

Cours #1 Introduction aux Différences Finies

1. INTRODUCTION ET PLAN

De nombreux phénomènes physiques (au sens large) peuvent être représentés / modélisés par une Equation aux Dérivées Partielles (EDP).

Une EDP est une équation reliant une fonction de *plusieurs variables* et ses dérivées partielles.

Par exemple en dimension 2, l'équation: $-(\frac{\partial^2 u}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial x_2^2})(x_1, x_2) = f(x_1, x_2)$.

La résolution d'une EDP est à priori difficile; rares sont les situations où nous savons calculé explicitement la solution. Nous avons alors recours divers méthodes numériques de résolution de ces EDP.

Les approches classiques de résolution numérique des EDP sont les méthodes des différences finies, des éléments finis et des volumes finis.

La méthode des Différences Finies (D.F.) se base sur l'approximation par Différences Divisées (D.D.) des dérivées partielles figurant dans l'équation.

Durant cette session d'introduction, nous allons commencer par étudier comment approcher numériquement des dérivées uniquement à l'aide des valeurs de la fonction.

Ensuite nous allons appliquer ce principe à une première EDP en dimension 1, très simple.

L'étude des EDP sera abordée plus en détail durant la prochaine session.

Le **plan** de cette session est le suivant:

- Formules d'approximation de dérivées par Différences Divisées en dimension 1.
- Un premier problème aux limites et sa discrétisation par Différences Finies.
- Approximation de dérivées par Différences Divisées en dimensions supérieures.

Durant ce cours d'introduction aux EDP et de leur résolution numérique, nous nous appuyerons notamment sur la référence suivante:

B. Mohammadi, J.-H. Saïac, "Pratique de la simulation numérique". Dunod (Industries et Technologies), 2003.

2. FORMULES D'APPROXIMATION DE DÉRIVÉES PAR DIFFÉRENCES DIVISÉES EN DIMENSION 1

2.1. Sur la nécessité d'approcher numériquement des dérivées pour construire un schéma numérique.

Le principe de la méthode des différences finies consiste à remplacer la fonction inconnue $u(x)$ d'une EDP, équation *continue*, par un *nombre fini* de valeurs u_i , $0 \leq i \leq N$.

L'objectif étant de calculer ces valeurs discrètes u_i comme étant une bonne approximation de $u(x_i)$, valeur de la solution exacte aux points de discrétisation, points de grille, x_i , $0 \leq i \leq N$:

$$u_i \approx u(x_i) \quad \text{avec } i = 0, \dots, N$$

Autrement dit, la résolution d'un problème continu est remplacé par la recherche de $(N+1)$ valeurs discrètes, approchant la valeur de la solution exacte aux points du maillage, points de grille, x_i .

Se pose alors la question de l'approximation des dérivées de la fonction u qui apparaissent dans l'équation différentielle, Equation aux Dérivées Partielles (EDP), par exemple $\frac{\partial u}{\partial x_I}(x)$.

Ces dérivées sont remplacées par une *approximation numérique basée sur des différences divisées*.

Remark. Du point de vue de la terminologie, nous employerons également par abus de langage le terme "différences finies" pour désigner l'approximation numérique de ces dérivées.

Les Différences Divisées (DD) sont tout particulièrement employées de manière récursive en interpolation polynomiale; la notion de *schémas aux Différences Finies* (DF) est propre aux EDP, tandis que les *opérateurs ou formules aux différences finies*, une fois divisés, deviennent un taux d'accroissement ou encore une différence divisée...

Etant donnée un segment $[a, b]$, nous le "discrétisons" en N petits segments $[x_i, x_{i+1}]$, avec $x_0 = a$ et $b = x_N$, cf figure.

Cette discrétisation du domaine géométrique est appelée maillage ou grille de calcul (y compris en dimensions supérieures). Elle peut être uniforme ou non.

Dans le cas *1d uniforme*, chaque "maille" est de longueur égale notée h . On a alors:

$$x_i = a + ih, \quad i = 0..N, \quad \text{et } h = \frac{(b-a)}{N}$$

soit: $x_{i+1} = x_i + h, \quad \forall i$.

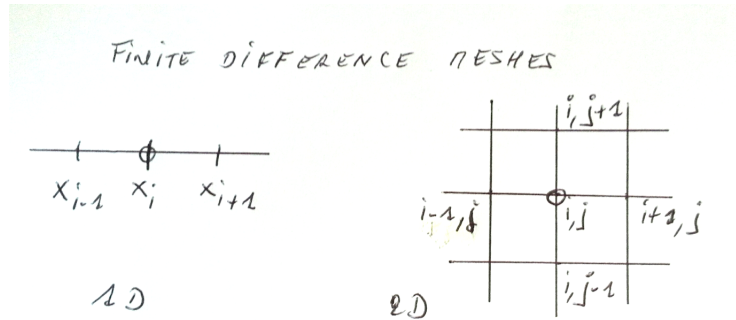


FIGURE 2.1. Maillages uniformes en dimension 1 et dimension 2.

2.2. Dérivées premières. Considérons une discrétisation *uniforme* du segment $[a, b]$ et une fonction $u(x)$ définie de $[a, b]$ à valeurs dans \mathbb{R} , u “suffisamment régulière” (ce point-ci sera précisé plus loin).

En écrivant des Développement Limités (DL) de Taylor de u en un point x_i du maillage, $x_i \in]a, b[$, on peut montrer que:

$$(2.1) \quad u'(x_i) = \frac{1}{h}[u(x_i + h) - u(x_i)] - \frac{h}{2}u''(x_i) + O(h^2)$$

mais aussi:

$$(2.2) \quad u'(x_i) = \frac{1}{h}[u(x_i) - u(x_i - h)] + \frac{h}{2}u''(x_i) + O(h^2)$$

ou encore:

$$(2.3) \quad u'(x_i) = \frac{1}{2h}[u(x_i + h) - u(x_i - h)] - \frac{h^2}{6}u^{(3)}(x_i) + O(h^3)$$

En allant plus loin et d’un seul coté pour les points sur lesquels s’appuyer, on a également:

$$(2.4) \quad u'(x_i) = \frac{1}{2h}[-u(x_i + 2h) + 4u(x_i + h) - 3u(x_i)] + \frac{h^2}{3}u^{(3)}(x_i) + O(h^3)$$

Exercice. Démontrer les formules (2.1)-(2.4).

Concernant la régularité requise de u , en s’appuyant sur la forme du reste du type Taylor-Lagrange, on obtient qu’il suffit d’avoir u de classe C^2 pour les deux premières formules et u de classe C^3 pour les deux dernières.

De ces DL de Taylor, on déduit immédiatement des formules d’approximation des dérivées, à l’ordre indiqué dans le reste.

On obtient:

- La formule aux différences finies décentrée à droite:

$$u'(x_i) \approx \frac{1}{h}[u(x_i + h) - u(x_i)] , \text{ ordre 1}$$

- La formule aux différences finies décentrée à gauche:

$$u'(x_i) \approx \frac{1}{h}[u(x_i) - u(x_i - h)] , \text{ ordre 1}$$

- La formule aux différences finies centrée:

$$u'(x_i) \approx \frac{1}{2h}[u(x_i + h) - u(x_i - h)] , \text{ ordre 2}$$

- La formule aux différences finies à 3 points, décentrée à droite:

$$u'(x_i) \approx \frac{1}{2h}[-u(x_i + 2h) + 4u(x_i + h) - 3u(x_i)] , \text{ ordre 2}$$

2.3. **Dérivées secondes.** Pour u de classe C^4 , une combinaison linéaire de DL de Taylor au point x_i donne:

$$(2.5) \quad u''(x_i) = \frac{1}{h^2}[u(x_i + h) - 2u(x_i) + u(x_i - h)] - \frac{h^2}{12}u^{(4)}(x_i) + O(h^5)$$

Ce qui nous conduit directement à la formule aux différences finies à 3 points centrée suivante:

$$u''(x_i) \approx \frac{1}{h^2}[u(x_i + h) - 2u(x_i) + u(x_i - h)] , \text{ ordre } 2$$

2.4. **Dérivées d'ordre supérieurs.** Selon le même procédé de construction, on peut obtenir sur un maillage uniforme les formules *centrées* d'approximation de dérivées *d'ordre 3 et d'ordre 4* suivantes:

$$u^{(3)}(x_i) \approx \frac{1}{2h^3}[u_{i+2} - 2u_{i+1} + 2u_{i-1} - u_{i-2}] , \text{ ordre } 2$$

$$u^{(4)}(x_i) \approx \frac{1}{h^4}[u_{i+2} - 4u_{i+1} + 6u_i - 4u_{i-1} + u_{i-2}] , \text{ ordre } 2$$

On remarquera que les coefficients de ces formules d'approximation de dérivée ne sont rien d'ordre que les coefficients du binôme; en particulier leur somme s'annule.

D'autres formules d'approximations sont possibles. Leur choix pour construire un schéma aux différences finies de résolution d'une EDP pourra dépendre des propriétés de l'équation et/ou de la solution recherchée.

3. UN PREMIER PROBLÈME AUX LIMITES ET SA DISCRÉTISATION PAR DIFFÉRENCES FINIES

Considérons l'équation différentielle d'ordre 2 suivante:

$$-u''(x) = f(x) \text{ pour } x \in]a, b[$$

avec f fonction donnée.

Supposons que nous ne savons pas intégrer f et que nous ne savons donc pas calculer *une* solution u de cette équation différentielle.

Le *problème de Cauchy* correspondant à cette équation différentielle linéaire d'ordre deux consisterait à fermer le système en considérant 2 "conditions initiales": $u(0)$ et $u'(0)$ donnés.

Contrairement au problème de Cauchy, le *problème aux limites* correspondant à cette équation différentielle linéaire d'ordre deux, consiste à fermer le système en considérant des conditions *aux bords du domaine de calcul*. On parle également de *conditions aux limites*.

Cherchons alors à résoudre le problème aux limites suivant:

$$(3.1) \quad \begin{cases} -u''(x) = f(x) & \text{pour } x \in]a, b[\\ u(a) = 0 \text{ et } u(b) = 0 \end{cases}$$

Lorsque c'est la valeur de la fonction qui est imposée sur les bords (et non sa dérivée par exemple), on parle de *conditions aux limites de Dirichlet*.

Pour f donnée dans C^2 , on peut montrer que la solution $u(x)$ de ce problème aux limites *existe*, est *unique*. Par ailleurs sa solution est continue par rapport aux données. On dit que le *problème est bien posé*. Notons que la solution est alors nécessairement de classe C^4 .

Ce système peut modéliser la déformation d'une barre 1d élastique, fixée sur ses bords, et sous l'effet du chargement $f(x)$. L'inconnue $u(x)$ désigne le déplacement de la barre à l'état d'équilibre (en effet, le problème ne dépend que de la variable d'espace x et pas d'une variable temporelle supplémentaire t).

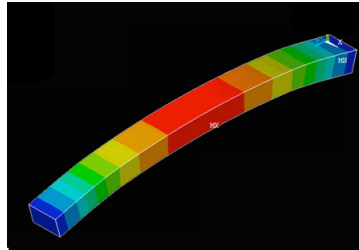


FIGURE 3.1. Déformation $u(x)$ d'une barre élastique fixée sur ses bords, et chargée sous l'action d'une force extérieure $f(x)$.

Pour résoudre numériquement ce problème, nous allons employer la méthode aux différences finies.

Cela consiste dans un premier temps à discrétiser (mailler) le domaine géométrique, ici le simple segment $[a, b]$.

Ensuite, nous allons remplacer les dérivées apparaissant dans l'équation (3.1) (le problème continu) par des formules aux différences divisées vues précédemment.

On considère une discrétisation uniforme de $[a, b]$.

L'équation continue, $-u''(x) = f(x)$, doit être vérifiée en tout point x de $]a, b[$ donc a-fortiori en tout point interne au maillage:

$$-u''(x_i) = f(x_i) \text{ pour } i = 1, \dots, N-1$$

En approximant la dérivée seconde par la formule aux différences finies centrée précédente (ordre 2), on obtient le *schéma numérique*:

$$(3.2) \quad -\frac{1}{h^2}[u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}] = f_i \text{ pour } i = 1, \dots, N-1$$

où: $f_i = f(x_i)$. Et avec les conditions aux limites discrètes:

$$(3.3) \quad u_0 = 0 \text{ et } u_N = 0$$

Nous sommes donc passé d'une équation différentielle continue à un système algébrique discret, de $(N - 1)$ équations à $(N - 1)$ inconnues. Les inconnues sont les valeurs (u_1, \dots, u_{N-1}) .

Etant linéaire en $\{u_i\}_{0 \leq i \leq N}$, ce schéma numérique (3.2)-(3.3) peut s'écrire sous forme matricielle. Cela donne:

$$(3.4) \quad \frac{1}{h^2} \begin{pmatrix} +2 & -1 & 0 & \dots & 0 \\ -1 & +2 & -1 & \dots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \dots & \ddots & \ddots & -1 \\ 0 & \dots & 0 & -1 & +2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ \vdots \\ \vdots \\ u_{N-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_1 \\ \vdots \\ \vdots \\ f_{N-1} \end{pmatrix}$$

$$\Leftrightarrow AU_h = h^2 F$$

avec $U_h = (u_1, \dots, u_{N-1})^T$ le vecteur inconnu et $F = (f_1, \dots, f_{N-1})^T$ le second membre. Notons que la première et la dernière équation s'écrivent bien:

$$-\frac{1}{h^2}[u_2 - 2u_1] = f_1 \text{ et } -\frac{1}{h^2}[-2u_{N-1} + u_{N-2}] = f_{N-1}$$

du fait des conditions au limites: $u_0 = 0 = u_N$.

Pour obtenir la solution numérique de ce problème aux limites, il ne reste plus qu'à résoudre ce système linéaire.

Une bonne méthode de résolution sera une méthode de Cholesky simplifiée, étant donné que la matrice est symétrique tridiagonale.

Conditions aux limites. Nous venons de remarquer que pour les points proches des bords, les conditions aux limites doivent être prises en compte dans les équations.

Dans le cas présent, pour $i = 1$ et $i = (N - 1)$, on a :

$$-\frac{1}{h^2}[u_2 - 2u_1] = \frac{1}{h^2}u_0 + f_1$$

$$-\frac{1}{h^2}[-2u_{N-1} + u_{N-2}] = \frac{1}{h^2}u_N + f_{N-1}$$

Les CL de Dirichlet ont été immédiates à prendre en compte car les valeur des u sont données, de surcroît nulles.

Nous verrons durant une prochaine session que d'autres conditions aux limites sont possibles. Par exemple, dans le cas présent, les conditions aux limites suivantes sont possibles:

$$u(a) = 0 \text{ et } -u'(b) = \alpha$$

Lorsque c'est la dérivée de la fonction qui est imposée sur les bords, on parle de *conditions aux limites de Neumann*.

Dans le cas de l'exemple de la barre élastique déformée, cette condition sur le bord droit correspondrait à une pente de la barre imposée et non plus à une barre encastree (déplacement nul).

Il existe toujours une unique solution à ce nouveau problème aux limites (nous verrons cela durant une prochaine session).

Du seul point de vue de la discrétisation DF, la nouvelle condition aux limites en $x_N = b$ peut se discrétiser ainsi:

$$-\frac{1}{h}[u_N - u_{N-1}] = \alpha$$

Cette CL implique alors une *inconnue et une équation supplémentaires* dans le système linéaire (3.4).

Le système portera désormais sur l'inconnue étendue $(u_1, \dots, u_{N-1}, u_N)^T$.

Quant à la $(N - 1)$ ième équation, elle se lit tout simplement comme les autres, à savoir: $-\frac{1}{h^2}[u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}] = f_i$ avec $i = (N - 1)$.

Notion de consistance et d'ordre de précision du schéma. Du fait de l'ordre 2 de la *formule* aux différences divisées utilisée, le *schéma* aux Différences Finies (DF) que nous avons construit pour le problème aux limites (3.1) est d'ordre 2.

De manière générale, on définit l'erreur de consistance et l'ordre d'un schéma comme suit.

Définition. L'erreur de consistance E d'un schéma aux différences finies est définie comme étant le terme restant lorsque l'on injecte la solution exacte de l'équation dans le schéma numérique.

Autrement dit, l'erreur de consistance E vérifie:

$$E = \frac{1}{h^2} AU_{ex} - F$$

où $U_{ex} = (u_{ex}(x_1), \dots, u_{ex}(x_{N-1}))^T$ est le vecteur des valeurs de la solution exacte aux points du maillage. Ensuite on dit que le schéma est **consistant à l'ordre p**

$$\|E\| = O(h^p)$$

Dans le cas présent, on a:

$$E_i = \left(\frac{1}{h^2} AU_{ex} - F\right)_i = -\frac{1}{h^2} [u_{ex}(x_{i+1}) - 2u_{ex}(x_i) + u_{ex}(x_{i-1})] - f_i = O(h^2) \quad \forall i, i = 0 \dots N$$

d'après l'erreur commise lors de l'approximation de la dérivée seconde. Le schéma (3.4) est donc consistant avec le problème aux limites (3.1) à l'ordre 2.

Remark. Dans le cas de la condition aux limites de Neumann (dérivée imposée et non plus valeur de la fonction imposée), l'approximation numérique faite de la dérivée au bord étant d'ordre 1, l'erreur de consistance du schéma ne saurait être d'ordre 2; et ce malgré l'approximation à l'ordre 2 de la dérivée seconde...

Pour obtenir un schéma numérique d'ordre 2, il faudrait alors effectuer une discrétisation de la condition au bord également d'ordre 2.

Plusieurs options sont alors possibles, notamment la technique dite du point fantôme.

Nous aborderons ce type de questionnements plus en détails durant une prochaine session.

Consistance requise, stabilité également... Terminons ce paragraphe en précisant que la *propriété de consistance du schéma avec l'équation approchée est absolument nécessaire* mais n'est pour pas autant suffisante pour obtenir la convergence de la solution numérique vers la solution exacte i.e. pour obtenir:

$$\|U_{ex} - U_h\| \rightarrow 0 \text{ lorsque } h \rightarrow 0$$

En effet, pour obtenir la convergence, il faut également s'assurer que le schéma est *stable*.

Cette notion de stabilité sera abordée durant une prochaine session.

4. APPROXIMATION DE DÉRIVÉES PAR DIFFÉRENCES DIVISÉES EN DIMENSION SUPÉRIEURES

L'extension des formules d'approximation des dérivées aux dimensions 2 et 3 est naturelle et aisée. Par contre leur utilisation dans le cadre des schémas aux différences finies sera restreinte aux géométries de formes régulières dans le sens où les bords doivent être parallèles à l'un des axes. En pratique, les formes les plus complexes envisageables seront tout au plus un assemblage de parallélépipèdes.

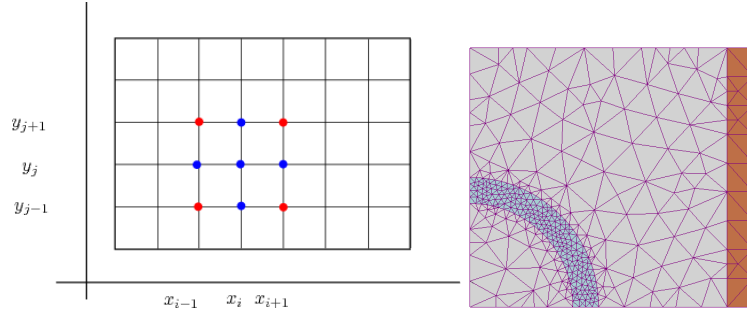


FIGURE 4.1. (G) Maillage régulier compatible avec les D.F. (D) Maillage Elements Finis de type “déstructuré”.

On considère par la suite une discrétisation uniforme dans chaque direction; on notera Δx le pas de discrétisation selon l'axe des x , Δy celui selon l'axe des y et Δz celui selon l'axe des z . Les points du maillage sont de coordonnées (x_i, y_j, z_k) .

Nous présentons ci-dessous l'extension obtenue dans le cas de la dimension $n = 2$. L'extension au cas $n = 3$ est aisée.

On note u_{ij} l'approximation de la valeur exacte $u(x_i, y_j)$ au point d'indice (i, j) du maillage.

Comme dans le cas 1d, en écrivant des DL de Taylor de la fonction au point (x_i, y_j) , et en les combinant, on obtient les formules aux différences finies suivantes.

Dérivées premières.

- Les formules aux différences finies décentrées à droite:

$$\frac{\partial u}{\partial x}(x_i, y_j) \approx \frac{1}{\Delta x}[u_{i+1,j} - u_{i,j}] \text{ et } \frac{\partial u}{\partial y}(x_i, y_j) \approx \frac{1}{\Delta y}[u_{i,j+1} - u_{i,j}], \text{ ordre } 1$$

- Les formules aux différences finies décentrées à gauche:

$$\frac{\partial u}{\partial x}(x_i, y_j) \approx \frac{1}{\Delta x}[u_{i,j} - u_{i-1,j}] \text{ et } \frac{\partial u}{\partial y}(x_i, y_j) \approx \frac{1}{\Delta y}[u_{i,j} - u_{i,j-1}], \text{ ordre } 1$$

- Les formules aux différences finies centrées:

$$\frac{\partial u}{\partial x}(x_i, y_j) \approx \frac{1}{2\Delta x}[u_{i+1,j} - u_{i-1,j}] \text{ et } \frac{\partial u}{\partial y}(x_i, y_j) \approx \frac{1}{2\Delta y}[u_{i,j+1} - u_{i,j-1}], \text{ ordre } 2$$

Opérateur d'ordre deux. La formule aux différences finies à 5 points pour approcher le laplacien s'écrit:

$$\Delta u(x_i, y_j) \approx \frac{1}{\Delta x^2}[u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}] + \frac{1}{\Delta y^2}[u_{i,j+1} - 2u_{i,j} + u_{i,j-1}], \text{ ordre } 2$$

Exercice. Démontrer cette formule d'approximation du laplacien.

Aussi, nous aurons besoin par la suite de discrétiser l'opérateur différentiel $\text{div}(\lambda \nabla u)$, où la fonction λ est donnée, a-priori dépendante de x .

Rappelons que: $\text{div}(\nabla u) = \Delta u$.

On peut alors considérer la discrétisation suivante:

$$\text{div}(\lambda \nabla u)(x_i, y_j) \approx$$

$$\frac{1}{\Delta x^2}[\lambda_{i+1/2,j}(u_{i+1,j} - u_{i,j}) + \lambda_{i-1/2,j}(u_{i-1,j} - u_{i,j})] + \frac{1}{\Delta y^2}[\lambda_{i,j+1/2}(u_{i,j+1} - u_{i,j}) + \lambda_{i,j-1/2}(u_{i,j-1} - u_{i,j})]$$

Du point de vue des conditions aux limites, de type Neumann notamment, leur discrétisation s'effectue de manière semblable que dans le cas unidimensionnel.

Enfin notons qu'en dimension 2 ou 3, le mode de numérotation des points du maillage influe directement sur la structure de la matrice à "inverser". Selon le type d'algorithmes de résolution linéaire (eg Cholesky), un mode de numérotation des points pourra être plus intéressante qu'un autre.

Pour terminer cette session, notons que la méthode de résolution d'une EDP par différences finies est facile à mettre en oeuvre; par contre le principe même de discrétisation des dérivées empêche l'usage de cette méthode pour des domaines de géométrie quelconque.

Dans le cas de géométries quelconques, la méthode des éléments finis ou des volumes finis devra être envisagée. Ces méthodes requièrent une sérieuse étude en terme d'analyse numérique.

Durant les prochaines sessions, nous allons présenter une introduction aux EDP les plus classiques, notamment l'équation de Poisson-Laplace et l'équation de la chaleur; nous étudierons le comportement qualitatif de leurs solutions respectives.

Les objectifs finaux sont de pouvoir construire des schémas numériques de résolution de ces équations et aussi d'interpréter leurs solutions.