

Discrétisation en temps du système dynamique

Nous avons choisi lors des chapitres précédents de présenter l'approximation des lois de conservation qui régissent l'évolution d'un fluide compressible grâce à une approche qui découple l'espace et le temps. Ce faisant, nous avons pu analyser complètement l'approche décentrée du premier ordre fondée sur la résolution approchée du problème de Riemann ainsi que l'extension de van Leer au second ordre. Nous abordons maintenant l'équation différentielle définie par le schéma en espace pour en donner une discrétisation complète en temps. Nous rappelons les principes fondamentaux de la discrétisation d'un système différentiel, détaillons les méthodes de Runge-Kutta explicites et diverses méthodes implicites, étudions l'effet de la discrétisation en temps sur le maintien de la propriété de variation totale décroissante et présentons plusieurs schémas dans le cas où certains termes ont une dynamique temporelle dominante.

1) Rappel des notions de base.

- Nous devons approcher l'équation d'évolution d'un fluide compressible, c'est à dire une loi de conservation du type

$$(1.1) \quad \frac{\partial W}{\partial t} + \sum_j \left[\frac{\partial}{\partial x_j} F^j(W) + \frac{\partial}{\partial x_j} P^j(W, \nabla W) \right] = \Omega(W)$$

Chapitre 3 du cours à l'Institut pour la Promotion des Sciences de l'Ingénieur [CDV92], septembre 1992. Traduction en "TEX" juillet 2003. Edition février 2011 ; 18 pages.

sur un maillage associé à une méthode de volumes finis. Nous avons vu qu'alors si nous disposons de N volumes de contrôle, nous disposons de N inconnues vectorielles W_K c'est à dire de $5N$ inconnues scalaires pour la dynamique d'un gaz non réactif à trois dimensions d'espace et de $11N$ inconnues scalaires pour un modèle réactif à sept espèces par exemple. Dans la pratique, le nombre N varie de 10 000 à 1 000 000, ce qui nous induit un problème d'évolution de l'inconnue $w = \{W_K, K = 1, \dots, N\}$ dans \mathbb{R}^m avec m variant de 50 000 à 11 000 000 :

$$(1.2) \quad w = \{W_K, K = 1, \dots, N\} \in \mathbb{R}^m, \quad 5 \cdot 10^4 \leq m \leq 1.1 \cdot 10^7.$$

Nous retiendrons la très grande taille des problèmes à traiter, ce qui entraîne des difficultés pratiques très importantes et une lourdeur dans la mise en œuvre informatique, même sur des super-ordinateurs.

• L'équation d'évolution en temps de l'inconnue w a été précisée dans un chapitre précédent relatif à la discrétisation spatiale mutidimensionnelle :

$$(1.3) \quad \frac{dW_K}{dt} + \sum_{a \in \partial K} \frac{|a|}{|K|} [\Phi_a + \Pi_a] - \Omega(W_K) = 0.$$

Les flux eulériens Φ_a et visqueux Π_a sur les interfaces du maillage ne sont maintenant considérés que comme des fonctions données de l'ensemble des inconnues, c'est à dire de w . Nous pouvons dans un premier temps considérer que tous les termes jouent un rôle analogue et poser simplement :

$$(1.4) \quad f(w) = - \left\{ \sum_{a \in \partial K} \frac{|a|}{|K|} [\Phi_a + \Pi_a] + \Omega(W_K) \right\}, \quad K = 1, \dots, N$$

ce qui permet d'écrire l'équation d'évolution (1.3) sous la forme plus compacte :

$$(1.5) \quad \frac{dw}{dt} = f(w), \quad w \in \mathbb{R}^m, \quad f(w) \in \mathbb{R}^m.$$

Rappelons que la fonction $f(\bullet)$ est parfaitement connue et calculable, même si son expression algébrique reste très complexe ! Nous pouvons aussi séparer les termes fluides des termes chimiques :

$$(1.6) \quad f(W) = g(w) + \Omega(w)$$

ce qui permet de réécrire le système (1.5) sous la forme

$$(1.7) \quad \frac{dw}{dt} = g(w) + \Omega(w).$$

Pour construire des schémas aux différences pour la loi d'évolution (1.5), on se donne un état w_n au temps t_n , un pas de temps Δt permettant d'arriver au temps t_{n+1} :

$$(1.8) \quad t_{n+1} = t_n + \Delta t$$

et on cherche w_{n+1} au nouveau pas de temps. Si nous intégrons en temps la relation (1.5) entre les instants t_n et t_{n+1} , nous avons simplement :

$$(1.9) \quad \frac{w_{n+1} - w_n}{\Delta t} = \frac{1}{\Delta t} \int_{t_n}^{t_{n+1}} f(w) dt$$

et le choix d'un schéma numérique est reporté sur la recherche d'une formule de quadrature pour le membre de droite de (1.9). Trois cas de figure classiques sont possibles : utiliser le point de départ t_n pour calculer l'intégrale, utiliser le point d'arrivée t_{n+1} ou bien utiliser une méthode plus précise comme la formule du trapèze. Dans le premier cas, nous obtenons un schéma dit d'Euler explicite ou d'Euler-Cauchy :

$$(1.10) \quad \frac{w_{n+1} - w_n}{\Delta t} = f(w_n) \quad \text{Euler explicite}$$

dans le second cas, un schéma d'Euler implicite :

$$(1.11) \quad \frac{w_{n+1} - w_n}{\Delta t} = f(w_{n+1}) \quad \text{Euler implicite,}$$

alors que le troisième choix conduit au schéma de Crank-Nicolson, implicite également :

$$(1.12) \quad \frac{w_{n+1} - w_n}{\Delta t} = \frac{1}{2} \left(f(w_n) + f(w_{n+1}) \right) \quad \text{Crank-Nicolson.}$$

Nous notons la grande simplicité opératoire de la relation (1.10) alors que les schémas implicites (1.11) et (1.12) demandent la résolution d'un problème *a priori* non linéaire dont l'inconnue est w_{n+1} . Remarquons aussi que ces trois schémas sont à un pas de temps puisqu'on couple seulement les pas de temps t_n et t_{n+1} , que les deux schémas d'Euler (1.10) et (1.11) sont d'ordre un alors que le schéma de Crank-Nicolson est d'ordre deux de précision. Nous ne définissons pas ici l'ordre de précision d'un schéma pour une équation différentielle ordinaire et renvoyons aux traités classiques de Gear [Ge71], Lambert [La74], Henrici [He74], Crouzeix-Mignot [CM84] ou à l'introduction proposée par L. Halpern [Ha85] ou P.A. Raviart [Ra87].

- Bien entendu, le choix d'un pas de temps est limité par des contraintes de stabilité. L'analyse classique est linéaire et scalaire, on prend $m = 1$ (!) dans la relation (1.5) et on suppose de plus

$$(1.13) \quad f(w) = -\lambda w, \quad w \in \mathbb{R}.$$

On sait qu'alors la variable w suit une décroissance exponentielle si le temps croît à l'infini :

$$(1.14) \quad w(t) = w(0) e^{-\lambda t}$$

qu'il s'agit de capturer avec le schéma numérique. Le coefficient d'amplification du schéma, défini par

$$(1.15) \quad w_{n+1} = K w_n ; \quad f \text{ donné par (1.13)}$$

doit être de module inférieur ou égal à 1. Or pour les trois schémas introduits plus haut, nous avons :

$$(1.16) \quad K = 1 - \lambda \Delta t \quad \text{Euler explicite}$$

$$(1.17) \quad K = \frac{1}{1 + \lambda \Delta t} \quad \text{Euler implicite}$$

$$(1.18) \quad K = \frac{2 - \lambda \Delta t}{2 + \lambda \Delta t} \quad \text{Crank-Nicolson .}$$

La condition (nécessaire) de stabilité

$$(1.19) \quad |K| \leq 1$$

ne fournit pas de condition pour le schéma d'Euler implicite et le schéma de Crank-Nicolson qui sont dits pour cette raison inconditionnellement stables, alors que l'on obtient

$$(1.20) \quad \lambda \Delta t \leq 2, \quad \lambda > 0, \quad \text{Euler explicite}$$

pour le schéma d'Euler-Cauchy qui est donc soumis à une condition de stabilité. On lui préférera plutôt la condition plus restrictive

$$(1.21) \quad \lambda \Delta t \leq 1, \quad \lambda > 0, \quad \text{Euler explicite}$$

qui garantit la monotonie du schéma, i.e. $0 < K < 1$. **Le pas de temps est limité par l'ordre de grandeur de la constante de temps du phénomène de relaxation** étudié pour le schéma d'Euler explicite.

- Notons toutefois que si l'on cherche à approcher un phénomène explosif, pour lequel un bon modèle élémentaire est toujours donné par la relation (1.13), mais avec $\lambda < 0$ cette fois, on a toujours $K > 1$ pour le schéma explicite quel que soit le pas de temps, mais cela ne contredit plus le comportement (divergent) de $w(t)$ que l'on cherche à approcher et l'on peut alors considérer le schéma explicite comme "inconditionnellement stable". Pour le schéma d'Euler implicite au contraire, la simulation d'un comportement divergent $K > 1$ n'est possible que sous la condition

$$(1.22) \quad (-\lambda) \Delta t \geq 2, \quad \lambda < 0, \quad \text{Euler implicite}$$

c'est à dire un pas de temps plus grand que l'échelle en temps du processus envisagé.

- Particularisons maintenant un peu plus le modèle spatial étudié et imaginons que nous cherchions à approcher une advection avec la célérité $a > 0$:

$$(1.23) \quad \frac{\partial w}{\partial t} + a \frac{\partial w}{\partial x} = 0, \quad a > 0.$$

Nous avons, après discrétisation par un schéma décentré d'ordre un, à intégrer en temps le système différentiel suivant :

$$(1.24) \quad \frac{dw_j}{dt} + \frac{a}{\Delta x} (w_j - w_{j-1}) = 0, \quad j \in \mathbb{Z}$$

et l'analyse de stabilité est simple pour l'ensemble infini d'indices j grâce à la transformation de Fourier. On pose :

$$(1.25) \quad w_j(t) = \tilde{w}(k) e^{ijk \Delta x}$$

et la composante de Fourier $\tilde{w}(k)$ suit l'équation d'évolution

$$(1.26) \quad \frac{d\tilde{w}(k)}{dt} + \frac{a}{\Delta x} (1 - e^{-ik \Delta x}) \tilde{w}(k) = 0.$$

Pour les trois schémas vus plus haut, le coefficient d'amplification est toujours donné par les relations (1.16) à (1.18), mais on a maintenant

$$(1.27) \quad \lambda = \frac{a}{\Delta x} (1 - e^{-i\xi}) , \quad \xi \in \mathbb{R}$$

et la condition de stabilité (1.19) doit être réalisée quel que soit le nombre d'onde $\xi = k\Delta x$. On introduit alors le nombre de Courant-Friedrichs-Lewy :

$$(1.28) \quad \sigma = a \frac{\Delta t}{\Delta x}.$$

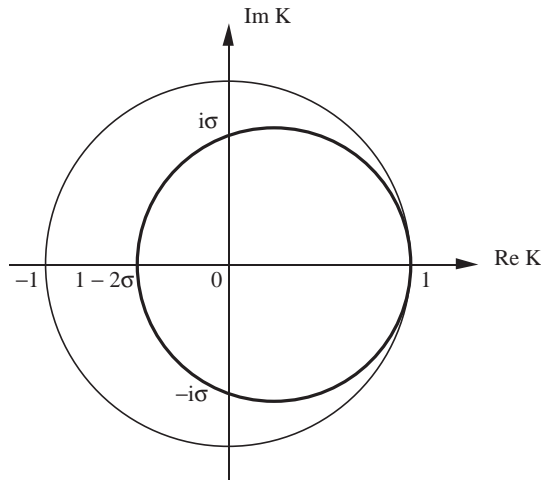


Figure 1 Analyse de stabilité du schéma Euler explicite pour l'équation d'advection avec un schéma en espace décentré du premier ordre.

- Pour le schéma explicite du premier ordre, on a :

$$(1.29) \quad K = (1 - \sigma) + \sigma e^{-i\xi} \quad \text{Euler explicite}$$

et après représentation graphique dans le plan complexe du lieu du coefficient d'amplification K quand ξ varie (figure 1), la condition de stabilité $1 - 2\sigma \geq -1$ prend la forme classique

$$(1.30) \quad \sigma \leq 1, \quad \text{condition de stabilité d'Euler-Cauchy pour l'advection.}$$

Cette condition déjà rencontrée dans les chapitres précédents exprime qu'**une onde physique** (c'est à dire une information propagée par l'équation d'advection (1.23)) **ne peut pas se déplacer de plus d'une maille par pas de temps.**

- Si on utilise le schéma d'Euler rétrograde (1.11), la condition de stabilité (1.19) garantit que quel que soit le pas de temps Δt , le schéma reste stable. Notons qu'un système linéaire doit être résolu pour mettre en œuvre ce schéma numérique ; il s'écrit

$$(1.31) \quad (1 - \sigma) w_j^{n+1} - \sigma w_{j-1}^{n+1} = w_j^n, \quad j \in \mathbb{Z}$$

et une perturbation localisée du second membre se transmet en un seul pas de temps à tous les autres points de grille. Le schéma implicite permet donc une vitesse infinie dans la propagation de l'information donc, de façon heuristique, on peut dire que la stabilité inconditionnelle est une conséquence du fait que **les ondes physiques** (de célérité a) **sont toujours moins rapides que les ondes numériques.** Pour le schéma de Crank-Nicolson (1.12), un calcul élémentaire montre que pour tout $\Delta t > 0$, la condition de stabilité (1.19) est effectivement réalisée. On se gardera toutefois de considérer la propriété de stabilité inconditionnelle comme conséquence directe du caractère implicite du schéma, puisque cette dernière assertion peut être mise en défaut.

- Nous terminons ce paragraphe par une introduction aux méthodes multipas. Pour approcher l'équation différentielle (1.5), on peut, au lieu de l'intégrer sur l'intervalle de temps $[t_n, t_{n+1}]$, prendre un intervalle plus grand du type $[t_{n-1}, t_{n+1}]$, par exemple. Un schéma numérique est alors associé à une formule de quadrature pour l'intégrale suivante :

$$(1.32) \quad \frac{w_{n+1} - w_{n-1}}{\Delta t} = \frac{1}{\Delta t} \int_{t_{n-1}}^{t_{n+1}} f(w(t)) dt .$$

Si on utilise le point t_{n+1} dans la formule de quadrature avec par exemple une formule d'intégration numérique de Simpson, on obtient le schéma implicite de Milne-Simpson :

$$(1.33) \quad \frac{w_{n+1} - w_{n-1}}{\Delta t} = \frac{1}{6} f(w_{n+1}) + \frac{2}{3} f(w_n) + \frac{1}{6} f(w_{n-1}) .$$

Mais les méthodes multipas les plus utilisées sont de type Adams-Bashford (explicites) ou Adams-Moulton (implicites). Nous avons par exemple :

$$(1.34) \quad \frac{w_{n+1} - w_n}{\Delta t} = \frac{3}{2} f(w_n) - \frac{1}{2} f(w_{n-1}) \quad \text{Adams-Bashford à 2 pas}$$

$$(1.35) \quad \left\{ \begin{array}{l} \frac{w_{n+1} - w_n}{\Delta t} = \frac{5}{12} f(w_{n+1}) + \frac{8}{12} f(w_n) - \frac{1}{12} f(w_{n-1}) \\ \text{Adams-Moulton à 2 pas} \end{array} \right.$$

et la méthode d'Adams-Moulton à un pas coïncide exactement avec le schéma de Crank-Nicolson. Notons que le schéma d'Adams-Bashford à deux pas (1.34) est d'ordre 2 alors que le schéma d'Adams-Moulton à deux pas (1.35) est d'ordre 3.

- L'analyse de stabilité des méthodes multipas se fait à partir des mêmes idées que pour le schéma d'Euler : on cherche le comportement du schéma quand on le teste sur l'équation différentielle associée à la relation (1.13), mais l'étude est plus délicate et demande de regarder avec précision des polynômes en variable complexe (voir les traités classiques de Gear, Lambert, ...). Nous pouvons définir le domaine D de stabilité absolue comme l'ensemble des valeurs de $z \equiv \lambda \Delta t$ qui fournit une solution toujours bornée au schéma pour le problème modèle (1.13). Pour les schémas d'Euler explicite et d'Adams-Bashford à deux pas, on peut montrer que l'ensemble D contient toujours un intervalle maximum $[0, r]$ de stabilité absolue, avec

$$(1.36) \quad r = 2 \quad \text{Euler explicite}$$

$$(1.37) \quad r = 1 \quad \text{Adams-Bashford à 2 pas, schéma (1.34) .}$$

Le résultat (1.36) n'est qu'une réécriture de la relation (1.20). Pour les schémas implicites d'Euler et d'Adams-Moulton à deux pas, nous avons

$$(1.38) \quad r = \infty \quad \text{Euler implicite}$$

$$(1.39) \quad r = 6 \quad \text{Adams-Moulton à 2 pas, schéma (1.35) .}$$

- Il est utile de préciser théoriquement la notion de stabilité absolue par la notion plus forte de A -stabilité. Une méthode multipas est A -stable si son domaine D de stabilité absolue contient le demi plan $\text{Re } z \geq 0$ tout entier :

$$(1.40) \quad D \supset \{ z \in \mathbb{C}, \text{Re } z \geq 0 \} \quad \text{méthode } A\text{-stable .}$$

Une méthode multipas linéaire A -stable est toujours d'ordre inférieur ou égal à 2, ce qui constitue une sérieuse limitation. Notons que le schéma d'Euler rétrograde est A -stable, mais que les autres méthodes d'Adams que nous venons d'introduire ne le sont pas. Il en est de même pour la méthode de Milne-Simpson. Pour concilier à la fois la A -stabilité et l'ordre 2 de précision du schéma, nous pouvons utiliser le schéma à deux pas de différentiation rétrograde, défini par la relation suivante :

$$(1.41) \quad \frac{3w_{n+1} - 4w_n + w_{n-1}}{2\Delta t} = f(w_{n+1}) \quad \text{différentiation rétrograde}$$

qui revient à évaluer l'opérateur $\frac{d}{dt}$ par un schéma d'ordre deux décentré amont.

- Malgré leur simplicité de construction, les méthodes multipas ne sont pas encore populaires pour l'approximation en temps des problèmes de dynamique des gaz. Nous y voyons deux raisons : il est d'abord nécessaire de stocker un ou plusieurs états antérieurs ce qui est très coûteux en place mémoire dans l'ordinateur (voir la relation (1.2) !) et ensuite le pas de temps utilisé est toujours défini en relation avec le nombre de Courant (1.28). La taille des mailles reste en général fixée au cours d'un pas de temps mais pas la vitesse maximale des ondes ; il en résulte que à iso-nombre de Courant σ , le pas de temps est **variable**. Il faut donc ou bien majorer uniformément les vitesses d'ondes pour utiliser des pas de temps constants, ou bien utiliser la variante à pas variables de la méthode multipas, détaillée par exemple dans le livre de Crouzeix et Mignot [CM84].

2) Schémas de Runge et Kutta.

- Nous avons vu que les méthodes multipas ne sont pas universellement employées pour l'approximation de problèmes fluides, ce à l'avantage des méthodes à un pas explicites, qui sont essentiellement formées des méthodes de Runge et Kutta. Nous présentons les schémas explicites les plus classiques puis proposons une introduction aux schémas de Runge-Kutta implicites.
- La méthode d'Euler explicite (ou d'Euler-Cauchy)

$$(2.1) \quad \frac{w_{n+1} - w_n}{\Delta t} = f(w_n)$$

est une méthode à un pas d'ordre 1 et par là appartient à la famille des méthodes de Runge-Kutta. Au lieu de donner une définition générale et précise de cette classe de schémas, nous commençons par les exemples de base. Nous avons vu que le problème d'une méthode à un pas est un calcul approché correct de l'intégrale

$$(2.2) \quad \frac{1}{\Delta t} \int_{t_n}^{t_{n+1}} f(w) dt.$$

Une idée naturelle est d'utiliser une formule du point milieu :

$$(2.3) \quad \frac{1}{\Delta t} \int_{t_n}^{t_{n+1}} f(w(t)) dt \approx f\left(w\left(t_n + \frac{\Delta t}{2}\right)\right)$$

et de calculer au mieux le "prédicteur" $w(t_n + \frac{\Delta t}{2})$ par exemple en utilisant ce que l'on connaît, c'est à dire le schéma d'Euler-Cauchy :

$$(2.4) \quad w_{n+1/2} = w_n + \frac{\Delta t}{2} f(w_n)$$

$$(2.5) \quad w_{n+1} = w_n + \Delta t f(w_{n+1/2}) .$$

Le schéma (2.4)-(2.5) est appelé schéma d'Euler modifié, il est d'ordre deux.

- On peut également partir du schéma de Crank-Nicolson

$$(2.6) \quad \frac{w_{n+1} - w_n}{\Delta t} = \frac{1}{2} \left(f(w_n) + f(w_{n+1}) \right)$$

et remplacer ce schéma implicite par une version explicite obtenue en substituant au terme qui fait intervenir w_{n+1} au second membre de la relation (2.6) un terme analogue prédit par le schéma d'Euler explicite. Nous définissons de cette façon le schéma de Heun :

$$(2.7) \quad w_{n,1} = w_n + \Delta t f(w_n)$$

$$(2.8) \quad w_{n+1} = w_n + \frac{\Delta t}{2} \left(f(w_n) + f(w_{n,1}) \right)$$

qui est explicite et du second ordre de précision.

- L'approche se généralise à un ordre supérieur (paramétré par le nombre de pas q) en cherchant pour calculer l'intégrale (2.2) une formule de quadrature du type

$$(2.9) \quad \int_0^1 \varphi(\theta) d\theta \approx \sum_{j=1}^q b_j \varphi(\theta_j)$$

qu'on associe avec des formules de quadrature partielles faisant intervenir uniquement les points θ_j , c'est à dire :

$$(2.10) \quad \int_0^{\theta_i} \varphi(\theta) d\theta \approx \sum_{j=1}^{i-1} a_{i,j} \varphi(\theta_j) .$$

Ainsi, on dispose de relations classiques pour augmenter l'ordre des schémas de Runge-Kutta, en augmentant bien entendu le nombre de pas. Nous avons par exemple le schéma de Heun du troisième ordre :

$$(2.11) \quad w_{n,1/3} = w_n + \frac{\Delta t}{3} f(w_n)$$

$$(2.12) \quad w_{n,2/3} = w_n + \frac{2}{3} \Delta t f(w_{n,1/3})$$

$$(2.13) \quad w_{n+1} = w_n + \frac{\Delta t}{4} \left(f(w_{n,1/3}) + 3f(w_{n,2/3}) \right)$$

et le très populaire schéma de Runge-Kutta du quatrième ordre :

$$(2.14) \quad w_{n,1/2} = w_n + \frac{\Delta t}{2} f(w_n)$$

$$(2.15) \quad \tilde{w}_{n,1/2} = w_n + \frac{\Delta t}{2} f(w_{n,1/2})$$

$$(2.16) \quad w_{n,1} = w_n + \Delta t f(\tilde{w}_{n,1/2})$$

$$(2.17) \quad w_{n+1} = w_n + \frac{\Delta t}{6} (f(w_n) + 2f(w_{n,1/2}) + 2f(\tilde{w}_{n,1/2}) + f(w_{n,1})) .$$

• Il est indispensable de déterminer le domaine D de stabilité de ces schémas, c'est à dire l'ensemble des points z du plan complexe pour lesquels l'équation différentielle

$$(2.18) \quad \frac{dw}{dt} + \lambda w = 0, \quad \lambda \in \mathbb{C}$$

est "bien approché par le schéma", en posant

$$(2.19) \quad z = \lambda \Delta t .$$

Nous cherchons un coefficient d'amplification du schéma (relation (1.15)) qui soit de module inférieur à 1 pour assurer la stabilité. Nous pouvons préciser la valeur du coefficient r qui donne la limite du domaine D avec l'axe réel :

$$(2.20) \quad r = 2 \quad \text{Euler explicite} \quad q = 1$$

$$(2.21) \quad r = 2 \quad \text{Euler modifié ou Heun} \quad q = 2$$

$$(2.22) \quad r = 2.51 \quad \text{Heun d'ordre trois} \quad q = 3$$

$$(2.23) \quad r = 2.78 \quad \text{Runge-Kutta d'ordre quatre} \quad q = 4 .$$

On peut tracer le domaine D (Figure 2, voir aussi Raviart [Ra87]) et on n'oublie pas que de façon pratique la condition de stabilité du schéma numérique s'écrit sous la forme

$$(2.24) \quad \lambda \Delta t \in D .$$

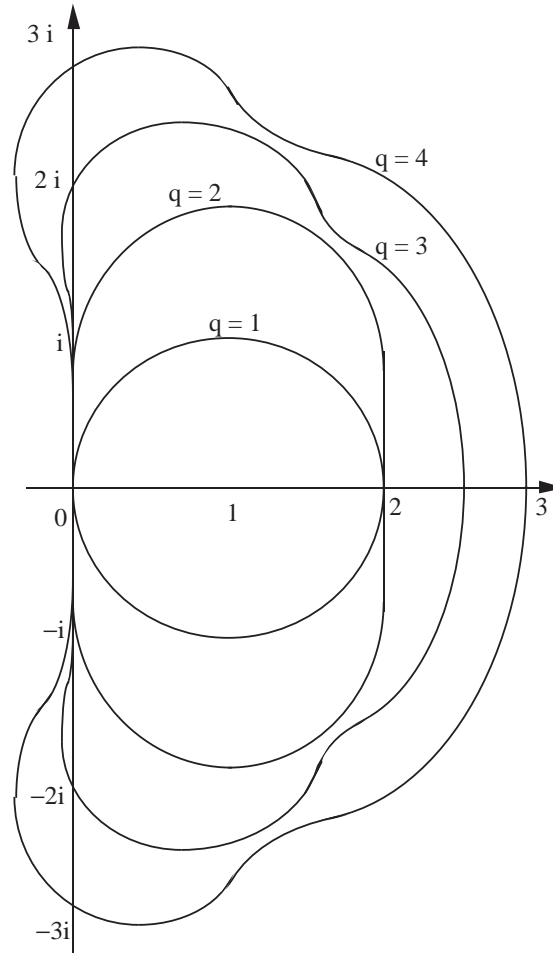


Figure 2 Domaines de stabilité absolue pour divers schémas de Runge-Kutta explicites.

- En pratique, Jameson *et al* [JST81] ont popularisé l'emploi des méthodes de Runge-Kutta dans le contexte des méthodes numériques centrées avec viscosité artificielle pour les équations d'Euler (dont nous ne parlons que très peu dans ce cours au bénéfice des méthodes décentrées). Notre expérience à l'Aérospatiale avec O.Michaux [DM93] est la très bonne qualité du schéma de Heun quand on emploie des expressions décentrées du flux avec la méthode Muscl. Mais on doit garder à l'esprit le coût d'un schéma de Runge-Kutta : celui-ci est proportionnel au nombre de pas puisque l'évaluation de la fonction $f(w)$ constitue l'essentiel du prix. Le schéma d'ordre 4 est donc deux fois plus coûteux que le schéma de Heun, lui même environ deux fois plus cher que les versions initialement proposées par van Leer [vL79], de type Euler modifié, où l'on remplace le prédicteur (2.4) jugé trop cher par une version économique, non conservative, mais trop peu robuste en présence de chocs forts !

• Mais pour augmenter de façon significative la taille du domaine de stabilité absolue D , on doit recourir à des schémas implicites. Nous en présentons un du premier ordre, paramétré par θ compris entre 0 et 1 :

$$(2.25) \quad w_\theta^n = \theta w_{n+1} + (1 - \theta) w_n$$

$$(2.26) \quad w_{n+1} = w_n + \Delta t f(w_\theta^n)$$

qui redonne le schéma d'Euler rétrograde pour $\theta = 1$ et d'Euler explicite pour $\theta = 0$. Le schéma (2.25)(2.26) a de bonnes propriétés de stabilité pour les équations différentielles non linéaires lorsque $\theta \geq 1/2$.

• Notons le renouveau des recherches sur les schémas de Runge-Kutta : Shu et Osher [SO88] ont introduit une famille de schémas de Runge-Kutta qui préserve la propriété de décroissance de la variation totale si le schéma d'Euler explicite correspondant possède déjà la propriété TVD (voir le paragraphe suivant). Plus récemment, van Leer, Tai et Powell [VTP89] ont introduit une famille de schémas de Runge-Kutta du premier ordre mais à plusieurs pas de temps de façon à minimiser uniformément en fréquence le coefficient d'amplification dans le cas d'une discrétisation de l'équation d'advection modèle (1.18).

3) Décroissance de la variation totale.

• Nous étudions maintenant comment la décroissance de la variation totale pour un schéma discrétisé en espace et continu en temps (schéma semi-discret) reste vraie quand on passe à une discrétisation en temps de type Euler explicite ou quand on utilise le schéma de Heun. On étudie une loi de conservation scalaire monodimensionnelle, on suppose connu le calcul des flux à l'interface $(j + 1/2)h$ et on forme la méthode des lignes :

$$(3.1) \quad \frac{du_j}{dt} + \frac{1}{h} \left(f_{j+1/2} - f_{j-1/2} \right) = 0.$$

Une condition suffisante pour que le schéma (3.1) soit à variation totale décroissante a été proposée par Sanders [Sa83] : il suffit qu'il se mette sous la forme suivante :

$$(3.2) \quad \frac{du_j}{dt} + \frac{1}{h} \left(-\xi_{j+1/2} \Delta_{j+1/2} + \eta_{j-1/2} \Delta_{j-1/2} \right) = 0$$

avec la notation classique :

$$(3.3) \quad \Delta_{j+1/2} = u_{j+1} - u_j, \quad j \in \mathbb{Z}$$

et sous l'hypothèse

$$(3.4) \quad \xi_{j+1/2} \geq 0; \quad \eta_{j+1/2} \geq 0, \quad \forall j \in \mathbb{Z}.$$

En effet, on a

$$(3.5) \quad TV(u) \equiv \sum_{j \in \mathbb{Z}} |\Delta_{j+1/2}|$$

et le calcul élémentaire suivant :

$$\frac{d}{dt} TV = \sum_{j \in \mathbb{Z}} \operatorname{sgn}(\Delta_{j+1/2}) \frac{d}{dt} \Delta_{j+1/2} \equiv \sum_{j \in \mathbb{Z}} s_{j+1/2} \frac{d}{dt} \Delta_{j+1/2}$$

$$\begin{aligned} h \frac{d}{dt} TV &= \sum_{j \in \mathbb{Z}} s_{j+1/2} \left[\xi_{j+3/2} \Delta_{j+3/2} - (\eta_{j+1/2} + \xi_{j+1/2}) \Delta_{j+1/2} + \eta_{j-1/2} \Delta_{j-1/2} \right] \\ &= \sum_{j \in \mathbb{Z}} s_{j+1/2} s_{j+3/2} \xi_{j+3/2} |\Delta_{j+3/2}| - \sum_{j \in \mathbb{Z}} (\eta_{j+1/2} + \xi_{j+1/2}) |\Delta_{j+1/2}| \\ &\quad + \sum_{j \in \mathbb{Z}} s_{j+1/2} s_{j-1/2} \eta_{j-1/2} |\Delta_{j-1/2}| \\ &= \sum_{j \in \mathbb{Z}} s_{j-1/2} s_{j+1/2} \xi_{j+1/2} |\Delta_{j+1/2}| - \sum_{j \in \mathbb{Z}} (\eta_{j+1/2} + \xi_{j+1/2}) |\Delta_{j+1/2}| \\ &\quad + \sum_{j \in \mathbb{Z}} s_{j+3/2} s_{j+1/2} \eta_{j+1/2} |\Delta_{j+1/2}| \end{aligned}$$

$$(3.6) \quad \frac{d}{dt} TV = -\frac{1}{h} \sum_{j \in \mathbb{Z}} \left[\xi_{j+1/2} (1 - s_{j-1/2} s_{j+1/2}) + \eta_{j+1/2} (1 - s_{j+3/2} s_{j+1/2}) \right] |\Delta_{j+1/2}|.$$

Le membre de droite de la relation (3.6) est bien négatif puisque $s_{j+1/2}$ vaut $+1$ ou -1 d'une part et que $\xi_{j+1/2}$ et $\eta_{j+1/2}$ sont positifs d'autre part.

• Quand on discrétise en temps l'équation différentielle (3.1), le plus simple est d'opter pour le schéma d'Euler explicite d'ordre un en temps :

$$(3.7) \quad \frac{1}{\Delta t} (u_j^{n+1} - u_j^n) + \frac{1}{\Delta x} (f_{j+1/2}^n - f_{j-1/2}^n)$$

qu'on peut aussi écrire

$$(3.8) \quad u_j^{n+1} = u_j^n + C_{j+1/2} \Delta_{j+1/2} - D_{j-1/2} \Delta_{j-1/2}$$

avec

$$(3.9) \quad C_{j+1/2} = \frac{\Delta t}{h} \xi_{j+1/2}, \quad D_{j+1/2} = \frac{\Delta t}{h} \eta_{j+1/2}.$$

Le schéma (3.8) est à variation totale décroissante, c'est à dire ici

$$(3.10) \quad TV^{n+1} \leq TV^n \equiv \sum_{j \in \mathbb{Z}} |\Delta_{j+1/2}|$$

si les conditions suffisantes de Harten [Ha83] sont vérifiées :

$$(3.11) \quad C_{j+1/2} \geq 0, \quad D_{j+1/2} \geq 0, \quad \forall j \in \mathbb{Z}$$

$$(3.12) \quad C_{j+1/2} + D_{j+1/2} \leq 1, \quad \forall j \in \mathbb{Z}.$$

Elles s'obtiennent par une transformation d'Abel analogue à celle effectuée pour aboutir à la relation (3.6). Les conditions (3.11) résultent clairement de la définition (3.9) et des conditions (3.4), alors que la relation (3.12) peut s'écrire sous la forme :

$$(3.13) \quad \Delta t \leq \frac{h}{\xi_{j+1/2} + \eta_{j+1/2}}, \quad \forall j \in \mathbb{Z}$$

ce qui est en fait une condition de stabilité de Courant-Friedrichs-Lewy !

• La discrétisation par un schéma de Runge-Kutta d'ordre deux défini par les relations :

$$(3.14) \quad \tilde{u}_j = u_j - \frac{\Delta t}{h} (f_{j+1/2}^n - f_{j-1/2}^n)$$

$$(3.15) \quad u_j^{n+1} = u_j - \frac{\Delta t}{2h} (\tilde{f}_{j+1/2}^n + f_{j+1/2}^n - \tilde{f}_{j-1/2}^n - f_{j-1/2}^n)$$

est encore à variation totale décroissante sous l'hypothèse (3.13) comme l'ont montré Shu et Osher [SO88]. On a d'abord, compte tenu de ce qui précède :

$$(3.16) \quad \widetilde{TV} \equiv \sum_{j \in \mathbb{Z}} |\tilde{u}_{j+1} - \tilde{u}_j|$$

et on remarque que l'on a :

$$u_j^{n+1} = u_j^n + \frac{1}{2} \left(C_{j+1/2} \Delta_{j+1/2} + \tilde{C}_{j+1/2} \tilde{\Delta}_{j+1/2} - D_{j-1/2} \Delta_{j-1/2} - \tilde{D}_{j-1/2} \tilde{\Delta}_{j-1/2} \right)$$

où les opérateurs tildés sont les analogues des opérateurs non tildés, mais appliqués à la suite $\{\tilde{u}_j\}$ au lieu de la suite $\{u_j^n\}$. On en tire :

$$(3.17) \quad u_j^{n+1} = \frac{1}{2} \tilde{u}_j + \frac{1}{2} \left(u_j + \tilde{C}_{j+1/2} \tilde{\Delta}_{j+1/2} - \tilde{D}_{j-1/2} \tilde{\Delta}_{j-1/2} \right)$$

$$u_j^{n+1} = \frac{1}{2} \tilde{u}_j + \frac{1}{2} \tilde{\tilde{u}}_j.$$

On tire aisément des relations (3.10), (3.17) et de l'inégalité triangulaire :

$$(3.18) \quad \sum_{j \in \mathbb{Z}} |\Delta_{j+1/2}^{n+1}| \leq \frac{1}{2} TV^n + \frac{1}{2} \widetilde{TV} \leq TV^n,$$

ce qui montre la propriété. La généralisation à des schémas de Runge-Kutta d'ordre supérieur est possible. Nous renvoyons le lecteur à l'article de Shu et Osher.

4) Traitement des termes raides.

- Nous avons vu qu'un problème fluide prend la forme générale (1.7), c'est à dire

$$(4.1) \quad \frac{dw}{dt} = g(w) + \Omega(w)$$

où $g(\bullet)$ représente les termes convectifs et diffusifs qui couplent entre elles les différentes mailles de discrétisation et $\Omega(\bullet)$ décrit la dynamique associée aux réactions chimiques, qui ne couplent pas les diverses variables conservatives entre deux mailles même voisines et de plus ne concerne que certaines équations. En effet, la vitesse de retour à l'équilibre chimique ne dépend que de l'état local du fluide dans la maille considérée.

- Au second membre de la relation (4.1), nous sommes en présence d'une part d'une évolution purement hydrodynamique g dont le temps caractéristique est τ_t et d'autre part d'une cinétique chimique Ω dont le temps caractéristique est τ_c . Le rapport entre ces deux constantes de temps définit le nombre de Damköhler

$$(4.2) \quad D_a = \frac{\tau_t}{\tau_c}.$$

Si l'on a $D_a \ll 1$, l'évolution de la chimie est lente devant l'évolution hydrodynamique et la composition du gaz reste figée. Par contre si $D_a \gg 1$, la chimie évolue beaucoup plus vite et peut donc être considéré en première approximation comme à l'équilibre chimique, c'est à dire solution de l'équation

$$(4.3) \quad \Omega(w) = 0.$$

Nous pouvons réécrire l'équation d'évolution (4.1) en faisant apparaître ce rapport entre les échelles de temps sous forme adimensionnée

$$(4.4) \quad \frac{dw}{dt} = g(w) + D_a \Omega(w).$$

Si nous utilisons pour intégrer l'équation différentielle (4.4) un schéma explicite de Runge-Kutta par exemple, la condition de stabilité (2.24) s'écrit pour la partie purement hydrodynamique

$$(4.5) \quad \frac{\Delta t}{\tau_t} \leq 1.$$

On obtient une expression analogue pour le terme source chimique qui prend la forme

$$(4.6) \quad \frac{\Delta t}{\tau_t} \leq \frac{1}{D_a}.$$

Si le nombre de Damköhler est petit, la condition (4.6) n'est pas restrictive, ce qui correspond bien à l'intuition physique puisque dans ce cas la chimie ne joue

pas de rôle important pour l'écoulement. Par contre si D_a est grand, c'est à dire si la réactivité chimique est importante, la condition (4.6) est dimensionnante pour le contrôle du pas de temps : au lieu d'employer un pas de temps contraint selon une relation de type (4.5), on doit prendre en compte la condition (4.6), ce qui conduit à des pas de temps 10^3 à 10^4 fois plus faibles (pour D_a de l'ordre de 10^3 à 10^4 bien entendu). Le terme chimique introduit dans ce cas de la raideur dans le problème, rendant celui-ci plus cher à résoudre puisque le coût du calcul croît dans des proportions au moins analogues à la multiplication du nombre de pas de temps, ce qui est rarement admissible en pratique.

• Il peut arriver que la condition (4.5) soit déjà très restrictive, c'est le cas par exemple pour les écoulements fluides à basse vitesse (faible nombre de Mach). L'évolution du fluide lui-même est lente devant la célérité des ondes acoustiques, rapides, qui sont alors le facteur essentiel de limitation du pas de temps. Dans ce cas, l'emploi d'un schéma implicite en temps est naturelle. Le schéma d'Euler rétrograde est bien entendu le plus populaire car dans le cas **linéaire**, il permet de relaxer les conditions (4.5) et (4.6) pour les phénomènes de propagation et de retour à l'équilibre chimique. Mais comme nous l'avons déjà dit, il faut alors résoudre pour chaque pas de temps le problème non-linéaire d'inconnue w^{n+1} suivant :

$$(4.7) \quad \frac{w^{n+1} - w^n}{\Delta t} = g(w^{n+1}) + D_a \Omega(w^{n+1})$$

ce qui est en général prohibitif en pratique. La version linéarisée d'un tel schéma est populaire ; elle consiste à remplacer au second membre de la relation (4.7) les termes en w^{n+1} par leur développement de Taylor autour du champ w^n connu depuis le pas de temps précédent :

$$(4.8) \quad g(w^{n+1}) = g(w^n) + g'(w^n) \bullet (w^{n+1} - w^n)$$

$$(4.9) \quad \Omega(w^{n+1}) = \Omega(w^n) + \Omega'(w^n) \bullet (w^{n+1} - w^n)$$

et à injecter les expressions (4.8) et (4.9) dans la relation (4.7). On obtient de cette façon un schéma linéarisé dont l'inconnue est traditionnellement l'incrément

$$(4.10) \quad \delta w = w^{n+1} - w^n$$

et qu'on écrit sous la forme classique :

$$(4.11) \quad \left(\frac{\text{Id}}{\Delta t} - g'(w^n) - D_a \Omega'(w^n) \right) \bullet \delta w = g(w^n) + D_a \Omega(w^n).$$

Le membre de droite de la relation (4.11) est exactement l'incrément explicite associé au schéma d'Euler-Cauchy : on parle de la **phase physique** du schéma. Une fois cette évolution calculée, la relation (4.11) s'interprète comme un système linéaire dont la solution est l'inconnue δw recherchée : il s'agit de la **phase mathématique** du schéma.

- On note ici le coût relativement faible pour évaluer le terme matriciel $\Omega'(w^n)$ qui est composé de termes diagonaux par blocs (de variables conservatives) puisque la fonction Ω découple les cellules. Par contre le terme $g'(w^n)$ est en général impossible à évaluer en pratique et de plus, couple entre elles les cellules du maillage.
- Nous retiendrons que pour les problèmes raides, le choix d'une méthode A -stable permet de s'affranchir de la condition de limitation sur le pas de temps. Par contre le prix à payer est la résolution d'un problème *a priori* non linéaire puisque le schéma d'Euler rétrograde que nous venons de détailler et le schéma (1.41) de différentiation rétrograde (d'ordre 2, A -stable également) sont implicites. Nous renvoyons à Crouzeix-Mignot [CM84] et Raviart [Ra87] pour une étude approfondie de schémas bien adaptés aux système raides et en particulier pour la notion de $A(\theta)$ -stabilité.
- Avant de terminer ce chapitre, nous voulons ici présenter un résultat théorique obtenu par G. Mehlman [Me91]. Ayant à étudier un système fluide dont la partie hydrodynamique $g(\bullet)$ est considérée comme peu raide, c'est à dire pour laquelle on accepte un pas de temps satisfaisant une condition de Courant de type (4.5), peut-on trouver un schéma dont la phase implicite ne fait intervenir que les termes sources chimiques de sorte que
 - le schéma soit A -stable en l'absence de convection
 - le schéma soit d'ordre 2
 - le schéma soit TVD en l'absence de chimie
 - le schéma soit stable sous une condition de Courant pas plus restrictive que la condition (4.5) à imposer pour la convection seule ?
- La réponse (positive) proposée par G. Mehlman [Me91] consiste à introduire un schéma multipas à 3 pas de temps :

$$(4.12) \quad \left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{\Delta t} \left(\frac{8}{3} (\beta + \gamma) W_j^{n+3} - 4\beta W_j^{n+2} + \frac{4}{3} (\beta - 2\gamma) W_j^n \right) = \\ = 2(\beta + 3\gamma) g_j(W^{n+2}) + 2(\gamma - \beta) g_j(W^n) \\ + 4(1 + \gamma) \Omega_j(W^{n+3}) \\ + 2(\beta - 3) \Omega_j(W^{n+2}) + 2(1 - \beta + 2\gamma) \Omega_j(W^n) \end{array} \right.$$

paramétré par les réels β et γ qui doivent vérifier la condition

$$(4.13) \quad \gamma > \beta > 3.$$

Pour un problème modèle d'advection à la célérité a , la condition de stabilité s'écrit

$$(4.14) \quad a \frac{\Delta t}{\Delta x} \leq \frac{2\beta}{\beta + 3\gamma}.$$

• Signalons pour terminer une alternative possible pour intégrer de façon économique et à l'aide de schémas en temps explicites la loi d'évolution (4.4). Il s'agit des méthodes de splitting (ou de décomposition d'opérateurs, voir l'ouvrage classique de Yanenko [Ya68]). Nous imaginons un cas où le nombre de Damköhler est grand (disons $D_a = 1000$ pour fixer les idées) et par suite le pas de temps de la chimie limite de trois ordres de grandeur le pas de temps du système couplé. Dans l'algorithme "splitté", un pas de temps se décompose en deux étapes successives au cours desquelles on ne prend en compte qu'un seul des opérateurs. On intègre d'abord l'hydrodynamique avec un schéma d'Euler explicite soumis à la condition de stabilité (4.5) :

$$(4.15) \quad \tilde{w} = w^n + \Delta t g(w^n)$$

puis on découpe le pas de temps Δt en $\Delta_1 = \frac{\Delta t}{D_a}$ pas de temps intermédiaires et on intègre le terme de chimie à l'aide d'un schéma explicite également mais à l'aide de 1000 pas de temps Δt_1 :

$$(4.16) \quad w_{n,0} = \tilde{w}$$

$$(4.17) \quad w_{n,j+1} = w_{n,j} + \Delta t_1 \Omega(w_{n,j}), \quad j = 1, \dots, 1000$$

$$(4.18) \quad w_{n+1} = w_{n,1000}.$$

Nous renvoyons à la thèse de Baraille [Ba91] pour une étude approfondie des méthodes de splitting relatives aux écoulements de gaz réactifs et à un schéma original **explicite** pour intégrer les termes de chimie **sans limitation sur le pas de temps** tout en utilisant uniquement des opérations élémentaires.