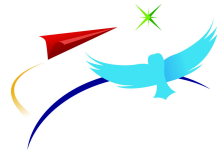


# Introduction à la Simulation Numérique

---

Jérémy Gressier



Septembre 2010

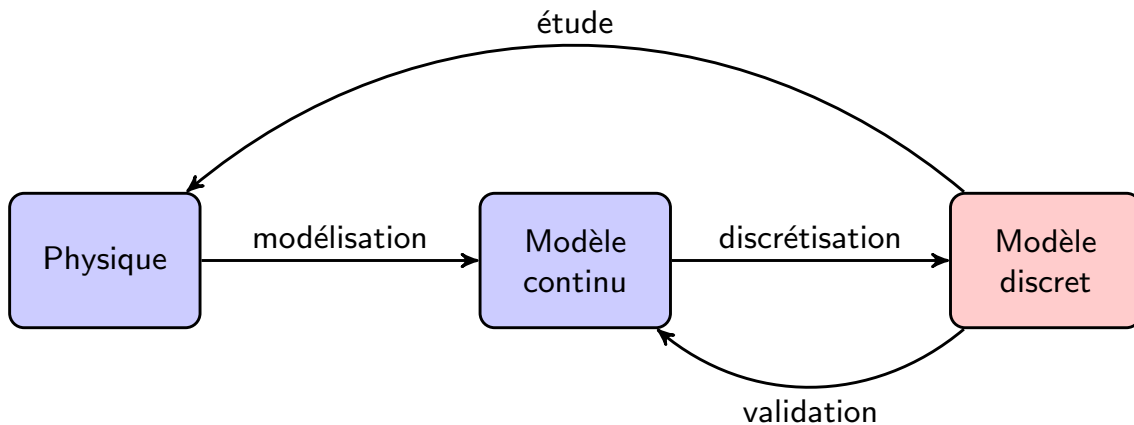
1 / 41

## Plan

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

2 / 41

## Simulation numérique, contexte



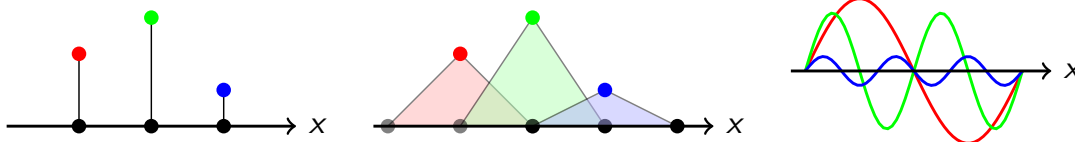
## Discrétisation

### Discrétisation

Représentation d'un problème continu ( $\dim \infty$ ) 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, IVP: *Initial Value Problem*)
- problème d'équilibre  
→ Problème à conditions limites  
(Pb stationnaire, Pb évolution à contrainte, BVP: *Boundary Value Problem*)
- 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 :**

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

**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  $u_{i\pm 1}$  en  $x_i$ )

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

## Dérivées du premier ordre

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

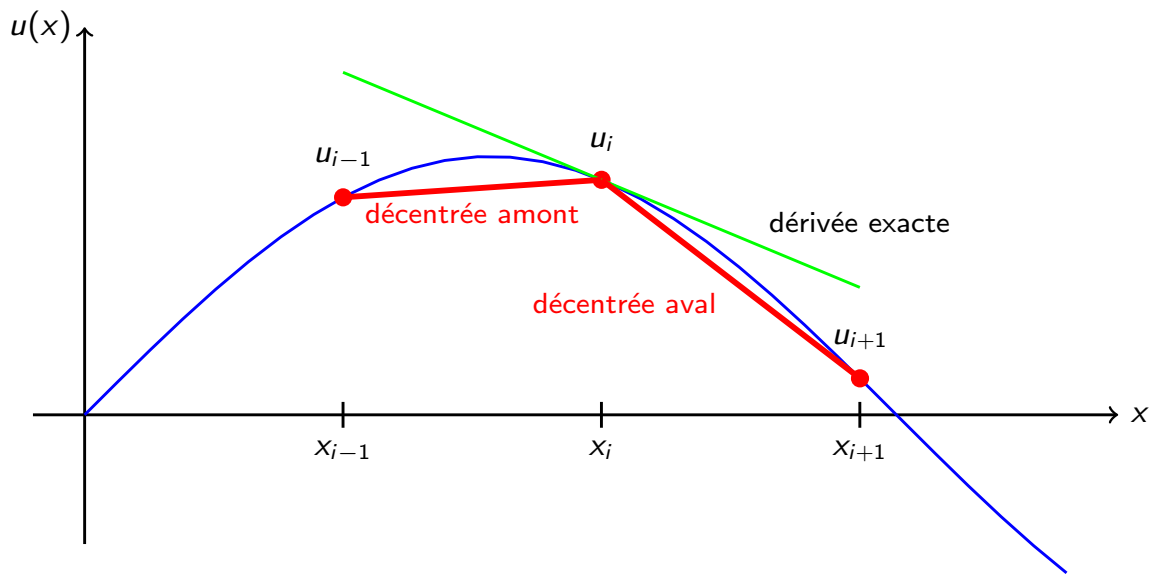
Différence décentrée aval (ordre 1)

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

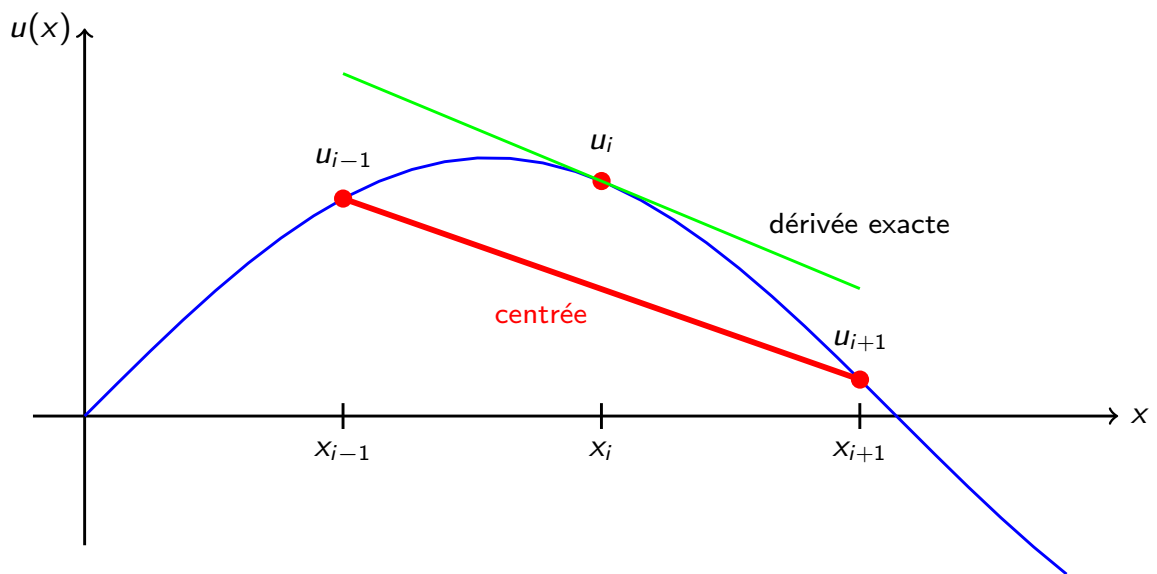
Différence centrée (ordre 2)

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

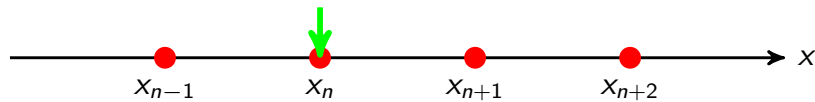
## Interprétation géométrique



## Interprétation géométrique



## Méthodologie générale



- 1 Choix du support de calcul pour obtenir  $\left(\frac{d^k u}{dx^k}\right)_{x_n}$  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  $\alpha_m$  sont des combinaisons linéaires des  $a_i$

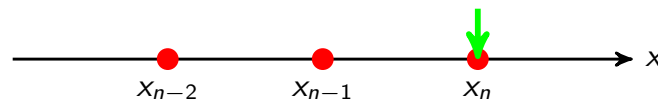
- 4 Déterminer les  $a_i$  à l'aide des  $k + p$  équations :  $\alpha_{m, m \neq k} = 0$  et  $\alpha_k = 1$

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<sup>nd</sup> ordre, décentré à gauche

1/2

- 1 choix du support



- 2 développement de Taylor

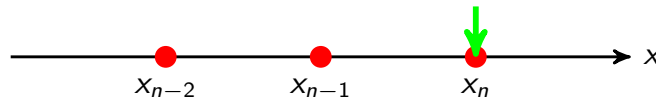
$$u_{n-2} \simeq u_n - 2\Delta x \left(\frac{du}{dx}\right)_{x_n} + \frac{4\Delta x^2}{2} \left(\frac{d^2 u}{dx^2}\right)_{x_n}$$

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

- 3 écriture des combinaison des  $u_{n+i}$

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

1 choix du support



2 développement de Taylor

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

4 identification

$$\begin{cases} a_{-2} + a_{-1} + a_0 = \alpha_0 \\ -2a_{-2} - a_{-1} = \alpha_1 \\ 4a_{-2} + a_{-1} = \alpha_2 \end{cases}$$

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

- extension du support de calcul (*stencil*) avec l'ordre de précision
- pas  $h$  ou  $\Delta x$  supposé constant (maillage régulier)

## 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		$/12h^2$

- extension du support de calcul (*stencil*) avec l'ordre de précision
- support de calcul plus important que pour la dérivée première
- pas  $h$  ou  $\Delta x$  supposé constant (maillage régulier)

## 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	$/6h^4$

- extension du support de calcul (*stencil*) avec l'ordre de dérivation
- pas  $h$  ou  $\Delta x$  supposé constant (maillage régulier)



## Formulation matricielle

### Exemple : équation de Poisson

sur le domaine  $]0; L[$

$$\Delta u = \frac{d^2 u}{dx^2} = f(x)$$

+ conditions aux limites en  $x = 0$  et  $x = L$

Soit  $U$ , vecteur des  $n + 1$  points  $u_i$  équi-répartis en  $x_i = i \Delta x$  sur le domaine  $[0; L]$  (avec  $n\Delta x = L$ )

### Discretisation à l'ordre 2 :

$$\begin{pmatrix} u_0'' \\ u_1'' \\ \vdots \\ u_i'' \\ \vdots \\ u_{n-1}'' \\ u_n'' \end{pmatrix} = A U = \frac{1}{\Delta x^2} \begin{pmatrix} ? & & & & & & \\ 1 & -2 & 1 & & & & 0 \\ & \ddots & \ddots & \ddots & & & \\ & & 1 & -2 & 1 & & \\ & 0 & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & & 1 & -2 & 1 \\ & & & & & ? & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_0 \\ u_1 \\ \vdots \\ u_i \\ \vdots \\ u_{n-1} \\ u_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} ? \\ f_1 \\ \vdots \\ f_i \\ \vdots \\ f_{n-1} \\ ? \end{pmatrix}$$

## Formulation matricielle

### Discretisation à l'ordre 2 :

$$A U = \frac{1}{\Delta x^2} \begin{pmatrix} ? & & & & & & \\ 1 & -2 & 1 & & & & 0 \\ & \ddots & \ddots & \ddots & & & \\ & & 1 & -2 & 1 & & \\ & 0 & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & & 1 & -2 & 1 \\ & & & & & ? & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_0 \\ u_1 \\ \vdots \\ u_i \\ \vdots \\ u_{n-1} \\ u_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} ? \\ f_1 \\ \vdots \\ f_i \\ \vdots \\ f_{n-1} \\ ? \end{pmatrix}$$

- écriture des conditions aux limites sous forme discrète
- résolution par inversion matricielle (conditionnement ?)
- matrice creuse (selon support de la formule de dérivation)

## Résumé sur la méthode des Différences Finies

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

## Problème de Cauchy

$$\begin{cases} \frac{d\mathcal{U}}{dt} = F(\mathcal{U}, t) \\ \mathcal{U}(0) = U_0 \end{cases}$$

- 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  $\left( \exists M, \forall i, j \in \{1..d\}, \left| \frac{dF_i}{d\mathcal{U}_j} \right| < M \right)$   
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

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

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**
- $(x \ v)$  espace d'états ou espace des phases

## Intégration temporelle des EDP

$$\frac{\partial \mathcal{U}}{\partial t} = \mathcal{H}(\mathcal{U}, t)$$

- $\mathcal{U}$  est un vecteur d'état à  $d$  variables d'état
- $\mathcal{H}$  est un opérateur différentiel sur  $\mathcal{U}(x, y, z, t)$

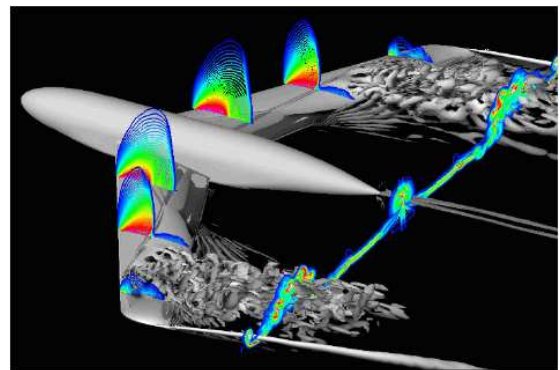
**Méthodes de discrétisation des EDP (cours 2A) :**  
(Différences Finies, Éléments Finis, Volumes Finis)

- discrétisation du vecteur d'état  $\mathcal{U}$  sur un maillage ( $N$  points) (dim  $N \times d$ )
- discrétisation de l'opérateur différentiel  $\mathcal{H}(\mathcal{U}) \rightarrow H(U)$
- intégration d'une EDO de dimension  $N \times d$

## Intégration temporelle des EDP : exemples

**Exemples :**

- Avion complet (fuselage+voilure+nacelles)  
Navier-Stokes :  $N \simeq 50 - 100M$ ,  $d \simeq 5 - 7$
- Chambre de combustion (NS+réactif) :  
 $N \simeq 50 - 100M$ ,  $d \simeq 10$



## Euler explicite

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

- écriture en  $t = t_n$ ,
- discrétisation du terme temporel *décentré à droite*

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

## Euler explicite

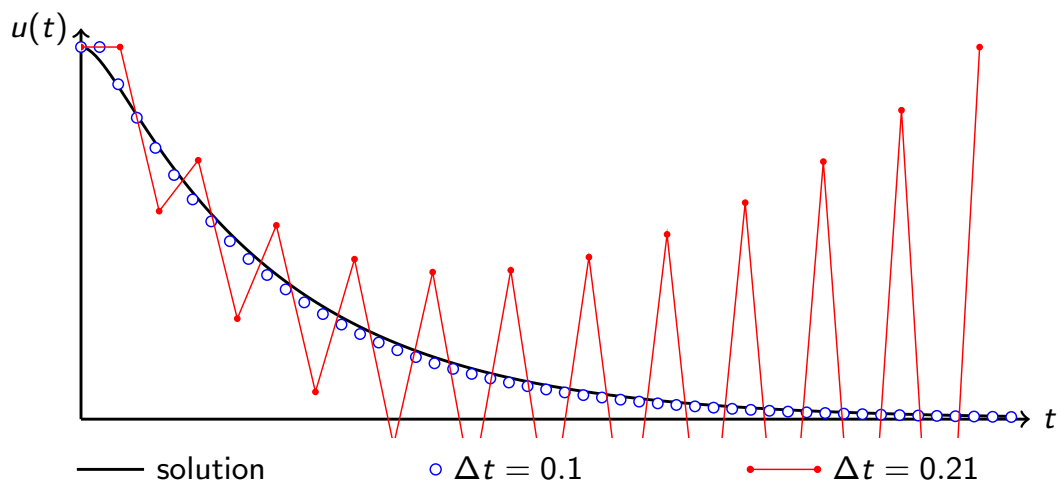
$$U^{n+1} \simeq U^n + \Delta t F(U^n, t_n)$$

- calcul direct, explicite de  $U^{n+1}$
- erreur d'ordre 1 à chaque pas de temps

## Euler explicite : exemple d'intégration

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

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



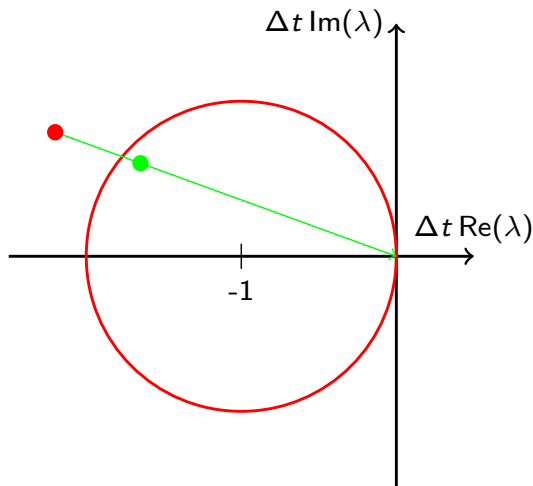
## Euler explicite : analyse de stabilité

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

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

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

## Euler implicite (backward Euler)

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

- écriture en  $t = t_{n+1}$ ,
- discrétisation du terme temporel *décentré à gauche*

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

### 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

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

Remarques :

- calcul de la matrice jacobienne (coût, difficulté)
- coût de l'inversion, erreur due au conditionnement (si  $\Delta t$  est grand)
- erreur de linéarisation

### Stabilité

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

Remarques :

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

## Autres formes implicites

### schéma de Cranck-Nicholson

$$U^{n+1} - U^n = \Delta t \frac{F(U^n) + F(U^{n+1})}{2}$$

- inconditionnellement stable (marginal sur l'axe imaginaire)
- précis au second ordre

### schéma de Gear

$$3U^{n+1} - 4U^n + U^{n-1} = 2\Delta t F(U^{n+1})$$

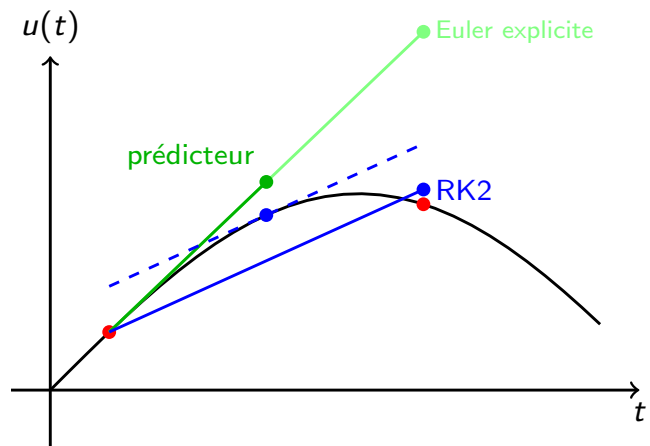
- inconditionnellement stable
- précis au second ordre
- nécessite de mémoriser un pas antérieur (multi-step)

## Prédicteur/correcteur point milieu

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

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

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



- 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-stage*)

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

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

Tableau de Butcher associé

$\gamma_0 = 0$				
$\gamma_1$	$\alpha_{1,0}$			
$\gamma_i$	$\alpha_{i,0}$	$\alpha_{i,i-1}$		
$\gamma_p$	$\alpha_{p,0}$	$\alpha_{p,j}$	$\alpha_{p,p-1}$	
1	$\beta_0$	...	...	$\beta_p$

- prédicteurs  $\bar{U}_i$  estimés au temps  $t^n + \gamma_i \Delta t$
- consistance  $\rightarrow \gamma_i = \sum_{j=0}^{i-1} \alpha_{i,j}$  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

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

trapèze

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

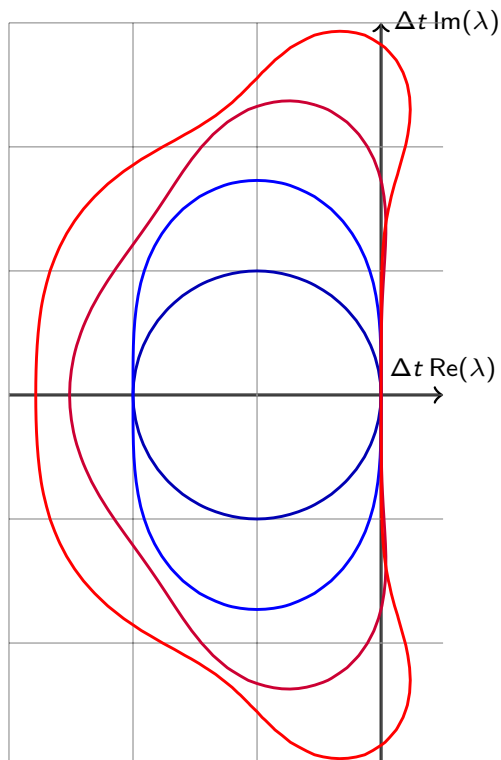
RK ordre 3

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

RK ordre 4

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

## Diagramme de stabilité linéaire des méthodes Runge-Kutta



- extension du domaine de stabilité
  - extension significative sur l'axe imaginaire (RK3 et RK4)
- adaptées aux systèmes faiblement amortis

## 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 :

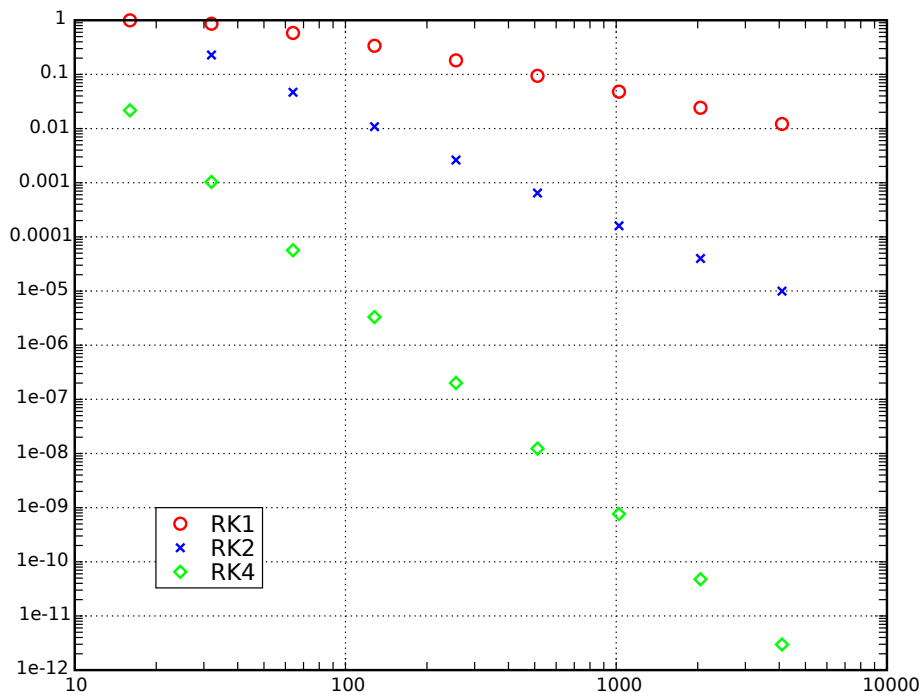
- la solution discrète converge vers la solution continue lorsque les pas tendent vers 0

## Théorème de Lax

un schéma consistant et stable est convergent

## Calcul d'erreur

Intégration  $\frac{du}{dt} = -u$  :  
erreur relative à  $t = 10$  selon nombre de pas



## Convergence de la méthode

Soit

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

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

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

**Exemple** : résolution de  $\frac{du}{dt} = -u$  avec un RK2

- 1 en 256 pts,  $m_2 = u(10) = 4.55190 \cdot 10^{-5}$  (erreur de 1.1%)
- 2 en 512 pts,  $m_1 = u(10) = 4.54292 \cdot 10^{-5}$  (erreur de 0.26%)
- 3  $r = 2$  et  $p = 2$ , on estime  $m^* = 4.53993 \cdot 10^{-5}$  (erreur de 0.0014%)

→ une précision équivalente aurait nécessité 3000 pts

## 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)