Introduction à la Simulation Numérique

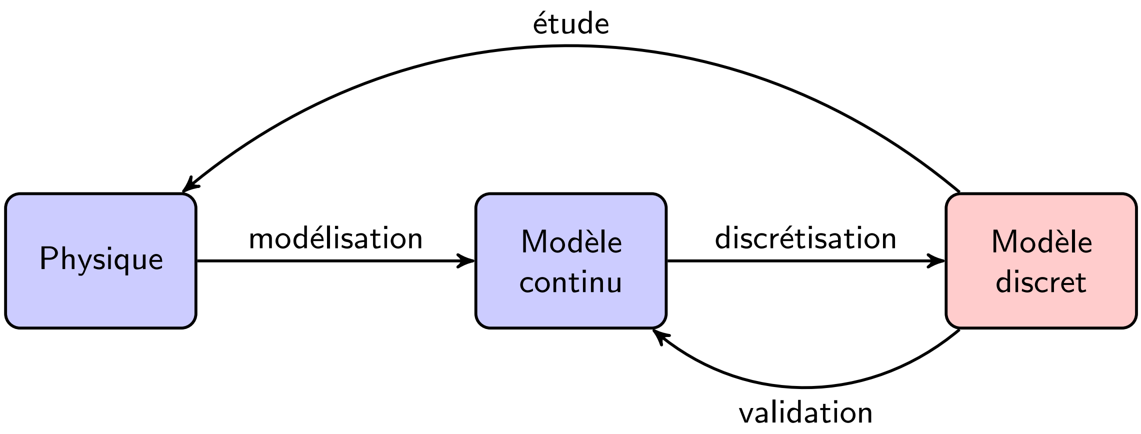
Jérémie Gressier

Septembre 2009

Plan

1. Présentation
2. Différences Finies
3. Intégration d'un problème de Cauchy
4. Conclusion

Simulation numérique, contexte



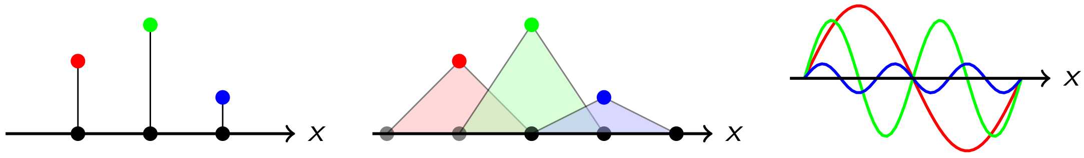
Discrétisation

Discrétisation

Représentation d'un problème continu (dim ∞) en problème de dimension finie

Quelques méthodes de représentation :

- valeurs en N points (Différences Finies)
- projection sur une base à support réduit (Éléments Finis, Volumes Finis)
- projection sur une base à support étendu (spectral, Fourier, Chebyshev, ...)



Types de problèmes physiques

- problème d'évolution
  → Problème à condition initiale (Pb de Cauchy)
- problème d'équilibre
  → Problème à conditions limites
  (Pb stationnaire, Pb évolution à contrainte)
- condition d'existence d'une solution
  → problème aux valeurs propres

Cadre du cours

- Équation différentielle ordinaire (une coordonnée x ou t)
- Problème à valeur initiale (évolution)
- Une (scalaire) ou plusieurs variables (vectoriel) (U de dimension d)
- Linéaire ou non-linéaire

Calcul discret de dérivées

Définition :

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

Différences finies :

$$\left(\frac{du}{dx}\right)_i \simeq \frac{u(x_{i+1}) - u(x_i)}{x_{i+1} - x_i}$$

erreur ?

Développement de Taylor : (de $u_{i\pm1}$ en x_i)

$$u_{i\pm1} = u_i \pm \left(\frac{du}{dx}\right)_i \Delta x + \frac{1}{2}\left(\frac{d^2u}{dx^2}\right)_i \Delta x^2 + \mathcal{O}(\Delta x^3)$$

Dérivées du premier ordre

$$u_{i\pm1} = u_i \pm \left(\frac{du}{dx}\right)_i \Delta x + \frac{1}{2}\left(\frac{d^2u}{dx^2}\right)_i \Delta x^2 + \mathcal{O}(\Delta x^3)$$

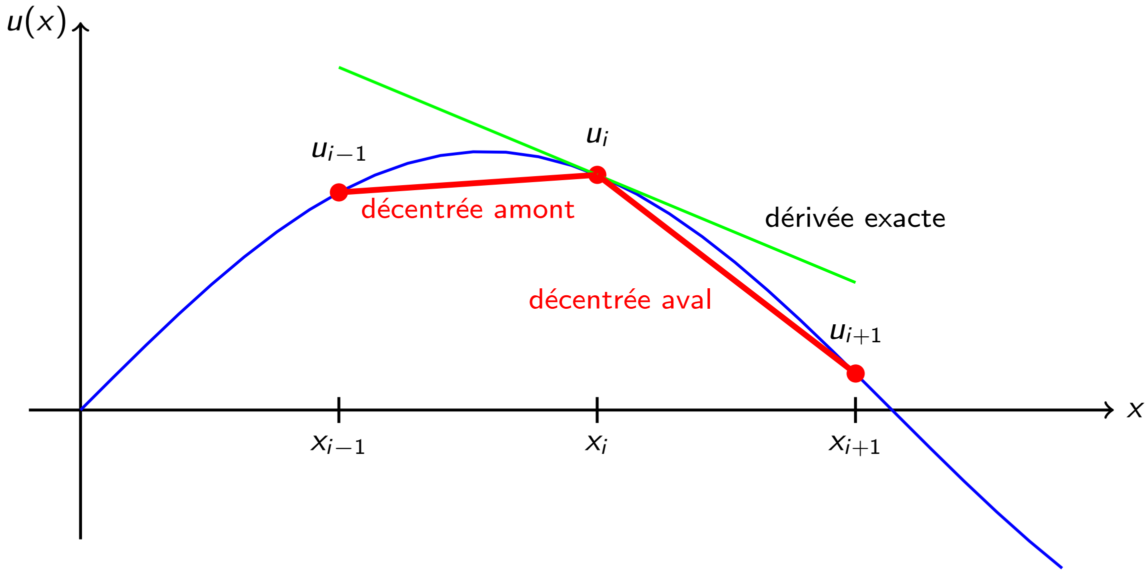
Différence décentrée aval (ordre 1)

$$\left(\frac{du}{dx}\right)_i = \frac{u_{i+1} - u_i}{\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x)$$

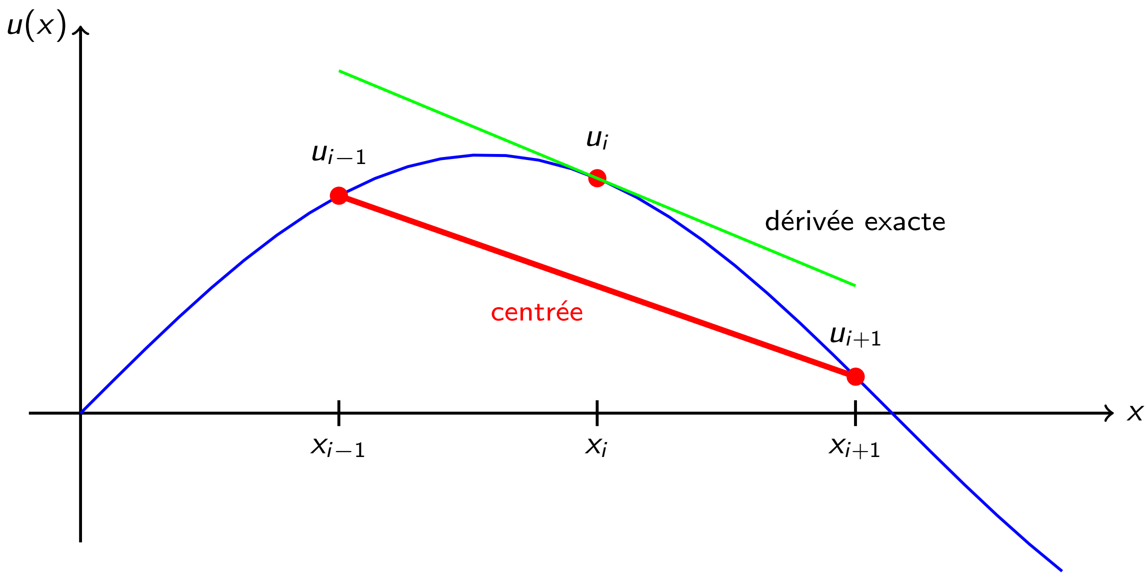
Différence centrée (ordre 2)

$$\left(\frac{du}{dx}\right)_i = \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x^2)$$

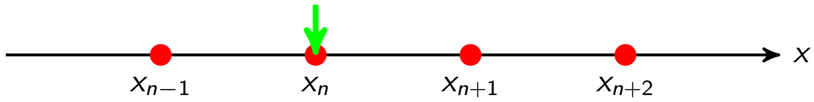
Interprétation géométrique



Interprétation géométrique



Méthodologie générale



1. Choix du support de calcul pour obtenir $\left(\dfrac{d^k u}{dx^k}\right)_{x_n}$ à l'ordre p
2. Développement de Taylor de chaque u_{n+i} à l'ordre $k+p$ en x_n
3. Écrire une combinaison arbitraire des u_{n+i}

$$\sum_{i,\text{support}} a_i\, u_{n+i} = \alpha_0\, u_n + \sum_{m=1,k+p} \alpha_m \left(\frac{d^m u}{dx^m}\right)_{x_n} \frac{\Delta x^m}{m!}$$

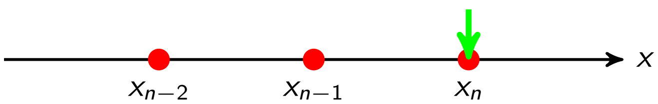
   où α_m sont des combinaisons linéaires des a_i

4. Déterminer les a_i à l'aide des $k+p$ équations : $\alpha_{m,m\neq k} = 0$ et $\alpha_k = 1$

Pour une évaluation de dérivée d'ordre k à un ordre de précision p, il faut (en général) un schéma à $k+p$ points.

Exemple: dérivée première, au 2^{nd} ordre, décentré à gauche 1/2

1. choix du support



2. développement de Taylor

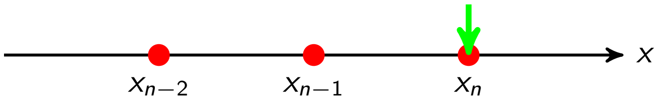
$$\begin{aligned} u_{n-2} &\simeq u_n - 2\Delta x \left(\frac{du}{dx}\right)_{x_n} + \frac{4\Delta x^2}{2}\left(\frac{d^2u}{dx^2}\right)_{x_n} \\ u_{n-1} &\simeq u_n - \Delta x \left(\frac{du}{dx}\right)_{x_n} + \frac{\Delta x^2}{2}\left(\frac{d^2u}{dx^2}\right)_{x_n} \end{aligned}$$

3. écriture des combinaison des u_{n+i}

$$\begin{aligned} \sum_{i=-2,0} a_i\, u_{n+i} &= (a_{-2} + a_{-1} + a_0) \quad u_n \\ &+(-2a_{-2} - a_{-1})\Delta x \quad \left(\frac{du}{dx}\right)_{x_n} \\ &+(4a_{-2} + a_{-1})\frac{\Delta x^2}{2} \quad \left(\frac{d^2u}{dx^2}\right)_{x_n} \end{aligned}$$

Exemple: dérivée première, au 2^{nd} ordre, décentré à gauche

1. choix du support



2. développement de Taylor
3. écriture des combinaison des u_{n+i}
4. identification

$$\left\{\begin{array}{rcrcrl} a_{-2} & + & a_{-1} & + & a_0 & = \alpha_0 \\ -2a_{-2} & - & a_{-1} & & & = \alpha_1 \\ 4a_{-2} & + & a_{-1} & & & = \alpha_2 \end{array}\right.$$

5. pour obtenir $\left(\frac{du}{dx}\right)_{x_n}$ à l'ordre 1, il faut $\alpha_0 = 0$ et $\alpha_1 = 1$ $\quad$ ($\infty^{\text{té}}$ solutions)
6. pour obtenir $\left(\frac{du}{dx}\right)_{x_n}$ à l'ordre 2, il faut $\alpha_0 = 0$, $\alpha_1 = 1$ et $\alpha_2 = 0$

$$\left(\frac{du}{dx}\right)_{x_n} = \frac{u_{n-2} - 4u_{n-1} + 3u_n}{2\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x^2)$$

Synthèse des dérivées du premier ordre

	ordre	x_{n-2}	x_{n-1}	x_n	x_{n+1}	x_{n+2}	
décentré gauche	1		-1	1			$/h$
décentré droite	1			-1	1		$/h$
décentré gauche	2	1	-4	3			$/2h$
décentré droite	2			-3	4	-1	$/2h$
centré	2		-1	0	1		$/2h$
centré	4	1	-8	0	8	-1	$/12h$

Synthèse des dérivées du second ordre

	ordre	x_{n-3}	x_{n-2}	x_{n-1}	x_n	x_{n+1}	x_{n+2}	x_{n+3}	
décentré gauche	1		1	-2	1				$/h^2$
décentré droite	1				1	-2	1		$/h^2$
centré	2*			1	-2	1			$/h^2$
décentré gauche	2	-1	4	-5	2				$/h^2$
décentré droite	2				2	-5	4	-1	$/h^2$
centré	4*		-1	16	-30	16	-1		$/12h^2$

Synthèse des dérivées centrées d'ordre élevé

	ordre	x_{n-3}	x_{n-2}	x_{n-1}	x_n	x_{n+1}	x_{n+2}	x_{n+3}	
$\frac{du}{dx}$	2			-1	0	1			$/2h$
	4		1	-8	0	8	-1		$/12h$
$\frac{d^2u}{dx^2}$	2			1	-2	1			$/h^2$
	4		-1	16	-30	16	-1		$/12h^2$
$\frac{d^3u}{dx^3}$	2		-1	2	0	-2	1		$/2h^3$
	4	1	-8	13	0	-13	8	-1	$/8h^3$
$\frac{d^4u}{dx^4}$	2		1	-4	6	-4	1		$/h^4$
	4	-1	12	-39	56	-39	12	-1	$/6h^4$

Résumé sur la méthode des Différences Finies

- calcul sur un ensemble de points (maillage)
  $\longrightarrow$ propriétés de convergence uniquement en ces points
- formules établies pour maillage uniforme
  $\longrightarrow$ perte des propriétés de précision sur autre maillage
- support de calcul important avec ordre (dérivée et précision)
  $\longrightarrow$ coût de calcul
  $\longrightarrow$ traitement des frontières

Problème de Cauchy

$$\left\{ \begin{array}{l} \dfrac{d\mathcal{U}}{dt} = F(\mathcal{U}, t) \\ \mathcal{U}(0) = U_0 \end{array} \right.$$

- problème d'évolution (équation d'évolution + condition initiale)
- équation différentielle ordinaire du premier ordre
- $\mathcal{U}$ de dimension d

Théorème de Cauchy-Lipschitz

si $F(\mathcal{U}, t)$ est lipschitzienne $\left(\exists M, \forall i, j \in \{1..d\}, \left|\dfrac{dF_i}{d\mathcal{U}_j}\right| < M\right)$

alors il existe une solution unique sur $\mathbb{R}^+$

Réduction de l'ordre du problème

Si l'ordre de dérivation maximal k est supérieur à un,
on se ramène au problème de Cauchy précédent
en définissant des variables supplémentaires, dérivées des premières.

- → réduction à un problème d'ordre 1
- → augmentation de la dimension du problème ($k \times d$)
- → conditions initiales : valeurs et dérivées supplémentaires introduites

Réduction de l'ordre : exemple

Système masse/ressort avec frottement visqueux

$$m\frac{d^2x}{dt^2} + c\frac{dx}{dt} + k\,x = 0$$

Rq : problème linéaire scalaire, ordre 2

Réduction de l'ordre par création de variables dérivées

Problème équivalent

$$\frac{d}{dt}\begin{pmatrix} x \\ v \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -k/m & -c/m \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x \\ v \end{pmatrix}$$

Rq :

- système linéaire de dim 2, ordre 1
- $(x \quad v)$ espace d'états ou espace des phases

Euler explicite

$$\frac{d\mathcal{U}}{dt} = F(\mathcal{U}, t)$$

Au premier ordre (développée en t_n),

$$\frac{U^{n+1} - U^n}{\Delta t} + \mathcal{O}(\Delta t) = F(U^n, t_n)$$

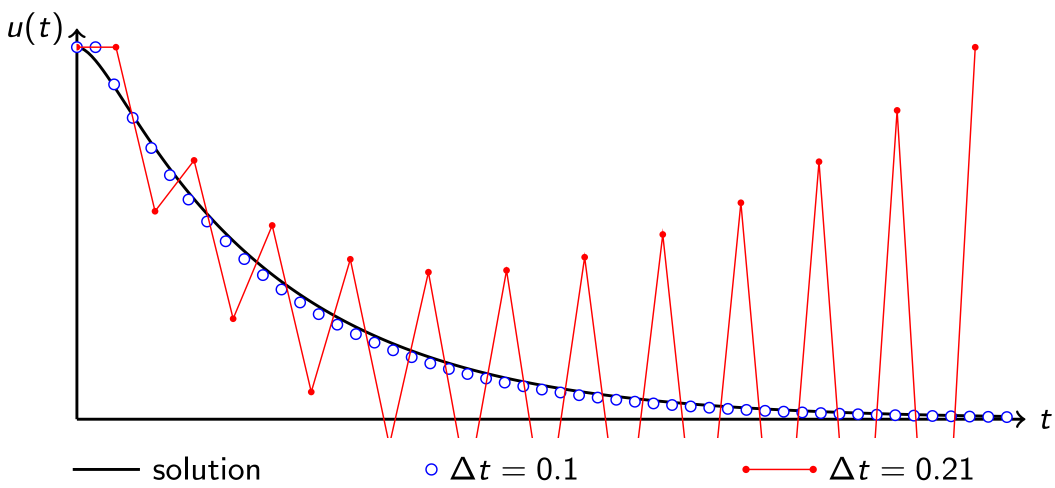
Euler explicite

$$U^{n+1} \simeq U^n + \Delta t F(U^n, t_n)$$

Euler explicite : exemple d'intégration

$$\frac{d^2u}{dt^2} + 11\frac{du}{dt} + 10u = 0 \qquad \text{avec } u(0) = 10\,, \quad \frac{du}{dt}(0) = 0$$

On reformule le problème $\frac{d}{dt}\begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -10 & -11 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}$



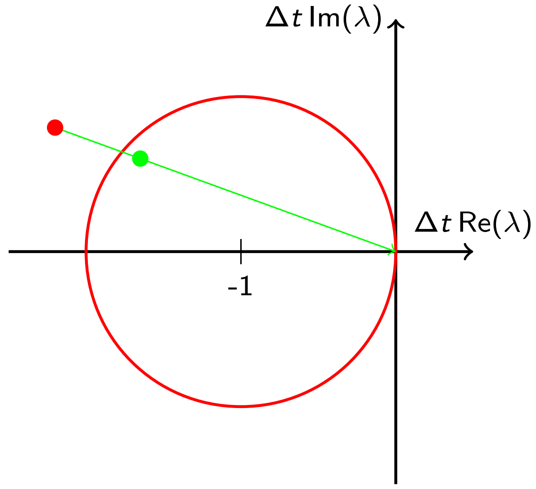
Euler explicite : analyse de stabilité

$$U^{n+1} = U^n + \Delta t\, \mathbb{A} \cdot U^n$$

Hypothèses : problème linéaire et $\mathbb{A}$ diagonalisable $W^{n+1} = W^n + \Delta t\, \Lambda \cdot W^n$

On obtient, par composante, $W_i^{n+1} = (1 + \Delta t\, \lambda_i) W_i^n$

L'intégration est stable si $\forall i,\ |1 + \Delta t\, \lambda_i| < 1$



- condition de stabilité sur Δt
- si λ réel, $\Delta t < \dfrac{2}{|\lambda|}$
- exemple: 2 valeurs propres $\{-1;\ -10\}$
  → $\Delta t_{\max} = 0.2$
- si λ imaginaire pur, inconditionnellement instable
- si problème non-linéaire, $\lambda = \lambda(U)$
  → pas adaptatif

Euler implicite (backward Euler)

$$\frac{d\mathcal{U}}{dt} = F(\mathcal{U}, t)$$

Au premier ordre (développée en t_{n+1}),

$$\frac{U^{n+1} - U^n}{\Delta t} + \mathcal{O}(\Delta t) = F(U^{n+1}, t_{n+1})$$

Euler implicite

$$U^{n+1} - \Delta t F(U^{n+1}, t_{n+1}) \simeq U^n$$

Remarques :

- si problème non linéaire, difficulté à résoudre (itératif)
- si problème linéaire, inversion matricielle (dim d)

Euler implicite linéarisé

Forme linéarisée

$$U^{n+1} = U^n + \Delta t \left[\mathbb{I} - \Delta t \left(\frac{\partial F}{\partial \mathcal{U}} \right)_{U_n} \right]^{-1} \cdot F(U^n)$$

Remarques :

- calcul de la matrice jacobienne (coût, difficulté)
- coût de l'inversion

Stabilité

$W_i^{n+1} = \dfrac{1}{1 - \Delta t\, \lambda_i} W_i^n \longrightarrow$ stabilité inconditionnelle pour tout $\lambda_i \in \mathbb{C}^-$ Re($\lambda_i < 0$)

Remarques :

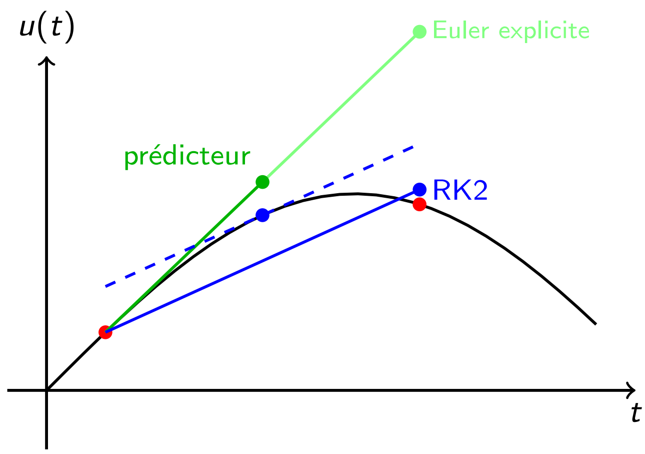
- schéma inconditionnellement stable $\longrightarrow$ Δt arbitrairement grand
- attention, seulement précis au premier ordre

Prédicteur/correcteur point milieu

$$\frac{d\mathcal{U}}{dt} = F(\mathcal{U}, t)$$

$$\overline{U} = U^n + \frac{\Delta t}{2} F(U^n, t_n)$$

$$U^{n+1} = U^n + \Delta t F\left(\overline{U}, t_n + \frac{\Delta t}{2}\right)$$



- 2 pas, 2 évaluations de F
- méthode d'ordre 2
- rapport coût O1/O2 à précision égale : $n^2/2n$

Méthodes de Runge et Kutta

Généralisation des méthodes p multi-étapes (*multi-level*)

$$\overline{U}_i = U^n + \Delta t \sum_{j=0}^{i-1} \alpha_{ij} F\big(\overline{U}_j\big)$$

$$U^{n+1} = U^n + \Delta t \sum_{j=0}^{p} \beta_j F\big(\overline{U}_j\big)$$

Tableau de Butcher associé
$$\begin{array}{r|llll}
\gamma_0 = 0 & & & & \\
\gamma_1 & \alpha_{1,0} & & & \\
\gamma_i & \alpha_{i,0} & \alpha_{i,i-1} & & \\
\gamma_p & \alpha_{p,0} & \alpha_{p,j} & \alpha_{p,p-1} & \\
\hline
 & \beta_0 & \dots & \dots & \beta_p
\end{array}$$

- consistance $\longrightarrow$ $\gamma_i = \sum_{j=0}^{i-1} \alpha_{i,j}$ et $\sum_{j=0}^{p} \beta_j = 1$

Tableaux de Butcher : exemples

RK ordre 1

Euler
$$\begin{array}{c|c}
0 & \\
\hline
 & 1
\end{array}$$

RK ordre 2

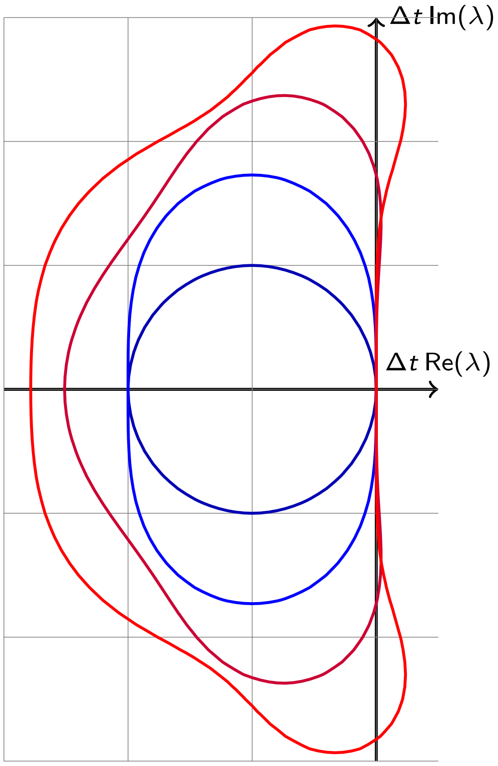
point milieu
$$\begin{array}{c|cc}
0 & & \\
1/2 & 1/2 & \\
\hline
 & 0 & 1
\end{array}$$

trapèze
$$\begin{array}{c|cc}
0 & & \\
1 & 1 & \\
\hline
 & 1/2 & 1/2
\end{array}$$

RK ordre 3
$$\begin{array}{c|ccc}
0 & & & \\
1 & 1 & & \\
1/2 & 1/4 & 1/4 & \\
\hline
 & 1/6 & 1/6 & 2/3
\end{array}$$

RK ordre 4
$$\begin{array}{c|cccc}
0 & & & & \\
1/2 & 1/2 & & & \\
1/2 & 0 & 1/2 & & \\
1 & 0 & 0 & 1 & \\
\hline
 & 1/6 & 1/3 & 1/3 & 1/6
\end{array}$$

Diagramme de stabilité linéaire des méthodes Runge-Kutta



- extension du domaine de stabilité
- extension significative sur l'axe imaginaire (RK3 et RK4)

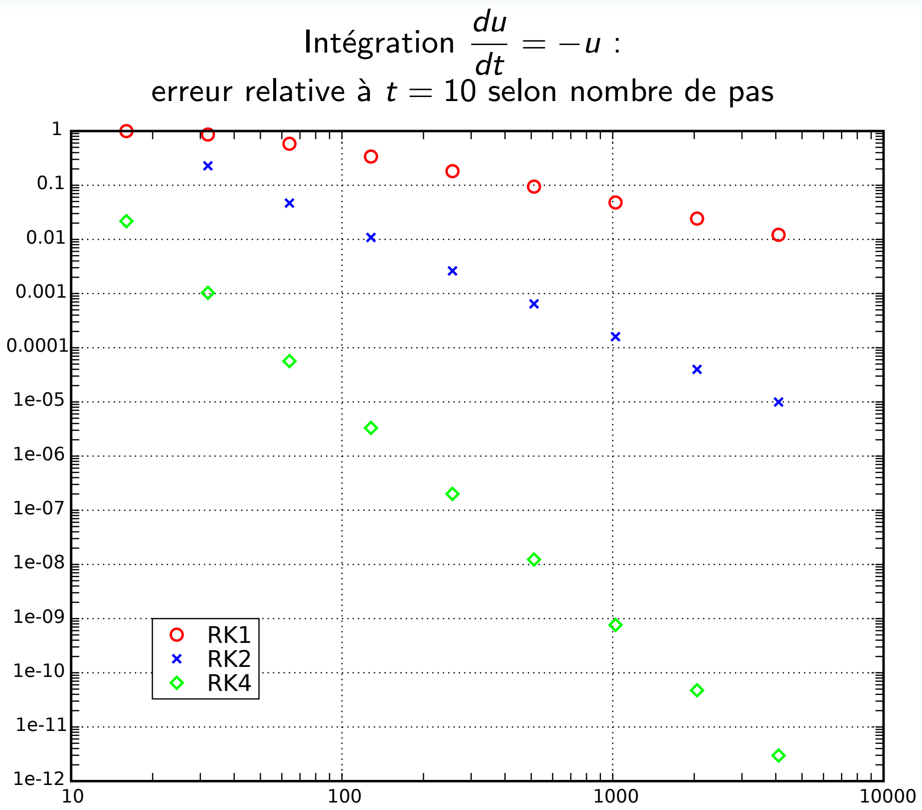
Propriétés des méthodes numériques

1. CONSISTANCE :
   - le modèle continu est approché avec une erreur d'ordre connu
   - cette erreur dépend des pas caractéristiques de discrétisation
   - l'ordre de précision quantifie la variation de cette erreur (//pas)
   - la solution discrète théorique converge vers la solution continue
2. STABILITÉ :
   - un schéma est stable si la solution du calcul est effectivement la solution du problème discret
   - toute perturbation numérique est amortie
3. CONVERGENCE :
   - la solution discrète converge vers la solution continue lorsque les pas tendent vers 0

Théorème de Lax

un schéma consistant et stable est convergent

Calcul d'erreur



Convergence de la méthode

Soit

- $m(h)$ mesure de la solution discrète associée au pas caractéristique h,
- p l'ordre de précision du schéma de discrétisation
- m_0 la solution exacte de cette mesure pour le problème continu

On a

- $m(h) = m_0 + \varepsilon(h)$
- $\varepsilon(h) = \mathcal{O}(h^p)$

On effectue 3 calculs (m_1, m_2, m_3) de pas (h_1, h_2, h_3) de ratios r.
On calcule l'ordre de la méthode selon

$$p = \frac{1}{\ln r} \ln \frac{m_3 - m_2}{m_2 - m_1}$$

Remarque :
Ce calcul peut être sensible au comportement réellement asymptotique de la méthode

Extrapolation de Richardson

À partir de

- $m(h_1) = m_0 + k\, h_1^p + \mathcal{O}(h_1^{p+1})$
- $m(h_2) = m_0 + k\,(rh_1)^p + \mathcal{O}(h_1^{p+1})$

On peut calculer

$$m^\star = \frac{r^p\, m_1 - m_2}{r^p - 1} = m_1 + \frac{m_1 - m_2}{r^p - 1}$$

qui est une estimation d'ordre $p+1$ de m_0

Conclusion

Différences Finies

- méthode basée sur les développements de Taylor
- utilisable pour les EDP (plusieurs coordonnées)
- support de calcul potentiellement étendu (coût, traitement des frontières)
- sensibilité à la qualité de la répartition des points

Problème à valeur initiale

- discrétisation *Différence Finies* de l'opérateur "temporel"
- méthodes explicites, précision et stabilité
  → attention aux problèmes raides (vp très différentes) et peu amortis
- méthodes implicites
  → coût de calcul (si $d \gg 1$) et en non-linéaire
  → attention à la précision
- classe de méthodes utilisées pour l'intégration des EDP (instationnaires)