Cours 2

Différences finies

François Dubois, mars 2003, édition 20 juillet 2006, 15 pages.

ch 2 Différences finies.

1) Discrétisation du temps.

- Nous avons vu au chapitre précédent qu'un système dynamique composé d'une équation d'évolution

(1) $$\frac{du}{dt} = f(u) \quad , \quad t>0$$

et d'une condition initiale

(2) $$u(0) = u_0 \quad , \quad u_0 \in \mathbb{R}^m$$

a une solution unique, au moins pour des temps assez petits et lorsque f a un minimum de régularité. Toutefois, on ne dispose pas en général de "formule" permettant de calculer $u(t)$ en fonction de la dynamique $f(\cdot)$ et de la condition initiale u_0. Une exception notable est le cas du point fixe linéaire, où

(3) $$f(u) = -\lambda u, \quad \lambda>0, \quad u \in \mathbb{R},$$

pour lequel la solution de (1)(2) est donnée par

(4) $$u(t) = e^{-\lambda t} u_0, \quad t>0.$$

• on renonce donc à calculer $u(t)$ pour tous les instants (réels) $t \geq 0$ et on se contente dans la suite d'approcher le vecteur $u(t)$ pour des instants précis fixés à l'avance. On se donne donc un intervalle de temps $\Delta t > 0$, un "pas" de temps élémentaire et la famille d'instants discrets obtenus en considérant les multiples entiers $2\Delta t$, $3\Delta t$, ... de ce pas de temps. On pose

(5) $\quad t^k = k\,\Delta t, \qquad k \in \mathbb{N}$.

On remarque que dans la relation (5), la notation t^k ne désigne pas un exposant, mais un indice, écrit en position supérieure ! Ce choix est justifié par un besoin de plusieurs indices pour les applications à l'acoustique. On peut donc concevoir de manière abstraite les valeurs $u(t^k)$, pour $k \in \mathbb{N}$, lorsque $u(\bullet)$ est la solution du système dynamique (1)(2). On sait que ces valeurs existent et sont uniques (car les cas où de véritables difficultés pour montrer l'existence ne sont pas envisagés ici) mais leur approximation n'est en général pas simple. Notons toute.

fois que même dans le cas d'une solution "exacte" telle que (4), le calcul des valeurs numériques de la fonction exponentielle (les $\exp(-\lambda t)$, $\lambda > 0$, $t > 0$) n'est pas trivial et demande un algorithme approprié pour sommer la série

(6) $\quad \exp(-\lambda t) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} (-\lambda t)^k .$

- on cherche donc une solution approchée u^k, $k \in \mathbb{N}$, a priori distincte de $u(t^k)$ [qui reste à jamais dans un contexte de l'abstraction mathématique] qu'on puisse calculer "à la main", ou avec une calculatrice électronique et un algorithme approprié. La question qui se pose est celle de l'algorithme de calcul approché. Si on pose naturellement

(7) $\qquad u^0 = u_0$

pour l'instant initial, comment "passer" jusqu'à l'instant Δt, c'est à dire évaluer u^1, approximation de $u(\Delta t)$, sachant qu'entre les instants 0 et Δt, le vecteur $u(t)$ "suit" la dynamique donnée par l'équation (1)? De manière plus générale, comment passer d'une valeur approchée

u^k connue (k est un entier fixé) à la valeur suivante u^{k+1} ? Comment remplacer le système dynamique en temps continu (1)(2) par un système dynamique discret $(u^k)_{k \in \mathbb{N}}$, une "relation de récurrence" entre u^k et u^{k+1} ?

2) Schéma d'Euler explicite.

- L'idée de base pour construire un schéma numérique est de remplacer la relation différentielle (1) par une relation intégrale :

$$(8) \qquad \frac{1}{\Delta t}\left(u(t^{k+1}) - u(t^k)\right) = \frac{1}{\Delta t} \int_{t^k}^{t^{k+1}} f(u(t))\, dt$$

et d'approcher ensuite la valeur moyenne au membre de droite de la relation (8). De manière générale, pour approcher la valeur moyenne $I(a, b; \varphi)$ de la fonction $]a, b[\ni t \mapsto \varphi(t) \in \mathbb{R}$ sur l'intervalle $[a, b]$, c'est à dire

$$(9) \qquad I(a, b; \varphi) \equiv \frac{1}{b-a} \int_a^b \varphi(t)\, dt \quad ,$$

on peut approcher $\varphi(\bullet)$ par divers polynomes construits à partir de quelques valeurs connues de φ aux points caractéristiques de l'intervalle $[a, b]$: $\varphi(a)$, $\varphi(b)$, $\varphi\left(\frac{a+b}{2}\right)$, et caetera.

- La méthode d'Euler explicite consiste à remplacer $\varphi(t)$ par $\varphi(a)$ dans le calcul approché de la moyenne $I(a,b;\varphi)$:

$$(10) \qquad I(a,b;\varphi) \simeq \varphi(a).$$

On en déduit donc

$$(11) \qquad \frac{1}{\Delta t}\big(u(t^{k+1}) - u(t^k)\big) \simeq f(u(t^k)),$$

avec un symbole d'approximation "$\simeq$" caractéristique des valeurs $u(t^k)$ de la solution <u>exacte</u> de l'équation (1). Le schéma numérique consiste à remplacer ce symbole d'approximation par une égalité ; le prix à payer est de remplacer les valeurs exactes $u(t^k)$ par des valeurs approchées u^k :

$$(12) \qquad u^k \simeq u(t^k), \quad t^k = k\Delta t, \; k \in \mathbb{N}.$$

Le schéma d'Euler explicite s'écrit donc

$$(13) \qquad \frac{1}{\Delta t}(u^{k+1} - u^k) = f(u^k), \quad k \in \mathbb{N}.$$

- La relation (13) définit un algorithme de calcul : si u^k est connu et $f(u^k)$ facile à calculer à partir de la connaissance de u^k, on "explicite" la valeur u^{k+1} à partir de la relation (13) :

$$(14) \qquad u^{k+1} = u^k + \Delta t\, f(u^k)$$

Ce calcul de u^{k+1}, immédiat dans les conditions précédentes, justifie le nom de "schéma d'Euler explicite". Il est naturel de tester la méthode précédente dans un cas où la solution exacte est connue. Le prototype classique est le retour à l'équilibre avec une constante de temps $\tau > 0$ donnée par

$$(15) \qquad \tau = 1/\lambda$$

si la dynamique $f(\bullet)$ est choisie via la relation (3). Compte tenu de (4), il vient facilement

$$(16) \qquad \frac{u(t^{k+1})}{u(t^k)} = e^{-\Delta t/\tau} \equiv e^{-\lambda \Delta t}$$

• Le schéma numérique (14), joint à (3), s'écrit quant à lui

$$(17) \qquad \frac{u^{k+1}}{u^k} = 1 - \lambda \Delta t$$

on fait alors les deux remarques suivantes, après avoir posé

$$(18) \qquad \xi = \lambda \Delta t = \frac{\Delta t}{\tau}$$

(i) Le schéma (17) est une approximation d'ordre 1 de l'exponentielle (16) satisfaite par la solution exacte :

$$(19) \qquad e^{-\xi} = 1 - \xi + O(\xi^2) \, ;$$

remplacer l'exponentielle $\exp(-\lambda \Delta t)$ par son approximation d'ordre 1, sa tangente, pour Δt petit, ce qu'exprime la relation (19), est certainement correct, au moins tant que $\xi = \Delta t/\tau$ est assez "petit".

(ii) Le rapport $u(t^{k+1})/u(t^k)$ des valeurs de la solution exacte d'une dynamique (1)(3) reste toujours positif quelque soit $\Delta t > 0$, ainsi que le montre la relation (16). Cette propriété est en défaut pour le schéma d'Euler, ainsi que le montre la relation (17) : $1 - \lambda \Delta t < 0$ dès que $\Delta t > \tau$. Pour $\Delta t > \tau$, ie un pas de temps Δt supérieur à la constante de temps τ du processus (physique) de retour à l'équilibre, les valeurs approchées u^k ne respectent plus la <u>monotonie</u> de la solution exacte. Ceci peut être catastrophique en pratique.
Le respect de la monotonie des valeurs approchées impose donc de <u>limiter le pas</u> de temps Δt à des valeurs cohérentes avec la dynamique du processus physique, ie de choisir $\Delta t > 0$ de sorte que

(20) $\qquad 0 < \Delta t < \tau \equiv 1/\lambda$.

- Nous retenons que pour être utilisé de manière efficace pour le problème modèle (1)(3) du retour à l'équilibre, le schéma d'Euler explicite doit satisfaire une <u>condition de stabilité</u> (20) qui indique que le pas de temps Δt du schéma numérique ne doit pas excéder le temps caractéristique τ du processus étudié.

3) Schéma d'Euler implicite

- Nous repartons toujours de la relation (8), exacte, entre les instants t^k et t^{k+1}. Le problème du choix du schéma numérique est ramené à estimer au mieux la valeur moyenne $I(a,b;\varphi)$ définie à la relation (9). Le choix (10) conduit au schéma d'Euler explicite, mais le choix

$$I(a,b;\varphi) \simeq \varphi(b) \tag{21}$$

est tout aussi naturel, et suppose a priori la fonction $\varphi(\bullet)$ approchée par une valeur constante sur l'intervalle $[a,b]$. On reporte ce choix au membre de droite de la relation (8), qui correspond à $a = t^k$, $b = t^{k+1} = t^k + \Delta t$, $\varphi(t) = f(u(t))$. Il vient alors

$$\frac{1}{\Delta t}\int_{t^k}^{t^{k+1}} f(u(t))\,dt \simeq f(u(t^{k+1})). \tag{22}$$

Le schéma d'Euler implicite s'obtient en remplaçant $u(t^k)$ par u^k, $u(t^{k+1})$ par u^{k+1} et les approximations par des égalités dans les relations (8) et (22). On obtient alors

$$\frac{1}{\Delta t}\left(u^{k+1} - u^k\right) = f(u^{k+1}) \tag{23}$$

- A partir de la valeur connue u^k, le schéma d'Euler implicite se propose de calculer u^{k+1} via la relation (23), c'est à dire en résolvant l'<u>équation</u>

$$(24) \qquad u^{k+1} - \Delta t\, f(u^{k+1}) = u^k .$$

On peut être déçu quelque peu du résultat, le schéma numérique (24) ne fournit pas explicitement u^{k+1} en fonction de u^k, il propose simplement une <u>équation</u> à résoudre pour évaluer u^{k+1}. L'algorithme doit être complété par le choix d'un algorithme pour la résolution de l'équation (24). On peut par exemple appliquer une méthode de la tangente, ou de Newton. La valeur u^{k+1} est obtenue comme limite de la suite $(u^{k+1}_n)_{n\in\mathbb{N}}$, avec par exemple l'initialisation

$$(25) \qquad u^{k+1}_0 = u^k$$

et des itérations définies en remplaçant $f(u^{k+1})$ par $f(u^{k+1}_{n+1})$, lui même approché autour de u^{k+1}_n par linéarisation :

$$(26) \qquad f(u^{k+1}_{n+1}) \simeq f(u^{k+1}_n) + f'(u^{k+1}_n)(u^{k+1}_{n+1} - u^{k+1}_n)$$

On injecte cette représentation de $f(u^{k+1})$ au membre de gauche de la relation (24) ; il vient

$$(27) \qquad \left\{ \begin{array}{l} u^{k+1}_{n+1} - \Delta t\, f'(u^{k+1}_n)\, u^{k+1}_{n+1} = \\ \qquad = u^k + \Delta t \left[f(u^{k+1}_n) - f'(u^{k+1}_n)\, u^{k+1}_n \right] \end{array} \right.$$

grâce à la résolution de l'équation (27), qui est linéaire, on passe de u_n^{k+1} à u_{n+1}^{k+1} et pour $n \to \infty$, on converge (si Δt n'est pas trop grand) vers une (la?) solution de l'équation (24).

- Lorsqu'on teste le schéma d'Euler implicite (24) dans le cas de l'équation modèle de retour à l'équilibre (i.e. $f(u) = -\lambda u$, cf (3)), il vient facilement

$$(28) \qquad \frac{u^{k+1}}{u^k} = \frac{1}{1+\lambda \Delta t}$$

on remarque que pour $\lambda > 0$ et $\Delta t \geq 0$, ce rapport reste toujours positif ; le schéma d'Euler implicite conduit toujours à des valeurs $(u^k)_{k \in \mathbb{N}}$ compatibles avec les contraintes de monotonie. On peut donc utiliser ce schéma quel que soit $\Delta t > 0$ et il n'y a pas à se donner de condition de stabilité sur le pas de temps.

- Si on développe le rapport u^{k+1}/u^k par rapport à l'infiniment petit $\xi = \lambda \Delta t$, la relation (28) conduit à

$$(29) \qquad \frac{u^{k+1}}{u^k} = 1 - \xi + \xi^2 + O(\xi^3)$$

alors que le développement (16) pour la solution exacte s'écrit :

$$(30)\qquad \frac{u(t^{k+1})}{u(t^k)} = 1 - \xi + \frac{\xi^2}{2} + O(\xi^3).$$

on a donc entre (29)(30) :

$$(31)\qquad \frac{u^{k+1}}{u^k} = \frac{u(t^{k+1})}{u(t^k)} + \frac{\xi^2}{2} + O(\xi^3)$$

et les développements (29) et (30) coïncident jusqu'au premier ordre inclus. On dit que le <u>schéma d'Euler implicite</u> est <u>d'ordre un</u> de précision.

4) <u>Schéma de Crank-Nicolson</u>

- au lieu de calculer la valeur moyenne $I(a,b;\varphi)$ par une formule à un point, comme dans les deux schémas précédents (voir les relations (10) et (21)), nous utilisons une méthode des trapèzes, qui consiste à supposer la fonction $\varphi(\bullet)$ affine entre a et b

$$(32)\qquad I(a,b;\varphi) \simeq \frac{1}{2}\big(\varphi(a) + \varphi(b)\big)$$

on réinjecte cette expression au membre de droite de la relation (8) :

$$(33)\qquad \frac{1}{\Delta t}\big(u(t^{k+1}) - u(t^k)\big) \simeq \frac{1}{2}\Big[f(u(t^k)) + f(u(t^{k+1}))\Big]$$

Le schéma de Crank-Nicolson consiste à définir la valeur approchée u^k en imposant une <u>égalité</u> dans la relation (33). Il s'écrit donc

(34) $$\frac{1}{\Delta t}\left(u^{k+1} - u^k\right) = \frac{1}{2}\left[f(u^k) + f(u^{k+1})\right].$$

- Si on connait u^k, la nouvelle valeur u^{k+1} s'obtient par résolution d'une équation, à savoir

(35) $$u^{k+1} - \frac{\Delta t}{2} f(u^{k+1}) = u^k + \frac{\Delta t}{2} f(u^k)$$

et les méthodes de Newton proposées pour le schéma d'Euler implicite peuvent être adaptées sans difficulté pour l'équation (35).

- Si on applique le schéma (34) au cas où $f(u) \equiv -\lambda u$, on trouve :

(36) $$\frac{u^{k+1}}{u^k} = \frac{1 - \lambda\Delta t/2}{1 + \lambda\Delta t/2}$$

et le respect de la monotonie impose de <u>limiter</u> la valeur du pas de temps :

(37) $$0 < \Delta t < 2\,\tau$$

Si on développe la fraction au membre de droite de la relation (36) en fonction de $\xi = \lambda\Delta t$, supposé petit, on trouve :

$$\frac{1-\xi/2}{1+\xi/2} = \left(1-\frac{\xi}{2}\right)\left(1-\frac{\xi}{2}+\frac{\xi^2}{4}+\dots\right) = 1-\xi+\frac{\xi^2}{2}-\frac{\xi^3}{4}+O(\xi^4) .$$

Donc

$$(38) \qquad \frac{u^{k+1}}{u^k} - \frac{u(t^{k+1})}{u(t^k)} = -\frac{\xi^3}{12} + O(\xi^4)$$

et le schéma de Crank-Nicolson est d'ordre deux de précision.

5) Schéma de Heun

• Le schéma de Crank-Nicolson est plus précis que les deux schémas d'Euler. Mais il reste implicite, ce qui peut conduire à des coûts calcul importants pour résoudre l'équation (35). On l'adapte donc pour le rendre explicite en suivant un procédé très pragmatique. On calcule d'abord une valeur "prédite" $\tilde{u}^{k+1}$ grâce au schéma d'Euler explicite :

$$(39) \qquad \tilde{u}^{k+1} = u^k + \Delta t\, f(u^k) .$$

On utilise ensuite cette valeur au membre de droite de (34), à la place de u^{k+1} :

$$(40) \qquad \frac{1}{\Delta t}\left(u^{k+1}-u^k\right) = \frac{1}{2}\left[f(u^k) + f(\tilde{u}^{k+1})\right]$$

on peut tout écrire sur une seule ligne :

$$(41) \qquad \frac{1}{\Delta t}\left(u^{k+1}-u^{k}\right)=\frac{1}{2}f(u^{k})+\frac{1}{2}f\left(u^{k}+\Delta t\, f(u^{k})\right),$$

relation qui définit le schéma de Heun, qui appartient également à la famille des schémas de Runge et Kutta.

- Si on teste le schéma (41) pour le retour modèle à l'équilibre, il vient

$$(42) \qquad \frac{u^{k+1}}{u^{k}} = 1-\lambda\Delta t+\frac{1}{2}(\lambda\Delta t)^{2}.$$

Le membre de droite de (42) est toujours supérieur à 0. Par contre pour $\lambda\Delta t>2$, le rapport u^{k+1}/u^{k} est supérieur à 1, ce qui est contradictoire avec le cas de la solution exacte, cf (16). On doit donc exclure de telles valeurs, d'où la condition de stabilité

$$(43) \qquad 0<\Delta t<2\tau.$$

- Le membre de droite de (42) est le développement de Taylor à l'ordre 2 de $\exp(-\lambda\Delta t)$. On tire donc de (16) et (42) :

$$(44) \qquad \frac{u^{k+1}}{u^{k}}-\frac{u(t^{k+1})}{u(t^{k})}=\frac{\xi^{3}}{6}+O(\xi^{4})$$

qui indique que le schéma de Heun est d'ordre 2.

6) Tableau récapitulatif

schéma	définition	nature	ordre	stabilité.
Euler explicite	(13)	explicite	1	$\lambda \Delta t < 1$
Euler implicite	(23)	implicite	1	$\Delta t > 0$
Crank-Nicolson	(34)	implicite	2	$\lambda \Delta t < 2$
Heun	(41)	explicite	2	$\lambda \Delta t < 2$

5 mars 2003.