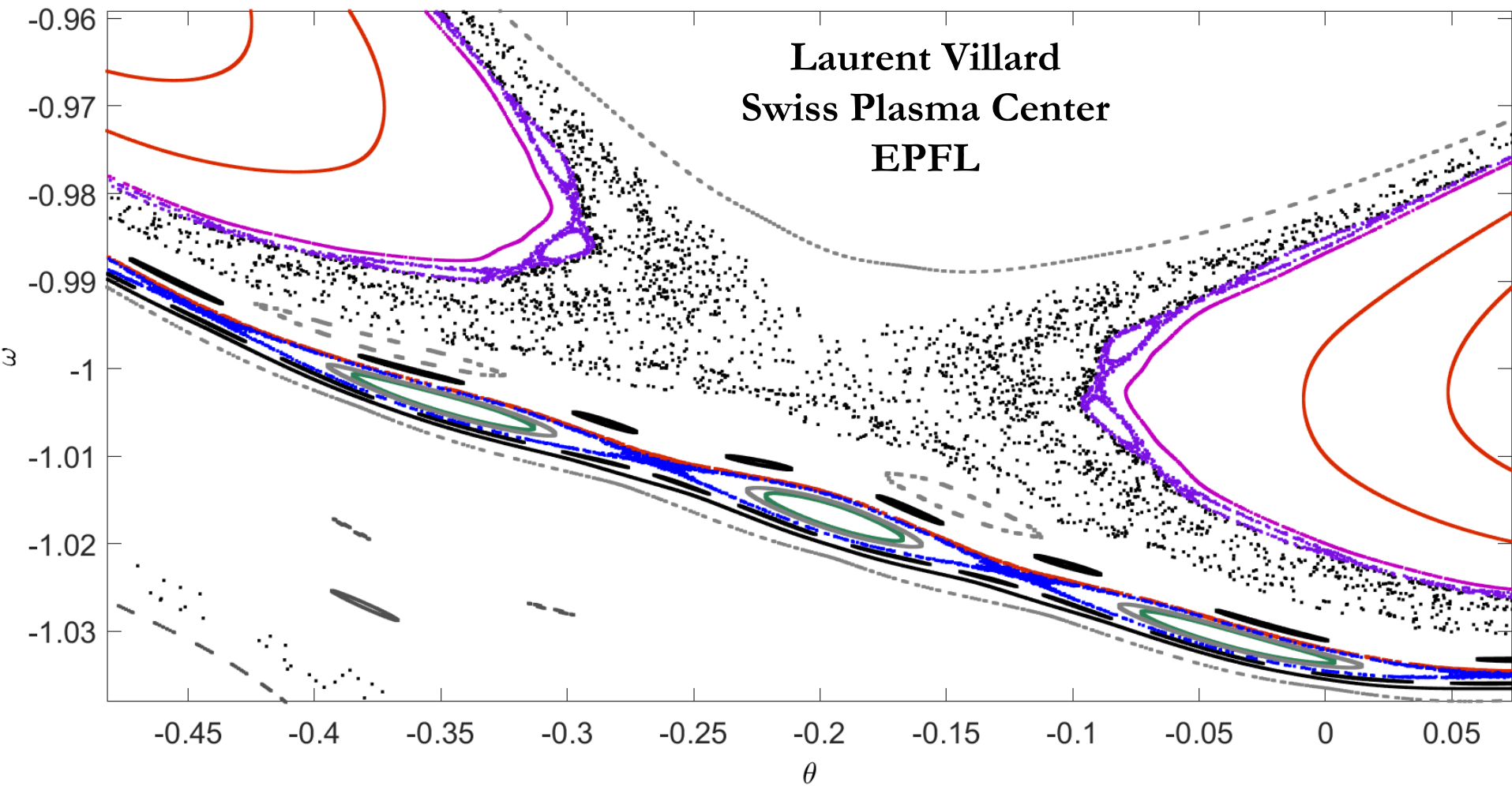


Physique Numérique

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

Accès 24/24, 7/7 à ces salles

Encadrement:

Erol Balkovic, Micol Bassanini, Brenno De Lucca, Paul Devianne, Giovanni Di Giannatale (préparateur), Lili Edes, Cosmas Heiss, Fabien Jeanquartier, Michele Marin, Hamza Meel, Baruch Rofman

(*) *BC07-08 équipée de 74 terminaux*

Ou: Travailler sur votre PC ou Mac

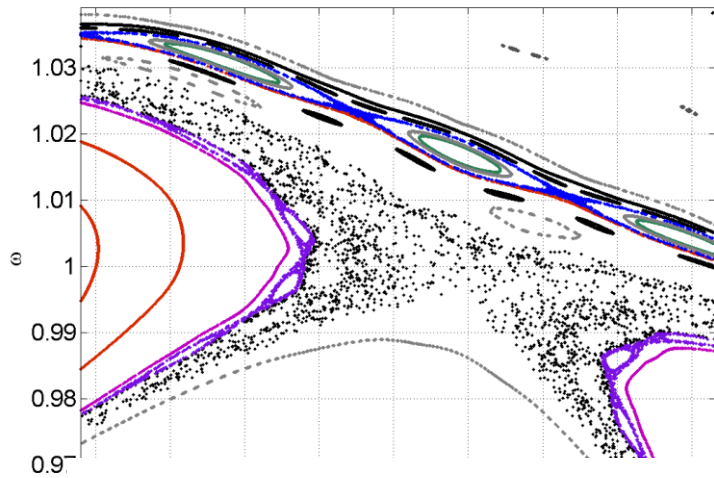
Connexion à un pool de machines virtuelles Linux

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

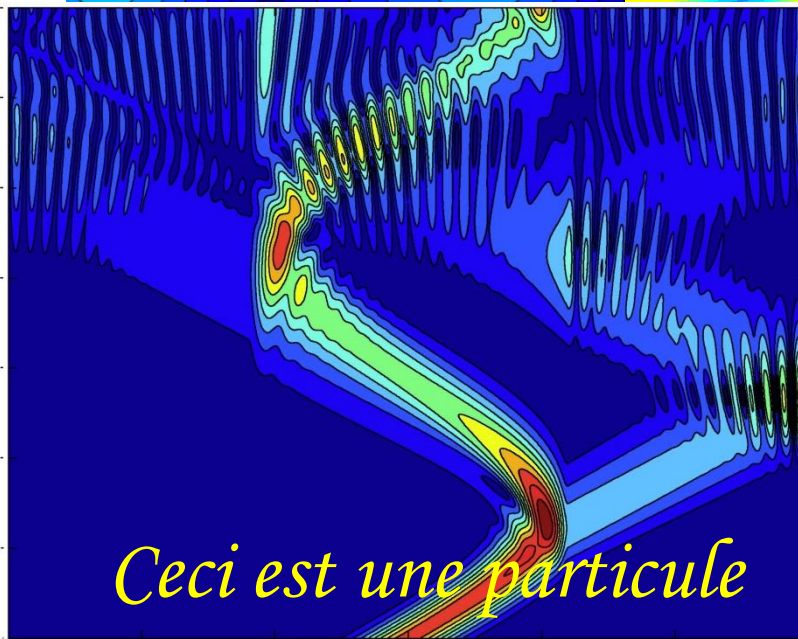
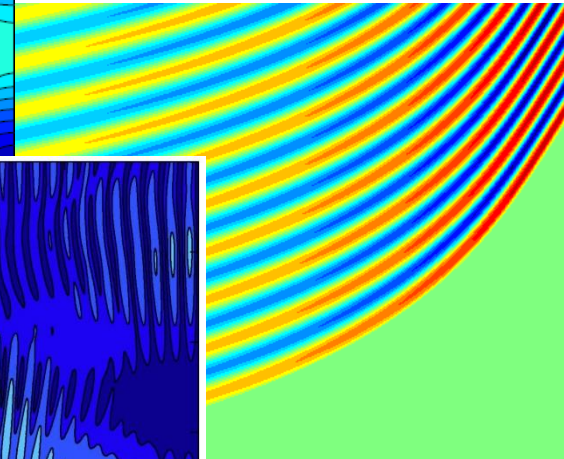
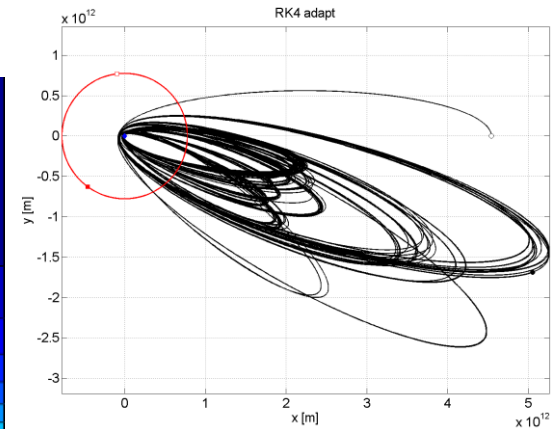
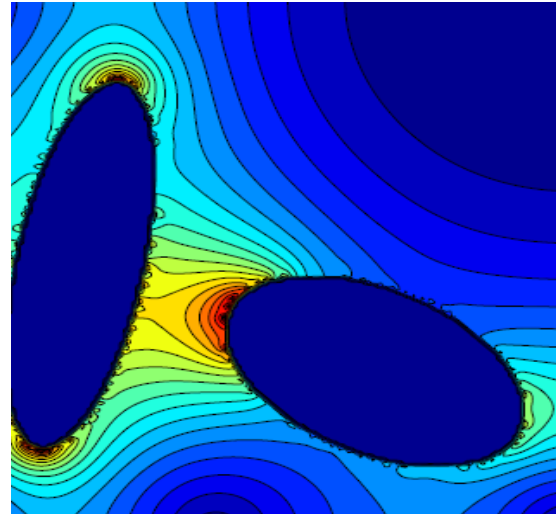
VV Pendule $g/l=1$ $\nu=0$ $\Omega=1$ $A=0.5$



Ceci est un pendule



Ceci est un pendule



Ceci est une particule

Documentation

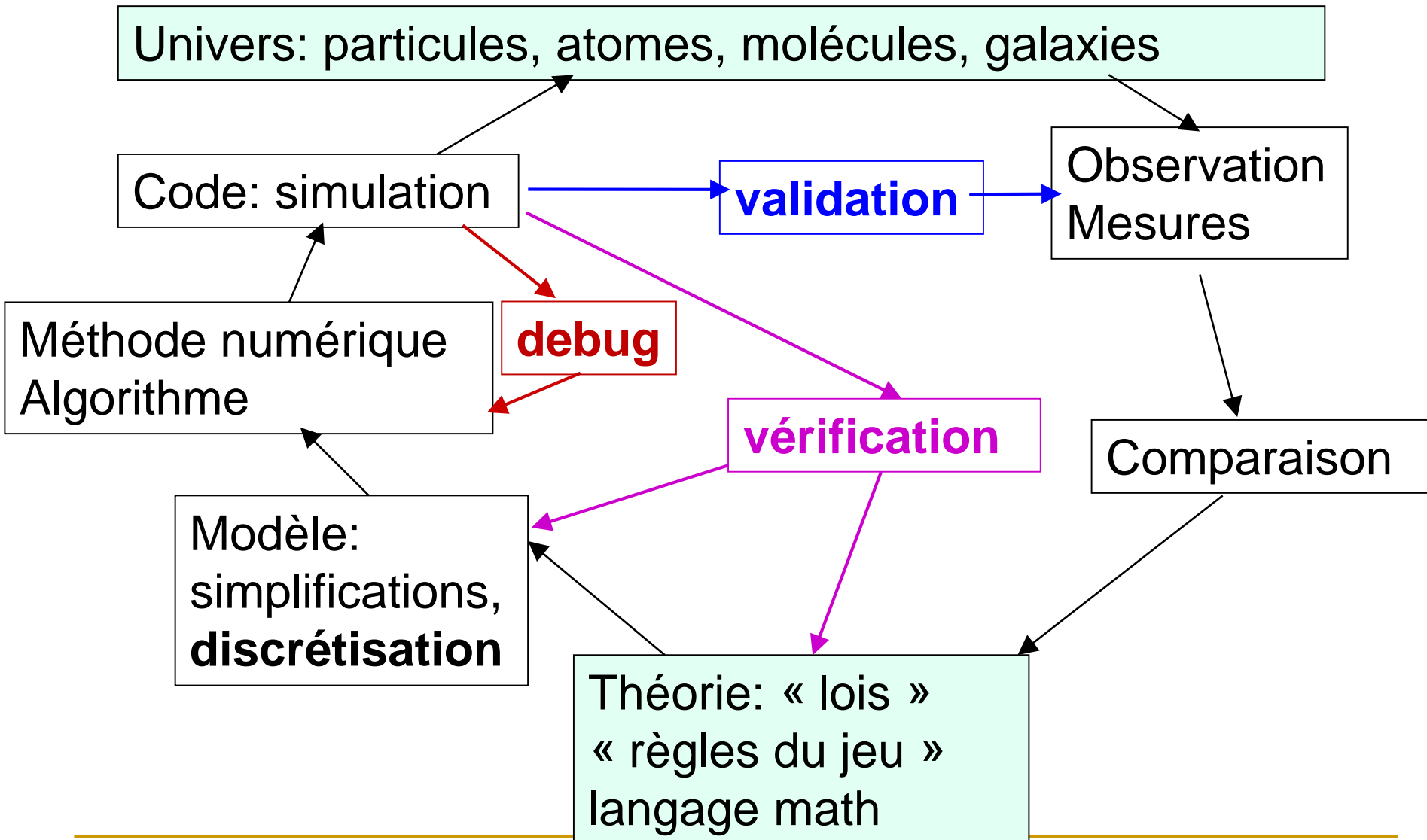
Site web: <http://moodle.epfl.ch/course/view.php?id=287>

- 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



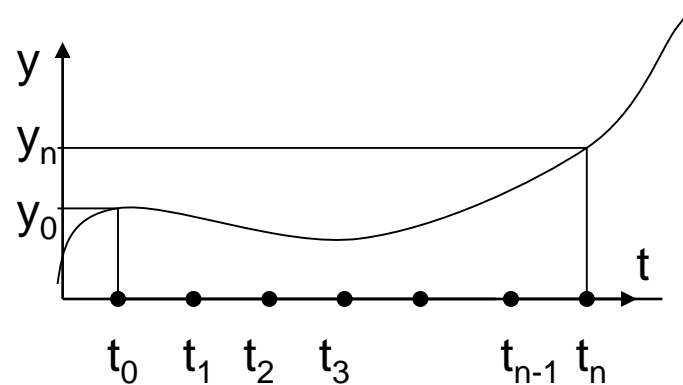
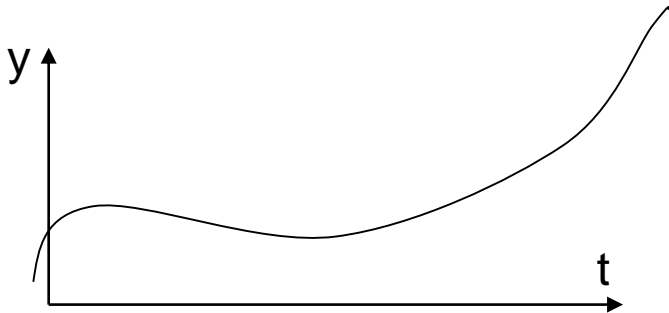
1.2 Discretisation

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

?

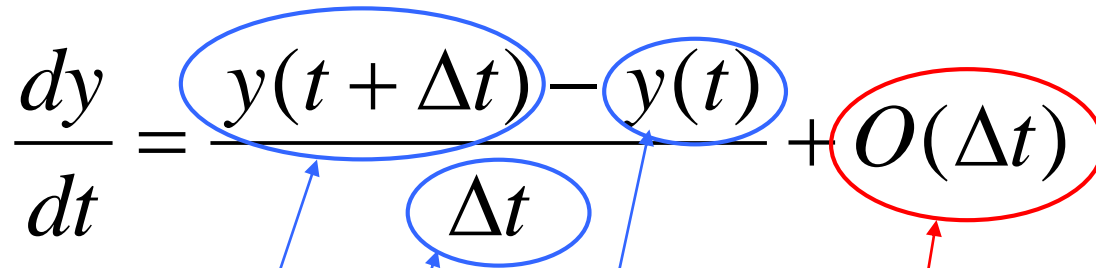
Opérations arithmétiques

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

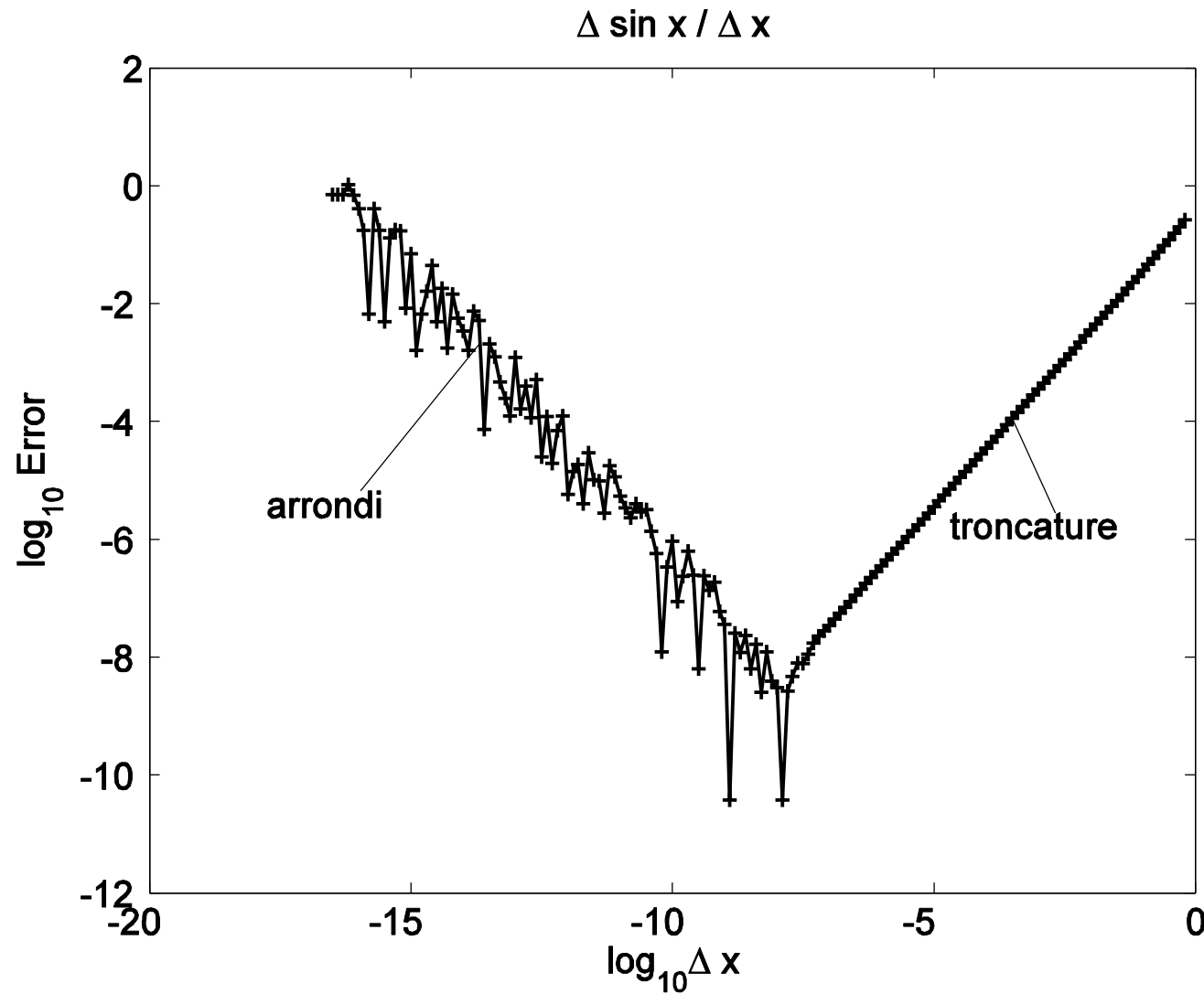


Fig. 1.1

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

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

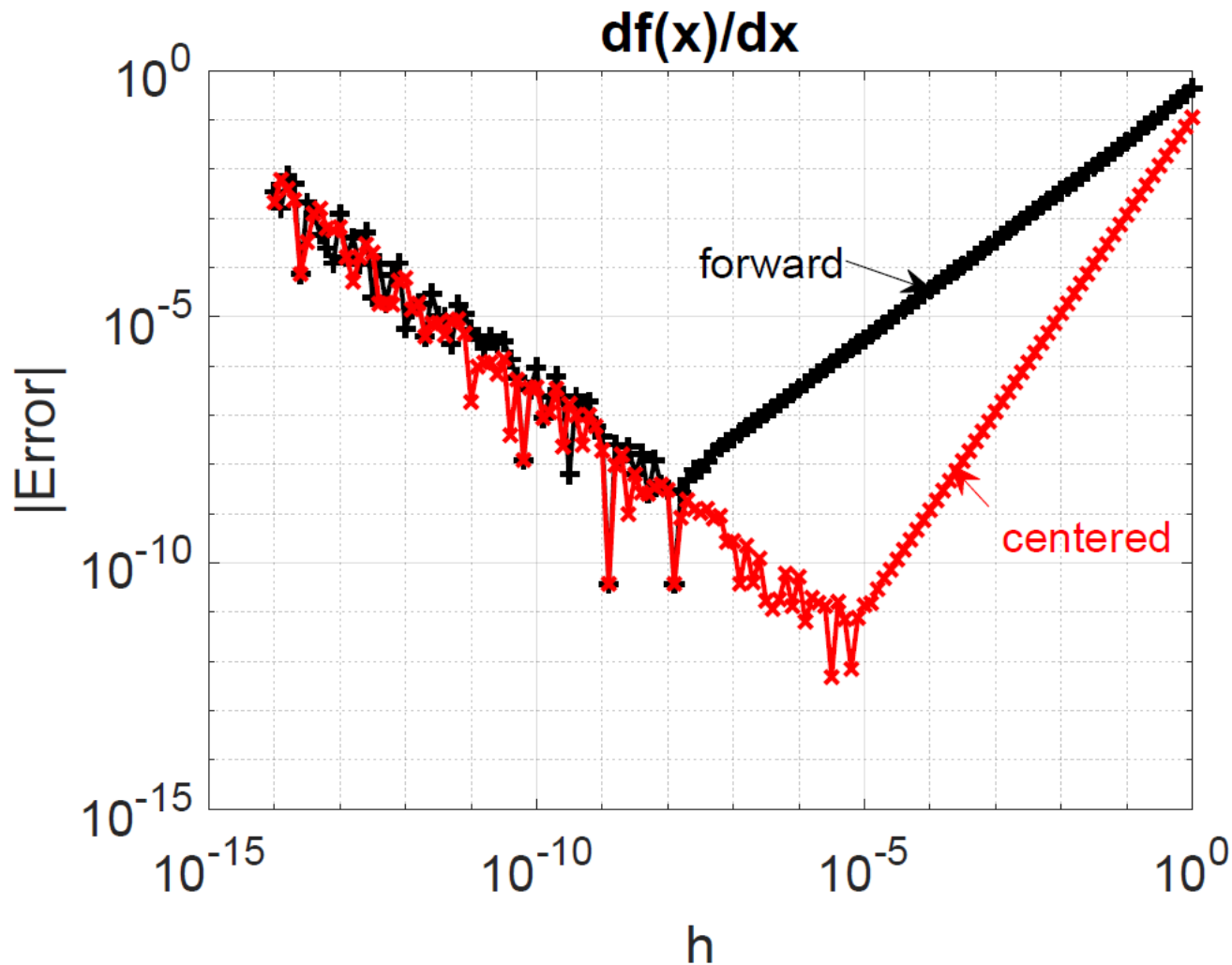
$$f_{j-1} = f_j - hf'_j + \frac{1}{2}h^2f''_j - \frac{1}{6}h^3f_j^{(3)} + \frac{1}{24}h^4f_j^{(4)} - \frac{1}{120}h^5f_j^{(5)} + \mathcal{O}(h^6) \quad (1.3)$$

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

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

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

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

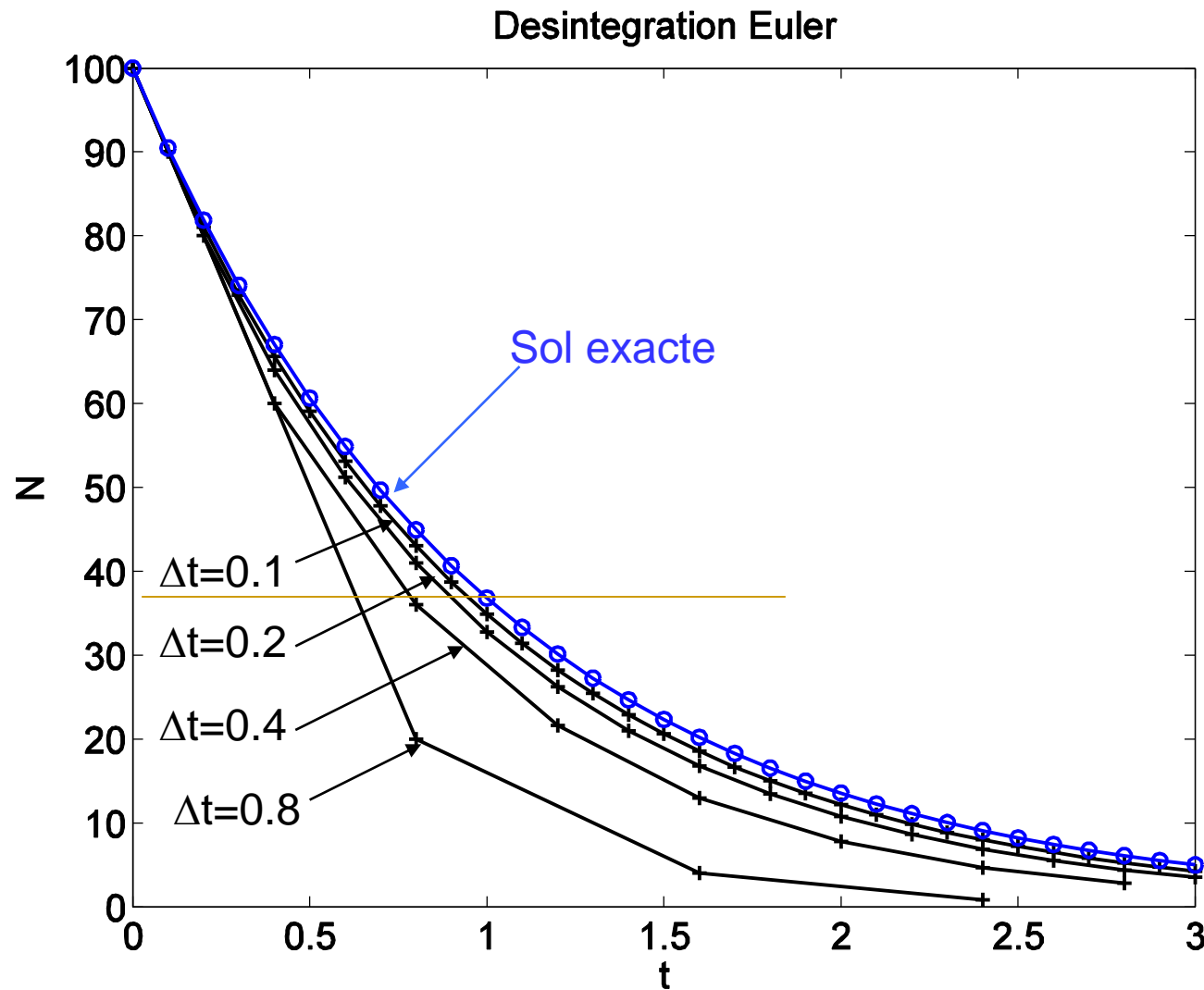


Fig.2

Schéma d'Euler explicite. Convergence

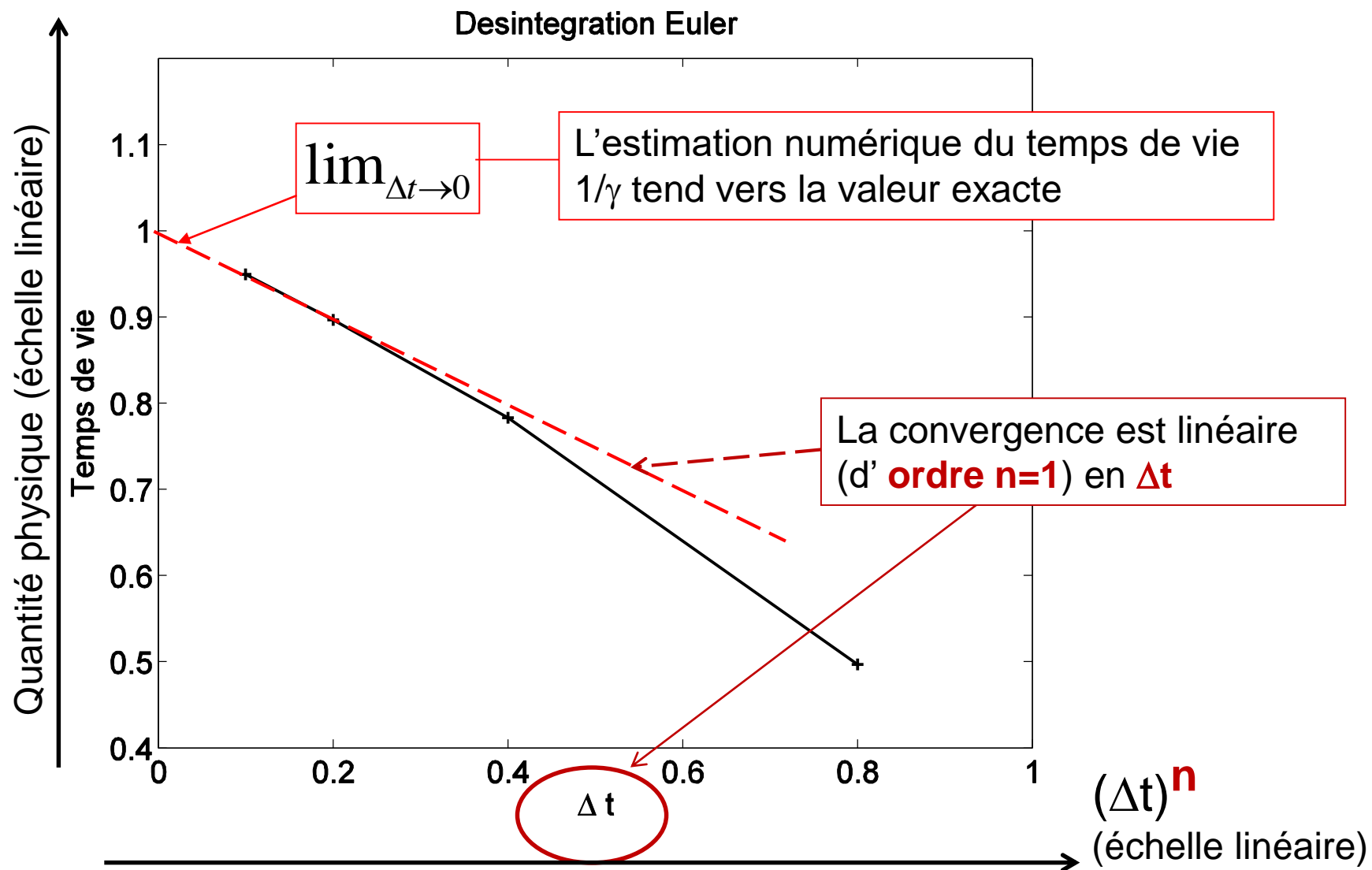


Schéma d'Euler explicite. Convergence

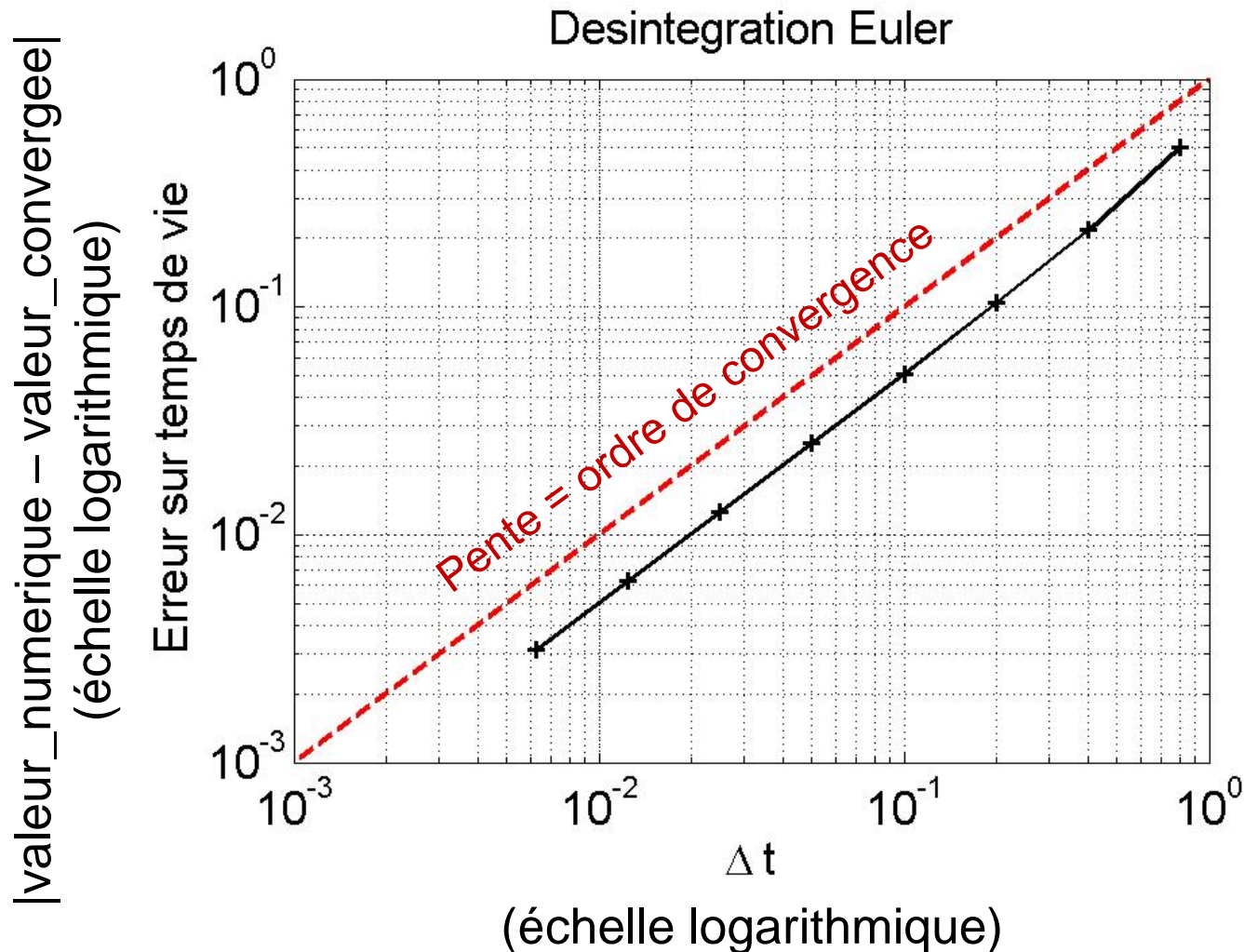


Schéma d'Euler explicite

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

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

Euler implicite (2.3.5)

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

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

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

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

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

Résoudre cette équation par itérations («point fixe»)

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

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

k → k+1

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

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: $\frac{d^2 \vec{x}}{dt^2} = \frac{1}{m} \vec{F}(\vec{x}, \vec{v}, t)$

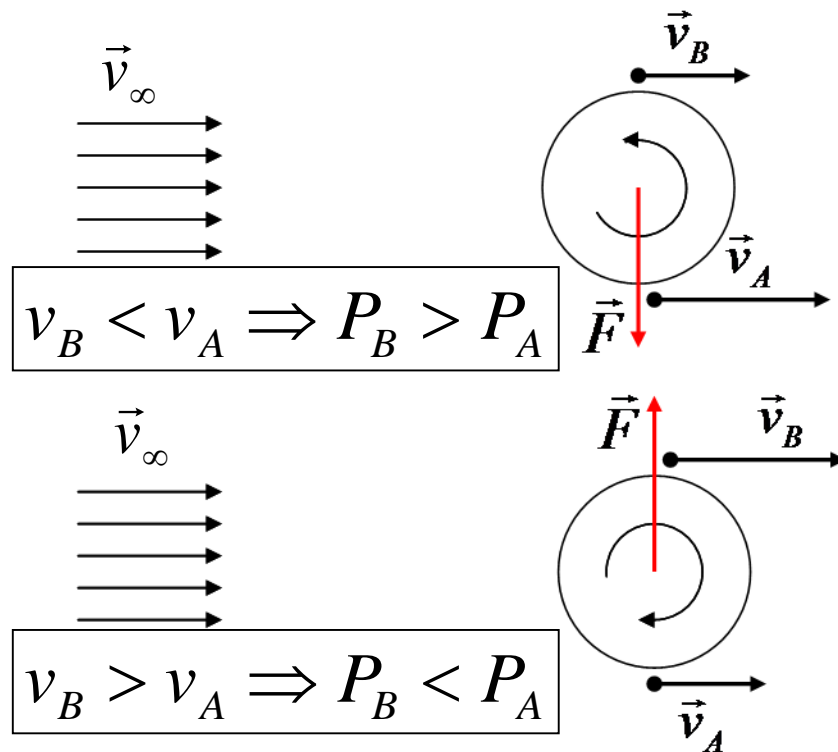
$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \\ v_x \\ v_y \\ v_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} v_x \\ v_y \\ v_z \\ F_x/m \\ F_y/m \\ F_z/m \end{pmatrix}$$

Exercice 1

- Magnus joue au tennis dans la station spatiale
- ... et sur la terre
- Schémas d'Euler explicite, implicite, semi-implicite
- Programmer le schéma semi implicite, avec un paramètre alpha comme ci-dessus.
 $\alpha = 1 \rightarrow$ explicite $\alpha = 0.5 \rightarrow$ semi - implicite,
 $\alpha = 0 \rightarrow$ implicite
- Convergence numérique
- Stabilité numérique
- Vérification du théorème de l'énergie mécanique

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

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

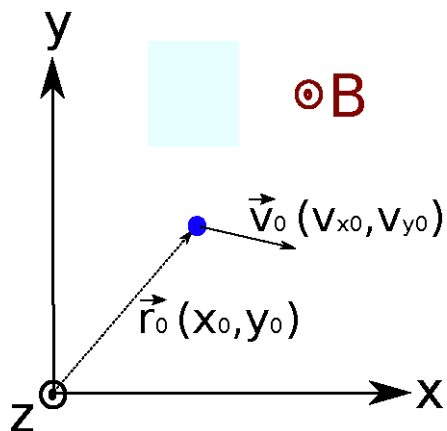
(dans le référentiel de l'obstacle)

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

(dans le référentiel du sol)

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

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

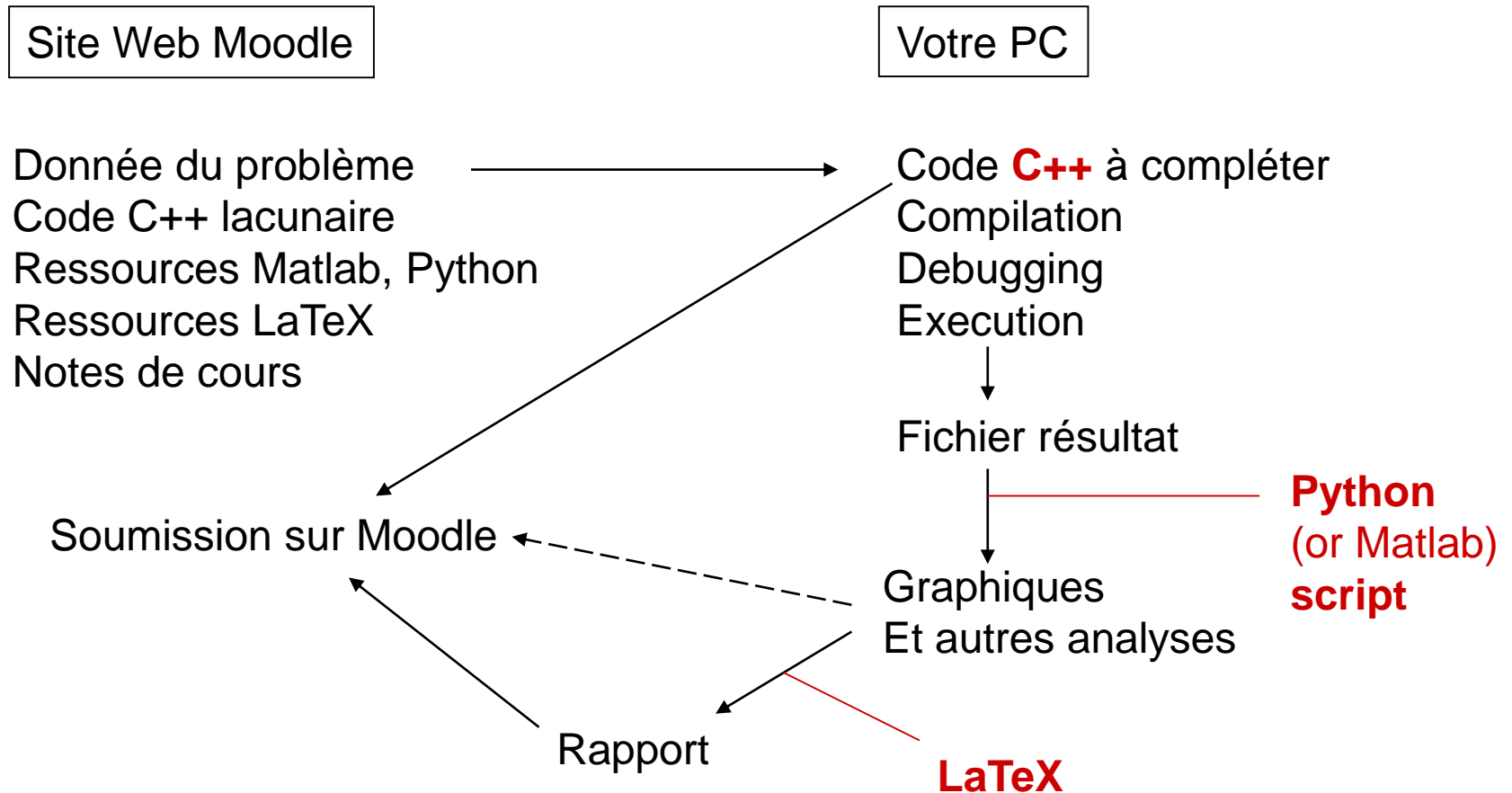


$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} v_x \\ v_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \Omega \\ -\Omega & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_x \\ v_y \end{pmatrix}$$

■ Lorentz: $\vec{F} = q\vec{v} \times \vec{B}$ $\Omega = \frac{qB}{m}$

■ Effet Magnus: $\vec{F} = -\mu R^3 \rho \vec{v} \times \vec{\omega}$ $\Omega = -\frac{\mu R^3 \rho \omega}{m}$

Fonctionnement des Exercices



Règles de fonctionnement des exercices

- **Travail en duo. Formation des paires:**
 - <https://moodle.epfl.ch/mod/choicegroup/view.php?id=957526>
 - ~5 paires → 1 groupe, pour 1 assistant
 - CHACUN des 2 étudiants programme, débuge, exécute, etc
 - 1 rapport pour 2 étudiants
 - Votre rapport est **personnel, il a deux auteurs**. Le plagiat est considéré à l'EPFL et dans ce cours 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**
- N_j (2 ou 3) séances pour l'exercice no.j**
- Note finale = moyenne pondérée des notes des exercices**

$$\sum_{j=2..n_{\text{exos}}} \text{note}_j * N_j / \sum_{j=2..n_{\text{exos}}} N_j$$

Répartition dans les salles d'exercices

- BC 02: Erol, Micol, Paul
- BC 03: Fabien, Hamza, Giovanni
- BC 07-08: Baruch, Brenno, Cosmas, Lili, Michele

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, ...