Nous avons l'équation de la chaleur :

$$\partial_t u - D \, \Delta u = f \tag{1}$$

Discrétisée en 3D comme :

$$\begin{aligned}\frac{u_{i,j,k}^{n+1} - u_{i,j,k}^{n}}{\Delta t} &- D \left(\frac{u_{i-1,j,k}^{n+1} - 2\,u_{i,j,k}^{n+1} + u_{i+1,j,k}^{n+1}}{\Delta x^2} \right) \\ &- D \left(\frac{u_{i,j-1,k}^{n+1} - 2\,u_{i,j,k}^{n+1} + u_{i,j+1,k}^{n+1}}{\Delta y^2} \right) \\ &- D \left(\frac{u_{i,j,k-1}^{n+1} - 2\,u_{i,j,k}^{n+1} + u_{i,j,k+1}^{n+1}}{\Delta z^2} \right) = f_{i,j,k}^{n}\end{aligned}$$

Soient $a, b, c, d \in \mathbb{R}$ les coefficients d'interaction entre les points définis par

$$a := \frac{1}{\Delta t} - 2b - 2c - 2d \qquad b := \frac{-D}{\Delta x^2} \qquad c := \frac{-D}{\Delta y^2} \qquad d := \frac{-D}{\Delta z^2}$$

L'équation discrétisée devient donc

$$a\,u_{i,j,k}^{n+1} + b\left(u_{i+1,j,k}^{n+1} + u_{i-1,j,k}^{n+1}\right) + c\left(u_{i,j+1,k}^{n+1} + u_{i,j-1,k}^{n+1}\right) + d\left(u_{i,j,k+1}^{n+1} + u_{i,j,k-1}^{n+1}\right) = \frac{1}{\Delta t}\,u_{i,j,k}^{n} + f_{i,j,k}^{n}$$

Étudions dans un premier temps (1) avec conditions aux limites périodiques en 1D

$$M_{1D} \begin{pmatrix} u_{0,\cdot,\cdot}^{n+1} \\ \vdots \\ u_{N_x-1,\cdot,\cdot}^{n+1} \end{pmatrix} = \frac{1}{\Delta t} \begin{pmatrix} u_{0,\cdot,\cdot}^{n} \\ \vdots \\ u_{N_x-1,\cdot,\cdot}^{n} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} f_{0,\cdot,\cdot} \\ \vdots \\ f_{N_x-1,\cdot,\cdot} \end{pmatrix}$$

Avec

$$M_{1D} = \begin{bmatrix} a & b & & & b \\ b & \ddots & \ddots & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & b \\ b & & & b & a \end{bmatrix} \in \mathcal{S}_{N_x}(\mathbb{R})$$

Étudions dans un second temps (1) avec conditions aux limites périodiques en 2D, extension vectoriel du cas 1D,

$$M_{2D} \begin{pmatrix} u_{0:N_x-1,0,\cdot}^{n+1} \\ \vdots \\ u_{0:N_x-1,N_y-1,\cdot}^{n+1} \end{pmatrix} = \frac{1}{\Delta t} \begin{pmatrix} u_{0:N_x-1,0,\cdot}^{n} \\ \vdots \\ u_{0:N_x-1,N_y-1,\cdot}^{n} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} f_{0:N_x-1,0,\cdot}^{n} \\ \vdots \\ f_{0:N_x-1,N_y-1,\cdot}^{n} \end{pmatrix}$$

Avec

$$M_{2D} = \begin{bmatrix} M_{1D} & C & & & C \\ C & \ddots & \ddots & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & C \\ C & & & C & M_{1D} \end{bmatrix} \in \mathcal{S}_{N_x N_y}(\mathbb{R}) \text{ et } C = \begin{bmatrix} c & & \\ & \ddots & \\ & & c \end{bmatrix} \in \mathcal{S}_{N_x}(\mathbb{R})$$

Ainsi (1) avec conditions aux limites périodiques en 3D, extension vectoriel du cas 2D,

$$M_{3D} \begin{pmatrix} u_{0:N_x-1,0:N_y-1,0}^{n+1} \\ \vdots \\ u_{0:N_x-1,0:N_y-1,N_z-1}^{n+1} \end{pmatrix} = \frac{1}{\Delta t} \begin{pmatrix} u_{0:N_x-1,0:N_y-1,0}^{n} \\ \vdots \\ u_{0:N_x-1,0:N_y-1,N_z-1}^{n} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} f_{0:N_x-1,0:N_y-1,0}^{n} \\ \vdots \\ f_{0:N_x-1,0:N_y-1,N_z-1}^{n} \end{pmatrix}$$

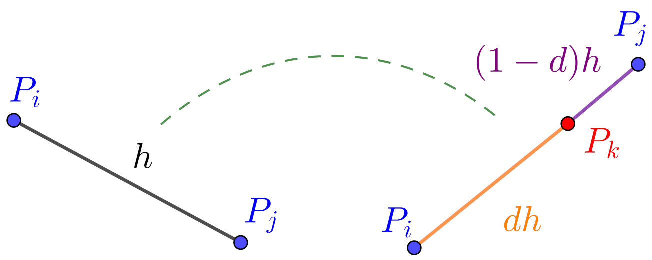
Avec

$$M_{3D} = \begin{bmatrix} M_{2D} & D & & & D \\ D & \ddots & \ddots & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & D \\ D & & & D & M_{2D} \end{bmatrix} \in \mathcal{S}_{N_x N_y N_z}(\mathbb{R}) \text{ et } D = \begin{bmatrix} d & & \\ & \ddots & \\ & & d \end{bmatrix} \in \mathcal{S}_{N_x N_y}(\mathbb{R})$$

Notre problème, regroupé sous forme matricielle sans conditions aux bords (sur la frontière définie par ϕ) et en ajoutant les nouveaux points à la fin de ceux du maillage, devient :

$$\underbrace{\left(\begin{array}{c|c} M_{3D} & 0 \\ \hline 0 & \mathrm{Id} \end{array}\right)}_{:=A} U^{n+1} = \frac{1}{\Delta t} U^n + F$$

Il reste un problème à régler : les nouveaux points sont situés sur des arêtes du maillage. Il nous faut donc supprimer des anciennes interactions et en rajouter de nouvelles :



Soient P_i et P_j deux points du maillage séparés par un pas h. Notons que sur un maillage cartésien h peut uniquement être Δx, Δy ou Δz.
Si nous insérons un point P_k sur l'arête $[P_i, P_j]$ séparé de P_i par une distance hd et par une distance $(1-d)h$ de P_j, nous notons que $d \in [0,1]$ le facteur de changement de distance.

Si nous voulons découper l'ancienne interaction en deux nouvelles, il nous faut donc appliquer l'algorithme simpliste :

- **1)** Supprimer l'interaction entre P_i et P_j. $A[i,j] = A[j,i] = 0$
- **2)** Créer une interaction entre P_i et P_k. Le coefficient est donné par $A[i,k] = A[k,i] = \frac{-D}{dh^2}$
- **3)** Créer une interaction entre P_j et P_k. Le coefficient est donné par $A[j,k] = A[k,j] = \frac{-D}{(1-d)h^2}$
- **4)** Mettre à jour le coefficient diagonal pour le point P_i.
  $A[i,i] = a + \frac{-D}{h^2} - \frac{-D}{dh^2} = \frac{1}{\Delta t} - 2b - 2c - 2d + \frac{-D}{h^2} - \frac{-D}{dh^2}$
- **5)** Mettre à jour le coefficient diagonal pour le point P_j.
  $A[j,j] = a + \frac{-D}{h^2} - \frac{-D}{(1-d)h^2} = \frac{1}{\Delta t} - 2b - 2c - 2d + \frac{-D}{h^2} - \frac{-D}{(1-d)h^2}$
- **6)** Mettre à jour le coefficient diagonal pour le point P_k.
  $A[k,k] = \frac{1}{\Delta t} - \frac{-D}{dh^2} - \frac{-D}{(1-d)h^2}$

Il en résulte une matrice à diagonale strictement dominante. Mais cela reste à prouver.

L'algorithme un peu plus détaillé est celui-ci :

Algorithme 1 : Idée

Définitions;

$b = \dfrac{-D}{\Delta x^2}, c = \dfrac{-D}{\Delta y^2}, d = \dfrac{-D}{\Delta z^2}, a = \dfrac{1}{\Delta t} - 2b - 2c - 2d$;

pour chaque p_k *: point du bord* **faire**

- k = indice global du point;
- n_k = nombre de voisins de p_k;
- **si** $n_k = 2$ **alors**
  - **Le point** p_k **est un point sur une arête**;
  - p_i = premier voisin de p_k;
  - i = indice global du point p_i
  - p_j = deuxième voisin de p_k
  - j = indice global du point p_j
  - $A[i, j] = A[j, i] = 0$ (supprime l'interaction entre p_i et p_j)
  - **Si** *l'arête est sur l'axe x* **Faire** *Move* $(\Delta x, b)$
  - **Si** *l'arête est sur l'axe y* **Faire** *Move* $(\Delta y, c)$
  - **Si** *l'arête est sur l'axe z* **Faire** *Move* $(\Delta z, d)$
- **fin**
- **si** $n_k = 4$ **alors**
  - **Le point est un point du maillage donc il n'y a rien de plus à faire**
- **fin**

fin

Algorithme 2 : Move (h, coeff)

$d = \frac{1}{h} \|p_k - p_i\|$

$v = \frac{1}{d} \times coeff$
$w = \frac{1}{(1-d)} \times coeff$

Màj de l'interaction entre p_i et p_k
$A[i, k] = A[k, i] = v$
$A[i, i] = A[i, i] + coeff - v$

Màj de l'interaction entre p_j et p_k
$A[j, k] = A[k, j] = w$
$A[j, j] = A[j, j] + coeff - w$

Màj de la ligne k
$A[k, k] = \frac{1}{\Delta t} - v - w$