par la condition CFL (15.62). Ce dernier schéma est à déconseiller à cause du découplage pair/impair de la solution sur la grille de calcul, donnant lieu à des oscillations lorsque la viscosité est faible. Le schéma AB/ER2 est supérieur au schéma AB/CN, de part sa plus grande stabilité, et son meilleur amortissement des fréquences élevées de la solution dans le cas non-linéaire. De plus le schéma AB/ER2 est tel que $\Delta t_{\text{cr}} \sim h$, ce qui ne semble pas être obtenu avec le schéma AB/CN.

15.4.4 Construction de schémas multi-niveaux d'ordre élevé

Technique générale

Dans cette partie, nous nous limiterons à détailler la technique de construction de schémas du second ordre au plus. Pour cela, on considère le schéma général à trois niveaux pour l'équation de convection-diffusion (15.48) :

$$\begin{aligned} \frac{(1+\epsilon)\Phi^{n+1} - 2\epsilon\Phi^n - (1-\epsilon)\Phi^{n-1}}{2\Delta t} &+ \mathcal{C}_h[\gamma_1\Phi^{n+1} + \gamma_2\Phi^n + (1-\gamma_1-\gamma_2)\Phi^{n-1}] \\ &- \mathcal{K}_h[\theta_1\Phi^{n+1} + \theta_2\Phi^n + (1-\theta_1-\theta_2)\Phi^{n-1}] \\ &= \alpha_1Q^{n+1} + \alpha_2Q^n + (1-\alpha_1-\alpha_2)Q^{n-1}. \end{aligned} \quad (15.73)$$

où ϵ et les γ_i , θ_i , α_i sont des paramètres à déterminer de façon que l'erreur de troncature soit au second-ordre. L'erreur de troncature de ce schéma s'obtient à partir des développements de Taylor suivants autour du temps $n\Delta t$:

$$\Phi^{n+1} = \Phi^n + \Delta t \frac{d\Phi^n}{dt} + \frac{\Delta t^2}{2} \frac{d^2\Phi^n}{dt^2} + \frac{\Delta t^3}{6} \frac{d^3\Phi^n}{dt^3} + \mathcal{O}(\Delta t^4), \quad (15.74a)$$

$$\Phi^{n-1} = \Phi^n - \Delta t \frac{d\Phi^n}{dt} + \frac{\Delta t^2}{2} \frac{d^2\Phi^n}{dt^2} - \frac{\Delta t^3}{6} \frac{d^3\Phi^n}{dt^3} + \mathcal{O}(\Delta t^4). \quad (15.74b)$$

En premier lieu, on utilise ces développements pour obtenir l'erreur de troncature de la dérivée temporelle :

$$\frac{(1 + \epsilon)\Phi^{n+1} - 2\epsilon\Phi^n - (1 - \epsilon)\Phi^{n-1}}{2\Delta t} = \frac{d\Phi^n}{dt} + \frac{\epsilon\Delta t}{2} \frac{d^2\Phi^n}{dt^2} + \frac{\Delta t^2}{6} \frac{d^3\Phi^n}{dt^3} + \mathcal{O}(\Delta t^3),$$

et de l'extrapolation :

$$\begin{aligned} \gamma_1\Phi^{n+1} + \gamma_2\Phi^n + \gamma_3\Phi^{n-1} &= (\gamma_1 + \gamma_2 + \gamma_3)\Phi^n + \Delta t(\gamma_1 - \gamma_3)\frac{d\Phi^n}{dt} + \frac{\Delta t^2}{2}(\gamma_1 + \gamma_3)\frac{d^2\Phi^n}{dt^2} \\ &\quad + \frac{\Delta t^3}{6}(\gamma_1 - \gamma_3)\frac{d^3\Phi^n}{dt^3} + \mathcal{O}(\Delta t^4). \end{aligned} \quad (15.75)$$

Cette extrapolation est utilisée pour les termes convectifs, diffusifs, et le second-membre du schéma général. A partir de ces relations, on obtient l'erreur de troncature du schéma en ordonnant les différents termes en puissance de Δt :

$$\begin{aligned} \text{Schéma (15.73)} &= \frac{d}{dt}\Phi^n + \mathcal{C}_h\Phi^n - \mathcal{K}_h\Phi^n - Q^n \\ &\quad + \Delta t \frac{d}{dt} \left[\frac{\epsilon}{2} \frac{d\Phi^n}{dt} + (2\gamma_1 + \gamma_2 - 1)\mathcal{C}_h\Phi^n - (2\theta_1 + \theta_2 - 1)\mathcal{K}_h\Phi^n - (2\alpha_1 + \alpha_2 - 1)Q^n \right] \\ &\quad + \frac{\Delta t^2}{2} \frac{d^2}{dt^2} \left[\frac{1}{3} \frac{d\Phi^n}{dt} + (1 - \gamma_2)\mathcal{C}_h\Phi^n - (1 - \theta_2)\mathcal{K}_h\Phi^n - (1 - \alpha_2)Q^n \right] \\ &\quad + \mathcal{O}(\Delta t^3). \end{aligned} \quad (15.76)$$

On déduit de cette identité :

- Le schéma est consistant quelle que soit l'expression de ses coefficients⁵.
- Pour obtenir une précision du second-ordre, il faut annuler le terme en $\mathcal{O}(\Delta t)$ de l'erreur de troncature : les coefficients doivent donc vérifier les 3 relations suivantes :

$$\frac{\epsilon}{2} = 2\gamma_1 + \gamma_2 - 1 = 2\theta_1 + \theta_2 - 1 = 2\alpha_1 + \alpha_2 - 1. \quad (15.77)$$

- Pour une précision en $\mathcal{O}(\Delta t^3)$, les coefficients doivent vérifier les relations (15.77) ainsi que :

$$\frac{1}{3} = 1 - \gamma_2 = 1 - \theta_2 = 1 - \alpha_2. \quad (15.78)$$

Exemples classiques de schémas au second-ordre

Les relations (15.77) définissent l'expression des schémas présentés dans les sections précédentes. Il suffit de poser $\gamma_1 = \theta_1 = 0$ pour obtenir des schémas explicites. Le cas $\gamma_1 = 0$ et $\theta_1 \neq 0$ correspond aux schémas semi-implicites.

Ces schémas peuvent être rassemblés en trois classes, suivant les niveaux utilisés par l'approximation de la dérivée temporelle.

- Pour $\epsilon = 1$, on obtient la famille des θ -schémas. Le schéma implicite CN (15.66) correspond au choix

$$\gamma_1 = \gamma_2 = \frac{1}{2}, \quad \theta_1 = \theta_2 = \frac{1}{2}, \quad \alpha_1 = \alpha_2 = \frac{1}{2}.$$

C'est le seul schéma à deux niveaux précis en $\mathcal{O}(\Delta t^2)$. Si, au contraire, on pose $\gamma_1 = 0$, alors nécessairement $\gamma_2 = 3/2$ et on obtient le schéma semi-implicite AB/CN (15.70).

- Pour $\epsilon = 0$, on obtient les schémas de type Leap-Frog. Un exemple classique est le schéma semi-implicite LF/CN défini par :

$$\gamma_1 = \alpha_1 = 0, \quad \gamma_2 = \alpha_2 = 1, \quad \theta_1 = \frac{1}{2}, \quad \theta_2 = 0.$$

⁵ Parmi les schémas à deux niveaux, on reconnaît les schémas du premier ordre EP1 (15.52) pour

$$\epsilon = 1, \gamma_1 = \theta_1 = \alpha_1 = 0, \gamma_2 = \theta_2 = \alpha_2 = 1.$$

et ER1 (15.65) pour

$$\epsilon = 1, \gamma_1 = \theta_1 = \alpha_1 = 1, \gamma_2 = \theta_2 = \alpha_2 = 0,$$

- Pour $\epsilon = 2$, on obtient les schémas d'Euler retardés du second-ordre. Le schéma totalement implicite ER2 (15.67) est donné par le jeu de coefficients :

$$\gamma_1 = \theta_1 = \alpha_1 = 1, \quad \gamma_2 = \theta_2 = \alpha_2 = 0.$$

Le schéma semi-implicite AB/ER2 (15.72) correspond à utiliser plutôt :

$$\gamma_1 = 0, \quad \gamma_2 = 2, \quad \theta_1 = \alpha_1 = 1, \quad \theta_2 = \alpha_2 = 0.$$

Enfin, il faut noter que les coefficients de ces schémas ne vérifient pas les conditions (15.78) : ils sont donc du second-ordre en temps.

15.4.5 Compléments sur les schémas multi-niveaux

Schémas de démarrage

Prenons l'exemple du schéma à trois niveaux AB2 (15.64). La condition initiale (15.51) fournit Φ^0 , et le calcul de Φ^1 avec le schéma AB2 est impossible, car on ne connaît pas Φ^{-1} (ni Q^{-1}). Ainsi, le calcul de Φ^1 doit être effectué avec un autre schéma, le “schéma de démarrage”, par exemple le schéma EP1 (15.52), soit :

$$\Phi^1 = \Phi^0 + \Delta t (Q^0 - \mathcal{L}_h \Phi^0).$$

Les calculs suivants ($n \geq 2$) pourront alors être réalisés sans problèmes par le schéma AB2.

Remarque 15.13. L'utilisation d'un schéma de démarrage en $\mathcal{O}(\Delta t)$ dans le cadre d'un calcul au second-ordre ne dégrade pas la précision globale de la méthode, qui reste en $\mathcal{O}(\Delta t^2)$. C'est la conséquence d'un résultat classique sur les méthodes numériques pour *EDO* (e.g. [6]).

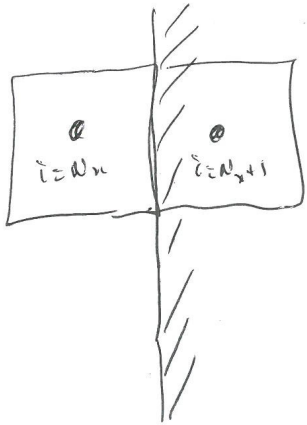
Les schémas à 3 niveaux présentés ci-dessus nécessitent donc des schémas de démarrage, d'ordre $\mathcal{O}(\Delta t)$ au moins. Par exemple, le schéma EP1 (ou ER1) pourra être choisi pour démarrer un calcul qui sera réalisé avec les schémas ER2, AB/CN et AB/ER2.

Pas de temps variable

pas fait

Utilisation des Ghost-cell pour imposer les conditions aux limites

①



Dirichlet $\frac{\phi_{Nn+1} + \phi_{Nn}}{2} = f_e$

$\Rightarrow \phi_{Nn+1} = 2f_e - \phi_{Nn}$

Neumann

$\frac{\phi_{Nn+1} - \phi_{Nn}}{\Delta x} = g_e$

$\Rightarrow \phi_{Nn+1} = \phi_{Nn} + \Delta x g_e$

• Utilisation des Formules centrees usuelles:

$\rightarrow$ Case Neuman:

$F_c^e = (u_e f_e) = u \frac{\phi_{Nn+1} + \phi_{Nn}}{2} = u_e \phi_{Nn} + \frac{\Delta x}{2} g_e$

$F_d^e = \left(\frac{\partial d}{\partial n} \right)_e = \frac{\phi_{Nn+1} - \phi_{Nn}}{\Delta x} = g_e$

on retrouve les conditions aux limites du cas.

Sech. 15.3.4.

$\rightarrow$ Case Dirichlet

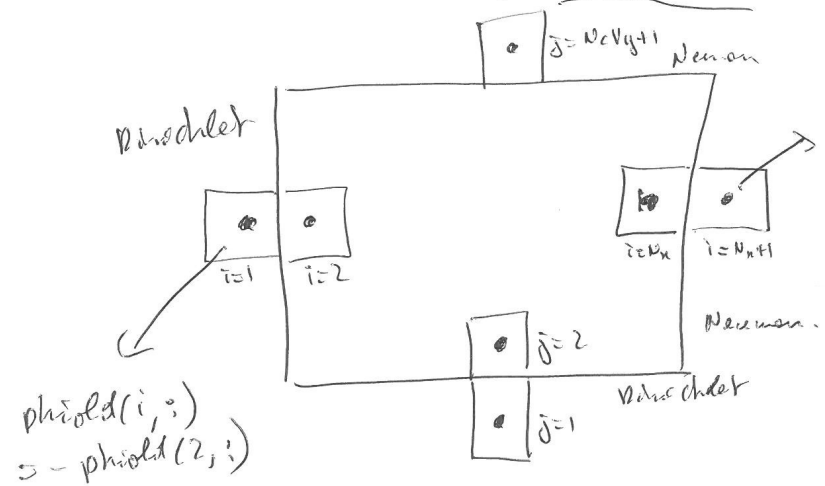
$F_c^e = u \frac{\phi_{Nn+1} + \phi_{Nn}}{2} = u f_e.$

$F_d^e = \left(\frac{\partial d}{\partial n} \right)_e = \frac{\phi_{Nn+1} - \phi_{Nn}}{\Delta x} = \frac{f_e - \phi_{Nn}}{\Delta x/2}$

idem cas.

Application sur 2D

$\text{phiold}(:, Ncvg+1) = \text{phiold}(:, Ncvg)$



Initiation à la
Méca. fluide. Numérique
("Comput. Fluid. Dyn." (CFD))

I) Présentation

Pour étudier l'écoulement des fluides, 3 voies:

- Expérimentale
- Modélisation/Simulation:

Exprimer les lois de la Φ des fluides
sous la forme d'éq's mathématiques (N.S.)

Pour les résoudre:

→ Voe Analytique (Théorie/recherche)

→ Numérique $\Rightarrow$ CFD
(recherche, bureau d'étude, ...)

II) But de ce cours

Présenter 2 logiciels (complémentaires) qui
sont actuellement utilisés en R&D:

* GAMBIT: le "maillonneur"

* FLUENT: le "solveur"

III) Étapes clés de la CFD

① Modéliser le pbme Φ ic "poser le pbme"

→ Définir la géométrie du domaine
(Utiliser les sym. éventuelles pour simplifier
le domaine de calcul)

→ Propriétés phys. de l'écoulement

- Matériau (viscosité, masse vol., ...)
- Turbulent ?
- exotherme ? réactif ?
- Compressible ? (coefficient de l'écoulement)

→ Définir les eq's à résoudre

• Eq's de transport

- masse
- q'té de mvt } N.S.
- Énergie/Température
- Modèles de fermeture (turbulent)
- ...

• Cond. aux. limites

• Cond. initiale ($t=0$).

réflexion préalable

Le "maillage"

GARBIT

② Définir le maillage

- Définir la géométrie
- La mailler

③ Simuler l'écoulement

- * Préparer le calcul
 - Eq's à résoudre
 - C.L., initiale

- * Calculer numériquement la solution

④ Le post-Traitement

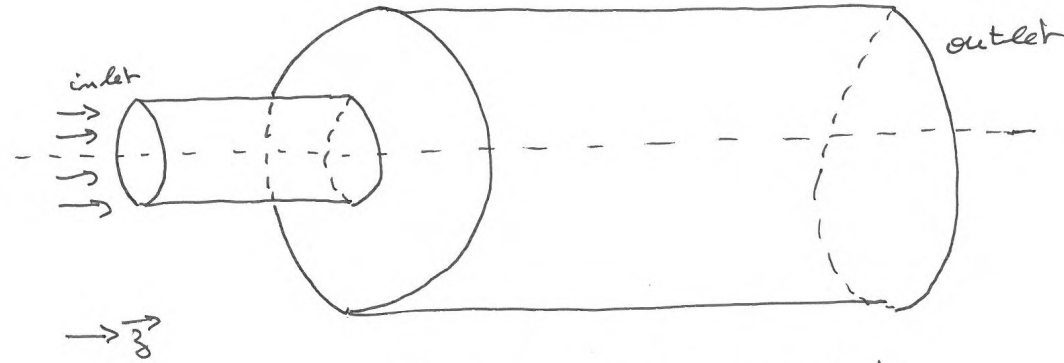
Analyser les résultats pour en tirer les informations pertinentes.

Le "solveur" FLUENT

③

TP1

L'écoulement du TP



Écoulement de l'eau dans une conduite circulaire avec élargissement brusque, avec une vitesse d'entrée uniforme u_{inlet}

- Régime de l'écoulement:

$$a) Re_D = \frac{\rho_{eau} u_{inlet} D}{\mu_{eau}}$$

avec: Pour une conduite lisse:

$$Re_D \leq \frac{1000}{2400}: \text{Laminar}$$

$$1000 \leq Re_D \leq \frac{2000}{4000}: \text{Transitional}$$

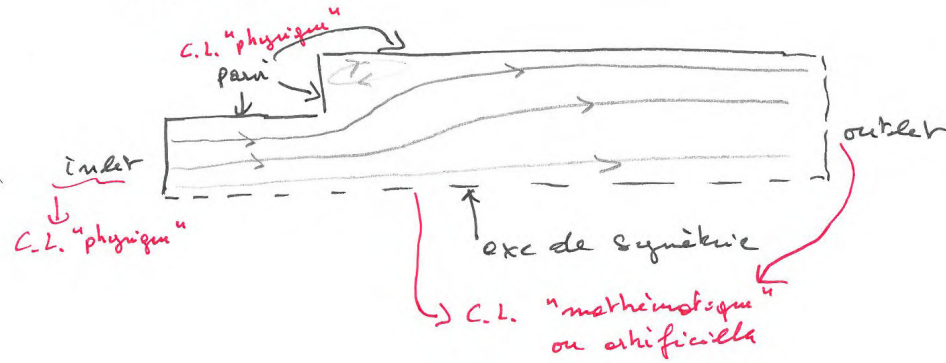
$$Re_D \geq \frac{2000}{4000}: \text{Turbulent}$$

- b) $u_{inlet} < C$ ($u < 1$) écoulement incompressible.

- Symétries?

⇒ Dans les cas transitionnels et turbulent, on peut faire l'hypothèse que l'écoulement est symétrique par rapport à l'axe ($0 \frac{z}{z}$) ($\frac{\partial}{\partial \theta} = 0$ des les c.g.t.).

⇒ Ecoulement axisymétrique: on modélise la TP2 dans une 2D:



⇒ Régime permanent ($\frac{\partial}{\partial t} = 0$ des eq's).

• Propriétés du fluide

⇒ eau, $\rho = \text{cte}$, $\mu = \text{cte}$

⇒ isotherme

• Equations à résoudre

⇒ Régime laminaire: eq's de N.S. incompressible

- 3 eq's scalaires pour u , v et P (2D)

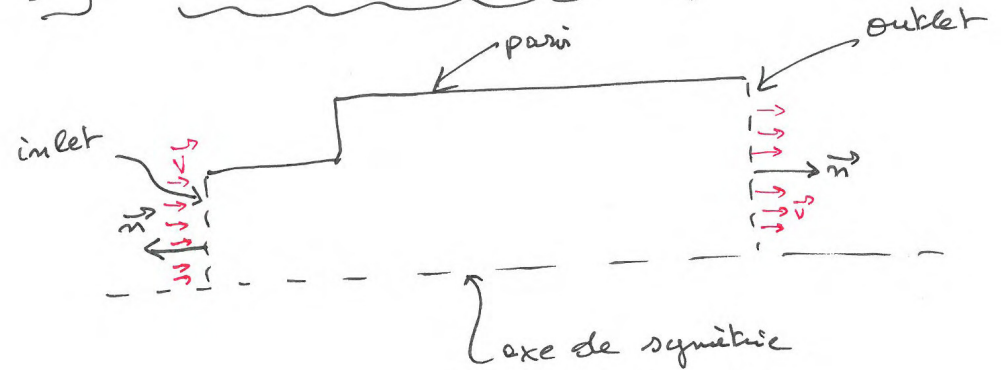
⇒ Régime turbulent:

- Eq's de N.S. moyennées pour $\bar{u}$, $\bar{v}$, $\bar{P}$

- Modèle de turbulence (ex: $k-\epsilon$)
→ 2 eq's de transport pour k et ϵ .

Bref descriptif des méthodes Numériques de FLUENT

I) Conditions aux limites



1) Cond. aux limites "physiques"

* A une paroi solide (type WALL de FLUENT)

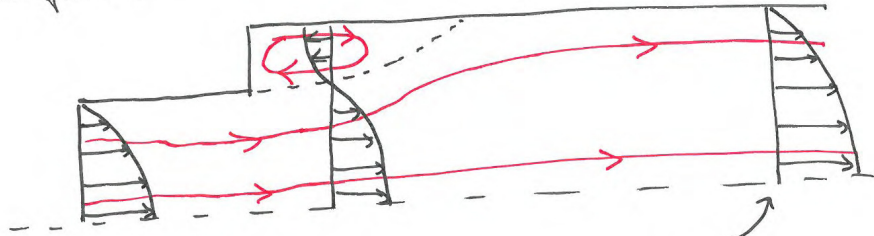
$$\text{Vitesse} \left\{ \begin{array}{l} \bullet \vec{V} = 0 \text{ en visqueux (adhérence à la paroi)} \\ \bullet \vec{V} \cdot \vec{n} = 0 \text{ en non visqueux} \end{array} \right.$$

température: $\frac{\partial T}{\partial n} = 0$: adiabatique

* Autres C.L.: surface libre, etc...

2) Cond. aux limites "artificielles"

Lorsqu'on tronque un domaine physique très grand ou infini :



On retrouve un profil de Poiseuille suffisamment en aval de l'élargissement

Problématique: Définir un domaine de calcul autour de l'élargissement tel que les C.L. artificielles n'affectent pas la solution à l'intérieur du domaine. (Surtout pour les C.L. d'OUTLET).

* A l'entrée: Inlet

Mathématiquement: frontière définie par $\vec{V} \cdot \vec{n} < 0$.

a) débit imposé: VELOCITY INLET

- $\left. \begin{array}{l} \vec{V} = \vec{V}_{inlet} \\ T = T_{inlet} \end{array} \right\}$
 définie par l'utilisateur:
 - constante
 - profil donné par une expérience

b) pression imposée: PRESSURE INLET

- $$P + \frac{\rho}{2} |\vec{V}|^2 = P_{inlet}$$

* A la sortie: Outlet

frontière définie par $\vec{V} \cdot \vec{n} > 0$ (fluide sort)

Si du fluide entre/sort ("back-flow") $\Rightarrow$ pbm de convergence de la solution. Il faut définir des C.L. qui laissent sortir le fluide sans provoquer de réflexion parasites qui influenceraient sur l'écoulement ^{amont}.

a) type OUTFLOW

On suppose que suffisamment en aval de la singularité, un écoulement de type Poiseuille, et on impose alors:

$$\frac{\partial \vec{u}}{\partial \vec{n}} = 0, \quad \frac{\partial T}{\partial \vec{n}} = 0$$

- Rq:
- Placer l'outlet suffisamment loin de la singularité ($L \geq 20D$)
 - Si l'écoulement est instationnaire, préférer la C.L. suivante:

b) type PRESSURE OUTLET

Une autre C.L. suppose que l'outlet débouche sur dans un milieu externe dont on connaît l'état de contrainte:

$$\underline{\underline{\sigma}}^\infty = -p^\infty \underline{\underline{I}}$$

où p^∞ est la pression atmosphérique extérieure. On impose alors la continuité du tenseur des contraintes:

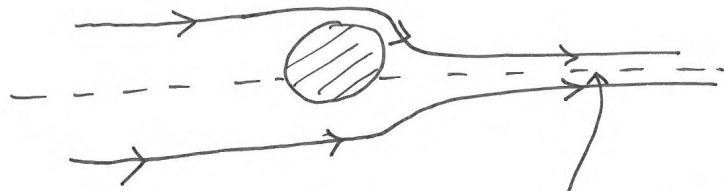
$$\underline{\underline{\sigma}} \cdot \vec{n} = \underline{\underline{\sigma}}^\infty \cdot \vec{n}$$

3) Cond. aux limites "mathématiques"

(4)

Pour imposer diverses symétries à l'écoulement, et diminuer la taille du maillage:

a) type SYMMETRY



sur l'axe: $\begin{cases} \vec{V} \cdot \vec{n} = 0 \\ \tau_{xy} = 0 \end{cases}$

b) type AXIS

l'équivalent du type précédent pour des écoulements 3D axisymétriques.

c) type PERIODIC

II) Méthode de volumes finis

(1)

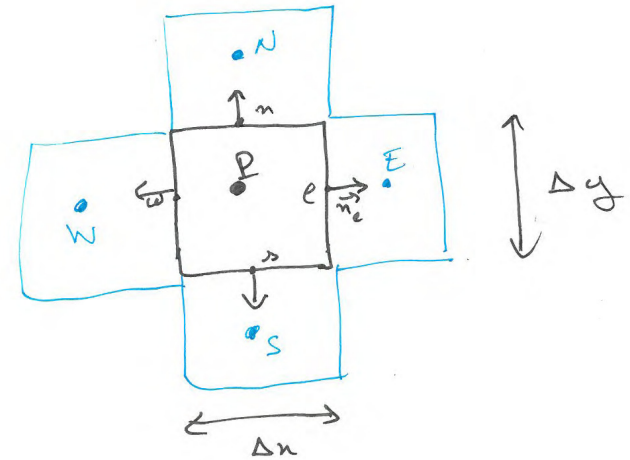
Eq^t de bilan générique ($\vec{v}$ une vitesse donnée)

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\vec{v} \phi) - \nabla \cdot (\nu \vec{\nabla} \phi) = 0$$

Méth. vol. finis est basée sur la forme intégrale de l'eq^t de bilan:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{V_P} \phi dV + \underbrace{\int_{P_P} \phi \vec{v} \cdot \vec{n} dP}_{\text{Flux convectifs: } F_c} - \underbrace{\int_{P_P} \nu \vec{\nabla} \phi \cdot \vec{n} dP}_{\text{Flux diffusifs: } F_d} = 0$$

où V_P est une cellule (volume de contrôle) d'un maillage:



Volume: $V_P = \Delta x \Delta y$

Surface: $P_P = P_e \cup P_n \cup P_s \cup P_w$

(2)

* Discrétisation basée sur des formules de quadrature:

$$\int_{V_P} \phi dV \approx V_P \phi_P \quad \text{par formule de la moyenne.}$$

$\Rightarrow$ Les inconnues sont situées au centre des cellules.

• Discrétisation des flux convectifs:

On considère le flux sur la face P_e : $(F_c)_e = \int_{P_e} \phi \vec{V} \cdot \vec{n}_e dP$

a) Approximation des intégrales surfaciques:

$$(F_c)_e = \int_{P_e} \phi u dy \approx \phi_e u_e \Delta y$$

b) Interpolation de ϕ_e / aux inconnues ϕ_P, ϕ_E , etc....

Comme en diff. finies, il y a de nombreuses possibilités:

• Centrée: $\phi_e \approx \frac{1}{2} \phi_P + \frac{1}{2} \phi_E$

$$\Rightarrow (F_c)_e \approx u_e \frac{\Delta y}{2} (\phi_P + \phi_E)$$

Remarque importante:

Si on suppose que $\vec{V} = c \vec{e}_x$, alors $(F_c)_w \approx -u \frac{\Delta y}{2} (\phi_P + \phi_W)$
on retrouve la formule centrée des différences finies:

$$(F_c)_e + (F_c)_w \approx u V_P \frac{\phi_E - \phi_W}{2 \Delta x} = V_P (u \delta_x^0 \phi_P)$$

(3)

• UPwind:

On décentre l'interpolation suivant la vitesse de ~~diffusion~~ convection $\vec{V}$:

$$\phi_e \approx \begin{cases} \phi_P & \text{si } u_e > 0 \\ \phi_E & \text{si } u_e < 0 \end{cases}$$

On retrouve ^{alors} l'approximation $\delta_x^- \phi_P$ des différences finies.

! C'est une formule en $O(\Delta x)$ seulement. Il existe de nombreuses formules + précises, en $O(\Delta x^2)$, p. ex:

QUICK

Remarques générales:

Sur maillage régulier et est à coeff. constants,
Vol. finis et diff. finies conduisent à des discrétisations équivalentes.

$\Rightarrow$ Les notions de $\left\{ \begin{array}{l} \text{Transcrite} \\ \text{précision} \\ \text{analyse de V. Neumann} \end{array} \right.$ restent valables en Vol. finis.

$\Rightarrow$ Vol. finis offrent + de possibilités pour les maillages quelconques.

III

Traité quation en temps des eq's de Navier - Stokes

Eq's N-S incompressibles, semi-discrétisées par vol. finies:

$$\begin{cases} \frac{du}{dt} + F(u) + Gp = 0 & (1a) \\ Du = 0 & (1b) \end{cases}$$

Difficulté majeure: il n'y a pas de dérivée en temps pour p en incompressible $\Rightarrow$ Mathématiquement, la pression n'est présente que pour enforcer la consistance de la masse.

Méthodes de correction de pression

1) Schéma explicite EP1:

$$\begin{cases} \frac{u^{n+1} - u^n}{\Delta t} + F(u^n) + G(p^{n+1}) = 0 & (2) \\ Du^{n+1} = 0 & (3) \end{cases}$$

il y a 3 eq's scalaires (2D)
il faut donc 3 inconnues: u^{n+1} , p^{n+1}

De l'eq (2), on tire la décomposition:

$$u^{n+1} = \underbrace{u^n + \Delta t F(u^n)}_{u^*: \text{connu}} + \underbrace{\Delta t G(p^{n+1})}_{\text{inconnu}} \quad (4)$$

Pour éliminer l'inconnue u^{n+1} , on injecte cette équation dans l'eq de cons. de la masse (3):

$$DG(p^{n+1}) = \frac{1}{\Delta t} Du^* \quad (5)$$

C'est la fameuse eq de Poisson pour la pression, que l'on résout pour obtenir p^{n+1} . On obtient alors u^{n+1} (tel que $Du^{n+1} = 0$) en utilisant l'Eq. (4).

En résumé, l'algo de correction de pression n'est:

① On fait une prédiction de la vitesse:
 $u^* = u^n + \Delta t F(u^n)$

② On calcule la pression p^{n+1} ; eq (5)
 $DG(p^{n+1}) = \frac{1}{\Delta t} Du^*$

③ On corrige la prédiction u^* ; eq (4):
 $u^{n+1} = u^* + \Delta t G(p^{n+1})$

2) Pour un schéma implicite: On ne peut obtenir $Du^{n+1} = 0$ après 3 étapes seulement. Il faut utiliser un schéma itératif:

$$(u^{n+1})^{h+1} = (u^{n+1})^h + d_u \delta u^{n+1}$$

$$(p^{n+1})^{h+1} = (p^{n+1})^h + d_p \delta p^{n+1}$$

pour obtenir la convergence: $D(u^{n+1})^h \rightarrow 0$ lorsque $h \rightarrow \infty$
 $\Rightarrow$ Algorithmes du type S.I.M. P.L.E (et ses variantes)

d_u, d_p : coeff. de sous-relaxation ($\in]0, 1[$).

3.4 Ajout d'eqt de transport: ~~est~~ (3) Algorithme Segregated

Supposons qu'on couple les eqts de N-S (1) avec une eqt de température:

$$\frac{dT}{dt} + F_c(u, T) + F_d(T) = 0$$

qu'on discrétise avec un schéma explicite (ER1):

$$(6) \frac{T^{n+1} - T^n}{\Delta t} + F_c(u^{n+1}, T^{n+1}) + F_d(T^{n+1}) = 0.$$

On procède de la façon suivante pour calculer $(u^{n+1}, p^{n+1}, T^{n+1})$:

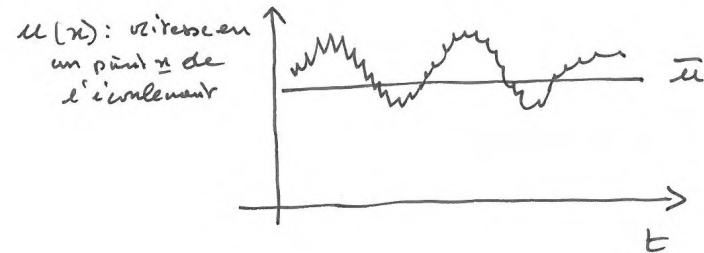
a) On utilise SIMPLE pour calculer (u^{n+1}, p^{n+1}) .

b) Comme u^{n+1} est connue, on résout (6) pour obtenir T^{n+1} .

Le principe de découplage des inconnues hydrodyn. (u^{n+1}, p^{n+1}) et des inconnues thermiques (ex: T^{n+1}) est connu sous le nom d'algorithme **SEGREGATED** dans FLUENT.

IV) Un mot sur la simulation de la turbulence (4)

- Mouvement désordonné du fluide:



- Simulation numérique directe (DNS): capturer sur un maillage toutes les échelles de l'écoulement:

en 3D, $N^3 \sim (Re)^{3/4}$: trop coûteux!

- En R & D, on utilise plutôt une approche statistique:

$$\underline{u} = \underline{\bar{u}} + \underline{u}' \quad , \quad p = \bar{p} + p'$$

On obtient les équations pour $(\underline{\bar{u}}, \bar{p})$ à partir des eqts de N.S.:

$$\begin{cases} \frac{\partial \underline{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\underline{u} \otimes \underline{u} - \underline{\tau}) + \nabla p = 0 \\ \nabla \cdot \underline{u} = 0 \end{cases}$$

(avec $\underline{\tau} = \frac{1}{2}(\nabla \underline{u}^T + \nabla \underline{u})$
 tenseur des déformations)

On prend la moyenne des eqts de NS pour obtenir les équations de Reynolds:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \bar{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{u} \bar{u} - 2\nu \bar{S}) + \nabla \bar{p} = 0 \\ \nabla \cdot \bar{u} = 0 \end{array} \right. \quad (2)$$

Puisque $\bar{u} \bar{u} \neq \bar{u} \bar{u}$, les eq's de Reynolds possèdent + d'inconnues ($\bar{u}$, $\bar{p}$ et $\bar{u} \bar{u}$: 7 inconnues scalaires en 3D) que d'équations (4 scalaires) $\Rightarrow$ problème de ~~sol~~ clôture des équations.

On fait alors l'hypothèse de Boussinesq:

$$\bar{u} \bar{u} = \bar{u} \bar{u} + \mu_t \bar{S}$$

où μ_t est la viscosité turbulente à "modéliser"

par analyse dimensionnelle:

$$\text{viscosité} = \text{viscosité} \times \text{longueur}.$$

Il y a un nombre infini de modèles. L'un des + répondu en R & D est le modèle $k-\epsilon$ ⁽¹⁹⁷⁴⁾, tel que:

$$\mu_t = C \frac{k^2}{\epsilon} \quad \begin{array}{l} \nearrow \quad k^2 \rightarrow \text{énergie cinétique turbulente} \\ \quad \quad \epsilon \rightarrow \text{taux de dissipation de } k \end{array}$$

constante sans dimension

Les variables k et ϵ doivent être modélisées en utilisant des eq's de transport à partir des eq's NS:

$$\frac{Dk}{Dt} = \dots, \quad \frac{D\epsilon}{Dt} = \dots$$

conclusion • Il faut résoudre des eq's pour $\bar{u}$, $\bar{p}$, k et ϵ (9 eq's en 3D)

- Mais le point de calcul qu'en DNS pour calculer les moyennes $\bar{u}$, $\bar{p}$...

- Dans la modélisation statistique, il apparaît des constantes empiriques qu'il faut ^{calibrer} déterminer en comparant le calcul numérique avec des expériences test. (3)

Partie I

Annexes et compléments

A Travaux Dirigés

A.1 Rappel : Méthodes numériques de base pour les equations différentielles ordinaires

Exercice A.1. (Résolution d'une E.D.O. non-linéaire)

On considère le problème de Cauchy :

$$\begin{cases} \dot{y}(t) = -t y^2(t), & t \in [0, 1], \\ y(0) = 2, \end{cases}$$

dont la solution exacte est $y(t) = 2/(1+t^2)$.

- 1) Cette *E.D.O.* est elle linéaire ? Pour le schéma EP1, établir la relation de récurrence donnant y^{n+1} en fonction de y^n . Pour $h = 1/10$, calculez la solution aux temps t_1 et t_2 .
- 2) Déterminez une condition nécessaire de stabilité pour EP1. Vérifiez que la méthode est stable pour le pas de temps utilisé dans la question précédente.
- 3) Appliquez ER1 à la résolution de cette EDO. Montrez que ce schéma se met sous la forme de récurrence :

$$G(t_{n+1}, y^{n+1}) = H(t_n, y^n),$$

et explicitez les fonctions G et H . Pouvez-vous facilement calculer y^{n+1} ? Pourquoi ? Décrivez une méthode itérative permettant de calculer y^{n+1} .

Exercice A.2. (Schéma de Crank-Nicolson)

On considère le problème de Cauchy :

$$\dot{y}(t) = f(t, y(t)), \quad t \in [0, T] \quad (\text{A.1a})$$

$$y(0) = y_0. \quad (\text{A.1b})$$

- 1) En appliquant la quadrature du trapèze entre les instants t_n et $t_{n+1} = t_n + h$, montrez qu'on définit le schéma :

$$\frac{y^{n+1} - y^n}{h} = \frac{1}{2} [f(t_n, y^n) + f(t_{n+1}, y^{n+1})]. \quad (\text{A.2})$$

qui est connu sous le nom de *schéma de Crank-Nicolson (C-N)*. Cette méthode est-elle explicite ou implicite ?

- 2) En utilisant des développements de Taylor, montrez que le schéma ER1 est précis au premier ordre, tandis que C-N est au second-ordre.
- 3) On applique le schéma C-N au problème test

$$\dot{y}(t) = \lambda y(t), \quad \lambda < 0.$$

Calculez son facteur d'amplification. Vérifiez que la méthode est bien au second-ordre. Etudiez la stabilité de la solution numérique.

- 4) On a utilisé deux schémas X et Y pour intégrer numériquement une E.D.O. de la forme (A.1). Les résultats sont reportés dans le tableau A.1. L'une de ces méthodes est ER1, l'autre C-N : pouvez-vous les identifier ?
- 5) Complétez le tableau A.2 avec les propriétés du schéma CN.

h	Schéma X	Schéma Y
1	3.05×10^{-2}	5.22×10^{-3}
0.5	1.46×10^{-2}	1.03×10^{-3}
0.25	7.16×10^{-3}	2.50×10^{-4}
0.125	3.55×10^{-3}	6.19×10^{-5}
0.0625	1.77×10^{-3}	1.54×10^{-5}

Tableau A.1. Erreurs commises à l'instant $t = t^*$ pour différentes valeurs du pas de temps.

Schémas	Type	Ordre q	$\sigma(\lambda h)$	Stabilité pour $\dot{y} = \lambda y$	
				$\lambda \in \mathbb{R}^{-,*}$	$\lambda \in \underline{i}\mathbb{R}^*$
EP1	Expl.	1	$1 + \lambda h$	$h < \frac{2}{-\lambda}$	Non
ER1	Impl.	1	$\frac{1}{1 - \lambda h}$	Oui	Oui
CN					

Tableau A.2. Principales propriétés des schémas numériques pour EDO.

A.2 Méthode des différences finies

A.2.1 Différences finies I : généralités sur les différences finies

Exercice A.3 (Formules de différences finies sur maillage uniforme).

On considère dans cet exercice un maillage uniforme $\{x_i = i\Delta x\}$ de pas uniforme Δx .

- 1) Utilisez les formules centrées du cours pour calculer l'approximation de $u'(x_i)$ et $u''(x_i)$ pour les fonctions suivantes : $u(x) = 1$, x et x^2 . Comparez avec les résultats analytiques. Qu'en serait-il pour les polynômes de degré supérieur ?
- 2) En utilisant des développements de Taylor, montrez que la formule centrée à trois points du cours :

$$\delta_{xx}^0 u_i = \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{\Delta x^2}, \quad (\text{A.3})$$

est une approximation au second ordre de $\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_i$.

- 3) Utilisez la technique générale de construction de formule de différences finies pour établir la formule *décentrée* du second ordre qui exprime $(\partial u / \partial x)_i$ en fonction de u_i , u_{i+1} , et u_{i+2} . Montrez que l'erreur de troncature s'écrit :

$$\tau_i = -\frac{\Delta x^2}{3} \left(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\right)_i.$$

Exercice A.4 (Formules de différences finies sur maillage non-uniforme).

Sur le maillage non-uniforme $\{x_i\}$, tel que $\Delta x_i = x_i - x_{i-1}$, on considère la formule de différences finies centrée suivante pour calculer $\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_i$:

$$\delta_x^0 u_i = \frac{1}{\Delta x_{i+1} + \Delta x_i} \left[\frac{\Delta x_i}{\Delta x_{i+1}} (u_{i+1} - u_i) + \frac{\Delta x_{i+1}}{\Delta x_i} (u_i - u_{i-1}) \right] \quad (\text{A.4})$$

- 1) Montrez que sur maillage uniforme on retrouve la formule centrée usuelle.
- 2) Montrez que la formule (A.4) est une approximation au second-ordre sur maillage non uniforme.

Exercice A.5 (Conditionnement des opérateurs de différences finies).

On considère l'équation de Laplace :

$$-u''(x) = f(x) \quad \text{dans } \Omega =]0, 1[, \quad (\text{A.5})$$

avec conditions aux limites de Dirichlet homogènes. On définit le maillage $\Omega_i = \{x_i = i\Delta x, i = 0, \dots, N+1\}$ avec le pas uniforme $\Delta x = 1/(N+1)$.

- 1) Montrez que la résolution de (A.5) par méthode de différences finies centrées conduit à la résolution du système linéaire :

$$-\frac{1}{\Delta x^2} \mathcal{K} U = F \quad (\text{A.6})$$

avec U et F respectivement les vecteur des inconnues $\{u_i\}$ et du second-membre $\{f(x_i)\}$ aux points intérieurs du maillage, et $\mathcal{K} = \text{Tridiag}_N[1, -2, 1]$ la matrice tridiagonale de taille $N \times N$ telle que :

$$\mathcal{K} = \begin{bmatrix} & & & & & & \\ & -2 & 1 & & & & \\ & 1 & -2 & 1 & & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & & 1 & -2 & 1 & \\ & & & & 1 & -2 & \end{bmatrix}.$$

- 2) Montrez que les valeurs propres de $\mathcal{K}$ s'écrivent¹ :

$$\lambda_k = 2 - 2 \cos k\pi \Delta x, \quad \text{pour } k = 1, \dots, N, \quad (\text{A.7})$$

Enoncez les propriétés principales de la matrice $\mathcal{K}$.

- 3) En remarquant que :

$$\cos N\pi \Delta x = -\cos \pi \Delta x,$$

déduire de la question précédente que le nombre de conditionnement de $\mathcal{K}$ s'écrit

$$\chi(\mathcal{K}) = \frac{1 + \cos \pi \Delta x}{1 - \cos \pi \Delta x},$$

et que, lorsque le maillage devient très fin ($\Delta x \rightarrow 0$),

$$\chi(\mathcal{K}) \simeq \frac{4}{\pi^2 \Delta x^2}.$$

¹ On rappelle que les valeurs propres de la matrice $\text{Tridiag}_N[a, b, c]$ s'écrivent :

$$\lambda_k = b - 2\sqrt{ac} \cos \frac{k\pi}{N+1}, \quad k = 1, 2, \dots, N.$$

- 4) Que pouvez-vous déduire de ces questions sur la performance des méthodes itératives pour résoudre le système linéaire (A.6) ?
- 5) De la même façon, montrez que la matrice *de masse* (cf. cours sur les éléments finis) $\mathcal{D} = \text{Tridiag}_N[1, 4, 1]/6\Delta x$ est bien conditionnée.

A.2.2 Différences finies II : Analyse des schémas instationnaires, consistance, stabilité.

Exercice A.6 (Le θ -schéma pour les équations paraboliques).

Cette exercice concerne l'approximation par différences finies de l'équation de la chaleur unidimensionnelle

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \nu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = f(x, t), \quad (\text{A.9})$$

avec $\nu \geq 0$. On notera Δt le pas de temps, Δx le pas d'espace, et u_i^n l'approximation différences finies de la solution $u(t_n, x_i)$ au temps $t_n = n\Delta t$ et au nœud $x_i = i\Delta x$. L'approximation sera basée sur des différences finies centrées en espace, et l'approximation temporelle utilisera le θ -schéma qui s'écrit, pour l'EDO $\dot{y}(t) = f(y(t), t)$:

$$\frac{y^{n+1} - y^n}{\Delta t} = \theta f(t_{n+1}, y^{n+1}) + (1 - \theta)f(t_n, y^n), \quad (\text{A.10})$$

avec θ un paramètre réel compris dans l'intervalle $[0, 1]$. Les conditions aux limites sont négligées.

- 1) Effectuez une semi-discretisation de l'équation de la chaleur en utilisant des différences finies centrées en espace. Ecrivez le système d'EDO obtenu sous une forme matricielle, et de manière indicielle en utilisant le symbole de dérivation discrète du cours : δ_{xx}^0 .
- 2) Achevez la discrétisation en utilisant le θ -schéma. Combien de niveaux de temps possède ce schéma ? Pour quelles valeurs de θ le schéma est-il : explicite ? implicite ? A quels schémas les valeurs $\theta = 0$ et $\theta = 1$ correspondent-elles ?
- 3) A l'aide de la formule de Taylor, déterminez une approximation de $\theta\phi^{n+1} + (1 - \theta)\phi^n$ au temps $n\Delta t$, jusqu'à l'ordre Δt^2 inclus.
- 4) Exprimez les deux premiers termes de l'erreur de troncature de $(u^{n+1} - u^n)/\Delta t$ et $\delta_{xx}^0 u_i$, approximation respective des opérateurs $\partial u/\partial t$ et $\partial^2 u/\partial x^2$.
- 5) En utilisant les questions précédentes, exprimez l'erreur de troncature du schéma au point $(n\Delta t, i\Delta x)$, jusqu'à l'ordre $\Delta t^2, \Delta x^2$ inclus.
- 6) Etudiez l'ordre de consistance du schéma suivant la valeur de θ .
- 7) Le schéma construit dans la question 2) avec $\theta = 1/2$ est connu sous le nom de *schéma de Crank-Nicolson* (CN). Ecrivez-le sous la forme *itérative* :

$$\sum_{j=i-1}^{i+1} \mathcal{B}_{ij}^1 u_i^{n+1} = \sum_{j=i-1}^{i+1} \mathcal{B}_{ij}^2 u_j^n,$$

où les $\mathcal{B}^l$ sont les *matrices d'itération* du schéma. Exprimez les coefficients de ces matrices en fonction du nombre de diffusion $r = \nu\Delta t/\Delta x^2$.

- 8) Exprimez le facteur d'amplification $g(\xi)$ du schéma CN en fonction de r et de $\xi = \sin^2 \frac{k\Delta x}{2} = \frac{1 - \cos k\Delta x}{2}$. Rappelez la condition de stabilité de Von Neumann et analysez la stabilité du schéma.
- 9) *Question subsidiaire* : même question pour θ quelconque. Montrez que si $\theta \geq 1/2$, le schéma est inconditionnellement stable et, si $\theta < 1/2$, il est stable sous la condition

$$\Delta t \leq \frac{\Delta x^2}{2\nu(1 - 2\theta)}.$$

- 10) Que peut-on dire sur la convergence du theta-schema ?
 11) Faites un bilan des propriétés du schema suivant la valeur de $\theta = 0, 1$ ou $1/2$.

Exercice A.7 (Le schéma de Richardson).

Pour discrétiser l'équation de la chaleur 1D, on considère maintenant l'approximation temporelle du point milieu :

$$\frac{y^{n+1} - y^{n-1}}{2\Delta t} = f(t_n, y^n), \quad (\text{A.11})$$

qui est construit en utilisant la formule de quadrature de la moyenne pour approcher l'intégrale $\int_{t_{n-1}}^{t_{n+1}} f(t, y(t)) dt$. L'approximation spatiale utilisera des différences finies centrées.

- 1) Effectuez une semi-discrétisation de l'équation de la chaleur, puis achevez la discrétisation avec la méthode du point milieu. Le schéma résultant est connu sous le nom de *schéma de Richardson* pour l'équation de la chaleur.
- 2) Combien de niveaux de temps possède ce schéma ? Quel est son ordre de troncature ?
- 3) Exprimez la matrice d'amplification du schéma. (On introduira la variable auxiliaire $v_i^{n+1} = u_i^n$ pour se ramener à un schéma à 2 niveaux.)
- 4) Le schéma de Richardson est-il stable ?

A.2.3 Différences finies III : schémas pour équations elliptiques

Exercice A.8 (Approximation d'un problème de convection-diffusion stationnaire).

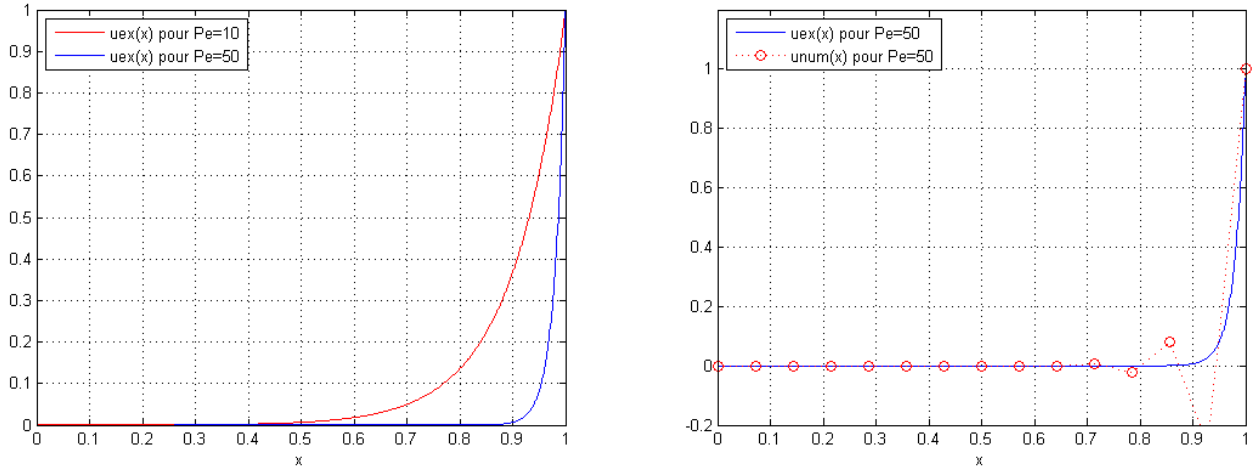


Fig. A.1. A gauche : Solution exacte de l'équation de convection diffusion stationnaire pour diverses valeur du nombre de Péclet. A droite : Solution par différences finies centrées pour $n = 13$.

On considère le problème de convection-diffusion avec conditions de Dirichlet :

$$au'(x) - \nu u''(x) = 0 \quad \text{dans } \Omega =]0, 1[, \quad (\text{A.1a})$$

$$u(0) = 0, \quad u(1) = 1, \quad (\text{A.1b})$$

avec la viscosité $\nu > 0$ et la vitesse de convection a supposée positive. La solution exacte de ce problème aux limites est :

$$u(x) = \frac{\exp \frac{a}{\nu} x - 1}{\exp \frac{a}{\nu} - 1}. \quad (\text{A.2})$$

- 1) Adimensionnez le problème (A.1) avec comme longueur de référence L , la taille du domaine, a la vitesse de référence, et exhibez le *nombre adimensionnel de Péclet* noté Pe . Montrez graphiquement que la solution exacte possède une couche limite lorsque la convection domine, *i.e.* $\text{Pe} \gg 1$.
- 2) Faites une approximation de (A.1) avec la méthode des différences finies centrées sur le maillage $\{x_i = i\Delta x, i = 0, \dots, N+1\}$ avec $\Delta x = 1/(N+1)$ le pas de maillage. Ecrivez les coefficients du schéma centré en fonction du *nombre de Péclet de maille* défini par :

$$\text{Pe}_h = \frac{a\Delta x}{\nu}. \quad (\text{A.3})$$

Ecrivez le schéma complet sous sa forme matricielle et donnez son ordre de troncature.

- 3) Cherchez la solution discrète du schéma centré sous la forme du *mode normal* $u_i = q^i$. Déterminez q en fonction des coefficients du schéma, et montrez que la solution s'écrit :

$$u_i = \frac{\left(\frac{2 + \text{Pe}_h}{2 - \text{Pe}_h}\right)^i - 1}{\left(\frac{2 + \text{Pe}_h}{2 - \text{Pe}_h}\right)^{N+1} - 1}. \quad (\text{A.4})$$

En déduire que la solution numérique présente des oscillations lorsque $\text{Pe}_h > 2$.

- 4) Application numérique : on considère le problème (A.1) avec $\nu = 10^{-3}$ et $a = 1$. Calculez le nombre de Péclet. Quel est nombre minimal de points N pour que la méthode de différences finies centrée ne présente pas d'oscillations ?
- 5) Remplacez l'approximation centrée du terme convectif de (A.1) par une approximation décentrée (ou *upwind*) dans le sens de la vitesse de convection. Utilisez la méthode des modes normaux pour montrer que la solution discrète s'écrit maintenant :

$$u_i = \frac{(1 + \text{Pe}_h)^i - 1}{(1 + \text{Pe}_h)^{N+1} - 1}, \quad (\text{A.5})$$

et qu'elle ne présente pas d'oscillations pour toutes valeurs de Pe_h .

Exercice A.9 (Nœud fantôme et condition de Neumann)).

Pour l'équation de Helmholtz

$$\lambda u(x) - u''(x) = f(x) \quad \text{dans } \Omega =]a, b[, \quad (\text{A.1})$$

on va mettre au point une nouvelle technique pour implémenter la condition de Neumann

$$u'(a) = g_-, \quad (\text{A.2})$$

dans un schéma de différences finies centrées. Comme dans le cours, nous considérerons le maillage uniforme

$$\Omega_h = \{x_i = a + (i-1)h, \quad i = 1, \dots, N\} \quad \text{avec } h = \frac{b-a}{N-1},$$

et noterons u_i et f_i les approximations respectives de $u(x)$ et $f(x)$ aux points de ce maillage.

- 1) En introduisant le point “fantôme”

$$x_0 = a - h,$$

discrétisez la condition aux limites (A.2) par différences finies centrées du second ordre.

- 2) Eliminez u_0 du système à l’aide de la formule courante pour (A.1), écrite au bord $x = a$ du domaine. Comparez avec la formule obtenue avec la première méthode du cours.
- 3) Etudiez l’erreur de troncature du schéma, notamment au point x_2 (faire le cas $\lambda = 0$ pour alléger les calculs).
- 4) Au bord $x = b$, on imposera la condition de Dirichlet

$$u(b) = g_+. \quad (\text{A.3})$$

Ecrivez le système complet, de dimension $N \times N$, sous forme tridiagonale tel qu’il soit prêt à être résolu par l’algorithme de Thomas.

Exercice A.10 (Condition de solvabilité d’un problème de Neumann).

On considère l’équation de Poisson dans $\Omega \subset \mathbb{R}^2$,

$$-\nabla^2 u = f, \quad (\text{A.4})$$

muni des conditions de Neumann

$$\frac{\partial u}{\partial \mathbf{n}}(\mathbf{x}) = g(\mathbf{x}), \quad \forall \mathbf{x} \in \partial\Omega. \quad (\text{A.5})$$

- 1) Vérifiez que si ce problème admet une solution, elle est définie à une constante près.
- 2) Par application du théorème de la divergence, montrez que le problème est soluble si les données vérifient la condition de compatibilité :

$$\int_{\partial\Omega} g \, dS + \int_{\Omega} f \, dV = 0. \quad (\text{A.6})$$

On considère maintenant la version *1D* du problème précédant, soit :

$$-u''(x) = f(x) \quad \text{pour } x \in \Omega =]0, 1[, \quad (\text{A.7a})$$

avec les conditions de Neumann non homogènes

$$u'(0) = g_- \quad \text{et} \quad u'(1) = g_+. \quad (\text{A.7b})$$

Pour discrétiser ce problème par différences finies, introduisons le maillage

$$\Omega_h = \{x_i = (i-1)h, \, 1 \leq i \leq N\} \quad \text{avec} \quad h = 1/(N-1). \quad (\text{A.8})$$

- 3) Montrez que la solution analytique est définie à une constante près et exhibez l’analogie *1D* de la condition de compatibilité (A.6).
- 4) Discrétisez (A.7) en utilisant la méthode du point fantôme. Ecrivez le système discret sous la forme matricielle de taille $N \times N$:

$$\mathcal{A}U = F, \quad (\text{A.9})$$

avec $U = (u_1, \dots, u_N)^T$. Explicitez $\mathcal{A}$ et F .

- 5) Montrez que la solution de (A.9) est définie à une constante près. En utilisant l’alternative de Fredholm³, énoncez une condition de solvabilité de ce système linéaire. Comparez-la avec le cas continu.

³ Un théorème fondamental de l’algèbre linéaire, connu sous le nom de l’*alternative de Fredholm*, établit que le système linéaire

- 6) Supposons que la donnée $f(x)$ vérifie la condition de compatibilité du problème continu (A.7). On définit les f_i du second-membre de (A.9) comme :

$$\begin{aligned} f_1 &= \frac{2}{h} \int_0^{\frac{h}{2}} f(x) \, dx, \\ f_i &= \frac{1}{h} \int_{x_i - \frac{h}{2}}^{x_i + \frac{h}{2}} f(x) \, dx \quad \text{pour } i = 2, \dots, N-1, \\ f_N &= \frac{2}{h} \int_{1-\frac{h}{2}}^1 f(x) \, dx. \end{aligned}$$

Montrez alors que la condition de solvabilité du système linéaire est vérifiée. Cette approximation des f_i est-elle semblable à l'interpolation usuelle⁴ ?

- 7) On cherche à résoudre le système linéaire (A.9) par l'algorithme de Thomas. Dans la suite de cette question, on notera :

$$\tilde{f}_1 = \frac{f_1}{2} - \frac{g_-}{h}, \quad \tilde{f}_N = \frac{f_N}{2} + \frac{g_+}{h}.$$

Montrez que, à l'issue de la première étape de cet algorithme, les $(N-1)$ premières lignes du système ont la forme :

$$\begin{bmatrix} 1 & -1 & & & & \\ 0 & 1 & -1 & & & \\ & & \cdot & \cdot & \cdot & \\ & & & 0 & 1 & -1 \\ & & & & \cdot & \cdot & \cdot \\ & & & & & 0 & 1 & -1 \\ & & & & & & \bullet & \bullet \end{bmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \cdot \\ u_i \\ \cdot \\ u_{N-1} \\ u_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} h^2 \tilde{f}_1 \\ h^2 (\tilde{f}_1 + f_2) \\ \cdot \\ h^2 \left(\tilde{f}_1 + \sum_{k=2}^i f_k \right) \\ \cdot \\ h^2 \left(\tilde{f}_1 + \sum_{k=2}^{N-1} f_k \right) \\ \bullet \end{pmatrix},$$

et que la dernière ligne, qui s'écrit :

$$\text{pivot}(N) u_N = h^2 \left(\tilde{f}_1 + \sum_{k=2}^{N-1} f_k + \tilde{f}_N \right),$$

$$\mathcal{A}X = B,$$

est soluble si et seulement si, pour tout Y tel que

$$\mathcal{A}^T Y = 0,$$

la condition de solvabilité

$$B^T Y = 0,$$

est vérifiée. En d'autres termes, ce théorème formule des conditions de "compatibilité" sur le second membre B : pour que le système linéaire possède des solutions (solution particulière + les éléments du noyau de $\mathcal{A}$), il faut que B soit orthogonal à tous les éléments du noyau de $\mathcal{A}^T$.

⁴ Conseil : utilisez la formule de quadrature du rectangle.

possède un pivot nul. En déduire que, si la condition de compatibilité discrète est vérifiée, le système admet néanmoins une solution définie à une constante près. Proposez une stratégie algorithmique pour contourner la division par zéro de la dernière ligne.

A.2.4 Différences finies IV : schémas pour équations hyperboliques

Exercice A.11 (Implémentation Matlab du θ -schéma pour l'équation de transport).

Pour discrétiser l'équation hyperbolique du transport

$$\frac{\partial u}{\partial t} + a \frac{\partial u}{\partial x} = 0, \quad \text{dans } \Omega =]0, 1[\quad (\text{A.10})$$

avec $a > 0$ et la condition d'inflow $u(a_x, t) = g_-(t)$, on considère le θ -schéma :

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} + a [\theta \delta_x^0 u_i^{n+1} + (1 - \theta) \delta_x^0 u_i^n] = 0, \quad \text{pour } \theta \in [0, 1] \quad (\text{A.11})$$

sur le maillage $\Omega_i = \{x_i = (i - 1)\Delta x, i = 1, \dots, N\}$ avec le pas uniforme $\Delta x = 1/(N - 1)$.

- 1) Reconnaissez les différents schémas du cours pour $\theta = 0, 1/2$ et 1 .
- 2) Pour imposer la condition au limite numérique à l'outflow $x = 1$ on utilisera le schéma upwind en $i = N$. Ecrivez-le θ -schéma sous sa forme itérative

$$\sum_{j=i-1}^{i+1} \mathcal{B}_{ij}^1 u_j^{n+1} = \sum_{j=i-1}^{i+1} \mathcal{B}_{ij}^2 u_j^n, \quad (\text{A.12})$$

et exprimez les coefficients des matrices $\mathcal{B}^1$ et $\mathcal{B}^2$ en fonction de θ et du nombre de Courant $C = a\Delta t/\Delta x$.

- 3) Ecrivez les fonctions matlab `M=cree_matrixB1(c,theta,n)` et `unew=theta_schema(c,theta,ug,uold,B1)` qui créent la matrice $\mathcal{B}^1$ et calculent la solution u_i^{n+1} en fonction des données du problème et de la solution au temps précédent u_i^n .

Exercice A.12 (Etude de la dispersion et dissipation numérique d'un schéma aux différences).

On considère l'équation hyperbolique du transport

$$\frac{\partial u}{\partial t} + a \frac{\partial u}{\partial x} = 0, \quad (\text{A.13})$$

avec $a > 0$. On a vu en cours que le schéma explicite décentré upwind

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} + a \delta_x^- u_i^n = 0, \quad (\text{A.14})$$

correspondait à une stabilisation du schéma explicite centré par l'introduction de diffusion numérique.

Le but de cet exercice est d'introduire de façon plus rigoureuse le concept de diffusion numérique, et d'introduire celui de dispersion numérique. L'approche que nous utiliserons repose sur l'étude de Fourier de l'équation équivalente du schéma numérique (A.14). Ces notions sont bien sûr valables pour d'autres EDP (pas nécessairement hyperboliques) et d'autres schémas.

L'équation équivalente d'un schéma est une généralisation des notions de consistance et d'erreur de troncature. Si on note

$$A u(t, x) = 0, \quad (\text{A.15})$$

l'équation à résoudre (qui correspond ici à (A.13)), et

$$A_h u_i^n = 0, \quad (\text{A.16})$$

le schéma numérique (ici, Eq. (A.14)) alors, par l'utilisation de développements de Taylor, il est possible d'écrire que la solution exacte $u(t, x)$ vérifie aux points du maillage

$$A_h u(t_n, x_i) = A u(t_n, x_i) + E_h(u(t_n, x_i)), \quad (\text{A.17})$$

où E_h correspond à l'erreur de troncature du schéma. C'est le terme dominant

$$\tau_i^n \sim E_h(u(t_n, x_i)), \quad \text{pour } \Delta t, \Delta x \text{ petit,}$$

que vous exhibez lorsque on vous demande de calculer l'ordre de troncature du schéma.

L'équation équivalente au schéma numérique (A.16) est définie comme l'équation aux dérivées partielles

$$A u(t, x) + E_h(u(t, x)) = 0. \quad (\text{A.18})$$

Puisque $E_h(u)$ comporte un nombre infini de termes qui sont obtenus par développement de Taylor, Eq. (A.18) a peu d'utilité pratique. Elle a, par contre, un grand intérêt théorique car elle permet d'évaluer quantitativement la précision du schéma numérique. Outre la détermination de l'ordre de troncature du schéma, elle permet, si l'on conserve les termes d'ordre supérieur de $E_h(u)$, d'observer les phénomènes de dissipation et dispersion numérique du schéma, ce qui est le but du TD.

1) Pour le schéma upwind (A.14), montrez que l'équation équivalente (A.18) s'écrit⁵ :

$$\frac{\partial u}{\partial t} + a \frac{\partial u}{\partial x} + \eta \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \Delta \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} + \mathcal{O}(\Delta t^3, \Delta x^3) = 0, \quad (\text{A.19})$$

où η et Δ dépendent de a , Δx et C le nombre de Courant. Pour cela, on utilisera des développements de Taylor de la solution autour de $(x_i = i\Delta x, t_n = n\Delta t)$, qu'on aura pris soin d'exprimer en fonction des dérivées spatiales uniquement. Mettez en évidence le terme dominant de l'erreur de troncature du schéma. Vérifiez qu'il est du premier ordre en espace et en temps.

2) Que se passe-t-il pour $C = 1$? Pour quelles valeurs de $C \neq 1$ le terme dominant de l'erreur est le plus petit possible ?

3) Nous savons que la solution de l'équation de transport (A.13) cherchée sous la forme du mode de Fourier

$$u(x, t) = \widehat{u}(t) e^{ikx}, \quad (\text{A.20})$$

s'écrit comme

$$u(x, t) = \widehat{u}_0 e^{ik(x-at)}, \quad \text{avec } \widehat{u}_0 = \widehat{u}(0), \quad (\text{A.21})$$

c'est-à-dire comme une onde se propageant à la vitesse $a > 0$ sans déformation.

D'une façon analogue, nous pouvons déterminer la représentation de Fourier de la solution numérique, dans le but d'examiner la capacité du schéma à représenter la propagation de cette onde. Pour cela, nous allons déterminer une solution sous la forme (A.20) de l'équation équivalente (A.19) tronquée au second-ordre, *i.e.* solution de l'équation

$$\frac{\partial u}{\partial t} + a \frac{\partial u}{\partial x} + \eta \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \Delta \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} = 0. \quad (\text{A.22})$$

Montrez que la solution s'écrit sous la forme

$$u(x, t) = u'_0(t) e^{ik(x-a't)}, \quad \text{avec } a' \in \mathbb{R}, \quad (\text{A.23})$$

et explicitez $u'_0(t)$ en fonction de $\widehat{u}_0$, η et k , et a' en fonction de a , Δ et k .

4) Que se passe-t-il pour $\eta > 0$? Montrez qu'on retrouve la condition *CFL* assurant la stabilité du schéma upwind.

⁵ On dit aussi : le schéma upwind (A.14) est consistant en $\mathcal{O}(\Delta t^2, \Delta x^2)$ avec l'EDP (A.19).

- 5) Tracez sur un même graphe la solution exacte (A.21) et la solution numérique (A.23) de l'équation de transport. Explicitez les termes liés à la dissipation numérique (*amortissement de la solution*) et de dispersion numérique (*altération de la vitesse de propagation*) du schéma upwind. En déduire que ce schéma est dissipatif au premier ordre et dispersif au second ordre.
- 6) Si vous avez du courage, ou de bonnes connaissances en Maple, montrez que l'équation équivalente du schéma de Lax-Wendroff appliqué à (A.13) s'écrit :

$$\frac{\partial u}{\partial t} + a \frac{\partial u}{\partial x} + a \frac{\Delta x^2}{6} (1 - C^2) \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} + a C \frac{\Delta x^3}{8} (1 - C^2) \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} + \mathcal{O}(\Delta t^4, \Delta x^4) = 0, \quad (\text{A.24})$$

et donc que le schéma est précis au second ordre en espace et en temps, dispersif au second ordre et dissipatif au troisième ordre. On remarque que le coefficient du premier terme dissipatif permet de retrouver la condition de stabilité du schéma.

A.3 Méthode des éléments finis

Exercice A.13 (Fléchissement d'une poutre).

On reprend l'exemple de la poutre du cours de différences finies, c'est-à-dire le problème de Helmholtz

$$c(x) u(x) - u''(x) = f(x) \quad \text{dans } \Omega =]0, 1[, \quad (\text{A.25a})$$

avec les conditions aux limites homogènes

$$u(0) = u(1) = 0. \quad (\text{A.25b})$$

- 1) Montrez que l'approximation par éléments finis $\mathcal{P}_1$ s'écrit :

$$\mathcal{M}u + \mathcal{K}u = f$$

où $\mathcal{K}$ et f sont respectivement la matrice de rigidité et le vecteur charge. La matrice $\mathcal{M}$, appelée *matrice de masse*, a pour composante :

$$\mathcal{M}_{ij} = \int_{\Omega} c(x) \psi_i(x) \psi_j(x) dx.$$

- 2) Dans le cas $c(x) = 1$ et pour un maillage uniforme de pas h , calculez $\mathcal{M}$ et écrivez le système complet.
- 3) Pour $c(x) \neq 1$ et un maillage uniforme, établir la forme du système linéaire dans le cas où l'intégration numérique du trapèze est utilisée. Effectuez-vous un crime variationnel ? Comparez avec l'approximation par différences-finies.
- 4) On considère maintenant $c(x) = \lambda$ et les conditions mixtes

$$u'(0) = 0 \quad \text{et} \quad u(1) = 0.$$

Etablir la formulation variationnelle du problème puis le système discret complet en utilisant la formule du trapèze.

Exercice A.14 (Éléments finis pour équation d'évolution).

On considère l'approximation par éléments finis $\mathcal{P}_1$ de l'équation de la chaleur 1D avec conditions de Dirichlet homogènes.

- 1) En utilisant le principe de semi-discrétisation (*cf.* cours Equations paraboliques), écrivez la version GFEM (Galerkin Finite Element Method) du schéma d'Euler progressif. Ce schéma est-il explicite ? Qu'en est-il si on utilisait la formule de quadrature du trapèze ?
- 2) On peut, comme en différences finies, effectuer une analyse de stabilité du schéma. Montrez que le facteur d'amplification s'écrit

$$g = 1 - \frac{12 r \xi}{3 - 2 \xi},$$

avec $\xi = (1 - \cos k \Delta x)/2$ et $r = \nu \Delta t / \Delta x^2$. En déduire la condition sur la stabilité du schéma. Comparez avec la stabilité obtenue par différences finies.

Remarque A.15 (Sur les éléments finis pour les équations d'évolution).

Pour une vraie méthode GFEM (intégration exacte), il n'est guère possible d'obtenir un schéma en temps qui soit explicite, et donc très économique en temps de calcul, tel qu'il n'y ait pas de système linéaire de la forme

$$\mathcal{M} \mathbf{u}^{n+1} = F(\mathbf{u}^n, \mathbf{u}^{n-1}, \dots), \quad (\text{A.26})$$

à résoudre à chaque pas de temps.

Il est à remarquer que pour tout N , le nombre de conditionnement de $\mathcal{M}$ est

$$\gamma_N(\mathcal{M}) \sim C$$

où C est une constante bornée, proche de l'unité et indépendante de N . En conséquence, la résolution de (A.26) n'est pas très coûteuse, car l'algorithme du gradient conjugué converge en un petit nombre d'itérations indépendant de N , à la différence de la résolution d'une équation de la forme

$$\mathcal{K} \mathbf{u} = F, \quad (\text{A.27})$$

comme vous l'avez vu en TP.

Néanmoins, la recherche d'une efficacité de calcul maximale des codes d'éléments finis pousse à l'utilisation d'algorithmes explicites. C'est pour cela qu'il est courant de s'efforcer à ce que à ce que $\mathcal{M} \sim \mathcal{I}_d$, par exemple par l'utilisation d'une sous intégration de la formulation variationnelle. On parle alors d'éléments finis avec approximation condensée de la matrice de masse (mass lumping). On gagne alors en temps de calcul et, parfois, en stabilité. Par contre, on perd sur le plan de la précision de la méthode, notamment les phénomènes de dispersion et dissipation numérique sont plus prononcés.

A.4 Méthode des volumes finis

Exercice A.16. On considère l'équation d'advection-diffusion stationnaire

$$\frac{du\phi}{dx} - \frac{d}{dx} \left(\nu \frac{d\phi}{dx} \right) = q(x), \quad (\text{A.28})$$

dans le domaine $\Omega =]0, 1[$. La viscosité $\nu = \nu(x)$ est strictement positive pour tout $x \in \Omega$. La vitesse d'advection $u = u(x)$ est de signe quelconque. On suppose néanmoins que $u(x=0) > 0$ et $u(x=1) > 0$: c'est-à-dire qu'au bord $x=0$ le fluide entre, et en $x=1$ le fluide sort. Pour que le problème soit mathématiquement bien posé, on choisit donc les conditions aux limites suivantes : on impose une condition d'entrée (inflow) en $x=0$,

$$\phi(0) = g_-, \quad (\text{A.29})$$

et une condition de sortie (outflow) en $x = 1$, qui est généralement de type Neumann :

$$\frac{d\phi}{dx}(1) = g_+. \quad (\text{A.30})$$

On se propose de résoudre ce problème par la méthode des volumes finis sur un maillage non-uniforme centré en cellules.

- 1) *Construction du maillage.* Soit $\{x_{i+\frac{1}{2}}, i = 0, \dots, N\}$ une suite de réels tels que :

$$0 = x_{\frac{1}{2}} < x_{\frac{3}{2}} < \dots < x_{N+\frac{1}{2}} = 1.$$

Construisez un maillage centré en cellules tels que les $x_{i+\frac{1}{2}}$ représentent les frontières des cellules élémentaires Ω_i . On notera x_i le centre de Ω_i , et Δx_i son volume. L'espacement entre les nœuds x_i et x_{i+1} sera noté $\widetilde{\Delta x}_i$. Combien y-a-t'il de cellules ? Représentez ce maillage sur un schéma. Soignez ce schéma en particulier autour d'une cellule Ω_i quelconque, et près des bords $x = 0$ et $x = 1$.

- 2) *Définition des inconnues.* On définit les valeurs moyennes dans une cellule :

$$\phi_i = \frac{1}{\Delta x_i} \int_{\Omega_i} \phi(x) dx, \quad q_i = \frac{1}{\Delta x_i} \int_{\Omega_i} q(x) dx, \quad i = 1, \dots, N.$$

Effectuez une approximation des intégrales permettant de relier ces moyennes aux valeurs nodales.

- 3) *Formulation volumes finis.* En intégrant l'équation (A.28) dans le volume Ω_i , montrez que la discretisation volumes finis s'écrit :

$$F_{i+\frac{1}{2}} - F_{i-\frac{1}{2}} = \Delta x_i q_i, \quad i = 1, \dots, N, \quad (\text{A.31})$$

avec $F = F^c - F^d$, les fonctions de flux conservatif et dissipatif dont vous donnerez l'expression. Le système discret est-il clos ? Quelle différence notable observez-vous par rapport au cas bidimensionnel ?

- 4) *Interpolation des flux.* Il faut maintenant exprimer les flux discrets $F_{i+\frac{1}{2}}, F_{i-\frac{1}{2}}$ en fonction des valeurs nodales ϕ_i .

- Dans le cas d'une vitesse d'advection quelconque, établissez les interpolations UDS et CDS du flux convectif $F_{i+\frac{1}{2}}^c$ pour $i = 1, \dots, N-1$, c'est-à-dire loin des bords. En déduire l'expression de $F_{i-\frac{1}{2}}^c$. Retrouvez la formule de différences finies upwind dans le cas $u(x) = u > 0$.
- Effectuez l'interpolation du flux diffusif $F_{i+\frac{1}{2}}^d$ pour $i = 1, \dots, N-1$. Sur maillage uniforme et $\nu(x) = \nu > 0$, retrouvez la formule de différences finies :

$$\frac{F_{i+\frac{1}{2}}^d - F_{i-\frac{1}{2}}^d}{\Delta x} = \nu \delta_{xx}^0 \phi_i.$$

- 5) *Implémentation des conditions aux limites.* Il faut maintenant tenir compte des conditions aux limites dans l'interpolation des flux discrets près des parois.

- Représentez les C.L. (A.29) et (A.30) sur le dessin du maillage. D'après Eq. (A.31), quels sont les flux discrets dont l'interpolation nécessite d'être modifiée *a priori* pour tenir compte des conditions aux limites ?
- Implémentez les C. L. dans les flux convectifs pour l'approximation CDS.
- Même question pour l'approximation UDS. D'après l'énoncé, $u_{\frac{1}{2}} > 0$: la condition de sortie (A.30) est-elle nécessaire ?
- Implémentez les C. L. dans les flux diffusifs.
- On se place maintenant dans le cadre d'un problème purement diffusif ($u = 0$ dans (A.28)), à viscosité constante. Exprimez le schéma (A.31) pour $i = 1$ et $i = N$ dans le cas d'un maillage uniforme. Comparez avec les différences finies. Peut-on interpréter cette implémentation des C. L. comme "le retour du point fantôme" ?

- 6) *Representation matricielle du schéma*. Montrez que la formulation volumes finis s'écrit sous la forme matricielle, de taille $N \times N$:

$$(\mathcal{C}_h(u) - \mathcal{D}_h) \Phi = Q'.$$

Dans le cas CDS, donnez l'expression des matrices tridiagonales $\mathcal{C}_h(u)$ et $\mathcal{D}_h$, ainsi que le second-membre Q' .

Bibliographie

En ce qui concerne l'analyse numérique "classique", niveau Licence ou Maîtrise, citons le livre de Quarteroni [9], et celui de Ciarlet [2] portant notamment sur l'optimisation. Citons aussi sur le même sujet le récent ouvrage de Bergonioux [1]. On rappelle que le grand classique présentant le côté pratique de l'analyse numérique est le "Numerical Recipes" de Press et al. [8], qui regroupe de nombreux programmes en *C* ou *Fortran*, et qui est disponible gratuitement sur le *Net*³.

Au sujet des méthodes numériques, le bouquin de Sainsaulieu [11] est un excellent complément de ces notes de cours, bien qu'il possède un formalisme mathématique légèrement plus élevé. Pour le niveau d'une maîtrise, citons aussi le livre de Rappaz and Picasso [10], et surtout celui d'Euvrard [3], qui possède une grande sensibilité "mécanique".

Pour ceux qui veulent connaître plus sur la *mécanique des fluides numérique*, un livre en anglais est incontournable : Ferziger and Perić [4]. Citons aussi les "classiques" de Fletcher [5] et Peyret and Taylor [7], et celui de Versteeg and Malalasekera [13] portant sur la méthode des volumes finis et son utilisation dans les codes de calcul commerciaux tels *Fluent*. Pour les gens vraiment accrochés : le récent bouquin de Wesseling [14].

- [1] M. Bergonioux. *Optimisation et Contrôle des Systèmes Linéaires*. Dunod, Paris, 2001.
- [2] P. G. Ciarlet. *Introduction à l'Analyse Numérique Matricielle et à l'Optimisation*. Masson, Paris, 1990.
- [3] D. Euvrard. *Résolution Numérique des Equations aux Dérivées Partielles*. Masson, Paris, 1988.
- [4] J. H. Ferziger and M. Perić. *Computational Methods for Fluid Dynamics*. Springer, Berlin, 1996.
- [5] C. A. J. Fletcher. *Computational Techniques for Fluid Dynamics*. Springer, Berlin, 1991.
- [6] R. Peyret. *Spectral Methods for Incompressible Viscous flow*. Springer, New York, 2002.
- [7] R. Peyret and T. D. Taylor. *Computational Methods for Fluid Flow*. Springer, New York, 1983.
- [8] W. H. Press, B. P. Flannery, S. A. Teukolski, and W. T. Vetterling. *Numerical Recipes*. Cambridge Univ. Press, Cambridge, 1992.
- [9] A. Quarteroni. *Méthodes Numériques pour le Calcul Scientifique*. Springer, Paris, 2000.
- [10] J. Rappaz and M. Picasso. *Introduction à l'Analyse Numérique*. Presses polytechniques et universitaires romandes, Lausanne, 1998.
- [11] L. Sainsaulieu. *Calcul Scientifique*. Masson, Paris, 1996.
- [12] G. Strang. *Introduction to Applied Mathematics*. Wellesley-Cambridge Press, Wellesley, MA, 1986.
- [13] H. K. Versteeg and W. Malalasekera. *An Introduction to Computational Fluid Dynamics. The Finite Volume Method*. Longman, Harlow, 1995.
- [14] P. Wesseling. *Principles of Computational Fluid Dynamics*. Springer, Berlin, 2001.

³ <http://www.library.cornell.edu/nr/bookfpdf.html>