Calcul scientifique

Jocelyne Erhel - projet ALADIN -

INRIA-RENNES

- Arithmétique flottante
- Résolution d'équations différentielles
- Résolution d'équations aux dérivées partielles
- Simulation du comportement d'un matériau composite

Cours en mécanique - Novembre-Décembre 2001

Résolution d'équations différentielles

- schéma d'Euler explicite
- schéma d'Euler implicite
- exemples

Méthodes à un pas

$$\begin{cases} u'(t) = f(u(t)),\ t \in [0,T] \\ u(0) = u_0 \end{cases}$$

Solution exacte $u^*(t)$

Discrétisation de l'intervalle $[0,T]$

Pas de temps Δt avec $T = N\Delta t$

$t_0 = 0, t_1 = \Delta t, \dots, t_n = n\Delta t, \dots, t_N = T$

Approximation de la solution

$u_n \simeq u^*(t_n)$

Récurrence u_{n+1} à partir de u_n

Schéma d'Euler explicite

Euler explicite - schéma

Exemple

$$\begin{cases} u'(t) = \lambda u(t),\ t \in [0,T] \\ u(0) = u_0 \end{cases}$$

avec $\lambda < 0$

Solution exacte $u^*(t) = u_0 \exp(\lambda t)$

Schéma

Approximation de $u'(t_n)$ par $\frac{u_{n+1} - u_n}{\Delta t}$

Approximation de $\lambda u(t_n)$ par λu_n

$$u_{n+1} = u_n + \Delta t(\lambda u_n)$$

Calcul immédiat

Voir demo sous Matlab

Euler explicite - précision

Convergence

$\lim_{\Delta t \to 0}(u_n - u^*(t_n)) = 0$

Erreur locale

$u_{n+1} - v(t_{n+1})$, avec v solution de $v'(t) = f(v(t))$ et $v(t_n) = u_n$
Erreur locale en $O(\Delta t^2)$

Erreur globale

Erreur globale $u_n - u^*(t_n)$ en $O(\Delta t)$

Schéma d'ordre 1

Interactions avec les erreurs d'arrondi

$u_{n+1} = u_n + \lambda \Delta t u_n$: Absorption pour Δt très petit

Euler explicite - stabilité

Solution exacte vers l'infini

$\lambda < 0$ donc $\lim_{t\to\infty} u^*(t) = 0$

Solution approchée vers l'infini

étude de $\lim_{n\to\infty} u_n$

$u_{n+1} = u_n + \lambda \Delta t u_n = (1 + \lambda \Delta t) u_n$

$u_n = (1 + \lambda \Delta t)^n u_0$

$\lim_{n\to\infty} u_n = 0 \Leftrightarrow |\lambda| \Delta t < 2$

schéma conditionnellement stable

Euler explicite - positivité

Signe de la solution exacte

Si $u_0 > 0$ alors $u^*(t) > 0, \forall t$

Signe de la solution approchée

étude du signe de u_n

Si $u_n > 0$ alors $u_{n+1} > 0 \Leftrightarrow |\lambda|\Delta t < 1$

Condition de positivité

Schéma d'Euler implicite

Euler implicite - schéma

Exemple

$$\begin{cases} u'(t) = \lambda u(t),\ t \in [0,T] \\ u(0) = u_0 \end{cases}$$

Schéma

Approximation de $u'(t_{n+1})$ par $\frac{u_{n+1}-u_n}{\Delta t}$

Approximation de $\lambda u(t_{n+1})$ par λu_{n+1}

$$u_{n+1} = u_n + \Delta t(\lambda u_{n+1})$$

Résoudre une équation

$$u_{n+1} = \frac{u_n}{1 - \lambda \Delta t}$$

Voir demo sous Matlab

Euler implicite - précision - stabilité - positivité

Précision

Schéma d'ordre 1

Stabilité

$u_{n+1} = u_n/(1 - \lambda\Delta t)$
$u_n = (1 - \lambda\Delta t)^{-n} u_0$
$\lim_{n\to\infty} u_n = 0$

schéma inconditionnellement stable

Positivité

Si $u_n > 0$ alors $u_{n+1} > 0$

Schéma qui conserve sans condition la positivité

Autres schémas

Schémas à un temps caractérisés par

- le caractère explicite : calculs immédiats
- ou le caractère implicite : système d'équations à résoudre
- la précision définie par l'ordre du schéma
- la stabilité garantie au besoin par des conditions sur le pas de temps
- la conservation du signe ou d'invariants

Schémas avec pas de temps variable et ordre variable

Bibliothèques numériques

Exemples

Un exemple en cinétique chimique (1/2)

Réactions chimiques

$$
\begin{array}{rcl}
NO_2 + h\nu & \xrightarrow{k_1} & NO + O(^{+++}) \\
O(^{+++}) + O_2 & \xrightarrow{k_2} & O_3 \\
NO + O_3 & \xrightarrow{k_3} & O_2 + NO_2
\end{array}
$$

Système d'équations différentielles

Concentrations $c_1 = [O(^{+++})]$, $c_2 = [NO]$, $c_3 = [NO_2]$ et $c_4 = [O_3]$
s_2 source de NO

$$
\left\{
\begin{array}{rcl}
\dot{c_1} & = & k_1 c_3 - k_2 c_1, \\
\dot{c_2} & = & k_1 c_3 - k_3 c_2 c_4 + s_2, \\
\dot{c_3} & = & k_3 c_2 c_4 - k_1 c_3, \\
\dot{c_4} & = & k_2 c_1 - k_3 c_2 c_4.
\end{array}
\right. \tag{1}
$$

Un exemple en cinétique chimique (2/2)

Propriétés du système différentiel

Système raide
Concentrations positives
Conservation de la masse moléculaire

Schémas numériques

Schéma d'Euler explicite
Schéma d'Euler implicite
Schéma implicite d'ordre élevé

voir demo sous Matlab

Exemples

voir demos proposées par Matlab

Résolution d'équations aux dérivées partielles

- méthodes de différences finies
- méthodes d'éléments finis
- exemples
- résolution d'EDP en temps et en espace

Différences finies

Différences finies - schéma

Exemple

$$\begin{cases} u''(x) = f(x),\ x \in [0,L] \\ u(0) = a,\ u(L) = b \end{cases}$$

Discrétisation de l'espace

Pas d'espace Δx

$x_0 = 0,\ x_1 = \Delta x, \ldots,\ x_i = i\Delta x, \ldots,\ x_{N+1} = L$

Approximations

$$u_i \simeq u^*(x_i)$$
$$u''(x_i) \simeq \frac{u_{i+1}+u_{i-1}-2u_i}{(\Delta x)^2}$$

Schéma de Différences Finies

$$u_{i+1} + u_{i-1} - 2u_i = (\Delta x)^2 f(x_i),\ i = 1,\ldots,N$$
$$u_0 = u(0),\ u_{N+1} = u(L)$$

Différences finies - calcul

Systèmes d'équations à résoudre

$$Au = (\Delta x)^2 b + c$$

avec
$A = tridiag(1, -2, 1) \in \mathbb{R}^{N \times N}$
$u = (u_i) \in \mathbb{R}^N$
$b = (f(x_i)) \in \mathbb{R}^N$
$c \in \mathbb{R}^N$, $c(1) = -u(0)$, $c(N) = -u(L)$, $c(i) = 0$, $i = 2, \dots, N-1$

Système linéaire creux tridiagonal

Éléments finis

Éléments Finis

Exemple

$$\begin{cases} u''(x) = f(x),\ x \in [0,L] \\ u(0) = a,\ u(L) = b \end{cases}$$

Discrétisation de l'espace

pas d'espace Δx

$x_0 = 0,\ x_1 = \Delta x,\ x_i = i\Delta x,\ x_{N+1} = L$

Approximations

Fonctions de base linéaires par morceaux

$v_i(x) = 0$ si $x \neq x_i$ et $v_i(x) = 1$ si $x = x_i$

Approximation de la solution linéaire par morceaux

$u(x) = \sum_{j=1}^{N} u_j v_j(x)$ et $u(0) = a,\ u(L) = b$

Formulation variationnelle

Produit par v_i et intégration sur $[0\ L]$
$\int_0^L u''(x)v_i(x)dx = \int_0^L f(x)v_i(x)dx$

Intégration par parties
$-\int_0^L u'(x)v_i'(x)dx = \int_0^L f(x)v_i(x)dx$

Approximation de u
$\sum_{j=1}^N (-\int_0^L v_j'(x)v_i'(x)dx)u_j = \int_0^L f(x)v_i(x)dx$

Elements Finis - calcul

Système d'équations à résoudre

$A = (a_{ij})$ avec $a_{ij} = -\int_0^L v_j'(x) v_i'(x) dx$
$b = (b_i)$ avec $b_i = \int_0^L f(x) v_i(x) dx +$ Conditions aux Limites
$u = (u_j)$
$\sum_{j=1}^N a_{ij} u_j = b_i$ ou $Au = b$

Système linéaire creux tridiagonal

Comparaison Différences Finies et Elements Finis

Cas d'une grille régulière

Les Éléments Finis linéaires par morceaux
sont équivalents aux Différences Finies précédentes
Système linéaire creux structuré (pentadiagonal, etc)

Cas d'une géométrie quelconque

Maillage d'éléments finis en triangles ou tétraèdres
Système linéaire creux quelconque

Précision et stabilité des méthodes DF et EF

Précision des méthodes

Méthodes précédentes d'ordre 1
Autres méthodes d'ordre p, $p > 1$
Preuves de précision plus rigoureuses en Éléments Finis

Stabilité

Conditions de positivité pour certains problèmes
Oscillations numériques pour certains problèmes

Exemples

Un exemple de convection-diffusion - schéma centré

Équations

$$\begin{cases} -u''(x) + Ru'(x) = f(x), x \in [01] \\ u(0) = 0,\ u(1) = 1 \end{cases}$$

Schéma centré de Différences Finies

$$u_i'' \simeq \frac{u_{i+1} + u_{i-1} - 2u_i}{(\Delta x)^2}$$

Dérivée centrée

$$u_i' \simeq \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{(2\Delta x)}$$

Système d'équations

$$c_i = \Delta x R_i / 2$$

$$\begin{cases} (-u_{i-1} + 2u_i - u_{i+1}) + c_i(u_{i+1} - u_{i-1}) = (\Delta x)^2 f_i, \quad i = 1, \ldots, n \\ u_0 = 0 \ ; \ u_{N+1} = 1 \end{cases}$$

Un exemple de convection-diffusion - schéma décentré

Dérivée décentrée

si $r \geq 0,\ u'_i \simeq \frac{u_i - u_{i-1}}{\Delta x}$
si $r \leq 0,\ u'_i \simeq \frac{u_{i+1} - u_i}{\Delta x}$

Système d'équations

$$\begin{cases} a^+ = \frac{1}{2}(a + |a|) \text{ et } a^- = \frac{1}{2}(a - |a|) \\ c_i = \Delta x R_i \\ (-u_{i-1} + 2u_i - u_{i+1}) + (-c_i^+ u_{i-1} + |c_i| u_i + c_i^- u_{i+1}) = (\Delta x)^2 f_i, \quad i = 1, \ldots, r \\ u_0 = 0 \ ; \ u_{N+1} = 1 \end{cases}$$

Un exemple de convection-diffusion - positivité

Positivité de la solution exacte u^*

Si $f = 0$, alors $0 \leq u^* \leq 1$

Si $f = 0$ et R constant, solution $u^*(x) = \frac{1-exp(Rx)}{1-exp(R)}$

Schéma centré

Oscillations avec valeurs négatives

Schéma décentré

Pas d'oscillations avec valeurs approchées entre 0 et 1

Voir demo sous Matlab

Résolution d'EDP en temps et en espace

EDP en temps et en espace

Deux phases : discrétisation en espace puis en temps

Discrétisation en espace

$$\frac{du}{dt}(t) + Au(t) = b(t),\ u(t) \in \mathbb{R}^N$$

Discrétisation en temps

Euler explicite : calcul immédiat

$$u_{n+1} = (I - \Delta t A) u_n + \Delta t\ b$$

Euler implicite : système d'équations à résoudre

$$(I + \Delta t A) u_{n+1} = u_n + \Delta t\ b$$

Un exemple

$$\begin{cases} \pi^2 \frac{\partial u}{\partial t}(x,t) = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x,t),\ t \in [0,T],\ x \in [0,1] \\ u(0,t) = 0, \\ \pi e^{-t} + \frac{\partial u}{\partial x}(1,t) = 0,\ t \in [0,T] \\ u(x,0) = \sin(\pi x),\ x \in [0,1] \end{cases}$$

Voir demo sous Matlab