POLYTECHNIQUE MONTRÉAL

LE GÉNIE EN PREMIÈRE CLASSE

MEC8211 - Vérification et Validation en Modélisation Numérique

Rappel sur la Méthode des Différences Finies (MDF)

David Vidal

Automne 2022

Méthode des différences finies - Objectif

Objectif :

- **Transformer** une **équation aux dérivées partielles** continue valable sur un domaine continu:
  - soit en un **système linéaire à *N* équations pour *N* inconnues**,
  - soit en un **système de *N* équations de récurrence**,

  dont les équations sont associées à un domaine discret appelé maillage.

$$L\left(u, \frac{\partial u}{\partial x}, \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \frac{\partial u}{\partial t}, \ldots\right) + f = 0$$

\+ Conditions Frontières

\+ Conditions Initiales (transitoire)

Problème…

OU

$$\begin{bmatrix} k_{11} & k_{12} & \cdots & k_{1n} \\ k_{21} & k_{22} & \cdots & k_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ k_{n1} & k_{n2} & \cdots & k_{nn} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_n \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \vdots \\ f_n \end{Bmatrix}$$

transitoire avec schéma implicite ou stationnaire

$$\begin{cases} u_1^{t+1} = g_1(u_0^t, u_1^t, u_2^t) \\ u_2^{t+1} = g_2(u_1^t, u_2^t, u_3^t) \\ \vdots \\ u_n^{t+1} = g_n(u_{n-1}^t, u_n^t, u_{n+1}^t) \end{cases}$$

transitoire avec schéma explicite

Méthode :

- **Écrire sous forme discrète** (*i*-1, *i*, *i*+1 …) toutes les **dérivées partielles** présentes dans l'EDP appliquée en *i* ainsi qu'aux C.F. et C.I.

Discrétisation des termes de dérivées

- Utilisation des développements limités en série de Taylor:

notation indicielle

$$T(x+\Delta x) = T(i+1) = T(i) + \left.\frac{dT}{dx}\right|_i \Delta x + \left.\frac{d^2T}{dx^2}\right|_i \frac{\Delta x^2}{2} + \left.\frac{d^3T}{dx^3}\right|_i \frac{\Delta x^3}{6} + \Delta x^4(\ldots) \quad (1)$$

$$T(x-\Delta x) = T(i-1) = T(i) - \left.\frac{dT}{dx}\right|_i \Delta x + \left.\frac{d^2T}{dx^2}\right|_i \frac{\Delta x^2}{2} - \left.\frac{d^3T}{dx^3}\right|_i \frac{\Delta x^3}{6} + \Delta x^4(\ldots) \quad (2)$$

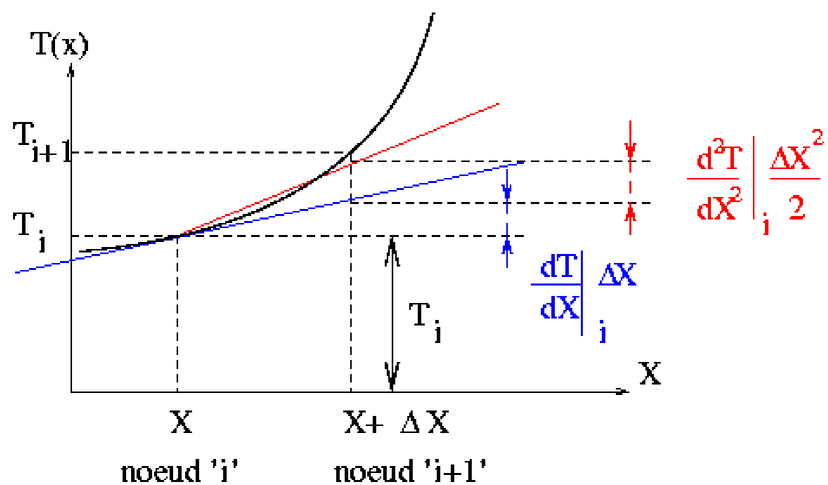
- On combine ces deux équations. Par exemple, la somme de (1) et de (2) :

$$T(i+1) + T(i-1) = 2T(i) + 2\left.\frac{d^2T}{dx^2}\right|_i \frac{\Delta x^2}{2} + \Delta x^4(\ldots) \qquad (1)+(2)$$

permet d'isoler :

$$\left.\frac{d^2T}{dx^2}\right|_i = \frac{T(i+1) - 2T(i) + T(i-1)}{\Delta x^2} + O(\Delta x^2)$$

représentatif de l'ordre de tous les termes tronqués



Principaux schémas d'approximation des termes dérivés

En combinant de différentes manières, on obtient ainsi les approximations discrètes (ou schémas de différenciation) suivantes :

	Termes tronqués	Type de schéma
(1) $\rightarrow \left.\dfrac{dT}{dx}\right\vert_i \approx \dfrac{T_{i+1}-T_i}{\Delta x}$	$+\,O(\Delta x)$	Approximation avant de la dérivée 1ère
(2) $\rightarrow \left.\dfrac{dT}{dx}\right\vert_i \approx \dfrac{T_i-T_{i-1}}{\Delta x}$	$+\,O(\Delta x)$	Approximation arrière de la dérivée 1ère
$(1)+(2) \rightarrow \left.\dfrac{d^2T}{dx^2}\right\vert_i \approx \dfrac{T_{i-1}-2T_i+T_{i+1}}{\Delta x^2}$	$+\,O(\Delta x^2)$	Approximation centrée de la dérivée 2nde
$(1)-(2) \rightarrow \left.\dfrac{dT}{dx}\right\vert_i \approx \dfrac{T_{i+1}-T_{i-1}}{2\Delta x}$	$+\,O(\Delta x^2)$	Approximation centrée de la dérivée 1ère
Aussi: $\left.\dfrac{dT}{dx}\right\vert_i \approx \dfrac{-T_{i+2}+4T_{i+1}-3T_i}{2\Delta x}$	$+\,O(\Delta x^2)$	Approximation avant dite « de Gear » de la dérivée 1ère
$\left.\dfrac{dT}{dx}\right\vert_i \approx \dfrac{T_{i-2}-4T_{i-1}+3T_i}{2\Delta x}$	$+\,O(\Delta x^2)$	Approximation arrière dite « de Gear » de la dérivée 1ère

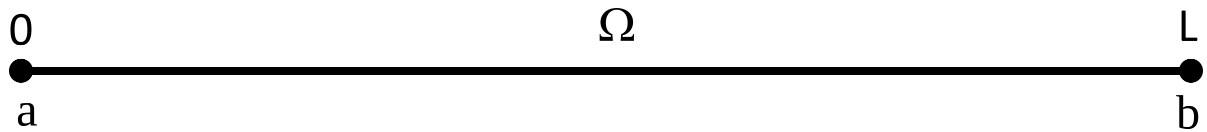
Précision du schéma

<u>NB:</u> nouvelle notation → $T(i+1)=T_{i+1}$

Exemple 1

- **Transfert de chaleur dans une tige avec source/puits de chaleur:**

On considère une tige de longueur L=b-a qu'on désigne par Ω et qu'on représente comme suit:



- Le problème de transfert est gouverné par l'équation de Poisson et **les conditions aux frontières de type Dirichlet** suivantes:

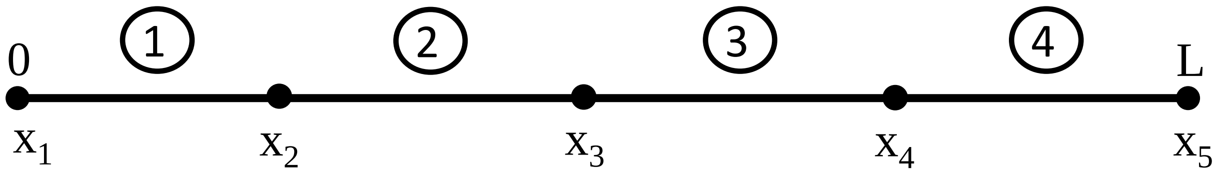
$$\left\| \begin{array}{l} -\kappa \dfrac{d^2T}{dx^2} = f \;\; dans\ \Omega \\ T(x=a) = T_a \\ T(x=b) = T_b \end{array} \right.$$

Problème elliptique

On s'intéresse ici au profil de température en régime permanent

- κ: conductivité thermique (W/m·K)
- *f*: source/puits de chaleur (W/m^3)

- On applique la discrétisation géométrique à l'aide de 4 intervalles (mailles):



- Approximation par un schéma de différences finies de la dérivée seconde:

$$\left.\frac{d^2T}{dx^2}\right|_{x_i} \approx \frac{T_{i-1} - 2T_i + T_{i+1}}{h^2}$$

Approximation centrée

avec

$$h = x_{i+1} - x_i = \text{constant}$$

- On obtient donc l'équation:

$$-\kappa\left(T_{i-1} - 2T_i + T_{i+1}\right) = h^2 f_i \quad avec \ (f_i = f(x_i))$$

qui doit être vérifiée pour *i*=2, 3 et 4.

- Ainsi nous avons aux nœuds 2, 3 et 4 les relations suivantes:

$$i = 2 : -\left(T_1 - 2T_2 + T_3\right) = \frac{h^2 f_2}{\kappa}$$

$$i = 3 : -\left(T_2 - 2T_3 + T_4\right) = \frac{h^2 f_3}{\kappa}$$

$$i = 4 : -\left(T_3 - 2T_4 + T_5\right) = \frac{h^2 f_4}{\kappa}$$

- Qu'on réécrit en transférant les conditions aux frontières à droite:

$$i = 2 : \qquad 2T_2 - T_3 = T_1 + \frac{h^2 f_2}{\kappa} = T_a + \frac{h^2 f_2}{\kappa}$$

$$i = 3 : -T_2 + 2T_3 - T_4 = \frac{h^2 f_3}{\kappa}$$

$$i = 4 : -T_3 + 2T_4 \qquad = T_5 + \frac{h^2 f_4}{\kappa} = T_b + \frac{h^2 f_4}{\kappa}$$

- Ou sous forme matricielle :

$$\begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 2 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} T_2 \\ T_3 \\ T_4 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} T_a + \left(h^2 / \kappa \right) f_2 \\ \left(h^2 / \kappa \right) f_3 \\ T_b + \left(h^2 / \kappa \right) f_4 \end{Bmatrix}$$

Forme compacte

- Un problème stationnaire mène toujours à la résolution d'un système matriciel (pas d'équations récurrentes)

- Remarque: l'approximation centrée est du second ordre $O(h^2)$. Autrement dit, l'erreur varie comme:

$$\underset{i}{Max} \left| T_i - T(x_i) \right| \leq C.h^2$$

avec C une constante.

Quel algorithme doit-on choisir pour résoudre un système linéaire?

Réponse:

- On choisit l'algorithme <u>en fonction de la taille *N* du système</u> et du type de matrice (p.ex. diagonale, creuse,…) à résoudre.

- Méthodes disponibles:
  1. Inversion de matrice et formule de Cramer (calculs de déterminant)
  2. Méthodes directes "avancées"(p.ex. factorisation LU, algorithme de Thomas,…)
  3. Méthodes itératives (p.ex. méthode de gradient conjugué, Gauss-Seidel,…)

N=	5	10	25	10^5	10^6
Formule de Cramer	1300 flops	4×10^8 flops	10^{15} ans	∞	∞
Factorisation LU	100 flops	900 flops	$\sim O$(msec)	$\sim O$(heure)	$\sim O$(mois)
Méthode itérative	-	-	-	$\sim O$(min)	$\sim O$(heure)

Quel algorithme doit-on choisir pour résoudre un système linéaire?

Table 7.4 *Operation count for some direct solution techniques.*

Direct solution technique	Approximate operation count	Approximate operations for $N = 1000$	Approximate operations for $N = 1$ million
Thomas algorithm[a]	$8N$	8×10^3	8×10^6
Gaussian elimination	$\frac{2}{3}N^3$	7×10^8	7×10^{17}
LU decomposition	$\frac{2}{3}N^3$	7×10^8	7×10^{17}
Gauss–Jordan	N^3	1×10^9	1×10^{18}
Matrix inversion	$2N^3$	2×10^9	2×10^{18}
Cramer's rule	$(N + 1)!$	4.0×10^{2570}	8.3×10^{5565714}

[a] for tridiagonal systems only.

(Oberkampf et Roy, 2010)

Operation count

- The operation count for Gaussian Elimination or LU Decomposition is $O(n^3)$, order of n^3.
- For iterative methods, the number of scalar multiplications is $O(n^2)$ at each iteration.
- If the total number of iterations required for convergence is much less than n, then iterative methods are more efficient than direct methods.
- Also iterative methods are well suited for sparse matrices

Algorithme de Thomas (forme simplifiée d'une élimination de Gauss)

Fonction MATLAB

```
function x = TDMAsolver(a,b,c,d)
%a, b, c are the column vectors for the compressed
tridiagonal matrix, d is the right vector
n = length(d); % n is the number of rows

% Modify the first-row coefficients
c(1) = c(1) / b(1);    % Division by zero risk.
d(1) = d(1) / b(1);

for i = 2:n-1
   temp = b(i) - a(i) * c(i-1);
   c(i) = c(i) / temp;
   d(i) = (d(i) - a(i) * d(i-1))/temp;
end

d(n) = (d(n) - a(n) * d(n-1))/( b(n) - a(n) * c(n-1));

% Now back substitute.
x(n) = d(n);
for i = n-1:-1:1
   x(i) = d(i) - c(i) * x(i + 1);
end
```

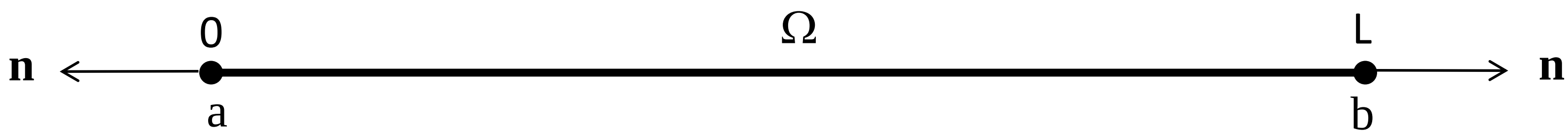
Source: http://en.wikipedia.org/wiki/Tridiagonal_matrix_algorithm

Valide seulement pour des systèmes matriciels tridiagonaux

Exemple 2

- **Transfert de chaleur dans une tige avec convection à la paroi (condition de flux)**

  On considère une tige de longueur L=b-a qu'on désigne par Ω et qu'on représente comme suit:



  Le problème de transfert est gouverné par l'équation de Laplace et les conditions aux frontières suivantes:

$$\left\|\begin{array}{l} -\kappa \dfrac{d^2T}{dx^2} = 0 \ dans\ \Omega \\ T(x=a) = T_a \\ -\kappa \left.\dfrac{dT}{d\mathbf{n}}\right|_{x=b} = \boxed{h_w\left(T - T_\infty\right)} \end{array}\right.$$

Problème elliptique

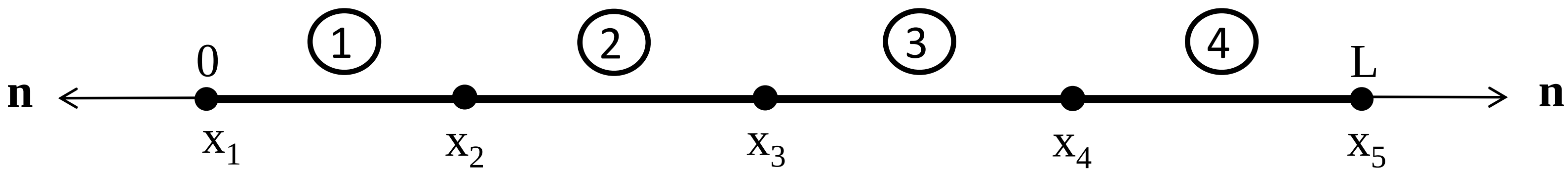
flux de convection

κ : conductivité thermique (W/m·K)

h_w: coefficient de convection (W/m^2·K)

T_∞: température ambiante (K)

On applique une discrétisation géométrique à l'aide de 4 intervalles (mailles):



Aussi, nous avons vu dans un exemple précédent que nous avons sur les nœuds internes la relation de récurrence suivante:

$$\left.\frac{d^2T}{dx^2}\right|_{x_i} \approx \frac{T_{i-1}-2T_i+T_{i+1}}{h^2} \quad \Rightarrow \quad -\kappa\left(T_{i-1}-2T_i+T_{i+1}\right)=0 \;\; pour \;\; i=2,3\, et\, 4$$

Cette relation correspond à l'approximation centrée par différences finies du laplacien.

<u>Traitement des conditions aux frontières</u>

Au point x_1 nous avons une **condition frontière de Dirichlet** en température

Au point x_5 nous avons une **condition frontière de flux de convection**

$$-\kappa\left.\frac{dT}{d\mathbf{n}}\right|_{x=b} = -\kappa\left.\frac{dT}{dx}n_x\right|_{x=b} = -\kappa\left.\frac{dT}{dx}\right|_{x=b} = h_w\left(T-T_\infty\right)$$

Or, en x_5 nous avons $T=T_5$. En adoptant pour la dérivée une **approximation arrière du premier ordre**, $O(h)$, l'expression de la condition de flux de convection selon un schéma de discrétisation par différences finies se ramène à la relation:

$$-\kappa \frac{(T_5 - T_4)}{h} = h_w (T_5 - T_\infty)$$

On rassemble les inconnues à gauche et nous avons:

$$-\frac{\kappa}{h} T_5 - h_w T_5 + \frac{\kappa}{h} T_4 = -h_w T_\infty$$

ou encore

$$T_5 \left(h_w + \frac{\kappa}{h} \right) - \frac{\kappa}{h} T_4 = h_w T_\infty$$

Finalement, nous obtenons le système matriciel suivant:

$$\begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & -\kappa/h & \left(\kappa/h + h_w\right) \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} T_2 \\ T_3 \\ T_4 \\ T_5 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} T_a \\ 0 \\ 0 \\ h_w T_\infty \end{Bmatrix}$$

Forme semi-compacte

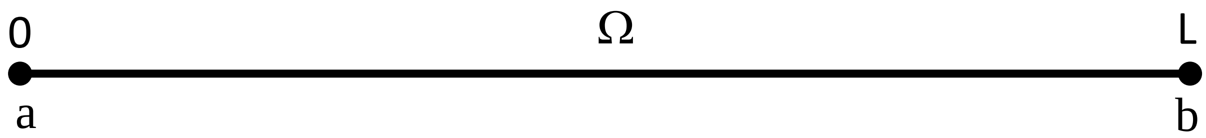
Remarque: nous avons une équation supplémentaire par rapport à l'exemple avec conditions de type Dirichlet-Dirichlet aux frontières.

Question: Quel serait le profil de température si $h_w = 0$? Si $h_w = \infty$?

Exemple 3:

- **Transfert de chaleur en régime transitoire**

  On considère une tige de longueur L=b-a qu'on désigne par Ω et qu'on représente comme suit:



  Le problème de transfert est gouverné par l'équation de la chaleur (ou 2ème loi de Fourier) et les **conditions frontières de type Dirichlet** suivantes:

$$\left\{\begin{array}{l} \rho C_p \dfrac{\partial T}{\partial t} - \kappa \dfrac{\partial^2 T}{\partial x^2} = 0 \; dans \; \Omega \\ T(t,a) = T_a, \; (\text{extrémité de la tige chauffée}) \\ T(t,b) = T_b, \; (\text{extrémité de la tige chauffée}) \\ T(0,x) = T_0, \;\; x \in \Omega \, (\text{conditions initiales}) \end{array}\right.$$

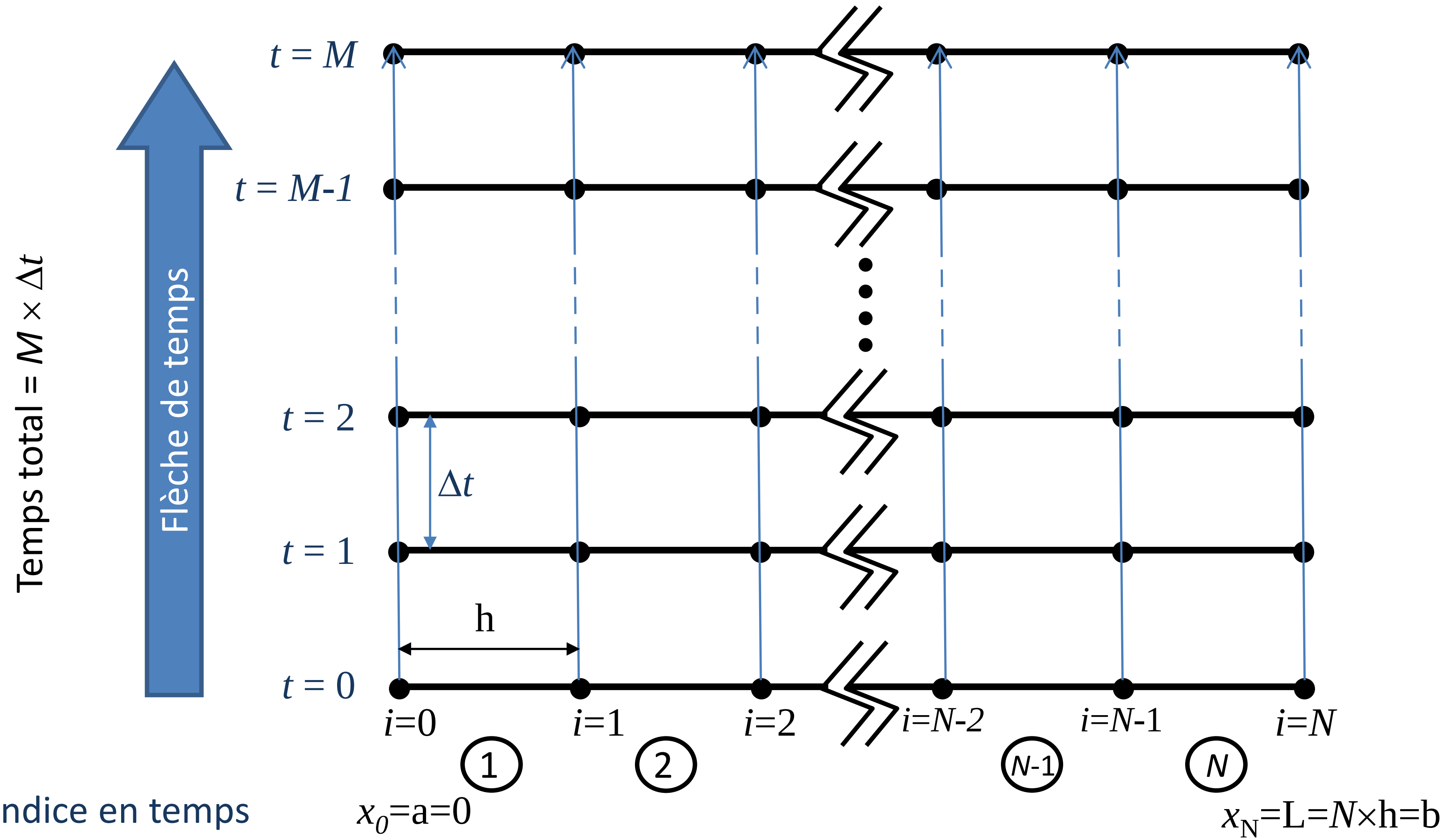
Problème parabolique

ρ: masse volumique (kg/m³)

C_p: capacité calorifique (J/kg·K)

κ: conductivité thermique (W/m·K)

- On expose ci-après la démarche pour résoudre ce problème à l'aide de la méthode des différences finies en espace et d'un schéma explicite d'Euler en temps vu précédemment.
- On divise le domaine en *N* intervalles de longueur *h* et le temps en *M* intervalles (ou « pas de temps ») *Δt* :



t = indice en temps
i = indice en espace

- Nous cherchons maintenant une solution approximée pour $T(t,x)$ soit:

$$T_i^t$$

indice en temps

indice en espace

avec:

- i = 1,2,…,N-1 ⟵ T_0 et T_N connus, $\forall\, t$
- t = 1,2,…,M ⟵ T^0 connu, $\forall\, i$

- On remplace maintenant les dérivées partielles par les approximations choisies:

$$\left.\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}\right|_{i,t} \approx \frac{T_{i+1}^t - 2T_i^t + T_{i-1}^t}{h^2}$$

$$\left.\frac{\partial T}{\partial t}\right|_{i,t} \approx \frac{T_i^{t+1} - T_i^t}{\Delta t}$$ schéma explicite d'Euler

- Le problème devient alors :

Diffusivité thermique

α

$$\frac{T_i^{t+1}-T_i^t}{\Delta t}-\frac{\kappa}{\rho C_p}\frac{T_{i+1}^t-2T_i^t+T_{i-1}^t}{h^2}=0$$

$$\boxed{T_i^{t+1}=T_i^t+\alpha\frac{\Delta t}{h^2}\left(T_{i+1}^t-2T_i^t+T_{i-1}^t\right)}\qquad \text{pour } i=1,2,..,N\text{-}1$$

- **Question :** comment résout-on?
- **Réponse:** on marche en temps à partir de la condition initiale $T_i^0=T_0$. Pas besoin de résoudre de système linéaire car c'est une méthode explicite!

- L'erreur commise varie en O(h^2 + Δ*t*).

- **Question :** ce schéma explicite est-il stable ?

- **Question :** ce schéma explicite est-il stable ?

- **Vérifions ensemble…**

Rappel:

$$x_i^{t+1} = G\, x_i^t + \ \ldots$$

Coefficient d'amplification

$$T_i^{t+1} = T_i^t + \alpha \frac{\Delta t}{h^2}\left(T_{i+1}^t - 2T_i^t + T_{i-1}^t\right)$$

$$T_i^{t+1} = \underbrace{\left(1 - 2\alpha \frac{\Delta t}{h^2}\right)}_{G} T_i^t + \alpha \frac{\Delta t}{h^2}\left(T_{i+1}^t + T_{i-1}^t\right)$$

- Stable sans oscillation si : $0 < G \leq 1$
- Stable avec oscillation si : $-1 \leq G \leq 0$
- Instable si : $G < -1$

$$\left(1 - 2\alpha \frac{\Delta t}{h^2}\right) > 0 \quad \Rightarrow \quad \alpha \frac{\Delta t}{h^2} < \frac{1}{2}$$

Stable sans oscillation

Nombre de Courant diffusive

- **Question :** Que se passe-t-il maintenant si…on remplace les dérivées partielles en temps par l'approximation arrière (schéma implicite) suivante:

$$\left.\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}\right|_{i,t} \approx \frac{T_{i+1}^{t} - 2T_i^{t} + T_{i-1}^{t}}{h^2}$$

$$\cancel{\left.\frac{\partial T}{\partial t}\right|_{i,t} \approx \frac{T_i^{t+1} - T_i^{t}}{\Delta t}}$$

~~schéma explicite d'Euler~~

$$\left.\frac{\partial T}{\partial t}\right|_{i,t} \approx \frac{T_i^{t} - T_i^{t-1}}{\Delta t}$$

schéma implicite d'Euler

$$\frac{T_i^{t} - T_i^{t-1}}{\Delta t} - \alpha\,\frac{T_{i+1}^{t} - 2T_i^{t} + T_{i-1}^{t}}{h^2} = 0$$

On a de façon équivalente en faisant le changement d'indice $t \rightarrow t+1$ et $t-1 \rightarrow t$:

$$\frac{T_i^{t+1} - T_i^{t}}{\Delta t} - \alpha\,\frac{T_{i+1}^{t+1} - 2T_i^{t+1} + T_{i-1}^{t+1}}{h^2} = 0$$

On a de façon équivalente:

$$\frac{T_i^{t+1}-T_i^t}{\Delta t}-\alpha\frac{T_{i+1}^{t+1}-2T_i^{t+1}+T_{i-1}^{t+1}}{h^2}=0$$

On réarrange:

$$h^2\left(T_i^{t+1}-T_i^t\right)-\alpha\Delta t\left(T_{i+1}^{t+1}-2T_i^{t+1}+T_{i-1}^{t+1}\right)=0$$

$$\boxed{-\alpha\Delta t\,T_{i-1}^{t+1}+(h^2+2\alpha\Delta t)T_i^{t+1}-\alpha\Delta t\,T_{i+1}^{t+1}=h^2T_i^t}$$

pour $i = 1,2,.., N$-1

On obtient ainsi un système linéaire de taille N-1 à résoudre au temps t+1 (cf. transparent suivant). C'est une méthode implicite inconditionnellement stable.

- L'erreur commise varie aussi en $O(h^2 + \Delta t)$.
- Il existe des méthodes inconditionnellement stables dont l'erreur varie comme $O(h^2+\Delta t^2)$. Une de celle-ci est la méthode de Crank-Nicolson…

Construction du système matriciel linéaire à l'itération en temps (t+1) pour le transfert de chaleur en régime transitoire aux conditions frontières de Dirichlet

pour $i = 1,2,.., N$-1

$$\boxed{\underbrace{-\alpha\Delta t}_{B}\, T_{i-1}^{t+1} + \underbrace{(h^2 + 2\alpha\Delta t)}_{A} T_i^{t+1} \underbrace{- \alpha\Delta t}_{B}\, T_{i+1}^{t+1} = \underbrace{h^2 T_i^t}_{C_i}}$$

$$\begin{bmatrix} A & B & 0 & 0 & & 0 & 0 & 0 & 0 \\ B & A & B & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & B & A & B & & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & B & A & & 0 & 0 & 0 & 0 \\ & \vdots & & & \ddots & & \vdots & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & & A & B & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & B & A & B & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & & 0 & B & A & B \\ 0 & 0 & 0 & 0 & & 0 & 0 & B & A \end{bmatrix} \begin{bmatrix} T_1^{t+1} \\ T_2^{t+1} \\ T_3^{t+1} \\ T_4^{t+1} \\ \vdots \\ T_{N-4}^{t+1} \\ T_{N-3}^{t+1} \\ T_{N-2}^{t+1} \\ T_{N-1}^{t+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_1 - BT_a \\ C_2 \\ C_3 \\ C_4 \\ \vdots \\ C_{N-4} \\ C_{N-3} \\ C_{N-2} \\ C_{N-1} - BT_b \end{bmatrix}$$

Forme compacte

On devra résoudre ce système autant de fois qu'il y a d'itérations en temps (c-à-d M fois) pour avoir l'évolution du champ de température dans le temps entre 0 et ($M\times\Delta t$) secondes.

$$\boxed{\underbrace{-\alpha\Delta t}_{B}\, T_{i-1}^{t+1} + \underbrace{(h^2 + 2\alpha\Delta t)}_{A} T_i^{t+1} - \underbrace{\alpha\Delta t}_{B}\, T_{i+1}^{t+1} = \underbrace{h^2 T_i^t}_{C_i}}$$

$$\begin{bmatrix}
1 & 0 & 0 & 0 & 0 & & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
B & A & B & 0 & 0 & & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & B & A & B & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & B & A & B & & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & B & A & & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 & & \vdots & & & \ddots & & & \vdots & & \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & & A & B & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & & B & A & B & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & B & A & B & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & & 0 & 0 & B & A & B \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & & 0 & 0 & 0 & 0 & 1
\end{bmatrix}
\begin{bmatrix}
T_0^{t+1} \\ T_1^{t+1} \\ T_2^{t+1} \\ T_3^{t+1} \\ T_4^{t+1} \\ \vdots \\ T_{N-4}^{t+1} \\ T_{N-3}^{t+1} \\ T_{N-2}^{t+1} \\ T_{N-1}^{t+1} \\ T_N^{t+1}
\end{bmatrix}
=
\begin{bmatrix}
T_a \\ C_1 \\ C_2 \\ C_3 \\ C_4 \\ \vdots \\ C_{N-4} \\ C_{N-3} \\ C_{N-2} \\ C_{N-1} \\ T_b
\end{bmatrix}$$

Forme non-compacte

Système matriciel équivalent au précédent

Méthode de Crank-Nicolson :

$$\frac{T_i^{t+1}-T_i^t}{\Delta t}-\alpha\frac{T_{i+1}^{t+1}-2T_i^{t+1}+T_{i-1}^{t+1}}{h^2}=0$$

schéma implicite d'Euler

+

$$\frac{T_i^{t+1}-T_i^t}{\Delta t}-\alpha\frac{T_{i+1}^{t}-2T_i^{t}+T_{i-1}^{t}}{h^2}=0$$

schéma explicite d'Euler

$$\boxed{\frac{T_i^{t+1}-T_i^t}{\Delta t}-\frac{1}{2}\alpha\frac{T_{i+1}^{t+1}-2T_i^{t+1}+T_{i-1}^{t+1}}{h^2}-\frac{1}{2}\alpha\frac{T_{i+1}^{t}-2T_i^{t}+T_{i-1}^{t}}{h^2}=0}$$

- L'erreur commise varie aussi en $O(h^2+\Delta t^2)$.
- Schéma stable inconditionnellement.
- Résolution d'un système linéaire à chaque pas de temps: la matrice est tridiagonale donc la méthode de Thomas peut être utilisée.

Autres schémas numériques (suite):

RAPPEL dans le rappel !

- **Schémas avec discrétisation du terme source (suite):**
  - Adams-Moulton (implicite):

$$x_{i+1} = x_i + \frac{1}{2}\Delta t\,(F_i + F_{i+1})$$

(ordre 2 – $\boxed{\text{Crank-Nicolson)}}$

$$x_{i+1} = x_i + \frac{\Delta t}{24}(9\,F_{i+1} + 19\,F_i - 5\,Fi_{-1} + F_{i-2})$$

(ordre 4)

- **Schémas prédicteur-correcteur :**
  1. Prédiction:

$$\tilde{x}_{i+1} = x_i + \Delta t\, f(t_i, x_i)$$

  2. Correction:

$$x_{i+1} = x_i + \frac{1}{2}\Delta t\,(f(t_i, x_i) + f(t_{i+1}, \tilde{x}_{i+1}))$$

(Crank-Nicolson)

ou

$$x_{i+1} = x_i + \Delta t\, f(t_{i+1}, \tilde{x}_{i+1})$$

(Euler implicite)

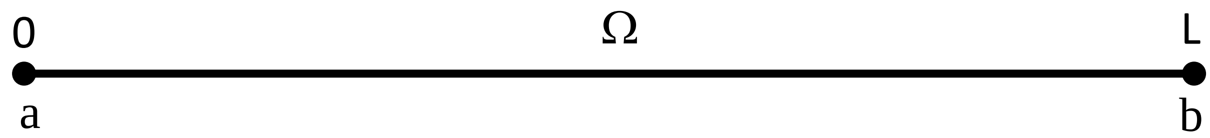
Schémas plus précis car ils utilisent un schéma explicite pour obtenir une approximation de F_{i+1} dans le schéma implicite

Attention: dans cette partie du cours les itérations en temps étaient écrites en indice (*i*) et non en exposant (*t*) comme maintenant.

Exemple 4:

- **Transfert de chaleur adiabatique en régime transitoire**

  On considère une tige de longueur L=b-a qu'on désigne par Ω et qu'on représente comme suit:



Le problème de transfert est gouverné par l'équation de la chaleur (ou 2$^{\text{ème}}$ loi de Fourier) et les **conditions frontières de type Dirichlet et Neumann** suivantes:

$$\left\| \begin{array}{l} \rho C_p \dfrac{\partial T}{\partial t} - \kappa \dfrac{\partial^2 T}{\partial x^2} = 0 \ dans\ \Omega \\ \boxed{\dfrac{\partial}{\partial x} T(t,a) = 0}, \text{(extrémité de la tige isolée)} \\ \boxed{T(t,b) = T_b}, \text{ (extrémité de la tige chauffée)} \\ T(0,x) = T_0, \quad x \in \Omega \text{(conditions initiales)} \end{array} \right.$$

ρ: masse volumique (kg/m^3)

C_p: capacité calorifique (J/kg·K)

κ: conductivité thermique (W/m·K)

- On expose ci-après la démarche pour résoudre ce problème à l'aide de la méthode des différences finies en espace et d'un schéma **explicite** d'Euler en temps vu précédemment.
- On obtient aux nœuds internes la relation de récurrence suivante (cf. exemple précédent):

$$T_i^{t+1} = T_i^t + \alpha \frac{\Delta t}{h^2}\left(T_{i+1}^t - 2T_i^t + T_{i-1}^t\right) \qquad \text{pour } i = 1,2,.., N\text{-}1$$

- **Question:** Comment prend-on en compte la condition de flux nul (condition adiabatique ou condition de symétrie) ?
- **Réponse:** Comme une contrainte à insérer dans le système d'équations de recurrence.

Le schéma de Gear permet d'approximer la dérivée par un schéma avant d'ordre 2, $O(h^2)$, comme suit :

$$\left.\frac{\partial T}{\partial x}\right|_{i,t} \approx \frac{-T_{i+2}^t + 4T_{i+1}^t - 3T_i^t}{2h} = 0$$

On obtient alors la relation suivante:

$$\text{pour } i = 0 : \qquad -T_2^t + 4T_1^t - 3T_0^t = 0$$

On obtient alors la relation suivante:

$$\text{pour } i = 0: \qquad -T_2^t + 4T_1^t - 3T_0^t = 0$$

Ou encore

$$T_0^t = \tfrac{1}{3}(4T_1^t - T_2^t)$$

En remplaçant l'expression de T_0^t,dans l'équation de récurrence pour *i*=1, on obtient le système d'équations suivant:

$$\text{pour } i = 1: \quad \begin{aligned} T_1^{t+1} &= T_1^t + \alpha \frac{\Delta t}{h^2}(T_2^t - 2T_1^t + T_0^t) \\ &= T_1^t + \tfrac{2}{3}\alpha \frac{\Delta t}{h^2}(T_2^t - T_1^t) \end{aligned}$$

et

$$\text{pour } i > 1: \qquad T_i^{t+1} = T_i^t + \alpha \frac{\Delta t}{h^2}\left(T_{i+1}^t - 2T_i^t + T_{i-1}^t\right)$$

Ne reste plus qu'à marcher en temps (schéma explicite) à partir de T(*t*=0,*x*)=T_0 pour obtenir la solution pour tout *t* et x.

- On expose ci-après la démarche pour résoudre ce problème à l'aide de la méthode des différences finies en espace et d'un schéma **implicite** d'Euler en temps vu précédemment.
- On obtient aux nœuds internes l'équation suivante (cf. exemple précédent):

$$T_i^{t+1} = T_i^t + \alpha \frac{\Delta t}{h^2}\left(T_{i+1}^{t+1} - 2T_i^{t+1} + T_{i-1}^{t+1}\right) \quad \text{pour } i = 1,2,.., N\text{-}1$$

$$\boxed{-\alpha\Delta t\, T_{i-1}^{t+1} + (h^2 + 2\alpha\Delta t)T_i^{t+1} - \alpha\Delta t\, T_{i+1}^{t+1} = h^2 T_i^t}$$

- Pour la condition de flux nul nous prenons le schéma de Gear permettant d'approximer la dérivée par un schéma avant d'ordre 2, $O(h^2)$, comme suit :

$$\left.\frac{\partial T}{\partial x}\right|_{i,t+1} \approx \frac{-T_{i+2}^{t+1} + 4T_{i+1}^{t+1} - 3T_i^{t+1}}{2h} = 0$$

On obtient alors la relation suivante:

$$\text{pour } i = 0 : \qquad -T_2^{t+1} + 4T_1^{t+1} - 3T_0^{t+1} = 0$$

Nous avons donc:

$$\text{pour } i = 0 : \qquad -T_2^{t+1} + 4T_1^{t+1} - 3T_0^{t+1} = 0$$

et

$$\text{pour } i = 1, N\text{-}1 :$$

$$\boxed{\underbrace{-\alpha\Delta t}_{B}\, T_{i-1}^{t+1} + \underbrace{(h^2 + 2\alpha\Delta t)}_{A} T_i^{t+1} \underbrace{- \alpha\Delta t}_{B}\, T_{i+1}^{t+1} = \underbrace{h^2 T_i^t}_{C_i}}$$

$$\begin{bmatrix} -3 & 4 & -1 & 0 & & 0 & 0 & 0 & 0 \\ B & A & B & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & B & A & B & & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & B & A & & 0 & 0 & 0 & 0 \\ & & \vdots & & \ddots & & \vdots & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & & A & B & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & B & A & B & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & & 0 & B & A & B \\ 0 & 0 & 0 & 0 & & 0 & 0 & B & A \end{bmatrix} \begin{bmatrix} T_0^{t+1} \\ T_1^{t+1} \\ T_2^{t+1} \\ T_3^{t+1} \\ \vdots \\ T_{N-4}^{t+1} \\ T_{N-3}^{t+1} \\ T_{N-2}^{t+1} \\ T_{N-1}^{t+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ C_1 \\ C_2 \\ C_3 \\ \vdots \\ C_{N-4} \\ C_{N-3} \\ C_{N-2} \\ C_{N-1} - BT_b \end{bmatrix}$$

Forme semi-compacte

Nous avons donc:

$$\text{pour } i = 0 : \qquad -T_2^{t+1} + 4T_1^{t+1} - 3T_0^{t+1} = 0$$

et

$$\text{pour } i = 1, N\text{-}1 :$$

$$\boxed{\underbrace{-\alpha\Delta t}_{B}\, T_{i-1}^{t+1} + \underbrace{(h^2 + 2\alpha\Delta t)}_{A} T_i^{t+1} \underbrace{- \alpha\Delta t}_{B}\, T_{i+1}^{t+1} = \underbrace{h^2 T_i^t}_{C_i}}$$

$$\begin{bmatrix} -3 & 4 & -1 & 0 & 0 & & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ B & A & B & 0 & 0 & & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & B & A & B & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & B & A & B & & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & B & A & & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ & & \vdots & & & \ddots & & & \vdots & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & & A & B & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & & B & A & B & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & B & A & B & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & & 0 & 0 & B & A & B \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} T_0^{t+1} \\ T_1^{t+1} \\ T_2^{t+1} \\ T_3^{t+1} \\ T_4^{t+1} \\ \vdots \\ T_{N-4}^{t+1} \\ T_{N-3}^{t+1} \\ T_{N-2}^{t+1} \\ T_{N-1}^{t+1} \\ T_N^{t+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ C_1 \\ C_2 \\ C_3 \\ C_4 \\ \vdots \\ C_{N-4} \\ C_{N-3} \\ C_{N-2} \\ C_{N-1} \\ T_b \end{bmatrix}$$

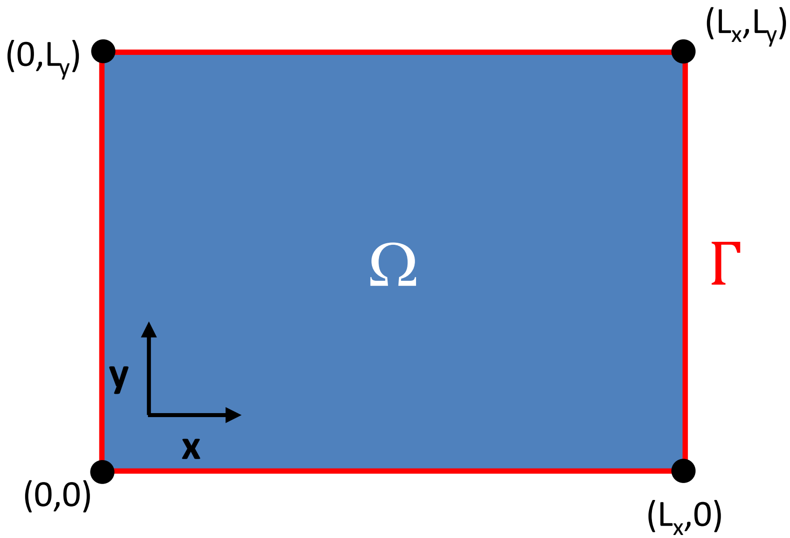
Forme non-compacte

Système matriciel équivalent au précédent (forme non-compacte)

Exemple 5

- **Transfert de chaleur dans une plaque (problème en 2D) :**

On considère une plaque de dimensions $L_x \times L_y$ que l'on désigne par Ω et qu'on représente comme suit:



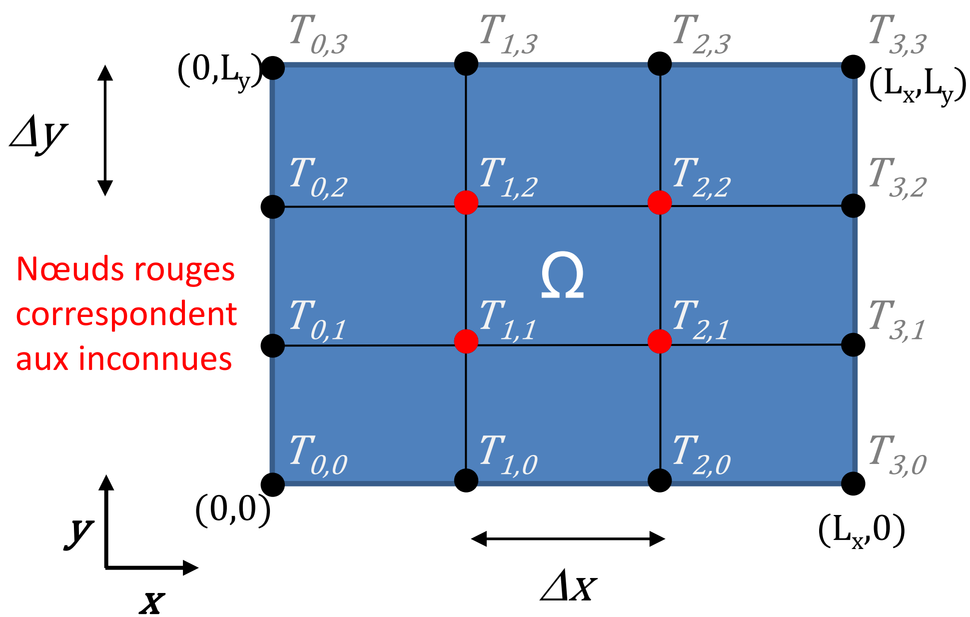
- Le problème de transfert est gouverné par l'équation elliptique et **les conditions aux frontières de type Dirichlet** suivantes:

$$\left\| \begin{array}{c} -\kappa \nabla^2 T = 0 \text{ dans } \Omega \\ T = T_0 \; sur \; \Gamma \end{array} \right.$$

- κ: conductivité thermique (W/m·K)

Nous allons résoudre ce problème à l'aide de la méthode des différences finies

- On divise la plaque en sous-domaines à l'aide de divisions en intervalles de taille Δx et Δy le long des axes x et y, respectivement. Pour fixer les idées, considérons la division (c-à-d le maillage) suivante:



Prenons les conditions frontières suivantes:

$$T_0(x,y) = \begin{cases} 1 & \text{si } y = 0 \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

$T_{i,j}$ est une approximation de $T(x_i, y_j)$

- On remplace le laplacien par des schémas de différentiation d'ordre 2:

$$\nabla^2 T = \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} = 0 \qquad \text{avec}$$

$$\left.\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}\right|_{i,j} \approx \frac{T_{i+1,j} - 2T_{i,j} + T_{i-1,j}}{(\Delta x)^2}$$

$$\left.\frac{\partial^2 T}{\partial y^2}\right|_{i,j} \approx \frac{T_{i,j+1} - 2T_{i,j} + T_{i,j-1}}{(\Delta y)^2}$$

- Il est courant de prendre $\Delta x = \Delta y = h$.

$$\nabla^2 T = \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} = 0$$

avec

$$\left.\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}\right|_{i,j} \approx \frac{T_{i+1,j} - 2T_{i,j} + T_{i-1,j}}{h^2}$$

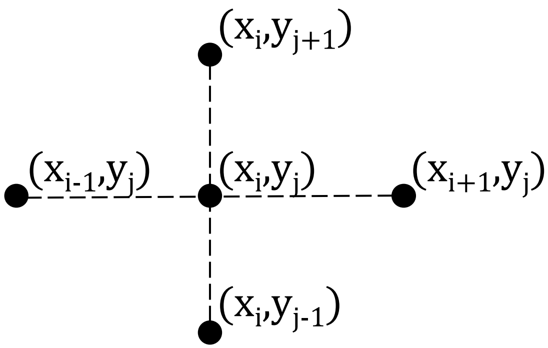
$$\left.\frac{\partial^2 T}{\partial y^2}\right|_{i,j} \approx \frac{T_{i,j+1} - 2T_{i,j} + T_{i,j-1}}{h^2}$$

- Le problème devient donc:

pour $i = 1,2$ et $j = 1,2$:

$$\boxed{-T_{i+1,j} + 4T_{i,j} - T_{i-1,j} - T_{i,j-1} - T_{i,j+1} = 0}$$

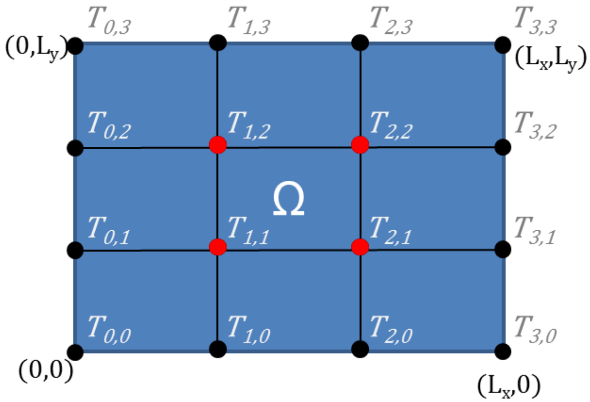
- Ceci constitue une approximation à 5 points:



On peut montrer que l'erreur est donnée par:

$$\frac{h^2}{12}\left[\frac{\partial^4 T(\xi,\zeta)}{\partial x^4} + \frac{\partial^4 T(\xi,\zeta)}{\partial y^4}\right], \qquad \forall(\xi,\zeta) \in \Omega$$

$$\boxed{-T_{i+1,j} + 4T_{i,j} - T_{i-1,j} - T_{i,j-1} - T_{i,j+1} = 0}$$



- Pour ***i* =1 et *j* =1**, nous avons donc:

$$-T_{2,1} + 4T_{1,1} - T_{0,1} - T_{1,0} - T_{1,2} = 0$$

$$-T_{2,1} + 4T_{1,1} - T_{1,2} = T_{0,1} + T_{1,0} = 0 + 1 = 1$$

- Pour ***i* =2 et *j* =1**:

$$-T_{3,1} + 4T_{2,1} - T_{1,1} - T_{2,0} - T_{2,2} = 0$$

$$4T_{2,1} - T_{1,1} - T_{2,2} = T_{2,0} + T_{3,1} = 1 + 0 = 1$$

- Pour ***i* =1 et *j* =2**:

$$-T_{2,2} + 4T_{1,2} - T_{0,2} - T_{1,1} - T_{1,3} = 0$$

$$-T_{2,2} + 4T_{1,2} - T_{1,1} = T_{0,2} + T_{1,3} = 0 + 0 = 0$$

- Pour ***i* =2 et *j* =2**:

$$-T_{3,2} + 4T_{2,2} - T_{1,2} - T_{2,1} - T_{2,3} = 0$$

$$4T_{2,2} - T_{1,2} - T_{2,1} = T_{3,2} + T_{2,3} = 0 + 0 = 0$$

- Construisons le système matriciel sachant que:

❶ $-T_{2,1} + 4T_{1,1} - T_{1,2} = 1$

❷ $4T_{2,1} - T_{1,1} - T_{2,2} = 1$

❸ $-T_{2,2} + 4T_{1,2} - T_{1,1} = 0$

❹ $4T_{2,2} - T_{1,2} - T_{2,1} = 0$

$$\begin{array}{c} ❶ \\ ❷ \\ ❸ \\ ❹ \end{array} \begin{bmatrix} 4 & -1 & -1 & 0 \\ -1 & 4 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 4 & -1 \\ 0 & -1 & -1 & 4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} T_{1,1} \\ T_{2,1} \\ T_{1,2} \\ T_{2,2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Résolution: par une méthode directe si la taille du système n'est pas trop grande ou par une méthode iterative comme celle de Gauss-Seidel ou du gradient conjugué. On obtient des matrices dont la largeur de bande est petite. Il existe des algorithmes qui exploitent cette propriété pour sauver de l'espace mémoire et du temps calcul.

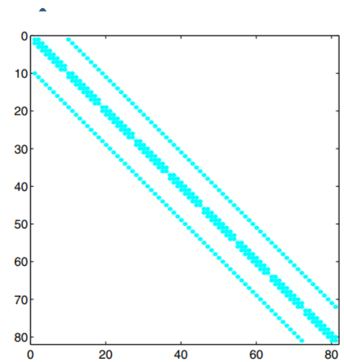
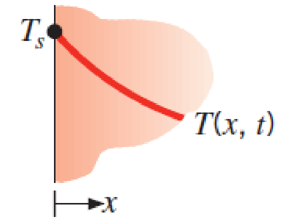


Figure 8.7. Structure de la matrice associée au schéma à cinq points en ordonnant les inconnues selon l'ordre lexicographique

Différents types de conditions frontières (ou conditions aux limites):

1. Condition frontière de Dirichlet:

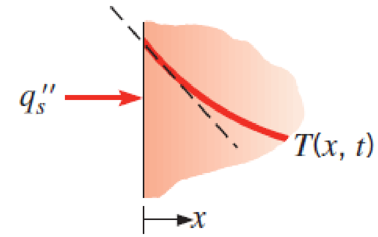
$$T(0,t) = T_s = \text{constante}$$



2. Conditions frontières de Neumann:

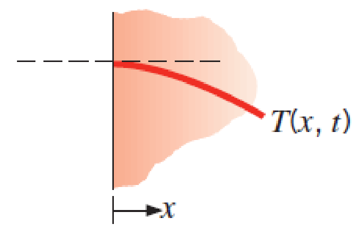
   a. Flux constant:

$$-\kappa \left.\frac{\partial T}{\partial x}\right|_{x=0} = q_s'' = \text{constant}$$



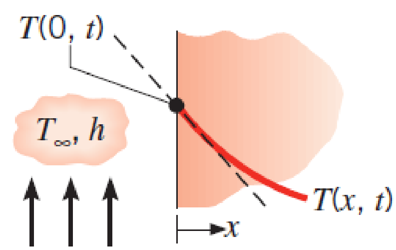
   b. Flux nul (condition adiabatique et de symétrie):

$$\left.\frac{\partial T}{\partial x}\right|_{x=0} = 0$$



3. Condition frontière de Robin (flux de convection):

$$-\kappa \left.\frac{\partial T}{\partial x}\right|_{x=0} = h(T_\infty - T(0,t))$$



(adapté de Bergman et al., 2011)

Remarques sur la méthode des différences finies

Permet de résoudre une variété d'EDP:

- elliptique (probl. stationnaire de diffusion): $$\alpha \nabla^2 U + f = 0$$
- parabolique (probl. instationnaire de diffusion): $$\frac{\partial U}{\partial t} - \alpha \nabla^2 U + f = 0$$
- hyperbolique (probl. instationaire d'advection): $$\frac{\partial U}{\partial t} - v \cdot \nabla U + f = 0$$
- mixte transport (probl. instationnaire d'advection-diffusion): $$\frac{\partial U}{\partial t} - (v \cdot \nabla U + \alpha \nabla^2 U) + f = 0$$

- **Avantage:** très simple à implanter, notamment pour générer la grille de calcul;
- **Inconvénient:** mal adaptée aux géométries complexes.

Différences entre les méthodes numériques

$$L\left(u, \frac{\partial u}{\partial x}, \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \frac{\partial u}{\partial t}, \dots\right) + f = 0$$

+ Boundary conditions
+ Initial conditions (transient)

PDE (strong formulation)

$$\begin{bmatrix} k_{11} & k_{12} & \cdots & k_{1n} \\ k_{21} & k_{22} & \cdots & k_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ k_{n1} & k_{n2} & \cdots & k_{nn} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_n \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \vdots \\ f_n \end{Bmatrix}$$

Implicit transient or stationnary

OR

$$\begin{cases} u_1^{t+1} = g_1(u_0^t, u_1^t, u_2^t) \\ u_2^{t+1} = g_2(u_1^t, u_2^t, u_3^t) \\ \vdots \\ u_n^{t+1} = g_n(u_{n-1}^t, u_n^t, u_{n+1}^t) \end{cases}$$

Explicit transient

Nodal algebraic equations obtained from...

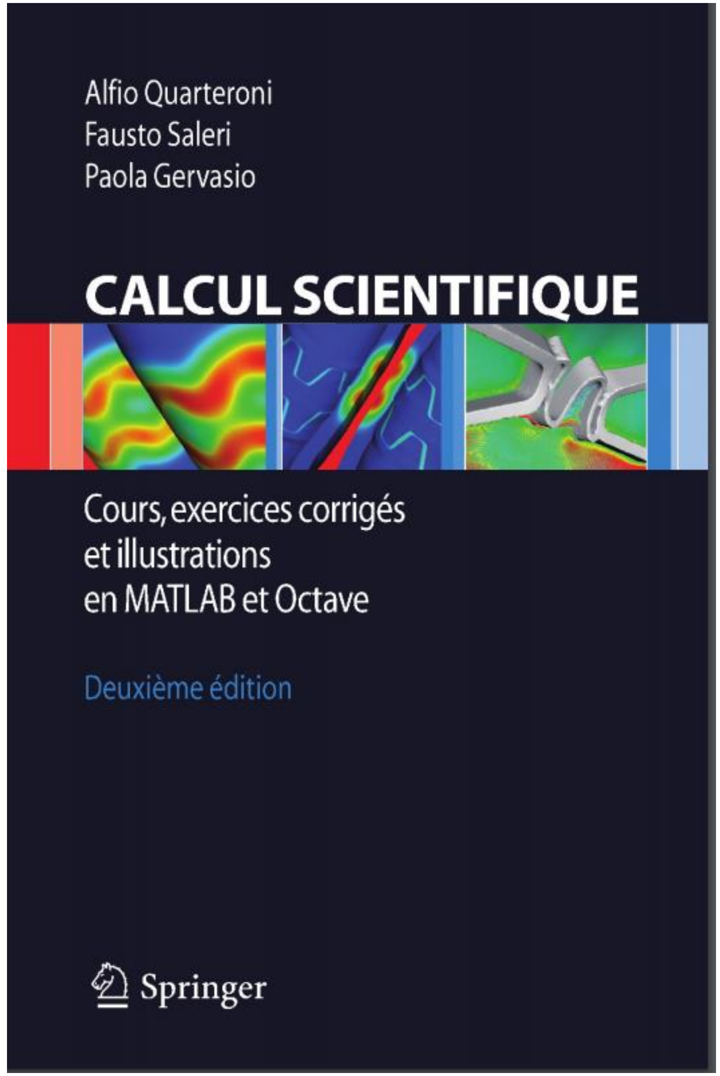
$$u, \nabla u, \nabla^2 u, \frac{\partial u}{\partial t}$$

FDM — *Ready-to-use FD approximation schemes* → u_i^t

FVM — *Green-Ostrogradski's theorem* → $u, \nabla u, \cancel{\nabla^2 u}, \frac{\partial u}{\partial t}$ — *FD approximation schemes* → u_i^t

FEM — *Weak formulation* → $u, \nabla u, \cancel{\nabla^2 u}, \frac{\partial u}{\partial t}$ — *Interpolation functions* → u_i^t

Lectures complémentaires suggérées



MR1: Chapitre 8
(MDF et MEF)