

Chapitre 4

Introduction aux différences finies

4.1 Introduction

La méthode des différences finies est la plus ancienne des techniques appliquées pour obtenir la solution d'équations différentielles. Elle repose sur la notion de dérivée et les propriétés du développement de Taylor. C'est probablement la méthode la plus simple à mettre en œuvre, du moins pour des maillages uniformes, mais elle requiert une forte régularité du maillage. En particulier, le maillage doit être structuré, i.e. les points du maillage dans \mathbb{R}^{n_d} sont situés à l'intersection de n_d familles de courbes rectilinéaires ou curvilignes. Par ailleurs, la prise en compte de certaines conditions aux limites est difficile.

4.2 Quelques Notions élémentaires

L'approximation par différences finies procède directement de la notion de dérivée. Pour une fonction $u(x)$, la dérivée au point x est définie.

$$u_x \equiv \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right) = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{u(x + \Delta x) - u(x)}{\Delta x} \quad (4.1)$$

Lorsque Δx est petit, mais fini, on obtient une approximation de u_x . L'approximation est d'autant meilleure que Δx est petit, mais tant que Δx reste fini une *erreur de troncature* est introduite. Celle-ci tend vers zéro lorsque Δx tend vers zéro. La puissance de Δx avec laquelle l'erreur tend vers zéro est l'ordre d'approximation. Elle peut être obtenue à partir du développement de Taylor de $u(x + \Delta x)$ autour du point x :

$$u(x + \Delta x) = u(x) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \frac{\partial^n u}{\partial x^n} \Big|_x \quad (4.2)$$

d'où l'on déduit par exemple

$$\frac{u(x) - u(x + \Delta x)}{\Delta x} = u_x(x) + \mathcal{O}(\Delta x) \quad (4.3)$$

qui constitue une approximation du premier ordre de la dérivée de $u(x)$ en x . Un grand nombre d'approximations par différences finies peut ainsi être obtenu.

4.2.1 Quelques propriétés des schémas de différences

Considérons un domaine $\Omega \subset \mathbb{R}$, $\Omega = [0, X]$, que l'on discrétisera spatialement de sorte à remplacer ce continuum par $N + 1$ points x_i , $i = 0, \dots, N$ avec un pas de discrétisation uniforme Δx . On désignera par u_i les valeurs de la fonction $u(x)$ aux points x_i , $u_i = u(x_i)$, avec $x_i = i\Delta x$ et $i \in [0, \dots, N]$.

On peut naturellement définir plusieurs approximations pour la dérivée première $(u_x)_i \equiv (\partial u / \partial x)|_i$.

$$(u_x)_i \equiv \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_i = \frac{u_{i+1} - u_i}{\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x) \quad (4.4)$$

$$(u_x)_i \equiv \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_i = \frac{u_i - u_{i-1}}{\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x) \quad (4.5)$$

La première approximation conduit à un schéma de différence avant (par rapport à $x = x_i$) alors que la deuxième, qui s'obtient à partir d'un développement de $u(x - \Delta x)$ autour de x , conduit à un schéma de différence arrière.

Une borne sur l'amplitude de l'erreur pour ces deux schémas s'obtient directement à partir du développement de Taylor.

$$|E| \leq \frac{\Delta x}{2} \max_{[x_i, x_{i+1}]} \left| \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right| \quad (4.6)$$

$$|E| \leq \frac{\Delta x}{2} \max_{[x_{i-1}, x_i]} \left| \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right| \quad (4.7)$$

On peut également définir un schéma de différence centrée, en considérant les développements de $u(x + \Delta x)$ et $u(x - \Delta x)$:

$$\begin{aligned} u_{i+1} &= u_i + \Delta x \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_i + \frac{\Delta x^2}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Big|_i + \frac{\Delta x^3}{6} \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \Big|_i + \dots \\ u_{i-1} &= u_i - \Delta x \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_i + \frac{\Delta x^2}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Big|_i - \frac{\Delta x^3}{6} \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \Big|_i + \dots \end{aligned}$$

on vérifie aisément

$$\frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2\Delta x} = \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_i + \mathcal{O}(\Delta x^2) \quad (4.8)$$

avec pour borne sur l'amplitude de l'erreur

$$|E| \leq \frac{\Delta x^2}{6} \max_{[x_{i-1}, x_{i+1}]} \left| \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \right| \quad (4.9)$$

Le schéma de différence centrée est donc du second ordre, soit un ordre plus élevé que les formules précédentes. Il est à noter est spatialement plus étendu que les schémas de différences avant ou arrière puisqu'il invoque un pas de $2\Delta x$.

Remarque 34. *Il est important de ne pas confondre l'ordre d'approximation et l'amplitude de l'erreur qui invoque l'évolution de dérivées, d'autant plus élevées que l'ordre du schéma de différence finie est élevé, de la fonction $u(x)$ dans l'intervalle de définition du schéma. L'erreur est reliée à la régularité de la fonction $u(x)$ sur l'intervalle en question.*

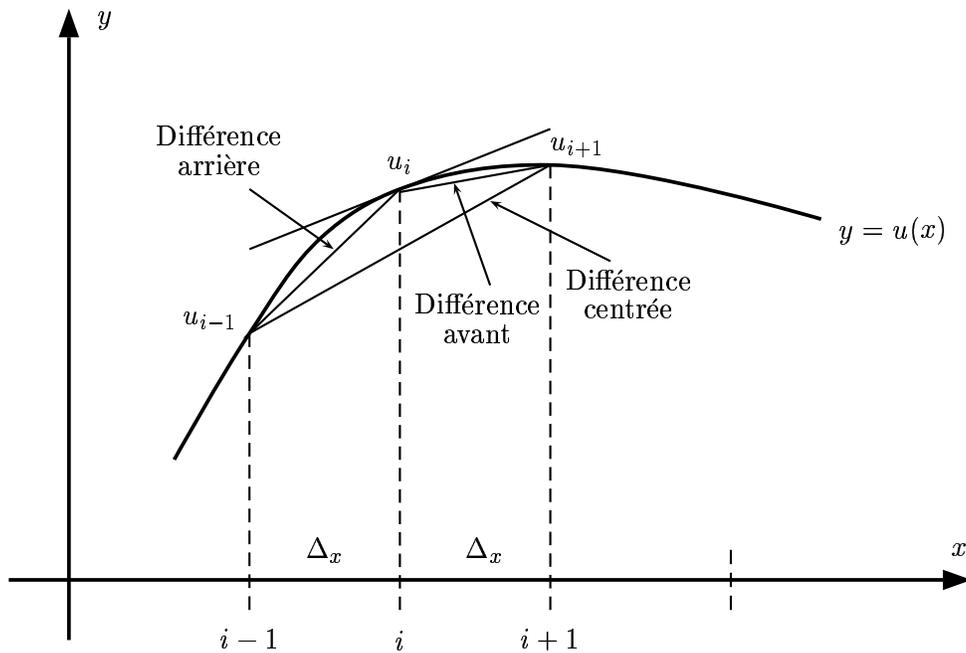


FIG. 4.1: *Interprétation géométrique des schémas de différences pour la dérivée première.*

On peut également considérer le schéma de différence avant pour $(u_x)_i$ comme un schéma de différence centrée pour le point

$$x_{i+1/2} = \frac{x_i + x_{i+1}}{2}$$

ce qui fournit une approximation d'ordre 2 pour la dérivée première de la fonction $u(x)$ au point $x_{i+1/2}$. Il s'agit d'une propriété importante souvent utilisée en raison de son caractère compact. Nous aurons l'occasion d'y revenir.

$$(u_x)_{i+1/2} = \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{i+1/2} = \frac{u_{i+1} - u_i}{\Delta x}$$

$$(u_x)_{i-1/2} = \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{i-1/2} = \frac{u_i - u_{i-1}}{\Delta x}$$

4.2.2 Schémas de différences finies avec un nombre arbitraire de points

Différents schémas de différences finies pour la dérivée première de $(u_x)_i$ peuvent être construits impliquant un nombre arbitraire de points, le nombre de points augmentant avec l'ordre du schéma.

Dans toute simulation numérique il est nécessaire d'établir un compromis entre le nombre de points simultanément impliqués, qui contrôle le coût, et la précision désirée. La largeur de bande du système algébrique qui devra être finalement résolu est en général directement proportionnelle à ce nombre de points.

Par exemple, on peut obtenir un schéma de différences finies pour $(u_x)_i$ du second ordre impliquant seulement les points amonts $i-2$, $i-1$, i , sous la forme

$$(u_x)_i = \frac{au_i + bu_{i-1} + cu_{i-2}}{2\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x^2) \quad (4.10)$$

Les coefficients (a, b, c) sont obtenus à partir des développements de Taylor de u_{i-2} et u_{i-1} autour de u_i

$$\begin{aligned} u_{i-2} &= u_i - 2\Delta x(u_x)_i + \frac{(2\Delta x)^2}{2}(u_x)_i - \frac{(2\Delta x)^3}{6}(u_{xx})_i + \dots \\ u_{i-1} &= u_i - \Delta x(u_x)_i + \frac{(\Delta x)^2}{2}(u_x)_i - \frac{(\Delta x)^3}{6}(u_{xx})_i + \dots \end{aligned}$$

En multipliant la première équation par c , la deuxième par b et u_i par a , on obtient

$$\begin{aligned} cu_{i-2} + bu_{i-1} + au_i &= \\ (a + b + c)u_i - 2\Delta x\left(c + \frac{b}{2}\right)(u_x)_i + \frac{(2\Delta x)^2}{2}\left(c + \frac{b}{4}\right)(u_{xx})_i + \mathcal{O}(\Delta x^3) \end{aligned}$$

En identifiant cette équation avec le schéma désiré, on obtient trois conditions

$$\begin{aligned} a + b + c &= 0 \\ c + b/2 &= -1 \\ c + b/4 &= 0 \end{aligned}$$

d'où $c = 1$, $b = -4$, $a = 3$ et le schéma

$$(u_x)_i = \frac{3u_i - 4u_{i-1} + u_{i-2}}{2\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x^2)$$

Il s'agit d'une procédure générale pour obtenir des schémas de différences finies, à un ordre donné, avec un nombre arbitraire de points. On peut en général construire ainsi un schéma explicite d'ordre p pour la dérivée première $(u_x)_i$ au point i impliquant $(p + 1)$ points. Par exemple, on vérifiera aisément le schéma avant à trois points $i + 2$, $i + 1$, i :

$$(u_x)_i = \frac{-3u_i + 4u_{i+1} - u_{i+2}}{2\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x^2)$$

On peut aussi définir un schéma centré par la même procédure

$$(u_x)_i = \frac{au_{i-1} + bu_i + cu_{i+1}}{\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x^2)$$

On en obtient l'équation

$$au_{i-1} + bu_i + cu_{i+1} = (a + b + c)u_i + (c - a)\Delta x(u_x)_i + (a + c)\frac{\Delta x^2}{2}(u_{xx})_i + \mathcal{O}(\Delta x^3)$$

ce qui fournit les trois conditions recherchées

$$\begin{aligned} a + b + c &= 0 \\ c - a &= 1 \\ a + c &= 0 \end{aligned}$$

soit $c = -a = 1/2$ et $b = 0$. On retrouve ainsi le schéma de différence centré précédent

$$(u_x)_i = \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x^2)$$

Des schémas d'ordre élevé plus compact, i.e. impliquant un nombre moins élevé de points, peuvent être obtenus en introduisant des schémas implicites sur lesquels nous reviendrons plus loin.

Des approximations par différences finies pour des dérivées d'ordre plus élevé peuvent être obtenues par répétition des schémas précédents. Ainsi, une approximation du second ordre de la dérivée seconde $(u_{xx})_i$ s'obtient par

$$\begin{aligned} (u_{xx})_i &\equiv \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Big|_i = \frac{(u_x)_{i+1} - (u_x)_i}{\Delta x} \\ &= \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{\Delta x^2} + \mathcal{O}(\Delta x^2) \end{aligned}$$

où un schéma arrière à deux points a été adopté pour $(u_x)_{i+1}$ et $(u_x)_i$.

On peut directement construire ce schéma à partir du développement de Taylor. En retenant un schéma centré impliquant les points $i + 1$, i et $i - 1$, on obtient directement

$$\begin{aligned} u_{i+1} &= u_i + \Delta x (u_x)_i + \frac{\Delta x^2}{2} (u_{xx})_i + \frac{\Delta x^3}{6} (u_{xxx})_i + \frac{\Delta x^4}{24} (u_{xxxx})_i + \dots \\ u_{i-1} &= u_i - \Delta x (u_x)_i + \frac{\Delta x^2}{2} (u_{xx})_i - \frac{\Delta x^3}{6} (u_{xxx})_i + \frac{\Delta x^4}{24} (u_{xxxx})_i + \dots \end{aligned}$$

on a de suite

$$(u_{xx})_i = \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{\Delta x^2} + \mathcal{O}(\Delta x^2)$$

avec pour l'amplitude de l'erreur

$$|E| \leq \frac{\Delta x^2}{12} \max_{[x_{i-1}, x_{i+1}]} \left| \frac{\partial^4 u}{\partial u^4} \right|$$

On peut ainsi construire des schémas explicites avec un nombre arbitraire de points i . Par exemple, un schéma amont à trois points pour la dérivée seconde $(u_{xx})_i$

$$(u_{xx})_i = \frac{au_i + bu_{i-1} + cu_{i-2}}{\Delta x^2} + \mathcal{O}(\Delta x)$$

conduit aux conditions suivantes

$$\begin{aligned} a + b + c &= 0 \\ 2c + b &= 0 \\ 4c + b &= 2 \end{aligned}$$

soit le schéma arrière

$$(u_{xx})_i = \frac{u_i - 2u_{i-1} + u_{i-2}}{\Delta x^2} + \mathcal{O}(\Delta x)$$

Ce schéma est seulement d'ordre 1 au point i . On peut noter que le même schéma est d'ordre 2 au point $i - 1$.

Ce type de procédure peut être généralisée afin d'obtenir des approximations de différences finies à un ordre prescrit. Afin d'obtenir une telle généralisation, il est nécessaire d'introduire un certain formalisme faisant appel à la notion d'opérateur de différences finies.

4.2.3 Exemples de solution pour une équation différentielle

Afin de préciser la mise en œuvre de ces méthodes, nous allons envisager la résolution de l'équation de la chaleur linéaire, à 1D, en régime stationnaire.

Équation de la chaleur linéaire avec conditions de Dirichlet

Considérons un domaine $\Omega = [0, X] \subset \mathbb{R}$. L'équation de la chaleur s'écrit alors

$$k \frac{\partial^2 u(x)}{\partial x^2} = -Q(x) \quad \forall x \in \Omega \quad (4.11)$$

où $u(x)$ est une fonction de $\Omega \rightarrow \mathbb{R}^+$, qui représente la température. La production de chaleur $Q(x)$ est également une fonction de $\Omega \rightarrow \mathbb{R}$.

Cette équation doit être complétée par des conditions aux limites. Considérons pour l'instant des conditions de type Dirichlet

$$\begin{aligned} u(0) &= \bar{u}_0 \\ u(X) &= \bar{u}_X \end{aligned}$$

Le domaine Ω est discrétisé spatialement par $L + 1$ points : $x_i, i = 0, \dots, L$ avec un pas de discrétisation Δx uniforme. On posera alors $u_i = u(x_i)$, avec $x_i = i\Delta x$. La connaissance de la fonction u est alors remplacée par celle des valeurs de la fonction aux points du maillage.

Au point i , on peut approximer l'équation (4.11) par un schéma de différences finies centré, on obtient alors

$$k \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{\Delta x^2} = -Q_i$$

Compte-tenu des conditions aux limites, on obtient alors $L - 1$ équations

$$\begin{aligned} -u_2 + 2u_1 &= \frac{\Delta x^2 Q_1}{k} + \bar{u}_0 \\ -u_3 + 2u_2 - u_1 &= \frac{\Delta x^2 Q_2}{k} \\ -u_4 + 2u_3 - u_2 &= \frac{\Delta x^2 Q_3}{k} \\ &\vdots \\ -u_{L-1} + 2u_{L-2} - u_{L-3} &= \frac{\Delta x^2 Q_{L-2}}{k} \\ 2u_{L-1} - u_{L-2} &= \frac{\Delta x^2 Q_{L-1}}{k} + \bar{u}_X \end{aligned}$$

Le système algébrique ainsi obtenu peut se mettre sous forme matricielle. En définissant $\mathbf{U} = [u_1, u_2, \dots, u_{L-2}, u_{L-1}]^T$, le vecteur dont les composantes sont les $L - 1$ valeurs de la fonction $u(x)$ définies aux points non contraints du maillage, le système algébrique peut s'écrire

$$\mathbf{K} \mathbf{U} = \mathbf{F}$$

avec

$$\mathbf{K} = \begin{bmatrix} 2 & -1 & & \mathbf{0} \\ -1 & 2 & -1 & \\ & \ddots & \ddots & \ddots \\ \mathbf{0} & & -1 & 2 & -1 \\ & & & 2 & -1 \end{bmatrix} \quad \text{et} \quad \mathbf{F} = \begin{bmatrix} \frac{\Delta x^2 Q_1}{k} + \bar{u}_0 \\ \frac{\Delta x^2 Q_2}{k} \\ \frac{\Delta x^2 Q_3}{k} \\ \frac{\Delta x^2 Q_4}{k} \\ \vdots \\ \frac{\Delta x^2 Q_{L-2}}{k} \\ \frac{\Delta x^2 Q_{L-1}}{k} - \bar{u}_X \end{bmatrix}$$

Le problème est donc ramené à la résolution d'un système algébrique. On notera que le système est symétrique et que la matrice, de par le schéma centré adopté, est tridiagonale.

4.2.4 Équation de la chaleur linéaire avec condition de Neumann

Dans certains cas les conditions aux limites portent sur des dérivées. C'est typiquement le cas des conditions de Neumann. Pour l'équation de la chaleur cela correspond à une condition de flux imposée.

Considérons le problème précédent de l'équation de la chaleur dans le domaine Ω , discrétisé par un schéma centré (4.11). Les conditions aux limites considérées sont maintenant

$$\begin{aligned} u(0) &= \bar{u}_0 \\ -k \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{x=X} &= -\bar{q} \end{aligned}$$

Le système algébrique peut se réécrire

$$\begin{aligned} -u_2 + 2u_1 &= \frac{\Delta x^2 Q_1}{k} + \bar{u}_0 \\ -u_3 + 2u_2 - u_1 &= \frac{\Delta x^2 Q_2}{k} \\ -u_4 + 2u_3 - u_2 &= \frac{\Delta x^2 Q_3}{k} \\ &\vdots \\ -u_{L-1} + 2u_{L-2} - u_{L-3} &= \frac{\Delta x^2 Q_{L-2}}{k} \\ -u_L + 2u_{L-1} - u_{L-2} &= \frac{\Delta x^2 Q_{L-1}}{k} \end{aligned}$$

Maintenant u_L n'est pas connu et l'on a $L - 1$ équations pour L inconnues : $u_1, u_2, \dots, u_{L-1}, u_L$. L'équation supplémentaire nous est fournie par la condition aux limites portant sur le flux.

$$\frac{\partial u}{\partial x} \Big|_L = -\frac{\bar{q}}{k}$$

On peut approximer cette condition par un schéma de différences finies arrière

$$\frac{u_L - u_{L-1}}{\Delta x} = -\frac{\bar{q}}{k}$$

ce qui complète les équations. On vérifiera que le système ainsi obtenu est toujours symétrique.

Cependant, on constate qu'il y a une inconsistance dans la mesure où les opérateurs différentiels ont été approchés par un schéma d'ordre 2 dans le volume et seulement d'ordre 1 sur les bords. Ceci peut avoir des effets importants dès lors que l'on s'intéresse à des phénomènes au voisinage de la frontière.

On peut y remédier dans le cas présent en introduisant un point fictif u_{L+1} en $x_{L+1} = (L+1)\Delta x$. Ce point n'a pas de signification physique et permet simplement de contrôler la valeur du flux. La condition aux limites peut alors être approchée par un schéma centré d'ordre 2

$$\frac{u_{L+1} - u_{L-1}}{2\Delta x} = -\frac{\bar{q}}{k}$$

Le système algébrique devient :

$$\begin{aligned} -u_2 + 2u_1 &= \frac{\Delta x^2 Q_1}{k} + \bar{u}_0 \\ -u_3 + 2u_2 - u_1 &= \frac{\Delta x^2 Q_2}{k} \\ -u_4 + 2u_3 - u_2 &= \frac{\Delta x^2 Q_3}{k} \\ &\vdots \\ -u_{L-1} + 2u_{L-2} - u_{L-3} &= \frac{\Delta x^2 Q_{L-2}}{k} \\ -u_L + 2u_{L-1} - u_{L-2} &= \frac{\Delta x^2 Q_{L-1}}{k} \\ 2u_L - 2u_{L-1} &= \frac{\Delta x^2 Q_L}{k} + 2\Delta x \frac{\bar{q}}{k} \end{aligned}$$

On vérifiera que le système algébrique n'est malheureusement plus symétrique.

Remarque 35. *Les conditions de type Neumann posent en général de sérieuses difficultés en différences finies. Pour des schémas d'ordre élevé en volume, il n'est généralement pas possible d'approcher les conditions de Neumann au même ordre.*

Équation de la chaleur non linéaire

La modélisation mathématique des problèmes physiques introduit souvent des équations différentielles et/ou des conditions aux limites non linéaires.

Considérons par exemple à nouveau le problème de la conduction de chaleur où cette fois-ci la conductivité thermique dépend de la température.

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[k(u) \frac{\partial u}{\partial x} \right] = -Q(x) \quad \forall x \in \Omega \quad (4.12)$$

On peut alors raisonner tout d'abord sur la variable «flux» $\psi = k(u)\partial u/\partial x$. En utilisant un schéma centré d'ordre 2

$$\frac{\partial \psi}{\partial x} \Big|_i = \frac{\psi_{i+1/2} - \psi_{i-1/2}}{\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x^2)$$

où $x_{i+1/2} = x_i + \Delta x/2$. On peut donc approcher l'équation (4.12)

$$k(u_{i+1/2}) \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{i+1/2} - k(u_{i-1/2}) \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{i-1/2} = -\Delta x Q_i$$

En approchant les dérivées premières de u aux points $i + 1/2$ et $i - 1/2$ par un schéma centré d'ordre 2, on obtient une approximation d'ordre 2 de l'équation de départ

$$k(u_{i+1/2}) [u_{i+1} - u_i] - k(u_{i-1/2}) [u_i - u_{i-1/2}] = -\Delta x^2 Q_i$$

On remarquera que si k ne dépend pas de la température, cette formule se réduit au schéma centré d'ordre 2 classique.

On obtient un système d'équations algébriques non linéaire à résoudre

$$\mathbf{K}(\mathbf{U}) \mathbf{U} = \mathbf{F}$$

Il n'est question ici d'étudier les différentes méthodes de résolution d'un tel système non linéaire. La méthode la plus classique est la méthode de Newton. Cette méthode exhibe une convergence quadratique si la solution initiale est voisine du point fixe recherché.

4.3 Méthodes générales pour les schémas de différences finies

Des procédures générales ont été introduites afin de générer des schémas de différences finies d'ordre donné. Une telle approche est basée sur la définition d'un certain nombre d'opérateurs:

$$\begin{aligned} \text{Opérateur de déplacement } E & : E u_i = u_{i+1} \\ \text{Opérateur de différence avant } \delta^+ & : \delta^+ u_i = u_{i+1} - u_i \\ \text{Opérateur de différence arrière } \delta^- & : \delta^- u_i = u_i - u_{i-1} \\ \text{Opérateur de différence centrée } \delta & : \delta u_i = u_{i+1/2} - u_{i-1/2} \\ \text{Opérateur de différence centrée } \bar{\delta} & : \bar{\delta} u_i = \frac{1}{2}(u_{i+1} - u_{i-1}) \\ \text{Opérateur moyenne } \mu & : \mu u_i = \frac{1}{2}(u_{i+1/2} + u_{i-1/2}) \\ \text{Opérateur différentiel } D & : D u = u_x = \frac{\partial u}{\partial x} \end{aligned}$$

À partir de ces définitions, on a les relations suivantes

$$\delta^+ = E - 1 \quad \delta^- = 1 - E^{-1}$$

où l'on introduit l'opérateur E^{-1} comme

$$E^{-1} u_i = u_{i-1}$$

et plus généralement, pour tout n positif ou négatif

$$E^n u_i = u_{i+n}$$

On a alors les relations

$$\delta^{-1} = E^{-1} \delta^+$$

et

$$\delta^+ \delta^- = \delta^- \delta^+ = \delta^+ - \delta^- = \delta^2$$

ainsi que

$$\begin{aligned}\delta &= E^{\frac{1}{2}} - E^{-\frac{1}{2}} \\ \mu &= \frac{1}{2} (E^{\frac{1}{2}} + E^{-\frac{1}{2}}) \\ \bar{\delta} &= \frac{1}{2} (E - E^{-1})\end{aligned}$$

et

$$\begin{aligned}\delta^{+2} &= \delta^+ \delta^- &= (E - 1)(E - 1) &= E^2 - 2E + 1 \\ \delta^{+3} &= \delta^+ \delta^+ \delta^+ &= (E - 1)^3 &= E^3 - 3E^2 + 3E - 1\end{aligned}$$

4.3.1 Construction de schémas de différences finies pour les dérivées premières

La clé pour la construction de schémas de différences finies réside dans la relation entre l'opérateur différentiel D et l'opérateur de déplacement E . Cette relation s'obtient à partir du développement de Taylor

$$u(x + \Delta x) = u(x) + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\Delta x^k}{k!} \frac{\partial^k u}{\partial x^k}$$

soit

$$\begin{aligned}E u(x) &= \left[1 + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\Delta x^k}{k!} D^k \right] u(x) \\ &= \exp \{ \Delta x D \} u(x)\end{aligned}$$

de manière symbolique

$$E = \exp \{ \Delta x D \} \quad \Rightarrow \quad \Delta x = \ln E \quad (4.13)$$

Schémas de différences finies avant

Les schémas de différences finies avant sont simplement obtenus à partir de la relation $\delta^+ = E - 1$

$$\Delta x D = \ln E = \ln (1 + \delta^+) = \sum_{k=0}^{\infty} \left[(-1)^k \frac{\delta^{+(k+1)}}{k+1} \right]$$

L'ordre du schéma dépend du nombre de termes retenus dans le développement. Le premier terme négligé détermine l'erreur de troncature. Ainsi, le premier terme donne un schéma d'ordre 1. Si l'on retient le deuxième terme, on obtient le schéma d'ordre 2

$$(u_x)_i = \frac{-3u_i + 4u_{i+1} - u_{i+2}}{2\Delta x} + \frac{\Delta x^2}{3} u_{xxx}$$

Schémas de différences finies arrières

De la même façon, des schémas de différences finies arrières peuvent s'obtenir à partir de la relation $\delta^- = 1 - E^-$, soit

$$\begin{aligned}\Delta x D &= \ln E = -\ln(1 - \delta^-) \\ &= \sum_{k=1}^{\infty} \left[\frac{\delta^{-(k+1)}}{k+1} \right]\end{aligned}$$

Au second ordre, on obtient le schéma

$$(u_x)_i = \frac{3u_i - 4u_{i-1} + u_{i-2}}{2\Delta x} + \frac{\Delta x^2}{3} u_{xxx}$$

Schémas de différences finies centrés

On peut obtenir des schémas de différences finies centrés à partir de la relation $\delta = E^{1/2} - E^{-1/2}$. En tenant compte de la relation $E = \exp\{\Delta x D\}$, on a

$$\delta = \exp\left\{\frac{\Delta x D}{2}\right\} - \exp\left\{-\frac{\Delta x D}{2}\right\} = 2 \sinh\left(\frac{\Delta x D}{2}\right)$$

d'où après inversion

$$\begin{aligned}\Delta x D &= 2 \sinh^{-1}(\delta/2) \\ &= 2 \left[\frac{\delta}{2} - \frac{1}{1 \cdot 3} \left(\frac{\delta}{2}\right)^3 + \frac{1 \cdot 3}{2 \cdot 4 \cdot 5} \left(\frac{\delta}{2}\right)^5 + \dots + (-1)^n \frac{1 \cdot 3 \dots (2n-1)}{2 \cdot 4 \dots 2n \cdot (2n+1)} \left(\frac{\delta}{2}\right)^{2n+1} + \dots \right] \\ &= \delta - \frac{\delta^3}{24} + \frac{3\delta^5}{640} - \frac{5\delta^7}{7168} + \dots\end{aligned}$$

Cette formule génère une famille de schémas de différences centrées pour la dérivée première $(x)_i$ basée sur les valeurs de la fonction aux nœuds milieux de la grille. En retenant seulement le premier terme, on obtient le schéma d'ordre 2

$$(u_x)_i = \frac{u_{i+1/2} - u_{i-1/2}}{\Delta x} - \frac{\Delta x^2}{24} u_{xxx}$$

En retenant les deux premiers termes, on obtient cette fois un schéma d'ordre 4

$$(u_x)_i = \frac{-u_{i+3/2} + 27u_{i+1/2} - 27u_{i-1/2} + u_{i-3/2}}{24\Delta x} + \frac{3}{640} \Delta x^4 \left(\frac{\partial^5 u}{\partial x^5} \right)$$

Pour générer une famille de différences centrées basées sur les nœuds entiers de la grille, on peut appliquer la même procédure avec cette fois l'opérateur $\bar{\delta}$

$$\bar{\delta} = \frac{1}{2} (E - E^{-1}) = \frac{1}{2} (\exp\{\Delta x D\} - \exp\{-\Delta x D\}) = \sinh(\Delta x D)$$

Soit

$$\begin{aligned}\Delta x D &= \sinh^{-1} \bar{\delta} \\ &= \left[\bar{\delta} - \frac{1}{2} \frac{\bar{\delta}^3}{3} + \frac{1 \cdot 3}{2 \cdot 5} \frac{\bar{\delta}^5}{5} + \dots + (-1)^n \frac{1 \cdot 3 \dots (2n-1)}{2 \cdot 4 \dots 2n} \frac{\bar{\delta}^{2n+1}}{2n+1} + \dots \right]\end{aligned}$$

Malheureusement, si le premier terme est une différence centrée d'ordre 2, le deuxième terme donne un schéma de différences centrées d'ordre 4 qui implique les quatre points $i - 3, i - 1, i + 1, i + 3$. Ceci n'est pas intéressant sur le plan numérique puisque l'on aurait aimé un schéma d'ordre 4 n'impliquant que les points $i - 2, i - 1, i + 1, i + 2$. Pour l'obtenir, on va tenir compte de la relation

$$\mu = \frac{1}{2} \left(E^{1/2} + E^{-1/2} \right) \Rightarrow \mu^2 = 1 + \frac{\delta^2}{4}$$

On a alors la relation, avec $\alpha = 1/2$

$$1 = \mu \left(1 + \frac{\delta^2}{4} \right)^{-\alpha} = \mu \left(1 - \frac{\alpha \delta^2}{1! 4} + \frac{\alpha(\alpha-1)}{2!} \left(\frac{\delta^2}{4} \right)^2 + \dots + (-1)^{n+1} \frac{\alpha(\alpha-1) \dots (\alpha-n+1)}{n!} \left(\frac{\delta^2}{4} \right)^n + \dots \right)$$

En multipliant alors la relation du schéma centré par 1, on obtient

$$\begin{aligned} \Delta x D &= \mu \left(\delta + \frac{1}{3!} \delta^3 + \frac{1^2 \cdot 2^2}{5!} \delta^5 - \dots \right) \\ &= \bar{\delta} \left(1 - \frac{\delta^3}{3!} + \frac{2^2}{5!} \delta^4 - \frac{2^2 \cdot 3^2}{7!} \delta^6 + \dots \right) \end{aligned}$$

On obtient alors les schémas centrés d'ordre 2 et 4 pour l'approximation de la dérivée première $(u_x)_i$

$$(u_x)_i = \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2\Delta x} - \frac{\Delta x^2}{6} u_{xxx}$$

et

$$(u_x)_i = \frac{-u_{i+2} + 8u_{i+1} - 8u_{i-1} + u_{i-2}}{12\Delta x} + \frac{\Delta x^4}{30} \left(\frac{\partial^5 u}{\partial x^5} \right)$$

4.3.2 Généralisation pour les dérivées d'ordre plus élevé

En utilisant la technique d'opérateur, un nombre quasi illimité de schémas de différences finies peut être obtenu pour l'approximation des dérivées du second ordre ou d'ordre plus élevé.

En utilisant l'opérateur δ^+ , on obtient les schémas de différences finies avant

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial^n u}{\partial x^n} \right)_i &= D^n u_i = \frac{1}{\Delta x^n} [\ln(1 + \delta^+)]^n u_i \\ &= \frac{1}{\Delta x^n} \left[\delta^{+n} - \frac{n}{2} \delta^{+(n+1)} + \frac{n(3n+5)}{24} \delta^{+(n+2)} - \frac{n(n+2)(n+3)}{48} \delta^{+(n+3)} + \dots \right] u_i \end{aligned}$$

En utilisant l'opérateur δ^- , on obtient les schémas de différences finies arrières

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial^n u}{\partial x^n} \right)_i &= D^n u_i = -\frac{1}{\Delta x^n} [\ln(1 - \delta^-)]^n u_i \\ &= \frac{1}{\Delta x^n} \left[\delta^{-n} + \frac{n}{2} \delta^{-(n+1)} + \frac{n(3n+5)}{24} \delta^{-(n+2)} + \frac{n(n+2)(n+3)}{48} \delta^{-(n+3)} + \dots \right] u_i \end{aligned}$$

Les schémas de différences centrées peuvent être obtenu à partir de

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial^n u}{\partial x^n}\right)_i &= D^n u_i = \frac{1}{\Delta x^n} \left(2 \sinh^{-1} \frac{\delta}{2}\right)^n u_i \\ &= \frac{1}{\Delta x^n} \delta^n \left[1 - \frac{n}{24} \delta^2 + \frac{n}{64} \frac{22 + 5n}{90} \delta^4 - \frac{n}{4^5} \left(\frac{5}{7} + \frac{n-1}{5} + \frac{(n-1)(n-2)}{3^5}\right) \delta^6 + \dots\right] u_i \end{aligned}$$

Ces schémas impliquent pour n pair les valeurs de la fonction aux nœuds entiers du maillage, et pour n impair les valeurs de la fonction aux points milieux.

Afin de générer des schémas qui impliquent les valeurs de la fonction aux nœuds entiers du maillage pour n impair, on peut utiliser la deuxième formule

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial^n u}{\partial x^n}\right)_i &= D^n u_i = \frac{1}{\Delta x^n} \frac{\mu}{[1 + (\delta^2/4)]^{1/2}} \left(2 \sinh^{-1} \frac{\delta}{2}\right)^n u_i \\ &= \mu \frac{\delta^n}{\Delta x^n} \left[1 - \frac{n+3}{24} \delta^2 + \frac{5n^2 + 52n + 135}{5760} \delta^4 + \dots\right] u_i \end{aligned}$$

Il est à noter que, pour des n pair, cette dernière famille génère des schémas impliquant cette fois des valeurs de la fonction aux nœuds milieux.

Dérivées secondes

On obtient les schémas pour les dérivées secondes

$$\begin{aligned} (u_{xx})_i &= \frac{1}{\Delta x^2} \left(\delta^{+2} - \delta^{+3} + \frac{11}{12} \delta^{+4} - \frac{5}{6} \delta^{+5} + \dots\right) u_i \\ (u_{xx})_i &= \frac{1}{\Delta x^2} \left(\delta^{-2} + \delta^{-3} + \frac{11}{12} \delta^{-4} + \frac{5}{6} \delta^{-5} + \dots\right) u_i \\ (u_{xx})_i &= \frac{1}{\Delta x^2} \left(\delta^2 - \frac{\delta^4}{12} + \frac{\delta^6}{90} - \frac{\delta^8}{560} + \dots\right) u_i \\ (u_{xx})_i &= \frac{\mu}{\Delta x^2} \left(\delta^2 - \frac{5\delta^4}{24} + \frac{259}{5760} \delta^6 + \dots\right) u_i \end{aligned}$$

Ces relations définissent quatre famille de schémas pour les dérivées secondes à différents ordres. En ne retenant que le premier terme dans chacune de ces formules, on obtient

schéma de différence avant : ordre 1

$$(u_{xx})_i = \frac{1}{\Delta x^2} (u_{i+2} - 2u_{i+1} + u_i) - \Delta x u_{xxx}$$

schéma de différence arrière : ordre 1

$$(u_{xx})_i = \frac{1}{\Delta x^2} (u_i - 2u_{i-1} + u_{i-2}) + \Delta x u_{xxx}$$

schéma de différence centrée : nœuds entiers - ordre 2

$$(u_{xx})_i = \frac{1}{\Delta x^2} (u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}) - \frac{\Delta x^2}{12} \left(\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}\right)_i$$

schéma de différence centrée : nœuds milieux – ordre 2

$$(u_{xx})_i = \frac{1}{2\Delta x^2} (u_{i+3/2} - u_{i+1/2} - u_{i-1/2} + u_{i-3/2}) - \frac{5}{24}\Delta x^2 \left(\frac{\partial^4 u}{\partial x^4} \right)$$

A l'exception du dernier, ces schémas pour la dérivée seconde n'impliquent que trois points du maillage comme pour les dérivées premières.

Un opérateur un plus complexe, que l'on rencontre en particulier dans le cas de la conduction de chaleur, est le suivant

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[k(x) \frac{\partial}{\partial x} \right] u_i = \frac{1}{\Delta x^2} \delta^+ (k_{i-1/2} \delta^-) u_i + \mathcal{O}(\Delta x^2)$$

ce qui conduit schéma

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[k(x) \frac{\partial}{\partial x} \right] u_i = \frac{k_{i+1/2}(u_{i+1} - u_i)}{\Delta x^2} - \frac{k_{i-1/2}(u_i - u_{i-1})}{\Delta x^2} \mathcal{O}(\Delta x^2)$$

Dérivées troisièmes

De la même façon on peut construire des schémas pour l'approximation de dérivées troisièmes. On a ainsi

schémas avant

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \right)_i &\equiv (u_{xxx})_i \\ &= \frac{1}{\Delta x^3} (u_{i+3} - 3u_{i+2} + 3u_{i+1} - u_i) - \frac{\Delta x}{2} \left(\frac{\partial^4 u}{\partial x^4} \right) \end{aligned}$$

ou au second ordre

$$= \frac{1}{2\Delta x^3} (-3u_{i+4} + 14u_{i+3} - 24u_{i+2} + 18u_{i+1} - 5u_i) + \frac{21}{12}\Delta x^2 \left(\frac{\partial^5 u}{\partial x^5} \right)$$

schéma arrière

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \right)_i &\equiv (u_{xxx})_i \\ &= \frac{1}{\Delta x^3} (u_i - 3u_{i-1} + 3u_{i-2} - u_{i-3}) + \frac{\Delta x}{2} \left(\frac{\partial^4 u}{\partial x^4} \right) \end{aligned}$$

ou au second ordre

$$= \frac{1}{2\Delta x^3} (5u_i - 18u_{i-1} + 24u_{i-2} - 14u_{i-3} + 3u_{i-4}) - \frac{21}{12}\Delta x^2 \left(\frac{\partial^5 u}{\partial x^5} \right)$$

schéma centré : nœuds milieu

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\right)_i &\equiv (u_{xxx})_i \\ &= \frac{1}{\Delta x^3} (u_{i+3/2} - 3u_{i+1/2} + 3u_{i-1/2} - u_{i-3/2}) - \frac{\Delta x^2}{8} \left(\frac{\partial^5 u}{\partial x^5}\right) \end{aligned}$$

ou au quatrième ordre

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{8\Delta x^3} (-u_{i+5/2} + 13u_{i+3/2} - 34u_{i+1/2} + 34u_{i-1/2} - 13u_{i-3/2} + u_{i-5/2}) \\ &\quad + \frac{37}{1920} \Delta x^4 \left(\frac{\partial^7 u}{\partial x^7}\right) \end{aligned}$$

schéma centré : nœuds entiers

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\right)_i &\equiv (u_{xxx})_i \\ &= \frac{1}{2\Delta x^3} (u_{i+2} - 2u_{i+1} + 2u_{i-1} - u_{i-2}) - \frac{\Delta x^2}{4} \left(\frac{\partial^5 u}{\partial x^5}\right) \end{aligned}$$

ou au quatrième ordre

$$= \frac{1}{8\Delta x^3} (-u_{i+3} + 8u_{i+2} - 13u_{i+1} - 13u_{i-1} - 8u_{i-2} + u_{i-3}) + \frac{7}{120} \Delta x^4 \left(\frac{\partial^7 u}{\partial x^7}\right)$$

4.4 Schémas de différences finies multi-dimensionnels

Les dérivées partielles de fonctions à plusieurs variables s'obtiennent par les formules précédentes, considérées pour chaque variable séparément.

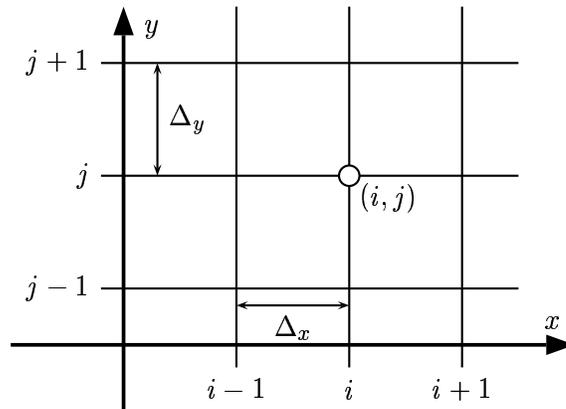


FIG. 4.2: Maillage structuré bi-dimensionnel.

Si le domaine $\Omega \subset \mathbb{R}^2$, on peut définir un maillage rectangulaire, Figure (4.2), formé des points : $x_i = x_0 + i\Delta x$ et $y_j = y_0 + j\Delta y$. On définit alors les valeurs de la fonctions aux nœuds de coordonnées (x_i, y_j) comme $u_{ij} \equiv u(x_i, y_j)$. Tous les schémas définis précédemment peuvent

alors être appliqués soit dans la direction x soit dans la direction y . On peut ainsi définir par exemple des opérateurs δ_x^\pm et δ_y^\pm .

On a ainsi par exemple pour une dérivée partielle d'ordre dans la direction x

$$(u_x)_{ij} \equiv \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_{ij} = \frac{1}{\Delta x} \delta_x^+ u_{ij} + \mathcal{O}(\Delta x) = \frac{u_{(i+1)j} - u_{ij}}{\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x)$$

De la même façon dans la direction y

$$(u_y)_{ij} \equiv \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right)_{ij} = \frac{1}{\Delta y} \delta_y^+ u_{ij} + \mathcal{O}(\Delta y) = \frac{u_{i(j+1)} - u_{ij}}{\Delta y} + \mathcal{O}(\Delta y)$$

et pour un schéma centré d'ordre 2 suivant la direction x

$$(u_{xx})_{ij} \equiv \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_{ij} = \frac{1}{\Delta x^2} \delta_x^2 u_{ij} + \mathcal{O}(\Delta x^2) = \frac{u_{(i+1)j} - 2u_{ij} - u_{(i-1)j}}{\Delta x^2} + \mathcal{O}(\Delta x^2)$$

4.4.1 Schémas de différences finies pour l'opérateur de Laplace

Considérons ici un exemple important : l'opérateur de Laplace à deux dimensions : $\Delta u = u_{xx} + u_{yy}$.

Si l'on applique un schéma centré dans chacune des deux directions, on obtient un opérateur différence à 5-points $\Delta^{(1)}$

$$\begin{aligned} \Delta u_{ij} &= \frac{u_{(i-1)j} - 2u_{ij} + u_{(i+1)j}}{\Delta x^2} + \frac{u_{i(j-1)} - 2u_{ij} - u_{i(j+1)}}{\Delta y^2} + \mathcal{O}(\Delta x^2, \delta y^2) \\ &\equiv \Delta^{(1)} u_{ij} + \mathcal{O}(\Delta x^2, \Delta y^2) \end{aligned}$$

si l'on considère un maillage uniforme $\Delta x = \Delta y$, Figure (4.3), on a le schéma

$$\Delta u_{ij} = \frac{u_{(i+1)j} + u_{(i-1)j} + u_{i(j-1)} + u_{i(j+1)} - 4u_{ij}}{\Delta x^2} - \frac{\Delta x^2}{12} \left(\frac{\partial^4 u}{\partial x^4} + \frac{\partial^4 u}{\partial y^4} \right)$$

En terme d'opérateur, ce schéma à cinq points peut encore s'écrire

$$\Delta^{(1)} u_{ij} = \left(\frac{\delta_x^2}{\Delta x^2} + \frac{\delta_y^2}{\Delta y^2} \right) u_{ij}$$

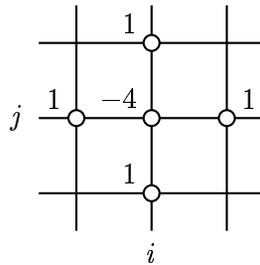
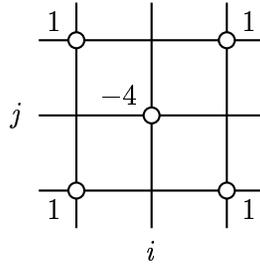


FIG. 4.3: Molécule à 5 points, $\Delta^{(1)}$, pour l'opérateur de Laplace.

FIG. 4.4: Molécule à 5 points, $\Delta^{(2)}$, pour l'opérateur de Laplace.

Ce schéma est de loin le plus utilisé pour l'approximation de l'opérateur de Laplace. Il peut être généralisé pour l'opérateur $\vec{\nabla} \cdot (k \vec{\nabla} u)$

$$\vec{\nabla} \cdot (k \vec{\nabla} u)_{ij} = \frac{1}{\Delta x^2} (\delta_x^+ k_{(i-1/2)j} \delta_x^-) u_{ij} + \frac{1}{\Delta y^2} (\delta_y^+ k_{i(j-1/2)} \delta_y^-) u_{ij} + \mathcal{O}(\Delta x^2, \Delta y^2)$$

D'autres schémas du même ordre sont possibles. Par exemple

$$\Delta^{(2)} = \frac{1}{\Delta x^2} (\mu_y \delta_x)^2 + \frac{1}{\Delta y^2} (\mu_x \delta_y)^2$$

Ce schéma peut être exprimé en terme de l'opérateur E

$$\begin{aligned} \Delta^{(2)} u_{ij} &\equiv \left[\left(\frac{1}{\Delta x} \mu_y \delta_x \right)^2 + \left(\frac{1}{\Delta y} \mu_x \delta_y \right)^2 \right] u_{ij} \\ &= \frac{1}{4\Delta x^2} (E_y + 2 + E_y^{-1}) (E_x - 2 + E_x^{-1}) u_{ij} + \frac{1}{4\Delta y^2} (E_x + 2 + E_x^{-1}) (E_y - 2 + E_y^{-1}) u_{ij} \end{aligned}$$

Si $\Delta x = \Delta y$, on obtient un nouveau schéma 5 points, Figure (4.4)

$$\begin{aligned} \Delta^{(2)} u_{ij} &= \frac{1}{4\Delta x^2} (u_{(i+1)(j+1)} + u_{(i+1)(j-1)} + u_{(i-1)(j-1)} + u_{(i-1)(j+1)} - 4u_{ij}) \\ &\quad - \frac{\Delta x^2}{12} \left(\frac{\partial^4 u}{\partial x^4} + \frac{\partial^4 u}{\partial y^4} \right) \end{aligned}$$

Ce schéma n'est pas en fait recommandé dans la mesure où les nœuds pairs et impairs se trouvent découplés, Figure(4.5a). Si la solution oscille entre deux valeurs a et b suivant la parité du nœud, Figure(4.5b), on obtiendra $\Delta^{(2)} u_{ij} = 0$ alors que clairement cette solution n'est pas physique.

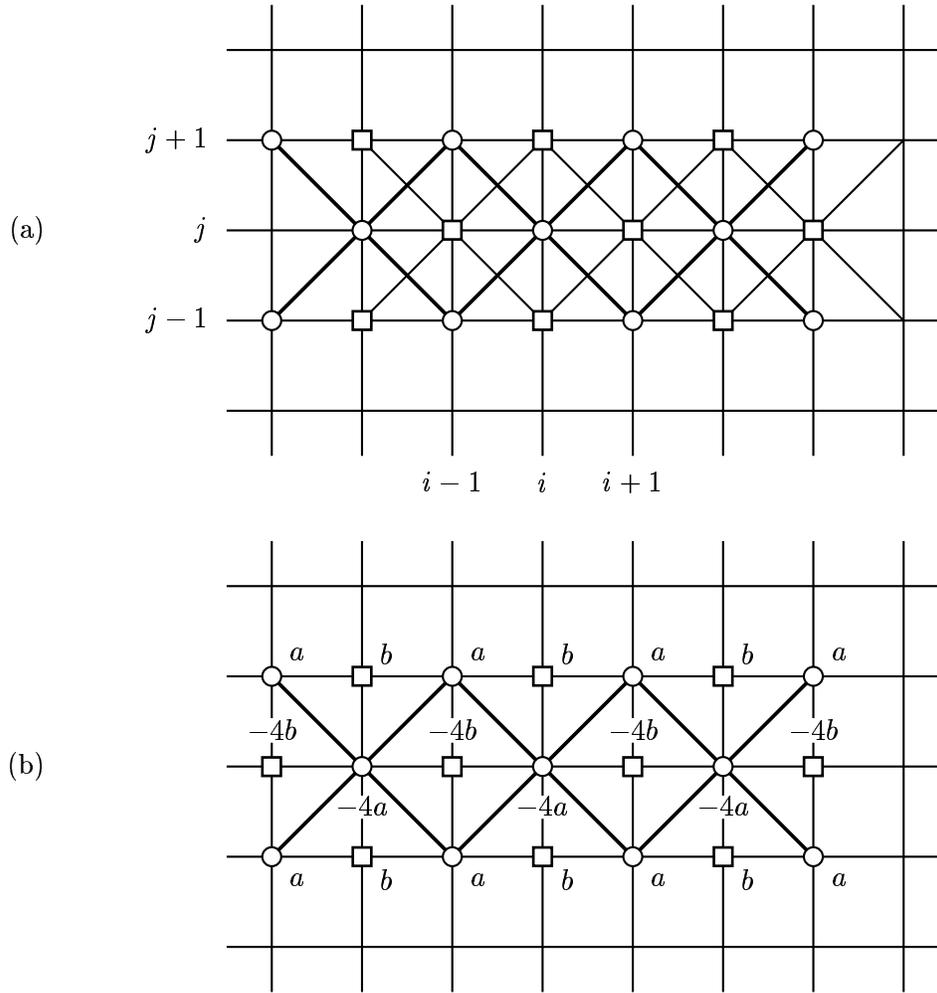


FIG. 4.5: Génération d'oscillations par le schéma 5 points $\Delta^{(2)}$

(a) Le schéma $\Delta^{(2)}$ découple les nœuds pairs et impairs.

(b) Si la solution oscille entre 2 valeurs suivant la parité du nœud, le schéma conduit à une solution non physique $\Delta^{(2)}u = 0$.

On peut définir une famille de schéma à 9 points pour l'opérateur de Laplace sur un maillage uniforme en utilisant la combinaison

$$\Delta^{(3)} = \left(a\Delta^{(1)} + b\Delta^{(2)} \right) u_{ij} \quad \text{avec } a + b = 1$$

En terme d'opérateurs, on obtient

$$\begin{aligned} \Delta^{(3)}u_{ij} &= \frac{1}{\Delta x^2} \left[(\delta_x^2 + \delta_y^2) + \frac{b}{2}\delta_x^2\delta_y^2 \right] u_{ij} \\ &= \Delta^{(1)} + \frac{b}{2}\delta_x^2\delta_y^2 u_{ij} - \frac{\Delta x^2}{12} \left[\frac{\partial^4 u}{\partial x^4} + \frac{\partial^4 u}{\partial y^4} + 6b \frac{\partial^4 u}{\partial x^2 \partial y^2} \right] \end{aligned}$$

Le choix de $b = 2/3$ conduit à un schéma classique en éléments finis pour des éléments quadrilatéraux bilinéaires, Figure (4.6).

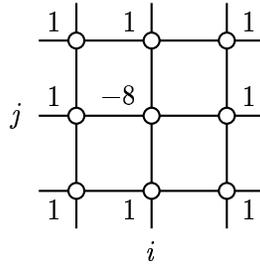


FIG. 4.6: Molécule 9 points $\Delta^{(3)}$ pour l'opérateur de Laplace avec $b = 2/3$.

Pour $b = 1/3$, on obtient un schéma, Figure (4.7), souvent recommandé dans la mesure où l'erreur de troncature est alors égale à

$$-\frac{\Delta x^2}{12} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right)^2 u = -\frac{\Delta x^2}{12} \Delta^2 u$$

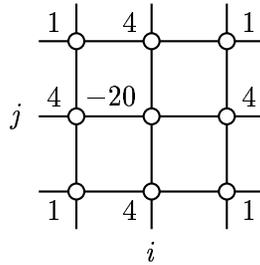


FIG. 4.7: Molécule 9 points $\Delta^{(3)}$ pour l'opérateur de Laplace avec $b = 1/3$.

L'équation $\Delta u = \lambda u$ peut alors être discrétisée par le schéma à 9 points $\Delta^{(3)}$ avec une erreur de troncature $-\frac{\lambda^2 \Delta x^2}{12} u$. Dans ce cas, le schéma corrigé

$$\Delta^{(3)} u_{ij} = \left(\lambda + \frac{\lambda^2 \Delta x^2}{12} \right) u$$

aura une erreur de troncature d'ordre 4

4.4.2 Schémas pour les dérivées mixtes

Les dérivées mixtes d'ordre quelconque peuvent être discrétisées de la même façon en utilisant, pour les opérateurs $D_x = \partial/\partial x$ et $D_y = \partial/\partial y$, les schémas précédents. Le schéma centré, d'ordre 2, le plus simple, Figure (4.8), s'obtient en utilisant

$$\begin{aligned} (u_{xy})_{ij} &= \frac{1}{\Delta x \Delta y} (\mu_x \delta_x \mu_y \delta_y) u_{ij} + \mathcal{O}(\Delta x^2 \Delta y^2) \\ &= \frac{u_{(i+1)(j+1)} - u_{(i+1)(j-1)} - u_{(i-1)(j+1)} + u_{(i-1)(j-1)}}{4\Delta x \Delta y} + \mathcal{O}(\Delta x^2, \Delta y^2) \end{aligned}$$

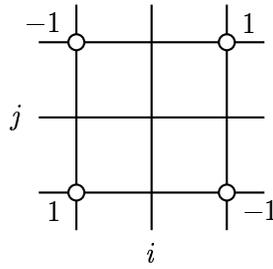


FIG. 4.8: Molécule pour le schéma centré associé à $(u_{xy})_{ij}$.

D'autres combinaisons sont possibles. Par exemple, Figure (4.9) :

$$\begin{aligned} (u_{xy})_{ij} &= \frac{1}{\Delta x \Delta y} (\mu_x \delta_x \delta_y^+) u_{ij} + \mathcal{O}(\Delta x^2, \Delta y) \\ &= \frac{1}{2\Delta x \Delta y} (u_{(i+1)(j+1)} - u_{(i-1)(j+1)} - u_{(i+1)j} + u_{(i-1)j}) + \mathcal{O}(\Delta x^2, \Delta y) \end{aligned}$$

qui est d'ordre 1 en Δy et d'ordre 2 en Δx . Ce schéma est d'ordre 2 pour la dérivée mixte évaluée au point $i(j + 1/2)$. En permutant x et y , on obtient un schéma d'ordre 1 en x et d'ordre 2 en y .

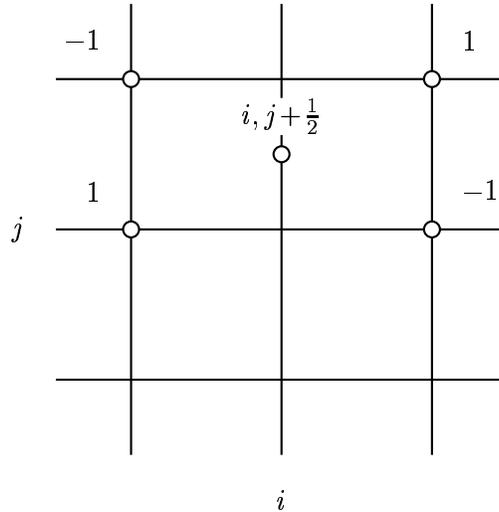


FIG. 4.9: Molécule d'ordre 2 en Δx et d'ordre 1 en Δy . Ce schéma est d'ordre 2 en $i, j + 1/2$.

Un schéma d'ordre 1 en x et y est obtenu en appliquant les opérateurs δ_x^+ et δ_y^+ , Figure (4.10) :

$$\begin{aligned} (u_{xy})_{ij} &= \frac{1}{\Delta x \Delta y} \delta_x^+ \delta_y^+ u_{ij} + \mathcal{O}(\Delta x, \Delta y) \\ &= \frac{1}{\Delta x \Delta y} (u_{(i+1)(j+1)} - u_{(i+1)j} - u_{i(j+1)} + u_{ij}) + \mathcal{O}(\Delta x, \delta y) \end{aligned}$$

Cette même formule donnera un schéma d'ordre 2 pour l'approximation de la dérivée mixte

au point $(i + 1/2), (j + 1/2)$

$$\begin{aligned} (u_{xy})_{(i+1/2)(j+1/2)} &= \frac{1}{\Delta x \Delta y} \delta_x \delta_y u_{(i+1/2)(j+1/2)} + \mathcal{O}(\Delta x^2, \Delta y^2) \\ &= \frac{1}{\Delta x \Delta y} (u_{(i+1)(j+1)} - u_{(i+1)j} - u_{i(j+1)} + u_{ij}) + \mathcal{O}(\Delta x^2, \delta y^2) \end{aligned}$$

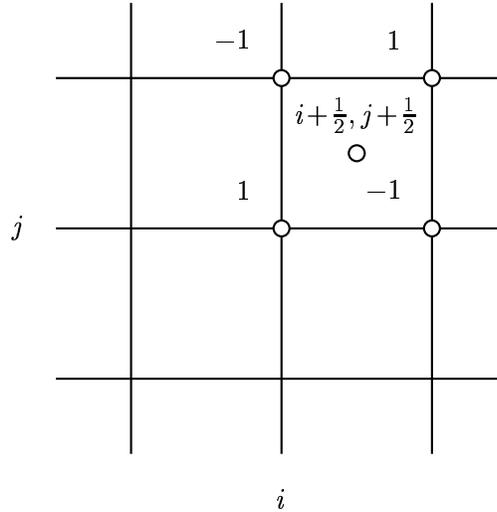


FIG. 4.10: Molécule à 4 points obtenue en appliquant les opérateurs de différences avant en x et y . Le schéma est d'ordre 1 en i, j et d'ordre 2 en $i + 1/2, j + 1/2$.

En appliquant des différences arrières dans les deux directions, on obtient également un schéma d'ordre 1

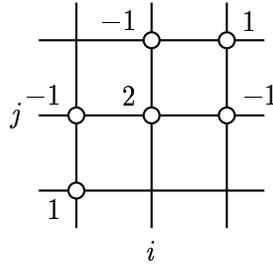
$$\begin{aligned} (u_{xy})_{ij} &= \frac{1}{\Delta x \Delta y} \delta_x^- \delta_y^- u_{ij} + \mathcal{O}(\Delta x, \Delta y) \\ &= \frac{1}{\Delta x \Delta y} (u_{(i-1)(j-1)} - u_{(i-1)j} - u_{i(j-1)} + u_{ij}) + \mathcal{O}(\Delta x, \Delta y) \end{aligned}$$

et un schéma d'ordre 2 au point $(i + 1/2), (j + 1/2)$

$$(u_{xy})_{(i-1/2)(j-1/2)} = \frac{1}{\Delta x \Delta y} \delta_x \delta_y u_{(i-1/2)(j-1/2)} + \mathcal{O}(\Delta x, \Delta y)$$

Du fait que les erreurs de troncature pour les schémas d'ordre 1 avant et arrière sont égales et de signe opposée, on obtient un schéma d'ordre 2 en sommant ces deux schémas, Figure (4.11):

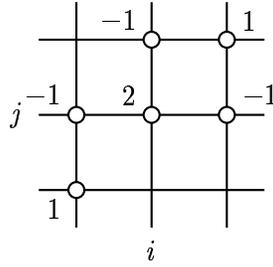
$$\begin{aligned} (u_{xy})_{ij} &= \frac{1}{2\Delta x \Delta y} [\delta_x^+ \delta_y^+ + \delta_x^- \delta_y^+] + \mathcal{O}(\Delta x^2, \Delta y^2) \\ &= \frac{1}{2\Delta x \Delta y} (u_{(i+1)(j+1)} - u_{(i+1)j} - u_{i(j+1)} + u_{(i-1)(j-1)} - u_{(i-1)j} - u_{i(j-1)} + 2u_{ij}) \\ &\quad + \mathcal{O}(\Delta x^2, \Delta y^2) \\ &= \frac{1}{2\Delta x \Delta y} \delta_x \delta_y (u_{(i+1/2)(j+1/2)} + u_{(i-1/2)(j-1/2)}) + \mathcal{O}(\Delta x^2, \Delta y^2) \end{aligned}$$

FIG. 4.11: Schéma d'ordre 2 pour la dérivée mixte en $(u_{xy})_i$.

Ce schéma, à la différence du schéma centré, a un coefficient non nul pour u_{ij} . Il peut être avantageux dans certains cas de renforcer le poids du coefficient de u_{ij} dans les équations algébriques du système discret, c'est à dire de renforcer le poids de la diagonale de la matrice associée au système algébrique.

Un autre schéma peut être obtenu en combinant cette fois des différences avant et arrière, ce qui donne un nouveau schéma d'ordre 2, Figure (4.12) :

$$\begin{aligned}
 (u_{xy})_{ij} &= \frac{1}{2\Delta x \Delta y} [\delta_x^+ \delta_y^- + \delta_x^- \delta_y^+] + \mathcal{O}(\Delta x^2, \Delta y^2) \\
 &= \frac{1}{2\Delta x \Delta y} (u_{(i+1)j} - u_{(i+1)(j-1)} + u_{i(j+1)} + u_{i(j-1)} - u_{(i-1)(j+1)} + u_{(i-1)j} - 2u_{ij}) \\
 &\quad + \mathcal{O}(\Delta x^2, \Delta y^2) \\
 &= \frac{1}{2\Delta x \Delta y} \delta_x \delta_y (u_{(i+1/2)(j-1/2)} + u_{(i-1/2)(j+1/2)}) + \mathcal{O}(\Delta x^2, \Delta y^2)
 \end{aligned}$$

FIG. 4.12: Schéma d'ordre 2 pour la dérivée mixte en $(u_{xy})_i$ obtenu par combinaison de différences avant et arrière.

On peut remarquer qu'en additionnant les deux derniers schémas, on retrouve le schéma centré d'ordre 2. On peut ainsi définir une famille générale de schémas d'ordre 2 pour la dérivée mixte comme une combinaison linéaire des deux derniers schémas

$$\begin{aligned}
 (u_{xy})_{ij} &= \frac{1}{2\Delta x \Delta y} \delta_x \delta_y [a (u_{(i+1/2)(j+1/2)} + u_{(i-1/2)(j-1/2)}) \\
 &\quad + b (u_{(i+1/2)(j-1/2)} + u_{(i-1/2)(j+1/2)})] + \mathcal{O}(\Delta x^2, \Delta y^2)
 \end{aligned}$$

avec la condition de consistance

$$a + b = 1$$

4.5 Éléments de généralisation pour des grilles non uniformes

Pour des grilles non uniformes, ou curvilignes, la discrétisation des équations peut être faite après transformation globale de l'espace physique (x, y, z) dans un espace cartésien de travail (ξ, η, ζ) , Figure (4.13). Les relations entre ces deux espaces sont définies à partir de simples formules de transformation de coordonnées $\xi = \xi(x, y, z)$, de même pour η et ζ . De sorte que tous les schémas précédents peuvent être appliqués pour les équations écrites en coordonnées curvilignes.

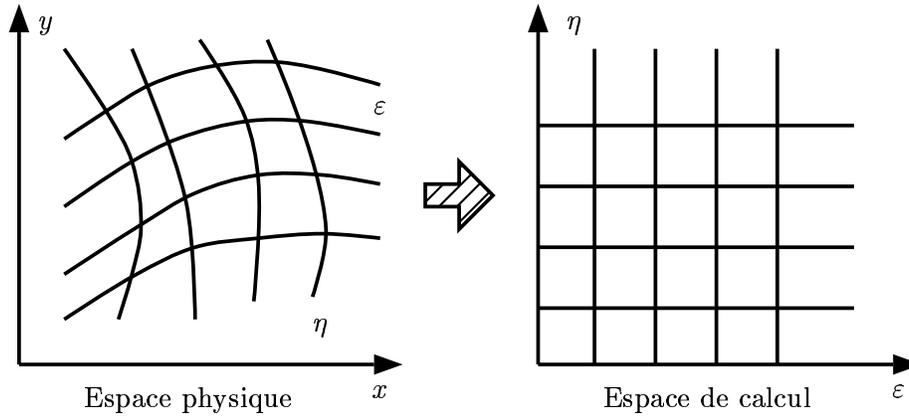


FIG. 4.13: *Grille curviligne.*

Ces équations contiennent alors des coefficients de la métrique associée qui doivent être discrétisés de manière consistante. Une telle procédure permet d'étendre la technique des différences finies à des géométries plus réalistes. La restriction majeure est ici que la transformation doit être définie de manière globale et que, pour chacune des directions de l'espace, les points de discrétisation doivent se localiser sur des familles de lignes qui ne s'intersectent pas. Cela restreint la discrétisation spatiale à des maillages de type structuré.

Si l'on considère seulement le cas d'un maillage cartésien non uniforme, Figure (4.14), on peut déjà avoir un aperçu de l'influence du maillage dans la formulation des schémas de différences finies.

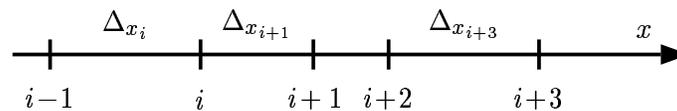


FIG. 4.14: *Grille non uniforme.*

Pour une distribution non uniforme de points x_i , sur l'axe x , on a pour le schéma avant

$$(u_x)_i = \frac{u_{i+1} - u_i}{\Delta x_{i+1}} - \frac{\Delta x_{i+1}}{2} u_{xx}$$

et pour le schéma arrière

$$(u_x)_i = \frac{u_i - u_{i-1}}{\Delta x_i} + \frac{\Delta x_i}{2} u_{xx}$$

où

$$\Delta x_i = x_i - x_{i-1}$$

Pour le schéma de différence centrée, d'ordre 2

$$(u_x)_i = \frac{1}{\Delta x_i + \Delta x_{i+1}} \left[\frac{\Delta x_i}{\Delta x_{i+1}} (u_{i+1} - u_i) + \frac{\Delta x_{i+1}}{\Delta x_i} (u_i - u_{i-1}) \right] - \frac{\Delta x_i \Delta_{i+1}}{6} u_{xxx}$$

Pour les dérivées secondes, on peut également généraliser le schéma centré à trois points

$$(u_{xx})_i = \left(\frac{u_{i+1} - u_i}{\Delta x_{i+1}} - \frac{u_i - u_{i-1}}{\Delta x_i} \right) \frac{2}{\Delta x_{i+1} + \Delta x_i} + \frac{1}{3} (\Delta x_{i+1} - \Delta x_i) u_{xxx} - \frac{\Delta_{i+1}^3 + \Delta x_i^3}{12(\Delta_{i+1} + \Delta x_i)} \left(\frac{\partial^4 u}{\partial x^4} \right)$$

Remarque 36. *Il est important de noter dans l'erreur de troncature un terme proportionnel à la différence entre deux pas de grille consécutifs Δx_{i+1} et Δx_i . Si la pas de discrétisation varie brutalement, par exemple $\Delta x_{i+1} \approx 2\Delta x_i$, le schéma précédent sera seulement du premier ordre. C'est une propriété très générale des schémas de différences finies sur des grilles non uniformes. Lorsque le pas de discrétisation ne varie pas continuellement une perte de précision est inévitable.*