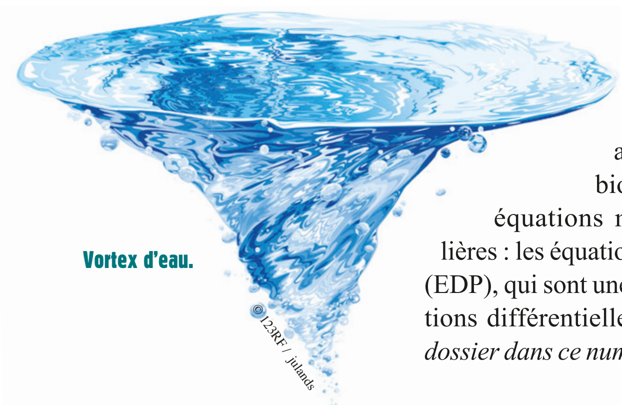
par Pierre Le Barbenchon

Les schémas aux différences finies

La physique, la biologie, la chimie, la mécanique et bien d'autres domaines regorgent de phénomènes qui se prêtent à une modélisation mathématique sous forme d'équations différentielles ou aux dérivées partielles. Il n'est généralement pas possible de résoudre explicitement ces équations. Dès lors, il faut chercher à les approcher…



Vortex d'eau.

©123RF / julands

Pour comprendre et modéliser les phénomènes naturels, aussi bien physiques que biologiques, on utilise des équations mathématiques particulières : les équations aux dérivées partielles (EDP), qui sont une généralisation des équations différentielles ordinaires *[voir notre dossier dans ce numéro]* au cas où la fonction inconnue est à plusieurs variables. On utilise les EDP par exemple pour modéliser les tourbillons présents dans l'air ou dans l'eau, les échanges thermiques, les mouvements électro-statiques, la propagation d'un virus, la relativité générale *[voir* Tangente *198, 2021, et* Tangente *203, 2022]*… Il y en a à profusion, et malheureusement on ne sait pas résoudre « de manière exacte » une grande majorité d'entre elles.

Pire encore, il arrive qu'on ne sache pas démontrer mathématiquement qu'il existe, ou non, des solutions à certaines de ces équations. C'est le cas de celles de Navier–Stokes en trois dimensions, qui décrivent les tourbillons dans les fluides (eau, air…). Physiquement, « on voit bien » les tourbillons se former (donc les solutions existent !) mais on ne sait pas le démontrer proprement. La résolution rigoureuse de ces équations est un problème du prix du millénaire (un prix d'un million de dollars sera remis à quiconque réussira à démontrer mathématiquement l'existence de telles solutions).

Interview

Dans quel domaine de recherche votre thèse s'inscrit-elle ?

Ma thèse s'intitule *Stabilité des schémas aux différences finies avec conditions de bord Lax–Wendroff inverse*. Le domaine des mathématiques dans lequel je travaille est l'analyse numérique. Je suis encadré par Benjamin Boutin et Nicolas Seguin, enseignants-chercheurs à l'université de Rennes-I, au laboratoire de l'Institut de recherche mathématique de Rennes (Irmar). Actuellement, je suis en deuxième année de thèse, après avoir étudié quatre ans à l'École normale supérieure (ENS) de Rennes.

Pourquoi avez-vous choisi ce sujet ?

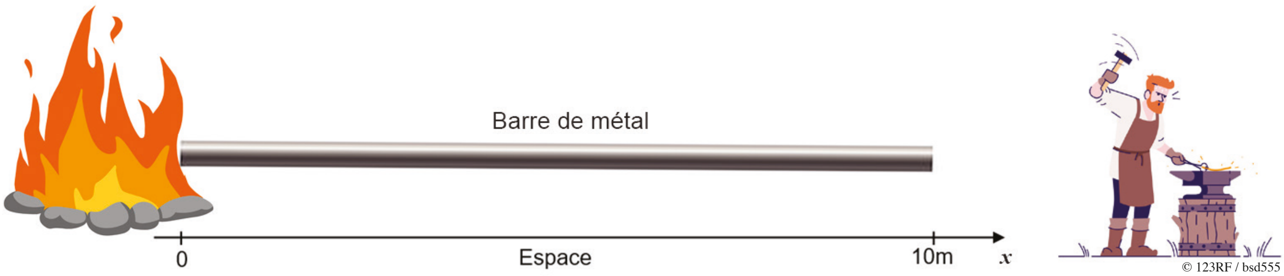
L'affinité aussi bien mathématique qu'humaine avec mes deux directeurs de thèse durant ma scolarité (et notamment pendant mon année de Master 2) a été la principale raison du choix de cette thèse. De plus, l'analyse numérique est un domaine très riche, qui utilise beaucoup de résultats issus d'autres domaines des mathématiques (algèbre linéaire, analyse fonctionnelle, analyse complexe, équations aux dérivées partielles, simulation informatique…). J'apprécie le fait de travailler dans différents domaines des mathématiques : cela me permet de garder une certaine vision d'ensemble.

Comment cette thèse s'insère-t-elle dans vos projets ?

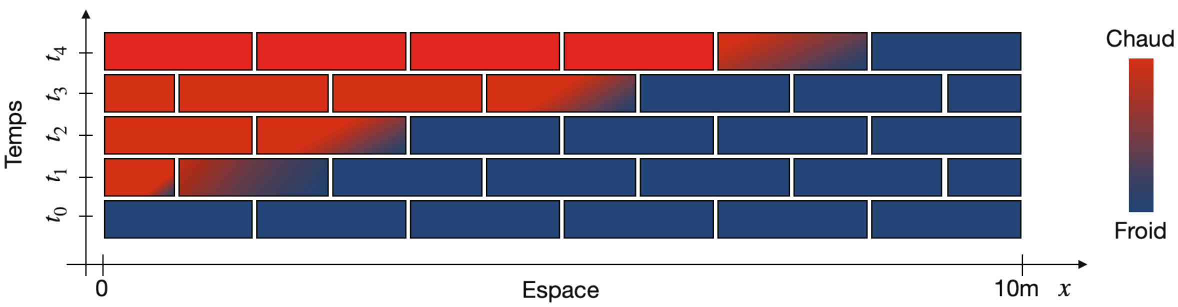
Mon projet à terme est de devenir professeur de mathématiques au lycée ou en classe préparatoire aux grandes écoles. Ainsi, les trois années consacrées à ma thèse m'apportent à la fois du recul sur les mathématiques et une première expérience dans l'enseignement. En effet, pendant mon doctorat, je suis également en charge d'heures d'enseignement à l'ENS Rennes.

+ L'analyse numérique, c'est quoi ?

L'analyse numérique est un domaine des mathématiques qui s'intéresse à approcher des solutions de ces équations que l'on ne sait pas résoudre exactement grâce à des algorithmes numériques et, aujourd'hui, informatiques. Cela permet, notamment dans le domaine de la physique, de pouvoir travailler sur des solutions approchées des équations sans connaître l'expression exacte de ces solutions. On cherche par exemple à déterminer la température d'une barre de métal qui est chauffée par un puissant radiateur à l'une de ses extrémités. Il faut résoudre alors l'*équation de la chaleur*. L'inconnue de notre équation est la température, qui dépend à la fois de l'espace (est-on « loin » ou « proche » du radiateur ?) et du temps (à quel moment fait-on la mesure après avoir allumé le radiateur ?). Si l'on représente la barre de métal comme un segment de dix mètres de long, on a alors une seule dimension d'espace (et, toujours, une dimension de temps).



On dispose de données initiales, acquises par exemple suite à des mesures physiques : la température à tout endroit de la barre de métal au moment où l'on allume le radiateur (l'instant initial t_0) et la chaleur émise par le radiateur à tout instant après que le radiateur a été allumé.
Un *schéma aux différences finies* est une méthode d'analyse numérique qui consiste à approcher la solution de l'équation par strates temporelles. On commence par se donner la température à chaque endroit de la barre de métal à l'instant initial. Ensuite, après un « petit » pas de temps, on met à jour ces températures en fonction des valeurs que l'on avait à l'instant précédent (selon une procédure choisie de telle sorte à ne pas faire trop d'erreurs). Puis on réitère ce procédé. C'est comme si l'on construisait un mur : on commence par une première rangée de briques (représentant l'instant initial), puis on construit une deuxième rangée (représentant l'instant suivant) qui s'appuie sur la première (chaque brique dépend des briques sur lesquelles elle repose), et ainsi de suite. L'espace (x) est donc représenté horizontalement, et le temps (t) verticalement.
Sur le dessin ci-dessous, on voit que pour faire, verticalement, un bord de mur bien droit, il va falloir tailler certaines briques du bord. Pour notre schéma aux différences finies, ce sera pareil : il va falloir se donner des *conditions de bord* adéquates à la donnée au « bord » de notre problème (ici, la température émise par le radiateur à tout instant).
La *méthode Lax–Wendroff inverse* est une façon particulière de tailler les briques du bord.



Un mur bien stable

On a donc obtenu un beau mur qui représente la solution approchée de notre équation, mais il faut vérifier qu'il est similaire au mur représentant la solution exacte de l'équation (qu'*a priori* on ne sait pas construire). Pour cela, on va avoir besoin de la notion de *stabilité*, qui permet de vérifier que la petite approximation que l'on fait quand on met à jour les valeurs ne va pas entraîner une très grosse erreur au bout d'un moment. Il y a des exemples de problèmes qui sont fortement instables, comme les systèmes « chaotiques » que l'on peut rencontrer en étudiant les systèmes dynamiques (lorsqu'on en modifie légèrement les conditions initiales, ils vont donner deux solutions très différentes ; c'est le principe de l'*effet papillon*). Ici, à l'inverse, on souhaite obtenir des schémas aux différences finies qui soient stables afin que la petite erreur que l'on fait en approchant la solution avec nos briques de mur ne conduise pas à des grosses erreurs à la fin. L'objectif de la thèse est de trouver des moyens simples et pratiques de vérifier que le schéma aux différences finies avec certaines conditions de bord soit bien stable.

© 123RF / atm2003

Prenons par exemple l'*équation de transport* $\frac{\partial u}{\partial t}(t,x) = \frac{\partial u}{\partial x}(t,x)$, avec la condition de bord $u(0, x) = f_0(x)$, où u est la fonction inconnue (supposée dérivable par rapport à chacune de ses variables), qui dépend de deux variables (le temps t et l'espace x), $\frac{\partial u}{\partial t}(t,x)$ désigne la dérivée partielle de u par rapport à la variable t, $\frac{\partial u}{\partial x}(t,x)$ désigne la dérivée partielle de u par rapport à la variable x, et f_0 est la condition initiale (supposée connue ou donnée). Comme pour le cas d'une fonction à une seule variable, la quantité $\frac{\partial u}{\partial t}(t,x)$ est définie comme la limite, lorsque le réel h tend vers 0, du taux d'accroissement $\frac{u(t+h,x)-u(t,x)}{h}$.

Autrement dit, l'équation de transport s'interprète en disant que, dans un « petit » pas de temps, on parcourt un « petit » pas de distance et que ces pas sont égaux. La théorie générale des EDP nous permet d'affirmer que, sous des hypothèses « raisonnables », l'équation de transport possède bien une unique solution u pour une fonction f_0 donnée.

Un schéma décentré

Dans un schéma aux différences finies, on veut approcher la solution $u(t, x)$. Pour cela, on discrétise le temps et l'espace par des petits pas Δt et Δx et on cherche à construire successivement des nombres $\mathrm{U}_{n,j}$ (pour des entiers n et j positifs) de façon à approcher les quantités $u(n\Delta t, j\Delta x)$, c'est-à-dire la valeur de u après n pas en temps et j pas en espace. Comme condition initiale (au temps $t = 0$) du schéma, on prend $\mathrm{U}_{0,j} = f_0(j\Delta x)$, qui représente la première rangée de briques.
Par exemple, le *schéma upwind* (qui est un cas particulier de *schéma décentré*) s'écrit de la manière suivante :

$$\frac{\mathrm{U}_{n+1,j}-\mathrm{U}_{n,j}}{\Delta t} = \frac{\mathrm{U}_{n,j+1}-\mathrm{U}_{n,j}}{\Delta x}.$$

On reconnaît le lien avec la définition des deux dérivées, où h joue le rôle des Δt et Δx, qui sont supposés « très petits ». En reformulant cette égalité, on trouve

$$\mathrm{U}_{n+1,j} = \left(1-\frac{\Delta t}{\Delta x}\right)\mathrm{U}_{n,j} + \frac{\Delta t}{\Delta x}\mathrm{U}_{n,j+1}.$$

Autrement dit, la valeur approchée de u au temps n+1 à l'endroit j va dépendre à la fois de la valeur au temps n et en j et de la valeur au temps n et à l'endroit j +1. On voit donc apparaître la construction du mur : la brique de $\mathrm{U}_{n+1,j}$ repose sur la brique $\mathrm{U}_{n,j}$ et sur la brique $\mathrm{U}_{n,j+1}$. Cela est valable pour tous les pas d'espace j et tous les pas de temps n.
Quand on construit le schéma aux différences finies de cette manière, on va avoir un problème pour définir la valeur « la plus à droite » de l'espace. En effet, si J est l'entier qui représente la dernière discrétisation en espace (celle la plus à droite, donc), pour définir $\mathrm{U}_{n+1,\mathrm{J}}$ il faudra avoir les valeurs de $\mathrm{U}_{n,\mathrm{J}}$ et de $\mathrm{U}_{n,\mathrm{J}+1}$. Mais cette dernière valeur est hors du domaine d'espace ! Il faut donc créer artificiellement cette valeur, pour que toute la construction du mur soit correcte ; c'est cela, concrètement, « tailler les briques du bord ».
Il existe plusieurs méthodes pour définir ces valeurs à l'extérieur du domaine : méthodes de Dirichlet, de Neumann, de Lax–Wendroff inverse, de Lax–Wendroff inverse simplifiée… Par exemple, la *méthode de Dirichlet homogène* impose la valeur de 0 à $\mathrm{U}_{n,\mathrm{J}+1}$ pour tous les pas en temps.
En pratique, il existe une multitude de schémas et chacun possède ses spécificités propres : « bonne » convergence vers la solution exacte, « bonne » rapidité de calcul, conservation d'une quantité physique (comme la masse d'un système)… Dans tous les cas, on cherche mathématiquement à démontrer ces propriétés afin d'assurer que l'utilisation du schéma est la plus pertinente possible quand on cherche à approcher une solution d'un problème.

P. L.B.