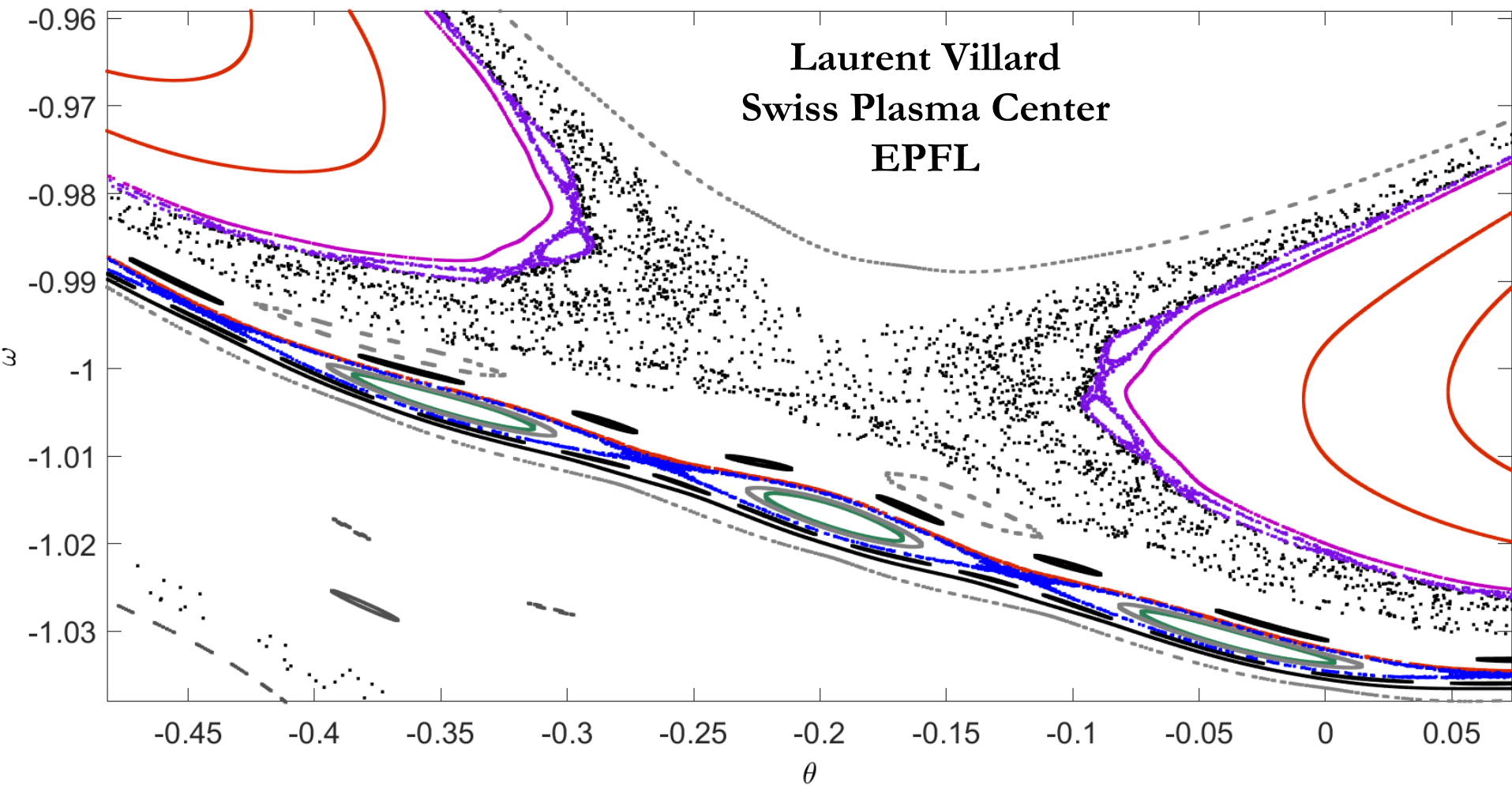


Physique Numérique

Laurent Villard
Swiss Plasma Center
EPFL



Physique Numérique

laurent.villard@epfl.ch

tel. +41 21 69 34564

Cours: mercredi, CE 3 13h15-15h

Exercices-TP: mercredi 15h15 - 18h, BC07-08(*), BC02, BC03, BC04

Accès 24/24, 7/7 à ces salles

Premier Assistant: Giovanni Di Giannatale, giovanni.digiannatale@epfl.ch

Assistant(e)s: Erol Balkovic, Micol Bassanini, Brenno De Lucca, Lili Edes, Cosmas Heiss, Fabien Jeanquartier, Michele Marin, Baruch Rofman, Nicole Vadot, Guillaume Van Parys, Mackenzie Van Rossem, Ibrahim Almuslimani, Leo Kruglikovs, Thierry Glauser, Felix Burkhardt

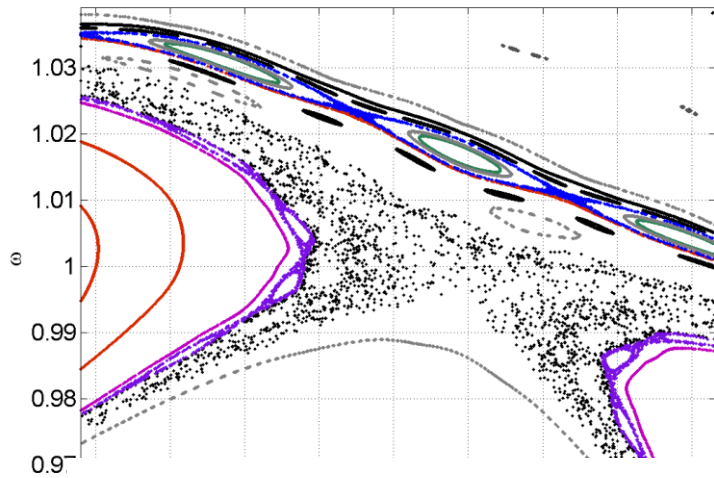
(*) *BC07-08 équipée de 74 terminaux
Connexion à un pool de machines virtuelles Linux*

Contenu du cours

- | | |
|---|---|
| <ol style="list-style-type: none">1. Introduction2. Evolution temporelle. Problèmes à valeur initiale (<i>Equations Différentielles Ordinaires</i>)<ul style="list-style-type: none">• Trajectoires, oscillations, chaos, gravitation, N-corps, ...3. Intégration spatiale. Problèmes à valeurs aux bords<ul style="list-style-type: none">• Electrostatique, chaleur, ...4. Intégration spatio-temporelle (<i>Equations aux Dérivées Partielles</i>)<ul style="list-style-type: none">• Advection-diffusion, ondes, mécanique quantique | <ol style="list-style-type: none">1. Discrétisation2. Euler explicite, implicite, semi-implicite, symplectique; Verlet, Runge-Kutta; Boris-Buneman<ul style="list-style-type: none">• Stabilité et convergence• Pas de temps adaptatif3. Gauss-Seidel, SOR. Elements Finis<ul style="list-style-type: none">• Convergence4. Différences Finies<ul style="list-style-type: none">• Stabilité et convergence• Propriétés de conservation• Explicite et semi-implicite |
|---|---|

Quelques exemples

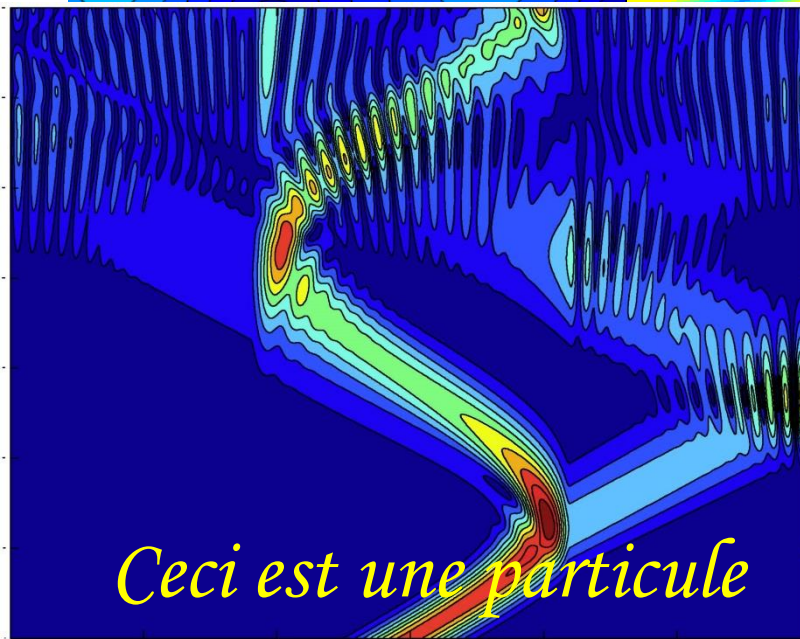
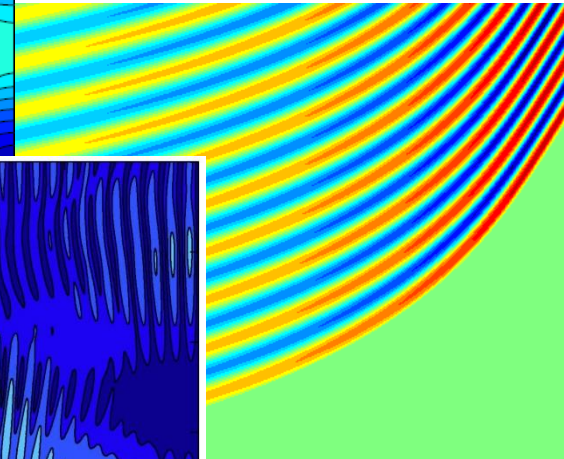
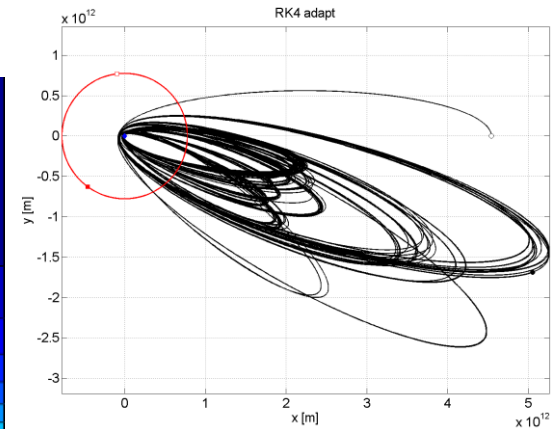
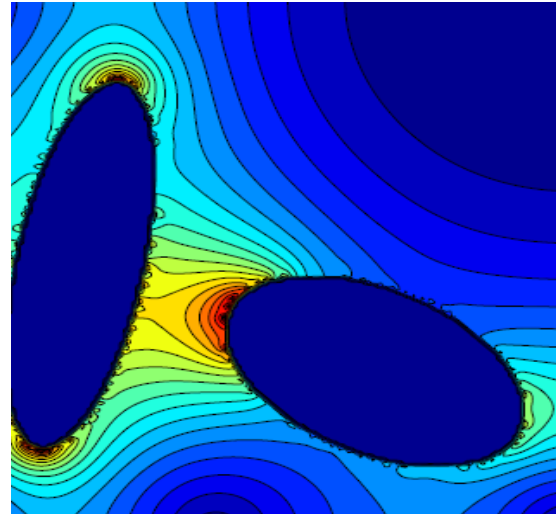
VV Pendule $g/l=1$ $\nu=0$ $\Omega=1$ $A=0.5$



Ceci est un pendule



Ceci est un pendule



Ceci est une particule

Documentation

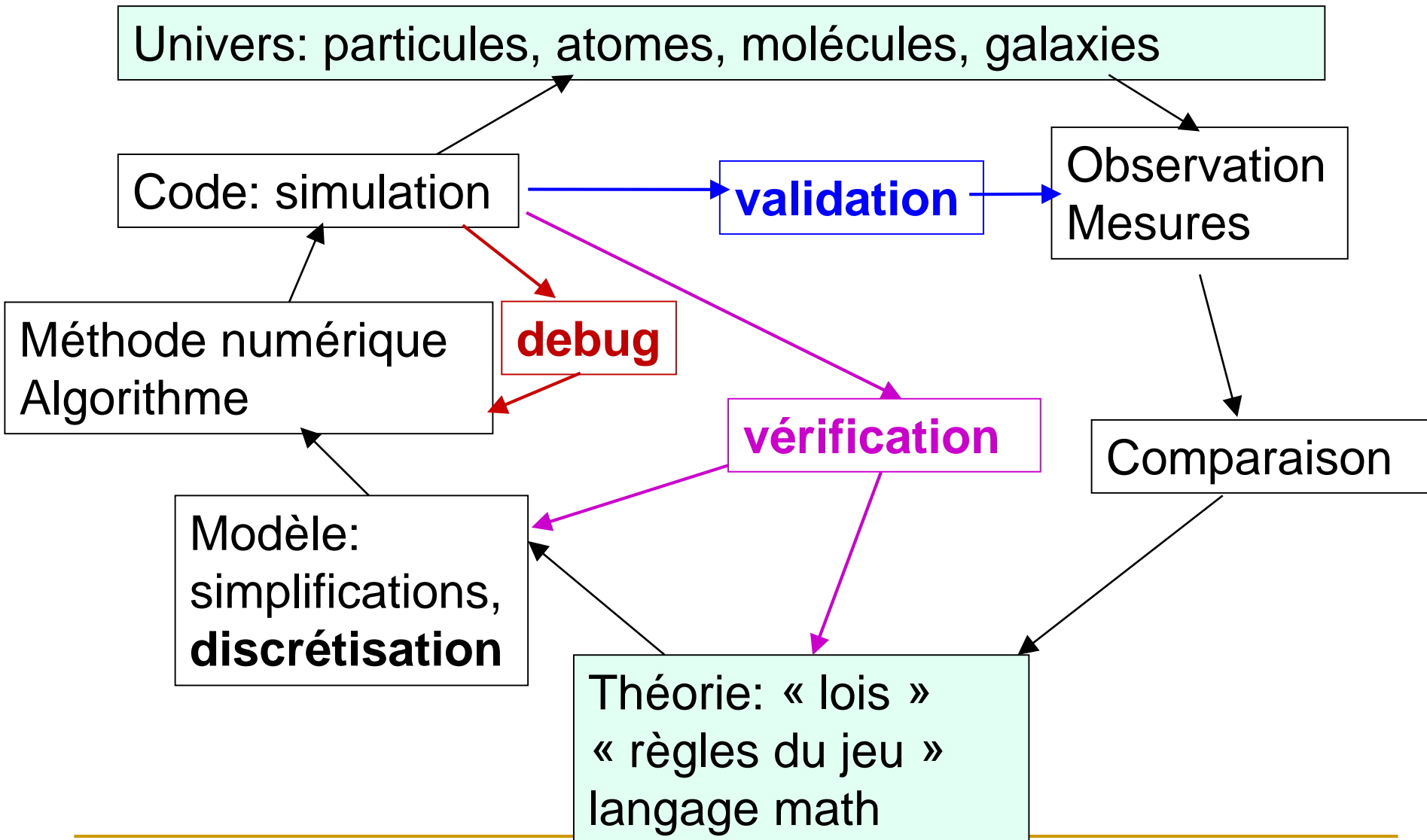
Site web: <http://moodle.epfl.ch/course/view.php?id=287>

- Enrolment key: PhysNum1277
- Notes de cours. Exercices. Ressources utiles (LaTeX, Matlab, etc..)

- Lecture pour la Semaine #1: Notes de cours
 - Chapitre 1 en entier
 - Chapitre 2, Section 2.1

<http://moodle.epfl.ch/mod/resource/view.php?id=8220>

1. Introduction. Objectifs



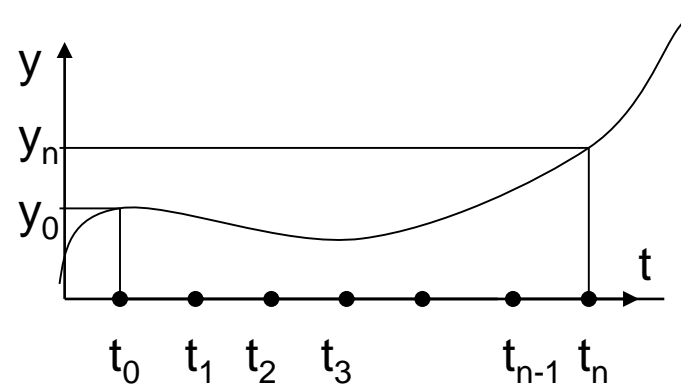
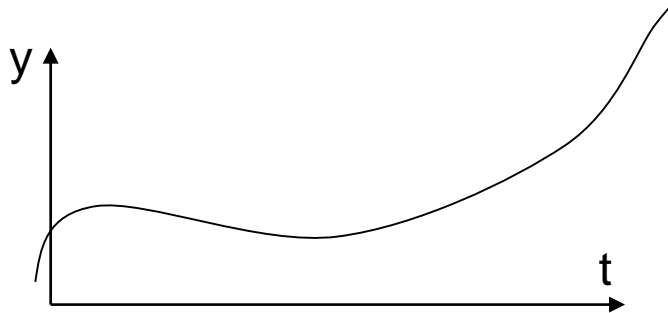
1.2 Discretisation

t continu

$\{t_n\}, n=0,1,2,3,\dots$

y(t) continue

$\{y_n\}, n=0,1,2,3,\dots y_n=y(t_n)$



Equation différentielle, p.ex.

$$\frac{dy}{dt} = f(y, t)$$

Approximation, p.ex. différences finies

$$\frac{y_{n+1} - y_n}{t_{n+1} - t_n} \approx f(y_n, t_n)$$

Solution exacte y(t)

?

Solution **approchée** $y_n(t_n)$, en un nombre **fini** de points

Calcul différentiel et intégral

?

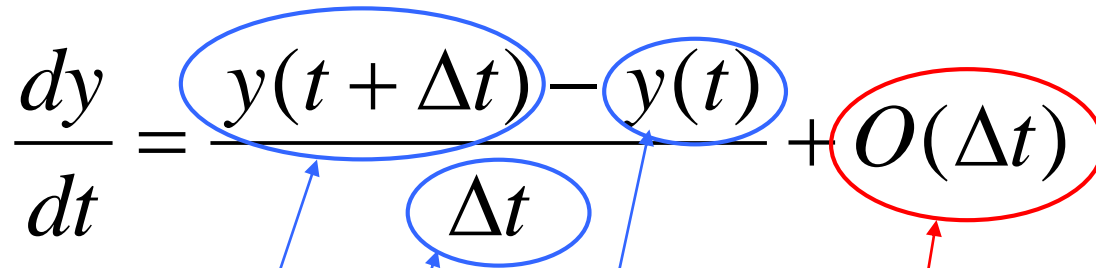
Opérations arithmétiques

Vérifier & Valider

- A quel point la solution discrétisée approche-t-elle la solution exacte?
 - Vérifier la **convergence** et la **stabilité** numériques
 - Vérifier les **propriétés physiques** de la solution et comparer avec la solution exacte, si elle existe
 - Valider: comparer avec l'expérience : TP
- Souvent, des solutions exactes n'existent que pour des équations résultant de *modèles approximatifs*, p.ex. « on néglige la présence de plus de 2 corps célestes »
- L'approche numérique permet en principe de s'affranchir de ces restrictions....
- ...mais connaître les limites et les «défauts» de l'outil numérique est un des objectifs fondamentaux du cours.

1.3 Intégration, différentiation: Erreurs

■ Dérivée

$$\frac{dy}{dt} = \frac{y(t + \Delta t) - y(t)}{\Delta t} + O(\Delta t)$$


Erreur d'**arrondi**: chaque nombre est représenté avec un nombre fini de bits

Erreur de **troncature**: liée au développement limité de la fonction $y(t)$ au 1er ordre

Erreurs d'arrondi et de troncature: exemple

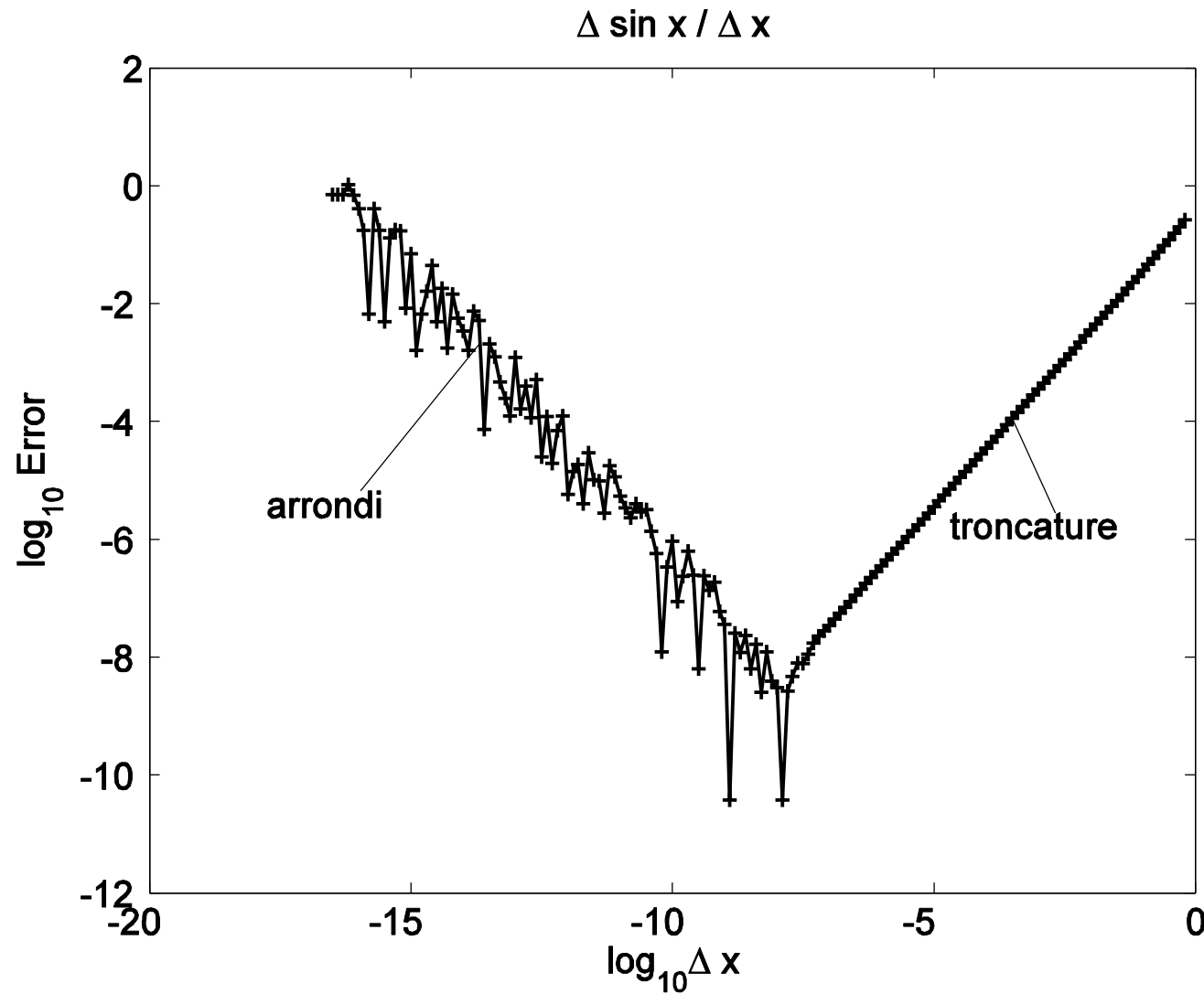


Fig. 1.1

1.4 Différences finies et développements limités

Soit des points de maillage $\{t_j\}$, $j=0,1,2,3,\dots$ équidistants

Soit $f_j=f(t_j)$, $f'_j=df/dt(t_j)$, ...

$$f_{j-2} = f_j - 2hf'_j + 2h^2f''_j - \frac{8}{6}h^3f_j^{(3)} + \frac{16}{24}h^4f_j^{(4)} - \frac{32}{120}h^5f_j^{(5)} + \mathcal{O}(h^6) \quad (1.2)$$

$$f_{j-1} = f_j - hf'_j + \frac{1}{2}h^2f''_j - \frac{1}{6}h^3f_j^{(3)} + \frac{1}{24}h^4f_j^{(4)} - \frac{1}{120}h^5f_j^{(5)} + \mathcal{O}(h^6) \quad (1.3)$$

$$f_{j+1} = f_j + hf'_j + \frac{1}{2}h^2f''_j + \frac{1}{6}h^3f_j^{(3)} + \frac{1}{24}h^4f_j^{(4)} + \frac{1}{120}h^5f_j^{(5)} + \mathcal{O}(h^6) \quad (1.4)$$

$$f_{j+2} = f_j + 2hf'_j + 2h^2f''_j + \frac{8}{6}h^3f_j^{(3)} + \frac{16}{24}h^4f_j^{(4)} + \frac{32}{120}h^5f_j^{(5)} + \mathcal{O}(h^6) \quad (1.5)$$

En combinant ces équations, on obtient différentes expressions de différences finies pour les dérivées de f aux points de maillage.

1.4 Différences finies et développements limités

Soit des points de maillage $\{t_j\}$, $j=0,1,2,3,\dots$ équidistants

Soit $f_j=f(t_j)$, $f'_j=df/dt(t_j)$, ...

$$f_{j-2} = f_j - 2hf'_j + 2h^2f''_j - \frac{8}{6}h^3f^{(3)}_j + \frac{16}{24}h^4f^{(4)}_j - \frac{32}{120}h^5f^{(5)}_j + \mathcal{O}(h^6) \quad (1.2)$$

$$f_{j-1} = f_j - hf'_j + \frac{1}{2}h^2f''_j - \frac{1}{6}h^3f^{(3)}_j + \frac{1}{24}h^4f^{(4)}_j - \frac{1}{120}h^5f^{(5)}_j + \mathcal{O}(h^6) \quad (1.3)$$

$$f_{j+1} = f_j + hf'_j + \frac{1}{2}h^2f''_j + \frac{1}{6}h^3f^{(3)}_j + \frac{1}{24}h^4f^{(4)}_j + \frac{1}{120}h^5f^{(5)}_j + \mathcal{O}(h^6) \quad (1.4)$$

$$f_{j+2} = f_j + 2hf'_j + 2h^2f''_j + \frac{8}{6}h^3f^{(3)}_j + \frac{16}{24}h^4f^{(4)}_j + \frac{32}{120}h^5f^{(5)}_j + \mathcal{O}(h^6) \quad (1.5)$$

$$f'_j = \frac{f_j - f_{j-1}}{h} + \mathcal{O}(h)$$

Différence finie «rétrograde»

1.4 Différences finies et développements limités

Soit des points de maillage $\{t_j\}$, $j=0,1,2,3,\dots$ équidistants

Soit $f_j=f(t_j)$, $f'_j=df/dt(t_j)$, ...

$$f_{j-2} = f_j - 2hf'_j + 2h^2f''_j - \frac{8}{6}h^3f_j^{(3)} + \frac{16}{24}h^4f_j^{(4)} - \frac{32}{120}h^5f_j^{(5)} + \mathcal{O}(h^6) \quad (1.2)$$

$$f_{j-1} = f_j - hf'_j + \frac{1}{2}h^2f''_j - \frac{1}{6}h^3f_j^{(3)} + \frac{1}{24}h^4f_j^{(4)} - \frac{1}{120}h^5f_j^{(5)} + \mathcal{O}(h^6) \quad (1.3)$$

$$f_{j+1} = f_j + hf'_j + \frac{1}{2}h^2f''_j + \frac{1}{6}h^3f_j^{(3)} + \frac{1}{24}h^4f_j^{(4)} + \frac{1}{120}h^5f_j^{(5)} + \mathcal{O}(h^6) \quad (1.4)$$

$$f_{j+2} = f_j + 2hf'_j + 2h^2f''_j + \frac{8}{6}h^3f_j^{(3)} + \frac{16}{24}h^4f_j^{(4)} + \frac{32}{120}h^5f_j^{(5)} + \mathcal{O}(h^6) \quad (1.5)$$

$$f'_j = \frac{f_j - f_{j-1}}{h} + \mathcal{O}(h)$$

Différence finie «rétrograde»

$$f'_j = \frac{f_{j+1} - f_j}{h} + \mathcal{O}(h)$$

Différence finie «progressive»

1.4 Différences finies et développements limités

Soit des points de maillage $\{t_j\}$, $j=0,1,2,3,\dots$ équidistants

Soit $f_j=f(t_j)$, $f'_j=df/dt(t_j)$, ...

$$f_{j-2} = f_j - 2hf'_j + 2h^2f''_j - \frac{8}{6}h^3f_j^{(3)} + \frac{16}{24}h^4f_j^{(4)} - \frac{32}{120}h^5f_j^{(5)} + \mathcal{O}(h^6) \quad (1.2)$$

$$f_{j-1} = f_j - hf'_j + \frac{1}{2}h^2f''_j - \frac{1}{6}h^3f_j^{(3)} + \frac{1}{24}h^4f_j^{(4)} - \frac{1}{120}h^5f_j^{(5)} + \mathcal{O}(h^6) \quad (1.3)$$

$$f_{j+1} = f_j + hf'_j + \frac{1}{2}h^2f''_j + \frac{1}{6}h^3f_j^{(3)} + \frac{1}{24}h^4f_j^{(4)} + \frac{1}{120}h^5f_j^{(5)} + \mathcal{O}(h^6) \quad (1.4)$$

$$f_{j+2} = f_j + 2hf'_j + 2h^2f''_j + \frac{8}{6}h^3f_j^{(3)} + \frac{16}{24}h^4f_j^{(4)} + \frac{32}{120}h^5f_j^{(5)} + \mathcal{O}(h^6) \quad (1.5)$$

$$\boxed{\phantom{f_{j+1}}} - \boxed{\phantom{f_{j-1}}} \Rightarrow \boxed{f'_j = \frac{f_{j+1} - f_{j-1}}{2h} + \mathcal{O}(h^2)} \quad \text{Différence finie centrée}$$

1.4 Différences finies et développements limités

Soit des points de maillage $\{t_j\}$, $j=0,1,2,3,\dots$ équidistants

Soit $f_j=f(t_j)$, $f'_j=df/dt(t_j)$, ...

$$f_{j-2} = f_j - 2hf'_j + 2h^2f''_j - \frac{8}{6}h^3f_j^{(3)} + \frac{16}{24}h^4f_j^{(4)} - \frac{32}{120}h^5f_j^{(5)} + \mathcal{O}(h^6) \quad (1.2)$$

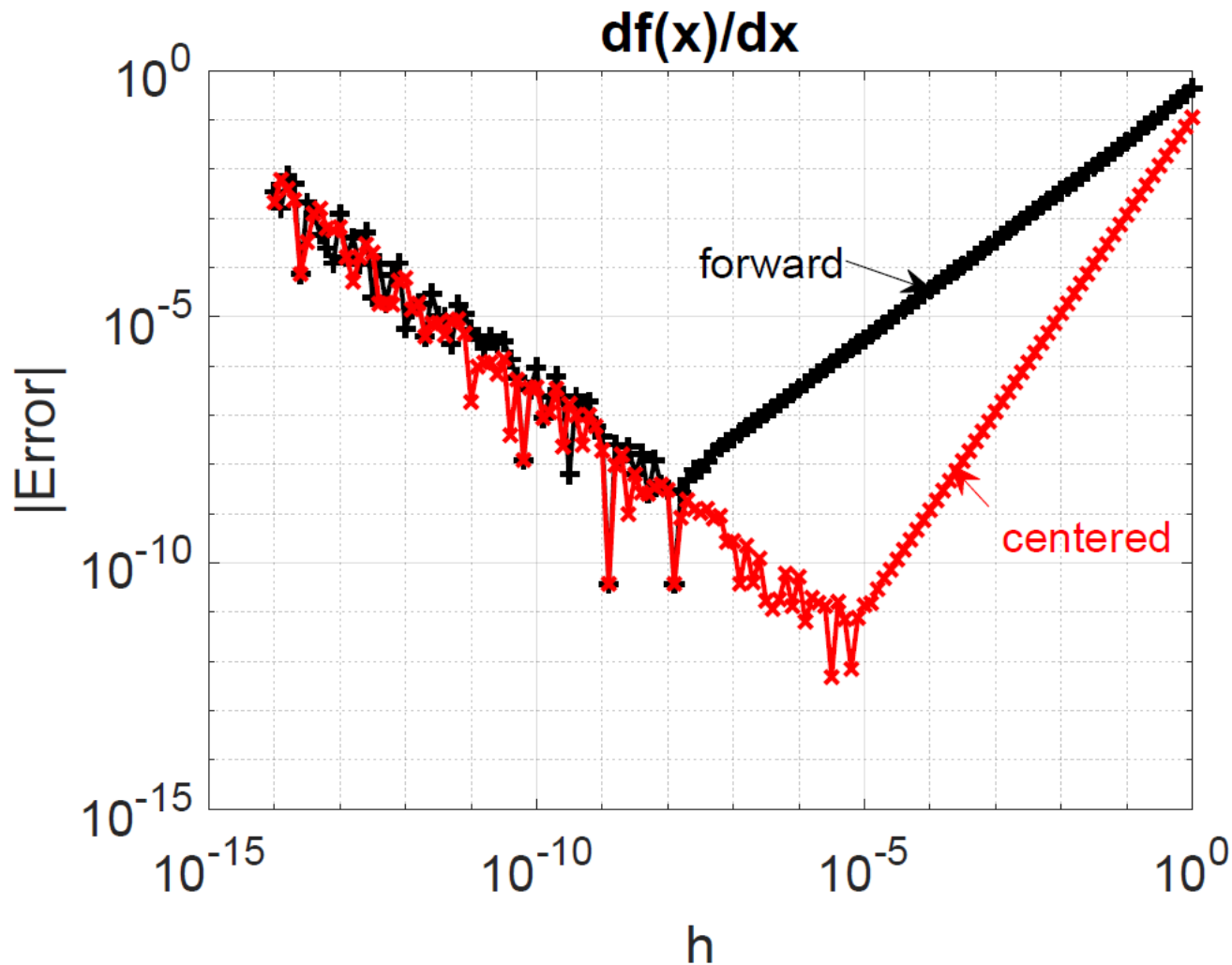
$$f_{j-1} = f_j - hf'_j + \frac{1}{2}h^2f''_j - \frac{1}{6}h^3f_j^{(3)} + \frac{1}{24}h^4f_j^{(4)} - \frac{1}{120}h^5f_j^{(5)} + \mathcal{O}(h^6) \quad (1.3)$$

$$f_{j+1} = f_j + hf'_j + \frac{1}{2}h^2f''_j + \frac{1}{6}h^3f_j^{(3)} + \frac{1}{24}h^4f_j^{(4)} + \frac{1}{120}h^5f_j^{(5)} + \mathcal{O}(h^6) \quad (1.4)$$

$$f_{j+2} = f_j + 2hf'_j + 2h^2f''_j + \frac{8}{6}h^3f_j^{(3)} + \frac{16}{24}h^4f_j^{(4)} + \frac{32}{120}h^5f_j^{(5)} + \mathcal{O}(h^6) \quad (1.5)$$

$$\boxed{\phantom{f_{j-1}}} + \boxed{\phantom{f_{j+1}}} \Rightarrow \boxed{f''_j = \frac{f_{j-1} - 2f_j + f_{j+1}}{h^2} + \mathcal{O}(h^2)}$$

Différence finie centrée



- Ordre de convergence supérieur pour les différences finies ***centrées***

2 Evolution temporelle

■ 2.1 Désintégrations

□ Réalité probabiliste

- Simulation statistique cf plus loin, Section 2.1.3

□ Modèle continu:

$$\frac{dN}{dt} = -\gamma N, \quad N(0) = N_0$$

□ 2.1.1 Schéma d'Euler explicite

Développement limité:

$$N(t + \Delta t) = N(t) + \frac{dN}{dt}(t)\Delta t + O(\Delta t)^2$$

Discrétiser $(t_n, N_n = N(t_n))$,
négliger Δt^2

$$N_{n+1} = N_n - \gamma N_n \Delta t$$

Schéma d'Euler explicite. Désintégration

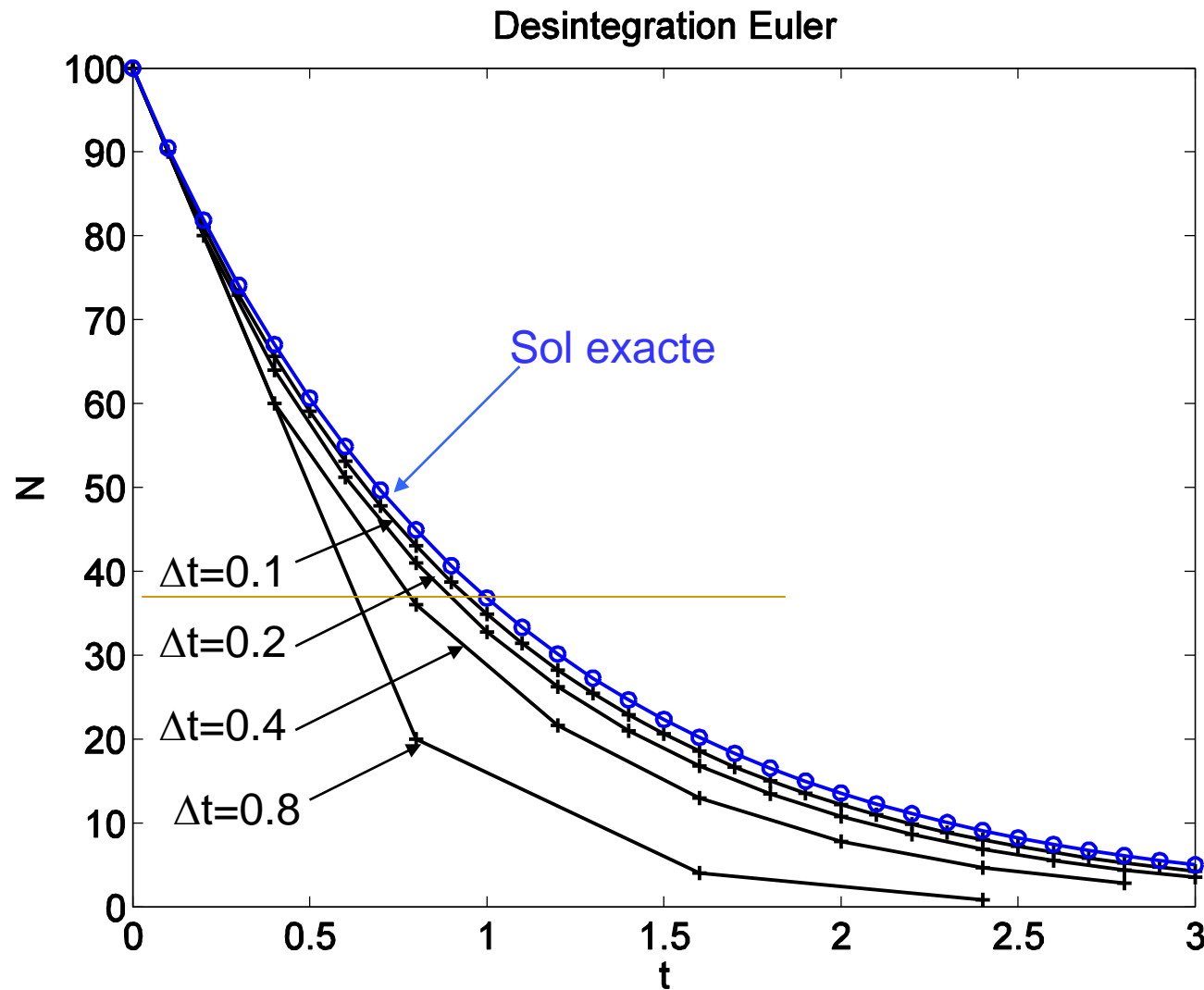


Fig.2

Schéma d'Euler explicite. Convergence

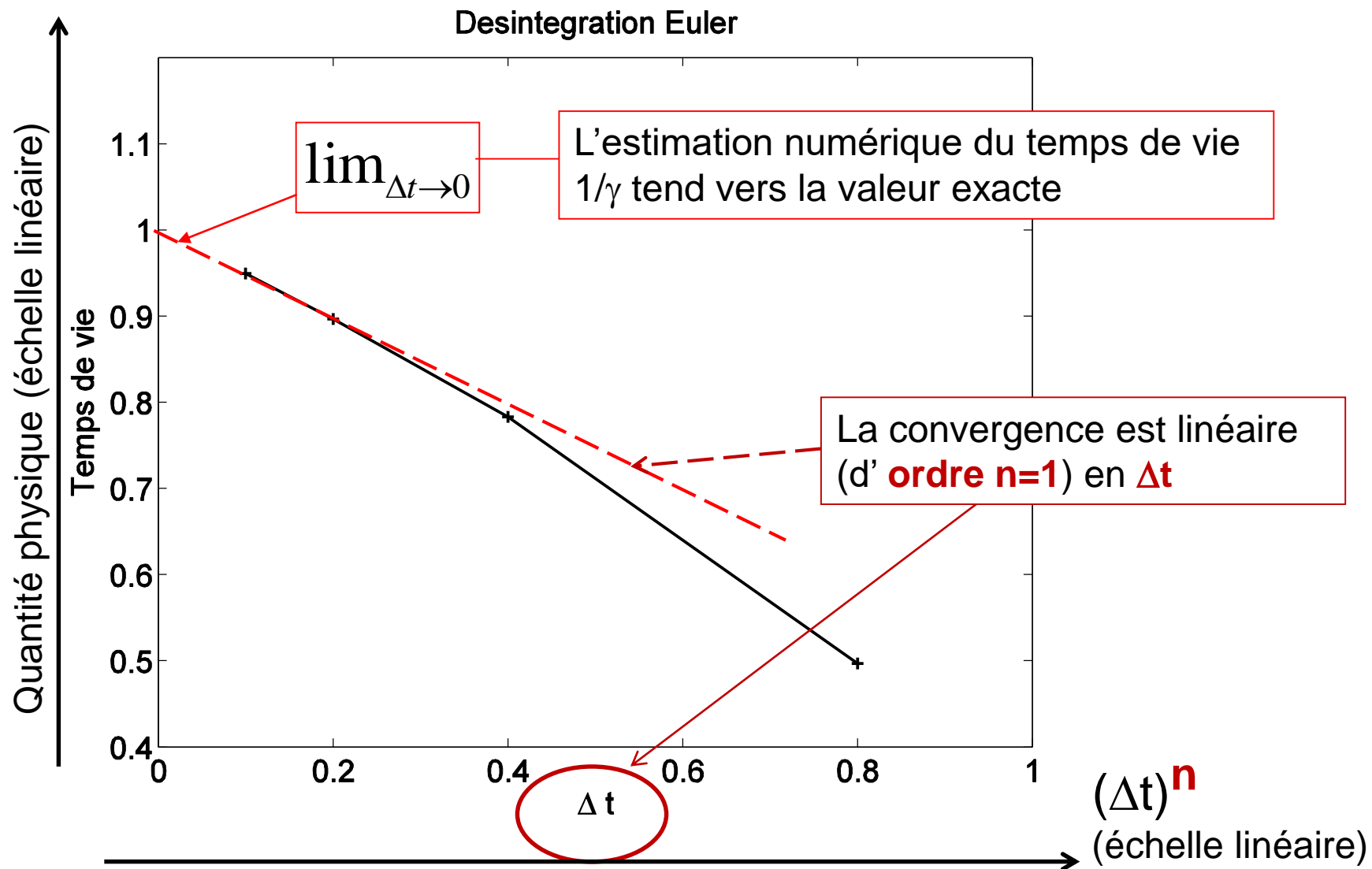


Schéma d'Euler explicite. Convergence

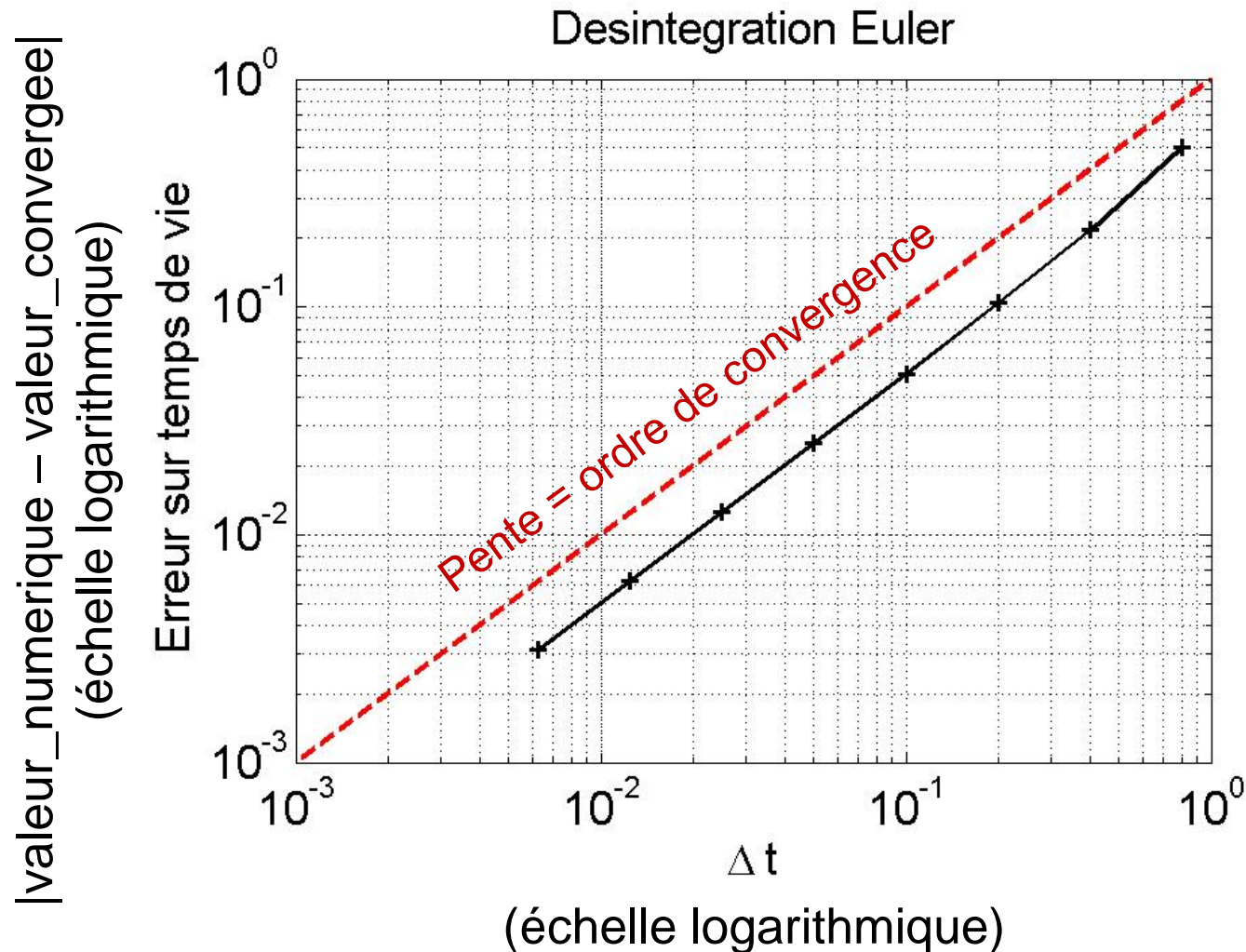


Schéma d'Euler explicite

Physique, Stabilité et Convergence

- On constate que
 - Si on prend Δt trop grand, la solution numérique oscille en changeant de signe! Donc on la rejette comme étant **non physique**
 - Si on prend Δt encore plus grand, la solution numérique oscille avec une amplitude exponentiellement croissante; le schéma numérique d'Euler est alors **instable**
 - Si on prend des Δt de plus en plus petits, la solution tend vers la solution analytique: on a **convergence** numérique

Schéma d'Euler explicite (résumé)

- $\frac{dy}{dt} = f(y, t)$

$$\{t_n\}, n=0,1,2,3,\dots$$

$$\{y_n\}, n=0,1,2,3,\dots \quad y_n = y(t_n)$$

- $y_{n+1} = y_n + f(y_n, t_n)\Delta t$

- Cas de la désintégration:

- $y \rightarrow N; f(y, t) = f(N, t) = -\gamma N$

Euler explicite (2.1)

$$\frac{y_{n+1} - y_n}{\Delta t} = f(y_n, t_n) + O(\Delta t)$$

Euler implicite (2.5)

$$\frac{y_{n+1} - y_n}{\Delta t} = f(y_{n+1}, t_{n+1}) + O(\Delta t)$$

$$y_{n+1} = y_n + f(y_{n+1}, t_{n+1}) \Delta t + O(\Delta t)^2 \quad (*)$$

Résoudre cette équation (*) par itérations («point fixe»)

$$k=0: \quad y_{n+1}^{(k=0)} = y_n$$

$$k \rightarrow k+1 \quad y_{n+1}^{(k+1)} = y_n + f(y_{n+1}^{(k)}, t_{n+1}) \Delta t$$

Arrêter les itérations lorsque l'erreur sur la résolution de (*) est inférieure à une tolérance spécifiée, voir Notes de Cours Eq.(2.68)

Euler semi-implicite (2.6)

$$\frac{y_{n+1} - y_n}{\Delta t} = \alpha f(y_n, t_n) + (1 - \alpha) f(y_{n+1}, t_{n+1})$$

$$y_{n+1} = y_n + [\alpha f(y_n, t_n) + (1 - \alpha) f(y_{n+1}, t_{n+1})] \Delta t$$

Résoudre cette équation par itérations («point fixe»)

k=0: $y_{n+1}^{(k=0)} = y_n$

$$y_{n+1}^{(k+1)} = y_n + [\alpha f(y_n, t_n) + (1 - \alpha) f(y_{n+1}^{(k)}, t_{n+1})] \Delta t$$

k → k+1

$$d = |y_{n+1}^{(k+1)} - y_n - [\alpha f(y_n, t_n) + (1 - \alpha) f(y_{n+1}^{(k+1)}, t_{n+1})] \Delta t|$$

Arrêter les itérations lorsque l'erreur d est inférieure à une tolérance spécifiée ε

Systèmes d'équations couplées

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} y^{(1)} \\ y^{(2)} \\ \dots \\ y^{(N_f)} \end{pmatrix} (t) = \begin{pmatrix} f^{(1)}(y^{(1)}, y^{(2)}, \dots, y^{(N_f)}, t) \\ f^{(2)}(y^{(1)}, y^{(2)}, \dots, y^{(N_f)}, t) \\ \dots \\ f^{(N_f)}(y^{(1)}, y^{(2)}, \dots, y^{(N_f)}, t) \end{pmatrix}$$

$$\boxed{\frac{d}{dt} \underline{\mathbf{y}}(t) = \underline{\mathbf{f}}(\underline{\mathbf{y}}, t)}$$

- Eqs du 2^e ordre, p.ex. Newton: $\frac{d^2 \vec{x}}{dt^2} = \frac{1}{m} \vec{F}(\vec{x}, \vec{v}, t)$

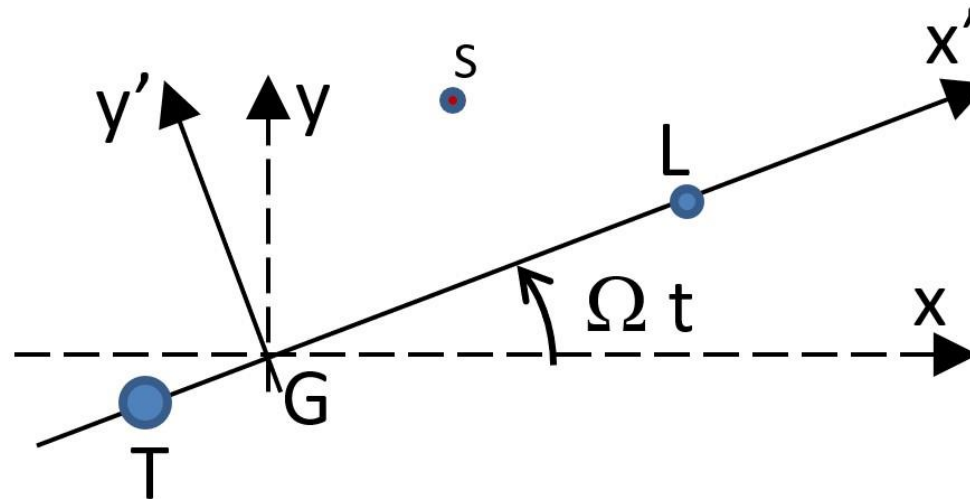
$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \\ v_x \\ v_y \\ v_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} v_x \\ v_y \\ v_z \\ F_x/m \\ F_y/m \\ F_z/m \end{pmatrix}$$

Exercice 1: Entre la Terre et la Lune

- Schémas d'Euler explicite, implicite, semi-implicite
- Programmer le schéma semi implicite, avec un paramètre alpha
 - $\alpha = 1 \rightarrow$ explicite
 - $\alpha = 0.5 \rightarrow$ semi — implicite,
 - $\alpha = 0 \rightarrow$ implicite
- Convergence numérique
- Vérification du théorème de l'énergie mécanique



Exercice 1 – quelques détails



- Système Terre-Lune en rotation (uniforme par simplification)
- Mouvement du satellite, $m_S \ll m_T, m_L \rightarrow$ problème à trois corps «réduit»
- Dans le référentiel \mathcal{R}' **en rotation** avec le système Terre-Lune
- \rightarrow Forces d'inertie et de Coriolis à considérer
- Satellite placé initialement au point d'équigravité
- Crash-test: le satellite va-t-il s'écraser (A) sur la terre? (B) sur la lune? (C) ni sur la terre ni sur la lune.

Oscillateur harmonique, particule dans champ B, effet Magnus, force de Coriolis: même structure mathématique

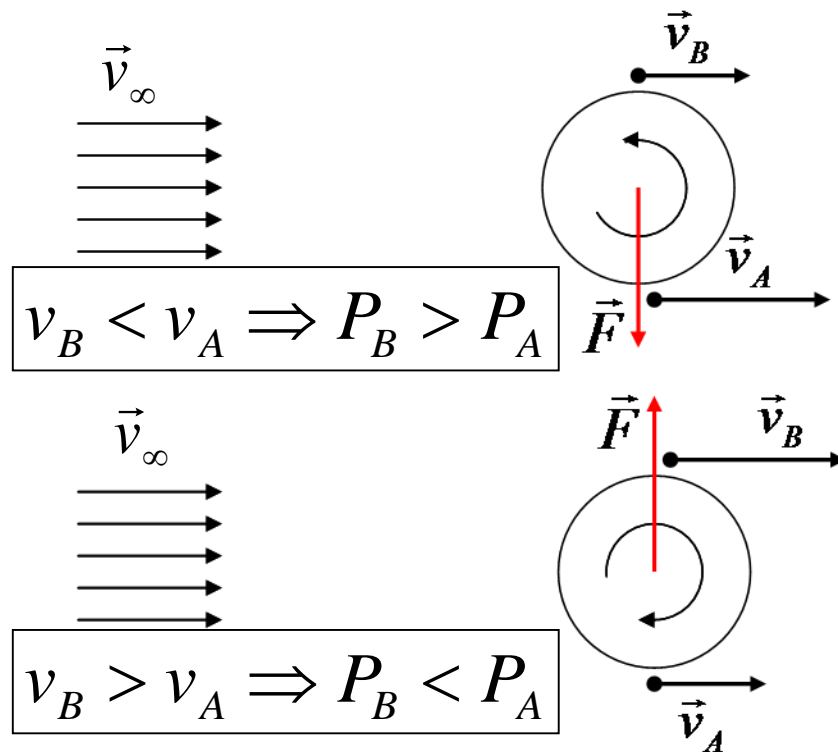
$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} x \\ v \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -\omega_0^2 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ v \end{pmatrix} \quad \omega_0 = \sqrt{\frac{k}{m}}$$

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} v_x \\ v_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \Omega \\ -\Omega & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_x \\ v_y \end{pmatrix}$$

- Lorentz: $\vec{F} = q\vec{v} \times \vec{B}$ $\Omega = \frac{qB}{m}$
- Effet Magnus: $\vec{F} = -\mu R^3 \rho \vec{v} \times \vec{\omega}$ $\Omega = -\frac{\mu R^3 \rho \omega}{m}$
- Coriolis: $\vec{F} = -2m \vec{\Omega} \times \vec{v}'$ $\Omega = \Omega_{R' \rightarrow R}$

Force de portance, effet Magnus

■ Expériences



■ Eq. Bernouilli

$$\frac{1}{2} \rho v^2 + P = \text{const}$$

(le long d'une ligne de courant)

■ Formule semi-empirique

$$\vec{F}_p = \rho \mu R^3 \vec{v}_\infty \times \vec{\omega}$$

(dans le référentiel de l'obstacle)

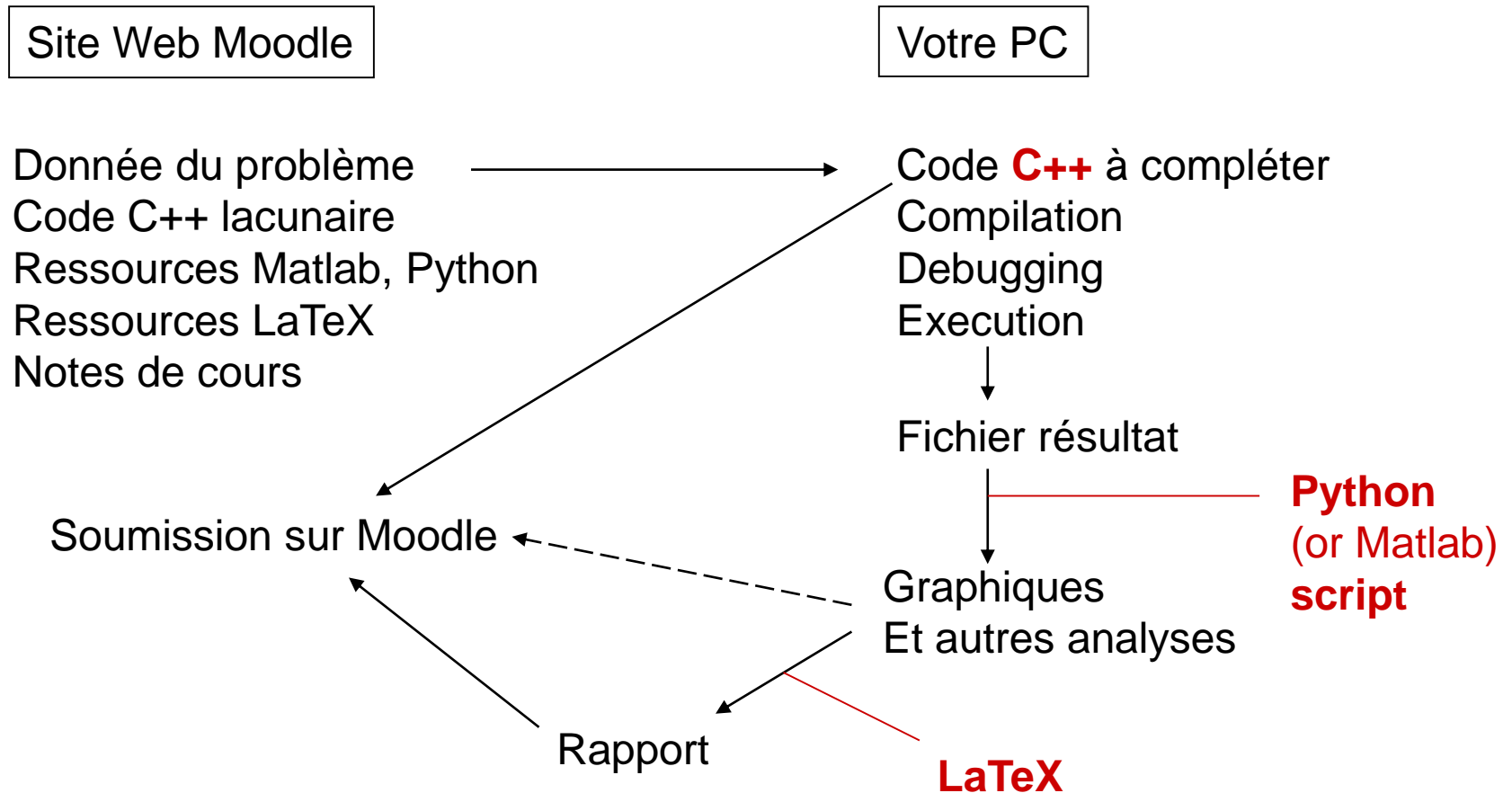
$$\vec{F}_p = \rho \mu R^3 \vec{\omega} \times \vec{v}$$

(dans le référentiel du sol)

Coriolis

■ Expériences

Fonctionnement des Exercices



Règles de fonctionnement des exercices

- **Travail en duo. Formation des paires:**
 - <https://moodle.epfl.ch/mod/choicegroup/view.php?id=1191333>
 - ~5 paires → 1 groupe, pour 1 assistant
 - CHACUN des 2 étudiants programme, débogue, exécute, etc
 - 1 rapport pour 2 étudiants
- Votre rapport est **personnel, il a deux auteurs**. Le plagiat est considéré à l'EPFL comme une faute grave.
- Présence obligatoire. En cas d'absence: **e-mail à votre assistant**
- Au moins une fois par exercice, **montrez votre code et son fonctionnement à votre assistant (dialogue)**
- **5pts (sur 50) de participation**

Soit N_j séances pour l'exercice no.j ($N_j=2$ ou 3).

Note finale = moyenne pondérée des notes des exercices

$$\sum_{j=1..n_{\text{exos}}} \text{note}_j * N_j / \sum_{j=1..n_{\text{exos}}} N_j$$

Répartition dans les salles d'exercices

TODO

- BC 02: Erol, Guillaume, Leo
- BC 03: Micol, Lili, Thierry
- BC 04: Nicole, Brenno, Felix
- BC 07-08: Cosmas, Fabien, Ibrahim, Michele, Baruch, Mack

La liste par assistant et par salle se trouve ici:

[TODOhttps://moodle.epfl.ch/mod/resource/view.php?id=910458](https://moodle.epfl.ch/mod/resource/view.php?id=910458)

La liste triée alphabétiquement par nom étudiant est ici:

[TODOhttps://moodle.epfl.ch/mod/resource/view.php?id=910459](https://moodle.epfl.ch/mod/resource/view.php?id=910459)

Accès aux machines virtuelles

- Depuis un des postes de BC07-08:
 - Log in (username, password EPFL), choisir **SB-IPHYS-UBU**
- Depuis votre PC/laptop:
 - Aller sur **<https://vdi.epfl.ch>** depuis un browser (Chrome, Firefox,...)
 - Sélectionner VMware Horizon HTML Access
 - Log in (username, password EPFL), choisir **SB-IPHYS-UBU**
- **Travailler dans le répertoire ~/Desktop/Myfiles/** et les sous-répertoires que vous créerez (p.ex. .../physnum/ex1/)

Changer le clavier sur les VMs

- Par défaut, le clavier installé sur les VMs est Suisse Romand (QWERTZ). Le clavier English-US (QWERTY) est également préinstallé (bouton Fr/En en haut à droite). Sur les postes de BC07-08, c'est le clavier Suisse Romand qui est physiquement installé.
- Pour ajouter un autre clavier, *une fois votre session ouverte sur la VM*:
- (en haut à gauche) Activities -> taper et sélectionner Region & Langage, puis 'Keyboard', puis sous la fenêtre 'Input Sources' cliquer le bouton '+', sélectionner le type de clavier souhaité (par exemple French) dans le menu déroulant, puis cliquer sur 'Add'.
- L'option devrait s'ajouter comme option du bouton en haut à droite de l'écran de la session. On peut facilement passer d'un type de clavier à l'autre en cliquant sur ce bouton.

LaTeX

- Voir un exemple sur Moodle, dossier ‘Ressources LaTeX’, fichier ‘SqueletteRapport.tex’ (et: aa.pdf, ohmabellefigure.png)
- On recommande d’utiliser la plateforme **Overleaf** qui permet le développement collaboratif à plusieurs utilisateurs (pour ce cours: ne partagez votre projet qu’avec votre partenaire de la paire – et avec votre assistant)
 - <https://fr.overleaf.com/edu/epfl>
- On peut aussi lancer LaTeX depuis la ligne de commande dans un Terminal; taper:
 - latex <nom_du_fichier.tex> ou
 - pdflatex <nom_du_fichier.tex>
- Il existe plusieurs logiciels qui fournissent un interface visuel pour LaTeX : Kile (installé sur les VMs), TeXworks, ...