Méthodes de discrétisation en fluides

4. Equation de diffusion stationnaire

Marc A. Habisreutinger

Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne
Section de génie mécanique, CH-1015 Lausanne

Jeudi 14 mars 2024

Contenu

Introduction

Méthode des différences finies

- Formulation intégrale

$$(\partial_t u, v) + (A(u), v) = \mathcal{F}(v), \quad \forall v \in L^2(\Omega)$$

- Fonctions test

$$v_i = \delta(\mathrm{x}_i)$$

- Interpolation des champs

$$\mathrm{u}_i(t) = (u(x,t), \delta(\mathrm{x}_i))$$

Introduction

$$\mathrm{u}_i(t) = (u(x,t), \delta(\mathrm{x}_i))$$
$$u(x,t) = \sum_{j=1}^{\mathrm{p}} \underline{\mathrm{u}}_j(t)\phi_j(x) + \tau(x,t,\mathrm{p})$$
$$\mathbf{D}_{,x}\mathbf{u} = \mathbf{\Phi}_{,x}\underline{\mathbf{\Phi}}\mathbf{u}$$

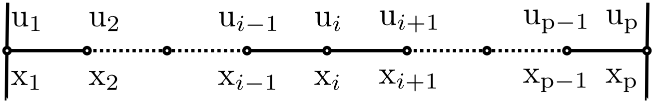
Méthode des différences finies

- Champs connus aux points de collocation uniquement
- Base d'interpolation non-définie
- Définition des opérateurs de dérivation discrets avec des séries de Taylor

$$u(x,t) = \sum_{n=0}^{\mathrm{r}-1} \frac{(x-\mathrm{x}_i)^n}{n!} \left.\frac{\partial^n u}{\partial x^n}\right|_{x=\mathrm{x}_i} + \tau(x,t,\mathrm{r})$$

Introduction

Méthode des différences finies



- Noeuds de collocation

$$\mathbb{X} = \{\mathrm{x}_i | x = \mathrm{x}_1 + (i-1)h\}, \quad i = 1, \ldots, \mathrm{p}$$

- Valeurs nodales

$$\mathrm{u}_i(t) = (u(x,t), \delta(\mathrm{x}_i))$$

Equation de diffusion

Formulation forte

On considère l'équation de diffusion stationnaire, en une dimension spatiale, dont la formulation forte est donnée par

$$\begin{cases} A(u) = -\nu \dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2} = f, \quad \Omega = [\mathrm{a}, \mathrm{b}] \\ u(\mathrm{a}) = 0, \ \dfrac{\partial u}{\partial x} \cdot n \Big|_{\mathrm{b}} = 0 \end{cases}$$

avec la solution

$$\boxed{u \in C^2(\Omega)}$$

Equation de diffusion

$$\begin{cases} A(u) = -\nu \dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2} = f \\ u(\mathrm{a}) = 0, \quad \dfrac{\partial u}{\partial x} \cdot n \Big|_{\mathrm{b}} = 0 \end{cases}$$

Formulation intégrale

La formulation intégrale est obtenue par produit scalaire par une fonction test (pondération)

$$(A(u), v) = \int_\Omega -\nu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \cdot v \, dx = \int_\Omega f \cdot v \, dx, \quad \forall v \in L^2(\Omega)$$

Equation de diffusion

$(A(u), v) = \int_\Omega -\nu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \cdot v \, dx = \int_\Omega f \cdot v \, dx$

Formulation intégrale

La formulation intégrale s'écrit donc sous la forme

$$\begin{cases} (A(u), v) = (f, v), \quad \forall v \in L^2(\Omega) \\ u(\mathrm{a}) = 0, \ \left.\dfrac{\partial u}{\partial x} \cdot n\right|_{\mathrm{b}} = 0 \end{cases}$$

avec la solution

$$\boxed{u \in H^2(\Omega)}$$

Equation de diffusion

Discrétisation spatiale

En utilisant les fonctions test, il vient

$$(A(u), \delta(\mathrm{x}_i)) = \int_\Omega -\nu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \cdot \delta(\mathrm{x}_i) \; dx = \int_\Omega f \cdot \delta(\mathrm{x}_i) \; dx, \quad i = 2, \dots, \mathrm{p}-1$$

Avec les conditions aux limites, on a donc les p équations

$$\begin{cases} A(u)|_{\mathrm{x}_i} = -\nu \left.\dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right|_{\mathrm{x}_i} = \mathrm{f}_i, \quad i = 2, \dots, \mathrm{p}-1 \\ \mathrm{u}_1 = 0, \; \left.\dfrac{\partial u}{\partial x} \cdot n\right|_{\mathrm{b}} = 0 \end{cases}$$

Equation de diffusion

Discrétisation spatiale

Pour approcher la dérivée seconde, on écrit les séries de Taylor

$$\mathrm{u}_{i+1} = \mathrm{u}_i + \frac{h}{1!}\left.\frac{\partial u}{\partial x}\right|_{\mathrm{x}_i} + \frac{h^2}{2!}\left.\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right|_{\mathrm{x}_i} + \frac{h^3}{3!}\left.\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\right|_{\mathrm{x}_i} \pm \mathcal{O}(h^4)$$

$$\mathrm{u}_{i-1} = \mathrm{u}_i - \frac{h}{1!}\left.\frac{\partial u}{\partial x}\right|_{\mathrm{x}_i} + \frac{h^2}{2!}\left.\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right|_{\mathrm{x}_i} - \frac{h^3}{3!}\left.\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\right|_{\mathrm{x}_i} \pm \mathcal{O}(h^4)$$

dont la somme permet d'obtenir

$$\left.\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right|_{\mathrm{x}_i} = \frac{\mathrm{u}_{i+1} - 2\mathrm{u}_i + \mathrm{u}_{i-1}}{h^2} \underbrace{-\frac{2h^2}{4!}\left.\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}\right|_{\mathrm{x}_i} \pm \mathcal{O}(h^4)}_{\epsilon=\mathcal{O}(h^2)}$$

Equation de diffusion

$$-\nu \left.\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right|_{\mathrm{x}_i} = \mathrm{f}_i$$

Discrétisation spatiale

$$\left.\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right|_{\mathrm{x}_i} = \frac{\mathrm{u}_{i-1} - 2\mathrm{u}_i + \mathrm{u}_{i+1}}{h^2} + \mathcal{O}(h^2)$$

On obtient ainsi le système d'équations algébriques

- sous forme indicielle

$$\begin{cases} -\nu \dfrac{\mathrm{u}_{i-1} - 2\mathrm{u}_i + \mathrm{u}_{i+1}}{h^2} = \mathrm{f}_i, \quad i = 2, \dots, \mathrm{p}-1 \\ \mathrm{u}_1 = 0, \ \dfrac{\mathrm{u}_\mathrm{p} - \mathrm{u}_{\mathrm{p}-1}}{h} = 0 \end{cases}$$

- sous forme matricielle

$$\underbrace{-\frac{\nu}{h^2}\begin{pmatrix} 1 & & & & \\ \cdot & \cdot & \cdot & & \\ & +1 & -2 & +1 & \\ & & \cdot & \cdot & \cdot \\ & & & -1/h & +1/h \end{pmatrix}}_{\mathbf{A}} \begin{pmatrix} \mathrm{u}_1 \\ \cdot \\ \mathrm{u}_i \\ \cdot \\ \mathrm{u}_\mathrm{p} \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & & & & \\ & \cdot & & & \\ & & 1 & & \\ & & & \cdot & \\ & & & & 1 \end{pmatrix}}_{\mathbf{M}} \begin{pmatrix} 0 \\ \cdot \\ \mathrm{f}_i \\ \cdot \\ 0 \end{pmatrix}$$

Equation de diffusion

Comparaison éléments/différences finis

- Différences finies du second ordre

$$\begin{cases} -\nu \dfrac{\mathrm{u}_{i-1} - 2\mathrm{u}_i + \mathrm{u}_{i+1}}{h^2} = \mathrm{f}_i, \quad i = 2, \ldots, \mathrm{p}-1 \\ \mathrm{u}_1 = 0, \quad \dfrac{\mathrm{u}_\mathrm{p} - \mathrm{u}_{\mathrm{p}-1}}{h} = 0 \end{cases}$$

- Eléments finis linéaires

$$\begin{cases} -\nu \dfrac{\mathrm{u}_{i-1} - 2\mathrm{u}_i + \mathrm{u}_{i+1}}{h} = \dfrac{h}{6}(\mathrm{f}_{i-1} + 4\mathrm{f}_i + \mathrm{f}_{i+1}), \quad i = 2, \ldots, \mathrm{p}-1 \\ \mathrm{u}_1 = 0, \; -\nu \dfrac{\mathrm{u}_{\mathrm{p}-1} - \mathrm{u}_\mathrm{p}}{h} = 0 \end{cases}$$

Equation modifiée

Définition

L'équation modifiée est l'équation réellement résolue après discrétisation

- Discrétisation spatiale

$$A(u) = f \qquad \rightarrow \qquad A(u_h) = f$$

- Equation modifiée

$$A(u_h) = A(u) + E_h(u) = f$$

- Convergence

$$\lim_{h \to 0} E_h(u) = 0$$

Equation modifiée

$$-\nu \frac{\mathrm{u}_{i-1} - 2\mathrm{u}_i + \mathrm{u}_{i+1}}{h^2} = \mathrm{f}_i$$

$$\left.\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right|_{\mathrm{x}_i} = \frac{\mathrm{u}_{i+1} - 2\mathrm{u}_i + \mathrm{u}_{i-1}}{h^2} - \frac{2h^2}{4!} \left.\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}\right|_{\mathrm{x}_i} \pm \mathcal{O}(h^4)$$

Dérivation

En utilisant le développement de Taylor,

$$-\nu \left.\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right|_{\mathrm{x}_i} - \nu \frac{2h^2}{4!} \left.\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}\right|_{\mathrm{x}_i} \pm \mathcal{O}(h^4) = \mathrm{f}_i$$

A l'ordre dominant, on a

$$A(u_h) = A(u) + E_h(u) = \underbrace{-\nu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}}_{\text{physique}} - \underbrace{\nu \frac{2h^2}{4!} \frac{\partial^4 u}{\partial x^4}}_{\text{numérique}} = f$$

On a bien convergence puisque

$$\lim_{h \to 0} E_h(u) = 0$$

Equation modifiée

Interprétation physique

Avec cette discrétisation, l'équation réellement résolue s'écrit

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \nu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \alpha_4 \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} = 0$$

En considérant une solution de la forme $u = \hat{\mathrm{u}}\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\mathrm{k}x - \omega t)}$, on obtient

$$(-\mathrm{i}\omega + \nu \mathrm{k}^2 - \alpha_4 \mathrm{k}^4)\hat{\mathrm{u}} = 0$$

dont on déduit la relation de dispersion

$$\omega = \overbrace{-\mathrm{i}\nu \mathrm{k}^2}^{\substack{\text{(atténuation)}\\ \text{diffusion}}} \quad \underbrace{+\mathrm{i}\alpha_4 \mathrm{k}^4}_{\text{amplification}}$$

Opérateurs de dérivation

Dérivée première - schéma progressif

- Série de Taylor

$$\mathrm{u}_{i+1} = \mathrm{u}_i + \frac{h}{1!}\left.\frac{\partial u}{\partial x}\right|_{\mathrm{x}_i} + \frac{h^2}{2!}\left.\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right|_{\mathrm{x}_i} + \frac{h^3}{3!}\left.\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\right|_{\mathrm{x}_i} \pm \mathcal{O}(h^4)$$

- En isolant la dérivée première

$$\left.\frac{\partial u}{\partial x}\right|_{\mathrm{x}_i} = \frac{\mathrm{u}_{i+1} - \mathrm{u}_i}{h} \underbrace{- \frac{h}{2!}\left.\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right|_{\mathrm{x}_i} \pm \mathcal{O}(h^2)}_{\epsilon = \mathcal{O}(h)}$$

- Approximation du premier ordre

Opérateurs de dérivation

Dérivée première - schéma rétrograde

- Série de Taylor

$$\mathrm{u}_{i-1} = \mathrm{u}_i - \frac{h}{1!}\left.\frac{\partial u}{\partial x}\right|_{\mathrm{x}_i} + \frac{h^2}{2!}\left.\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right|_{\mathrm{x}_i} - \frac{h^3}{3!}\left.\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\right|_{\mathrm{x}_i} \pm \mathcal{O}(h^4)$$

- En isolant la dérivée première

$$\left.\frac{\partial u}{\partial x}\right|_{\mathrm{x}_i} = \frac{\mathrm{u}_i - \mathrm{u}_{i-1}}{h} \underbrace{+\frac{h}{2!}\left.\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right|_{\mathrm{x}_i} \pm \mathcal{O}(h^2)}_{\epsilon=\mathcal{O}(h)}$$

- Approximation du premier ordre

Opérateurs de dérivation

Dérivée première - schéma centré

- Série de Taylor

$$\mathrm{u}_{i+1} = \mathrm{u}_i + \frac{h}{1!}\left.\frac{\partial u}{\partial x}\right|_{\mathrm{x}_i} + \frac{h^2}{2!}\left.\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right|_{\mathrm{x}_i} + \frac{h^3}{3!}\left.\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\right|_{\mathrm{x}_i} \pm \mathcal{O}(h^4)$$
$$\mathrm{u}_{i-1} = \mathrm{u}_i - \frac{h}{1!}\left.\frac{\partial u}{\partial x}\right|_{\mathrm{x}_i} + \frac{h^2}{2!}\left.\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right|_{\mathrm{x}_i} - \frac{h^3}{3!}\left.\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\right|_{\mathrm{x}_i} \pm \mathcal{O}(h^4)$$

- Différence des deux séries

$$\left.\frac{\partial u}{\partial x}\right|_{\mathrm{x}_i} = \frac{\mathrm{u}_{i+1} - \mathrm{u}_{i-1}}{2h} \underbrace{- \frac{h^2}{3!}\left.\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\right|_{\mathrm{x}_i} \pm \mathcal{O}(h^4)}_{\epsilon = \mathcal{O}(h^2)}$$

- Approximation du second ordre

Opérateurs de dérivation

$$\mathbf{D}_{,x}\mathbf{u} = \mathbf{\Phi}_{,x}\underline{\mathbf{\Phi}}\mathbf{u}$$

Dérivée première - formulations matricielles

- Schéma progressif

$$\left.\frac{\partial u}{\partial x}\right|_{\mathrm{x}_i} = \frac{\mathrm{u}_{i+1} - \mathrm{u}_i}{h} \pm \mathcal{O}(h) \qquad \mathbf{D}^{+}_{,x} = \frac{1}{h}\begin{pmatrix} -1 & +1 & & & \\ & -1 & +1 & & \\ & & -1 & +1 & \\ & & & -1 & +1 \\ & & & & ? \end{pmatrix}$$

- Schéma rétrograde

$$\left.\frac{\partial u}{\partial x}\right|_{\mathrm{x}_i} = \frac{\mathrm{u}_i - \mathrm{u}_{i-1}}{h} \pm \mathcal{O}(h) \qquad \mathbf{D}^{-}_{,x} = \frac{1}{h}\begin{pmatrix} ? & & & & \\ -1 & +1 & & & \\ & -1 & +1 & & \\ & & -1 & +1 & \\ & & & -1 & +1 \end{pmatrix}$$

- Schéma centré

$$\left.\frac{\partial u}{\partial x}\right|_{\mathrm{x}_i} = \frac{\mathrm{u}_{i+1} - \mathrm{u}_{i-1}}{2h} \pm \mathcal{O}(h^2) \qquad \mathbf{D}^{\circ}_{,x} = \frac{1}{2h}\begin{pmatrix} ? & ? & & & \\ -1 & 0 & +1 & & \\ & -1 & 0 & +1 & \\ & & -1 & 0 & +1 \\ & & & ? & ? \end{pmatrix}$$

Opérateurs de dérivation

Dérivée seconde - schéma centré

- Série de Taylor

$$\mathrm{u}_{i+1} = \mathrm{u}_i + \frac{h}{1!}\left.\frac{\partial u}{\partial x}\right|_{\mathrm{x}_i} + \frac{h^2}{2!}\left.\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right|_{\mathrm{x}_i} + \frac{h^3}{3!}\left.\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\right|_{\mathrm{x}_i} \pm \mathcal{O}(h^4)$$

$$\mathrm{u}_{i-1} = \mathrm{u}_i - \frac{h}{1!}\left.\frac{\partial u}{\partial x}\right|_{\mathrm{x}_i} + \frac{h^2}{2!}\left.\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right|_{\mathrm{x}_i} - \frac{h^3}{3!}\left.\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\right|_{\mathrm{x}_i} \pm \mathcal{O}(h^4)$$

- Somme des deux séries

$$\left.\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right|_{\mathrm{x}_i} = \frac{\mathrm{u}_{i+1} - 2\mathrm{u}_i + \mathrm{u}_{i-1}}{h^2} \underbrace{- \frac{2h^2}{4!}\left.\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}\right|_{\mathrm{x}_i} \pm \mathcal{O}(h^4)}_{\epsilon = \mathcal{O}(h^2)}$$

- Approximation du second ordre

Opérateurs de dérivation

$\mathbf{D}_{,xx}\mathbf{u} = \mathbf{\Phi}_{,xx}\underline{\mathbf{\Phi}}\mathbf{u}$

Dérivée seconde - schéma centré

- Formulation indicielle

$$\left.\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right|_{\mathrm{x}_i} = \frac{\mathrm{u}_{i-1} - 2\mathrm{u}_i + \mathrm{u}_{i+1}}{h^2} \pm \mathcal{O}(h^2)$$

- Formulation matricielle

$$\mathbf{D}^{\circ}_{,xx} = \frac{1}{h^2}\begin{pmatrix} ? & ? & & & \\ +1 & -2 & +1 & & \\ & +1 & -2 & +1 & \\ & & +1 & -2 & +1 \\ & & & ? & ? \end{pmatrix}$$

Opérateurs de dérivation

$u(x,t) \simeq \sum_{n=0}^{\mathrm{r}-1} \frac{(x-\mathrm{x}_i)^n}{n!} \left.\frac{\partial^n u}{\partial x^n}\right|_{x=\mathrm{x}_i}$

Méthode générale

- Pour approximer une dérivée d'ordre n,
- avec un support[1] de r points,
- il faut satisfaire

$$\mathrm{r} > n$$

- et utiliser r développements de Taylor à r termes.

[1] en anglais *stencil*

Opérateurs de dérivation

$u(x,t) \simeq \sum_{n=0}^{\mathrm{r}-1} \frac{(x-\mathrm{x}_i)^n}{n!} \left.\frac{\partial^n u}{\partial x^n}\right|_{x=\mathrm{x}_i}$

Méthode générale

Ainsi, pour un schéma centré et $\mathrm{r} = 3$, on écrit

$$\begin{aligned}
\mathrm{u}_{i-1} &= \frac{(1h)^0}{0!} \left.\frac{\partial^0 u}{\partial x^0}\right|_{\mathrm{x}_i} - \frac{(1h)^1}{1!} \left.\frac{\partial^1 u}{\partial x^1}\right|_{\mathrm{x}_i} + \frac{(1h)^2}{2!} \left.\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right|_{\mathrm{x}_i} \pm \mathcal{O}(h^3) \\
\mathrm{u}_{i} &= \frac{(0h)^0}{0!} \left.\frac{\partial^0 u}{\partial x^0}\right|_{\mathrm{x}_i} + \frac{(0h)^1}{1!} \left.\frac{\partial^1 u}{\partial x^1}\right|_{\mathrm{x}_i} + \frac{(0h)^2}{2!} \left.\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right|_{\mathrm{x}_i} \pm \mathcal{O}(h^3) \\
\mathrm{u}_{i+1} &= \frac{(1h)^0}{0!} \left.\frac{\partial^0 u}{\partial x^0}\right|_{\mathrm{x}_i} + \frac{(1h)^1}{1!} \left.\frac{\partial^1 u}{\partial x^1}\right|_{\mathrm{x}_i} + \frac{(1h)^2}{2!} \left.\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right|_{\mathrm{x}_i} \pm \mathcal{O}(h^3)
\end{aligned}$$

Opérateurs de dérivation

Méthode générale

Ces séries de Taylor peuvent s'écrire sous forme matricielle,

$$\left(\begin{array}{c} \mathrm{u}_{i-1} \\ \mathrm{u}_{i} \\ \mathrm{u}_{i+1} \end{array}\right) = \underbrace{\left(\begin{array}{ccc} \frac{(1h)^0}{0!} & -\frac{(1h)^1}{1!} & \frac{(1h)^2}{2!} \\ \frac{(0h)^0}{0!} & +\frac{(0h)^1}{1!} & \frac{(0h)^2}{2!} \\ \frac{(1h)^0}{0!} & +\frac{(1h)^1}{1!} & \frac{(1h)^2}{2!} \end{array}\right)}_{\equiv \mathbf{T}} \left(\begin{array}{c} \frac{\partial^0 u}{\partial x^0} \\ \frac{\partial^1 u}{\partial x^1} \\ \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \end{array}\right)_{|\mathrm{x}_i} \pm \left(\begin{array}{c} \mathcal{O}(h^3) \\ \mathcal{O}(h^3) \\ \mathcal{O}(h^3) \end{array}\right)$$

Dans ce cas, la matrice des coefficients de Taylor vaut

$$\mathbf{T} = \left(\begin{array}{ccc} 1 & -h & \frac{h^2}{2} \\ 1 & 0 & 0 \\ 1 & +h & \frac{h^2}{2} \end{array}\right)$$

Opérateurs de dérivation

$$\left.\frac{\partial u}{\partial x}\right|_{x_i} = \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2h} \pm \mathcal{O}(h^2)$$

$$\left.\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right|_{x_i} = \frac{u_{i-1} - 2u_i + u_{i+1}}{h^2} \pm \mathcal{O}(h^2)$$

Méthode générale

Ensuite, on multiplie à gauche par $\mathbf{T}^{-1}$ pour obtenir

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial^0 u}{\partial x^0} \\ \frac{\partial^1 u}{\partial x^1} \\ \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \end{pmatrix}_{|x_i} = \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -\frac{1}{2h} & 0 & +\frac{1}{2h} \\ +\frac{1}{h^2} & -\frac{2}{h^2} & +\frac{1}{h^2} \end{pmatrix}}_{=\mathbf{T}^{-1}} \begin{pmatrix} u_{i-1} \\ u_i \\ u_{i+1} \end{pmatrix} \pm \begin{pmatrix} 0 \\ \mathcal{O}(h^2) \\ \mathcal{O}(h^{1+1}) \end{pmatrix}$$

On retrouve les résultats précédents pour une approximation des dérivées première et seconde avec un schéma centré de trois points.

Opérateurs de dérivation

Méthode générale

Si on considère une approximation décentrée avec $\mathrm{r} = 4$, on obtient

$$
\begin{aligned}
\mathrm{u}_{i-2} &= \frac{(2h)^0}{0!}\left.\frac{\partial^0 u}{\partial x^0}\right|_{\mathrm{x}_i} - \frac{(2h)^1}{1!}\left.\frac{\partial^1 u}{\partial x^1}\right|_{\mathrm{x}_i} + \frac{(2h)^2}{2!}\left.\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right|_{\mathrm{x}_i} - \frac{(2h)^3}{3!}\left.\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\right|_{\mathrm{x}_i} \pm \mathcal{O}(h^4) \\
\mathrm{u}_{i-1} &= \frac{(1h)^0}{0!}\left.\frac{\partial^0 u}{\partial x^0}\right|_{\mathrm{x}_i} - \frac{(1h)^1}{1!}\left.\frac{\partial^1 u}{\partial x^1}\right|_{\mathrm{x}_i} + \frac{(1h)^2}{2!}\left.\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right|_{\mathrm{x}_i} - \frac{(1h)^3}{3!}\left.\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\right|_{\mathrm{x}_i} \pm \mathcal{O}(h^4) \\
\mathrm{u}_{i} &= \frac{(0h)^0}{0!}\left.\frac{\partial^0 u}{\partial x^0}\right|_{\mathrm{x}_i} + \frac{(0h)^1}{1!}\left.\frac{\partial^1 u}{\partial x^1}\right|_{\mathrm{x}_i} + \frac{(0h)^2}{2!}\left.\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right|_{\mathrm{x}_i} + \frac{(0h)^3}{3!}\left.\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\right|_{\mathrm{x}_i} \pm \mathcal{O}(h^4) \\
\mathrm{u}_{i+1} &= \frac{(1h)^0}{0!}\left.\frac{\partial^0 u}{\partial x^0}\right|_{\mathrm{x}_i} + \frac{(1h)^1}{1!}\left.\frac{\partial^1 u}{\partial x^1}\right|_{\mathrm{x}_i} + \frac{(1h)^2}{2!}\left.\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right|_{\mathrm{x}_i} + \frac{(1h)^3}{3!}\left.\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\right|_{\mathrm{x}_i} \pm \mathcal{O}(h^4)
\end{aligned}
$$

Opérateurs de dérivation

Méthode générale

Sous forme matricielle, ceci s'écrit

$$\begin{pmatrix} \mathrm{u}_{i-2} \\ \mathrm{u}_{i-1} \\ \mathrm{u}_{i} \\ \mathrm{u}_{i+1} \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} \frac{(2h)^0}{0!} & -\frac{(2h)^1}{1!} & \frac{(2h)^2}{2!} & -\frac{(2h)^3}{3!} \\ \frac{(1h)^0}{0!} & -\frac{(1h)^1}{1!} & \frac{(1h)^2}{2!} & -\frac{(1h)^3}{3!} \\ \frac{(0h)^0}{0!} & +\frac{(0h)^1}{1!} & \frac{(0h)^2}{2!} & +\frac{(0h)^3}{3!} \\ \frac{(1h)^0}{0!} & +\frac{(1h)^1}{1!} & \frac{(1h)^2}{2!} & +\frac{(1h)^3}{3!} \end{pmatrix}}_{\equiv \mathbf{T}} \begin{pmatrix} \frac{\partial^0 u}{\partial x^0} \\ \frac{\partial^1 u}{\partial x^1} \\ \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \\ \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \end{pmatrix}_{|\mathrm{x}_i} \pm \begin{pmatrix} \mathcal{O}(h^4) \\ \mathcal{O}(h^4) \\ \mathcal{O}(h^4) \\ \mathcal{O}(h^4) \end{pmatrix}$$

Dans ce cas, la matrice des coefficients de Taylor vaut

$$\mathbf{T} = \begin{pmatrix} 1 & -2h & \frac{4h^2}{2} & -\frac{8h^3}{6} \\ 1 & -h & \frac{h^2}{2} & -\frac{h^3}{6} \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & +h & \frac{h^2}{2} & +\frac{h^3}{6} \end{pmatrix}$$

Opérateurs de dérivation

Méthode générale

Ensuite, on multiplie à gauche par $\mathbf{T}^{-1}$ pour obtenir

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial^0 u}{\partial x^0} \\ \frac{\partial^1 u}{\partial x^1} \\ \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \\ \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \end{pmatrix}_{|\mathrm{x}_i} = \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ +\frac{1}{6h} & -\frac{6}{6h} & +\frac{3}{6h} & +\frac{2}{6h} \\ 0 & +\frac{1}{h^2} & -\frac{2}{h^2} & +\frac{1}{h^2} \\ -\frac{1}{h^3} & +\frac{3}{h^3} & -\frac{3}{h^3} & +\frac{1}{h^3} \end{pmatrix}}_{=\mathbf{T}^{-1}} \begin{pmatrix} \mathrm{u}_{i-2} \\ \mathrm{u}_{i-1} \\ \mathrm{u}_i \\ \mathrm{u}_{i+1} \end{pmatrix} \pm \begin{pmatrix} 0 \\ \mathcal{O}(h^3) \\ \mathcal{O}(h^2) \\ \mathcal{O}(h^1) \end{pmatrix}$$

On en déduit donc les schémas de dérivation

$$\left.\frac{\partial^1 u}{\partial x^1}\right|_{\mathrm{x}_i} \simeq \frac{2\mathrm{u}_{i+1} + 3\mathrm{u}_i - 6\mathrm{u}_{i-1} + \mathrm{u}_{i-2}}{6h}$$

$$\left.\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\right|_{\mathrm{x}_i} \simeq \frac{\mathrm{u}_{i+1} - 3\mathrm{u}_i + 3\mathrm{u}_{i-1} - \mathrm{u}_{i-2}}{h^3}$$

$$\left.\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right|_{\mathrm{x}_i} \simeq \frac{\mathrm{u}_{i+1} - 2\mathrm{u}_i + \mathrm{u}_{i-1}}{h^2}$$

Opérateurs de dérivation

Méthode générale

- Ordre de dérivation maximal calculable

$$\mathrm{n}_{\mathrm{max}} = \mathrm{r} - 1$$

- Ordre de précision pour la dérivée d'ordre n (schéma non-centré)

$$\epsilon = \mathcal{O}(h^{\mathrm{r}-n})$$

- Ordre de précision pour la dérivée d'ordre n (schéma centré)

$$\epsilon = \mathcal{O}(h^{\mathrm{r}-n+1}), \quad n \text{ pair}$$
$$\epsilon = \mathcal{O}(h^{\mathrm{r}-n}), \quad n \text{ impair}$$

Conditions aux limites

Principaux types

$$\begin{cases} A(u) = f \\ u \in C^k(\Omega), \ + C.L. \end{cases}$$

- Conditions de Dirichlet

$$u = D(x,t), \quad \text{sur } \partial\boldsymbol{\Omega}_{\mathrm{D}}$$

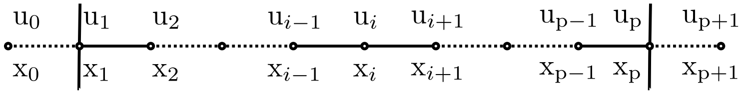
- Conditions de Neumann

$$\frac{\partial u}{\partial \boldsymbol{n}} = \boldsymbol{\nabla} u \cdot \boldsymbol{n} = N(x,t), \quad \text{sur } \partial\boldsymbol{\Omega}_{\mathrm{N}}$$

- Conditions périodiques

Conditions aux limites

Conditions de Dirichlet



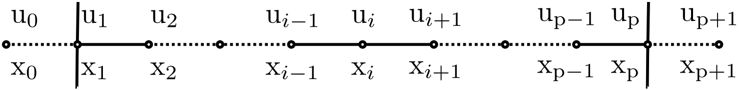
$u_1 = \alpha$ $\qquad\qquad$ $u_p = \beta$

Conditions aux limites

$$\left.\frac{\partial u}{\partial x}\right|_{\mathrm{x}_i} = \frac{\mathrm{u}_{i+1} - \mathrm{u}_i}{h} \pm \mathcal{O}(h)$$

$$\left.\frac{\partial u}{\partial x}\right|_{\mathrm{x}_i} = \frac{\mathrm{u}_i - \mathrm{u}_{i-1}}{h} \pm \mathcal{O}(h)$$

Conditions de Neumann (flux) - Schéma décentré d'ordre 1



$$\left.\frac{\partial u}{\partial x} \cdot n\right|_{\mathrm{x}_1} = \alpha \simeq \frac{\mathrm{u}_1 - \mathrm{u}_2}{h}$$

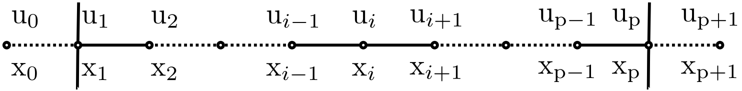
$$\left.\frac{\partial u}{\partial x} \cdot n\right|_{\mathrm{x}_p} = \beta \simeq \frac{\mathrm{u}_p - \mathrm{u}_{p-1}}{h}$$

Conditions aux limites

$$\left.\frac{\partial u}{\partial x}\right|_{x_i} = \frac{-3u_i+4u_{i+1}-u_{i+2}}{2h} \pm \mathcal{O}(h^2)$$

$$\left.\frac{\partial u}{\partial x}\right|_{x_i} = \frac{+3u_i-4u_{i-1}+u_{i-2}}{2h} \pm \mathcal{O}(h^2)$$

Conditions de Neumann (flux) - Schéma décentré d'ordre 2



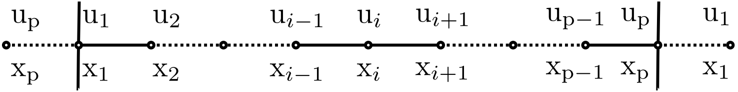
$$\left.\frac{\partial u}{\partial x}\cdot n\right|_{x_1} = \alpha \simeq \frac{+3u_1-4u_2+u_3}{2h}$$

$$\left.\frac{\partial u}{\partial x}\cdot n\right|_{x_p} = \beta \simeq \frac{+3u_p-4u_{p-1}+u_{p-2}}{2h}$$

Conditions aux limites

Conditions périodiques

$$\mathrm{p} \equiv 0 \qquad i \equiv i + k\mathrm{p},\ k \in \mathbb{Z} \qquad p + 1 \equiv 1$$



$$\left.\frac{\partial^n u}{\partial x^n}\right|_{\mathrm{x_1}} = \left.\frac{\partial^n u}{\partial x^n}\right|_{\mathrm{x_p}}, \quad \forall n \in \mathbb{N}$$

Conditions aux limites

$$\left.\frac{\partial u}{\partial x}\right|_{\mathrm{x}_i} \simeq \frac{\mathrm{u}_{i+1}-\mathrm{u}_{i-1}}{2h}$$

$$\left.\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right|_{\mathrm{x}_i} \simeq \frac{\mathrm{u}_{i-1}-2\mathrm{u}_i+\mathrm{u}_{i+1}}{h^2}$$

$$\mathrm{u}_0 \equiv \mathrm{u}_\mathrm{p} \quad \mathrm{u}_{\mathrm{p}+1} \equiv \mathrm{u}_1$$

Conditions périodiques

- Dérivée première

  Schéma centré

$$\left.\frac{\partial u}{\partial x}\right|_{\mathrm{x}_1} \simeq \frac{\mathrm{u}_2-\mathrm{u}_\mathrm{p}}{2h}$$

$$\left.\frac{\partial u}{\partial x}\right|_{\mathrm{x}_\mathrm{p}} \simeq \frac{\mathrm{u}_1-\mathrm{u}_{\mathrm{p}-1}}{2h}$$

- Dérivée seconde

  Schéma centré

$$\left.\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right|_{\mathrm{x}_1} \simeq \frac{\mathrm{u}_\mathrm{p}-2\mathrm{u}_1+\mathrm{u}_2}{h^2}$$

$$\left.\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right|_{\mathrm{x}_\mathrm{p}} \simeq \frac{\mathrm{u}_{\mathrm{p}-1}-2\mathrm{u}_\mathrm{p}+\mathrm{u}_1}{h^2}$$

$$\overline{\mathbf{D}}^{\circ}_{,x} = \frac{1}{2h}\begin{pmatrix} 0 & +1 & & & -1 \\ -1 & 0 & +1 & & \\ & -1 & 0 & +1 & \\ & & -1 & 0 & +1 \\ +1 & & & -1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\overline{\mathbf{D}}^{\circ}_{,xx} = \frac{1}{h^2}\begin{pmatrix} -2 & +1 & & & +1 \\ +1 & -2 & +1 & & \\ & +1 & -2 & +1 & \\ & & +1 & -2 & +1 \\ +1 & & & +1 & -2 \end{pmatrix}$$