Autour de l'opérateur laplacien et des différences finies

Dans ce projet, on s'intéresse à la résolution numérique par la méthode des différences finies de deux problèmes faisant intervenir un opérateur différentiel, le laplacien, apparaissant dans la formulation mathématique de nombreux phénomènes physiques.

1 Valeurs propres du laplacien dans un domaine polygonal – le problème de Dirichlet

Dans cette première partie, on cherche à résoudre numériquement le problème aux valeurs propres suivant : trouver une fonction u des variables d'espace x et y, non identiquement nulle, et un réel λ tels que

$$-\Delta u = \lambda u \qquad \text{dans } \Omega, \tag{1}$$

$$u = 0 \quad \text{sur } \partial\Omega,$$
 (2)

où Ω désigne un domaine de \mathbb{R}^2 , de frontière polygonale $\partial\Omega$. Le symbole Δ dans la première équation représente un opérateur différentiel d'ordre deux, appelé *laplacien*, défini, pour toute fonction u de classe \mathscr{C}^2 sur Ω , par

$$\Delta u(x,y) = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x,y) + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}(x,y).$$

La condition aux limites homogène (2) est dite de Dirichlet.

Ce problème étant posé dans un espace de dimension infinie (l'espace des fonctions infiniment dérivables sur Ω), on doit le discrétiser pour être en mesure de le résoudre numériquement. Dans le cas présent, l'application de la $m\acute{e}thode$ des $diff\acute{e}rences$ finies consiste en la détermination d'approximations des valeurs de solutions de (1)-(2) aux points d'une grille de pas h donné, obtenues par résolution d'un problème aux valeurs propres matriciel (et donc de dimension finie).

1.1 Cas d'un domaine carré

On considère tout d'abord le domaine $\Omega =]-1, 1[\times]-1, 1[$.

Tâche 1. En admettant que les fonctions propres u solutions de (1)-(2) sont à variables séparées, montrer qu'elles sont de la forme

$$u(x,y) = C_{m,n} \sin\left(\frac{m\pi}{2}(x+1)\right) \sin\left(\frac{n\pi}{2}(y+1)\right),\,$$

où m et n sont des entiers strictement positifs et $C_{m,n}$ est une constante non nulle arbitraire. Combien valent les valeurs propres associées?

On va maintenant effectuer une discrétisation du problème (1)-(2). Pour cela, on commence par définir une grille, qui est un ensemble $\{x_{i,j}\}_{0 \leq i,j \leq N}$ de points de Ω , appelés næuds, tels que $x_{i,j} = (ih, jh)$, avec N un entier supérieur ou égal à 2 fixé, le réel $h = \frac{2}{N}$ étant appelé pas de discrétisation de la grille. L'approximation d'une solution u du problème aux valeurs propres par un schéma aux différences finies centré du second ordre 1, encore connu sous le nom de schéma à cinq points (voir la figure 1), correspond à

$$\frac{u_{i+1,j} + u_{i-1,j} - 4u_{i,j} + u_{i,j+1} + u_{i,j-1}}{h^2} - \Delta f(x_{i,j}) = O(h^2),$$

d'où une erreur d'ordre deux en h.

^{1.} La notion d'ordre d'un schéma aux différences finies est liée à une estimation de l'erreur commise lorsqu'on remplace les dérivées d'une fonction régulière par les différences finies correspondantes. Dans le cas présent, on montre, si f est une fonction suffisamment régulière, par des développements de Taylor que l'on a

l'approximation des valeurs $u(x_{i,j})$, $0 \le i, j \le N$, de u aux nœuds de la grille par un ensemble de valeurs $u_{i,j}$ satisfaisant le système d'équations algébriques

$$-\frac{u_{i+1,j} + u_{i-1,j} - 4u_{i,j} + u_{i,j+1} + u_{i,j-1}}{h^2} = \lambda_h u_{i,j}, \ 1 \le i, j \le N - 1,$$
(3)

issu de l'équation aux dérivées partielles (1), où λ_h désigne une approximation de la valeur propre associée à u, ainsi que les conditions

$$u_{i,j} = 0, i = 0 \text{ ou } N, j = 0 \text{ ou } N,$$
 (4)

dérivant de la condition aux limites de Dirichlet homogène (2).

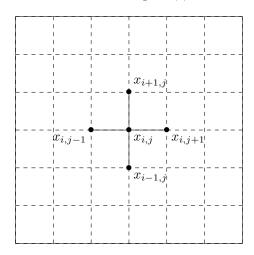


FIGURE 1 – Exemple de grille de différences finies pour un domaine carré et représentation du schéma à cinq points.

En notant u_h le vecteur de $\mathbb{R}^{(N-1)^2}$ dont les composantes $(u_h)_k$, $1 \leq k \leq (N-1)^2$, vérifient

$$(\boldsymbol{u}_h)_{i+(N-1)(j-1)} = u_{i,j}, \ 1 \le i, j \le N-1,$$
 (5)

il est facile de vérifier que le système (3) peut s'écrire sous la forme d'un système linéaire

$$A_h \mathbf{u}_h = \lambda_h \mathbf{u}_h, \tag{6}$$

dont la matrice A_h est d'ordre $(N-1)^2$, symétrique définie positive et creuse, c'est-à-dire qu'un grand nombre de ses coefficients sont nuls. On voit en effet que les éléments de sa $i^{\text{ième}}$ ligne, $1 \le i \le (N-1)^2$, sont donnés, en faisant abstraction des « effets de bord », par

$$(A_h)_{ij} = \frac{1}{h^2} \begin{cases} 4 & \text{si } j = i, \\ -1 & \text{si } j = i - N + 1, i - 1, i + 1, i + N - 1, \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases}$$

On se trouve donc ramené à la détermination des valeurs et vecteurs propres d'une matrice dont la taille dépend de la valeur du pas de discrétisation h, le nombre et la qualité 2 des approximations obtenues augmentant lorsque h tend vers zéro.

Pour la mise-en-œuvre numérique de ce problème, on va tirer parti du caractère creux de la matrice, pour optimiser d'une part son stockage en mémoire et le nombre d'opérations requises par les algorithmes qu'on utilisera d'autre part, en faisant appel à une structure ad hoc implémentée dans les logiciels MATLAB et GNU OCTAVE.

Tâche 2. Construire quatre tableaux de $(N-1)^2$ entiers, nommés nord, sud, est et ouest, ayant pour $i^{\text{ième}}$ élément, $1 \le i \le (N-1)^2$, le numéro, relativement à la numérotation introduite en (5), du nœud

^{2.} On ne demande évidemment pas de prouver cette affirmation.

situé respectivement au-dessus, au-dessous, à droite et à gauche du $i^{\text{ième}}$ nœud de la grille (voir la figure 1 pour une illustation). Utiliser alors ces tableaux et les commandes sparse et speye pour écrire une fonction construisant la matrice A_h d'ordre $(N-1)^2$ du système (6) en ne stockant que ses éléments non nuls.

Tâche 3. Choisir un pas de discrétisation h suffisament fin, c'est-à-dire un entier N assez grand, et résoudre le problème aux valeurs propres obtenu. En particulier, on s'intéressera aux approximations des dix plus petites valeurs propres de l'opérateur que l'on calculera à l'aide de la commande eigs. Pour chacune de ces dix valeurs propres, comparer les valeurs obtenues avec les valeurs exactes trouvées dans la tâche 1 en calculant l'erreur relative

 $\left|\frac{\lambda-\lambda_h}{\lambda}\right|,$

où λ est la valeur propre de l'opérateur laplacien avec condition de Dirichlet correspondant à l'approximation λ_h . Représenter également les dix fonctions propres associées calculées.

1.2 Cas d'un domaine en forme de L

On considère maintenant le domaine $\Omega =]-1,1[\times]-1,1[\setminus[0,1]\times[0,1].$

Tâche 4. Utiliser l'approche suivie dans la tâche 1 pour donner l'expression de quelques couples de valeurs et vecteurs propres du problème (1)-(2) pour cette seconde géométrie.

Tâche 5. Reprendre la tâche 2 et écrire une fonction construisant la matrice du problème approché pour cette seconde géométrie.

Tâche 6. Choisir un pas de discrétisation h suffisament fin et résoudre le problème aux valeurs propres discret obtenu. Parmi les dix plus petites valeurs propres calculées, quelles sont celles qui ne coïncident pas avec celles précedemment calculées dans le carré? Représenter les fonctions propres associées à ces valeurs. Qu'observe-t-on?

2 Résolution de l'équation de la chaleur – climatisation d'une pièce isolée

On s'intéresse maintenant à un problème basé sur l'équation de la chaleur, qui est une équation aux dérivées partielles faisant intervenir l'opérateur laplacien, que l'on va résoudre une nouvelle fois en utilisant un schéma aux différences finies.

Pour cela, on considère le domaine bidimensionnel Ω donné par

$$\Omega =]-2, 2[\times]-4, 4[,$$

qui modélisant une pièce. On introduit également trois sous-ensembles de la frontière $\partial\Omega$

$$\Gamma_1 = [-2, 2] \times \{4\}, \ \Gamma_2 = [-2, 2] \times \{-4\} \text{ et } \Gamma_3 = \partial \Omega \setminus (\Gamma_1 \cup \Gamma_2).$$

Le problème à résoudre est le suivant : trouver une fonction u des variables d'espace x et y et de la variable de temps t telle que

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \nu \,\Delta u = 0 \text{ dans } \Omega \times]0, T[, \tag{7}$$

$$\frac{\partial u}{\partial \mathbf{n}} = g_i \text{ sur } \Gamma_i \times]0, T[, i = 1, 2, 3, \tag{8}$$

$$u_{|_{t=0}} = u_0 \text{ dans } \Omega, \tag{9}$$

où $\frac{\partial u}{\partial \boldsymbol{n}}$ désigne la dérivée normale de u par rapport à la frontière, définie par

$$\frac{\partial u}{\partial \boldsymbol{n}} = \frac{\partial u}{\partial x} n_x + \frac{\partial u}{\partial y} n_y$$

avec $\mathbf{n} = (n_x, n_y)^T$ le vecteur unitaire normal à $\partial\Omega$ et dirigé vers l'extérieur du domaine Ω , et où les seconds membres g_i , i = 1, 2, 3, et u_0 sont des fonctions données et ν est une constante, également donnée.

Ce système détermine l'évolution de la température u au cours du temps dans une pièce à l'intérieur de laquelle la conductivité thermique $\nu > 0$ est constante, et qui, à l'instant initial t = 0, admet pour distribution de température le champ u_0 . Les conditions aux limites (8), dites de Neumann, s'interprètent en termes de flux de chaleur sur la frontière.

Pour la discrétisation en espace de l'équation (7), on utilise le schéma à cinq points introduit plus haut, ce qui conduit à un système d'équations différentielles du premier ordre en temps de la forme

$$\frac{\mathrm{d}u_{i,j}}{\mathrm{d}t} - \nu \frac{u_{i+1,j} + u_{i-1,j} - 4u_{i,j} + u_{i,j+1} + u_{i,j-1}}{h^2} = 0 \text{ sur }]0, T[, \tag{10}$$

écrites pour tout couple d'indices (i,j) correspondant à un nœud interne de la grille du domaine Ω . Pour fermer ce système, il faut lui adjoindre des équations pour les nœuds de la grille appartenant à la frontière $\partial\Omega$. On utilise pour cela une discrétisation des conditions aux limites (8), qui se doit d'être du second ordre, de manière à rester consistant avec la discrétisation de l'opérateur laplacien employée et ne pas engendrer de perte de précision.

Si l'on considère un nœud x_{i_0,j_0} situé dans la partie Γ_1 de la frontière du domaine Ω , pour laquelle le vecteur normal \boldsymbol{n} vaut $\boldsymbol{e}_{\boldsymbol{y}} = (0,1)^T$, la condition (8) en ce point s'écrit

$$\frac{\partial u}{\partial y}(x_{i_0,j_0}) = g_1(x_{i_0,j_0}).$$

Une technique classique, parfois appelée $technique\ du\ miroir$ dans le cas d'une condition de Neumann homogène, pour approcher cette relation consiste à introduire un nœud « fictif » x_{i_0,j_0+1} situé hors du domaine (voir la figure 2) et à poser

$$\frac{u_{i_0,j_0+1} - u_{i_0,j_0-1}}{2h} = g_1(x_{i_0,j_0}),$$

soit encore

$$u_{i_0,j_0+1} = 2h g_1(x_{i_0,j_0}) + u_{i_0,j_0-1}.$$

Ceci permet alors d'écrire l'équation (10) en tout nœud du bord du domaine Ω puis d'en éliminer ensuite la (ou les) inconnue(s) au(x) nœud(s) fictif(s). Au nœud x_{i_0,j_0} , on obtient par exemple l'équation

$$\frac{\mathrm{d}u_{i_0,j_0}}{\mathrm{d}t} - \nu \, \frac{u_{i_0+1,j_0} + u_{i_0-1,j_0} - 4\,u_{i_0,j_0} + 2\,u_{i_0,j_0-1}}{h^2} = \frac{2\nu}{h} \, g_1(x_{i_0,j_0}) \, \, \mathrm{sur} \, \,]0,T[,$$

On arrive ainsi à un système différentiel linéaire ayant pour inconnues les approximations $u_{i,j}(t)$ de u(t) aux nœuds de la grille appartenant au domaine Ω et à sa frontière $\partial\Omega$.

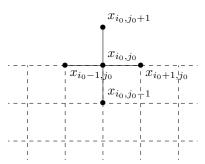


FIGURE 2 – Ajout d'un nœud « fictif » à la grille aux différences finies et représentation du schéma à cinq points en un nœud x_{i_0,j_0} du bord du domaine.

Tâche 7. Écrire une fonction construisant la matrice A_h et le second membre f_h (faisant intervenir les données du problème) du système différentiel linéaire du premier ordre

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{u}_h}{\mathrm{d}t} + \nu A_h \boldsymbol{u}_h = \boldsymbol{f}_h \text{ sur }]0, T[, \tag{11}$$

$$\boldsymbol{u}_h(0) = \boldsymbol{u}_{0,h},\tag{12}$$

associé au problème semi-discrétisé en espace par la méthode des différences finies, dans lequel $u_h(t)$ désigne un vecteur contenant les approximations des valeurs de u(t), $t \in [0,T]$, aux nœuds de la grille appartenant à $\Omega \cup \partial \Omega$ et $u_{0,h}$ est un vecteur contenant les valeurs de la fonction u_0 en ces mêmes nœuds. On pourra pour cela adapter la technique des tableaux de nœuds voisins précédemment utilisée pour la prise en compte des conditions aux limites de Neumann imposées 3 .

Pour arriver à une discrétisation totale, c'est-à-dire à la fois en espace et en temps, du problème, on approche la dérivée en temps par un schéma aux différences finies décentré. Ce choix conduit à une classe de méthodes appelées θ -schémas. En notant $v^{(k)}$ la valeur d'une variable v à l'instant $t^{(k)} = k\delta t$, avec $\delta t > 0$ un pas de discrétisation en temps fixé, le θ -schéma appliqué à (11)-(12) s'écrit

$$\begin{cases}
\frac{\boldsymbol{u}_{h}^{(k+1)} - \boldsymbol{u}_{h}^{(k)}}{\delta t} = -\nu A_{h} \left(\theta \, \boldsymbol{u}_{h}^{(k+1)} + (1 - \theta) \, \boldsymbol{u}_{h}^{(k)} \right) + \theta \, \boldsymbol{f}_{h}^{(k+1)} + (1 - \theta) \, \boldsymbol{f}_{h}^{(k)}, \ 0 \le k \le \frac{T}{\delta t} - 1, \\
\boldsymbol{u}_{h}^{(0)} = \boldsymbol{u}_{0,h},
\end{cases} (13)$$

avec $\theta \in [0, 1]$.

Pour être convergent, un schéma de discrétisation doit être consistant et stable. La théorie montre qu'un θ -schéma est consistant pour toute valeur de θ dans [0,1] et qu'il est stable si θ appartient à l'intervalle $\left[\frac{1}{2},1\right]$ ou sous la condition suivante sur le pas de temps

$$\delta t \le \frac{2}{(1-2\theta)\nu\lambda_{h,\max}},$$

où $\lambda_{h,\text{max}}$ désigne la plus grande valeur propre de la matrice A_h , si θ appartient à $\left[0,\frac{1}{2}\right]$.

Tâche 8. Quel système linéaire doit-on résoudre pour obtenir l'approximation de la solution à l'instant $t^{(k+1)}$, $0 \le k \le \frac{T}{\delta t} - 1$, à partir des données du problème et de l'approximation de la solution à l'instant précédent? Quels schémas « connus » retrouve-t-on pour les choix $\theta = 0$, $\theta = \frac{1}{2}$ et $\theta = 1$?

On fixe à présent des valeurs pour les données du problème :

$$g_1 = 28, 5, g_2 = -28, 5, g_3 = 0, u_0 = 290, \nu = 10 \text{ et } T = 10.$$

Tâche 9. Implémenter le θ -schéma et résoudre numériquement le problème pour $\theta \in \{0, 0, 25, 0, 5, 1\}$ en choisissant un pas de discrétisation en temps garantissant la stabilité de la méthode. Tracer les graphes des évolutions des températures minimale, moyenne et maximale au cours du temps et observer que la solution u(t) tend vers un état stationnaire lorsque t tend vers l'infini.

Quelques remarques

Lors de l'écriture d'un algorithme, utiliser autant que possible des formulations vectorielles à la place des structures de contrôles habituelles (boucles par exemple) pour pouvoir pleinement tirer parti de la vectorisation des calculs dans Matlab et GNU Octave. Ne pas hésiter à largement commenter les fonctions et programmes produits lors de la réalisation du projet, afin qu'ils soient facilement compréhensibles et utilisables par d'autres personnes que leurs auteurs.

^{3.} On veillera à traiter avec soin les nœuds du bord situés en des coins du domaine, en raison du problème de définition de la normale extérieure en ces points.