Chapitre 2

Différences finies

1) Discrétisation en temps

• Nous avons vu au chapitre précédent qu'un système dynamique composé d'une équation d'évolution

$$(1) \qquad \frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}t} \;=\; f(u)\,, \qquad t>0$$

et d'une condition initiale

$$(2) \qquad u(0) \;=\; u_0\,, \qquad u_0 \in \mathbb{R}^{\mathrm{t},m}$$

a une solution unique, au moins pour des temps assez petits et lorsque f a un minimum de régularité. Toutefois, on ne dispose pas en général de "formule" permettant de calculer $u(t)$ en fonction de la dynamique $f(\bullet)$ et de la condition initiale u_0. Une exception notable est le cas du point fixe linéaire, où

$$(3) \qquad f(u) \;=\; -\lambda\, u\,, \qquad \lambda>0\,, \qquad u\in\mathbb{R}\,,$$

pour lequel la solution de (1) (2) est donnée par

$$(4) \qquad u(t) \;=\; \mathrm{e}^{-\lambda\, t}\, u_0\,, \qquad t>0.$$

• On renonce donc à calculer $u(t)$ pour **tous** les instants (réels) $t \geq 0$ et on se contente dans la suite d'**approcher** le vecteur $u(t)$ pour des instants précis **fixés à l'avance**. On se donne donc un **intervalle de temps** $\Delta t > 0$, un "pas de temps" élémentaire et la famille d'instants discrets obtenus en considérant les multiples entiers $2\,\Delta t,\ 3\,\Delta t, \dots\ k\,\Delta t, \dots$ de ce pas de temps. On pose

$$(5) \qquad t^k \;=\; k\,\Delta t\,, \qquad k\in\mathbb{N}\,.$$

On remarque que dans la relation (5), la notation t^k ne désigne **pas** un exposant, mais un indice, écrit en position supérieure ! Ce choix est justifié par un besoin de plusieurs indices pour les applications à l'acoustique.

• On peut donc concevoir de manière abstraite les valeurs $u(t^k)$, pour $k\in\mathbb{N}$, lorsque $u(\bullet)$ est **la** solution du système dynamique (1) (2). On sait que ces valeurs existent et sont uniques (les cas où de véritables difficultés pour montrer l'existence n'est pas envisagée ici) mais leur approximation n'est en général pas simple. Notons toutefois que même dans le cas d'une solution "exacte" telle que (4), le calcul des valeurs numériques de la fonction exponentielle (les $\exp(-\lambda\, t)$, $\lambda > 0,\, t > 0$) n'est pas trivial et demande un algorithme approprié pour resommer la série

$$\exp(-\lambda\, t) \;=\; \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \big(-\lambda\, t \big)^k \,. \tag{6}$$

• On cherche donc une solution approchée u^k, pour $k \in \mathbb{N}$, *a priori* distincte de $u(t^k)$ (qui reste à jamais dans le contexte de l'abstraction mathématique), qu'on puisse calculer "à la main" ou avec une calculatrice électronique et un algorithme approprié. La question que nous posons ici est celle de l'**algorithme de calcul approché**. Si on "démarre" naturellement par

$$u^0 \;=\; u_0 \tag{7}$$

pour l'instant initial, comment "passer" jusqu'à l'instant Δt, c'est à dire comment calculer u^1, approximation de $u(\Delta t)$, sachant qu'entre les instants 0 et Δt, le vecteur $u(t)$ "suit" la dynamique donnée par l'équation (1) ? De manière plus générale, comment passer d'une valeur approchée u^k déjà connue (k est ici un nombre entier fixé) à la valeur suivante u^{k+1} ? Comment remplacer le système dynamique en **temps continu** (1) (2) par un système dynamique **discret** $(u^k)_{k\in\mathbb{N}}$, c'est à dire une "relation de récurrence" entre u^k et u^{k+1} ?

2) Schéma d'Euler explicite

• L'idée de base pour construire un schéma numérique est d'intégrer l'équation (1) par rapport au temps, *id est* de remplacer la relation différentielle (1) par une relation intégrale :

$$\frac{1}{\Delta t} \Big(u(t^{k+1}) \,-\, u(t^k) \Big) \;=\; \frac{1}{\Delta t} \int_{t^k}^{t^{k+1}} f\big(u(t)\big)\, \mathrm{d}t \,. \tag{8}$$

On **approche** ensuite la valeur moyenne au membre de droite de la relation (8). De manière générale, pour approcher la valeur moyenne $I(a,\, b\,;\, \varphi)$ d'une fonction $]a,\, b[\, \ni t \longmapsto \varphi(t) \in \mathbb{R}$ arbitraire sur l'intervalle $[a,\, b]$ c'est à dire

$$I(a,\, b\,;\, \varphi) \;\equiv\; \frac{1}{b-a} \int_a^b \varphi(t)\, \mathrm{d}t \,, \tag{9}$$

on peut remplacer la fonction $\varphi(\bullet)$ par divers polynomes construits à partir de quelques valeurs connues de φ en des points caractéristiques de l'intervalle $[a,\, b]$: $\varphi(a)$, $\varphi(b)$, $\varphi(\frac{a+b}{2})$, *et caetera.*

• La méthode d'Euler explicite consiste à remplacer $\varphi(t)$ par la constante $\varphi(a)$ dans le calcul approché de la moyenne $I(a,\, b\,;\, \varphi)$. On en déduit donc très simplement :

$$(10) \qquad I(a,\, b\,;\, \varphi) \;\approx\; \varphi(a)\,,$$

relation qui jointe au choix $\varphi(t) \equiv f(u(t))$ au sein de la relation (8), conduit à

$$(11) \qquad \frac{1}{\Delta t}\Big(u(t^{k+1}) \,-\, u(t^k)\Big) \;\approx\; f\big(u(t^k)\big)\,,$$

avec un symbole d'approximation "$\approx$" caractéristique des valeurs $u(t^k)$ de la solution **exacte** de l'équation (1). La construction du schéma numérique consiste à remplacer ce symbole d'approximation par une égalité ; le prix à payer est de remplacer les valeurs exactes $u(t^k)$ par des valeurs **approchées** u^k :

$$(12) \qquad u^k \;\approx\; u(t^k)\,, \qquad t^k \;=\; k\,\Delta t\,, \qquad k \in \mathbb{N}\,.$$

• En conséquence, le schéma d'Euler explicite s'écrit :

$$(13) \qquad \frac{1}{\Delta t}\big(u^{k+1} \,-\, u^k\big) \;=\; f\big(u^k\big)\,, \qquad k \in \mathbb{N}\,.$$

La relation (13) définit un algorithme de calcul : si u^k est connu et $f(u^k)$ facile à calculer à partir de la connaissance de u^k, on "explicite" la valeur u^{k+1} à partir de la relation (13) :

$$(14) \qquad u^{k+1} \;=\; u^k \,+\, \Delta t\, f(u^k)\,.$$

Ce calcul de u^{k+1}, immédiat dans les conditions précédentes, justifie le nom de "schéma d'Euler explicite".

• Il est naturel de tester la méthode précédente dans un cas où la solution exacte est connue. Le prototype classique est le retour à l'équilibre avec une constante de temps τ donnée par

$$(15) \qquad \tau \;=\; \frac{1}{\lambda}$$

si la dynamique $f(\bullet)$ est choisie *via* la relation (3). Compte tenu de (4), il vient facilement

$$(16) \qquad \frac{u\big(t^{k+1}\big)}{u\big(t^k\big)} \;=\; \mathrm{e}^{-\Delta t/\tau} \;\equiv\; \mathrm{e}^{-\lambda\,\Delta t}\,.$$

• Le schéma numérique (14), joint à (3), s'écrit quant à lui

$$\frac{u^{k+1}}{u^k} \,=\, 1 \,-\, \lambda\,\Delta t\,. \tag{17}$$

On fait alors les deux remarques suivantes, après avoir posé

$$\xi \,=\, \lambda\,\Delta t \,=\, \frac{\Delta t}{\tau}\,. \tag{18}$$

• **(i)** Le schéma (17) est une approximation d'ordre un de la loi l'exponentielle (16) satisfaite par la relation exacte :

$$\mathrm{e}^{-\xi} \,=\, 1 \,-\, \xi \,+\, \mathrm{O}(\xi^2)\,; \tag{19}$$

remplacer l'exponentielle $\exp(-\lambda\,\Delta t)$ par son approximation d'ordre un, sa tangente, pour Δt petit, ce qu'on exprime par la relation (19), est certainement correct, au moins tant que $\xi = \frac{\Delta t}{\tau}$ reste “petit”.

• **(ii)** Le rapport $u(t^{k+1})/u(t^k)$ des valeurs de la solution exacte d'une dynamique (1) (3) reste toujours positif quel que soit $\Delta t > 0$, ainsi que le montre la relation (16). Cette propriété est en défaut pour le schéma d'Euler, ainsi que le montre la relation (17) : $1 - \lambda\,\Delta t \,<\, 0$ dès que $\Delta t > \tau$. Pour $\Delta t > \tau$, c'est à dire lorsque le pas de temps Δt est supérieur à la constante de temps τ du processus (physique) de retour à l'équilibre, les valeurs approchées u^k ne respectent plus la **monotonie** de la solution exacte. Ceci peut être catastrophique en pratique. Le respect de la monotonie impose en conséquence de **limiter le pas de temps** Δt à des valeurs cohérentes avec la dynamique du processus physique, *i.e.* de choisir Δt de sorte que

$$0 \,<\, \Delta t \,<\, \tau \,\equiv\, \frac{1}{\lambda}\,. \tag{20}$$

• Nous retenons que pour être utilisé de manière efficace pour le problème modèle (1) (3) du retour à l'équilibre, le schéma d'Euler explicite doit satisfaire une **condition de stabilité** (20) qui indique que le pas de temps Δt du schéma numérique ne doit pas excéder le temps caractéristique τ du processus étudié.

3) Schéma d'Euler implicite

• Nous repartons toujours de la relation (8) qui est **exacte**, entre les instants t^k et t^{k+1}. Le problème du choix du schéma numérique est ramené à estimer au mieux la valeur moyenne $I(a,\, b\,;\, \varphi)$ définie à la relation (9). Le choix (10) conduit au schéma d'Euler explicite, mais le choix

$$(21) \qquad I(a,\, b\,;\, \varphi) \;\approx\; \varphi(b)\,,$$

est tout aussi naturel que le choix proposé à la relation (10) et suppose *a priori* la fonction $\varphi(\bullet)$ approchée par une valeur **constante** sur l'intervalle $[a,\, b]$. On reporte ce choix au membre de droite de la relation (8), qui correspond à $a = t^k$, $b = t^{k+1}$, $\varphi(t) \;=\; f(u(t))$. Il vient alors

$$(22) \qquad \frac{1}{\Delta t}\Big(u(t^{k+1}) \;-\; u(t^k)\Big) \;\approx\; f\big(u(t^{k+1})\big)\,.$$

Le schéma d'Euler implicite s'obtient en remplaçant $u(t^k)$ par u^k, $u(t^{k+1})$ par u^{k+1} et les approximations par des égalités dans les relations (8) et (22). On obtient ainsi

$$(23) \qquad \frac{1}{\Delta t}\Big(u^{k+1} \;-\; u^k\Big) \;=\; f\big(u^{k+1}\big)\,.$$

• A partir de la valeur connue u^k, le schéma d'Euler implicite se propose de calculer u^{k+1} *via* la relation (23), c'est à dire en résolvant l'**équation**

$$(24) \qquad u^{k+1} \;-\; \Delta t\, f\big(u^{k+1}\big) \;=\; u^k\,.$$

On peut être quelque peu déçu du résultat ; le schéma numérique (24) ne fournit pas explicitement la valeur u^{k+1} en fonction de u^k, il propose simplement une **équation** à résoudre pour évaluer u^{k+1}. L'algorithme doit être complété par le choix d'un algorithme pour la résolution de l'équation (24). On peut par exemple appliquer une méthode de la tangente, ou de Newton. La valeur u^{k+1} et obtenue comme limite de la suite $(u_n^{k+1})_{n\in\mathbb{N}}$, avec par exemple l'initialisation

$$(25) \qquad u_0^{k+1} \;=\; u^k$$

et des itérations définies en remplaçant $f(u^{k+1})$ par $f(u_{n+1}^{k+1})$, lui-même approché autour de u_n^{k+1} par linéarisation :

$$(26) \qquad f\big(u_{n+1}^{k+1}\big) \;\approx\; f\big(u_n^{k+1}\big) \;+\; f'\big(u_n^{k+1}\big) \bullet \big(u_{n+1}^{k+1} - u_n^{k+1}\big)\,.$$

On injecte cette représentation de $f(u^{k+1})$ au membre de gauche de la relation (24) ; il vient

$$(27) \qquad u_{n+1}^{k+1} \;-\; \Delta t\, f'\big(u_n^{k+1}\big)\, u_{n+1}^{k+1} \;=\; u^k \;+\; \Delta t\,\big[f\big(u_n^{k+1}\big) \;-\; f'\big(u_n^{k+1}\big)\, u_n^{k+1}\big]\,.$$

Grâce à la résolution de l'équation (27) qui est **linéaire**, on passe de u_n^{k+1} à u_{n+1}^{k+1} et pour n tendant vers l'infini, on converge (si le pas de temps Δt n'est pas trop grand) vers une (la ?) solution de l'équation (24).

• Lorsqu'on **teste** le schéma d'Euler implicite (24) dans le cas de l'équation modèle de retour à l'équilibre (*i.e.* $f(u) = -\lambda\, u,$ *c.f.* (3)), il vient facilement

$$(28) \qquad \frac{u^{k+1}}{u^k} \;=\; \frac{1}{1 \,+\, \lambda\,\Delta t}\,.$$

On remarque que pour $\lambda > 0$ et $\Delta t > 0,$ ce rapport reste toujours positif ; le schéma d'Euler implicite conduit toujours à des valeurs $(u^k)_{k \in \mathbb{N}}$ compatibles avec les contraintes de monotonie. On peut donc utiliser ce schéma quel que soit $\Delta t > 0$ et il n'y a **pas** à se donner de condition de stabilité sur le pas de temps.

• Si on développe le rapport u^{k+1}/u^k par rapport à l'infiniment petit $\xi = \lambda\,\Delta t,$ la relation (28) conduit à

$$(29) \qquad \frac{u^{k+1}}{u^k} \;=\; 1 \,-\, \xi \,+\, \xi^2 \,+\, \mathrm{O}(\xi^3)$$

alors que le développement pour la solution exacte (16) sécrit

$$(30) \qquad \frac{u(t^{k+1})}{u(t^k)} \;=\; 1 \,-\, \xi \,+\, \frac{\xi^2}{2} \,+\, \mathrm{O}(\xi^3)\,.$$

On a donc à partir des relations (29) et (30) la propriété :

$$(31) \qquad \frac{u^{k+1}}{u^k} \;=\; \frac{u(t^{k+1})}{u(t^k)} \,+\, \frac{\xi^2}{2} \,+\, \mathrm{O}(\xi^3)$$

et les développements (29) et (30) coïncident jusqu'au premier ordre inclus. On dit que **le schéma d'Euler implicite est d'ordre un** de précision.

4) Schéma de Crank-Nicolson

• Au lieu de calculer la valeur moyenne $I(a,\, b\,;\, \varphi)$ par une formule de quadrature à un point comme pour les deux précédents schémas (voir les relations (10) et (21)), nous utilisons une méthode des trapèzes, qui consiste à supposer la fonction $\varphi(\bullet)$ **affine** entre les points a et $b.$ Nous avons alors :

$$(32) \qquad I(a,\, b\,;\, \varphi) \;\approx\; \frac{1}{2}\big(\varphi(a) \,+\, \varphi(b)\big)\,.$$

On ré-injecte cette expression au membre de droite de la relation (8) et on en déduit :

$$(33) \qquad \frac{1}{\Delta t}\big(u(t^{k+1}) \,-\, u(t^k)\big) \;\approx\; \frac{1}{2}\Big[f\big(u(t^k)\big) \,+\, f\big(u(t^{k+1})\big)\Big]\,.$$

Le schéma de Crank-Nicolson consiste à définir la valeur approchée u^k en imposant une **égalité** au sein de la relation (33). Il s'écrit donc

$$(34) \qquad \frac{1}{\Delta t}\big(u^{k+1} \,-\, u^k\big) \;=\; \frac{1}{2}\Big[f\big(u^k\big) \,+\, f\big(u^{k+1}\big)\Big]\,.$$

• Si on connaît la valeur u^k, la nouvelle valeur u^{k+1} s'obtient par résolution d'une équation, à savoir

$$(35) \qquad u^{k+1} \,-\, \frac{\Delta t}{2}\, f\big(u^{k+1}\big) \;=\; u^k \,+\, \frac{\Delta t}{2}\, f\big(u^k\big)$$

et en conséquence le schéma de Crank-Nisolson est **implicite**. Les méthodes d'approximation par l'algorithme de Newton proposées pour le schéma d'Euler implicite peuvent être adaptées sans difficulté pour l'équation (35).

• Si on applique le schéma (34) au cas où $f(u) = -\lambda\, u$, on trouve

$$(36) \qquad \frac{u^{k+1}}{u^k} \;=\; \frac{1 \,-\, \lambda\,\Delta t\,/\,2}{1 \,+\, \lambda\,\Delta t\,/\,2}$$

et le respect de la monotonie impose de **limiter** la valeur du pas de temps :

$$(37) \qquad 0 \,<\, \Delta t \,<\, \frac{2}{\lambda}\,.$$

Quand on développe la fraction rationnelle au membre de droite de la relation (36) en fonction de $\xi = \lambda\,\Delta t$, supposé infiniment petit, on trouve

$$\frac{1 \,-\, \xi\,/\,2}{1 \,+\, \xi\,/\,2} \;=\; \Big(1 - \frac{\xi}{2}\Big)\Big(1 - \frac{\xi}{2} + \frac{\xi^2}{4} + \ldots\Big) \;=\; 1 \,-\, \xi \,+\, \frac{\xi^2}{2} \,-\, \frac{\xi^3}{4} \,+\, \mathrm{O}(\xi^4)\,.$$

Donc

$$(38) \qquad \frac{u^{k+1}}{u^k} \,-\, \frac{u(t^{k+1})}{u(t^k)} \;=\; -\frac{\xi^3}{12} \,+\, \mathrm{O}(\xi^4)$$

et **le schéma de Crank-Nicolson est d'ordre deux** de précision.

5) Schéma de Heun

• Le schéma de Crank et Nicolson est plus précis que les deux schémas proposés initialement par Euler. Mais il reste implicite, ce qui peut conduire à des coûts de calcul importants pour résoudre l'équation (35). On l'adapte donc pour le rendre explicite en suivant un procédé très pragmatique. On calcule d'abord une valeur "prédite" $\widetilde{u}^{k+1}$ à l'aide du schéma d'Euler explicite :

$$\widetilde{u}^{k+1} \,=\, u^k \,+\, \Delta t\, f(u^k)\,. \tag{39}$$

On utilise ensuite cette valeur au membre de droite de la relation (34), en lieu et place de u^{k+1}. On obtient de cette façon :

$$\frac{1}{\Delta t}\big(u^{k+1} \,-\, u^k\big) \,=\, \frac{1}{2}\Big[f\big(u^k\big) \,+\, f\big(\widetilde{u}^{k+1}\big)\Big] \tag{40}$$

en complément de la relation (39). On peut aussi écrire les relations (39) et (40) sur une seule ligne :

$$\frac{1}{\Delta t}\big(u^{k+1} \,-\, u^k\big) \,=\, \frac{1}{2}\Big[f\big(u^k\big) \,+\, f\big(u^k \,+\, \Delta t\, f(u^k)\big)\Big] \tag{41}$$

et cette relation définit le schéma de Heun, qui appartient aussi à la famille des schémas de Runge et Kutta.

• Si on teste le schéma (41) pour le modèle du retour à l'équilibre, il vient :

$$\frac{u^{k+1}}{u^k} \,=\, 1 \,-\, \lambda\,\Delta t \,+\, \frac{1}{2}\,(\lambda\,\Delta t)^2\,. \tag{42}$$

Le membre de droite de la relation (42) est toujours supérieur à zéro. Par contre, pour $\lambda \Delta t > 2$, le rapport u^{k+1}/u^k est supérieur à l'unité, ce qui contredit le comportement qualitatif de la solution exacte (16). On doit donc exclure de telles valeurs, d'où la **condition de stabilité** :

$$0 \,<\, \Delta t \,<\, \frac{2}{\lambda}\,. \tag{43}$$

Le membre de droite de la relation (42) est exactement le développement de Taylor à l'ordre deux en $\xi \equiv \lambda \Delta t$ de $\exp(-\xi)$. On tire donc des relations (16) et (42) :

$$\frac{u^{k+1}}{u^k} \,-\, \frac{u(t^{k+1})}{u(t^k)} \,=\, \frac{\xi^3}{6} \,+\, \mathrm{O}(\xi^4) \tag{44}$$

qui indique que le schéma de Heun est **d'ordre deux en temps**.

6) Tableau récapitulatif

schéma	définition	nature	ordre	stabilité
Euler explicite	(13)	explicite	1	$0 < \lambda \Delta t \leq 1$
Euler implicite	(23)	implicite	1	$\Delta t > 0$
Crank-Nicolson	(34)	implicite	2	$0 < \lambda \Delta t \leq 2$
Heun	(41)	explicite	2	$0 < \lambda \Delta t \leq 2$

FD, mars 2003, février 2005.