Introduction au calcul scientifique pour les EDP de la physique.

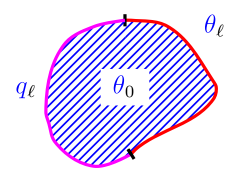
Patrick Joly

INRIA-Rocquencourt

Un exemple de problème à résoudre.

Exemple: la conduction de la chaleur. Soit Ω un domaine de $\mathbb{R}^N$ $(N = 1, 2, 3)$ de frontière $\Gamma = \partial\Omega = \Gamma_0 \cap \Gamma_1$. On s'intéresse à la distribution de température dans Ω et à ses fluctuations dans le temps sachant que:

- Une température θ_ℓ est imposée sur la partie Γ_0.
- Un flux de chaleur q_ℓ est imposé sur la partie Γ_1.
- On connait la distribution de température initiale θ_0.



La démarche de l'ingénieur mathématicien

1. Modélisation / mise en équations.
   - Construction du problème continu (système d'EDP).
2. Analyse mathématique du problème posé. COURS-TD
   - Questions d'existence, unicité. Propriétés des solutions.
3. Conception d'une méthode numérique. COURS-TD
   - Construction d'un problème discrétisé.
4. Analyse numérique. COURS-TD
   - Questions de stabilité, convergence, précision.
5. Algorithmique. ADMIS
   - Choix de méthodes de résolution en dimension finie.
6. Mise en oeuvre sur ordinateur. PROJETS
   - Relève de la programmation et de l'informatique
7. Pre et Post Traitement (maillages / visualisation).
   - Outils de la CAO.

La mise en équations

Les données du problème:

- La géométrie du problème $(\Omega, \Gamma_0, \Gamma_1)$
- Les fonctions: $\theta_0(x), x \in \Omega$, $\theta_\ell(x,t), x \in \Gamma_0$, $q_\ell(x,t), x \in \Gamma_1$.
- La conductivité du milieu : $\sigma(x) > 0, x \in \Omega$.

Les inconnues du problème:

- La température : $\theta(x,t), \quad x \in \Omega, t > 0.$
- Le flux de chaleur: $\vec{q}(x,t), \quad x \in \Omega, t > 0.$

Les lois de la physique:

- Loi de conservation : $\dfrac{\partial \theta}{\partial t} + \text{div}\, \vec{q} = 0.$
- Loi de conduction : $\vec{q} = -\sigma \nabla \theta.$

La mise en équation

- Loi de conservation : $\dfrac{\partial \theta}{\partial t} + \text{div}\, \vec{q} = 0.$
- Loi de conduction : $\vec{q} = -\sigma \nabla \theta.$

Si on élimine $\vec{q}$ le problème à résoudre s'écrit:

$$\left\{\begin{array}{ll} \text{Trouver } \theta(x,t) : \Omega \times]0,T[\longrightarrow \mathbb{R} \text{ tel que:} & \\ \dfrac{\partial \theta}{\partial t} - \text{div}(\sigma \nabla \theta) = 0, & x \in \Omega, \quad t > 0, \\ \sigma \dfrac{\partial \theta}{\partial n} = q_\ell, \quad (-\vec{q} \cdot n = q_\ell) & x \in \Gamma_1, \quad t > 0, \\ \theta = \theta_\ell, & x \in \Gamma_0, \quad t > 0, \\ \theta(x,0) = \theta_0(x), & x \in \Omega. \end{array}\right.$$

Nature du problème

$$\left\{\begin{array}{ll} \text{Trouver } \theta(x,t) : \Omega \times]0,T[\longrightarrow \mathbb{R} \text{ tel que:} & \\ \dfrac{\partial \theta}{\partial t} - \text{div}(\sigma \nabla \theta) = 0, & x \in \Omega, \quad t > 0, \\ \sigma \dfrac{\partial \theta}{\partial n} = q_\ell, & x \in \Gamma_1, \quad t > 0, \\ \theta = \theta_\ell, & x \in \Gamma_0, \quad t > 0, \\ \theta(x,0) = \theta_0(x), & x \in \Omega. \end{array}\right.$$

Le temps faisant partie explicitement des variables du problème, on a affaire à un problème d'évolution.

Tant mathématiquement que numériquement, les variables x et t jouent un rôle différent.

Nature du problème

$$\left\{\begin{array}{ll} \text{Trouver } \theta(x,t) : \Omega \times]0,T[\longrightarrow \mathbb{R} \text{ tel que:} & \\ \dfrac{\partial \theta}{\partial t} - \text{div}(\sigma \nabla \theta) = 0, & x \in \Omega, \quad t > 0, \\ \sigma \dfrac{\partial \theta}{\partial n} = q_\ell, & x \in \Gamma_1, \quad t > 0, \\ \theta = \theta_\ell, & x \in \Gamma_0, \quad t > 0, \\ \theta(x,0) = \theta_0(x), & x \in \Omega. \end{array}\right.$$

L'équation de la chaleur est le prototype des équations paraboliques qui modélisent les phénomènes de diffusion. Elles interviennent aussi en mécanique des fluides (milieux poreux, diffusion de polluants), ou en finance (Black-Scholes).

Ces équations seront abordées au cours 8.

Les difficultés de l'analyse mathématique.

Vu de très loin, le problème peut être mis sous la forme:

$$\text{Trouver } u \in V \text{ tel que } A\ u = d$$

où V est un espace vectoriel (espace de fonctions), A est un opérateur linéaire, le vecteur u est la fonction inconnue θ et d représente les données $(\theta_0, \theta_\ell, q_\ell)$.

Cela ressemble à un système linéaire.

Les différences majeures, sources de difficultés, sont:

- L'espace fonctionnel V est de dimension infinie.
- L'opérateur A est un opérateur différentiel (non continu dans des topologies classiques).

De ce fait, les questions d'existence et d'unicité de la solution sont très délicates.

Notion de problème bien posé.

Soit $(S, \|\cdot\|_S)$ et $(D, \|\cdot\|_D)$ deux espaces vectoriels normés et F une application (non nécessairement linéaire) de S dans $\mathcal{D}$ ouvert de D. On dira que le problème:

$$(P) \qquad \text{Trouver } u \in\ S \text{ tel que } F(u) = d$$

est bien posé au sens de Hadamard si:

- Pour tout d dans $\mathcal{D}$, (P) admet une solution et une seule.
- Cette solution dépend continument de la donnée d:

$$d^n \to d \ \text{ dans } \ D \Longrightarrow u^n \to u \ \text{ dans } \ S$$

Dans le cas F linéaire , $\mathcal{D} = D$ et la condition de continuité se traduit par l'existence d'une constante C telle que:

$$\|u\|_S \leq C\ \|d\|_D.$$

Notion de problème bien posé.

Attention, la notion de problème bien posé n'est pas intrinsèque. Elle est liée au choix des espaces S et D et surtout au choix des normes $\|\cdot\|_S$ et $\|\cdot\|_D$.

On dit aussi que le problème est stable en norme $\|\cdot\|_S$ par rapport à la norme $\|\cdot\|_D$.

La notion de stabilité du problème continu est un pré-requis quasiment indispensable en vue de l'approximation numérique.

Stabilité L^2 du problème de Cauchy.

On admet ici le résultat d'existence et unicité pour notre problème modèle et on va s'intéresser à un résultat de stabilité.

On va se restreindre à $\theta_\ell = q_\ell = 0$ auquel cas la seule donnée est θ_0 (problème de Cauchy).

On va établir le résultat de stabilité:

$$\forall\, t > 0, \quad \|\theta(t)\|_{L^2(\Omega)} \leq \|\theta_0\|_{L^2(\Omega)}.$$

Le résultat va apparaître comme une estimation a priori, c'est à dire une estimation qu'on est capable d'obtenir sans connaître explicitement la solution.

L'estimation a priori.

On multiplie l'équation par θ et on intègre sur Ω:

$$\int_\Omega \frac{\partial \theta}{\partial t}\ \theta\ dx - \int_\Omega \text{div}(\sigma \nabla \theta)\ \theta\ dx = 0$$

On remarque que:

$$\int_\Omega \frac{\partial \theta}{\partial t}\ \theta\ dx = \int_\Omega \frac{\partial}{\partial t}\Big(\frac{\theta^2}{2}\Big)\ dx = \frac{1}{2}\frac{d}{dt}\int_\Omega \theta^2\ dx.$$

On utilise la formule de Green (intégration par parties):

$$-\int_\Omega \text{div}(\sigma \nabla \theta)\ \theta\ dx = \int_\Omega \sigma |\nabla \theta|^2\ dx - \sigma \int_\Gamma \frac{\partial \theta}{\partial n}\ \theta\ d\gamma$$

(θ s'annule sur Γ_0, $\dfrac{\partial \theta}{\partial n}$ sur Γ_1.)

L'estimation a priori.

On multiplie l'équation par θ et on intègre sur Ω:

$$\int_\Omega \frac{\partial \theta}{\partial t}\,\theta\,dx - \int_\Omega \mathrm{div}\big(\sigma \nabla \theta\big)\,\theta\,dx = 0$$

On remarque que:

$$\int_\Omega \frac{\partial \theta}{\partial t}\,\theta\,dx = \int_\Omega \frac{\partial}{\partial t}\Big(\frac{\theta^2}{2}\Big)\,dx = \frac{1}{2}\frac{d}{dt}\int_\Omega \theta^2\,dx.$$

On utilise la formule de Green (intégration par parties):

$$-\int_\Omega \mathrm{div}\big(\sigma \nabla \theta\big)\,\theta\,dx = \int_\Omega \sigma |\nabla \theta|^2\,dx$$

(θ s'annule sur Γ_0, $\dfrac{\partial \theta}{\partial n}$ sur Γ_1.)

L'estimation a priori.

On obtient par conséquent l'identité:

$$\frac{1}{2}\frac{d}{dt}\int_\Omega \theta^2\,dx + \int_\Omega \sigma|\nabla\theta|^2\,dx = 0.$$

Compte tenu de la positivité de σ il vient:

$$\frac{1}{2}\frac{d}{dt}\int_\Omega \theta^2\,dx \leq 0,$$

dont on déduit:

$$\forall\, t > 0, \quad \int_\Omega \theta(x,t)^2\,dx \leq \int_\Omega \theta_0(x)^2\,dx$$

Approximation numérique.

On va se placer en dimension 1:

$$\Omega =]0, L[, \quad \Gamma_0 = \{0\}, \quad \Gamma_1 = \{L\}.$$

Le problème à résoudre s'écrit:

$$\left\{\begin{array}{ll} \text{Trouver } u(x,t) :]0,L[\times]0,T[\longrightarrow \mathbf{R} \text{ tel que:} & \\ \dfrac{\partial u}{\partial t} - \dfrac{\partial}{\partial x}\big(\sigma \dfrac{\partial u}{\partial x}\big) = 0, & x \in]0,L[, \quad t > 0, \\ \sigma \dfrac{\partial u}{\partial x}(L,t) = q_\ell(t), & t > 0, \\ u(0,t) = \theta_\ell(t), & t > 0, \\ u(x,0) = u_0(x), & x \in]0,L[. \end{array}\right.$$

Méthode des différences finies: le principe.

L'idée est de calculer (une approximation de) la solution aux points d'une grille de calcul suffisamment fine.

Pour cela, on se donne un pas de discrétisation en espace $\Delta x = L/(J+1) > 0$ et un pas de discrétisation en temps $\Delta t > 0$ et on va chercher à calculer:

$$u_j^n \sim u(x_j, t^n), \quad x_j = j\Delta x, \quad t^n = n\Delta t.$$

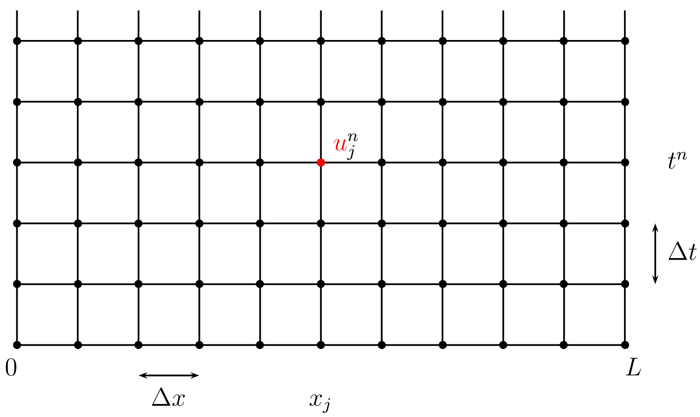
L'espoir est que, lorsque Δx et Δt tendront vers 0, l'erreur commise

$$e_j^n = u_j^n - u(x_j, t^n).$$

tendra (en un sens à préciser) vers 0.

Méthode des différences finies.

Points de calcul: $x_j = j\ \Delta x,\ \ 0 \leq j \leq J+1, \quad t^n = n\Delta t,\ \ n \geq 0.$



Méthode des différences finies: le principe.

Pour produire les équations définissant les inconnues discrètes, l'idée est d'écrire (de façon approchée) l'EDP à résoudre en chaque point intérieur de la grille de calcul.

Pour cela il faut définir des approximations d'opérateurs différentiels ne faisant appel qu'aux valeurs discrètes: ce sont les opérateurs aux différences.

Les équations manquantes sont fournies par la prise en compte des conditions initiales et des conditions aux limites.

Après discrétisation, on est ramené à la résolution d'un problème posé en dimension finie, traitable sur ordinateur.

Construction d'opérateurs aux différences.

L'idée de base est de revenir à la définition d'une dérivée

$$f'(x) = \lim_{h\to 0} \frac{f(x+h) - f(x)}{h}, = \lim_{h\to 0} \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h}, \ldots$$

Construction d'opérateurs aux différences.

Approximation de $\dfrac{\partial u}{\partial t}(x_j, t^n)$.

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x_j, t^n) \sim \frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t}$$

C'est une approximation décentrée à droite, d'ordre 1 car l'erreur de troncature

$$\varepsilon_j^n = \frac{u(x_j, t^{n+1}) - u(x_j, t^n)}{\Delta t} - \frac{\partial u}{\partial t}(x_j, t^n)$$

$$\text{(Taylor)} \qquad = \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}(x_j, t^n) + O(\Delta t^2)$$

Construction d'opérateurs aux différences.

Approximation de $\frac{\partial}{\partial x}(\sigma \frac{\partial u}{\partial x})(x_j, t^n)$.

Construction d'opérateurs aux différences.

Supposons connu $v^n_{j+\frac{1}{2}} = v(x_{j+\frac{1}{2}}, t^n), \quad v = \sigma \frac{\partial u}{\partial x}$.

On réalise alors une approximation centrée, d'ordre 2 avec:

$$\frac{\partial}{\partial x}(\sigma \frac{\partial u}{\partial x})(x_j, t^n) = \frac{\partial v}{\partial x}(x_j, t^n) \sim \frac{v^n_{j+\frac{1}{2}} - v^n_{j-\frac{1}{2}}}{\Delta x}$$

On fait alors l'approximation (centrée):

$$v^n_{j+\frac{1}{2}} \sim \sigma_{j+\frac{1}{2}} \frac{u^n_{j+1} - u^n_j}{\Delta x}$$

pour aboutir à:

$$\frac{\partial}{\partial x}(\sigma \frac{\partial u}{\partial x})(x_j, t^n) \sim \frac{1}{\Delta x}\Big(\sigma_{j+\frac{1}{2}}(\frac{u^n_{j+1} - u^n_j}{\Delta x}) - \sigma_{j-\frac{1}{2}}(\frac{u^n_j - u^n_{j-1}}{\Delta x})\Big)$$

Construction d'opérateurs aux différences.

Lorsque σ est constant on a fait l'approximation:

$$\sigma \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_j, t^n) \sim \sigma \frac{u^n_{j+1} - 2u^n_j + u^n_{j-1}}{\Delta x^2}$$

qui est une approximation d'ordre 2 ainsi que le montre l'estimation de l'erreur de troncature:

$$\begin{aligned} \varepsilon^n_j &= \sigma \frac{u(x_{j+1}, t^n) - 2u(x_j, t^n) + u(x_{j-1}, t^n)}{\Delta x^2} - \sigma \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_j, t^n) \\ &= \sigma \frac{\Delta x^2}{12} \frac{\partial^4 u}{\partial x^4}(x_j, t^n) + O(\Delta x^4) \end{aligned}$$

Le schéma numérique

Pour $n \geq 0$ et $1 \leq j \leq J-1$:

$$\frac{u^{n+1}_j - u^n_j}{\Delta t} - \frac{1}{\Delta x}\Big(\sigma_{j+\frac{1}{2}}(\frac{u^n_{j+1} - u^n_j}{\Delta x}) - \sigma_{j-\frac{1}{2}}(\frac{u^n_j - u^n_{j-1}}{\Delta x})\Big) = 0.$$

$$\begin{cases} \text{Pour } 1 \leq j \leq J-1: & u^0_j = u_{0,j}. \\ \text{Pour } n \geq 0: & u^n_0 = u^n_\ell. \\ \text{Pour } n \geq 0: & \dfrac{u^n_J - u^n_{J-1}}{\Delta x} = q^n_\ell. \end{cases}$$

Le schéma numérique

Pour $n \geq 0$ et $1 \leq j \leq J-1$:

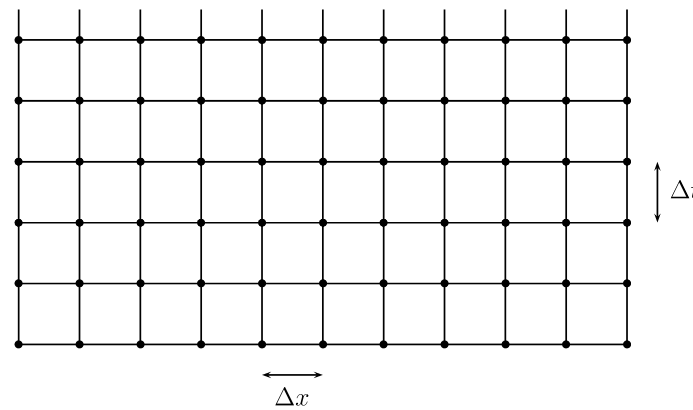
$$u_j^{n+1} = u_j^n + \frac{\Delta t}{\Delta x^2}\Big(\sigma_{j+\frac{1}{2}}(u_{j+1}^n - u_j^n) - \sigma_{j-\frac{1}{2}}(u_j^n - u_{j-1}^n)\Big) = 0.$$

$$\begin{cases} \text{Pour } 1 \leq j \leq J-1: & u_j^0 = u_{0,j}. \\ \text{Pour } n \geq 0: & u_0^n = u_\ell^n. \\ \text{Pour } n \geq 0: & u_J^n = u_{J-1}^n + \Delta x \; q_\ell^n. \end{cases}$$

Il s'agit d'un schéma explicite.

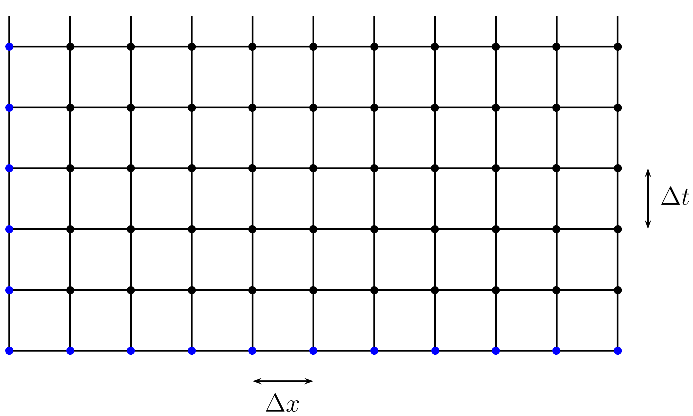
Mise en oeuvre du schéma numérique.

On construit la grille de calcul.



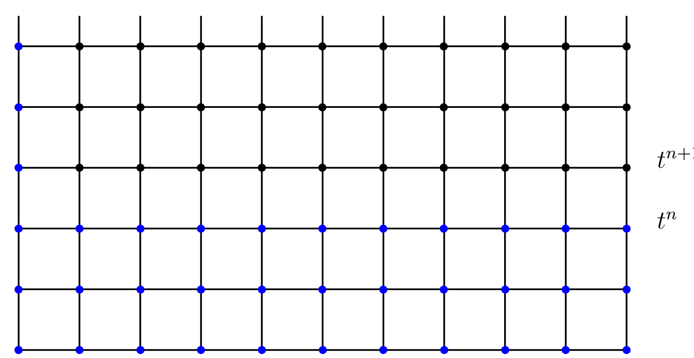
Mise en oeuvre du schéma numérique.

On prend en compte les condition initiale et de Dirichlet.



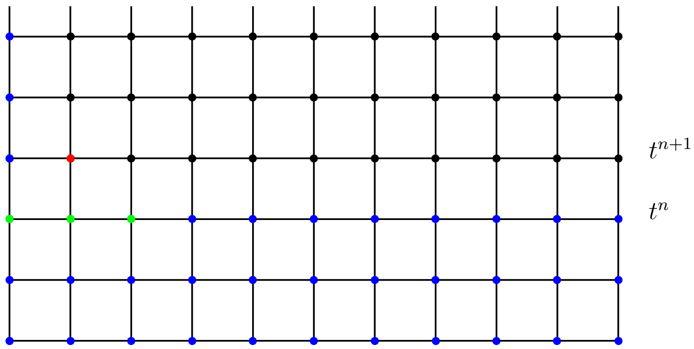
Mise en oeuvre du schéma numérique.

Supposons la solution calculée jusqu'à l'instant t^n.



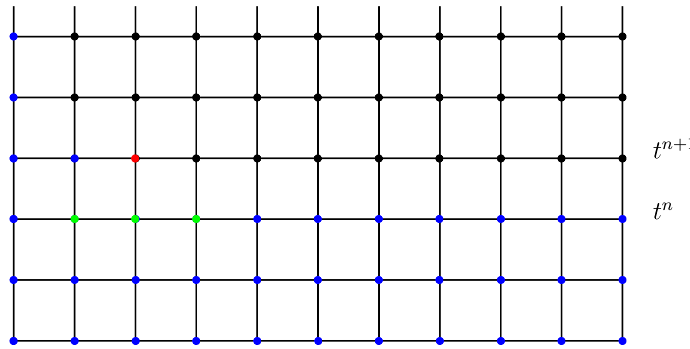
Mise en oeuvre du schéma numérique.

Application du schéma intérieur.



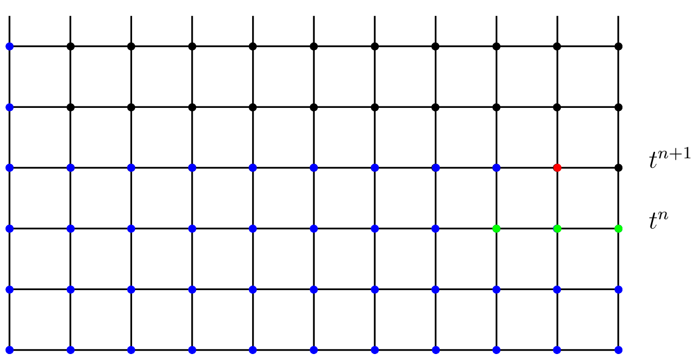
Mise en oeuvre du schéma numérique.

Application du schéma intérieur.



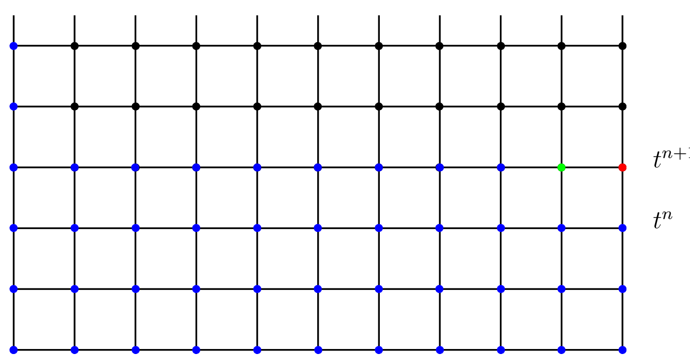
Mise en oeuvre du schéma numérique.

Application du schéma intérieur.



Mise en oeuvre du schéma numérique.

Application de la condition de Neumann.



L'analyse numérique.

C'est une branche des mathématiques qui s'est développée avec l'avènement des ordinateurs.

L'analyse numérique des équations aux dérivées partielles est l'art de maîtriser le passage du continu au discret.

- Montrer que le problème approché est bien posé: existence et unicité de u_h.
- Montrer la convergence : $u_h \to u$ quand $h \to 0$.
  - La stabilité : borne uniforme du type $\|u_h\| \leq C$.
  - La consistance : approximation des équations.
- Obtenir des estimations d'erreur: $\|u - u_h\| \leq \ ? \ $.

En principe : stabilité + consistance $\Longrightarrow$ convergence.

Un exemple de schéma instable.

Revenons à notre problème modèle. Pour améliorer la précision de notre méthode on peut penser à utiliser une approximation centrée de la dérivée en temps.

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^{n-1}}{2\Delta t} - \frac{1}{\Delta x}\Big(\sigma_{j+\frac{1}{2}}\big(\frac{u_{j+1}^n - u_j^n}{\Delta x}\big) - \sigma_{j-\frac{1}{2}}\big(\frac{u_j^n - u_{j-1}^n}{\Delta x}\big)\Big) = 0.$$

Un tel schéma se révèle inconditionnellement instable.

Autres exemples.

Problèmes stationnaires elliptiques.

Nous faisons l'hypothèse que quand $t \to +\infty$:

$$\begin{cases} \theta_\ell(x,t) \to \theta_\ell^\infty(x) & x \in \Gamma_0 \\ q_\ell(x,t) \to q_\ell^\infty(x) & x \in \Gamma_1 \end{cases}$$

On peut démontrer la convergence vers un état stationnaire

$$\theta(x,t) \to \theta^\infty(x), \quad t \to +\infty,$$

où $\theta^\infty : \Omega \to \mathbb{R}$ est solution du problème aux limites:

Autres exemples.

Problèmes stationnaires elliptiques.

On peut démontrer la convergence vers un état stationnaire

$$\theta(x,t) \to \theta^\infty(x), \quad t \to +\infty,$$

où $\theta^\infty : \Omega \to \mathbb{R}$ est solution du problème aux limites:

$$\begin{cases} -\mathrm{div}\big(\sigma\nabla\theta^\infty\big) = 0, & \text{dans } \Omega, \\ \theta^\infty = \theta_\ell, & \text{sur } \Gamma_0, \\ \sigma\dfrac{\partial\theta^\infty}{\partial n} = q_\ell, & \text{sur } \Gamma_0. \end{cases}$$

Autres exemples.

Problèmes stationnaires elliptiques.

$$\begin{cases} -\text{div}\big(\sigma\nabla\theta^{\infty}\big) = 0, & \text{dans } \Omega, \\ \theta^{\infty} = \theta_{\ell}, & \text{sur } \Gamma_0, \\ \sigma\dfrac{\partial\theta^{\infty}}{\partial n} = q_{\ell}, & \text{sur } \Gamma_0. \end{cases}$$

Ce problème est le prototype des problèmes elliptiques qu'on recontre aussi en mécanique des solides et des fluides (phénomènes d'equilibre), en électrostatique,...

Seront étudiés dans les cours 2,3,4,5.

Autres exemples.

Problèmes hyperboliques linéaires. (Cours 9 et 10)

La propagation du son dans un fluide est régie par l'équation des ondes acoustiques:

$$\frac{1}{\rho_0 c_0^2}\frac{\partial^2 p}{\partial t^2} - \text{div}\big(\frac{1}{\rho_0}\nabla p\big) = f,$$

où l'inconnue p désigne la (variation de) pression, ρ_0 désigne la densité du fluide, c_0 la célérité du son et f un terme source.

Au même titre que l´équation de transport, l'équation des ondes est le prototype de l'équation hyperbolique linéaire qui décrit des phénomènes de propagation.

On rencontre aussi ce type d'équation en électromagnétisme (Maxwell) ou en mécanique du solide (élastodynamique).

Autres exemples.

Problèmes de type Fredholm.

Si le terme source est harmonique en temps:

$$f(x,t) = f_{\infty}(x)\exp i\omega t$$

où la pulsation $\omega > 0$ est donnée, on aura le comportement en temps long:

$$p(x,t) \sim p_{\infty}(x)\exp i\omega t, \quad t \to +\infty.$$

où p_{∞} est solution de l'équation de Helmholtz:

$$-\text{div}\big(\frac{1}{\rho_0}\nabla p_{\infty}\big) - \frac{\omega^2}{\rho_0 c_0^2}\, p_{\infty} = f_{\infty}(x).$$

C'est le prototype du problème elliptique non coercif mais de type Fredholm, traité dans les cours 6 et 7.

Autres exemples.

Problèmes hyperboliques non linéaires.

Ces modèles interviennent pour la description des phénomènes de propagation non linéaire, surtout en mécanique des fluides (propagation des chocs, ondes de détente,...) mais aussi pour la modélisation du traffic routier (modélisation des bouchons).

En dimension 1, l'équation modèle est ($f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$):

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} f(u) = 0, \quad x \in \mathbb{R},\ t > 0.$$

- $f(u) = au$: équation de transport.
- $f(u) = u^2/2$: équation de Burgers.

Cette équation sera traitée aux cours 11 et 12.