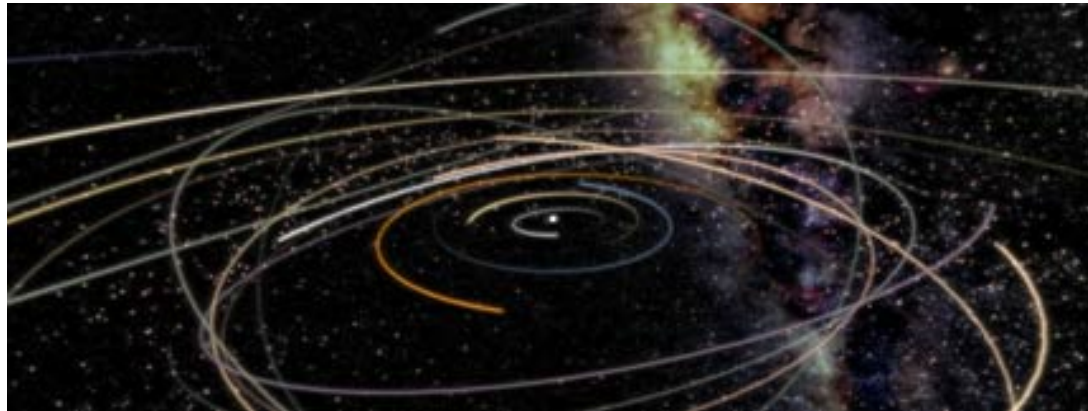


# Introduction à la simulation numérique. Quelques exemples en formation planétaire

**Sébastien Charnoz**

Université Paris Diderot

AIM / IPGP



**Labex UnivEarths**

# Situations où l'ordinateur est nécessaire

Objet est inaccessible

- \* Etoiles
- \* Objet de l'astrophysique
- \* Objets infiniment petits ou grand

Objet n'existe pas / ou pas encore physiquement => étudier son comportement théorique

- \* Conception des véhicules
- \* Réacteur nucléaire
- \* Conception de bâtiments, d'infra structures etc..
- \* Objets Abstraits/ Imaginaires (mais obéissant à des lois, systèmes dynamiques)

Soit pour essayer d'explorer une idéalisation abstraite d'un objet réel

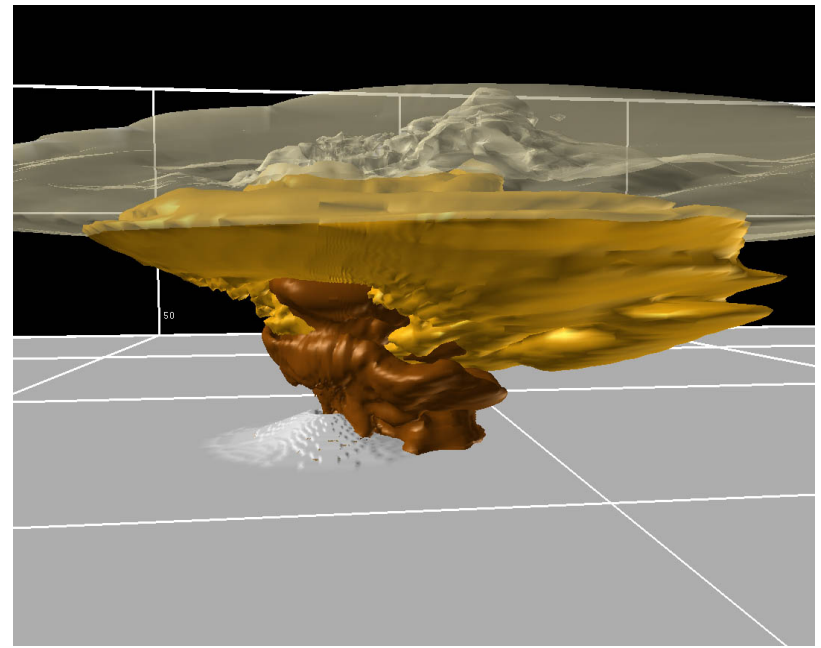
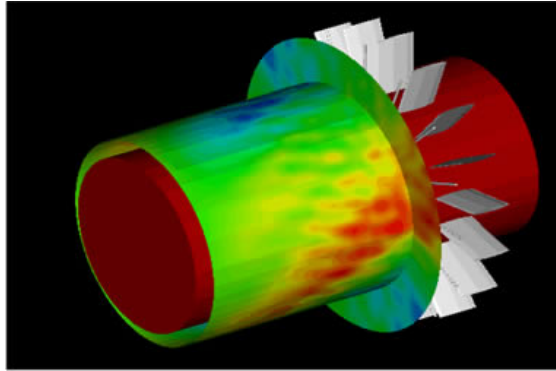
- Cerveau / Réseau de neurones

Soit par ce que la complexité d'un calcul est grande :

- casser un code, simulations multi-agents, intelligence artificielle

**Une SIMULATION est un modèle  
Mathématique**

**une idéalisation \*IMPARFAITE\***



**Quand le nombre d'opérations à effectuer commence  
être grand (~ comparable aux performance des meilleurs ordinateurs)  
=> CALCUL HAUTE PERFORMANCE**

# L'outil de base



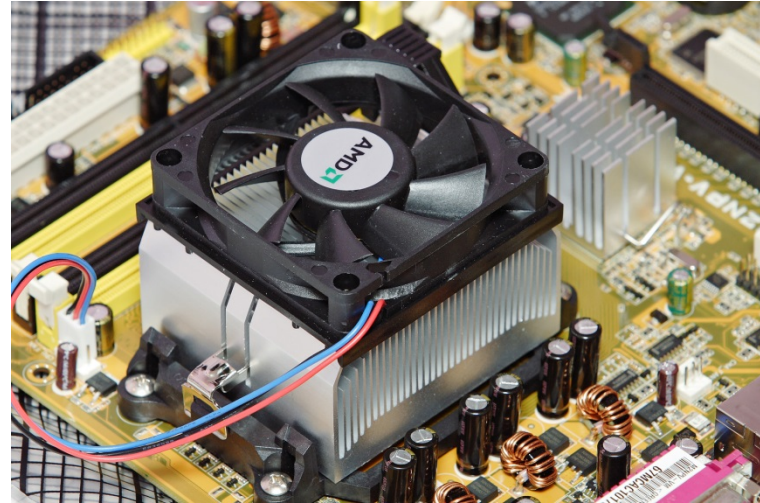
Traditionnellement : 1 microprocesseur (unité de calcul)

1 microprocesseur ~ 1, 000 -100,000 opérations par seconde...

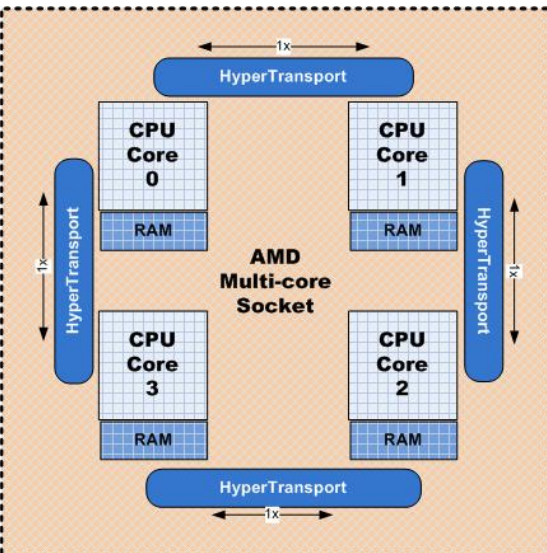
Mais ce n'est plus suffisant



**Problème** : la vitesse des microprocesseurs n'augmente plus : limite physique de refroidissement.



**Nouvelle architecture** pour gagner de la puissance : Monteur les procs. En parrallèle  
=> Clusters de calculs



- Problèmes de communication
- Problèmes de programmation !!

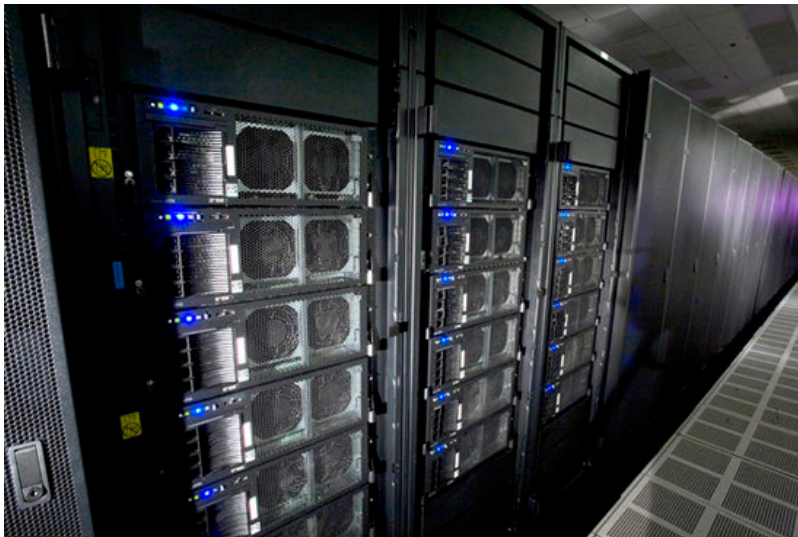
## Quelques unes des machines les plus puissantes en Octobre 2013

Machine ayant le plus grand nombre de processeur  
Tianhe-2 (Voie Lactée), Jiangzhu (Chine)  
National University of Defense and Technologie



320000 processeurs

# TITAN : Cray XT5-HE ( [Oak Ridge National Laboratory](#) )



Cray XT5-HE Opteron Six Core 2.6 GHz

Combien de processeurs ?

**224 256 processeurs**

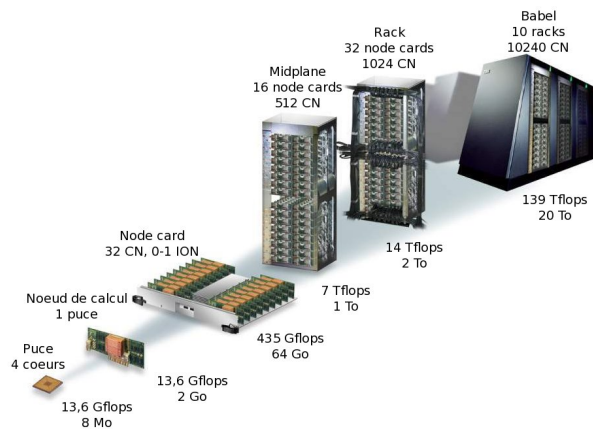
AMD x86\_64 Opteron Six Core 2600 MHz (10.4 GFlops)



# Les capacités de calcul en France : Babel

## IDRIS / IBM Blue Gene

40 960 Coeurs



## super calculateurs TERA du CEA



Plus grands centres de calcul en France :  
(dans le TOP 50)

IDRIS (CNRS)  
TOTAL  
EDF R&D  
CEA

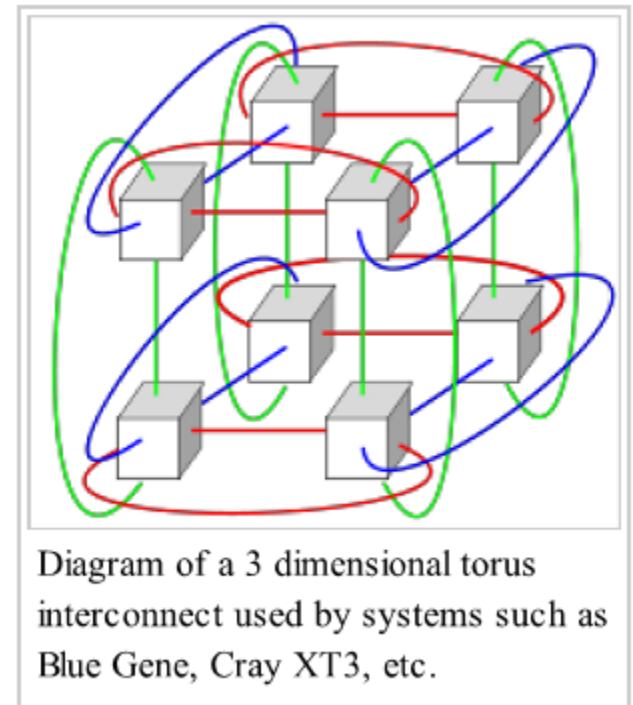
## Mare Nostrum (Barcelone)



Copyright 2005. Barcelona Supercomputing Center - BSC

Mare Nostrum





Importance des communications : difficultés de programmation.

Grands calculs : les communications sont gérée « manuellement » (MPI) =>  
Temps de latence peut être important

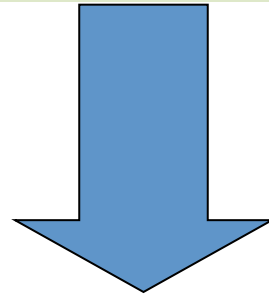
# Qu'est ce que la simulation numérique ?

## Quelques exemples

*« Un programme sur ordinateur qui simule un système physique en « résolvant » les équations de la Physique de manière exacte »*

FINALITE : Créer un objet virtuel, une simulation, pour faire des des MESURES et caractériser son EVOLUTION  
(recherche, Ingénierie, etc...)

=> Objet auquel on n'a pas accès



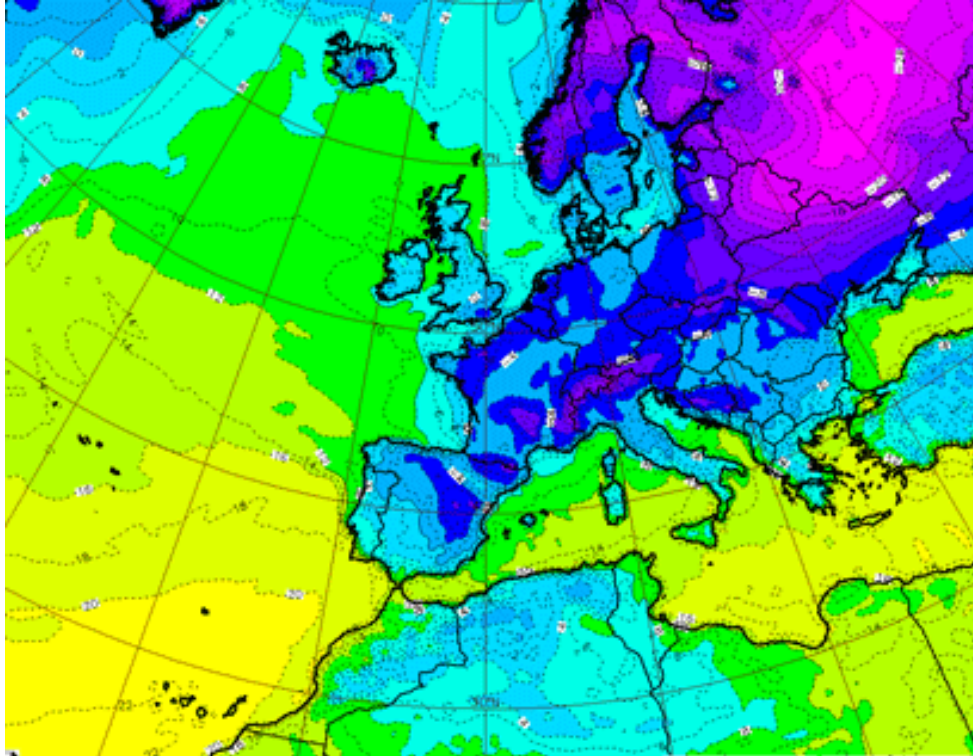
HYPER-REALISME mais pas d'interactivité (pour l'instant)

Transfer : Simulation Numérique => Jeu vidéo de simulation



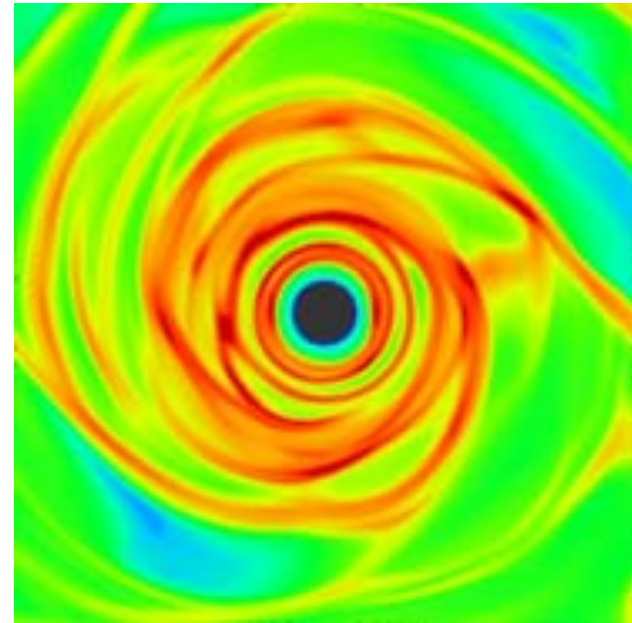
# EXEMPLES DE CALCULS HAUTE PERFORMANCE

Prévision météorologique  
(code ARPEGE utilisé par Météo France)

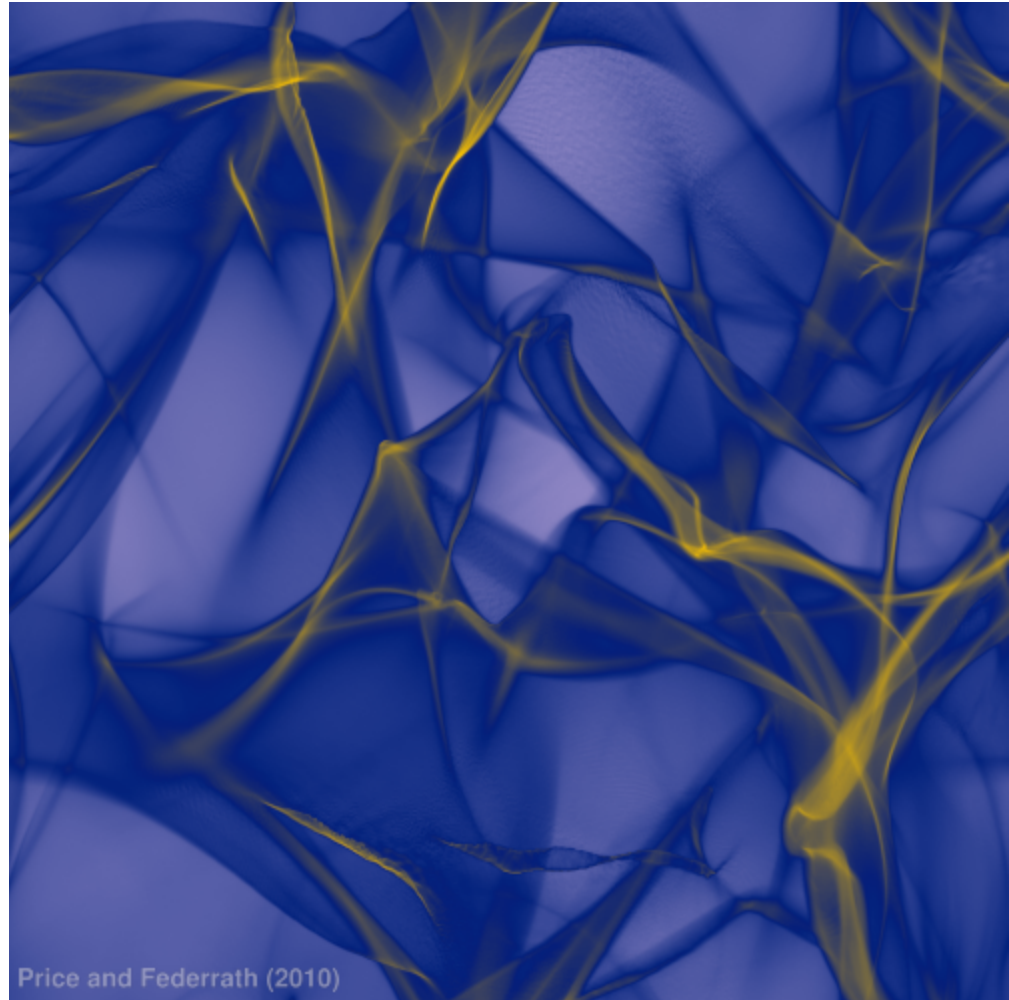
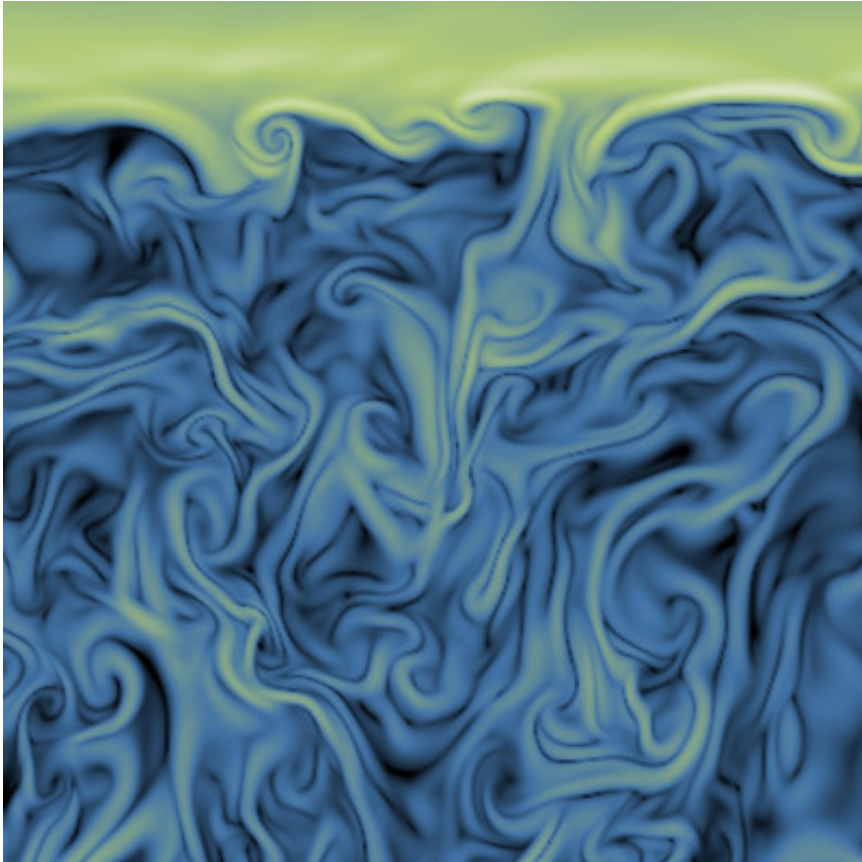


Grille de ARPEGE

Ecoulement des fluides



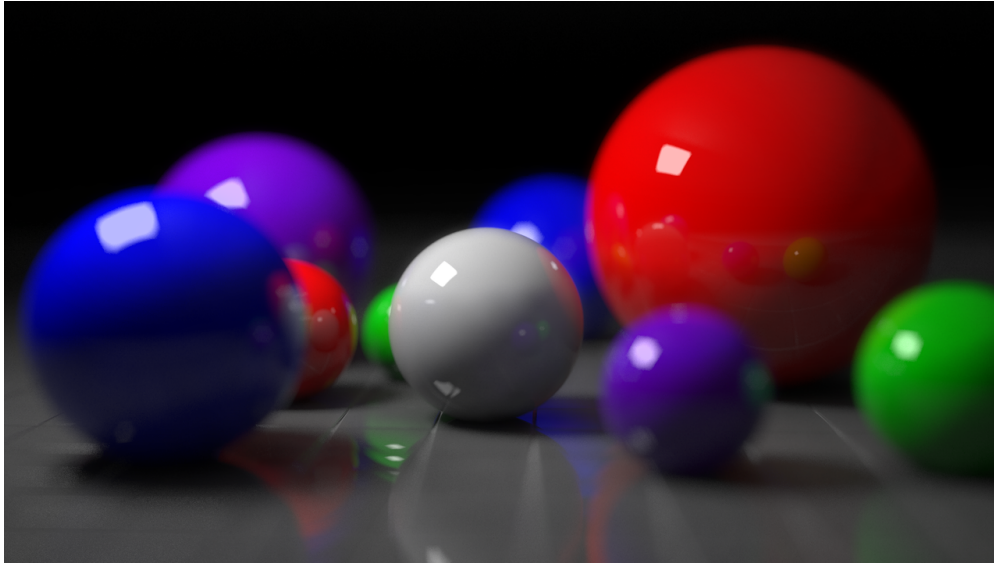
## Turbulence



ZEUS



# Propagation de la lumière (transfert radiatif) dans la limite optique géométrique



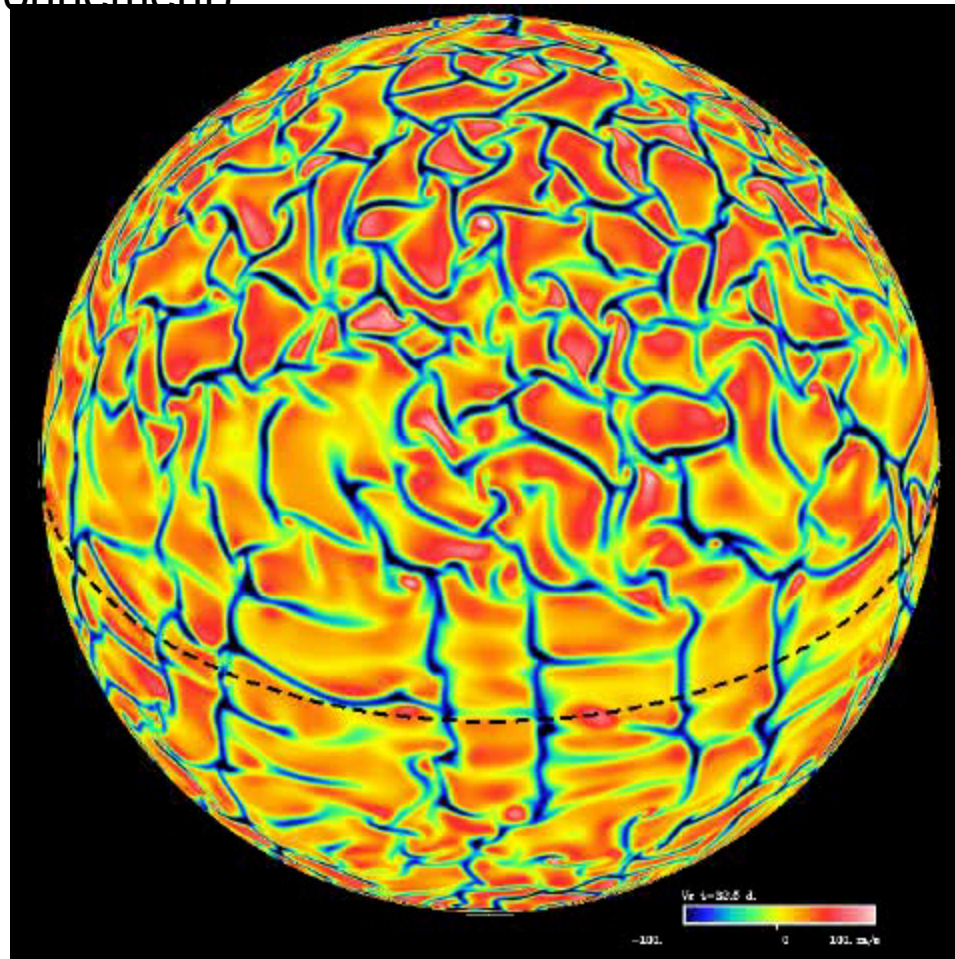
Ray Tracing

Simulations multi-groupes



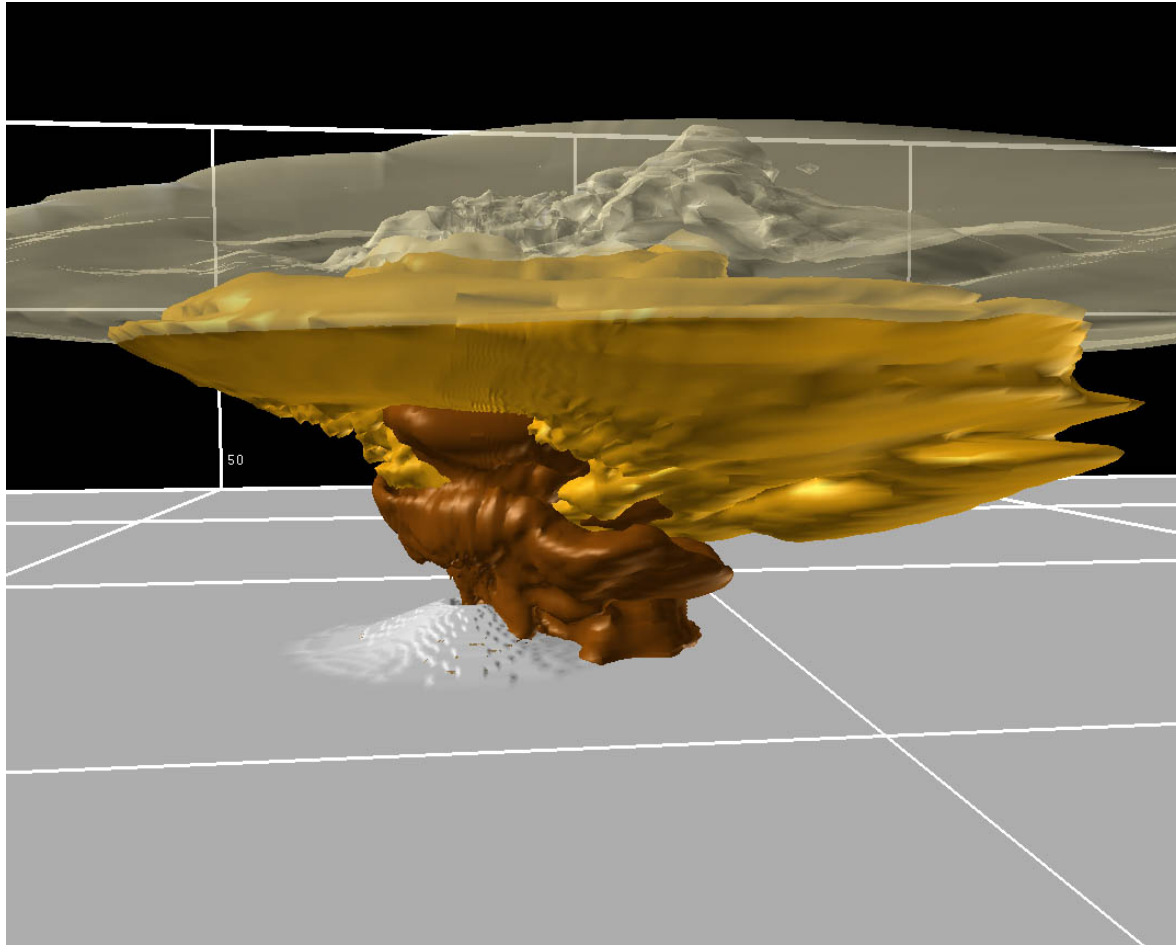
# Convection Solaire

(Hydro + Rayonnement)



AIM

# Volcanisme



# QUE FAIT UN ORDINATEUR ?

*Les 4 opérations ( +, -, X, / )*

+

*Stocker des chiffres en mémoire*

+

Afficher les résultats

C'est tout !!

Mais il le fait très vite (d'où sont intérêt)

# Avantages de l'ordinateur

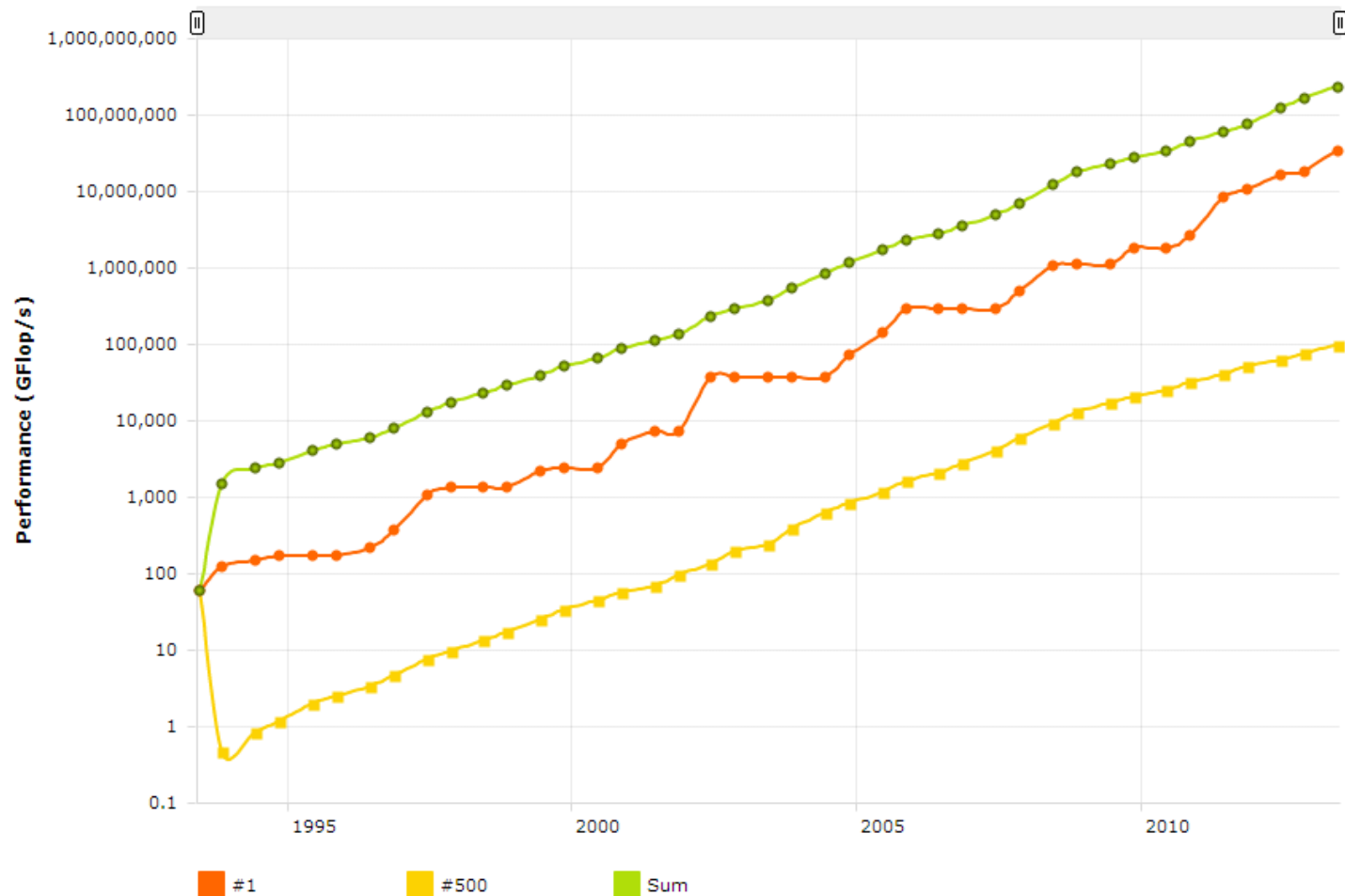
## - Rapidité de calculs

Unité : le FLOP (FLoating Point Operation)

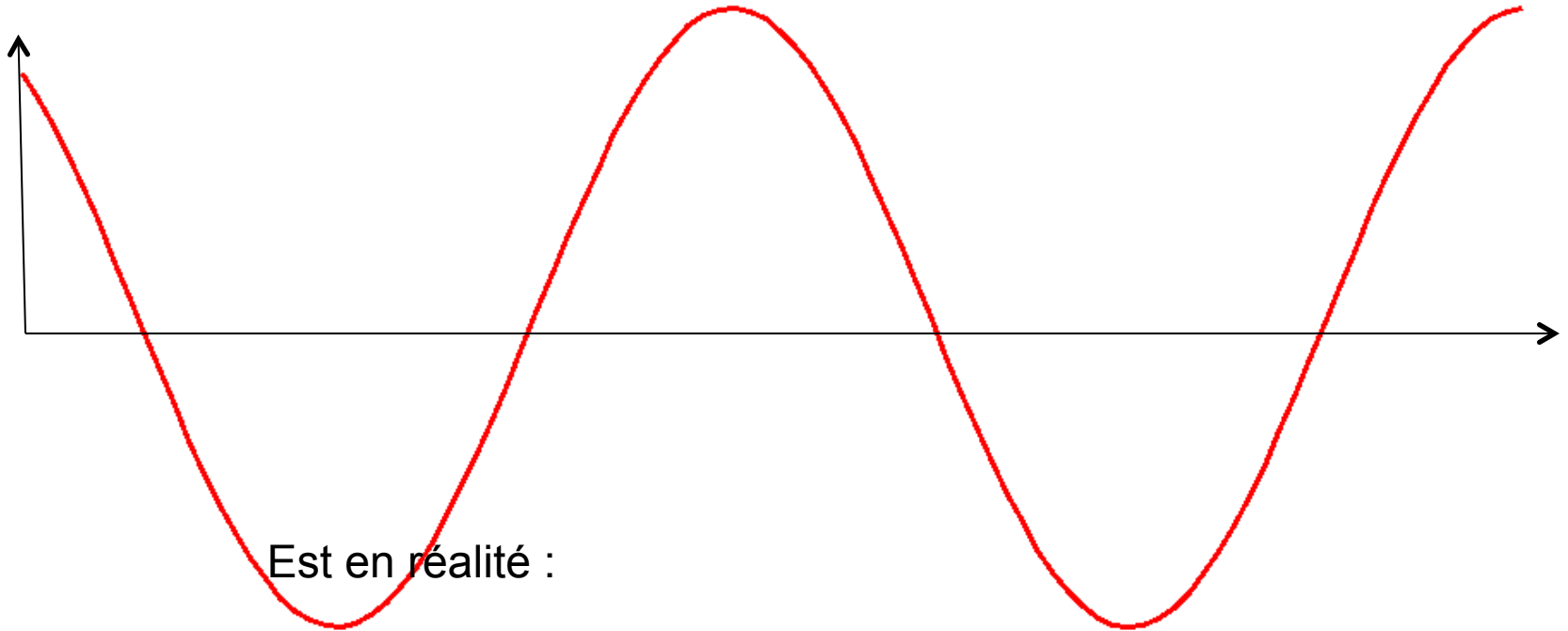
PC : ~ GFLOP

A l'heure actuelle : On atteint le PETAFLOP ( $\sim 10^{15}$  opérations par secondes)

## -grande mémoire

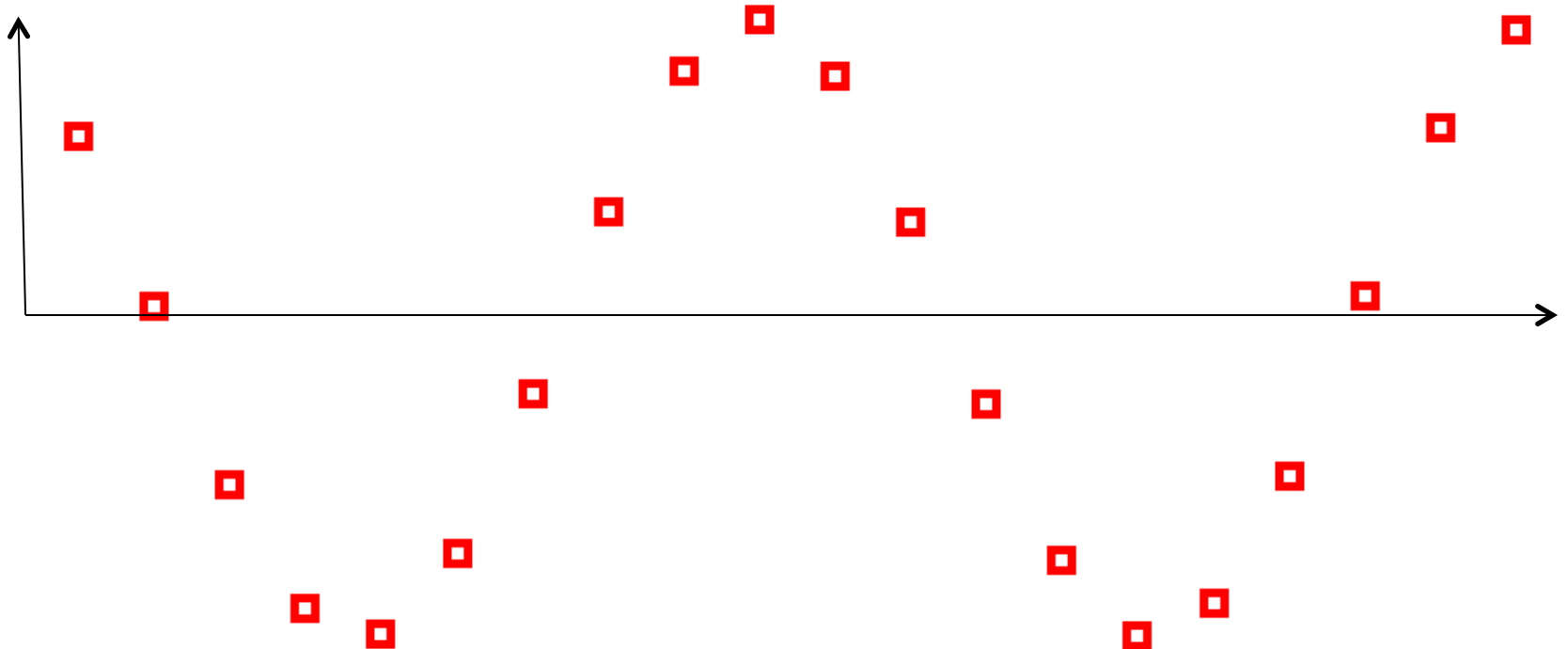


Pour un ordinateur , ceci :  $f(x) = \cos(x)$





Cela : ....



Je vous laisse imaginer les difficultés que cela entraîne...

Bienvenue dans le monde de la simulation numérique !!

# **Limitation de la machine => Calcul Fini ( nombres entiers)**

- Les chiffres sont représentés avec un nombre fini de décimales ( $\sim 10-15$ ) !!
- Nombre fini d'opérations

**Nombreuses conséquences qui conditionnent TOUT le calcul scientifique et TOUTE l'approche du calcul numérique (et TOUT ce cours...)**

- Tout calcul est approché
- Tout calcul devient rapidement inexacte

**$\Rightarrow$  Nécessité d'inventer nouvelles (ALGORITHMES) pour conduire un c**  
**De la manière la plus performantes sans perte de précision**

# Comment concevoir une simulation numérique ?

**1- Il faut tout d'abord identifier les LOIS auxquelles obéissent le système que l'on veut simuler**

**=> Dépend de la discipline (Physique, Mathématiques, etc..)**

**2- Il faut trouver une manière de représenter ces lois sur une machine**

**=> Algorithme de résolution**

**La machine ensuite exécute le calcul à très grande vitesse**

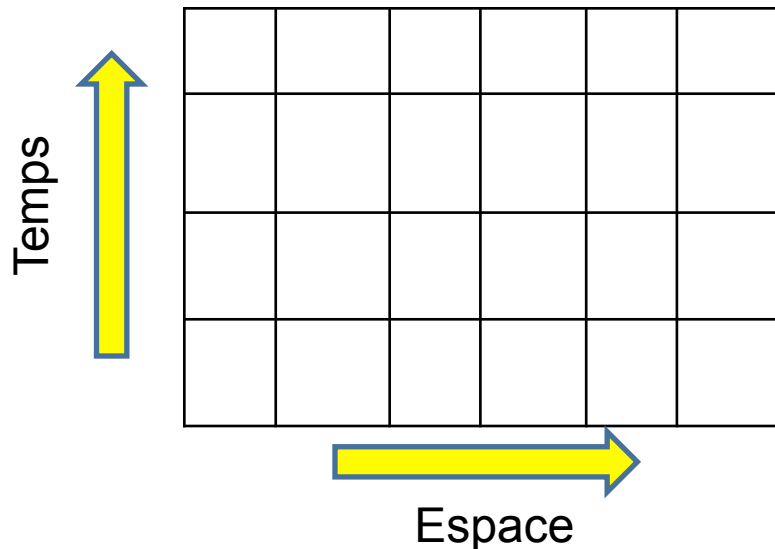
## Calculateur fini : comment représenter l'espace et le temps ?

en utilisant uniquement :

- Les nombres (0,1,2 .....)
- Les 4 opérations ?



L'espace temps est représenté sous forme d'un GRILLE



# Faire évoluer le « monde virtuel » consiste à faire évoluer des chiffres dans les grilles en fonction de lois prédéterminées

Exemple hyper simple :

Deux objets qui rentrent en collision et rebondissent, un lourd (rouge) un léger (jaune)

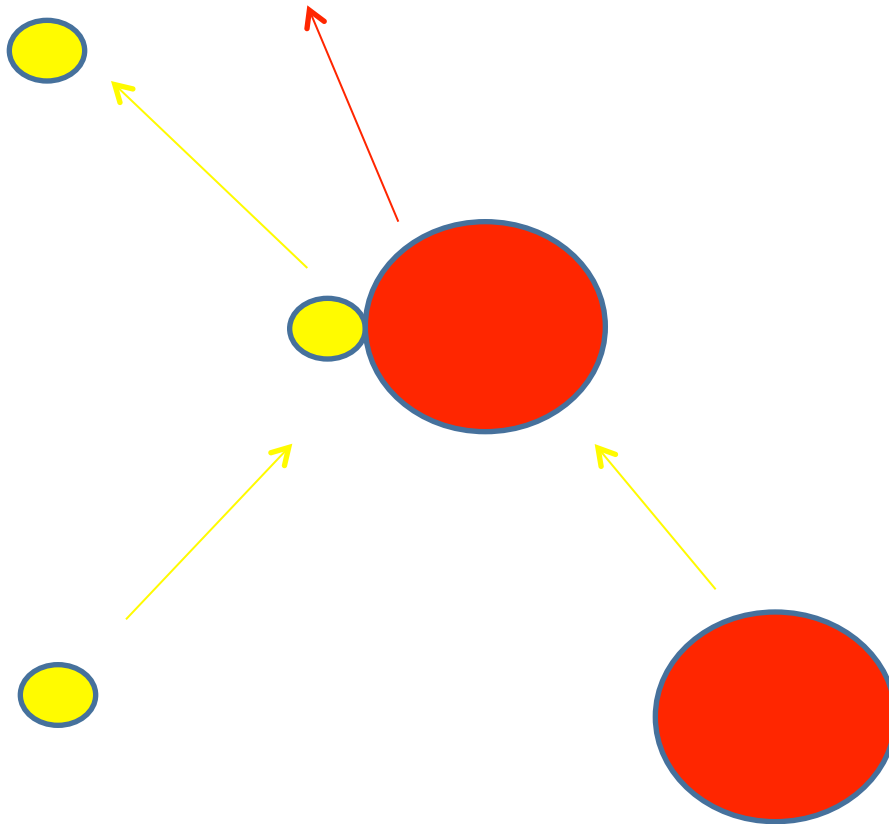


Diagram illustrating a 2D grid representing a virtual world, with axes labeled **Temps** (Time) and **Espace** (Space).

1	2	0	0	0	0
	1	2	0	0	0
0	0	3	0	0	0
0	0	1	2	0	0
0	1	0	0	2	0
1	0	0	0	0	2

# **La grille de calcul est la manifestation de l'imperfection du calculateur**

- ⇒ Calculateur fini, Calculateur discret**
- ⇒ Plus cette grille est fine (résolution)**
- ⇒ plus le calcul est réaliste**
- ⇒ Plus le calcul est lent**

**Il est très difficile d'évaluer la validité d'un calcul numérique**

**=>**

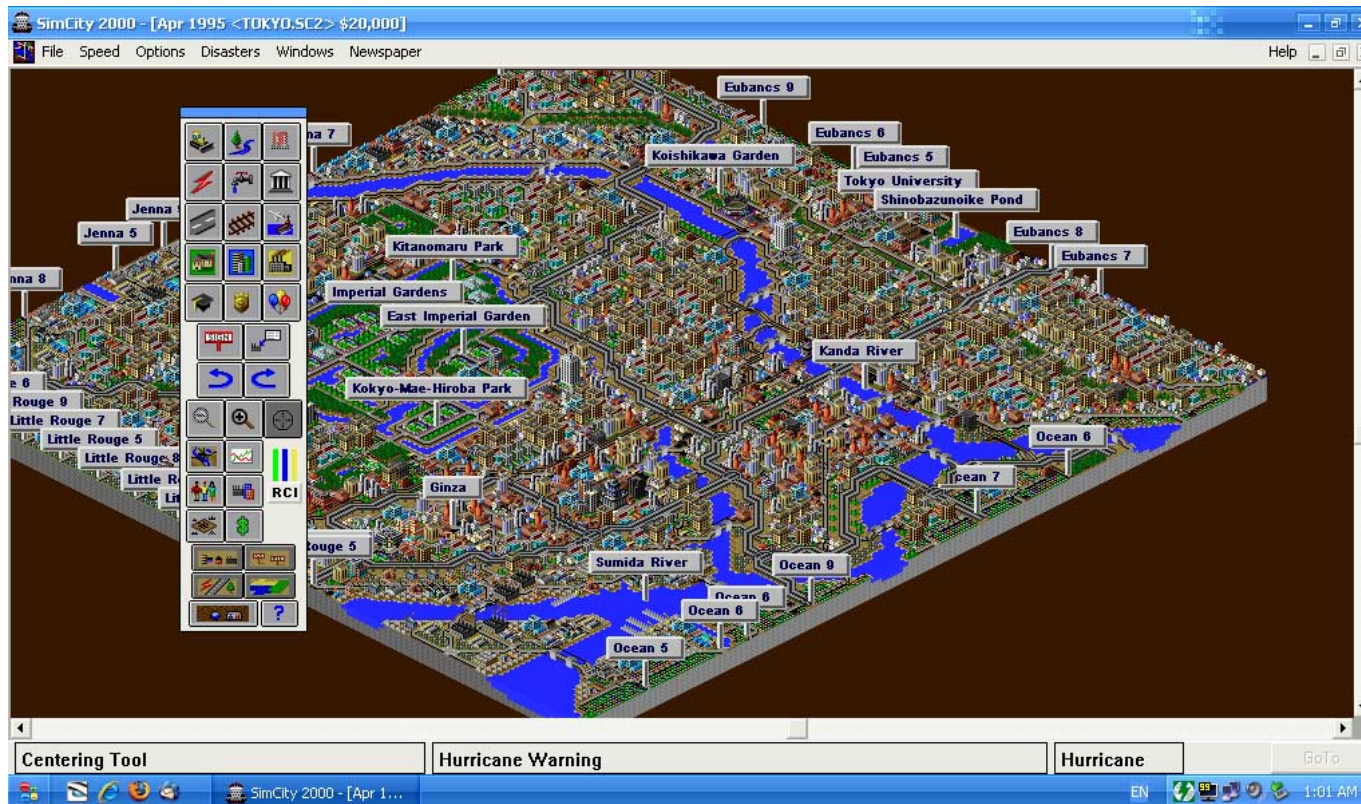
**Expérience numérique à comparer aux expériences physiques**

**=> Lois Vs. conditions expérimentales**

## EXEMPLES DE SIMULATIONS ... LUDIQUES

### Domaine privilégié des lois => Le Jeu

Un jeu est défini par un ensemble de lois (règles), qui s'appliquent sur des objets => très adapté au passage sur la machine.



Sim city



Une simulation primitive...

- Mouvement des objets
- Bonne 3D
- Utilisation des lois de la géométrie pour visualiser le système

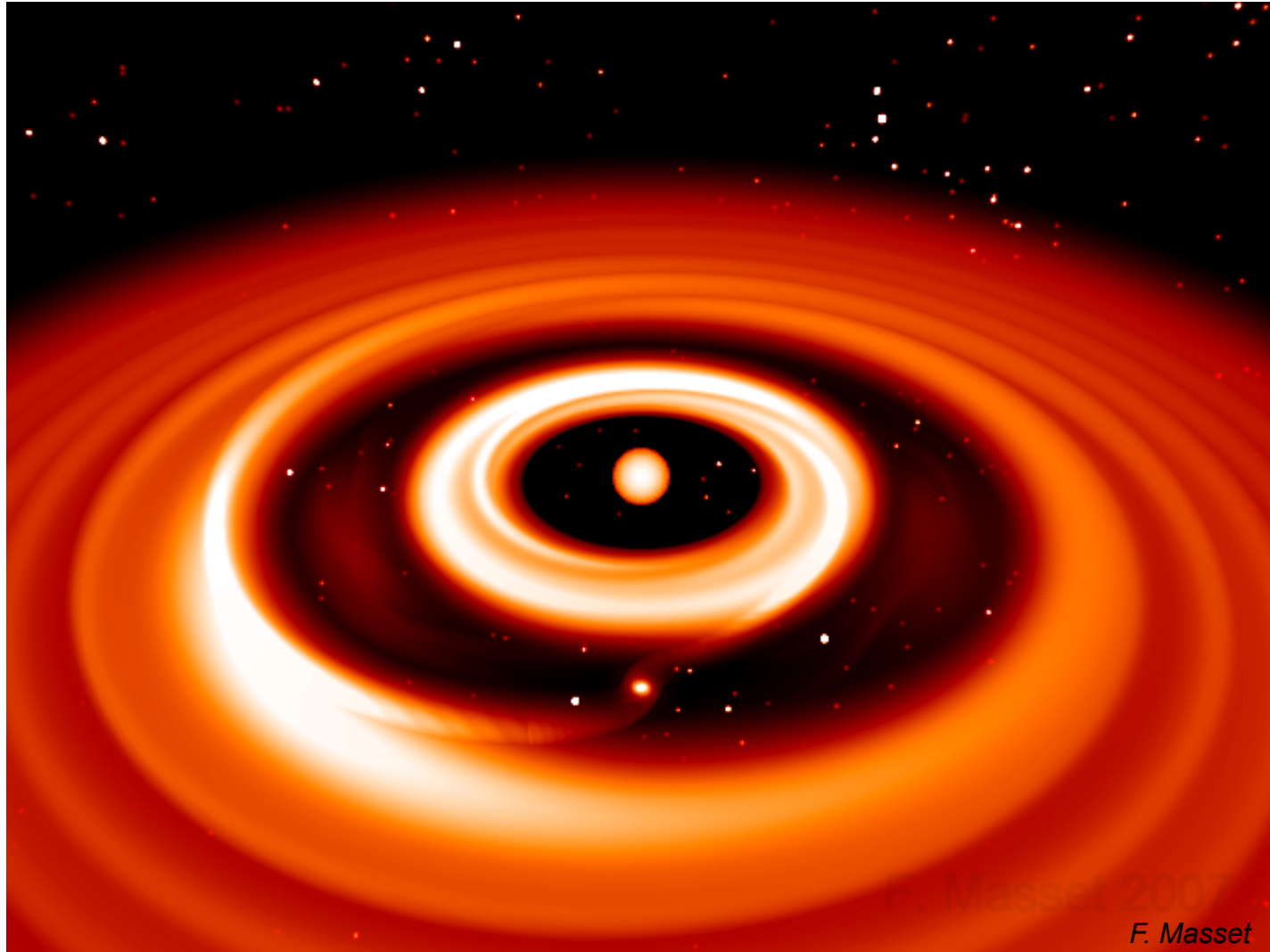
**Un aspect important du jeu, c'est *l'interactivité***

**Les simulations numériques ne sont pas faites pour être interactives  
(.... Pour l'instant...)**

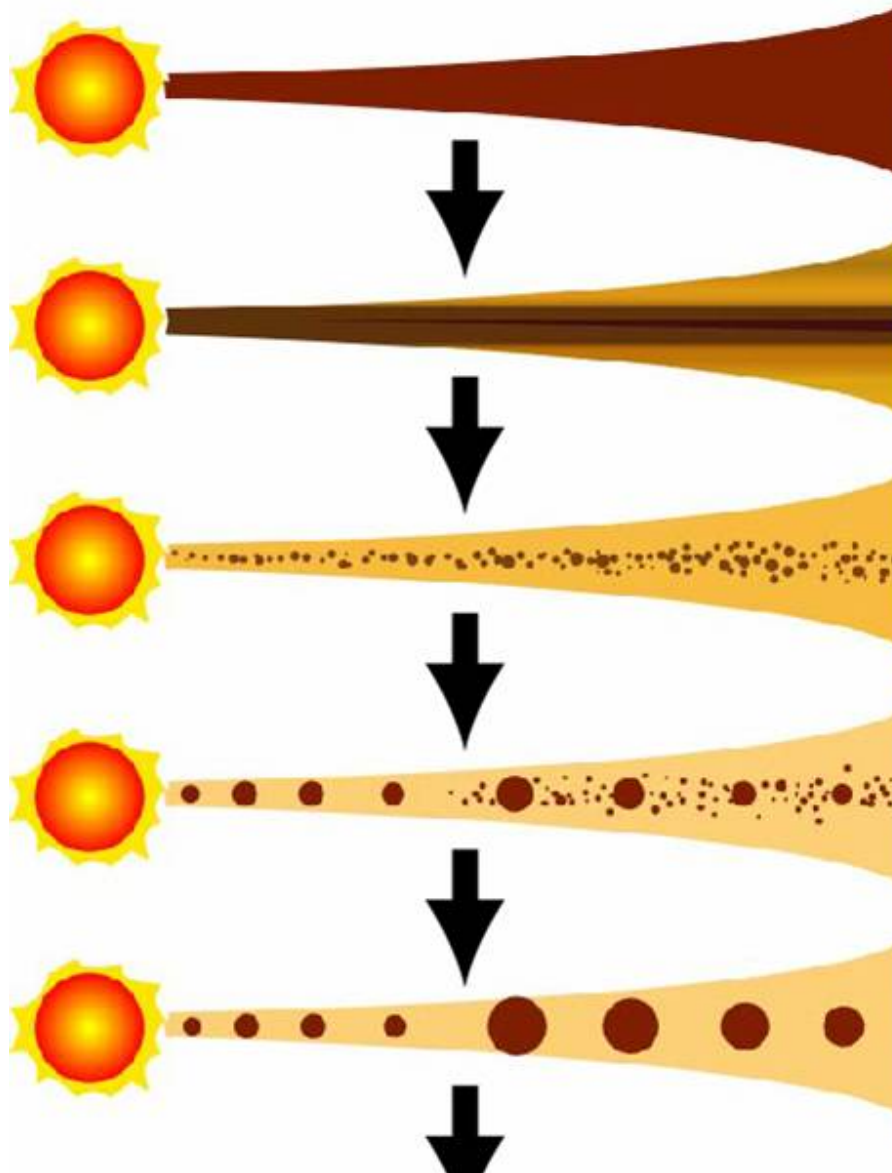
**=> Développement de logiciels de visualisation interactifs**



# Quelques exemples de calculs numériques: L'origine de notre Système Solaire



Limite des modèles physiques : Il faut 5 modèles différents !  
Couplage entre des systèmes de nature différente



Hydrodynamique

Hydrodynamique + particules

Autogravité-Ncorps + couplage Hydro

N corps + accrétion / Physique statistique

N corps + physique des collisions

...

# Equations d'Euler + gravité

- Équation de continuité (ou équation de bilan de la masse)

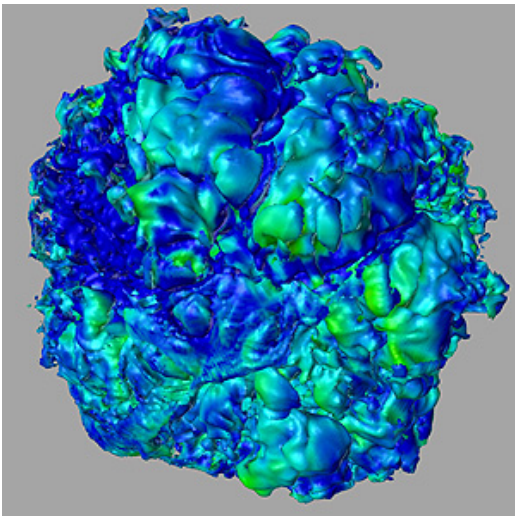
$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{v}) = 0$$

- Équation de bilan de la quantité de mouvement

$$\frac{\partial (\rho \vec{v})}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{v} \otimes \vec{v}) = -\vec{\nabla} p + \vec{\nabla} \cdot \vec{\tau} + \rho \vec{f}$$

- Équation de bilan de l'énergie

$$\frac{\partial (\rho e)}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot [(\rho e + p) \vec{v}] = \vec{\nabla} \cdot (\vec{\tau} \cdot \vec{v}) + \rho \vec{f} \cdot \vec{v} - \vec{\nabla} \cdot \vec{q} + r$$

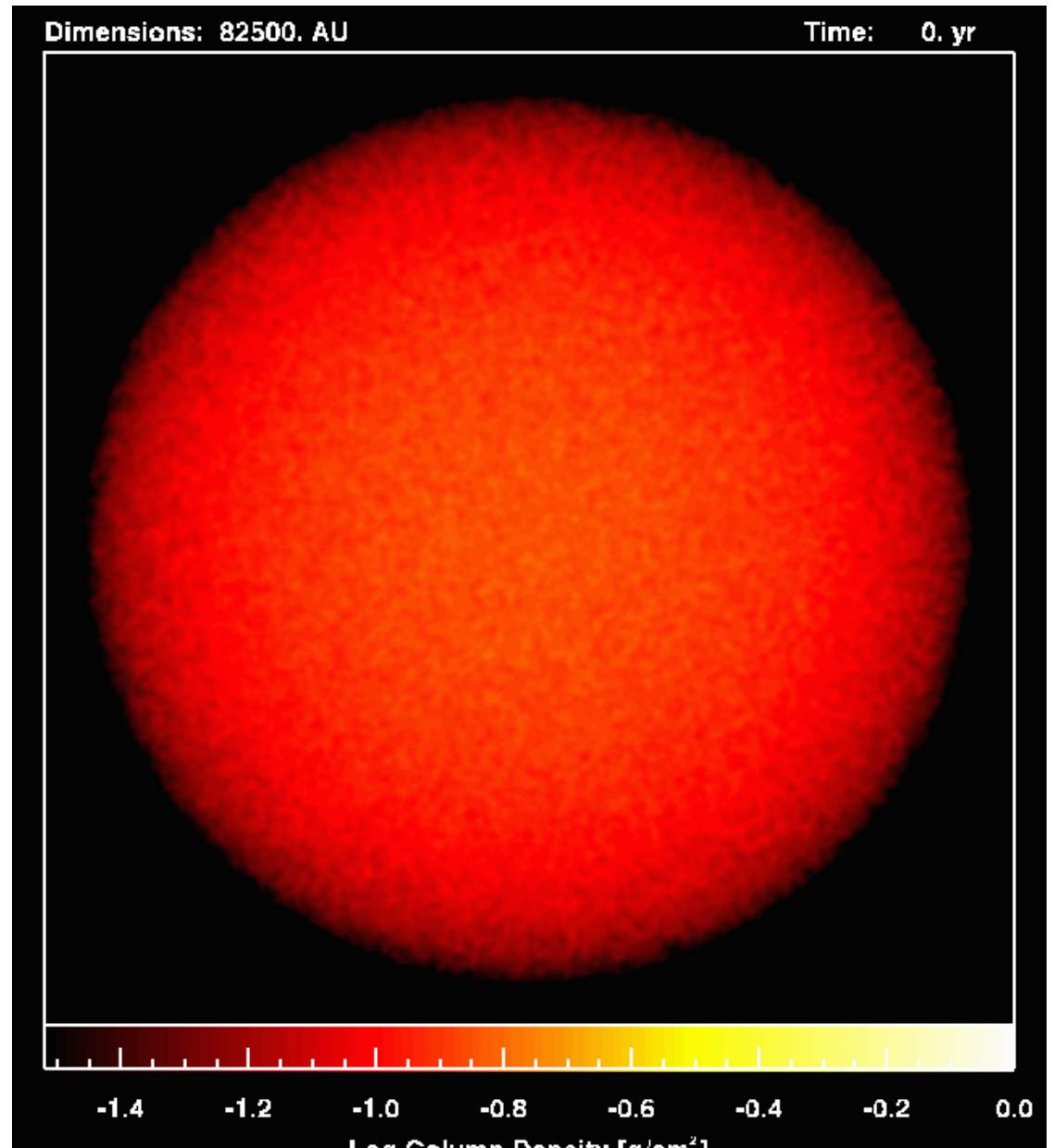


Phase primordiale : effondrement du nuage, formation d'étoiles

Simulation  
hydrodynamique 3D  
de formation d'étoiles  
en amas.

Point de départ: une  
sphère de gaz

Bate, 2002



Disque interne chauffé par le jeune soleil.  
Les glaces et gaz ne peuvent condenser:  
seules les roches subsistent.

Silicates et métaux

Silicates, métaux  
et glaces diverses

Mercury

Venus

Earth

Mars

Jupiter

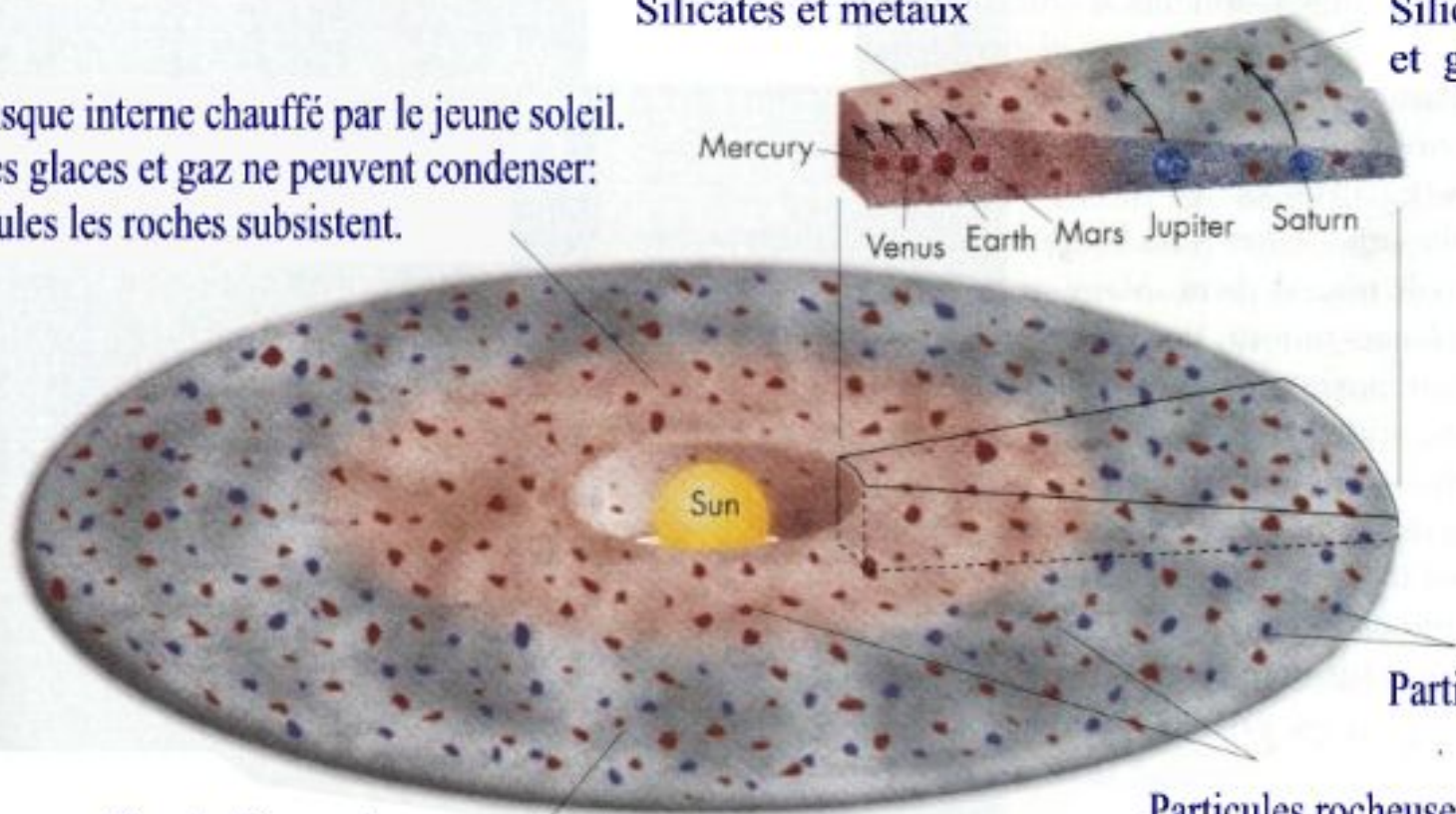
Saturn

Sun

Particules de glaces.

Particules rocheuses

Dans le disque externe,  
plus froid, les glaces subsistent.



# Transfert radiatif / Electromagnétisme : Tous les problèmes de visualisation

## 2. Les équations de Maxwell

$$\text{div } \vec{D} = \rho \quad (1)$$

$$\text{div } \vec{B} = 0 \quad (2)$$

$$\text{rot } \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \quad (3)$$

$$\text{rot } \vec{H} = \vec{j} + \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} \quad (4)$$

Equation de

Maxwell-Gauss

$$\oint_S \vec{D} \cdot d\vec{S} = \iiint_V \rho d\tau$$

conservation du

flux de

Equation de

Maxwell-Faraday

$$\oint_C \vec{E} \cdot d\vec{l} = -\frac{d}{dt} \oint_S \vec{B} \cdot d\vec{S} = 0$$

(phénomène d'induction)

Equation de

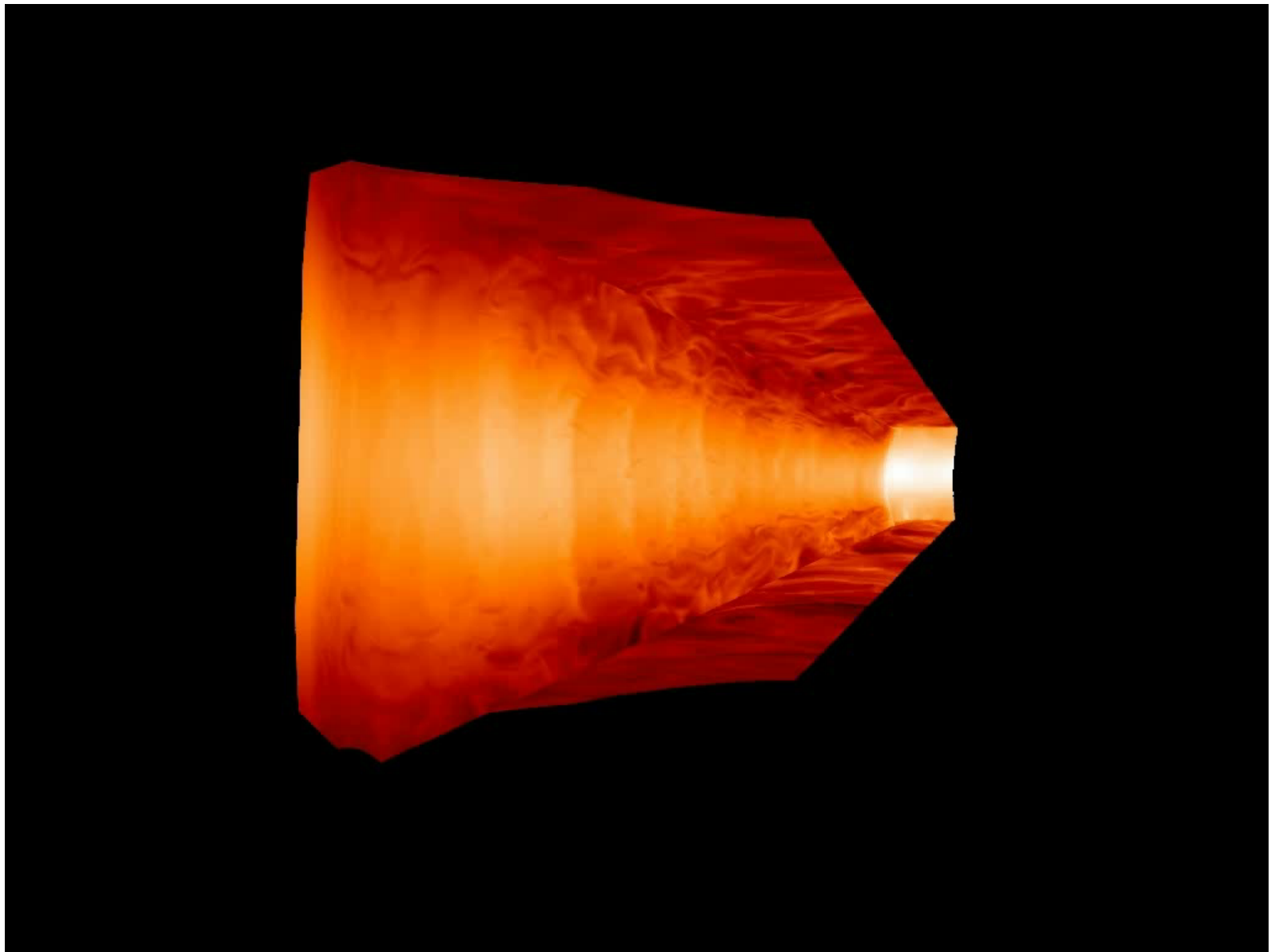
Maxwell-Ampère

illumination

Visualisation 3D

Effets spéciaux

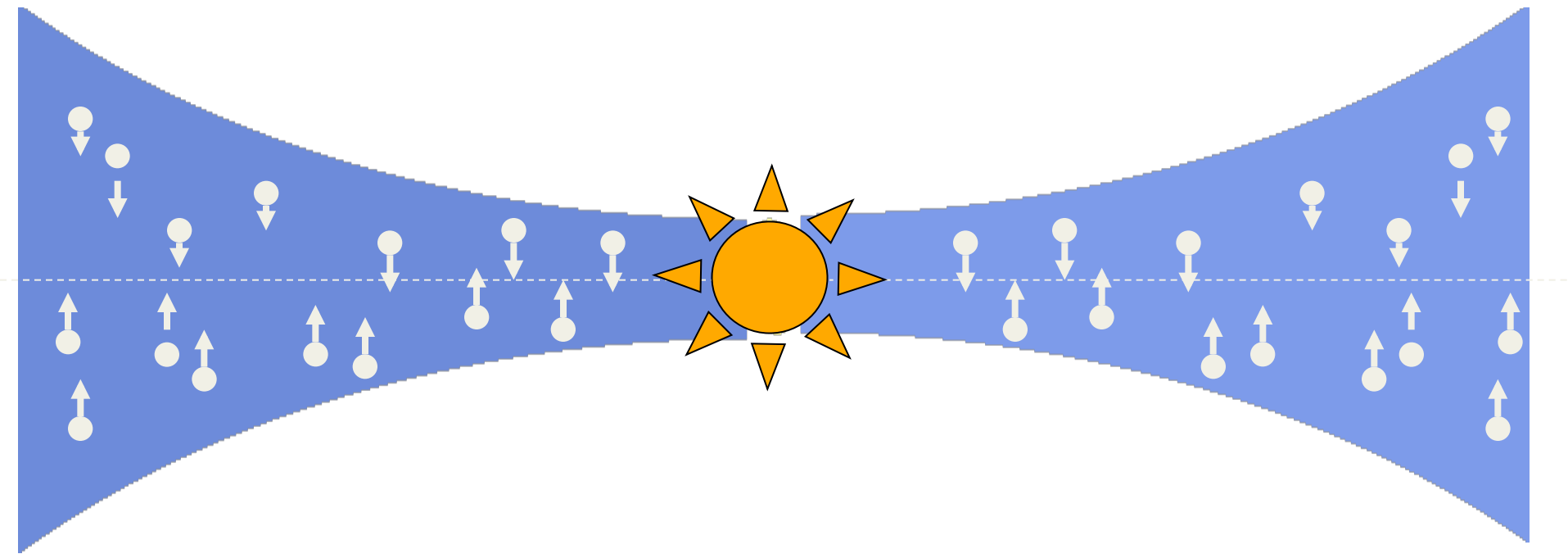
Aujourd'hui on essayer de coupler  
Toutes les lois pour un rendu plus  
Réaliste.



Laboratoire AIM (Uiniversité Paris Diderot / CEA / CNRS)

Disque protoplanétaire : MHD

Les grains sédimentent dans le plan médian du disque





# Simulation 3D de la sédimentation de la poussière:

mélange fluide + poussières

## Equations d'Euler

- Équation de continuité (ou équation de bilan de la masse)

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{v}) = 0$$

- Équation de bilan de la quantité de mouvement

$$\frac{\partial (\rho \vec{v})}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{v} \otimes \vec{v}) = -\vec{\nabla} p + \vec{\nabla} \cdot \vec{\tau} + \rho \vec{f}$$

- Équation de bilan de l'énergie

$$\frac{\partial (\rho e)}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot [(\rho e + p) \vec{v}] = \vec{\nabla} \cdot (\vec{\tau} \cdot \vec{v}) + \rho \vec{f} \cdot \vec{v} - \vec{\nabla} \cdot \vec{q} + r$$

Dans ces équations :

$\vec{\nabla} = \frac{\partial}{\partial x} \vec{e}_x + \frac{\partial}{\partial y} \vec{e}_y + \frac{\partial}{\partial z} \vec{e}_z$

## Poussières : Couplage avec le gaz

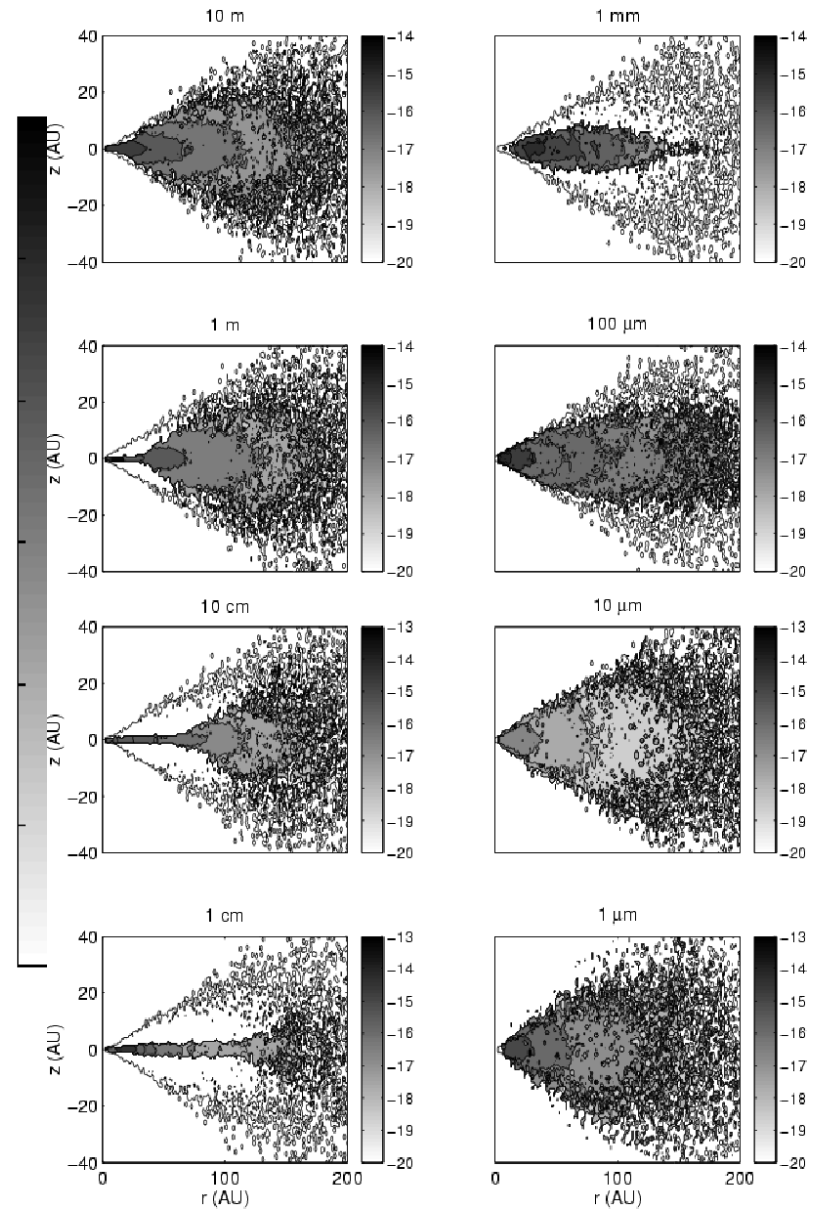
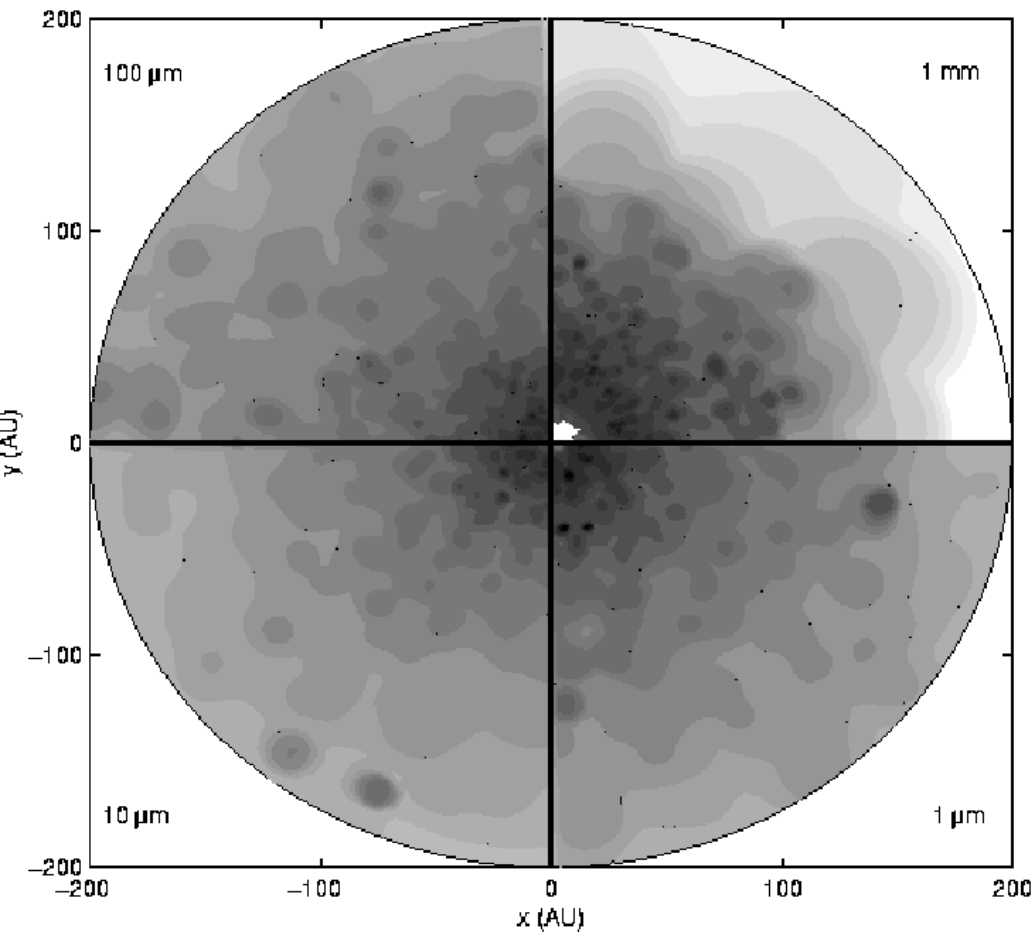
$$\frac{d\vec{v}}{dt} = \frac{\vec{F}_*}{m} - \frac{\vec{v} - \vec{v}_g}{\tau},$$

$$\tau = \frac{a\rho_s}{\rho C_s},$$

Temps de couplage

# Simulation 3D de la sédimentation de la poussière:

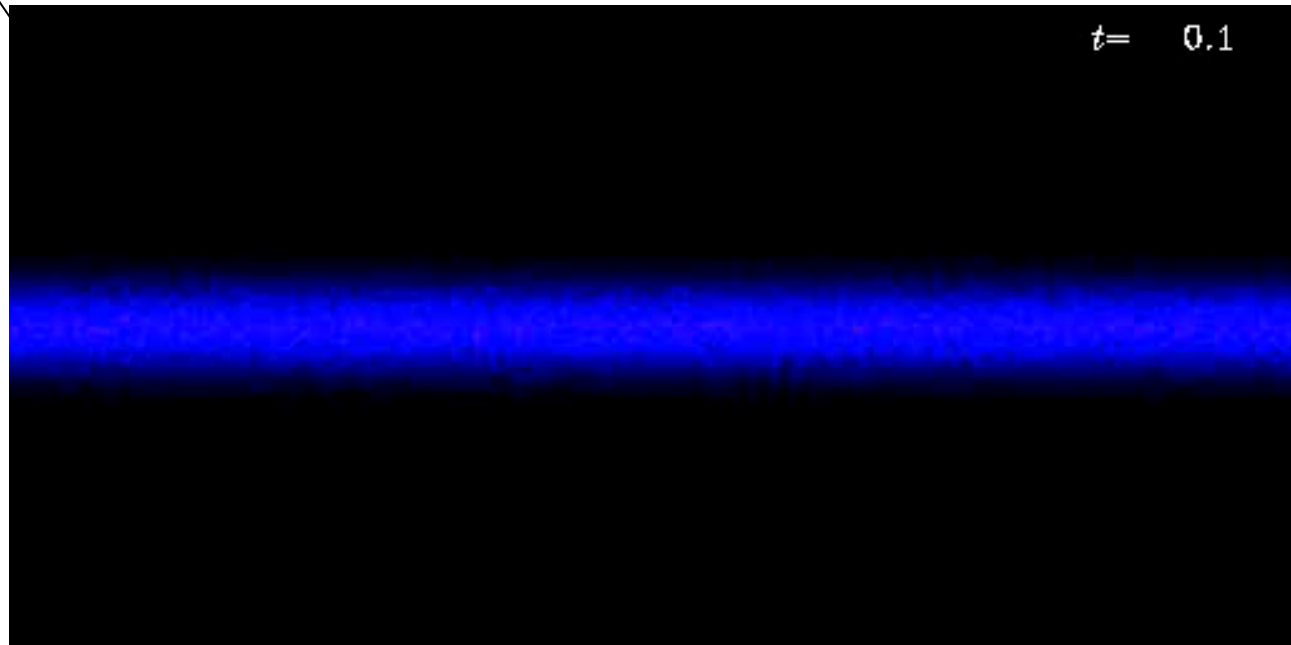
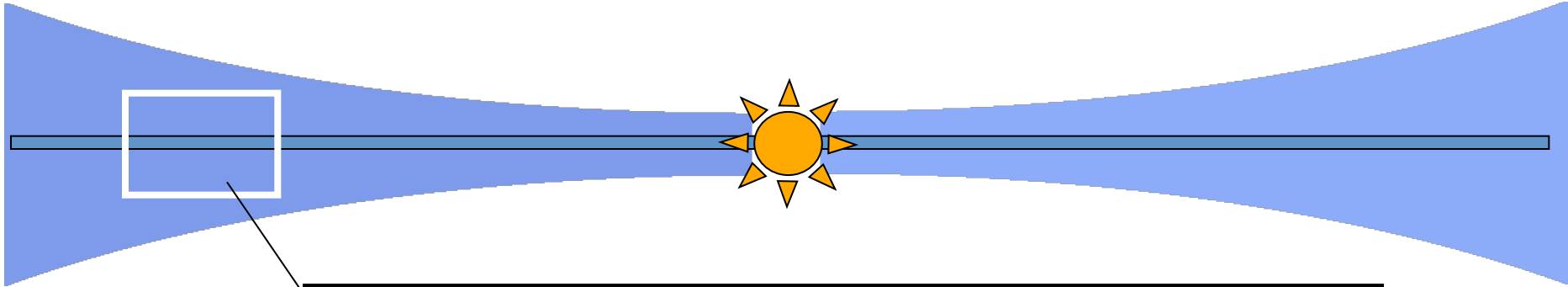
mélange fluide + poussières



Les grosses poussières sédimentent  
Plus vite.

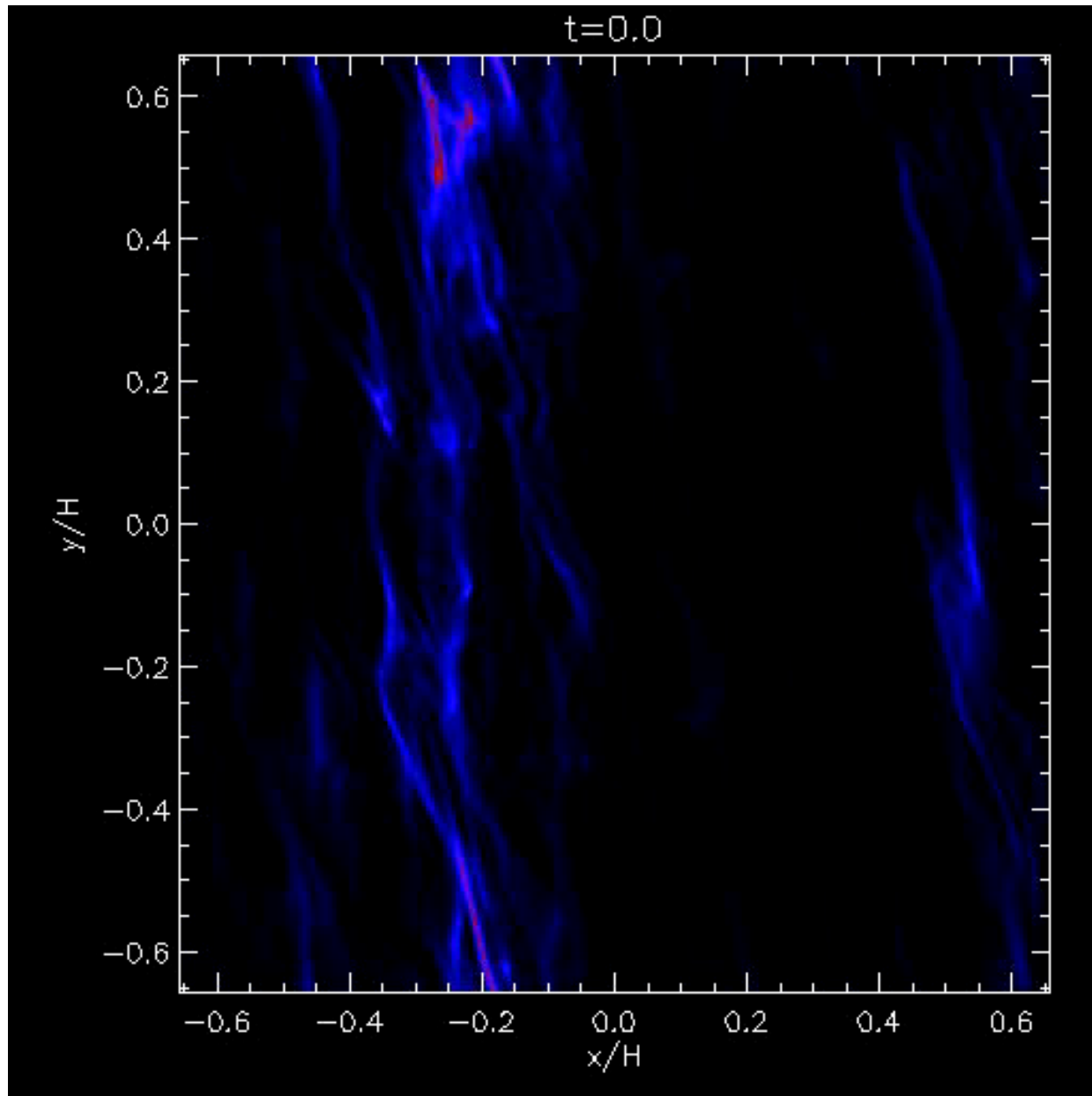
Ensuite les premiers planétésimaux se forment :

Couplage Hydro – Poussières (Bi-fluide) + autogravité de la poussière +  
Retour de force sur le fluide



Assemblage des premiers planétésimaux  
Streaming instability

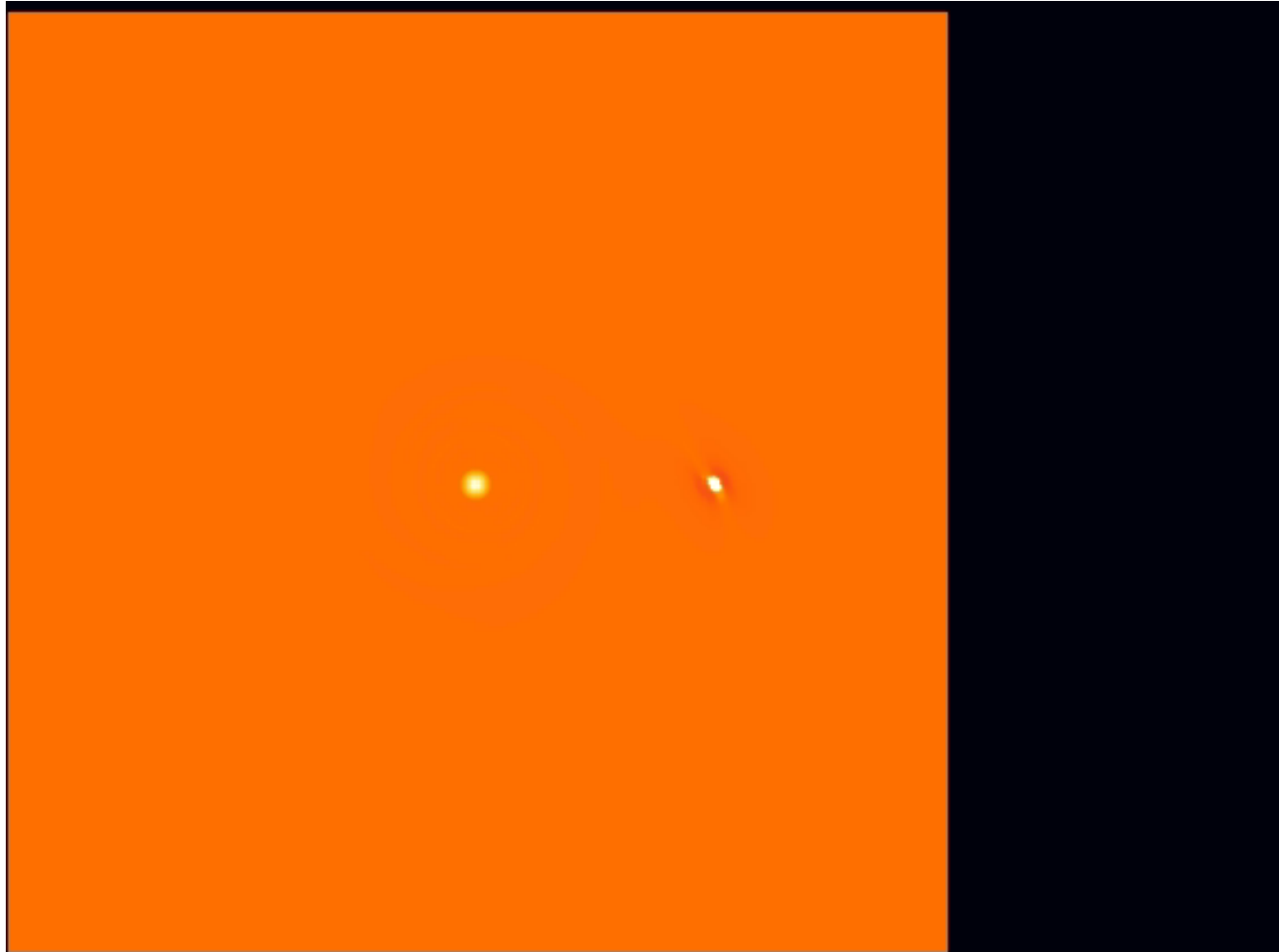
La même simulation vue de haut : assemblage des planétésimaux



Les premiers embryons planétaires apparaissent et forment des planètes...  
Certaines migrent vers l'étoile => retour à l'hydro !!

Gravité du disque  
+  
Gravité de la planète

[LIEN](#)



# Simulation de l'accrétion des protoplanètes => eau sur Terre

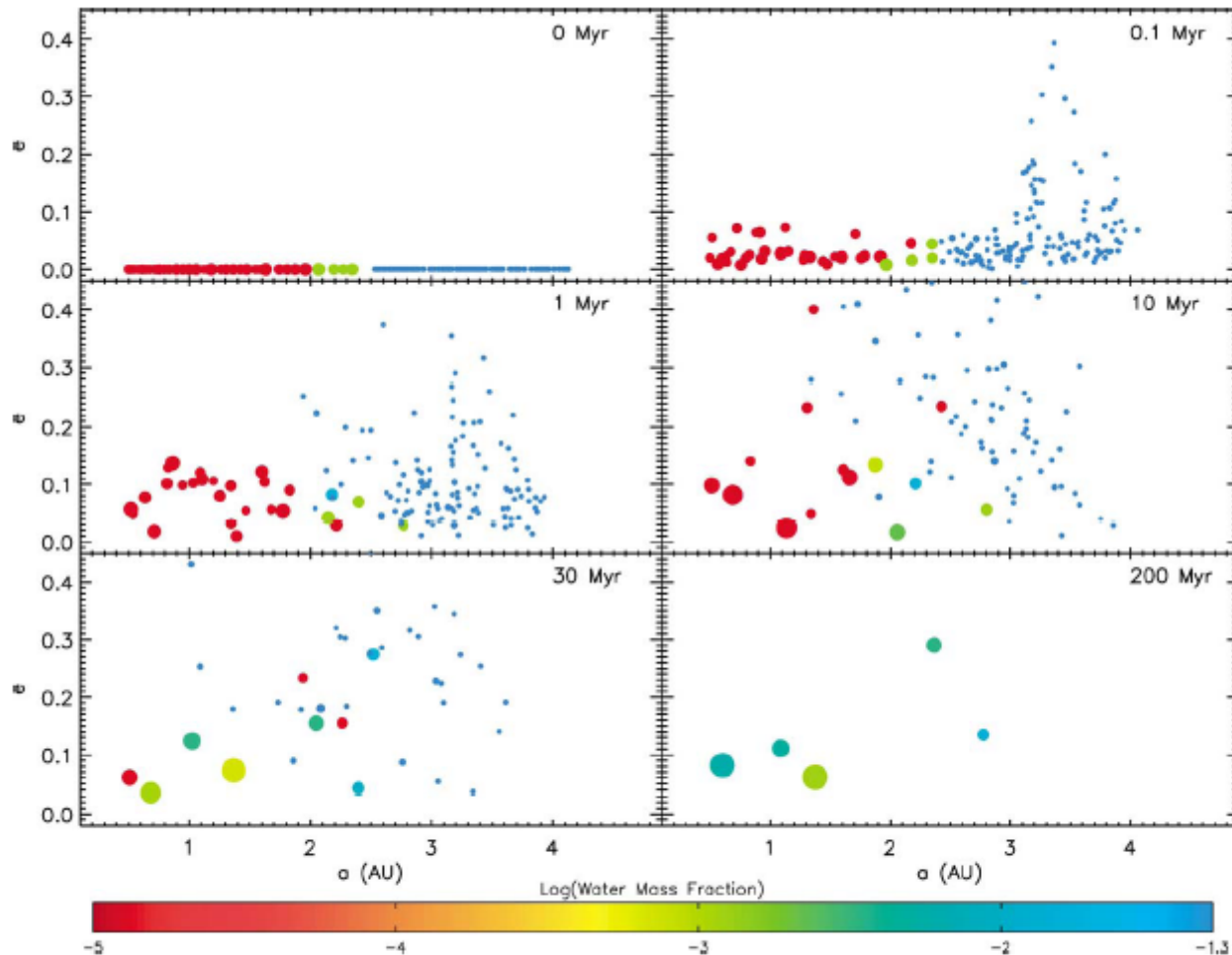


Fig. 3. Snapshots in the evolution of a simulation with Jupiter at 5.2 AU with zero eccentricity, and a planetesimal mass of  $0.01M_{\oplus}$  (simulation 10: see Table 1 for details). The size of each object is proportional to its mass<sup>(1/3)</sup> (but does not represent the actual physical size), and the color of each object corresponds to its water mass fraction. Note that the wettest objects have water mass fractions of  $\log_{10}(5\%) = -1.3$ . See text for discussion.

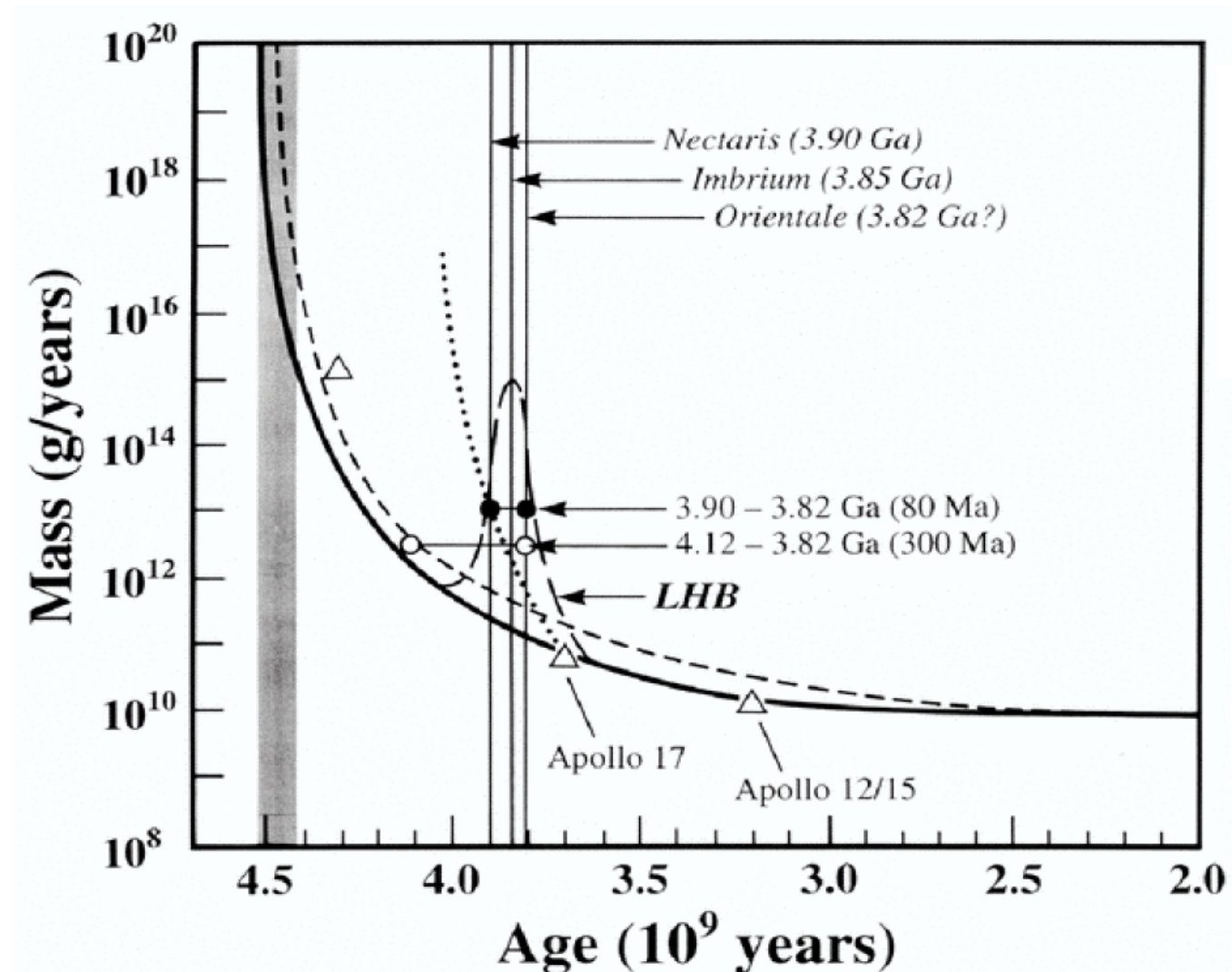
La phase finale d'assemblage du Système Solaire



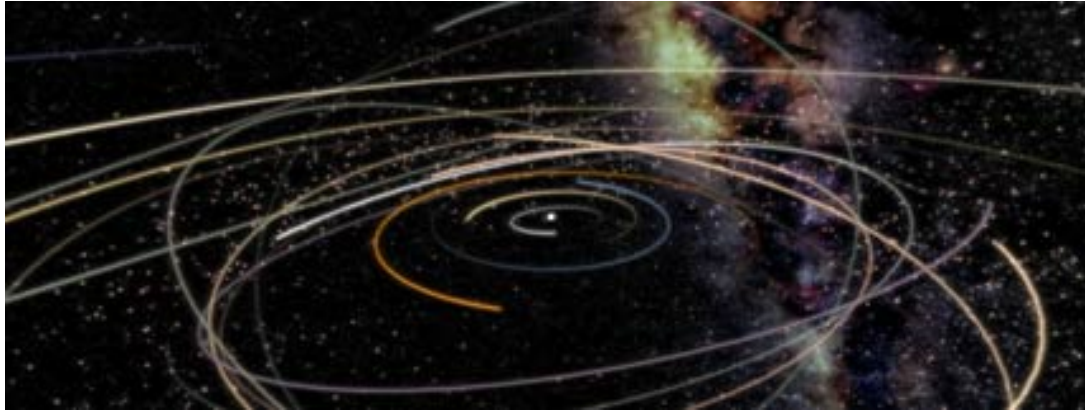
## Un événement catastrophique dans l'histoire du Système Solaire

⇒ Mise évidence d'une phase « catastrophique » dans l'histoire lunaire :

*Le bombardement massif tardif (LHB)*



# Equations d'un système à N-corps



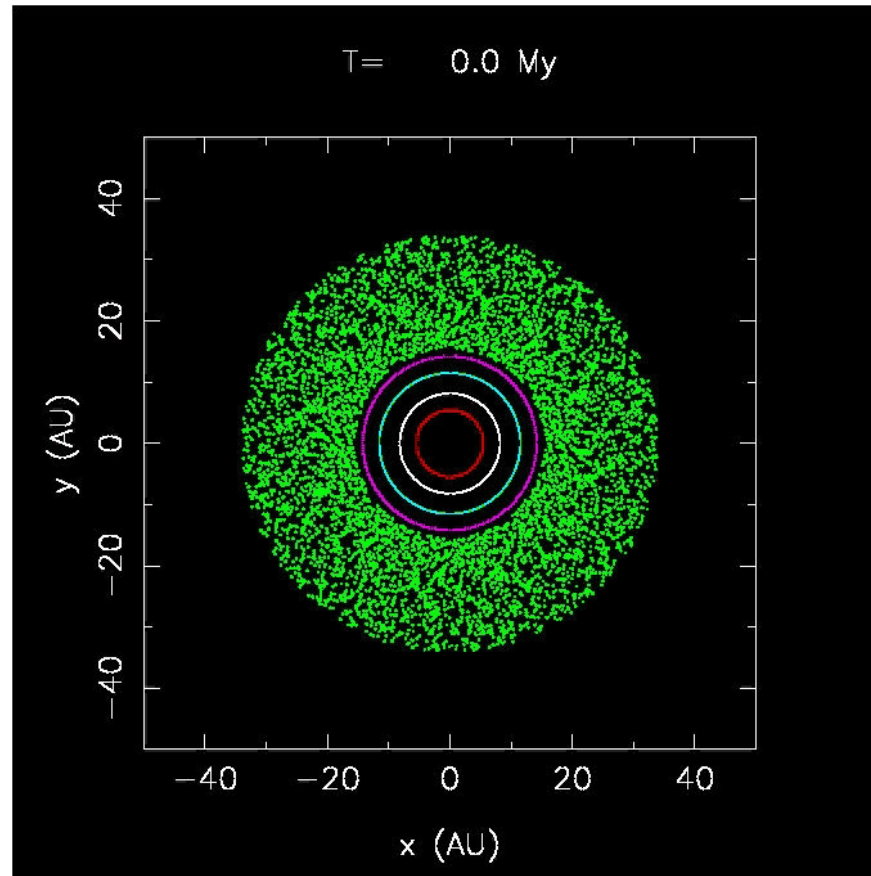
Equations très simples !

$$M_i \frac{dV_i}{dt} = \sum_{j \neq i} \frac{G M_i M_j}{r_{ij}^2}$$

Les planètes terrestres et géante sont nées. Le gaz a disparu...

Elles évoluent dynamiquement...

=> Simulation d'un phase instable du système solaire (NCORPS)



Le BOMBARDEMENT TARDIF :

Explique : la cratérisation de la lune, les satellites des planètes géantes, les orbites des planètes

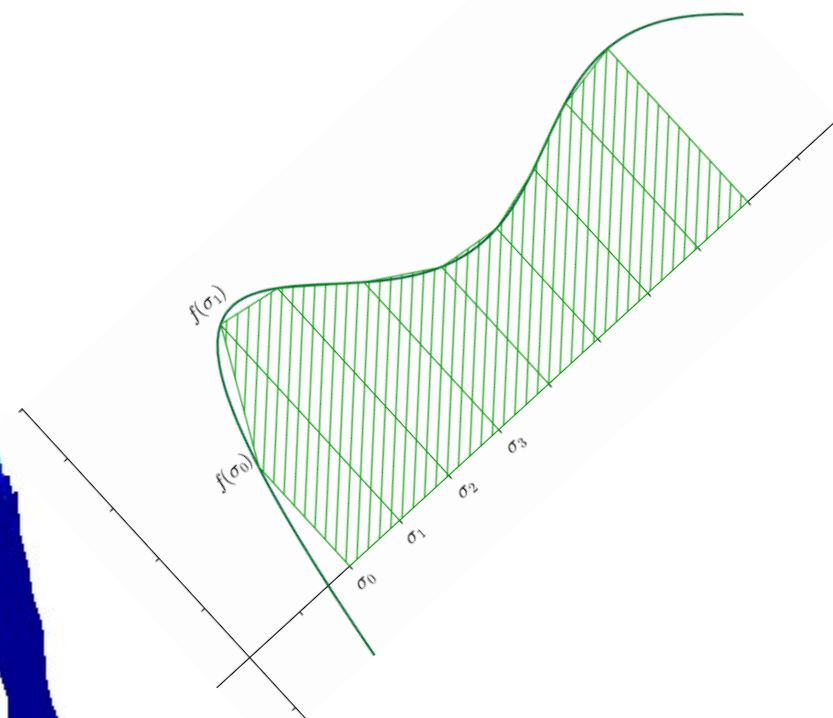
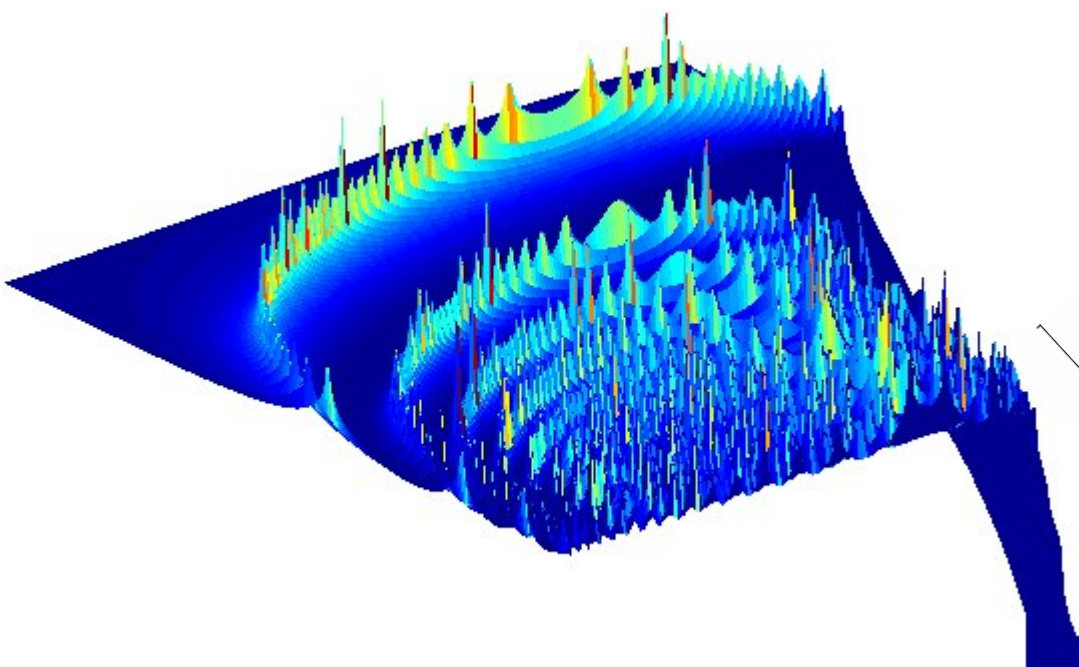
**Tous ces outils nous permettent d'explorer « expérimentalement » les scénarios Possibles.**

**Le modèle « standard » de formation des planètes aujourd'hui est à peu près résolu par le calcul numérique. Mais de nombreuses questions demeurent.**

**Mais nous manquons toujours d'une description unifiée...**

**=> Les super-ordinateurs ont leur rôle à jouer !!!**

# Introduction aux méthodes du calcul numérique





**Equations différentielles Ordinaires**

**Vs.**

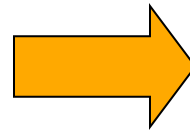
**Equations aux dérivées partielles**

**2 univers différents !**

*En fonction du système étudié, il y a toujours*

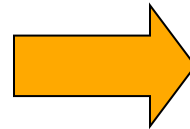
Une ou plusieurs **quantités** à déterminer

$$a_z = \frac{d^2 z}{dt^2} = -g$$



X, V et V=integrale (a)

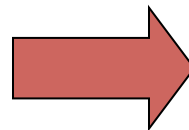
$$\frac{\partial T}{\partial t} - \kappa \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = f(x, t)$$



Température T

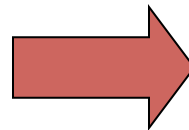
•En fonction de un ou plusieurs **paramètres**

$$a_z = \frac{d^2 z}{dt^2} = -g$$



Le temps t

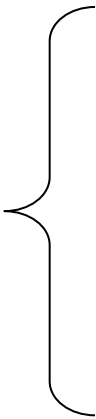
$$\frac{\partial T}{\partial t} - \kappa \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = f(x, t)$$



Temps t, espace x

# Comment bien poser un problème ?

Un problème est bien posé  
si nous avons

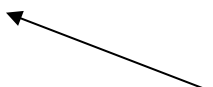
- 
- Une liste de quantités à calculer en fonction d'une liste de paramètres
  - Une equa. diff. d'évolution pour **\*chaque\*** quantité qui évolue
  - Les conditions initiales (ou cond. Limites)

## Propagation d'une onde

Paramètres :  $X$  (position) et  $t$  (le temps)

Quantité :  $U(x,t)$  : Amplitude à la position  $X$  et à l'instant  $t$

Equation : 
$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - c^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = f(x, t)$$



forcage

Condition initiale : Dépend du problème bien sur,  
Profil  $u(x)$  à  $t=0$

## Mouvement des planètes

Quantités : Position et Vitesse : (X,Y,Z, V<sub>x</sub>, V<sub>y</sub>, V<sub>z</sub>)

Paramètre : Temps

Equations différentielles

$$\frac{dx}{dt} = V_x$$

$$\frac{dV_x}{dt} = \sum_{j \neq i} \frac{Gm_j}{r_{ij}^3} (\vec{r}_i - \vec{r}_j)$$

Idem pour Y et Z

6 au total

Conditions initiales : Position et vitesses initiales

[kepler.htm](http://kepler.htm)



# Propagation de la chaleur

Quantité : température T

Paramètre : X (espace) et t (temps)

équation : 
$$\frac{\partial T}{\partial t} - \kappa \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = f(x, t)$$
 ← forcage

Condition initiale : Profil T(x) à t=0

# RESOLUTION : LES METHODES

Les outils de résolution des équations sont différents.

Cependant elles se basent toutes sur une même idée , imposée par les limites de l'ordinateur :

La **Discrétisation du problème** : **Les paramètres sont discrétisés** :

Exemple :

le temps s'écrit  $t = t_n = n * dt$  où  $dt$  sera le pas de temps

L'espace (à 1D ) s'écrit :  $x = n * dx$  où  $dx$  sera le pas d'espace

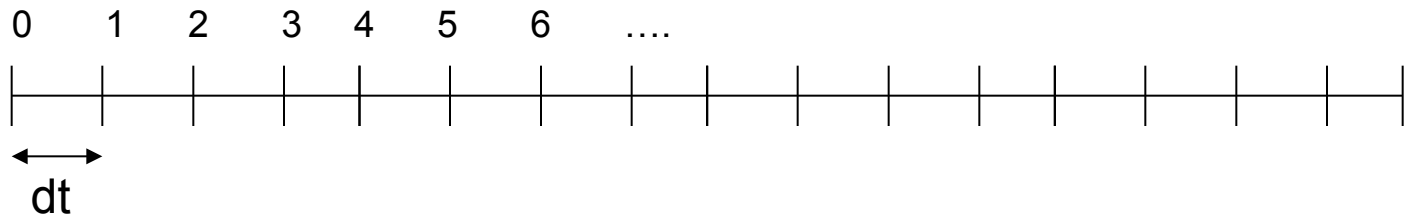
On résout donc le problème sur une **grille** de paramètres.

Une **grille de temps**, une **grille d'espace** etc...

Plus la grille est fine (dt ou dx ) plus la résolution est proche de la solution exacte

---

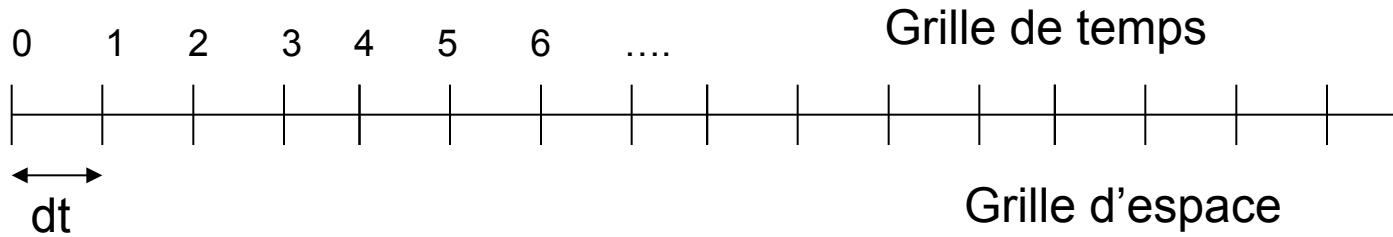
**1D (temps, espace 1D etc...)  $t_n = n \times dt$**



Dans le cas 1D (1 seul paramètre, ex : le temps)

La résolution consiste à calculer une SUITE :

$$U_{n+1} = F(U_n, t_n) \text{ où } U_n \text{ est la quantité à l'instant } t_n$$



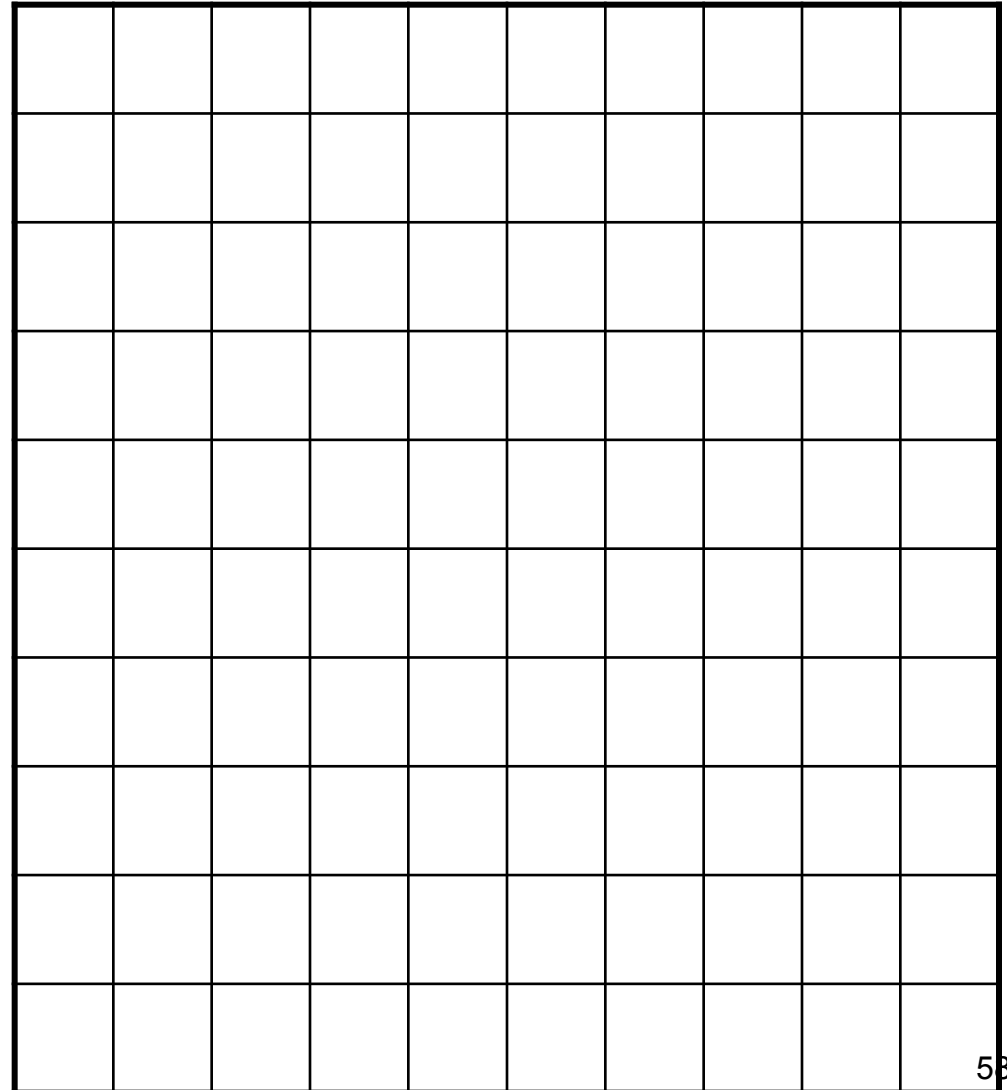
À 2D ou plus

Ex :

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - c^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = f(x, t)$$

En fait on en fait un grille  
à 3D (2D espace + 1D temps)

$U_{i,j,k} = F(\text{Cases voisines})$





## Pour les equations à 1 paramètre (ODE)

$$U_{n+1} = F(U_n, t_n) \text{ où } U_n \text{ est la quantité à l'instant } t_n$$

La fonction  $F$  est appelée « intégrateur » (ou « solver » )

Tout le problème consiste à trouver une fonction  $F$  précise , rapide et robuste.

La précision de la solution dépend de la finesse de la grille et du nombre d'étapes de calcul.

## **2. Exemple de résolution numérique**

## Système à 1 paramètre (ODE) : Mouvement d'un ressort

Quantités :  $x$  et  $v_x$

Paramètre :  $t$

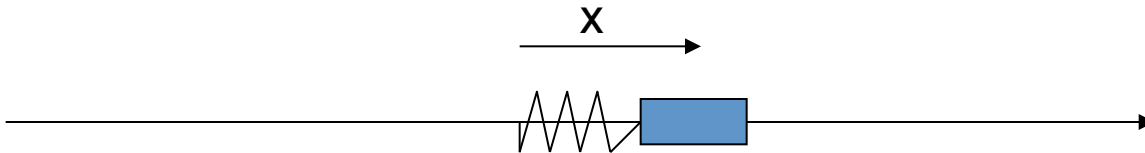
Equations :  $f = ma = -kx \Rightarrow$

$$\frac{dV_x}{dt} = \frac{-kx}{m}$$

Est- ce tout ???

$k$  : coef. de raideur

$m$  : masse



Non car il nous manque l'équation d'évolution de X :

Equations d'évolutions du système

$$\begin{aligned}\frac{dx}{dt} &= V \\ \frac{dV}{dt} &= \frac{-kx}{m}\end{aligned}$$

Dans un système à 1 seul paramètre (ODE) on peut TOUJOURS ramener l'équation à un ENSEMBLE d'équations du 1<sup>ER</sup> ORDRE

**On a alors :**

**Quantités :** X et Vx

**Conditions initiales :**  $X(t=0) = 10. \text{ m}$   
 $V(t=0)=0. \text{ m/s}$

**Paramètre :** t

**Equations :**

$$\frac{dx}{dt} = V$$

$$\frac{dV_x}{dt} = \frac{-kx}{m}$$

k : coef. de raideur  
m : masse

---

**SOLUTION ANALYTIQUE :**

\* démontrer

$$x(t) = A \cos(\omega t + \varphi)$$

$$v(t) = -A \omega \sin(\omega t + \varphi)$$

$$\omega = \sqrt{k/m}, A = X_0$$

**Nous allons maintenant résoudre le MÊME problème  
Mais de manière « numérique »**

**Il nous faut un algorithme pour calculer l'évolution  
de la solution par petits incréments de temps  $dt$ .**

**Nous allons découvrir les « problèmes » du numérique**

Comment construire un intégrateur ?

Contraintes : - précis  
- stable  
- rapide

Mauvaise nouvelle : pas de solution universelle!



## 2. Construction d'un intégrateur : méthodes de base

L'intégrateur dépend du problème envisagé

Nous étudierons dans un premiers temps les équations à un seul paramètres  
(le temps souvent)

On les appelle les **équations différentielles ordinaires (ODE)**

L'outil de base pour construire **F** est le développement de Taylor :

$$X(t + dt) = X(t) + dt \cdot f(x, t) + \frac{dt^2}{2!} f'(x, t) + \frac{dt^3}{3!} f''(x, t) + \dots$$

En pratique on ne connaît que **f**. Le but de tout intégrateur est d'estimer le mieux possible le développement de X en ne connaissant que **f**...

C'est possible !

Soit une quantité  $X$ .

En utilisant le développement de Taylor on a :

$$X_{n+1} = X(t + dt)$$

$$X(t + dt) \approx X(t) + dt \frac{dX}{dt} + \frac{dt^2}{2} \frac{d^2 X}{dt^2} + \dots$$

Fonction  $f$ , équa. diff du système

En s'inspirant de ce développement, la fonction  $F$  sera :

$$X_{n+1} = F(X_n, t) = X_n + dt D(t, X_n)$$

Où  $D$  sera une approximation numérique de la dérivée !!

Comment construire D :

Cas le plus simple :

**METHODE d'EULER** : pour résoudre  $\frac{dX}{dt} = f(x, t)$

On pose  $D(x, t) = f(x, t)$

La fonction F (x,t) est alors :  $X_{n+1} = X_n + D(x, t) dt = X_n + f(x, t) dt$

---

Exemple : Cas du ressort avec Euler

$$\begin{pmatrix} x_{n+1} \\ v_{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} F_x(t_n, x_n, v_n) \\ F_v(t_n, x_n, v_n) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_n + dt D_x(t_n, x_n, v_n) \\ v_n + dt D_v(t_n, x_n, v_n) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_n + dt v \\ v_n + dt \frac{-kx}{m} \end{pmatrix}$$


On prend un grille pour le paramètre t :  $dt=0.01$  seconde

$$X_{n+1} = f(X_n, t_n)$$

$$V_{n+1} = f(V_n, t_n) \quad , \text{ où } t_n = n * dt$$

F est l'intégrateur. Nous prendrons ici la méthode de Euler (nous verrons)

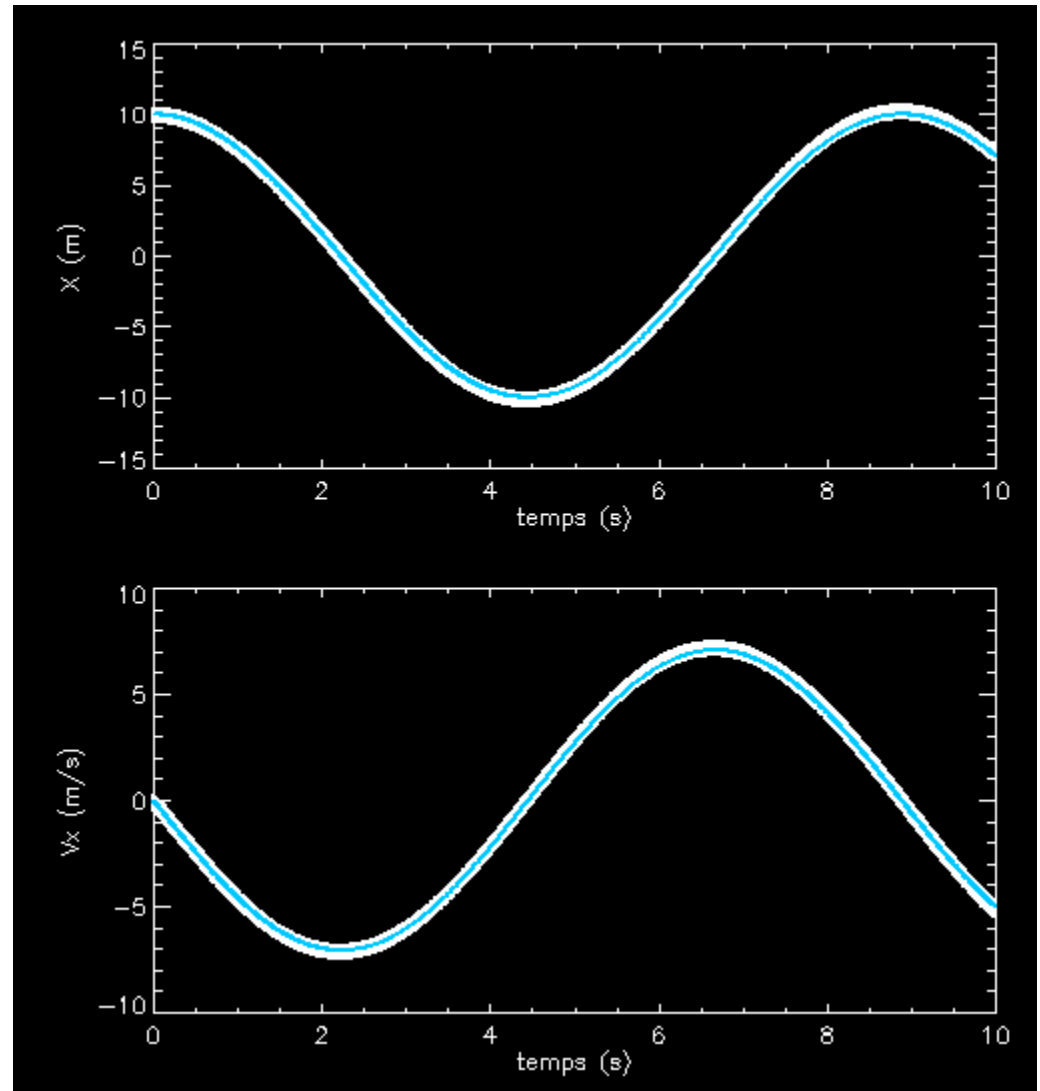
### **ALGORITHME**

1. Initialiser  $X_0$  et  $V_0$
2. Initialiser  $dt$
-  3. Calculer  $X_{n+1} = f(X_n, t_n)$  et  $V_{n+1} = f(V_n, t_n)$
4. Incrémenter le temps :  $T=T+dt$
5. Revenir en 3.

# Solution numérique : ressort résolu par Euler

$dt=0.01$  s

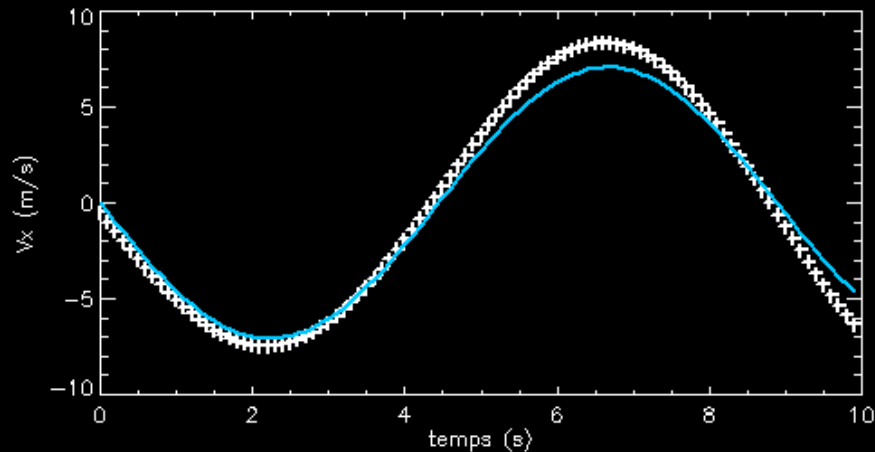
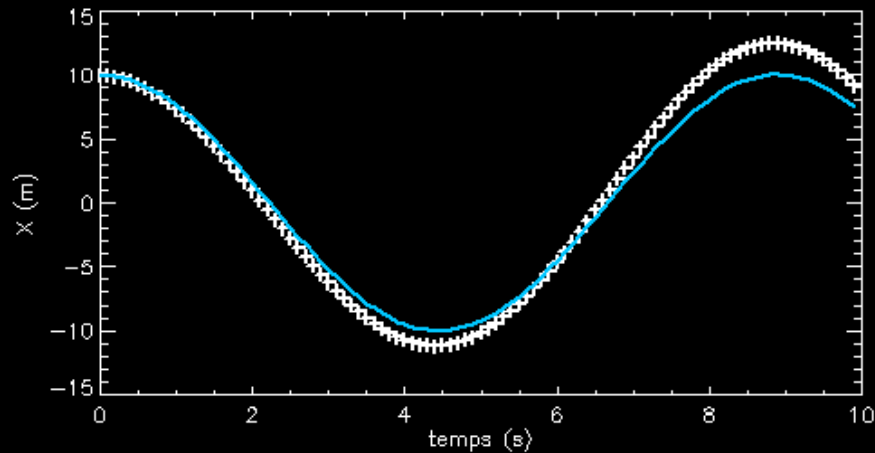
N	t	X	V
0.000000	0.000000	10.0000	0.000000
1.00000	0.010000	10.0000	-0.0500000
2.00000	0.020000	9.99950	-0.100000
3.00000	0.030000	9.99850	-0.149998
4.00000	0.040000	9.99700	-0.199990
5.00000	0.050000	9.99500	-0.249975
6.00000	0.060000	9.99250	-0.299950
7.00000	0.070000	9.98950	-0.349912
8.00000	0.080000	9.98600	-0.399860
9.00000	0.090000	9.98200	-0.449790
10.0000	0.100000	9.97751	-0.499700
11.0000	0.110000	9.97251	-0.549588
12.0000	0.120000	9.96701	-0.599450
13.0000	0.130000	9.96102	-0.649285
14.0000	0.140000	9.95452	-0.699090
15.0000	0.150000	9.94753	-0.748863
16.0000	0.160000	9.94005	-0.798601
17.0000	0.170000	9.93206	-0.848301
18.0000	0.180000	9.92358	-0.897961
19.0000	0.190000	9.91460	-0.947579
20.0000	0.200000	9.90512	-0.997152
21.0000	0.210000	9.89515	-1.04668
22.0000	0.220000	9.88468	-1.09615
23.0000	0.230000	9.87372	-1.14558
24.0000	0.240000	9.86227	-1.19495
25.0000	0.250000	9.85032	-1.24426
26.0000	0.260000	9.83787	-1.29351
27.0000	0.270000	9.82494	-1.34270
28.0000	0.280000	9.81151	-1.39182
29.0000	0.290000	9.79760	-1.44088
etc..			



Blanc: sol numérique  
bleu : sol analytique

## Mais la solution numérique dépend du pas de temps

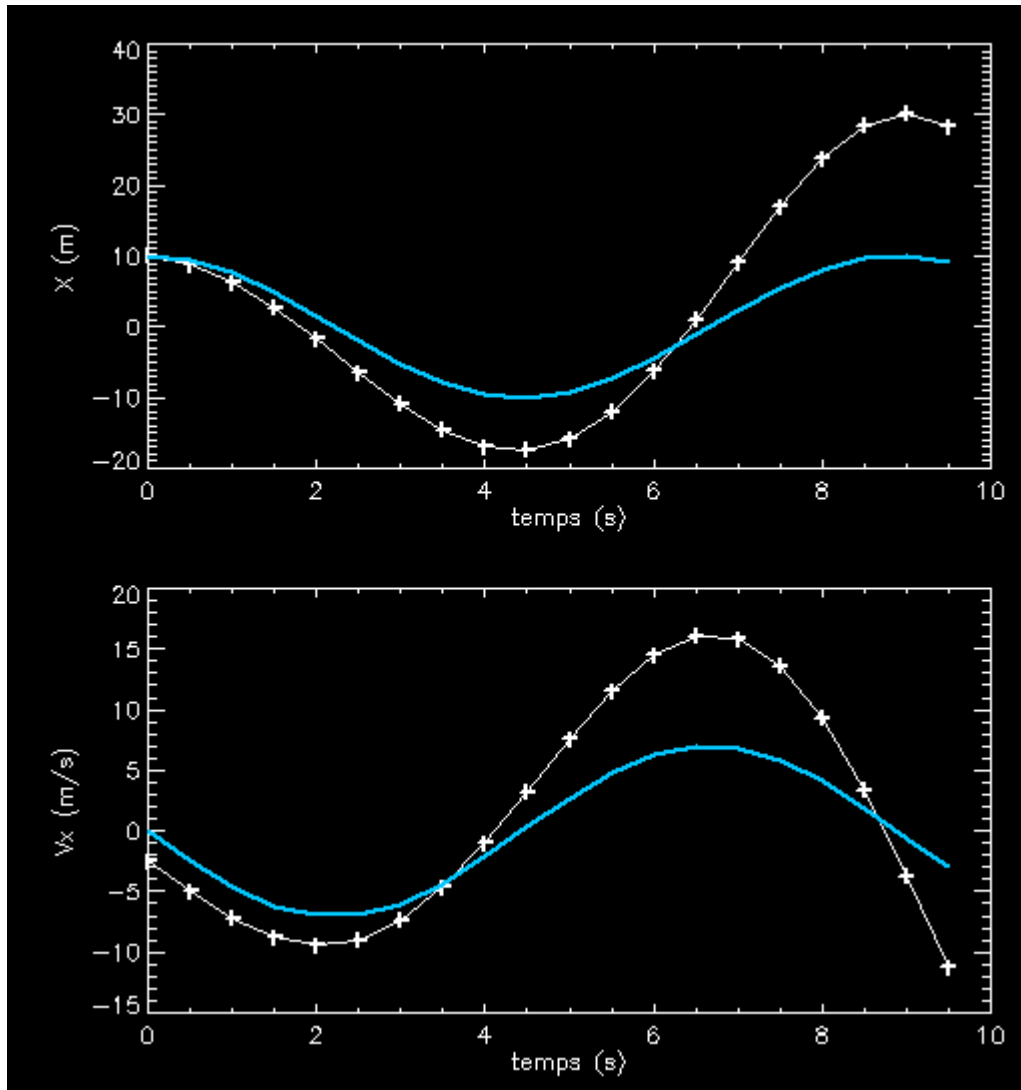
$dt=0.1$  s



Plus  $dt$  est grand plus l'erreur augmente !!



$dt=0.5$  s



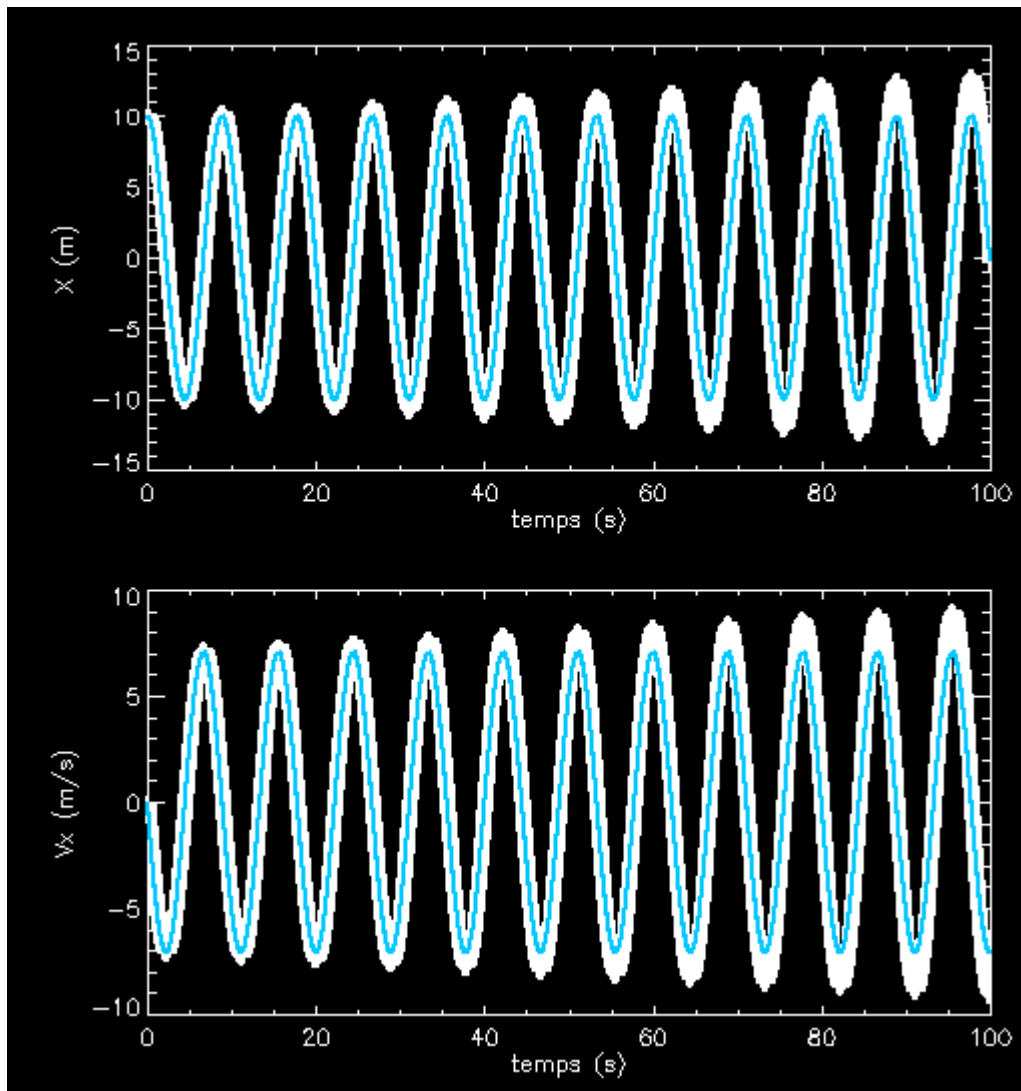
POUR TOUT INTEGRATEUR :

Toute solution numérique  
n'est qu'approximative

La précision dépend du pas  
d'intégration

Plus le pas est grand, plus  
le calcul est rapide,  
MAIS moins il est précis

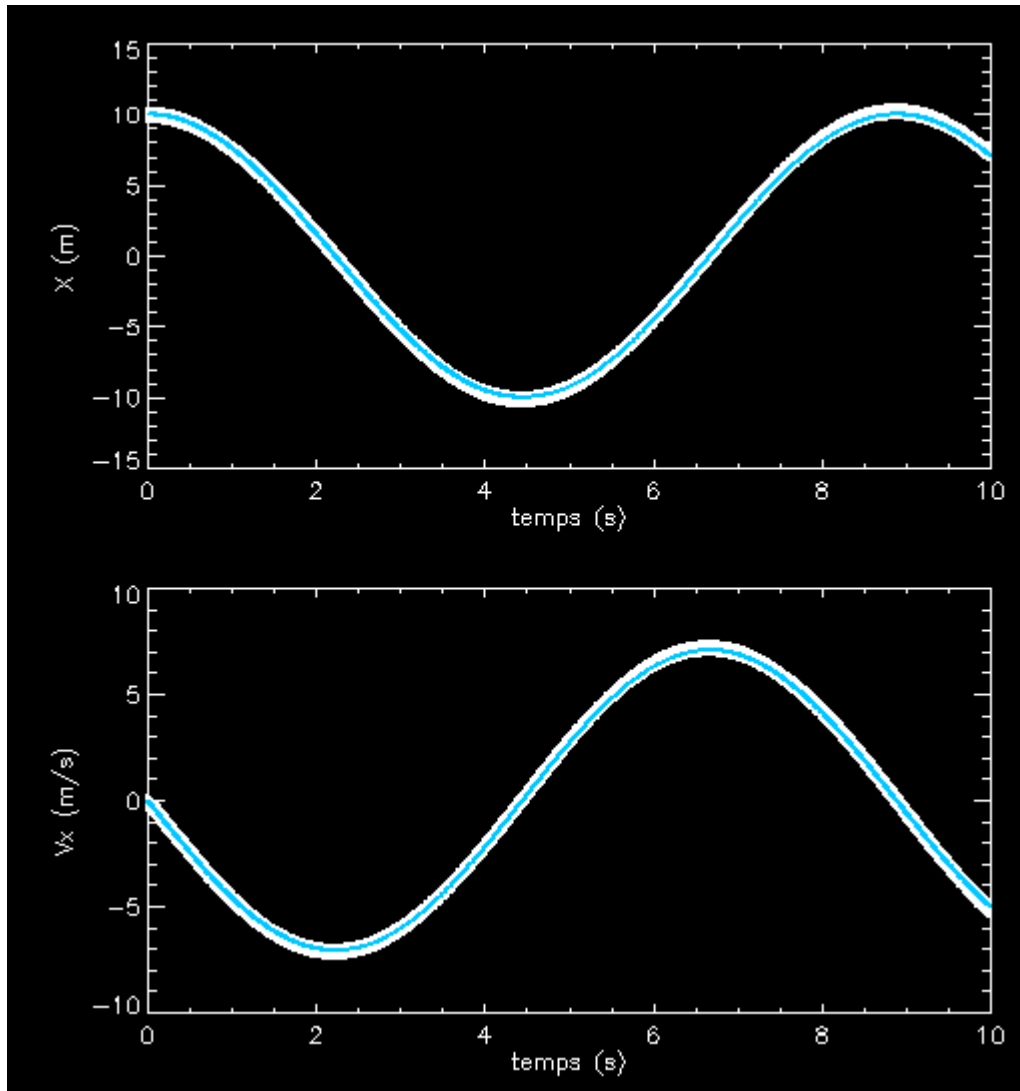
Et inversement ...



$\Delta t = 0.01$  s

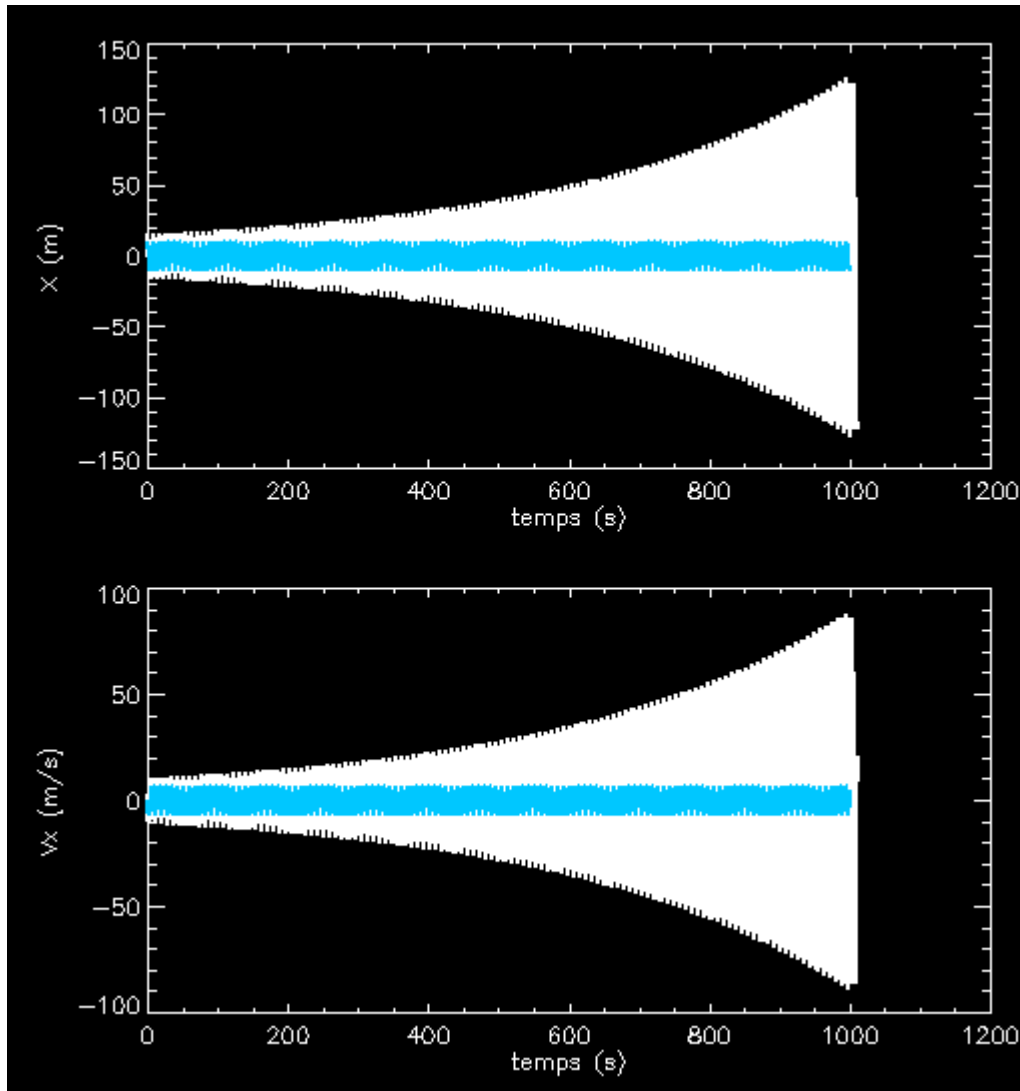
10000 étapes

## La précision diminue avec le nombre d'étapes de calculs :



$\Delta t = 0.01$  s

1000 étapes de calcul



$\Delta t = 0.01\text{s}$

100000 étapes

Tout intégrateur finit  
par s'éloigner de la solutions  
quand le nombre d'étapes  
de calcul augmente

## Construire un meilleur schémas numérique en s'inspirant de l'intégration

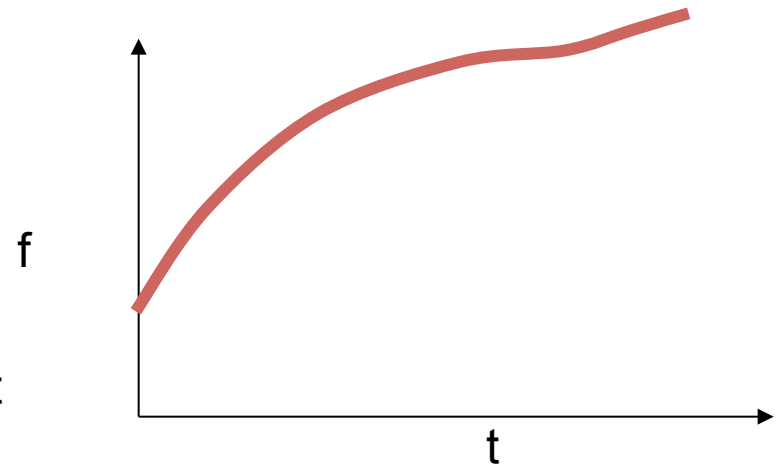
On sait que la résolution exacte de  $X_{n+1}$  est :

$$X_{n+1} = X_n + dt D(t, x) = X_n + \int_t^{t+dt} f(t, X(t), \dots) dt$$

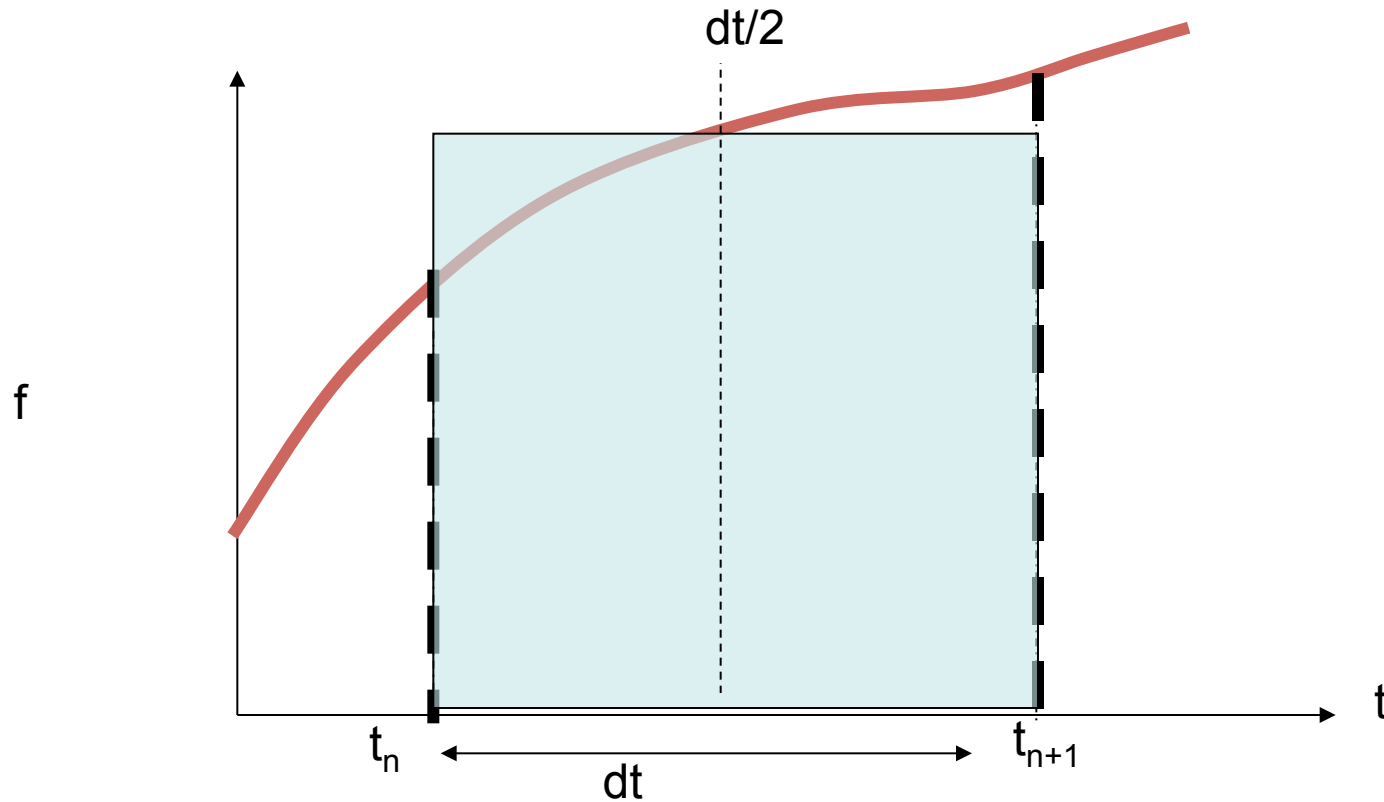
donc

$$D(t, x) = \frac{\int_t^{t+dt} f(t, X(t), \dots) dt}{dt}$$

D est l'aire sous la courbe divisée par dt



Idée : approximer D par la méthode des trapèzes, méthode du point milieu



$D \sim (\text{Aire bleue})/dt$

$$\sim \frac{dt * f\left(t + \frac{dt}{2}, X\left(t + \frac{dt}{2}\right)\right)}{dt}$$

$$D(t, x) \sim \frac{dt}{dt} f\left(t + \frac{dt}{2}, X\left(t + \frac{dt}{2}\right)\right)$$

Mais on peut encore approximer  $X(t+dt/2)$  par :

$$X(t + dt/2) \sim X(t) + dt/2 * f(t, x)$$

On obtient alors un nouveau schéma d'intégration : **Euler modifié**

$$\begin{aligned} X_{n+1} &= X_n + dt D(X_n, t) \\ &= X_n + dt f\left(t + \frac{dt}{2}, X_n + \frac{dt}{2} f(t, X_n)\right) \end{aligned}$$

Qu'on peut encore écrire

$$X_{n+1} = X_n + dt f\left(t + \frac{dt}{2}, k_1\right)$$

$$\text{où } k_1 = X_n + \frac{dt}{2} f(t, X_n)$$



## Précision de la méthode

$$X_{n+1} = X_n + dt f(t) + \frac{dt^2}{2} f'(t) + \frac{dt^3}{8} f''(t_n) + \dots$$

Or le vrai développement de Taylor de  $X_n$  est (sachant que  $dX/dt=f$ )

$$X_{n+1} = X_n + dt f(t) + \frac{dt^2}{2} f'(t) + \frac{dt^3}{6} f''(t_n) + \dots$$

**La méthode d'Euler modifiée est précise jusqu'à l'ordre 2**

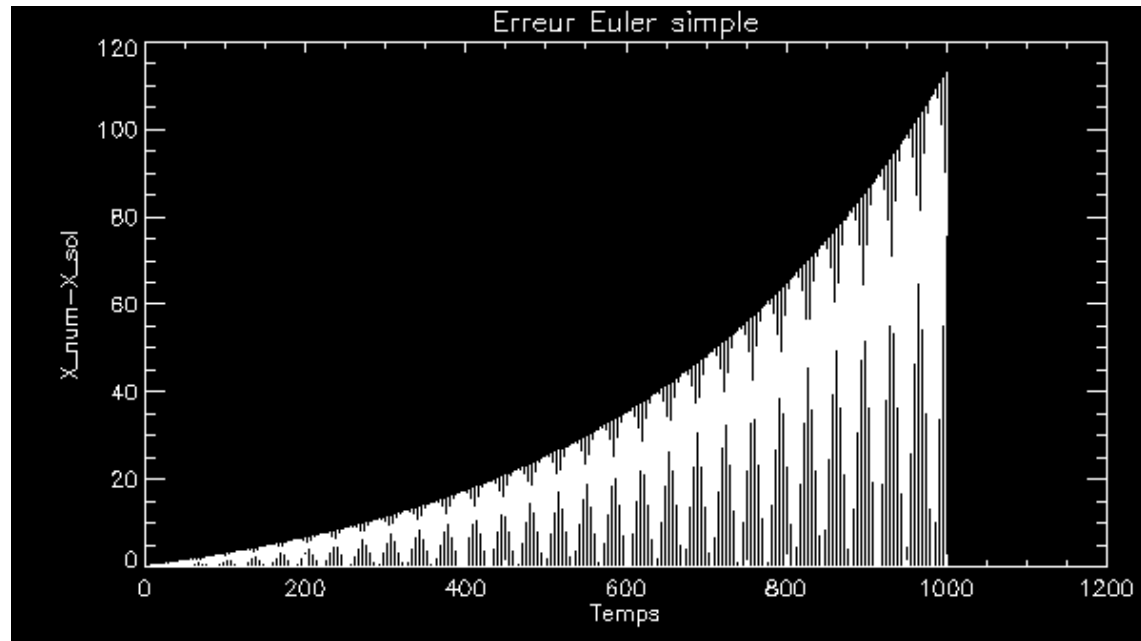
Application :

Exemple du ressort

$\text{Abs}(X_{\text{vrai}} - X_{\text{approx}})$

**Euler simple :**

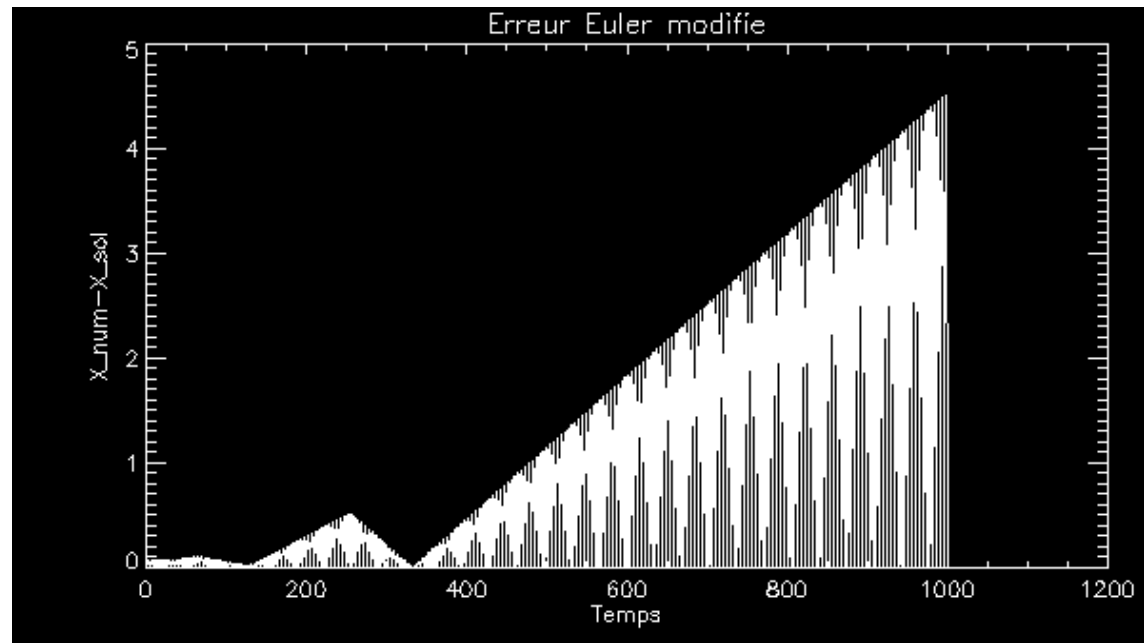
$\Delta t = 0.01$



**Euler modifié :**

Gain de précision :

**Un facteur 20 !!**



# Catalogue des intégrateurs d'ODE les plus courants.

L'ordre de l'intégrateur est entre parenthèses

Euler explicite (1)  $U_{n+1} = U_n + dt \cdot f(t_n, U_n)$

Euler implicite (1)  $U_{n+1} = U_n + dt \cdot f(t_{n+1}, U_{n+1})$

Leap Frog (2)  $U_{n+1} = U_{n-1} + 2dt \cdot f(t_n, U_n)$

Euler modifié (2)  $U_{n+1} = U_n + dt \cdot f\left(t_n + \frac{dt}{2}, U_n + \frac{dt}{2} f(t_n, U_n)\right)$

Cranck Nicholson(2)  $U_{n+1} = U_n + \frac{dt}{2} \cdot (f(t_n, U_n) + f(t_{n+1}, U_{n+1}))$

Adam Bashfort (2)  $U_{n+1} = U_n + dt \cdot \left(\frac{3}{2} f(t_n, U_n) - \frac{1}{2} f(t_{n-1}, U_{n-1})\right)$

Adam Bashfort (3)  $U_{n+1} = U_n + dt \cdot \left(\frac{23}{12} f(t_n, U_n) - \frac{16}{12} f(t_{n-1}, U_{n-1}) + \frac{5}{12} f(t_{n-2}, U_{n-2})\right)$

Adam Moulton (3)  $U_{n+1} = U_n + dt \cdot \left(\frac{5}{12} f(t_{n+1}, U_{n+1}) + \frac{8}{12} f(t_n, U_n) - \frac{1}{12} f(t_{n-1}, U_{n-1})\right)$

Runge Kutta (2)

$$\begin{cases} k_1 = dt \cdot f(t_n, U_n) \\ k_2 = dt \cdot f(t_n + dt, U_n + k_1) \\ U_{n+1} = U_n + \frac{1}{2}(k_1 + k_2) \end{cases}$$

Runge Kutta (4)

$$\begin{cases} k_1 = dt \cdot f(t_n, U_n) \\ k_2 = dt \cdot f(t_n + \frac{dt}{2}, U_n + \frac{k_1}{2}) \\ k_3 = dt \cdot f(t_n + \frac{dt}{2}, U_n + \frac{k_2}{2}) \\ k_4 = dt \cdot f(t_n + dt, U_n + k_3) \\ U_{n+1} = U_n + \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \end{cases}$$

Vers les méthodes adaptatives et de haute précision :

## Le RK4 adaptatif : contrôle de l'erreur

Idée : comment contrôler  $dt$  pour être sûr que l'erreur ne soit pas trop grande

**Plusieurs méthodes existent**, Une méthode à pas de temps adaptatif est plus complexe à mettre en place , mais souvent plus rapide et plus précise.

Nécessite de BIEN connaître la physique du système

### Difficulté

**Comme on ne connaît pas à *priori* la solution exacte, il est difficile d'estimer l'erreur.**

Une méthode usuelle est de réaliser que si le calcul est faux, ou très approximé, La solution trouvée par l'intégrateur devrait dépendre *très* fortement de la valeur de  $dt$ .

Pourquoi ? Par ce que :  $\lim (F(X_n)) = \text{Solution}$  , quand  $dt \rightarrow 0$

Donc quand on est loin de la solution (contraposée)  $F$  dépend fortement du pas de temps.

**Idée** : Comparer différentes évaluations de l'intégrateur , soit en fonction du pas de temps, soit en fonction de l'Ordre de l'intégrateur.

Il faut introduire un paramètre de précision,  $\Delta_0$  , **la précision désirée**

**1<sup>ère</sup> technique** : **Faire 2 évaluations du résultat, en prenant  $dt$  et  $dt/2$ . (double le temps de calcul)** . Si les deux résultats sont égaux plus ou moins  $\Delta_0$  Alors la solution est acceptable, sinon il faut diminuer le pas de temps.

Méthode simple mais très couteuse en temps :

**Combien d' évaluations ?**

4 pour le pas de temps à  $dt$

8 pour 2 pas de temps à  $dt/2$  MAIS la 1ere à  $dt/2$  est la même que celle à  $dt$  donc 12 au total.

A comparer avec 8 évaluations (on avance avec  $dt/2$ )

Donc une augmentation du temps de calcul de  $11/8 \sim 1.4$   
40% plus lent

**2<sup>ème</sup> méthode :** Plus élégante et plus rapide : Runge Kutta 5 adaptatif  
Méthode de Fehlberg pour le Runge Kutta

Fehlberg a étudié le RK5. Il nécessite 6 appels à la dérivée

Le RK5 s'écrit d'une manière générale

$$k_1 = hf(x_n, y_n)$$

$$k_2 = hf(x_n + a_2h, y_n + b_{21}k_1)$$

...

$$k_6 = hf(x_n + a_6h, y_n + b_{61}k_1 + \dots + b_{65}k_5)$$

$$y_{n+1} = y_n + c_1k_1 + c_2k_2 + c_3k_3 + c_4k_4 + c_5k_5 + c_6k_6 + O(h^6)$$

**Le résultat est d'ordre 5**



**Mais Fehlberg à découvert q'une autre combinaison de coefficients donne un résultat d'ordre 4**

**Ordre 5**

$$y_{n+1} = y_n + c_1 k_1 + c_2 k_2 + c_3 k_3 + c_4 k_4 + c_5 k_5 + c_6 k_6 + O(h^6)$$

**Ordre 4**

$$y_{n+1}^* = y_n + c_1^* k_1 + c_2^* k_2 + c_3^* k_3 + c_4^* k_4 + c_5^* k_5 + c_6^* k_6 + O(h^5)$$

**DONC : En calculant les mêmes quantités k1 à k6, on peut avoir deux évaluations différentes du résultat :**

**$Y_n$  à l'ordre 5**

**$Y_n^*$  à l'ordre 4**

**=>  $ABS(Y_n^* - Y_n)$  est une estimation de l'erreur à l'ordre 5**

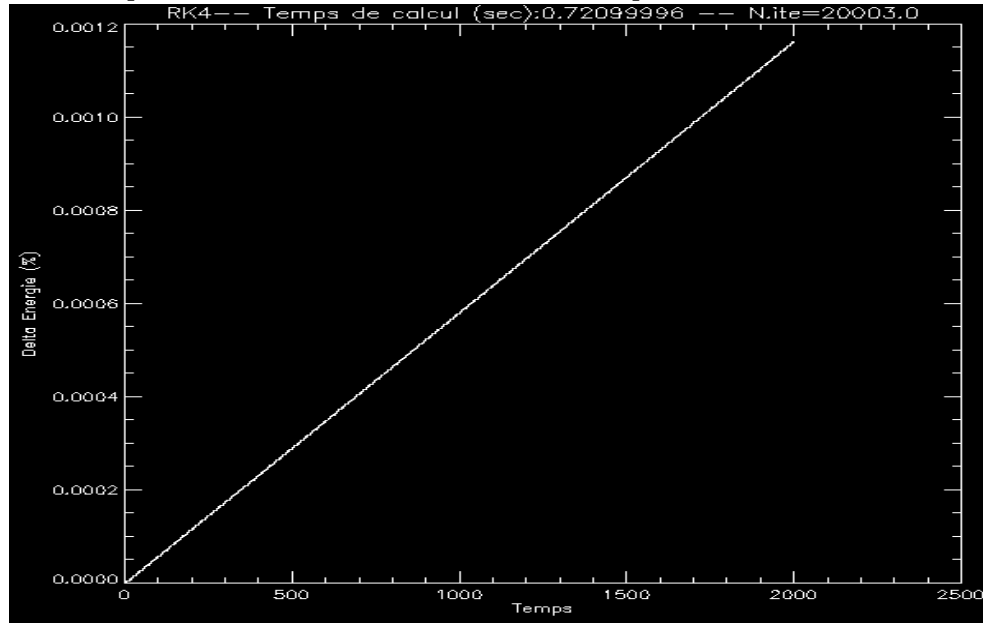
## Un pas de temps typique du RK5 adaptatif

1. Évalue  $Y_n$  et  $Y_n^*$
2. Calculer  $\Delta$
3. Calculer  $dt'$
4. Si  $dt' < dt$  retourner en 2 pour vérifier
5. Remplacer  $dt'$  par  $dt$
6. Retourner en 1 (pas de temps suivant)

**ATTENTION : Il est en général dangereux de travailler avec des pas de temps adaptatifs, car 1 pas de temps mal calculé peut fausser tout le calcul. Il faut bien contrôler les instabilités.**

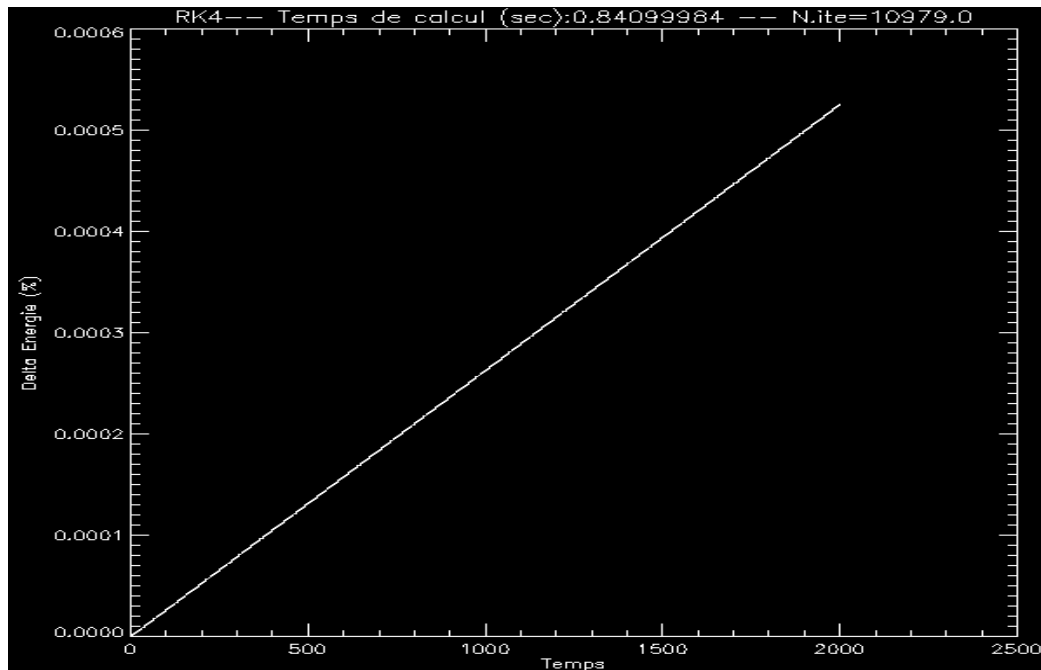
**MAIS si ça marche, cela vaut la peine de l'utiliser**

## Exemple : RK4 Vs. RK5 Adaptatif. Problème de la planète



Energie RK4

$\Delta t = 0.2$

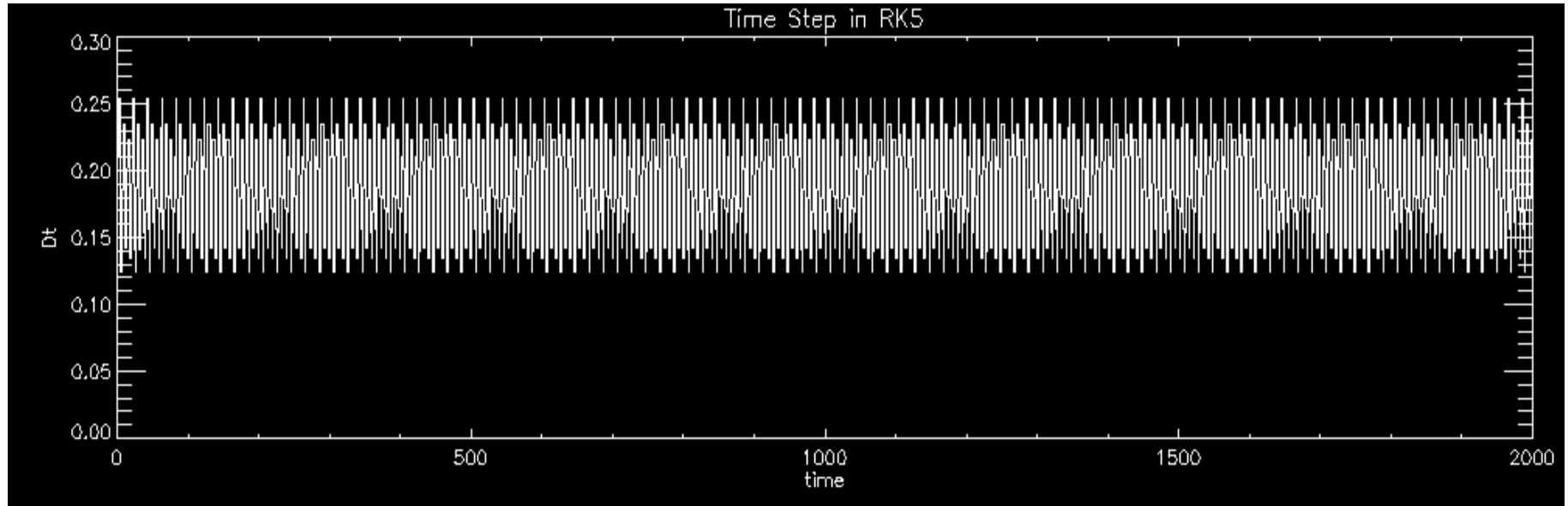


Energie RK5 Adaptatif

L'erreur sur E croît 2 fois  
moins vite

Temps de calcul comparable

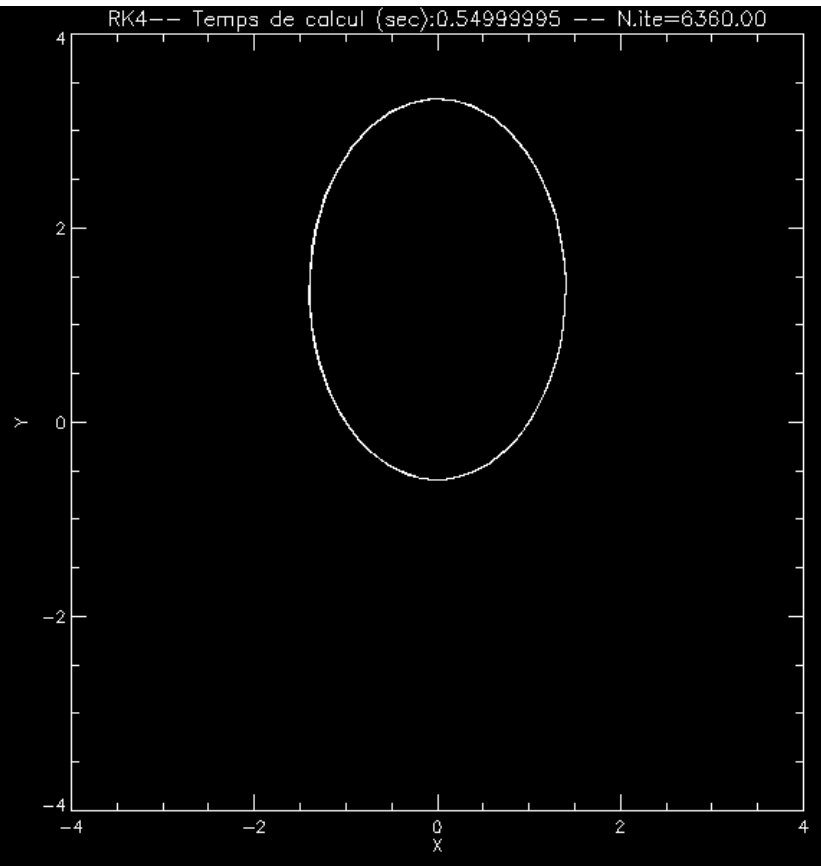
## Voici le pas de temps du RK5 Adaptatif



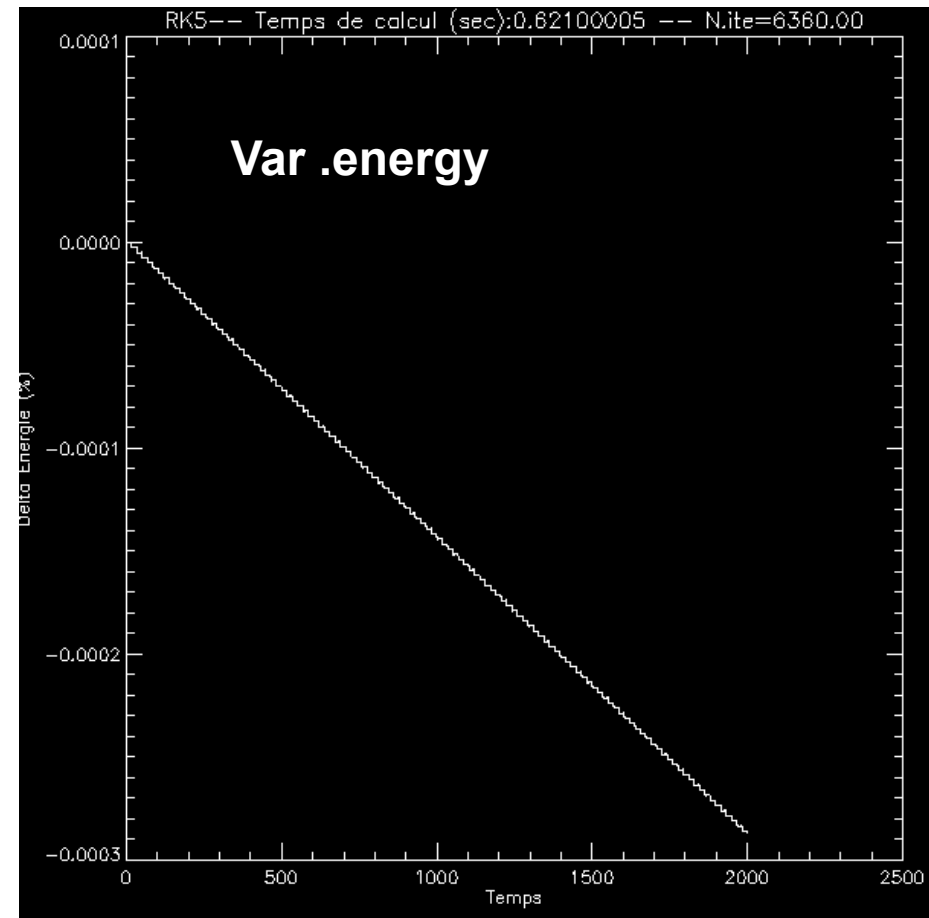
**dt diminue quand la planète accélère (périhélie)**

**dt augmente quand la planète décélère (Aphélie)**

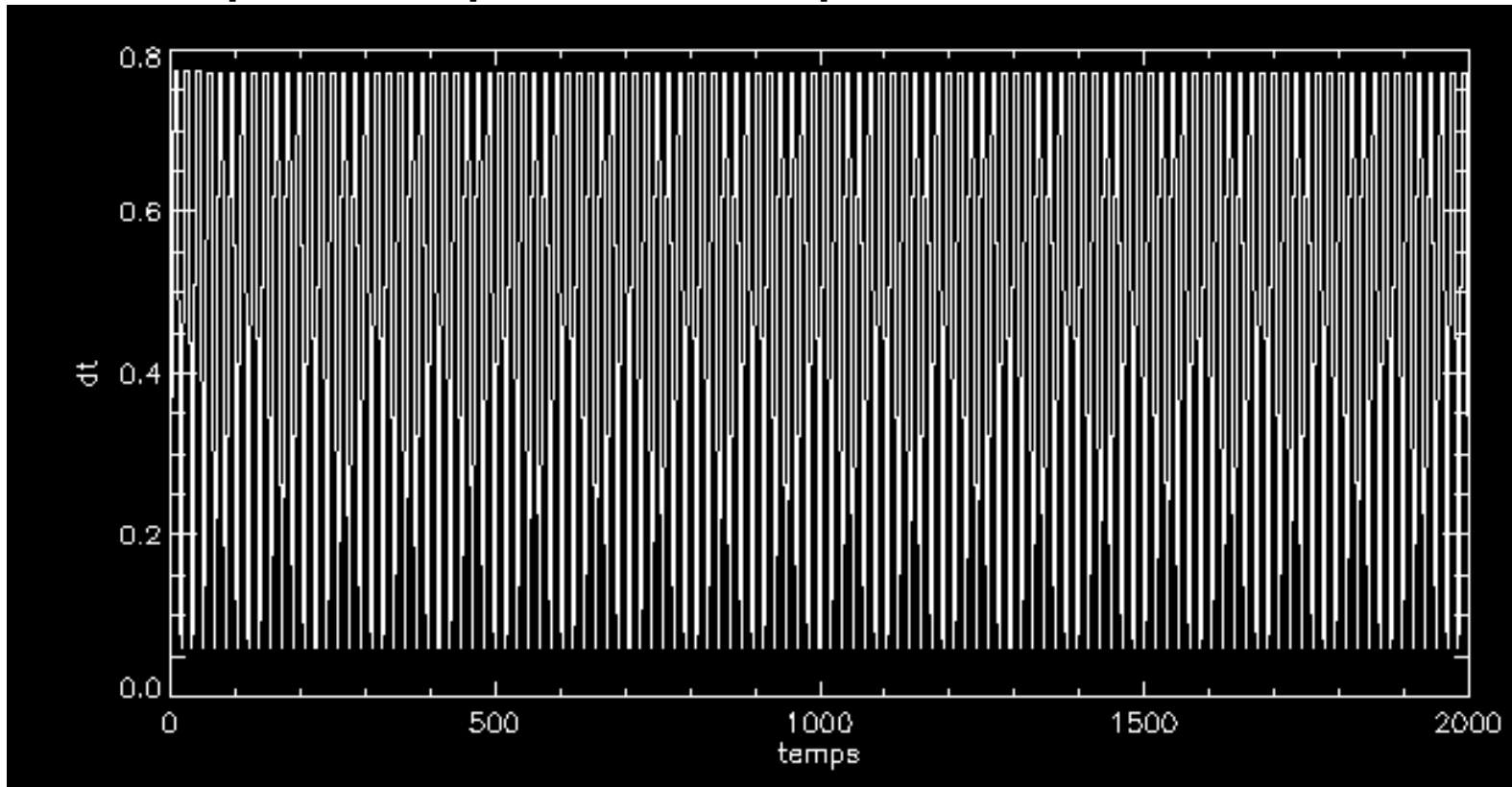
Prenons une orbite TRES allongée (difficile à intégrer)  
Avec un gd pas de temps initial:



**RK5 adaptatif**

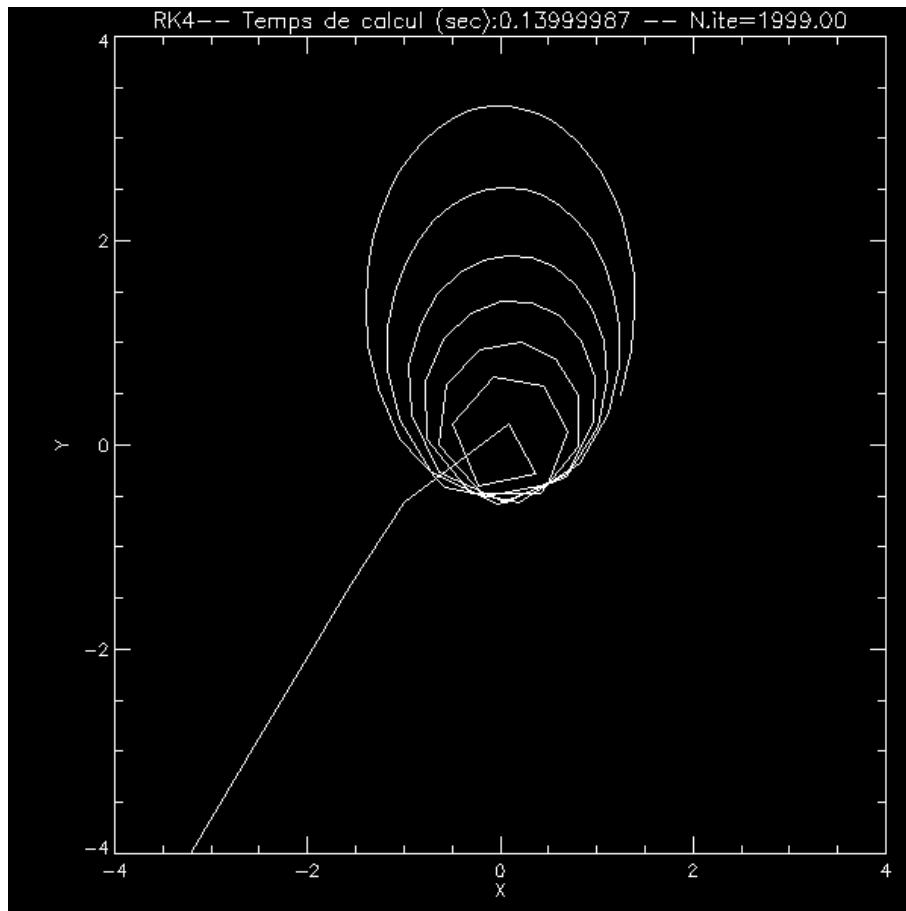


## Evolution du pas de temps dur RK5 adaptatif:



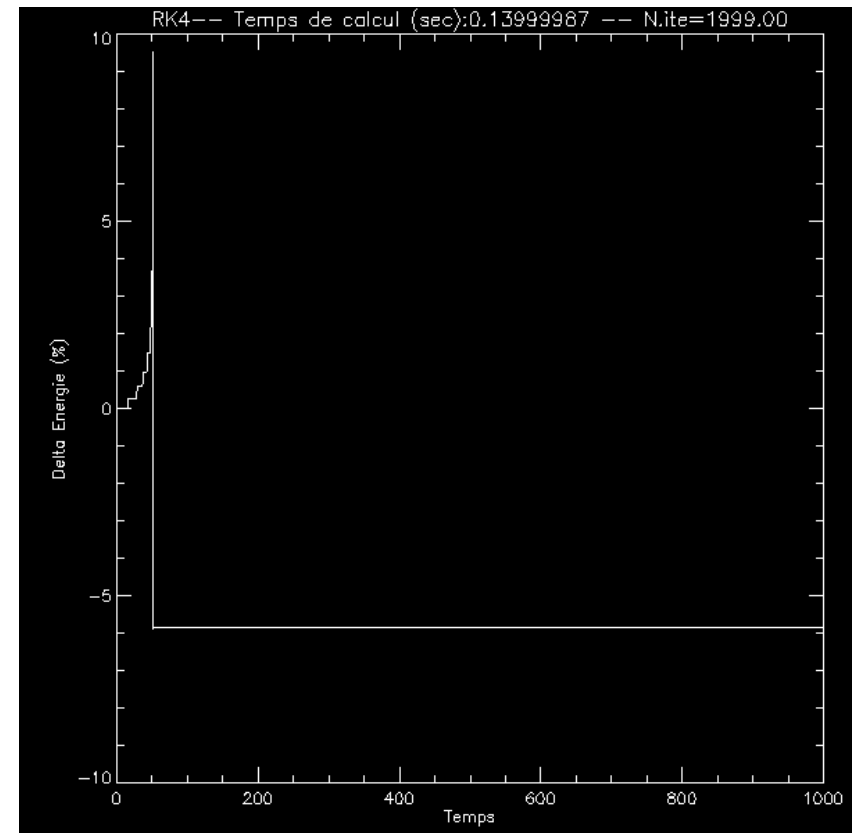
**Le pas de temps s'adapte à l'orbite en permanence.  
Pas de temps initial : 0.5**

## RK4 avec $DT=0.5$ , mêmes conditions initiales



Humm.....

Energie ....



## EN GUISE DE CONCLUSION SUR LES ODE

1. Bien choisir son intégrateur en fonction du problème  
(Problème simple ? Problème Raide ? etc...)
2. Un ordre élevé ne signifie pas TOUJOURS une précision élevée
3. Parfois un intégrateur Implicite peut vous simplifier la vie et augmenter la précision

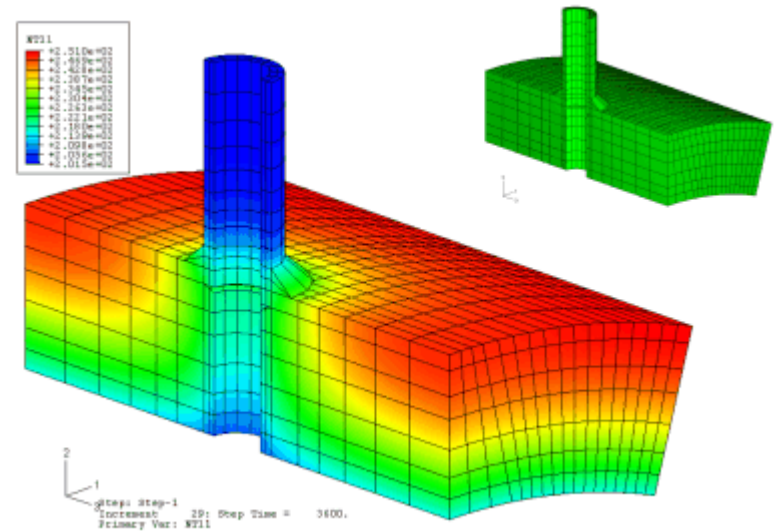
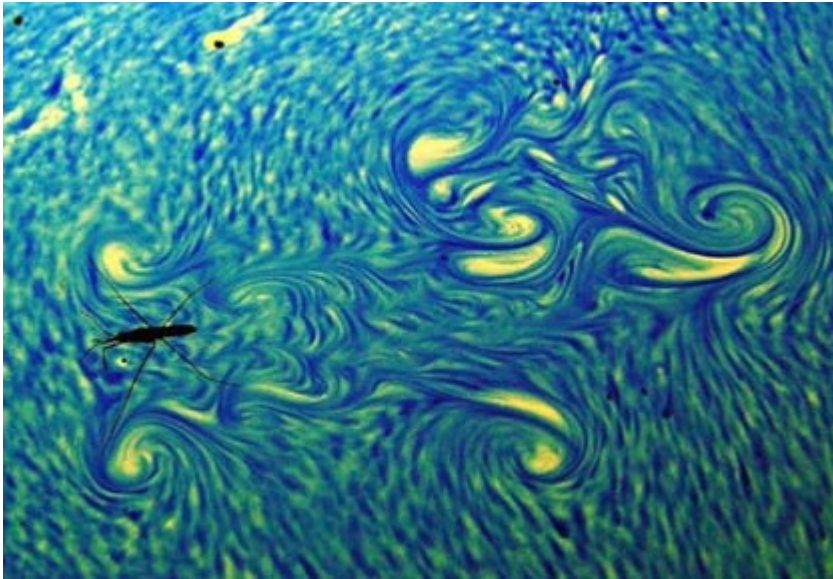
**Ne jamais croire le résultat d'un intégrateur trop vite !!!**

4. Toujours contrôler ce que l'on fait  
:comparer aux solutions analytiques, Contrôler l'énergie, contrôler le résultat en fonction du pas de temps
5. Utiliser un pas de temps adaptatif avec \*beaucoup\* de précautions



# Les Equations aux dérivées partielles ...

## Le cas du transport



De nombreux problèmes en physiques sont décrits par des équations d'évolution qui implique plusieurs paramètres (t et x souvent)

Comme elles impliquent plusieurs paramètres, l'équation différentielle fait intervenir des dérivées *partielles* par rapport à chacun des paramètres

$$c^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = f(x, t) \quad \text{Equation d'onde}$$

$$D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \frac{\partial u}{\partial t} = f(x, t) \quad \text{Equation de diffusion (chaleur)}$$

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + i\hbar \frac{\partial u}{\partial t} - U(x) u = 0 \quad \text{Equation de Shrodinger}$$

D'où le terme « PDE » pour « Partial Differential Equation »

## Il y a deux grandes approches de résolutions

Soit on travail dans l'espace « physique » (espace réel) et les méthodes seront appelées **Différences finies** ou **Volumes Finis** ou **Eléments Finis** .  
On travaille sur une grille d'espace et de temps.

Soit on travail dans l'espace de Fourier (décomposition des fonctions sur une base de fourrier) , et les méthodes seront appelées **Spectrales**. On travaille sur une base finie (donc incomplète) sur laquelle les solutions se décomposent. On aura donc une grille qui contiendra les termes de la décomposition.

**Nous étudierons avant tout les méthodes dans l'espace physique**


Pour commencer, un exemple :  
**L'équation d'advection**

L'équation d'advection décrit comment une quantité est transportée dans un courant (par exemple un polluant dans de l'eau).

$U(x,y,z,t)$  = concentration d'un élément à la position  $(x,y,z)$  et à  $t$

Dérivée totale

Production de polluant à l'instant  $t$  à la position  $r$


$$\frac{Du}{Dt} = f(r,t) \Leftrightarrow$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial t} + \frac{\partial u}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial t} + \frac{\partial u}{\partial z} \frac{\partial z}{\partial t} = f(r,t) \Leftrightarrow$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \vec{v} \cdot \vec{\nabla} u = f(r,t)$$

«  $v$  scalaire gradient de  $u$  »

**Si on étudie uniquement le cas à 1D**  
**Et si la vitesse de l'eau est constante = C**

**Alors l'équation d'advection (transport) devient :**

$$\partial_t u(x, t) + c \partial_x u(x, t) = f(x, t)$$

↑  
dérivée partielle  
par rapport au temps

↑  
dérivée partielle  
par rapport à l'espace

**Si C n'est pas constant :**

$$\partial_t u(x, t) + \partial_x cu(x, t) = f(x, t)$$

Nous allons d'abord étudier quelques propriétés de cette équation  
Ensuite nous verrons comment la résoudre numériquement

# Importance de l'équation d'advection (ou de transport)

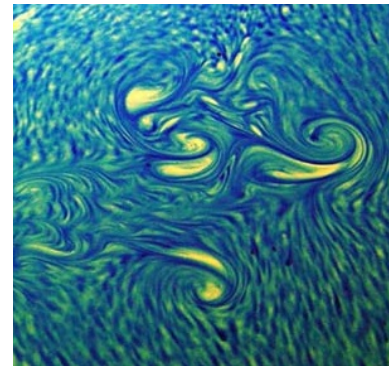
De nombreux problèmes physique sont en FAIT des problèmes de transport.

Exemple : Equations de Euler  
(mécanique des fluides non visqueux)

$$\rho \frac{\partial}{\partial t} + U \text{grad}(\rho) + \rho \cdot \text{Div}(U) = 0$$

$$\rho \frac{\partial}{\partial t} (U \downarrow r, U \downarrow \theta) + \rho (U \downarrow r \frac{\partial U \downarrow r}{\partial r} - U \downarrow \theta \frac{\partial U \downarrow \theta}{\partial r} + U \downarrow r \frac{\partial U \downarrow \theta}{\partial r} + U \downarrow \theta \frac{\partial U \downarrow r}{\partial r}) + (\frac{\partial P}{\partial r}, 0) = 0$$

$$\rho \frac{\partial \epsilon}{\partial t} + \rho U \text{grad}(\epsilon) + P \cdot \text{Div}(U) = 0$$



Conservation masse.

Conservation Qtt. Mvmt

Conservation Energie

# Avec un peu de réécriture en 1D ... et une aspirine

$$\frac{\partial r \rho}{\partial t} + \frac{\partial r U \rho}{\partial r} = 0$$

Masse

$$\frac{\partial r U \rho}{\partial t} + \frac{\partial r \rho U^2}{\partial r} = \rho U^2 - r \frac{\partial P}{\partial r}$$

Qtt de mouvement

$$\frac{\partial r U \theta}{\partial t} + \frac{\partial r \rho U \theta}{\partial r} = -\rho U \theta$$

$$\frac{\partial r \epsilon}{\partial t} + \frac{\partial r U \rho \epsilon}{\partial r} = -P \left( \frac{\partial r U \rho}{\partial r} + U \rho \right)$$

Energie

# Oh ... des flux partout !

$$\frac{\partial r \rho}{\partial t} + \frac{\partial r U_r \rho}{\partial r} = 0$$

Masse

FLUX de  $\rho$  (conservation)  
Vitesse :  $U_r$

$$\frac{\partial r \rho U_r}{\partial t} + \frac{\partial r \rho U_r^2}{\partial r} = \rho U_r \theta - r \frac{\partial P}{\partial r}$$

FLUX de  $\rho U_r$  (production)  
Vitesse :  $U_r$

$$\frac{\partial r \rho U_r \theta}{\partial t} + \frac{\partial r \rho U_r U_r \theta}{\partial r} = -\rho U_r U_r \theta$$

FLUX de  $\rho U_\theta$  (production)  
Vitesse :  $U_r$

$$\frac{\partial r \rho \epsilon}{\partial t} + \frac{\partial r \rho U_r \epsilon}{\partial r} = -P \cdot \left( \frac{\partial r U_r}{\partial r} + U_r \right)$$

Energie

Flux d'Energie Interne  
(production)  
Vitesse :  $U_r$

Même forme fonctionnelle que l'équation d'advection + qq termes sources

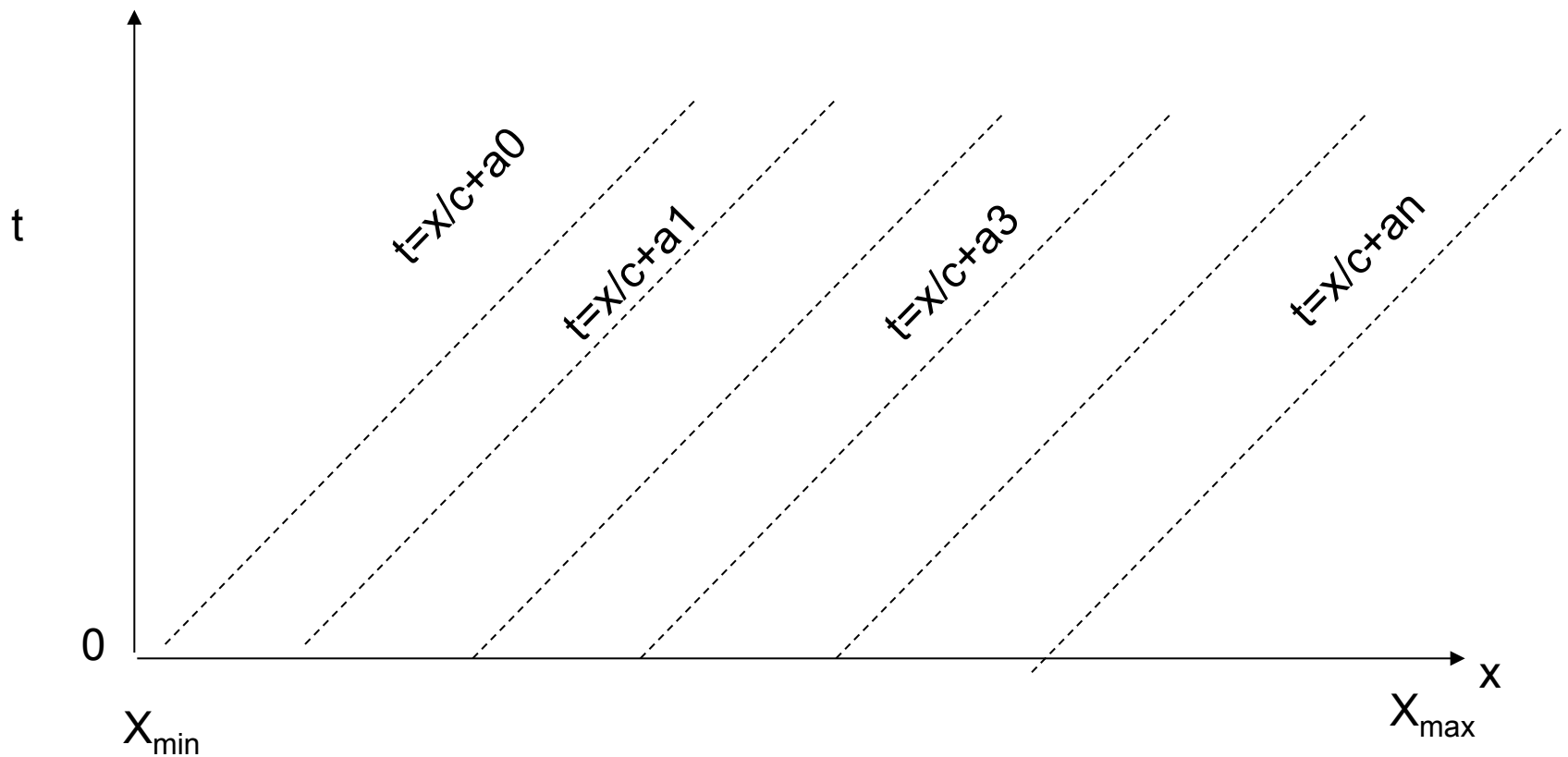


Une propriété importante de l'équation d'advection : les caractéristiques

Une propriété remarquable de l'équation d'advection (que l'on retrouve dans les équations d'ondes) **est que la solution se propage à la vitesse C. On appelle cela une *courbe caractéristique*.**

Cette propriété va nous être très utile.

$$\partial_t u(x, t) + c \partial_x u(x, t) = f(x, t)$$

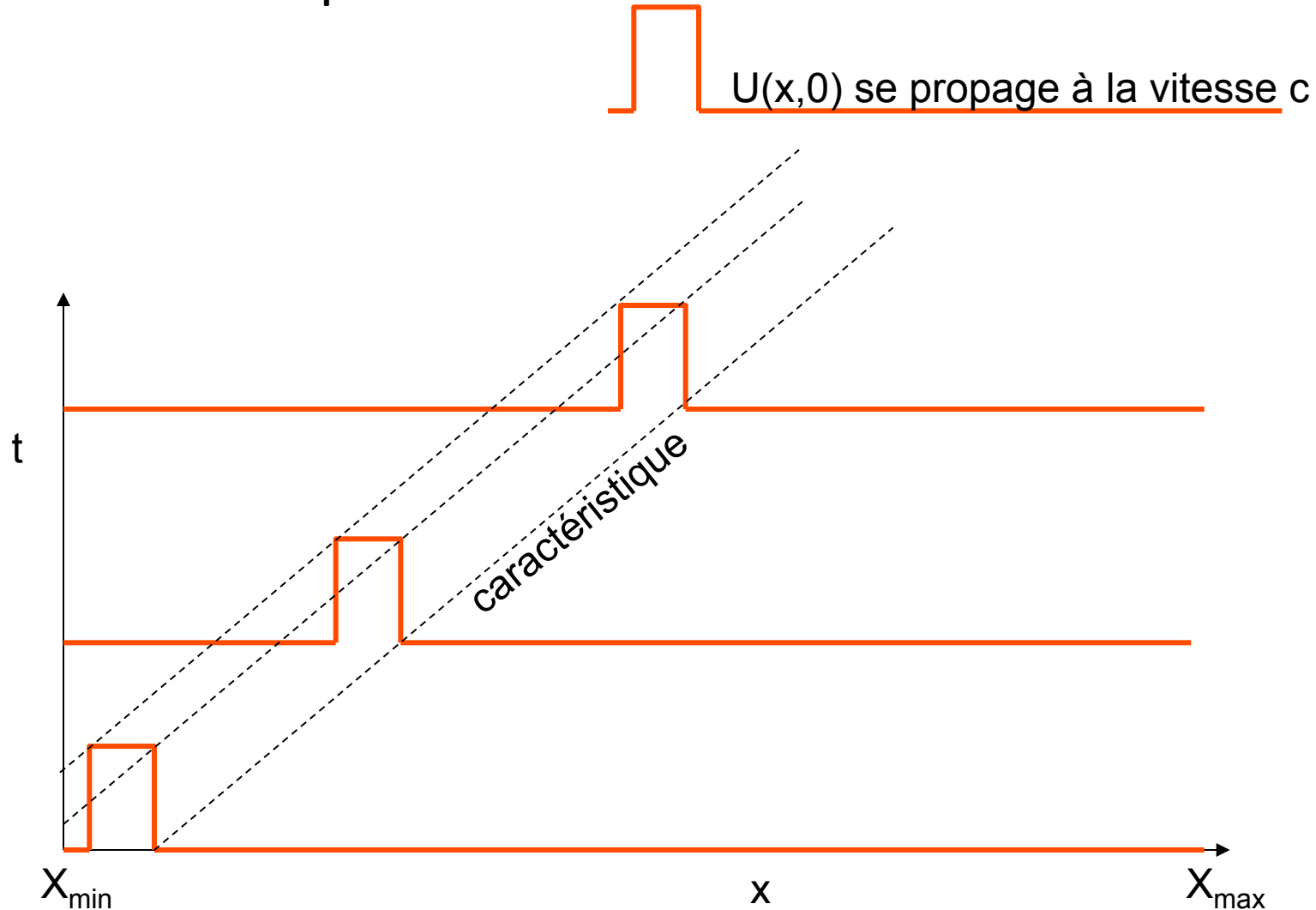


Ces droites ( de pente  $1/C$ ) sont les courbes *caractéristiques* de l'équation d'advection. La solution  $u(x, 0)$  se propage le long de ces droites

Que vaut  $u(x,t)$  ? Si  $x-ct=a$  alors  $u(x,t)=u(a-ct, 0)$

Si  $a-ct$  tombe en dehors de domaine de  $X$  initial  $= [X_{\min}, X_{\max}]$ , alors il faut imposer une condition limite  $\Leftrightarrow$  si  $(a-ct) \notin [X_{\min}, X_{\max}]$  alors  $u(x,t)=\varphi(a-ct)$

L'équation de transport ne fait que « propager » une conditions initiale le long d'une courbe Appelée « caractéristique »



On retrouve le même comportement dans l'équation d'ondes

Notez que la donnée initiale  $U(x,0)$  est évacuée après un temps  $(X_{\max}-X_{\min})/c$

Qui est le temps de traversée du domaine de résolution

# LA GRILLE DE RESOLUTION

On résout l'équation d'advection sur une grille, donc chaque boîte a pour côté :  $dx \times dt$

$$x_j = a + jdx \quad \text{et} \quad dx = (b-a)/J$$

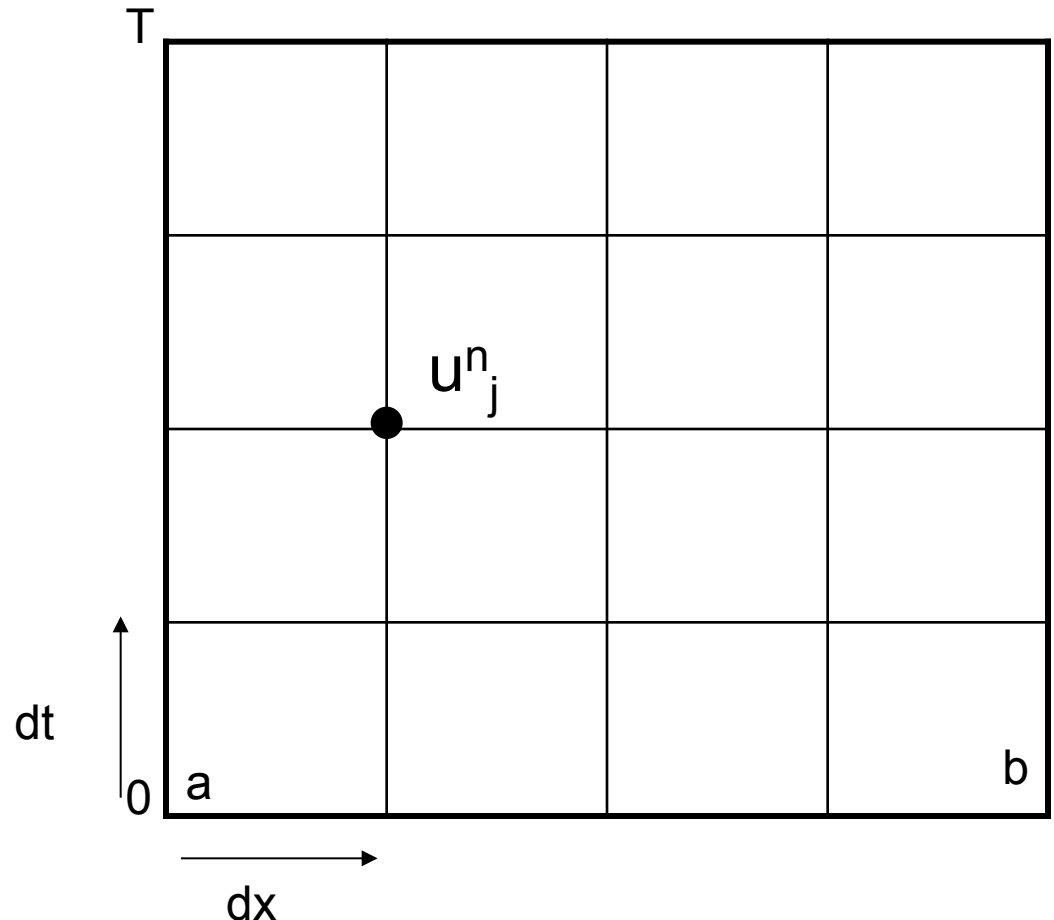
$$t_n = ndt \quad \text{et} \quad dt = T/N$$

$J = \text{nb de boîtes en } X$

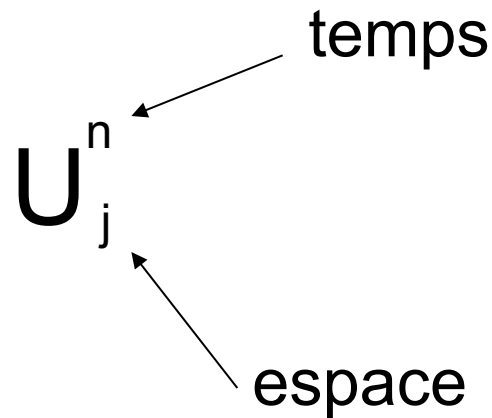
$N = \text{nb de boîtes en } T$

Soit  $U^n_j$  l'approximation numérique de  $u(x_j, t_n)$

L'état initial du système est donné par  $U^0_j$  pour tout  $j = u(x_j, 0)$



# notations



$n$  varie de 1 à  $N$   
 $j$  varie de 1 à  $J$

$n=0$  : condition initiale

$j=0$  ou  $J+1$  : condition limites  
au bord du domaine

L'évolution du système se fera en calculant progressivement  
les valeurs de  $U_j^{n+1}$  pour tout  $J$  en fonction des valeurs de  $U_j^n$

# Résolution par différences finies

La méthode la plus simple est celle des *différences finies* =  
*approximation des dérivées par des différences*

L'équation à résoudre est

$$\partial_t u(x, t) + c \partial_x u(x, t) = 0$$

Appliquons des méthodes d'ordre 1

Comment calculer  $d U_j^n / dt \Leftrightarrow d u(x_j, t_n) / dt$  ?

Comment calculer  $d U_j^n / dx \Leftrightarrow d u(x_j, t_n) / dx$  ?

Au premier ordre , on peut dire :

$$\frac{\partial U_j^n}{\partial t} \approx \frac{U_j^{n+1} - U_j^n}{dt}$$

← Opérateur différence avant explicite:  
 $D^+(f_k) = f_{k+1} - f_k$

*et*

$$\frac{\partial U_j^n}{\partial x} \approx \frac{U_j^n - U_{j-1}^n}{dx}$$

← Opérateur différence arrière explicite:  
 $D^-(f_k) = f_k - f_{k-1}$

Le choix de  $D^-$  est motivé par le fait que l'information se déplace *en avant*. L'info pour  $X+1$  vient de  $X$

Donc l'équation devient : ????

$$\partial_t u(x, t) + c \partial_x u(x, t) = 0$$

$$\frac{\partial U_j^n}{\partial t} \approx \frac{U_j^{n+1} - U_j^n}{dt}$$

$$\frac{\partial U_j^n}{\partial x} \approx \frac{U_j^n - U_{j-1}^n}{dx}$$

$$\frac{U_j^{n+1} - U_j^n}{dt} + c \frac{U_j^n - U_{j-1}^n}{dx} = 0 \Rightarrow$$

$$U_j^{n+1} = U_j^n - \left( \frac{cdt}{dx} \right) (U_j^n - U_{j-1}^n)$$



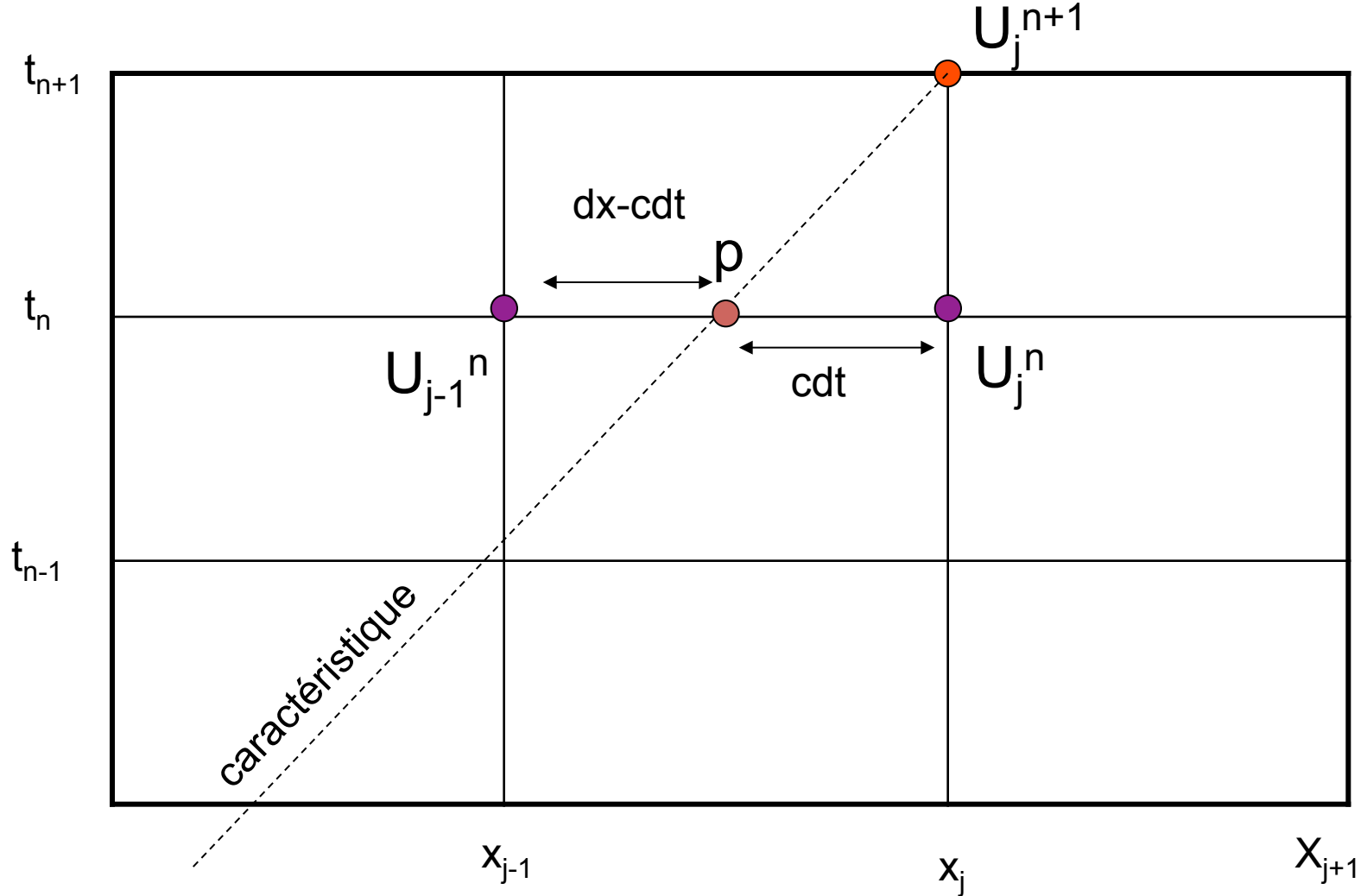
Le schéma d'intégration sera donc:

$$U_j^{n+1} = U_j^n - \left( \frac{cdt}{dx} \right) (U_j^n - U_{j-1}^n)$$

Avec  $U_{j+1}^n$  et  $U_0^n$  donné par les conditions limites du problème

On notera :  $\sigma = \frac{cdt}{dx}$

Condition de validité du schéma sur  $\sigma$  ??



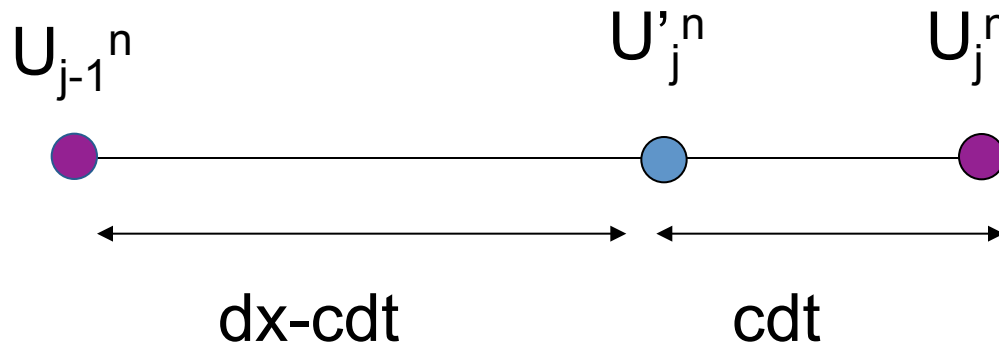
Normalement  $U_j^{n+1} = U_p^n$  avec  $X_p$  situé entre  $x_{j-1}$  et  $x_j$

Le schéma nous dit donc  $U_j^{n+1} = U_j^n - cdt/dx (U_j^n - U_{j-1}^n)$

**=> On a bien fait de prendre  $D^-$  pour la dérivée spatiale car l'info vient bien de la gauche !!!**

Comme  $U_j^{n+1} = U_j^n - cdt/dx (U_j^n - U_{j-1}^n) = (1-\sigma) U_j^n + \sigma U_{j-1}^n$

➡ c'est en fait une interpolation linéaire de  $U_p^n$  !!!



Pour que l'interpolation soit efficace il faut que

$cdt \ll dx \Rightarrow \sigma \ll 1$  : **CONDITION DE COURANT / CFL**  
(CFL : courant-Friedrichs-Levy)

La condition de courant est .. *très courante* quand on intègre des PDE. On la rencontre toujours sous une forme ou sous une autre

On peut la comprendre comme suit

Si  $c$  est la vitesse de transmission de l'info.

Si  $dx$  est le pas d'espace

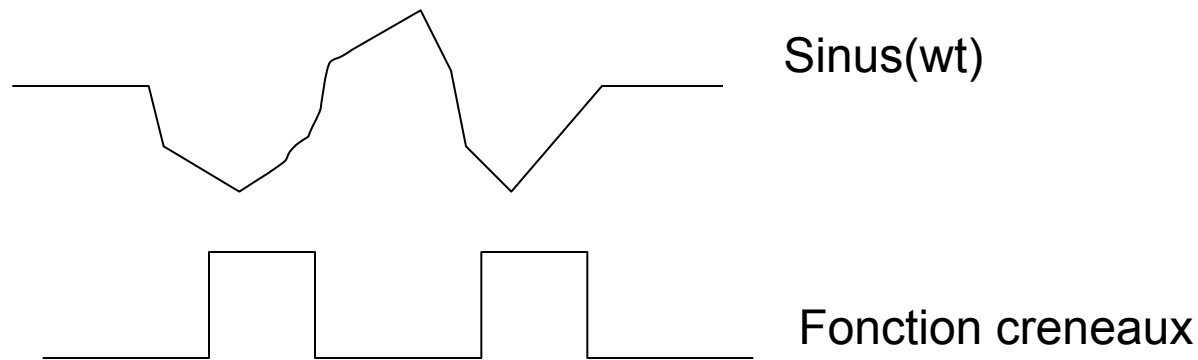
Si  $dt$  est le de temps

*Il faut que le pas de temps  $dt$  soit beaucoup plus court que le temps de transmission de l'info la longueur  $dx$  :*

$dt \ll dx/c \Leftrightarrow cdt/dx \ll 1$  **CONDITION CFL**

Conditions limites en dehors du domaine:  $U=0$

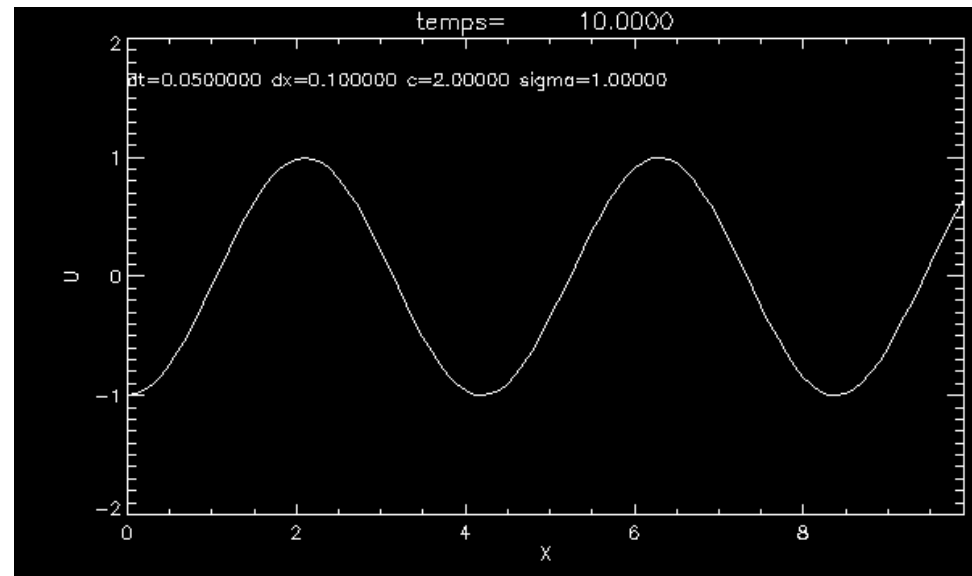
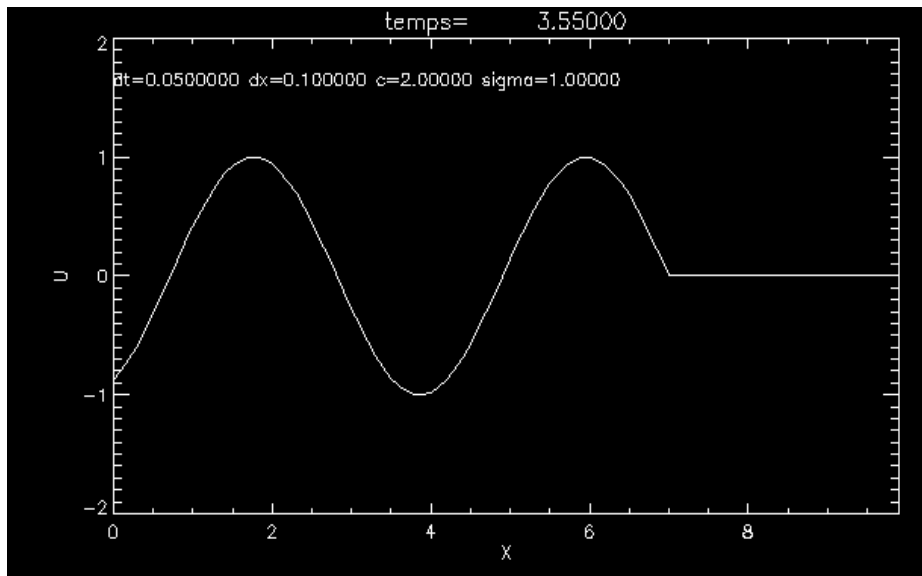
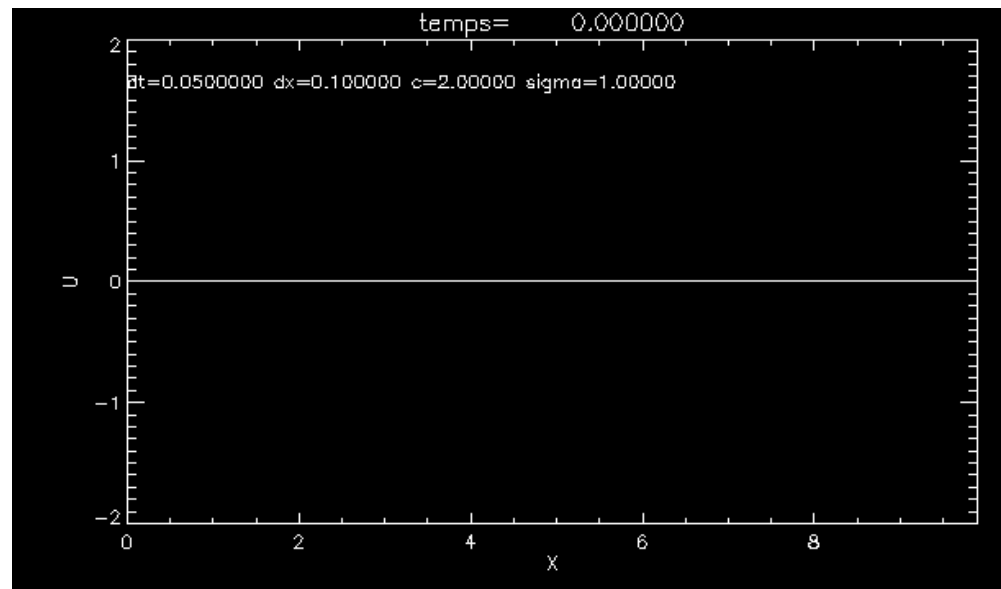
Conditions aux bords :  $U_0^{n+1}$  A DEFINIR !!



1. Initialiser  $U^0$ ,  $dx$ ,  $dt$ ,  $c$
- 2. Calculer  $U^{n+1} = A U^n$
3. Mettre  $U_0^{n+1} = \text{cste}$  pour la condition au bord
4. retourner en 2

# Exemple d'intégration numérique

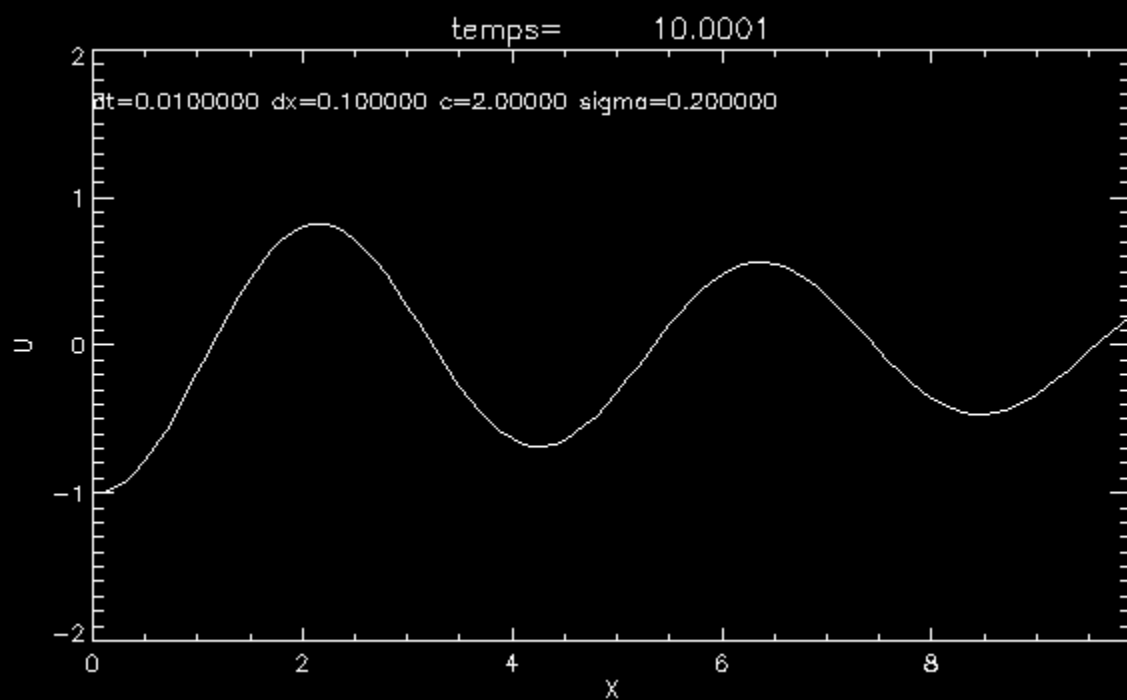
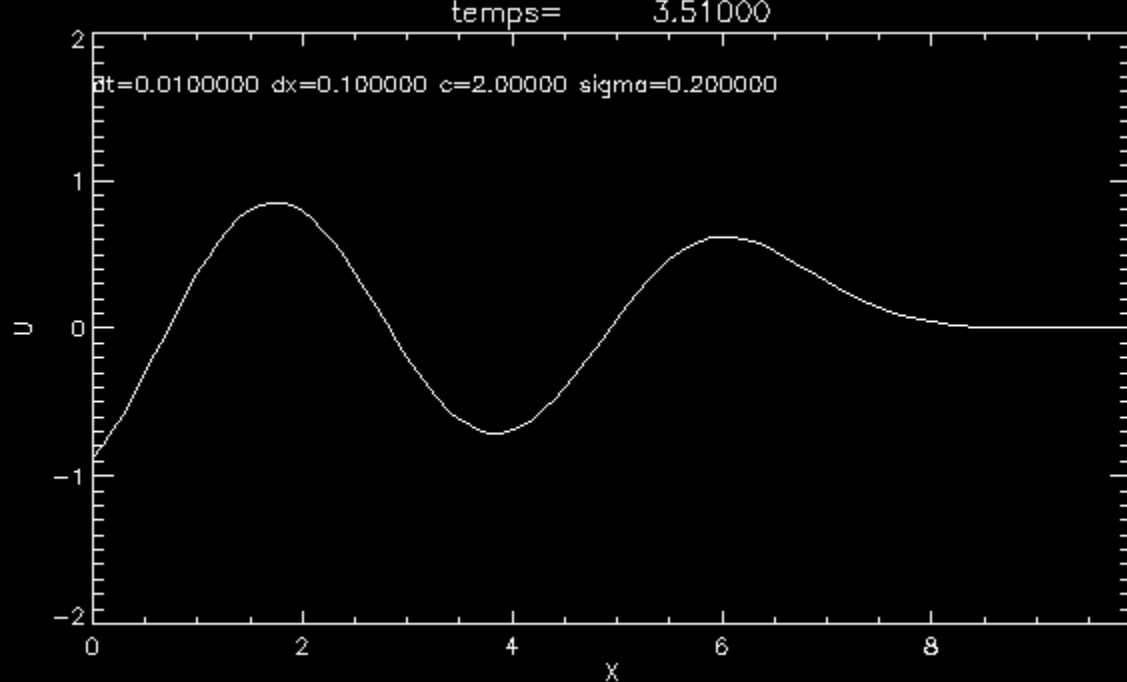
Condition au bord :  $\sin(\text{temps})$



Cas Pathologique  $\sigma = 1$ , solution exacte  $U_j^{n+1} = U_{j-1}^n \dots$ , propre à l'UPWIND  
 $\sigma = 1$ , en pratique IMPOSSIBLE ..

Prenons  $dt=0.01$   
 $\Rightarrow \sigma=0.2$

Que se passe-t-il ?

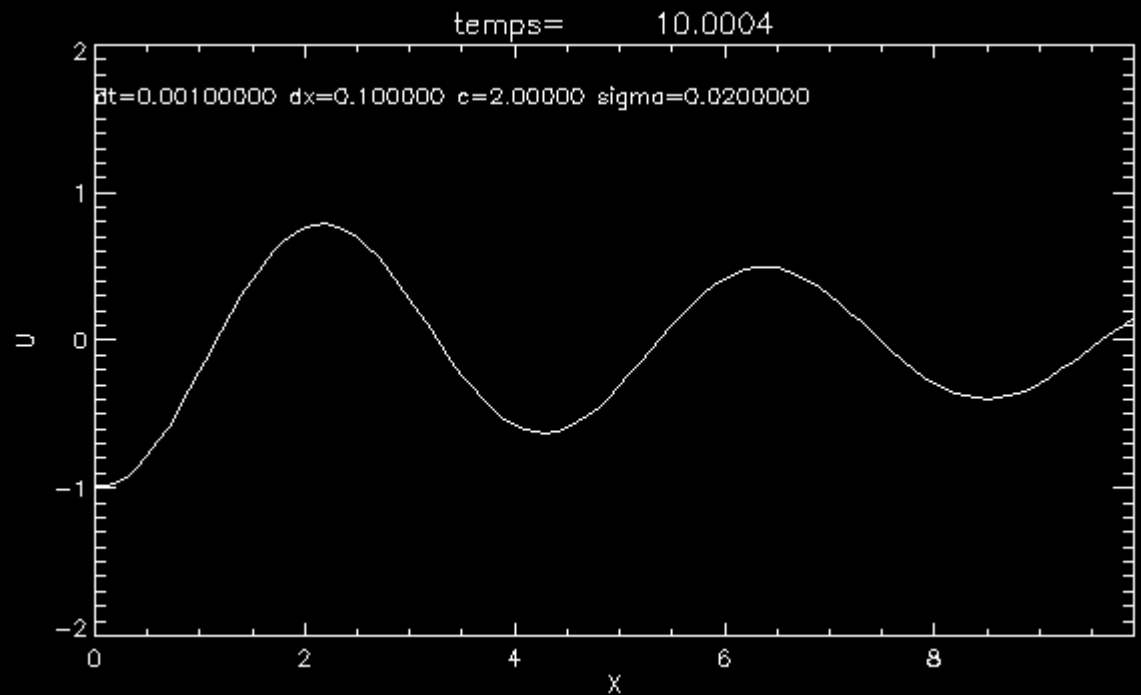
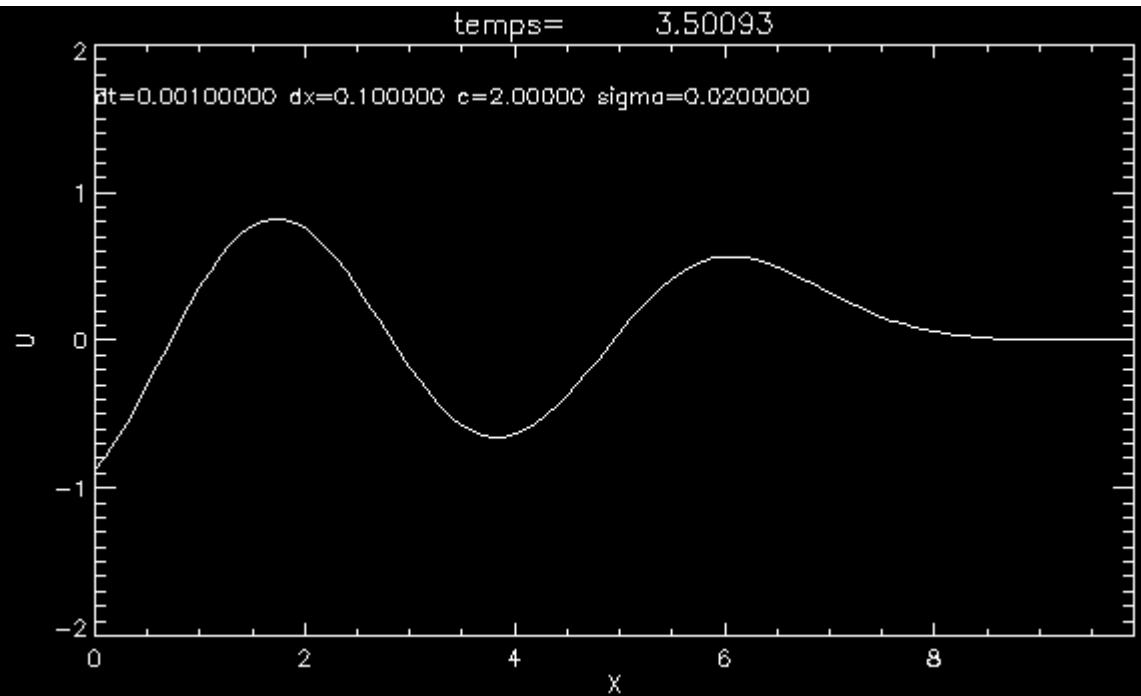


$dt=0.001$   
 $\sigma=0.02$

On observe de la  
« diffusion numérique »

=>

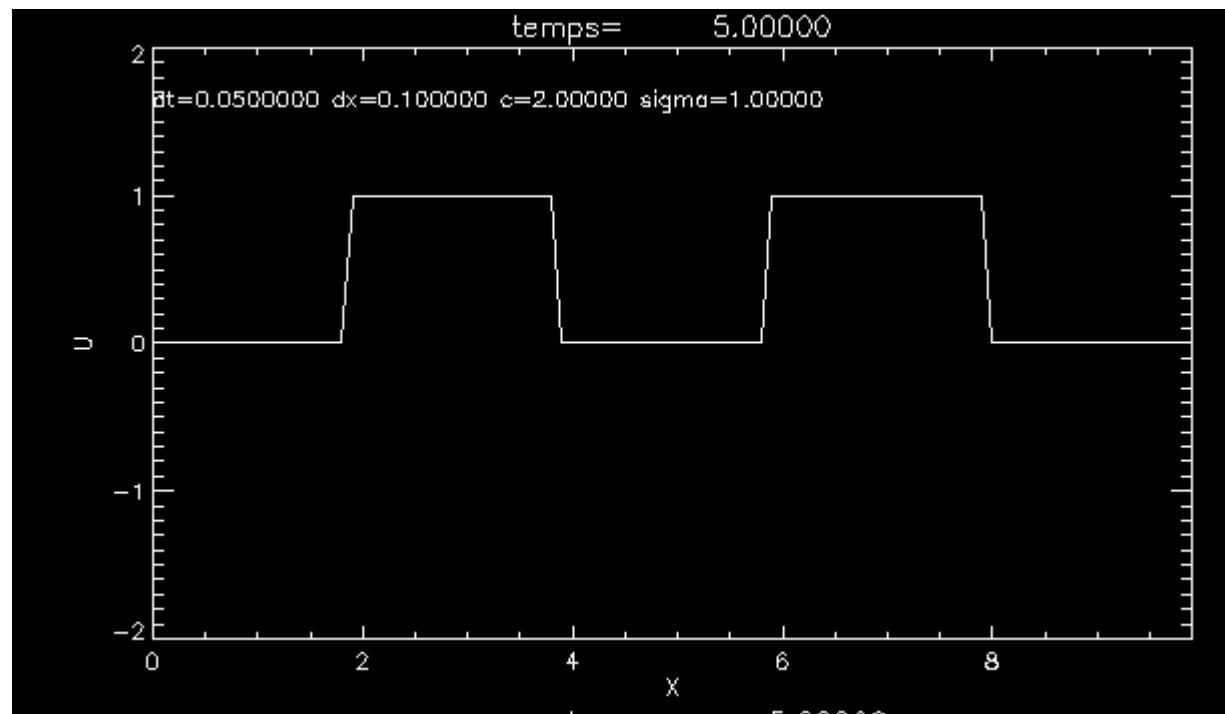
Diffusion artificielle  
engendrée par le schéma



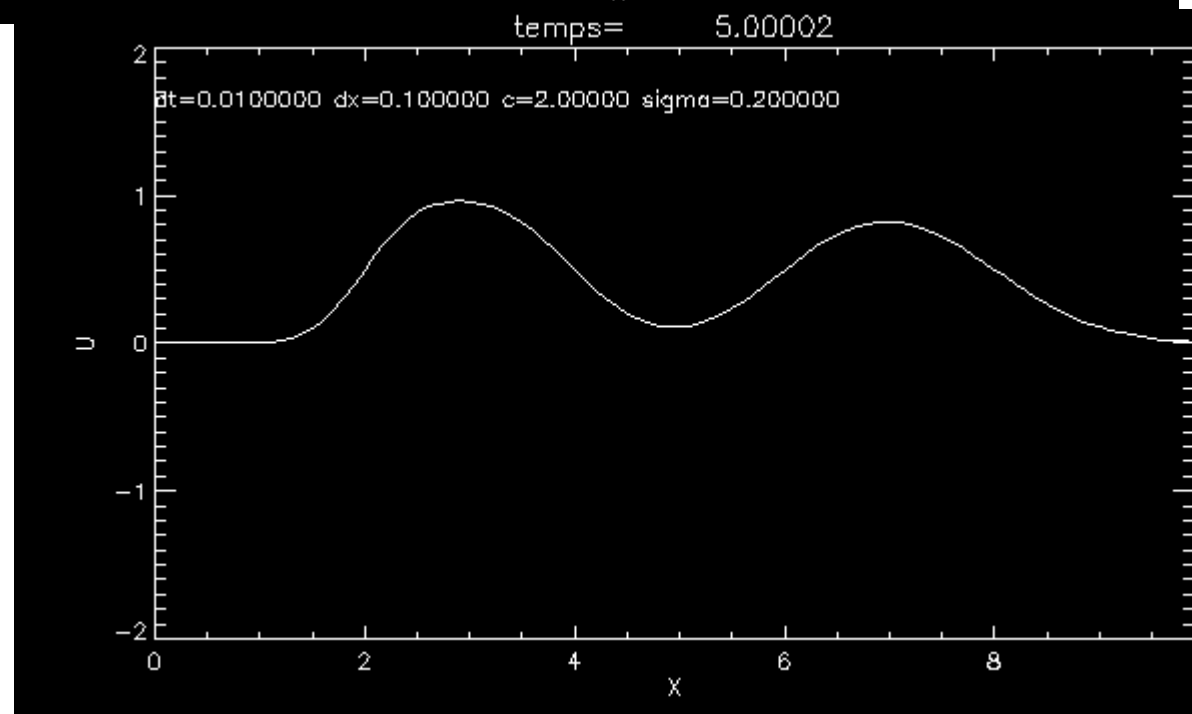


Autre exemple : crenaux

$Dt=0.05$   
 $\sigma=1$



$Dt=0.01$   
 $\sigma=0.2$



## Dissipation numérique... d'où viens tu ??

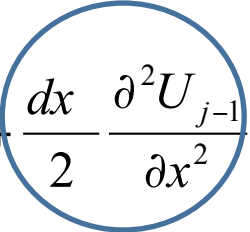
Nos dérivées sont estimées de manière trop simples....

$$U_j = U_{j-1} + dx \frac{\partial U_{j-1}}{\partial x} + \frac{dx^2}{2} \frac{\partial^2 U_{j-1}}{\partial x^2} + O(dx^2)$$

donc

$$\frac{U_j - U_{j-1}}{dx} = \frac{\partial U_{j-1}}{\partial x} + \frac{dx}{2} \frac{\partial^2 U_{j-1}}{\partial x^2} + O(dx)$$

approximation



$$\partial_t u(x, t) + c \partial_x u(x, t) = 0$$

Véritable équation  
À résoudre

Pour résoudre le problème :

Pas de solution miracle....

Augmenter l'ordre du schémas => instabilité

**Utiliser des méthodes types :**

Volumes finis

Utiliser des limiteurs de flux.

# Introduction aux volumes finis

## Reprenons l'équation de transport

$$\partial_t u(x, t) + \partial_x cu(x, t) = f(x, t)$$

## Equations fondamentales de l'hydro (ex. Cylind.)

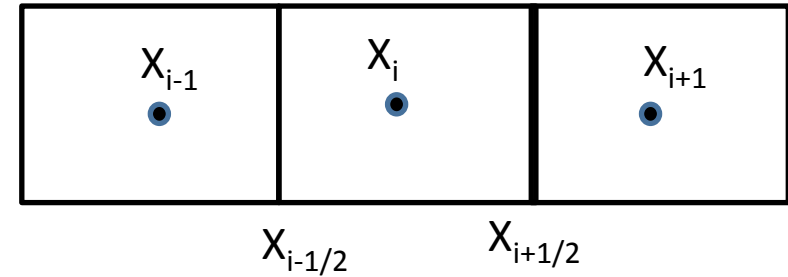

$$\partial_r \rho / \partial t + \partial_r U \downarrow r \rho / \partial r = 0$$

$$\partial_r \rho U \downarrow r / \partial t + \partial_r \rho U \downarrow r \uparrow 2 / \partial r = \rho U \downarrow \theta \uparrow 2 - r \partial P / \partial r$$

$$\partial_r \rho e / \partial t + \partial_r U \downarrow r \rho / \partial r = -P \cdot (\partial_r U \downarrow r / \partial r + U \downarrow r)$$

# Une idée lumineuse : intégrer l'équation sur une cellule du domaine Et travailler sur des valeurs moyennes $\langle U \rangle$

$$\langle U_i \rangle = \int_{i-1/2}^{i+1/2} U(x) dx$$



Or 
$$\partial_t u(x, t) + \partial_x cu(x, t) = 0$$

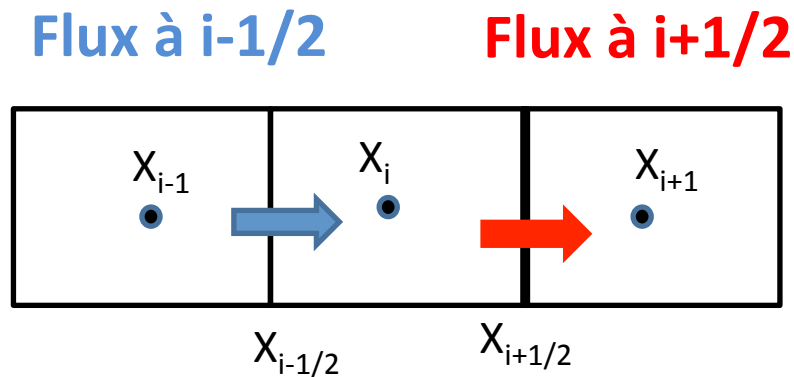
Donc 
$$d\langle U \rangle_i / dt = \int_{i-1/2}^{i+1/2} \partial U / \partial t dx$$

$$d\langle U \rangle_i / dt = \int_{i-1/2}^{i+1/2} \partial U / \partial t dx = \int_{i-1/2}^{i+1/2} -\partial cu / \partial x dx = -c U(i+1/2) + c U(i-1/2)$$

$$d\langle U \rangle_i / dt = \text{Flux\_droite} - \text{Flux\_gauche} \quad \text{Flux} = C \times U$$

On se retrouve avec un problème conceptuellement très simple

$$d\langle U \rangle_i / dt = \text{Flux\_droite} - \text{Flux\_gauche} \quad \text{Flux} = C \times U$$



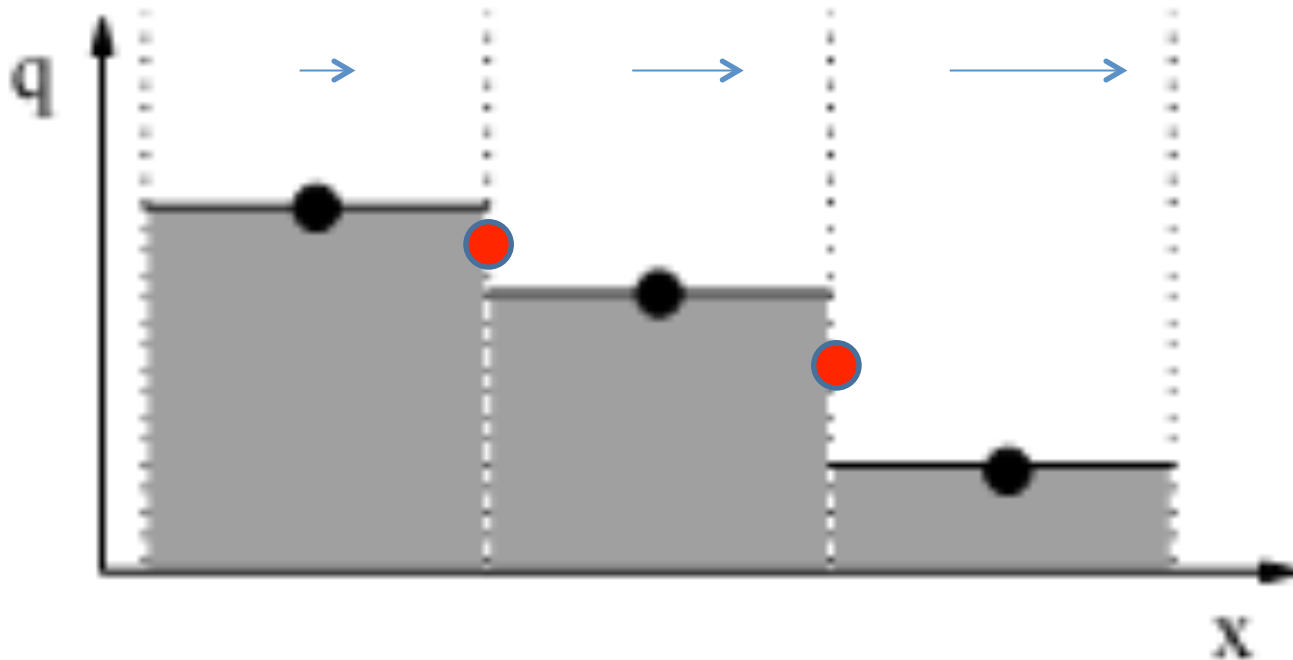
La méthode des volumes finis consiste à faire un bilan des flux gauches et droits  
Dans chaque cellule.

MAIS

Ce Flux est complexe à calculer car ON NE CONNAIT PAS les valeurs physiques aux interfaces.  
**Nécessité d'une interpolation !! Nécessité de préserver la stabilité !!**

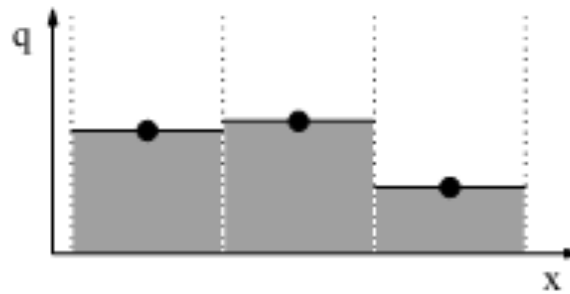
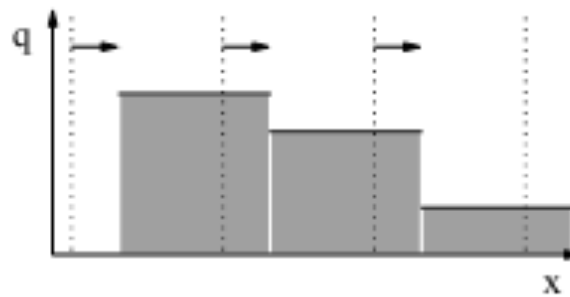
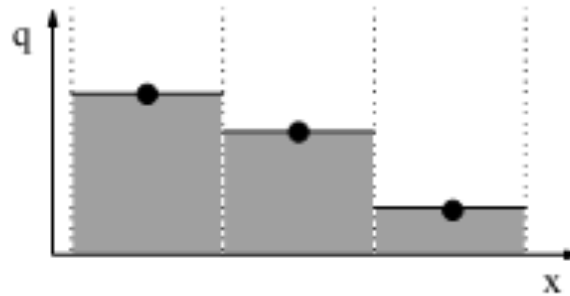
# Introduction au Calcul de Flux numériques :

Importance du sens de transport de l'information !



Quelles sont les valeurs du système aux interfaces ?  
Respecter le principe du sens de transport de l'information

## Méthode simple : Cellule donneuse (ordre 0) . Stable mais peu précise





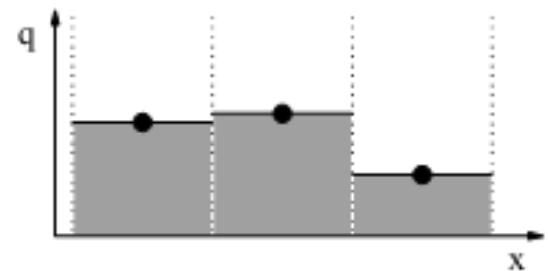
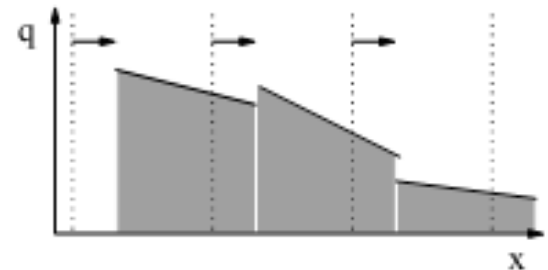
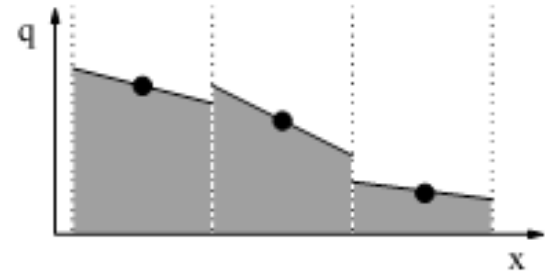
# Méthodes d'ordre 1 : Comment reconstruire l'information aux bords ?

$$\langle F \downarrow i-1/2 \rangle = F \downarrow i + \sigma_i^n (X \downarrow i - X \downarrow i-1/2)$$

$$\langle F \downarrow i+1/2 \rangle = F \downarrow i + \sigma_i^n (X \downarrow i+1/2 - X \downarrow i)$$

Que prendre pour  $\sigma_i^n$ , la pente ??

Pleins de choix sont possible !

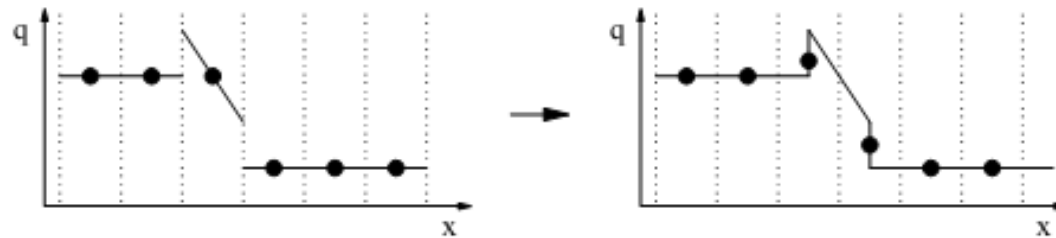


Centered slope:  $\sigma_i^n = \frac{q_{i+1}^n - q_{i-1}^n}{2\Delta x}$  (Fromm's method)

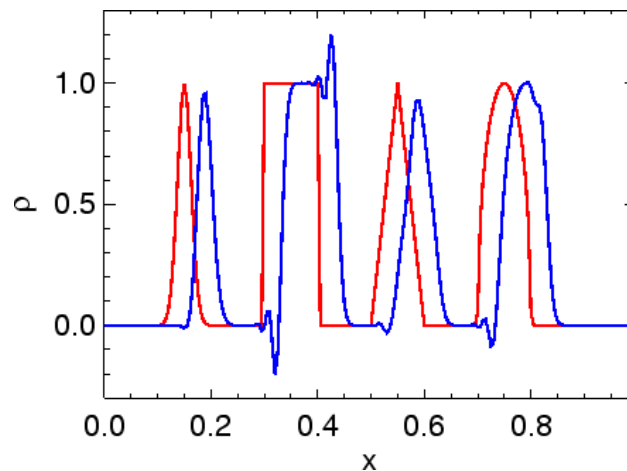
Upwind slope:  $\sigma_i^n = \frac{q_i^n - q_{i-1}^n}{\Delta x}$  (Beam-Warming method)

Downwind slope:  $\sigma_i^n = \frac{q_{i+1}^n - q_i^n}{\Delta x}$  (Lax-Wendroff method)

Mais cela déclenche des oscillations aux bords des discontinuités



**Figure 4.3.** Illustration of why higher order schemes, such as the piecewise linear Lax-Wendroff scheme shown here, produce oscillations near discontinuities.

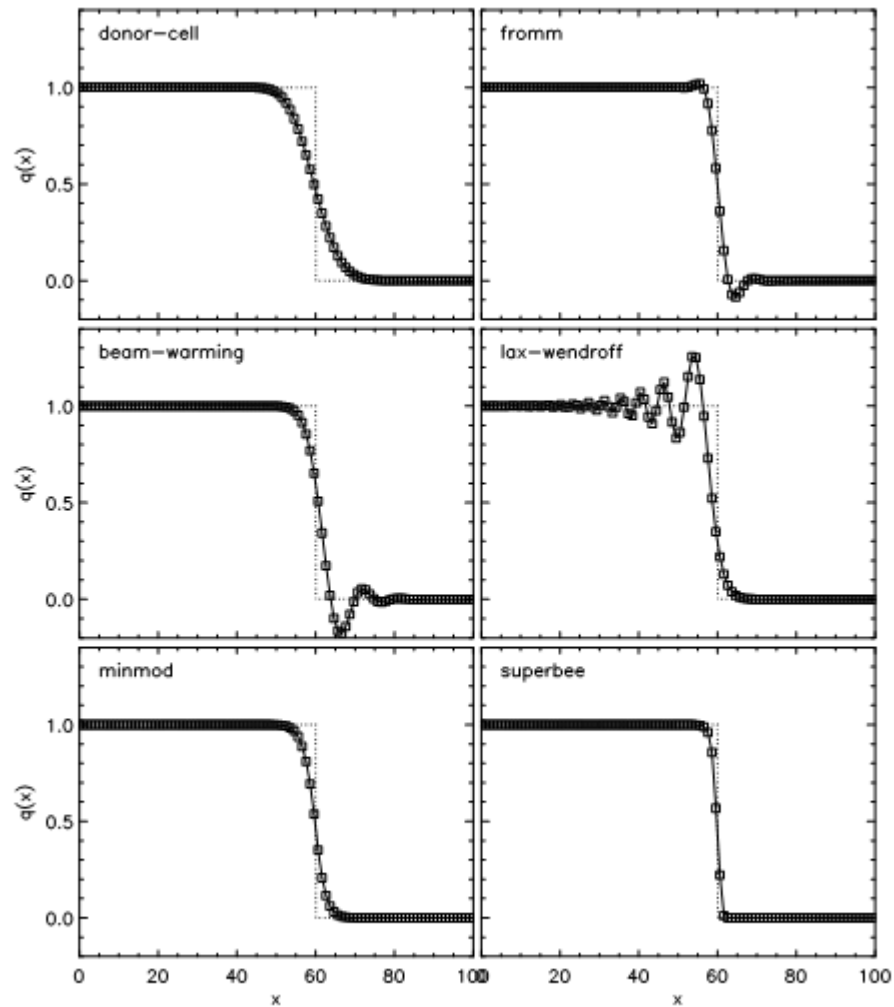


Lax Wendroff

Nécessité de « limiteurs de pentes » =>

Astuces numériques pour limiter les oscillations

Il existe de nombreux limiteurs de pente... méthodes non linéaires.



Nécessité d'un choix. Aucune méthode n'est parfaite.

# En guise de conclusion

- Secteur très actif du calcul numérique car c'est la base de la résolution des équations de l'hydrodynamique
- Nous n'avons pas parlé d'autres méthodes capables de traiter les ondes de chocs) (problème de rieman, méthodes de godunov etc..

## En conclusion

- Le calcul numérique est un savoir faire, avant d'être une théorie.
- IL se rapproche de la physique expérimentale => regard critique sur les résultats.

**Un outil puissant qui permet de traiter de nouveaux problèmes,  
mais à manier avec précaution.**