

Introduction aux méthodes numériques de résolution des équations aux dérivées partielles (EDP)

Cours 1

Sébastien DEHEUELS, Laurène JOUVE

Institut de Recherche en Astrophysique et Planétologie

Octobre 2017

Déroulement de l'enseignement

- Introduction aux méthodes numériques de résolution des EDP (3h)
- T.P. sur les méthodes numériques (R. Belmont)
- T.P. sur les disques d'accrétion (R. Belmont)
- T.P. sur les processus dynamiques en physique stellaire (S. Deheuvels)

Plan du cours

- Les différents types de simulations numériques en astrophysique
- Méthodes numériques pour la résolution des EDP
 - Un peu de théorie
 - Propriétés de quelques schémas numériques simples (différences finies)
 - Comparaison de l'efficacité de deux schémas dans le cas d'une équation d'advection 1D
- Limitations des simulations numériques

Pourquoi des simulations numériques ?

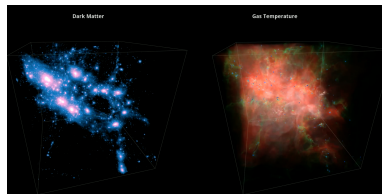
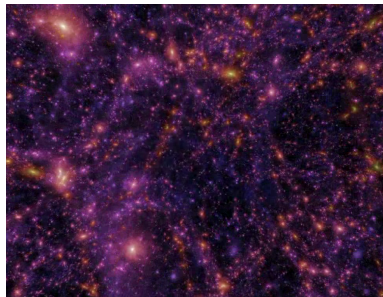
- Obtenir des solutions (approchées) d'équations que l'on ne sait pas résoudre analytiquement.
- Comparer ces solutions avec les observations, mais...
- Dans la plupart des cas, les simulations numériques doivent être envisagées comme des expériences numériques qui permettent de tester des modèles existants et d'en construire de nouveaux.
- Comparées aux expériences de laboratoire, les simulations numériques :
 - explorent des régimes de paramètres différents
 - donnent accès à la solution complète

Différentes méthodes numériques

- Différences finies
- Éléments finis
- Volumes finis
- Méthodes spectrales
- Smoothed Particle Hydrodynamics
- Méthodes Monte-Carlo

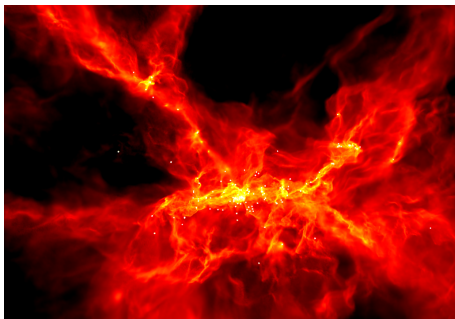
Exemples de simulations en astrophysique

- N-corps (Cosmologie, Galaxie, Planètes ...)



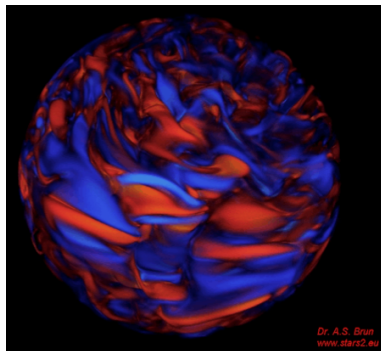
Exemples de simulations en astrophysique

- Smoothed Particle Hydrodynamics (Formation stellaire)



Exemples de simulations en astrophysique

- Méthodes spectrales (Dynamo solaire)



Un peu de vocabulaire

- La variable u dépend de n variables indépendantes a_1, a_2, \dots, a_n . Toute relation entre u , a_k ($k = 1, \dots, n$) et des dérivées de u par rapport aux a_k :

$$F\left(u, a_1, \dots, \frac{\partial u}{\partial a_1}, \dots, \frac{\partial^2 u}{\partial a_1^2}, \frac{\partial^2 u}{\partial a_1 \partial a_2}, \dots, \frac{\partial^p u}{\partial a_1^p}\right) = 0$$

constitue une **equation aux dérivées partielles** (EDP).

- Une EDP est dite **d'ordre p** quand la dérivée partielle d'ordre le plus élevé qu'elle contient est d'ordre p .
- Une EDP est dite **linéaire** quand elle l'est par rapport à u et à toutes ses dérivées partielles.
- Une EDP est dite **homogène** quand elle ne contient que des termes faisant intervenir u et ses dérivées partielles.

Exemples

- L'équation de transport

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

est une EDP **linéaire d'ordre 1 homogène**.

- L'équation de Burgers

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

est une EDP **non-linéaire d'ordre 1 homogène**.

- L'équation de Poisson

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

est une EDP **linéaire d'ordre 2 non-homogène**.

Classification des EDP d'ordre 2

Si on considère la forme générale d'une EDP d'ordre 2 :

$$A \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + B \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} + C \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + D \frac{\partial u}{\partial x} + E \frac{\partial u}{\partial y} + Fu = G$$

où A, B, C, D, E, F et G sont considérés constants pour simplifier. On peut alors classer les EDP de ce type en 3 catégories :

- **elliptique** si $B^2 - 4AC < 0$. C'est par exemple l'équation de Laplace.
- **parabolique** si $B^2 - 4AC = 0$. C'est par exemple l'équation de la chaleur.
- **hyperbolique** si $B^2 - 4AC > 0$. C'est par exemple l'équation des ondes (l'équation de transport, d'ordre 1, est également considérée comme hyperbolique).

Différents types d'erreur

- L'erreur **d'arrondi** : imposée par le calculateur.
- L'erreur **de troncature** ou **de consistance** : liée à l'algorithme de calcul.

Exemple :

$$f(x) = f(a) + (x - a)f'(a) + \dots + \underbrace{\int_a^x \frac{(x - t)^{n-1}}{(n - 1)!} f^{(n)}(t) dt}_{\text{erreur de consistance}}$$

- L'erreur **de méthode** : due par exemple à un mauvais conditionnement ou à une expression mal équilibrée.

Exemple :

$$10^{-8}x^2 - 0.8x + 10^{-8} = 0$$

Schéma de discrétisation

- Soit $\Omega \subset \mathbb{R}^n$, $x \in \mathbb{R}$ and $t \in \mathbb{R}^+$ et l'EDP :

$$\mathcal{L}u(x, t) = f \quad \text{dans } \Omega \quad (1)$$

$$u(x, 0) = u_0(x) \quad (\text{conditions initiales}) \quad (2)$$

$$u(x, t) = b(x) \quad \text{sur } \partial\Omega \quad (\text{conditions au bord}) \quad (3)$$

- On considère les subdivisions $x_0 < x_1 < \dots < x_n$ avec $\Delta x = x_{i+1} - x_i$ et $t_0 < t_1 < \dots < t_m$ avec $\Delta t = t_{j+1} - t_j$. On appelle $u_{i,j}$ une approximation de $u(x_i, t_j)$ et u_j est le vecteur $(u_{0,j}, \dots, u_{n,j})$.
- On appelle **schéma de discrétisation** à $l + 1$ niveaux en temps l'expression suivante :

$$A_l u_{j+l} = A_{l-1} u_{j+l-1} + \dots + A_0 u_j$$

- Si $A_l = Id$, le schéma est dit **explicite**, sinon, il est dit **implicite**.

Différences finies

Exemple de l'équation de la chaleur

- On considère l'équation de la chaleur :

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

- Approximation de la dérivée première en temps à l'aide du développement de Taylor (ordre 1) :

$$u_{i,j+1} = u_{i,j} + \Delta t \left(\frac{\partial u}{\partial t} \right)_{i,j} + O((\Delta t)^2)$$

d'où l'approximation de la dérivée première :

$$\left(\frac{\partial u}{\partial t} \right)_{i,j} = \frac{u_{i,j+1} - u_{i,j}}{\Delta t} + O(\Delta t)$$

Différences finies

Exemple de l'équation de la chaleur

- Approximation de la dérivée seconde en espace à l'aide du développement de Taylor (ordre 2) :

$$u_{i+1,j} = u_{i,j} + \Delta x \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_{i,j} + \frac{(\Delta x)^2}{2} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_{i,j} + \frac{(\Delta x)^3}{6} \left(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \right)_{i,j} + O((\Delta x)^4)$$

$$u_{i-1,j} = u_{i,j} - \Delta x \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_{i,j} + \frac{(\Delta x)^2}{2} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_{i,j} - \frac{(\Delta x)^3}{6} \left(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \right)_{i,j} + O((\Delta x)^4)$$

- La somme des deux nous donne une **approximation de la dérivée seconde** :

$$\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_{i,j} = \frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{(\Delta x)^2} + O((\Delta x)^2)$$

Différences finies

Exemple de l'équation de la chaleur

- On obtient donc le schéma de discrétisation suivant :

$$\frac{u_{i,j+1} - u_{i,j}}{\Delta t} - \alpha \frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{\Delta x^2} = 0$$

- C'est donc un schéma à **2 niveaux** en temps **explicite** (car $A_1 = Id$) et A_0 une matrice tri-diagonale contenant les coefficients :

$$\alpha \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \quad \text{et} \quad 1 - 2\alpha \frac{\Delta t}{\Delta x^2}$$

- Le schéma serait **implicite** si on avait utilisé le temps $j + 1$ pour le schéma en espace.

Idée du traitement numérique d'une EDP

On souhaite maintenant obtenir un « bon » schéma de discrétisation permettant d'avoir une erreur de consistance contrôlée et petite pour que la solution approchée tende vers la solution exacte.

Rappel Équations Différentielles Ordinaires

- Résolution de l'EDO du type $y' = f[y(t), t]$
- En disposant d'une estimation de la fonction solution y aux temps t_0, \dots, t_k , on cherche à calculer y_{k+1}

$$y_{k+1} = y_k + I_k \quad \text{avec} \quad I_k = \int_{t_k}^{t_{k+1}} f[y(t'), t'] dt'$$

- Dans la pratique on ne dispose que de valeurs estimées, notées \tilde{y}_k

$$\tilde{y}_{k+1} = \tilde{y}_k + \tilde{I}_k$$

- Il existe deux sources d'erreurs :
 - $\tilde{I}_k \neq I_k$ (erreur de **consistance**)
 - $\tilde{y}_k \neq y_k$: les erreurs peuvent s'accumuler au fil des itérations (notion de **stabilité**)

Différences finies

Ordre du schéma et consistance

- On appelle **erreur de consistance** $e_{i,j}$ la quantité obtenue en remplaçant l'inconnue par la solution exacte dans le schéma de discrétisation, en chaque point du maillage (x_i, t_j) .
- Le schéma est **d'ordre p en temps et q en espace** si l'erreur de consistance vérifie :

$$e_{i,j} = O(\Delta t^p) + O(\Delta x^q)$$

- Le schéma est **consistant** si l'erreur de consistance tend vers 0 lorsque tous les pas de discrétisation tendent vers 0. C'est une propriété **locale**.

Différences finies

Ordre du schéma et consistance : équation de la chaleur

- Dans l'exemple précédent, avec le schéma de discrétisation :

$$\frac{u_{i,j+1} - u_{i,j}}{\Delta t} - \alpha \frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{\Delta x^2} = 0$$

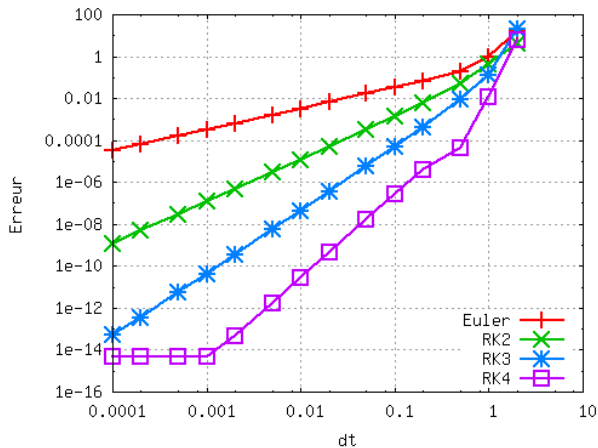
L'erreur de consistance est :

$$e = \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - \alpha \frac{\Delta x^2}{12} \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} + O(\Delta t^2) + O(\Delta x^4)$$

- Le schéma est donc consistant car l'erreur tend vers 0 quand $(\Delta t, \Delta x)$ tendent vers 0.
- Si on choisit $\alpha \Delta t / \Delta x^2 = 1/6$ alors le schéma est d'ordre 2 en temps et 4 en espace.

Différences finies

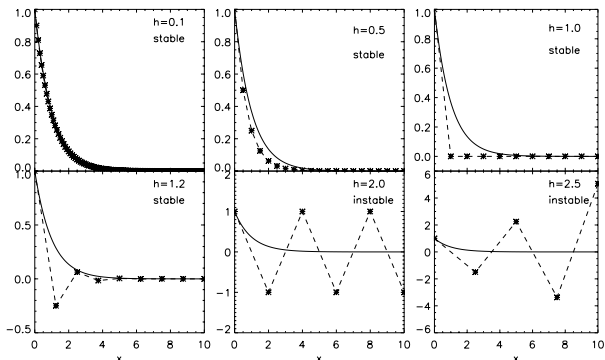
Ordre du schéma : illustration



Différences finies

Stabilité : illustration

- Rappel EDO $y' = f[y(t), t]$
- La méthode d'Euler n'est stable que si $\frac{\partial f}{\partial y} < 0$ et $\Delta t < \frac{2}{|\partial f / \partial y|}$
- Exemple pour $y' + y = 0$ avec $y(0) = 1$



Différences finies

Stabilité

- La stabilité assure que les erreurs ne vont pas croître au cours du déroulement de l'algorithme. C'est une propriété **globale**.
- Soit le schéma à 2 niveaux $u_{n+1} = Au_n$. Ce schéma est **stable** pour la norme $\|\cdot\|$ s'il existe $K > 0$ indépendante de n telle que :

$$\|A^n\| \leq K$$

- Si l'inégalité n'est vérifiée que pour un certain choix de Δx et Δt alors le schéma est dit **conditionnellement stable**.
- La définition dépend de la norme choisie. Nous allons considérer la stabilité en norme L^2 (ou au sens de Neumann) car très utile dans la pratique.

Différences finies

Stabilité

- On considère des conditions de périodicité en espace pour l'inconnue u .
- On prend la transformée de Fourier du schéma numérique $u_{n+1} = Au_n$. On obtient la **matrice d'amplification** S telle que $\hat{u}_{n+1} = S(k)\hat{u}_n$, où :

$$\hat{u}_n(k) = \int_{-\infty}^{+\infty} u_n(x) \exp(-ikx) dx$$

- Le schéma est stable ssi le rayon spectral de la matrice d'amplification est borné par 1 quelque soit k .

Différences finies

Stabilité : équation de la chaleur

- Soit le schéma de discrétisation **explicite** pour l'équation de la chaleur :

$$\frac{u_{i,j+1} - u_{i,j}}{\Delta t} - \alpha \frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{\Delta x^2} = 0$$

- On prend sa transformée de Fourier, sachant que :

$$\hat{u}_{i+p,j}(k) = \exp(ipk\Delta x) \hat{u}_{i,j}(k)$$

- On obtient :

$$\begin{aligned} \hat{u}_{i,j+1}(k) &= \left[1 - \frac{\alpha\Delta t}{\Delta x^2} (-\exp(-ik\Delta x) + 2 - \exp(ik\Delta x)) \right] \hat{u}_{i,j}(k) \\ &= \left[1 - 4\alpha \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \sin^2 \left(\frac{k\Delta x}{2} \right) \right] \hat{u}_{i,j}(k) \end{aligned}$$

- Le facteur d'amplification est inférieur à 1 pour tout k ssi la condition suivante (appelée de Courant-Friedrichs-Lewy, ou CFL) est vérifiée :

$$\alpha\Delta t/\Delta x^2 < 1/2$$

Différences finies

Stabilité : équation de la chaleur

- Soit le schéma de discrétisation **implicite** pour l'équation de la chaleur :

$$\frac{u_{i,j+1} - u_{i,j}}{\Delta t} - \alpha \frac{u_{i+1,j+1} - 2u_{i,j+1} + u_{i-1,j+1}}{\Delta x^2} = 0$$

- On a cette fois :

$$\hat{u}_{i,j+1}(k) \left[1 + \frac{\alpha \Delta t}{\Delta x^2} (-\exp(-ik\Delta x) + 2 - \exp(ik\Delta x)) \right] = \hat{u}_{i,j}(k)$$

soit :

$$\hat{u}_{i,j+1}(k) = \frac{1}{\left[1 + 4\alpha \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \sin^2 \left(\frac{k\Delta x}{2} \right) \right]} \hat{u}_{i,j}(k)$$

- Le facteur d'amplification est donc inférieur à 1 pour tout k . Le schéma est **inconditionnellement stable**.

Convergence

- L'erreur globale est définie par :

$$e = \sup_{i,j} |u_{i,j} - u(x_i, t_j)|$$

- Un schéma est **convergent** si l'erreur globale tend vers 0 (ou si la solution numérique $u_{i,j}$ tend vers la solution exacte $u(x_i, t_j)$) quand les pas de discrétisation tendent vers 0.

Théorème d'équivalence de Lax

Pour un problème linéaire et bien posé, on a l'équivalence suivante :

Convergence \iff **Consistance + Stabilité**

Convergence

Résumé

Pour un problème « réel », avec des conditions aux limites données et une discrétisation donnée, la convergence est habituellement impossible à démontrer théoriquement. Il faut donc :

- Tester la stabilité sur une version simplifiée du problème
- Tester la convergence vers une solution exacte d'une version simplifiée du problème
- Tester différentes résolutions
- Tester d'autres méthodes de discrétisation

Autres méthodes

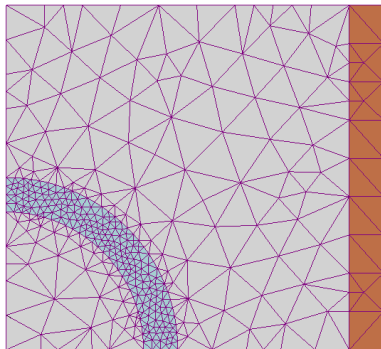
Eléments finis

- On résout un problème équivalent, appelé formulation **faible** ou **variationnelle** du problème de départ. Elle s'obtient en prenant le produit scalaire de l'EDP de départ avec des fonctions dites **tests**.
- On cherche la solution dans **un sous-espace de dimension finie** V_h de l'espace entier V .
- On maille V_h à l'aide de **volumes élémentaires très simples** (triangles, tétraèdres, parallélépipèdes,...).
- On choisit une base de V_h constituée de fonctions simples dont **le support est localisé** sur une ou quelques mailles.
- On résout un système linéaire (**avec matrices creuses**) pour trouver les coefficients de la solution sur cette base.

Autres méthodes

Eléments finis

- Des géométries complexes peuvent être prises en compte.
- La liberté dans le choix du maillage permet de raffiner aux endroits critiques.



Autres méthodes

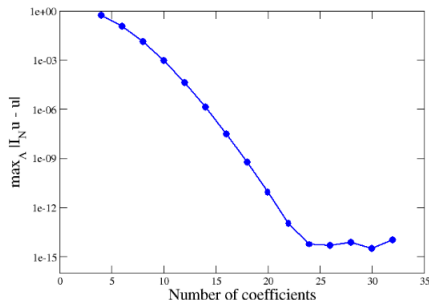
Méthodes spectrales

- La solution est projetée sur une **base de fonctions prédéfinies** dont on connaît les propriétés (évaluations, dérivées,...).
- Les fonctions utilisées sont en général des **polynômes orthogonaux** (Tchebychev, Legendre,...) ou des **fonctions trigonométriques** (séries de Fourier).
- La solution est donc représentée par ses coefficients de projection sur ces fonctions.
- Un système linéaire du type $AX=B$ est alors à résoudre.

Autres méthodes

Méthodes spectrales

- La décroissance de l'erreur est exponentielle (équivalent à un schéma aux différences finies d'ordre infini), on dit qu'elle est évanescence.



Comment bien choisir sa méthode ?

- On veut un schéma de discrétisation **précis et stable**.
- On veut un temps de calcul faible et un algorithme **simple et facilement parallélisable**.

⇒ Ces exigences sont souvent contradictoires et il n'y a donc pas de réponse générale !

- La meilleure solution dépend du problème considéré.
- Il faut bien connaître les méthodes numériques pour faire un choix judicieux (avant de se lancer dans le développement).
- Les tests sont de toutes façons nécessaires.