

Schémas numériques implicites pour les équations semi-différentielles.

FRANÇOIS DUBOIS^{*} ET STÉPHANIE MENGUÉ[□]

06 juin 2000[†]

RÉSUMÉ

Nous proposons dans ce mémoire quatre schémas numériques aux différences finies pour approcher les équations semi-différentielles ordinaires d'ordre un demi, c'est à dire de la forme $(D^{1/2} u)(t) = \Phi(u(t), t)$. Une première idée utilise les racines carrées formelles d'opérateurs aux différences finies et une seconde la représentation intégrale et les méthodes classiques de quadrature. Nous détaillons les calculs algébriques et les algorithmes nécessaires à la mise en œuvre numérique sur ordinateur. Nous mettons en évidence les ordres de convergence pour les erreurs maximale et en moyenne quadratique dans divers cas où la dynamique est donnée par une fonction puissance.

PLAN

- 1) Introduction
- 2) Extraction de racines carrées d'opérateurs
- 3) Quadrature et éléments finis
- 4) Tests élémentaires
- 5) Conclusion
- 6) Références bibliographiques

^{*} fdubois@cnam.fr, Conservatoire National des Arts et Métiers, 15 rue Marat, F-78 210 Saint Cyr l'École et laboratoire "Applications Scientifiques du Calcul Intensif", bâtiment 506, BP 167, F-91403 Orsay, Europe.

[□] smengue@univ-mlv.fr, Université de Marne-La-Vallée, Laboratoire Systèmes de Communication, 5, boulevard Descartes, Champs sur Marne, F-77454 Marne-La-Vallée Cedex 2, Europe.

[†] Note IAT 334-2000 de l'Institut Aérotechnique, édition 30 mai 2010.

1) INTRODUCTION.

• Soit $u(\bullet)$ une fonction de \mathbb{R} dans \mathbb{R} causale, c'est à dire nulle sur l'intervalle $] -\infty, 0]$:

$$(1.1) \quad u(t) \equiv 0 \quad \text{si } t \leq 0$$

qu'on suppose pour fixer les idées continue sur la droite réelle, mais on devrait à ce niveau faire des hypothèses mathématiques plus précises, avec un espace fonctionnel du type $H_{00}^{1/2}([0, \infty[)$ (voir par exemple Lions-Magenes [LM68]). On cherche à approcher numériquement la solution de l'équation semi-différentielle

$$(1.2) \quad (D^{1/2} u)(t) = \Phi(u(t), t), \quad t > 0$$

$$(1.3) \quad u(0) = 0$$

où $\Phi : \mathbb{R} \times]0, \infty[\ni (v, t) \mapsto \Phi(v, t) \in \mathbb{R}$ est une fonction assez régulière et $D^{1/2}$ l'opérateur de dérivation d'ordre un demi, qui est une convolution définie par la relation suivante (voir par exemple Lighthill [Li78], page 21) :

$$(1.4) \quad (D^{1/2} u)(t) = \int_0^t \frac{du}{ds} \frac{ds}{\sqrt{\pi(t-s)}} .$$

• Notre vision du problème (1.1)-(1.2) est celle d'un **système dynamique** piloté par l'équation semi-différentielle (1.2) ; la connaissance de l'ensemble du passé de l'instant t permet de connaître le futur, donc de découvrir petit à petit la solution $u(\bullet)$ comme fonction causale du temps.

• Nous étudions dans ce mémoire divers schémas aux différences finies pour approcher l'équation (1.2) (1.3). Nous fixons un pas de temps $h > 0$ et au lieu de chercher $u(t)$ pour toutes les valeurs du paramètre réel t , nous cherchons à approcher la fonction $u(\bullet)$ aux points multiples entiers du pas h :

$$(1.5) \quad t^k = kh, \quad k \in \mathbb{N}, \quad h > 0 \text{ fixé.}$$

$$(1.6) \quad u^k \approx u(t^k).$$

Une première méthode consiste à discrétiser directement la relation de convolution (1.4). Ce type d'algorithme est développé dans l'ouvrage classique de Oldham et Spanier sur le calcul fractionnaire [OS74] et nous y renvoyons le lecteur.

• Nous développons dans cette note deux méthodes aux différences finies pour approcher numériquement l'équation semi-différentielle (1.2) (1.3). L'une est liée à la propriété que la dérivée d'ordre un demi est, en un certain sens, la **racine carrée** de la dérivée usuelle. En effet, quand on itère deux fois la dérivée d'ordre un demi, on trouve la dérivée usuelle :

$$(1.7) \quad \left(D^{1/2}(D^{1/2} u) \right)(t) \equiv \frac{du}{dt}, \quad t > 0.$$

L'autre méthode s'appuie sur un raisonnement par introduction d'une **représentation intégrale** suivi d'un calcul approché avec diverses formules de quadrature

appropriées pour définir des schémas aux différences (voir par exemple le livre de Hairer, Nørstett et Wanner [HNW87]).

2) EXTRACTION DE RACINES CARRÉES D'OPÉRATEURS.

• Soit $u(\bullet)$ une fonction causale, que nous supposons, comme aux relations (1.5) (1.6), connue seulement en ses valeurs discrètes u^k aux points t^k ($k \in \mathbb{N}$). Nous approchons la dérivée première de $u(\bullet)$ au point t^k par le schéma aux différences décentré amont $(D^-u)^k$ précis au premier ordre en espace

$$(2.1) \quad (D^-u)^k = \frac{1}{h} (u^k - u^{k-1}), \quad k \in \mathbb{Z}$$

ou bien par un schéma décentré $(D^{--}u)^k$ vers le passé (pour respecter la causalité), précis au second ordre en espace mais à trois points :

$$(2.2) \quad (D^{--}u)^k = \frac{1}{h} \left(\frac{3}{2} u^k - 2 u^{k-1} + \frac{1}{2} u^{k-2} \right), \quad k \in \mathbb{N}.$$

On utilise la relation (1.7) pour chercher à approcher l'expression $(D^{1/2}u)(t^k)$ par un schéma aux différences finies $(\Delta^{1/2}u)^k$ de la forme :

$$(2.3) \quad (\Delta^{1/2}u)^k \equiv \frac{1}{\sqrt{h}} \sum_{j=0}^{\infty} \alpha_j u^{k-j}$$

sachant que la somme au second membre de la relation (2.3) n'est pas une série puisqu'un nombre fini seulement d'indices $k-j$ sont non nuls. L'idée est donc de chercher les coefficients $(\alpha_j)_{j \in \mathbb{N}}$ de façon à satisfaire un analogue discret de la relation (1.7) :

$$(2.4) \quad \left(\Delta^{1/2}(\Delta^{1/2}u) \right)(t^k) \equiv Du^k, \quad \forall k \in \mathbb{N}$$

où D désigne l'un des deux opérateurs aux différences D^- et D^{--} .

• On calcule avec soin le membre de gauche de la relation (2.4), compte tenu de la relation (2.3). Il vient :

$$\begin{aligned} h \left(\Delta^{1/2}(\Delta^{1/2}u) \right)(t^k) &= \sum_{j=0}^{\infty} \alpha_j \sqrt{h} (\Delta^{1/2}u)^{k-j} = \sum_{j=0}^{\infty} \alpha_j \sum_{l=0}^{\infty} \alpha_l u^{k-j-l} \\ &= \sum_{p=0}^{\infty} \left(\sum_{j+l=p} \alpha_j \alpha_l \right) u^{k-p}. \end{aligned}$$

L'équation à résoudre pour déterminer le schéma (2.3) porte sur les coefficients α_j . Dans le cas où l'on prend $D = D^-$, on a le système suivant :

$$(2.5) \quad \begin{cases} (\alpha_0^-)^2 & = 1 \\ 2 \alpha_0^- \alpha_1^- & = -1 \\ \sum_{l=0}^j \alpha_l^- \alpha_{j-l}^- & = 0, \quad j \geq 2 \end{cases}$$

et lorsque $D = D^{--}$, l'équation (2.4) s'écrit :

$$(2.6) \quad \begin{cases} (\alpha_0^{--})^2 & = 3/2 \\ 2 \alpha_0^{--} \alpha_1^{--} & = -2 \\ 2 \alpha_0^{--} \alpha_2^{--} + (\alpha_1^{--})^2 & = 1/2 \\ \sum_{l=0}^j \alpha_l^{--} \alpha_{j-l}^{--} & = 0, \quad j \geq 3. \end{cases}$$

Il semble naturel de choisir $\alpha_0 > 0$ mais le fait de changer cette condition en $\alpha_0 < 0$ modifie tous les signes des coefficients, ce qui n'est pas incompatible avec la relation (2.3). La résolution des systèmes (2.5) et (2.6) se fait de proche en proche. On trouve facilement pour (2.5) :

$$(2.7) \quad \alpha_0^- = 1, \quad \alpha_1^- = -\frac{1}{2}, \quad \alpha_2^- = -\frac{1}{8}, \quad \alpha_3^- = -\frac{1}{16}, \quad \alpha_4^- = -\frac{5}{128}, \dots$$

et pour le système (2.6), il vient avec un peu plus d'effort :

$$(2.8) \quad \alpha_0^{--} = \sqrt{\frac{3}{2}}, \quad \alpha_1^{--} = -\sqrt{\frac{2}{3}}, \quad \alpha_2^{--} = -\frac{1}{6}\sqrt{\frac{1}{6}}, \quad \alpha_3^{--} = -\frac{1}{18}\sqrt{\frac{2}{3}}, \dots$$

De façon générale, comme les dernières relations de (2.5) et (2.6) sont identiques, on a, si la lettre α désigne indifféremment α_2^- ou α_2^{--} et pour i entier supérieur ou égal à un :

$$(2.9) \quad \begin{cases} \alpha_0 \alpha_{2i+1} & = - \sum_{k=1}^i \alpha_k \alpha_{2i+1-k}, \quad i \geq 1 \\ \alpha_0 \alpha_{2i} & = - \sum_{k=1}^{i-1} \alpha_k \alpha_{2i-k} - \frac{1}{2} (\alpha_i)^2, \quad i \geq 2. \end{cases}$$

• On peut aussi, suivant la démarche utilisée par Oustaloup [Ou95], introduire l'opérateur de retard discret δ^- :

$$(2.10) \quad (\delta^- u)^k = u^{k-1}, \quad k \in \mathbb{Z}$$

qui permet d'écrire les opérateurs aux différences finies D^- et D^{--} sous la forme :

$$(2.11) \quad \begin{cases} D^- & = \frac{1}{h} (\text{Id} - \delta^-) \\ D^{--} & = \frac{1}{h} \left(\frac{3}{2} \text{Id} - 2\delta^- + \frac{1}{2} (\delta^-)^2 \right). \end{cases}$$

L'unicité du développement en série formelle montre qu'alors les opérateurs

$$(2.12) \quad (\Delta^{1/2-} u)^k \equiv \frac{1}{\sqrt{h}} \sum_{j=0}^{\infty} \alpha_j^- u^{k-j}$$

et

$$(2.13) \quad (\Delta^{1/2--} u)^k \equiv \frac{1}{\sqrt{h}} \sum_{j=0}^{\infty} \alpha_j^{--} u^{k-j}$$

sont égaux aux racines carrées formelles des deux relations (2.11), c'est à dire

$$(2.14) \quad \Delta^{1/2-} = \frac{1}{\sqrt{h}} \left(\text{Id} - \frac{1}{2} \delta^- - \dots - \frac{1}{k!} \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + 1 \right) \dots \left(\frac{1}{2} + k - 2 \right) (\delta^-)^k + \dots \right)$$

$$(2.15) \quad \Delta^{1/2--} = \sqrt{\frac{3}{2h}} \sqrt{\left(\text{Id} - \frac{4}{3} \delta^- + \frac{1}{3} (\delta^-)^2 \right)}$$

$$(2.16) \quad \Delta^{1/2--} = \sqrt{\frac{3}{2h}} \left(\text{Id} - \frac{2}{3} \delta^- - \frac{1}{18} (\delta^-)^2 + \dots \right)$$

et ce résultat est bien cohérent avec les relations (2.7) et (2.8).

• Dans ce paragraphe, nous avons proposé de discrétiser le système d'équations semi-différentielles (1.2)-(1.3) par différences finies associées à l'extraction de racines carrées d'opérateurs aux différences finies (2.1) et (2.2) à l'aide de l'une des deux relations algébriques suivantes :

$$(2.17) \quad \frac{1}{\sqrt{h}} \left(u^j - \frac{1}{2} u^{j-1} + \dots + \alpha_k^- u^{j-k} + \dots + \alpha_{j-1}^- u^1 \right) = \Phi(u^j, j \Delta t)$$

$$(2.18) \quad \frac{1}{\sqrt{h}} \left(\sqrt{\frac{3}{2}} u^j - \sqrt{\frac{2}{3}} u^{j-1} + \dots + \alpha_k^{--} u^{j-k} + \dots + \alpha_{j-1}^{--} u^1 \right) = \Phi(u^j, j \Delta t)$$

où α_k^- et α_k^{--} sont, pour k entier supérieur ou égal à 1, calculés avec les relations (2.5) à (2.9). Pour chacun de ces schémas, il est nécessaire de résoudre une équation d'inconnue u^j de la forme

$$(2.19) \quad \alpha_0 u^j - \Phi(u^j, j \Delta t) = \rho^j$$

où ρ^j est une fonction donnée des variables $u^0 = 0, u^1, \dots, u^{j-1}$. Pour cette raison, les deux schémas (2.17) et (2.18) sont dits "implicites".

3) QUADRATURE ET ÉLÉMENTS FINIS.

• La seconde méthode numérique consiste à intégrer l'équation semi-différentielle "une demi fois", c'est à dire d'écrire à la place des équations (1.2) (1.3) l'équation équivalente (voir par exemple [OS74]) :

$$(3.1) \quad u(t) = I^{1/2} \left(\Phi(u(t)), t \right)$$

où $I^{1/2}$ est l'opérateur de semi-intégration des fonctions vérifiant la propriété (1.1), c'est à dire :

$$(3.2) \quad I^{1/2} (v(\bullet), t) = \int_0^t v(s) \frac{ds}{\sqrt{\pi(t-s)}},$$

avec $v(s) = \Phi(u(s), s)$. L'idée développée avec R. Msallam pour l'étude de l'interaction dans un trombone du fluide parfait monodimensionnel avec une couche limite acoustique [MD99] est d'approcher la semi-intégrale $I^{1/2} (v(\bullet), t^k)$ à l'aide des nombres $v(t^j)_{j \in \mathbb{N}}$ en découpant l'intégrale au second membre de la relation (3.2) à l'aide du pas h . On écrit donc simplement

$$(3.3) \quad I^{1/2} (v(\bullet), t^k) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sum_{j=1}^k \int_{(j-1)h}^{jh} v(s) \frac{ds}{\sqrt{(t^k - s)}}$$

puis on approche chaque intégrale au second membre de la relation (3.3) à l'aide d'une formule de quadrature à deux points, c'est à dire

$$(3.4) \quad \int_a^b \frac{v(s)}{\sqrt{t-s}} ds \approx \frac{1}{2} (v(a) + v(b)) \int_a^b \frac{1}{\sqrt{t-s}} ds.$$

On pose alors $v^j \approx v(jh)$ et on a le calcul élémentaire suivant :

$$\begin{aligned} I^{1/2} (v(\bullet), t^k) &\approx \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sum_{j=1}^k \frac{1}{2} (v^{j-1} + v^j) \int_{(j-1)h}^{jh} \frac{1}{\sqrt{kh-s}} ds \\ &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sum_{j=1}^k (v^{j-1} + v^j) \left[-\sqrt{kh-s} \right]_{(j-1)h}^{jh} \\ &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sum_{j=1}^k (v^{j-1} + v^j) \left(\sqrt{k-j+1} - \sqrt{k-j} \right) \sqrt{h} \\ &= \sqrt{\frac{h}{\pi}} \left[(\sqrt{k} - \sqrt{k-1}) v^0 + \sum_{j=1}^{k-1} (\sqrt{k-j+1} - \sqrt{k-j-1}) v^j + v^k \right]. \end{aligned}$$

On vient de mettre en évidence la formule de quadrature :

$$(3.5) \quad I^{1/2} (v(\bullet), t^k) \approx \sum_{j=0}^k \beta_{k,j} v^j$$

avec

$$(3.6) \quad \begin{cases} \beta_{k,0} = \sqrt{\frac{h}{\pi}} (\sqrt{k} - \sqrt{k-1}) \\ \beta_{k,j} = \sqrt{\frac{h}{\pi}} (\sqrt{k-j+1} - \sqrt{k-j-1}), \quad 1 \leq j \leq k-1 \\ \beta_{k,k} = \sqrt{\frac{h}{\pi}}. \end{cases}$$

• L'idée d'un schéma implicite de type de Crank-Nicolson consiste à écrire une formule de quadrature approché de l'intégrale (ici $I^{1/2}(v(\bullet), t^k)$) et à procéder par récurrence. On pose

$$(3.7) \quad u^0 = 0$$

et on suppose, pour k entier fixé supérieur ou égal à un, que l'on a calculé les valeurs approchées u^0, u^1, \dots, u^{k-1} . On cherche alors $u^k \in \mathbb{R}$ de sorte que

$$(3.8) \quad u^k = \sum_{j=0}^k \beta_{k,j} \Phi(u^j, j\Delta t).$$

L'équation (3.8) a pour inconnue la variable u^k ; elle est implicite et peut être écrite sous la forme

$$(3.9) \quad u^k - \beta_{k,k} f(u^k, k\Delta t) = \sum_{j=0}^{k-1} \beta_{k,j} \Phi(u^j, j\Delta t).$$

La résolution de l'équation (3.9) est menée avec un algorithme de Newton, initialisé avec la valeur au pas de temps précédent, c'est à dire u^{k-1} .

• Une seconde méthode plus précise est analogue à la méthode décrite dans le paragraphe précédent mais au lieu de chercher la fonction discrétisée $v(\bullet)$ par l'intermédiaire de ses valeurs nodales sans travailler particulièrement l'interpolation dans chaque intervalle (relation (3.4)), on cherche une fonction $\tilde{v}(\bullet)$ approchée sur la grille $\{lh, l \geq 0\}$ par des éléments finis continus affines dans chaque intervalle (éléments finis P_1 dans la nomenclature usuelle, voir par exemple le livre de Raviart et Thomas [RT83]) :

$$(3.10) \quad \tilde{v}(t) = \sum_{l \geq 0} v^l \varphi_l(t)$$

avec

$$(3.11) \quad \begin{cases} \varphi_0(t) = \begin{cases} 1 - t/h & \text{si } 0 \leq t \leq h \\ 0 & \text{si } t \geq h \end{cases} \\ \varphi_l(t) = \begin{cases} \frac{t - (l-1)h}{h} & \text{si } (l-1)h \leq t \leq lh, \\ \frac{(l+1)h - t}{h} & \text{si } lh \leq t \leq (l+1)h \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases} \end{cases}$$

L'intégrale $I^{1/2}(\tilde{v}(\bullet), t^k)$ se découpe avec les fonctions de forme des éléments finis P_1 :

$$\begin{aligned} I^{1/2}(\tilde{v}(\bullet), t^k) &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{kh} \left[\sum_{l \geq 0} v^l \varphi_l(s) \right] \frac{ds}{\sqrt{kh-s}} \\ &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sum_{l=0}^k v^l \int_0^{kh} \varphi_l(s) \frac{ds}{\sqrt{kh-s}}. \end{aligned}$$

On pose donc

$$(3.12) \quad \gamma_{k,l} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{kh} \varphi_l(s) \frac{ds}{\sqrt{kh-s}}, \quad 0 \leq l \leq k$$

et le schéma aux différences pour le système (1.2) (1.3) s'écrit de façon analogue à celui obtenu à la relation (3.9) :

$$(3.13) \quad u^k - \gamma_{k,k} \Phi(u^k, k\Delta t) = \sum_{l=0}^{k-1} \gamma_{k,l} \Phi(u^l, l\Delta t)$$

si on suppose que la fonction $\mathbb{R} \ni t \mapsto f(u(t), t) \in \mathbb{R}$ a été approchée par éléments finis P_1 à partir des valeurs u^l en $t^l = lh$.

• Il reste à effectuer le calcul des coefficients $\gamma_{k,l}$ pour $0 \leq l \leq k$. On pose d'abord

$$(3.14) \quad a_{k,l} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{(l-1)h}^{lh} \frac{t - (l-1)h}{h} \frac{dt}{\sqrt{kh-t}}, \quad 1 \leq l \leq k,$$

$$(3.15) \quad b_{k,l} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{lh}^{(l+1)h} \frac{(l+1)h - t}{h} \frac{dt}{\sqrt{kh-t}}, \quad 0 \leq l \leq k-1.$$

Il vient après quelque algèbre élémentaire :

$$(3.16) \quad a_{k,l} = \frac{2}{3} \sqrt{\frac{h}{\pi}} \left(2(k-l+1) \sqrt{k-l+1} - (3+2(k-l)) \sqrt{k-l} \right)$$

$$(3.17) \quad b_{k,l} = \frac{2}{3} \sqrt{\frac{h}{\pi}} \left((3-2(k-l)) \sqrt{k-l} + 2(k-l-1) \sqrt{k-l-1} \right)$$

et on en déduit :

$$(3.18) \quad \left\{ \begin{array}{l} \gamma_{k,0} = b_{k,0} = \frac{2}{3} \sqrt{\frac{h}{\pi}} \left((3-2k)\sqrt{k} + 2(k-1)\sqrt{k-1} \right) \\ \gamma_{k,l} = a_{k,l} + b_{k,l}, \quad 1 \leq l \leq k-1 \\ \quad = \frac{4}{3} \sqrt{\frac{h}{\pi}} \left((k-l-1)^{3/2} - 2(k-l)^{3/2} + (k-l+1)^{3/2} \right) \\ \gamma_{k,k} = a_{k,k} = \frac{4}{3} \sqrt{\frac{h}{\pi}}. \end{array} \right.$$

• Quand on utilise une formule de quadrature pour discrétiser l'équation semi-différentielle (1.2)-(1.3) sous la forme d'une équation semi-intégrale (3.1), on obtient un schéma numérique qui s'écrit sous la forme implicite

$$(3.19) \quad u^j - \theta_j \Phi(u^j, j\Delta t) = \rho^j.$$

Dans la relation (3.19), le coefficient θ_j est calculé à l'aide de la relation $\theta_j = \beta_{j,j}$ si on utilise le schéma de Msallam (relations (3.6) et (3.9)) et $\theta_j = \gamma_{j,j}$ si on utilise le schéma par éléments finis P_1 (relations (3.13) et (3.18)). D'autre part, le second membre ρ^j , est égal au membre de droite de la relation (3.9) dans le cas du schéma de Msallam et au membre de droite de (3.18) pour les éléments finis P_1 . Il est fonction uniquement des valeurs u^0, u^1, \dots, u^{j-1} aux instants discrets précédents l'instant t^j .

4) TESTS ÉLÉMENTAIRES.

• On choisit une dynamique $(u, t) \mapsto \Phi(u, t)$ paramétrée par les fonctions $u \mapsto f(u)$ et $t \mapsto g(t)$ et les paramètres réels θ_f et θ_g :

$$(4.1) \quad \Phi(u, t) = \theta_f f(u) + \theta_g g(t).$$

Nous choisissons les deux paramètres numériques θ_f et θ_g de façon que la solution du problème (1.2)(1.3)(4.1) conduise toujours à l'une des cinq fonctions $t \mapsto u_j(t)$, ($j = 1, \dots, 5$) suivantes :

$$(4.2) \quad u_1(t) = \sqrt{t} \quad t > 0$$

$$(4.3) \quad u_2(t) = t \quad t > 0$$

$$(4.4) \quad u_3(t) = t\sqrt{t} \quad t > 0$$

$$(4.5) \quad u_4(t) = t^2 \quad t > 0$$

$$(4.6) \quad u_5(t) = t^2 \sqrt{t} \quad t > 0.$$

• Dans une première approche (paragraphe a), nous prenons $\theta_f = 0$ et $\theta_g = 1$ et le calcul à effectuer est une simple semi-quadrature. On choisit donc en conséquence les fonctions $t \mapsto g_j(t)$, ($j = 1, \dots, 5$) suivantes :

$$(4.7) \quad g_1(t) = \frac{1}{2} \sqrt{\pi}$$

$$(4.8) \quad g_2(t) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sqrt{t}$$

$$(4.9) \quad g_3(t) = \frac{3}{4} \sqrt{\pi} t$$

$$(4.10) \quad g_4(t) = \frac{8}{3\sqrt{\pi}} t \sqrt{t}$$

$$(4.11) \quad g_5(t) = \frac{15}{16} \sqrt{\pi} t^2.$$

• Dans une seconde approche (paragraphe b), nous prenons $\theta_f = 1$ et $\theta_g = 0$. L'équation (1.2) (4.1) est alors un véritable système dynamique associé aux cinq fonctions $u \mapsto f_j(u)$, ($j = 1, \dots, 5$) suivantes :

$$(4.12) \quad f_1(u) = \frac{1}{2} \sqrt{\pi}$$

$$(4.13) \quad f_2(u) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sqrt{u}$$

$$(4.14) \quad f_3(u) = \frac{3}{4} \sqrt{\pi} u^{2/3}$$

$$(4.15) \quad f_4(u) = \frac{8}{3\sqrt{\pi}} u^{3/4}$$

$$(4.16) \quad f_5(u) = \frac{15}{16} \sqrt{\pi} u^{4/5}.$$

• Enfin, nous proposons au paragraphe c) de tester une dynamique plus complexe avec des paramètres θ_f et θ_g différents de 0 et 1. Afin de retrouver comme solution de (2.1) (4.1) les cinq fonctions $t \mapsto u_j(t)$, proposées aux relations (4.2) à (4.6), il suffit de prendre $\theta_f + \theta_g = 1$ au sein de la relation (4.1), ainsi que le montre le calcul suivant :

$$\begin{aligned} D^{1/2} u_j &= \theta_f D^{1/2} u_j + \theta_g D^{1/2} u_j \\ &= \theta_f f_j(u_j(t)) + \theta_g g_j(t) \\ &= \Phi_j(u_j(t), t). \end{aligned}$$

• Nous avons mesuré les erreurs e_2^n en norme L^2 et e_∞^n en norme L^∞ pour les quatre schémas numériques (2.17) d'extraction de la racine carrée du schéma aux différences finies à deux points, (2.18) d'extraction de racine carrée du schéma à trois points, (3.9) de quadrature approchée proposé avec Msallam et (3.13) par éléments finis P_1 . Nous avons effectué les cinq tests définis ci-dessus avec des pas de maillage h de la forme $1/2^n$ et les mesures d'ordres de convergence sont définis comme suit :

$$(4.17) \quad h = \frac{1}{2^n}, \quad n \in \{3, 4, \dots, 13\}$$

$$(4.18) \quad e_2^n = \sqrt{h} \sqrt{\frac{1}{2}|u(0) - u^0|^2 + \sum_{j=1}^{2^n-1} |u(jh) - u^j|^2 + \frac{1}{2}|u(2^n h) - u^{2^n}|^2}$$

$$(4.19) \quad e_\infty^n = \max \left\{ |u(jh) - u^j|, \quad j = 0, \dots, 2^n \right\}.$$

Les simulations numériques ont été effectuées avec le logiciel expérimental “semidif” (voir [GDR2K]). Les figures 1 à 5 présentent les résultats des quatre schémas précédents pour les cinq cas tests ci-dessus lorsqu’on utilise 16 points (i.e. $n = 4$ dans la relation (4.17)) dans l’intervalle $[0, 1]$.

a) Tests de semi-quadrature.

- Pour le premier cas test (fonction g_1 constante) les schémas de Msallam et par éléments finis intègrent exactement l’équation semi-différentielle (1.2). Les erreurs (de l’ordre de 10^{-16} pour le schéma de Msallam et 10^{-12} pour celui par éléments finis) mises en évidence auront permis de vérifier la cohérence des comportements théorique et numérique puisqu’elles sont dues uniquement aux erreurs d’arrondis de la machine et ne sont donc pas significatives pour l’étude qui nous occupe ici. Nous présentons en conséquence à la figure 6 les erreurs e_2^n et e_∞^n en fonction de n pour les deux schémas d’extraction de racines carrées. Dans les deux cas, l’erreur en norme L^2 présente un taux de convergence d’ordre un et l’erreur en norme L^∞ un taux de convergence d’ordre un demi. Les erreurs ponctuelles sont importantes au début du calcul à cause de la singularité de la dérivée en zéro pour la fonction u_0 (relations (1.1) et (4.2)) mais elles ne se propagent pas en temps et l’erreur en moyenne quadratique a un comportement plus précis.

- Pour le second cas test, la fonction g_2 est calculée à la relation (4.8), l’erreur en norme L^2 est d’ordre $3/2$, sauf pour le premier schéma (2.17) d’extraction de la racine carrée du schéma à deux points, où elle est d’ordre un seulement (voir la figure 7). La norme L^∞ (figure 8) montre une convergence à l’ordre un pour les quatre schémas testés.

- Pour le troisième test où la fonction g_3 est affine, le schéma par éléments finis est à nouveau exact et ne peut pas être introduit dans les comparaisons. Les figures 9 et 10 présentent les convergences en norme L^2 et en norme L^∞ pour les trois autres schémas. Le schéma par extraction de la racine carrée du schéma aux différences à deux points est le moins précis (ordre 1 tant en norme L^2 qu’en norme L^∞) : les erreurs dues au saut de dérivée à l’origine se propagent dans tout l’intervalle d’étude. On a le même type de comportement pour le schéma de Msallam qui est toutefois plus précis puisque les erreurs sont d’ordre $3/2$ pour les deux normes. L’extraction de la racine carrée du schéma aux différences décentré à trois points reste précis à l’ordre $3/2$ pour la norme du supremum des erreurs mais est le plus précis pour la mesure de l’erreur en moyenne quadratique puisqu’il atteint l’ordre deux.

- Pour ce quatrième cas test où g_4 est en $t^{3/2}$ (c.f. (4.10)), les erreurs L^2 (figure 11) et L^∞ (figure 12) montrent les mêmes ordres de convergence. On trouve l'ordre un pour le schéma (2.17) d'extraction de la racine carrée du schéma à deux points, l'ordre trois demi pour le schéma de Msallam et l'ordre deux pour la racine carrée (2.18) du schéma aux différences à trois points et le schéma (3.12) par éléments finis P_1 .
- Pour le cinquième cas test, la fonction g_5 est quadratique, les qualités des quatre schémas aux différences peuvent être comparées. Il s'agit d'un cas presque régulier puisque la fonction $u_5(\bullet)$ définie par (4.6) est deux fois continuellement dérivable et même Lipschitz d'ordre $5/2$. Les erreurs en norme L^2 sont synthétisées à la figure 13 et celle en norme L^∞ à la figure 14. Le schéma (2.17) d'extraction de la racine du schéma aux différences à deux points reste d'ordre un pour les deux normes et le schéma (3.9) de Msallam reste d'ordre $3/2$ pour les deux normes, comme pour le cas précédent. Les schémas (2.18) d'extraction de la racine du schéma à trois points et (3.13) par éléments finis P_1 sont d'ordre deux pour les deux normes.
- Le tableau qui suit donne une synthèse des ordres de convergence des quatre schémas aux différences pour les cinq tests proposés.

	(2.17) racine carrée du schéma à deux points	(2.18) racine carrée du schéma à trois points	(3.9) quadrature approchée avec Msallam	(3.13) éléments finis P_1 .
$g_1(\bullet)$ constante				
norme L^2	1	1	∞	∞
norme L^∞	0.5	0.5	∞	∞
$g_2(\bullet)$ linéaire				
norme L^2	1	1.5	1.5	1.5
norme L^∞	1	1	1	1
$g_3(\bullet)$ puissance $3/2$				
norme L^2	1	2	1.5	∞
norme L^∞	1	1.5	1.5	∞
$g_4(\bullet)$ quadratique				
norme L^2	1	2	1.5	2
norme L^∞	1	1.5	1.5	2
$g_5(\bullet)$ puissance $5/2$				
norme L^2	1	2	1.5	2
norme L^∞	1	2	1.5	2

b) Tests de dynamique.

• Pour la seconde série de cas tests, on a à résoudre une véritable équation semi-différentielle dont les solutions sont encore données aux relations (4.2) à (4.6). Nous présentons aux figures 15 à 19 les résultats numériques lorsqu'on utilise 16 points de grille en temps entre 0 et 1. On remarque clairement que les erreurs sont beaucoup plus importantes que pour la famille de tests précédente. Nous renvoyons à une comparaison avec les figures 1 à 5 respectivement.

• Nous avons ensuite mesuré les erreurs en norme L^2 et en norme L^∞ pour les quatre schémas et les cinq fonctions tests proposées aux relations (4.12) à (4.16). Les résultats sont présentés à la figure 20 pour f_1 constante et aux figures 21 à 28 pour les quatre autres dynamiques. La figure 20 est rigoureusement identique à la figure 6 car $f_1 = g_1$ ne dépend ni de u ni de t ! Cette remarque montre que notre logiciel Semidif donne des résultats cohérents quand on l'utilise dans des sous-modules différents. Les figures 21 à 28 indiquent un ordre de convergence de un pour les deux normes L^2 et L^∞ , les quatre schémas et les quatre cas tests f_2 à f_5 .

c) Tests couplés.

• A titre de validation, nous avons effectué les cinq simulations suivantes associées à un choix particulier de paramètres θ_f et $\theta_g = 1 - \theta_f$ pour les différentes fonctions f et g proposées aux relations (4.2) à (4.6). De façon précise, nous avons résolu numériquement l'équation (4.1) avec les données suivantes :

$$(4.20) \quad f = f_1, \quad g = g_1, \quad \theta_f = 0.1, \quad \theta_g = 0.9,$$

$$(4.21) \quad f = f_2, \quad g = g_2, \quad \theta_f = 0.3, \quad \theta_g = 0.7,$$

$$(4.22) \quad f = f_3, \quad g = g_3, \quad \theta_f = 0.5, \quad \theta_g = 0.5,$$

$$(4.23) \quad f = f_4, \quad g = g_4, \quad \theta_f = 0.7, \quad \theta_g = 0.3,$$

$$(4.24) \quad f = f_5, \quad g = g_5, \quad \theta_f = 0.9, \quad \theta_g = 0.1$$

en choisissant le schéma (2.18) d'extraction de la racine carrée du schéma aux différences à trois points. Avec 16 points de grille, les résultats sont présentés à la figure 29. Les erreurs en norme L^2 et en norme L^∞ quand on raffine le maillage sont présentées aux figures 30 et 31. Dans l'ensemble, les ordres de convergence obtenus sont compatibles avec les expériences précédentes décrites aux paragraphes a et b. Toutefois, aucune loi ne se dégage en ce qui concerne la prédiction des ordres de convergence, qui en particulier ne sont pas toujours égaux aux interpolés des ordres de convergence des paragraphes a et b avec les poids θ_f et θ_g .

Figure 1 : solutions exacte et approchées de l'équation $(D^{1/2} u_1)(t) = g_1(t)$

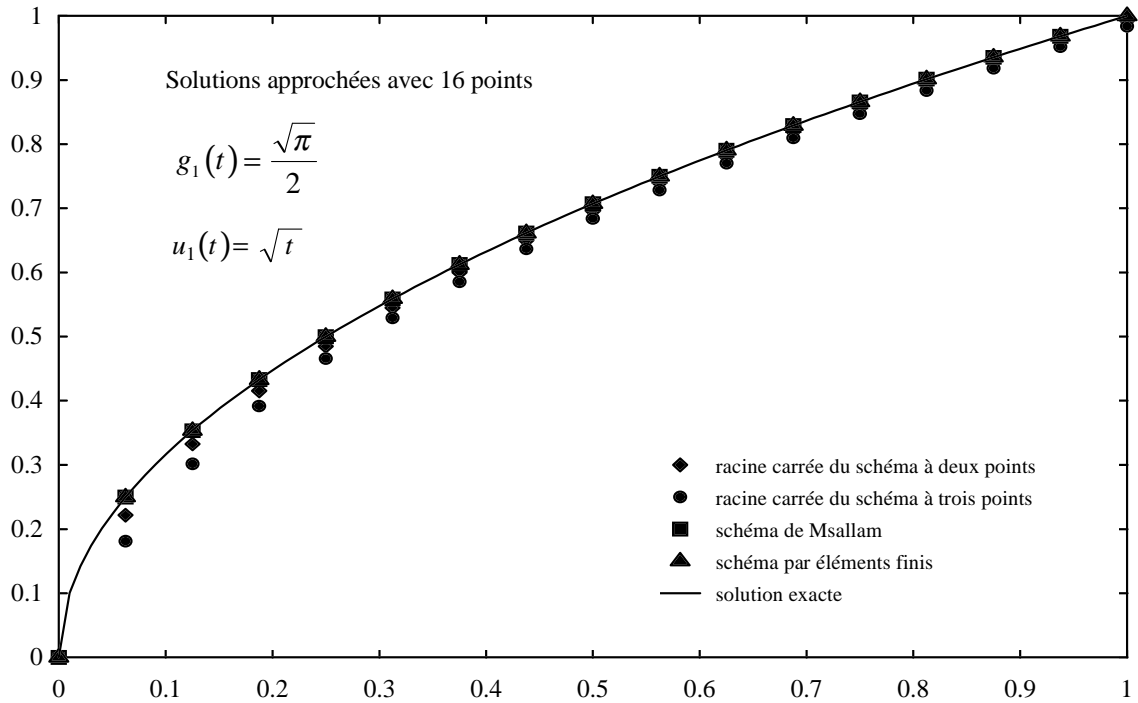


Figure 2 : solutions exacte et approchées de l'équation $(D^{1/2} u_2)(t) = g_2(t)$

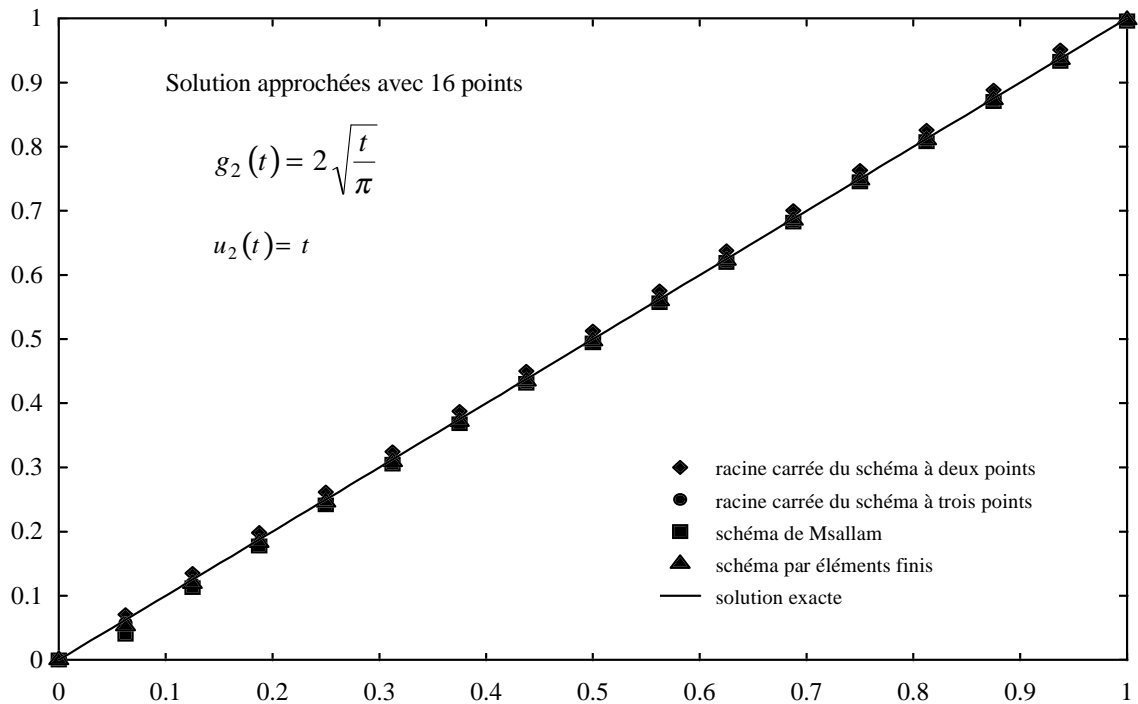


Figure 3 : solutions exacte et approchées de l'équation $(D^{1/2} u_3)(t) = g_3(t)$

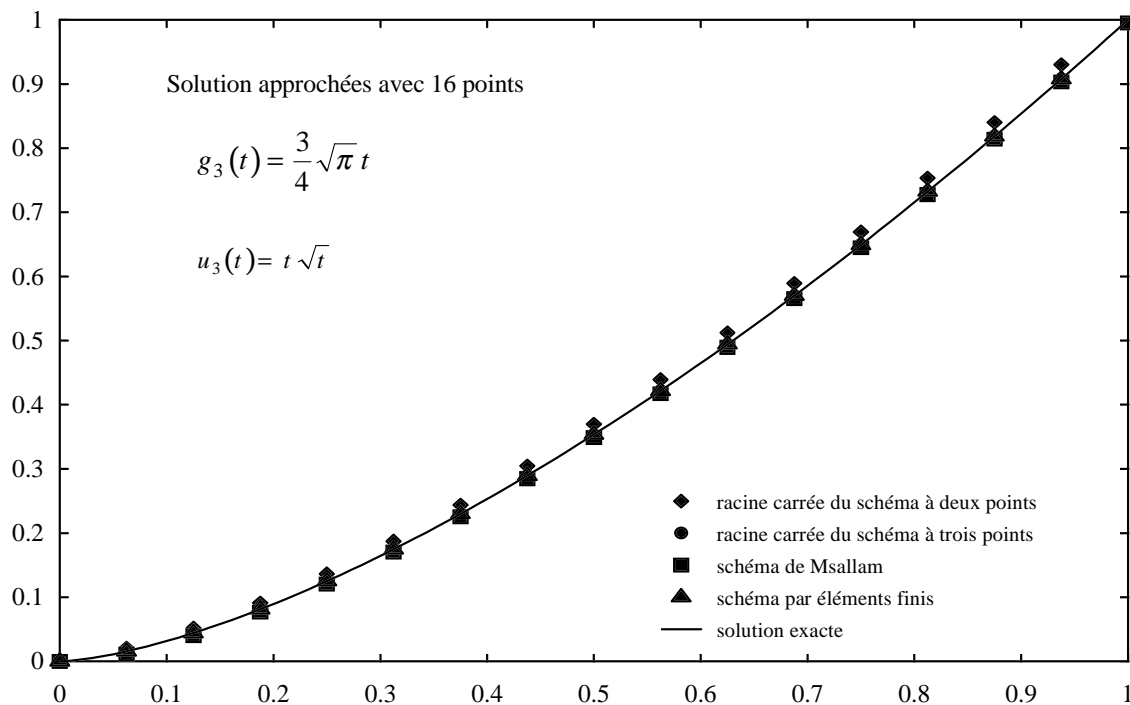


Figure 4 : solutions exacte et approchées de l'équation $(D^{1/2} u_4)(t) = g_4(t)$

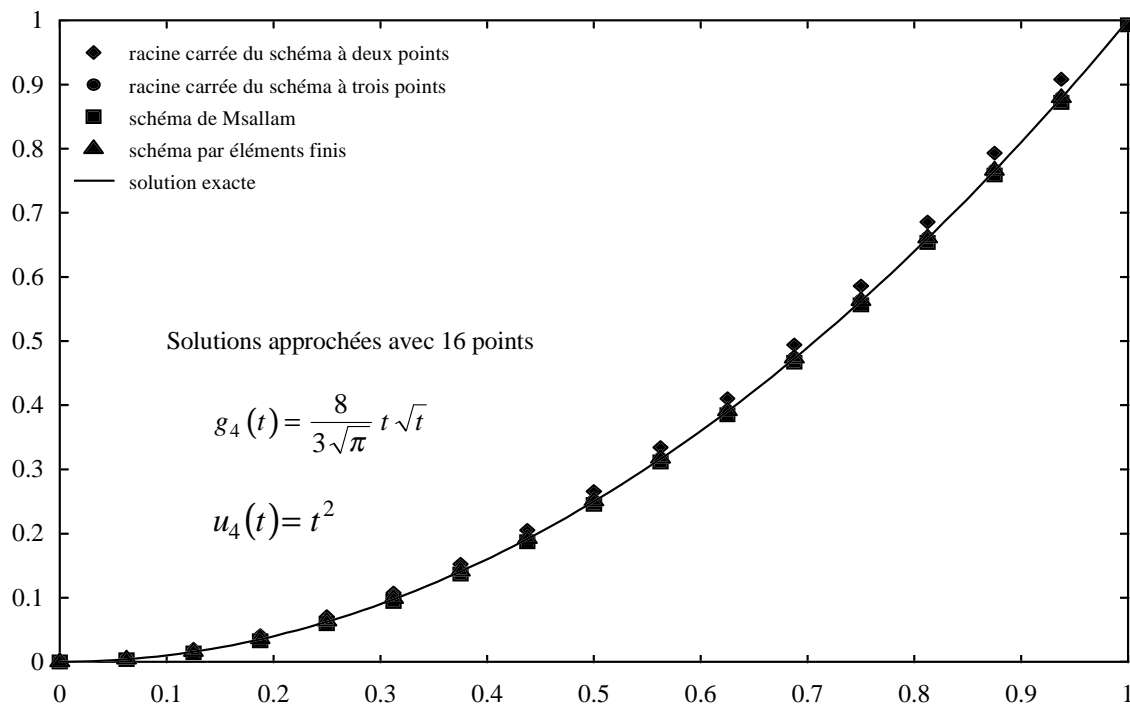


Figure 5 : solutions exacte et approchées de l'équation $(D^{1/2} u_5)(t) = g_5(t)$

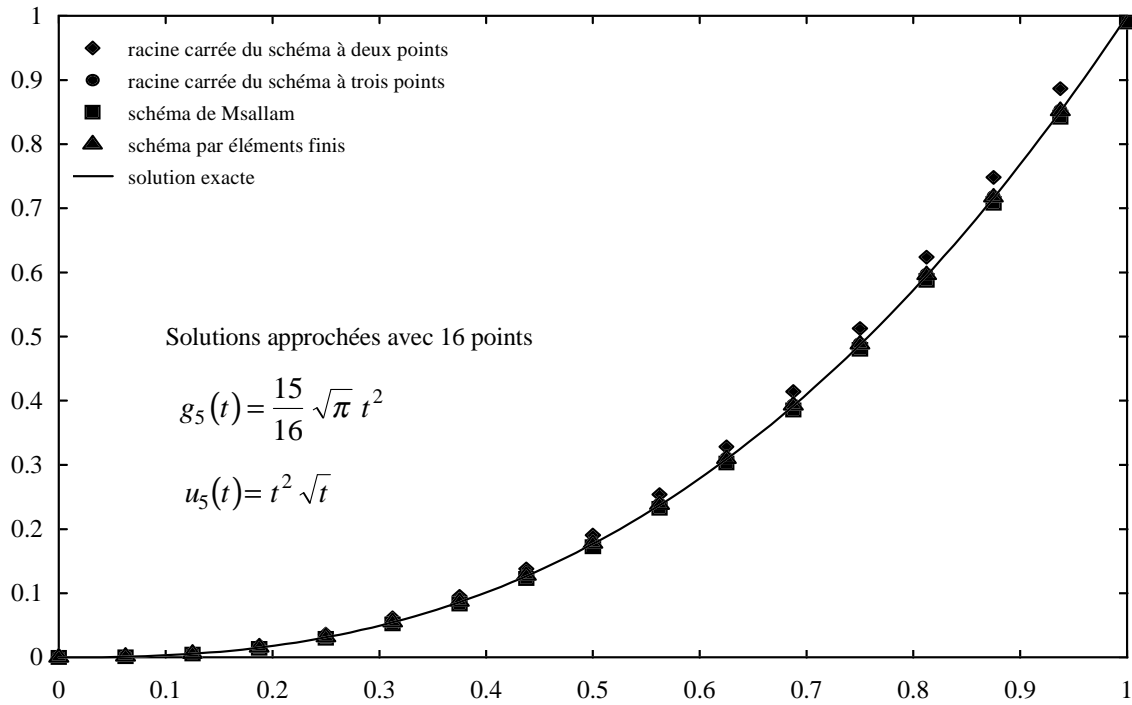


Figure 6 : erreurs en norme L^2 et L^∞ , cas test n°1

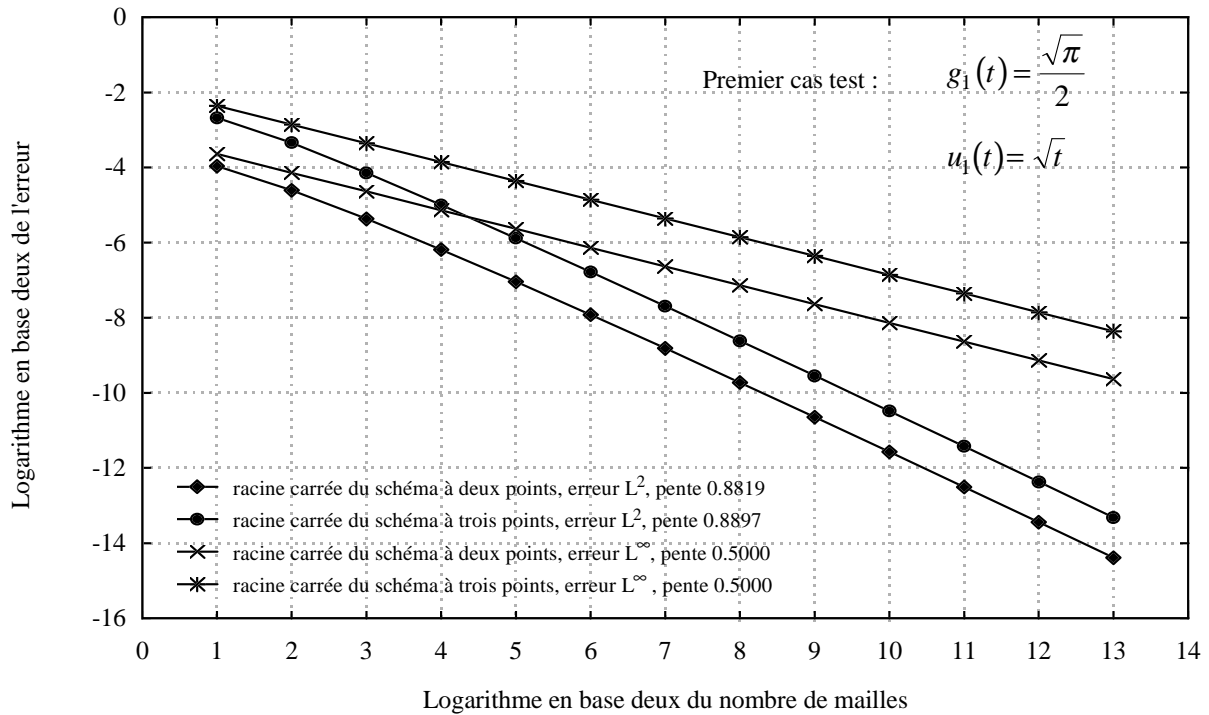


Figure 7 : erreurs en norme L^2 , cas test n° 2

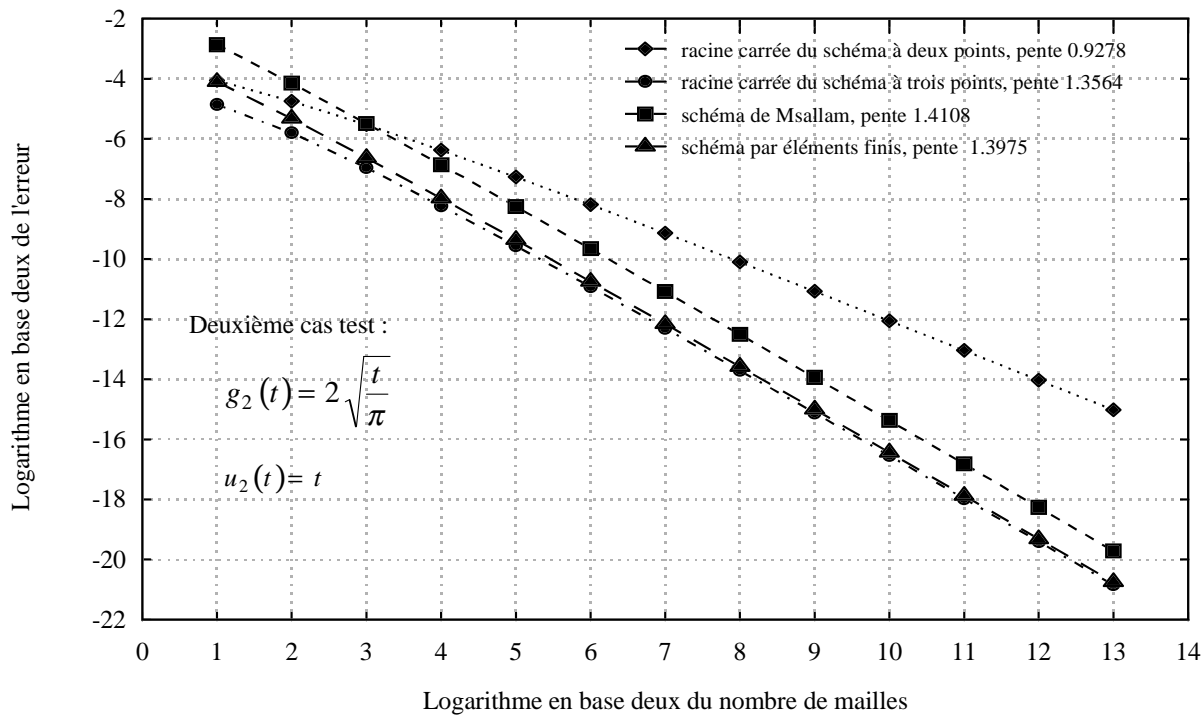


Figure 8 : erreurs en norme L^∞ , cas test n° 2

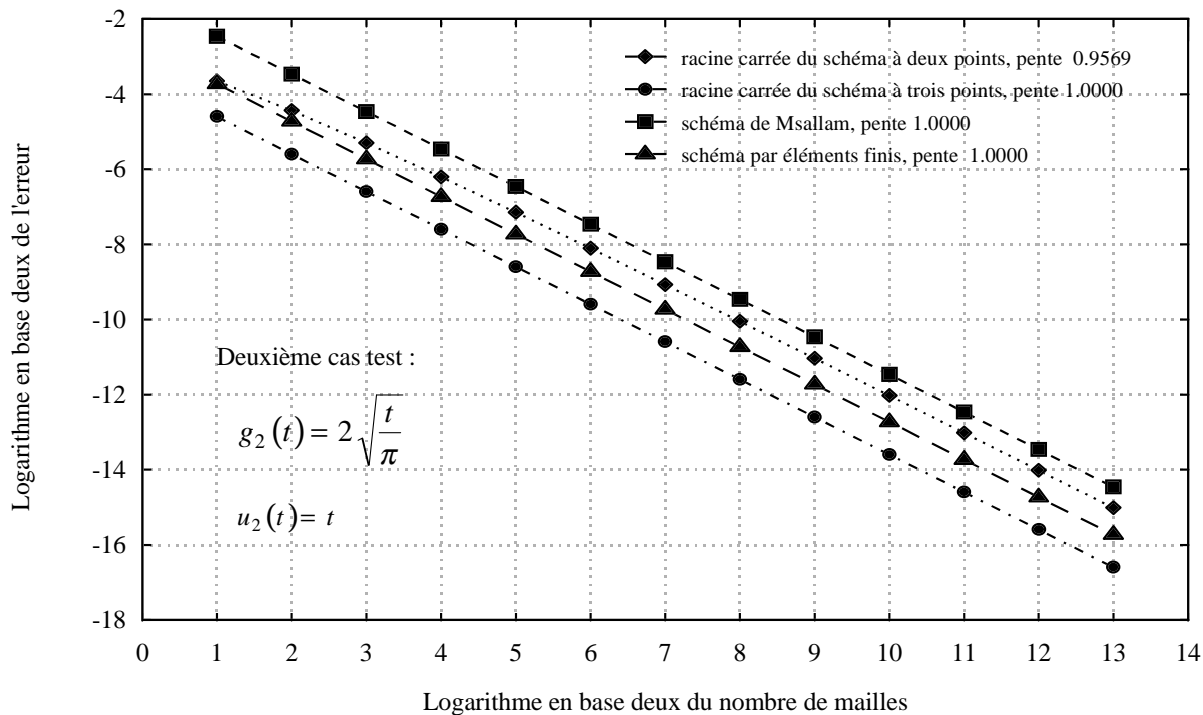


Figure 9 : erreurs en norme L^2 , cas test n°3

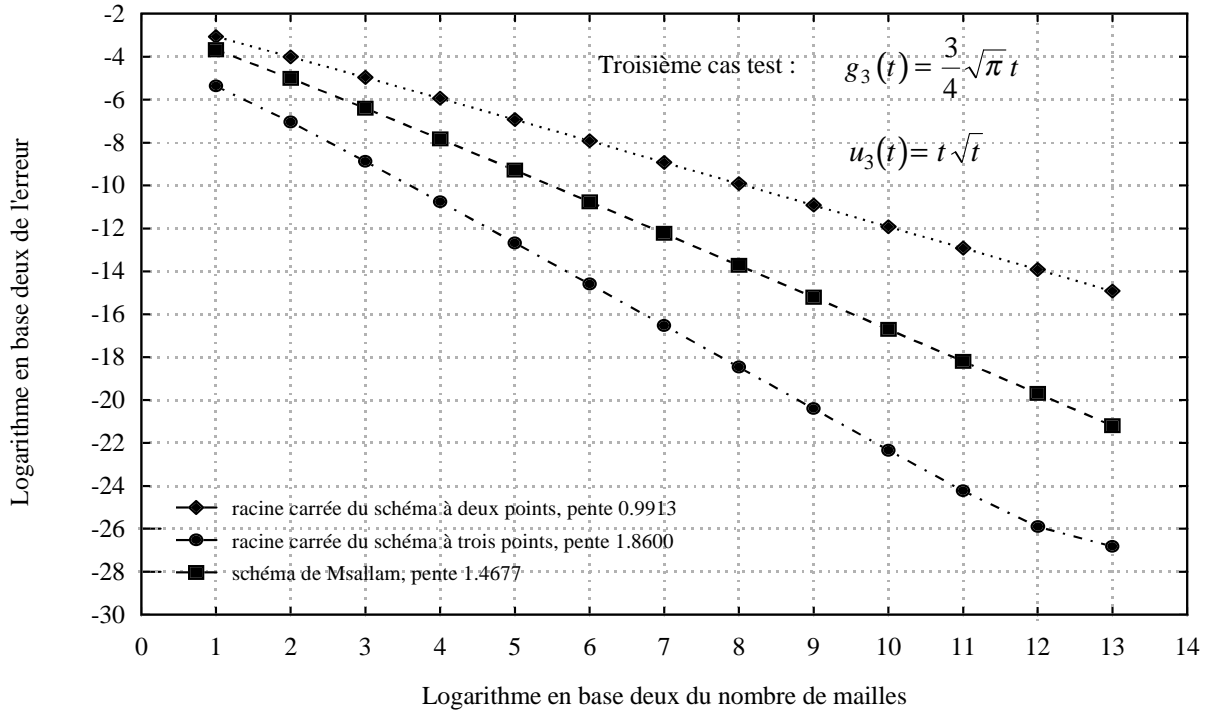


Figure 10 : erreurs en norme L^∞ , cas test n°3

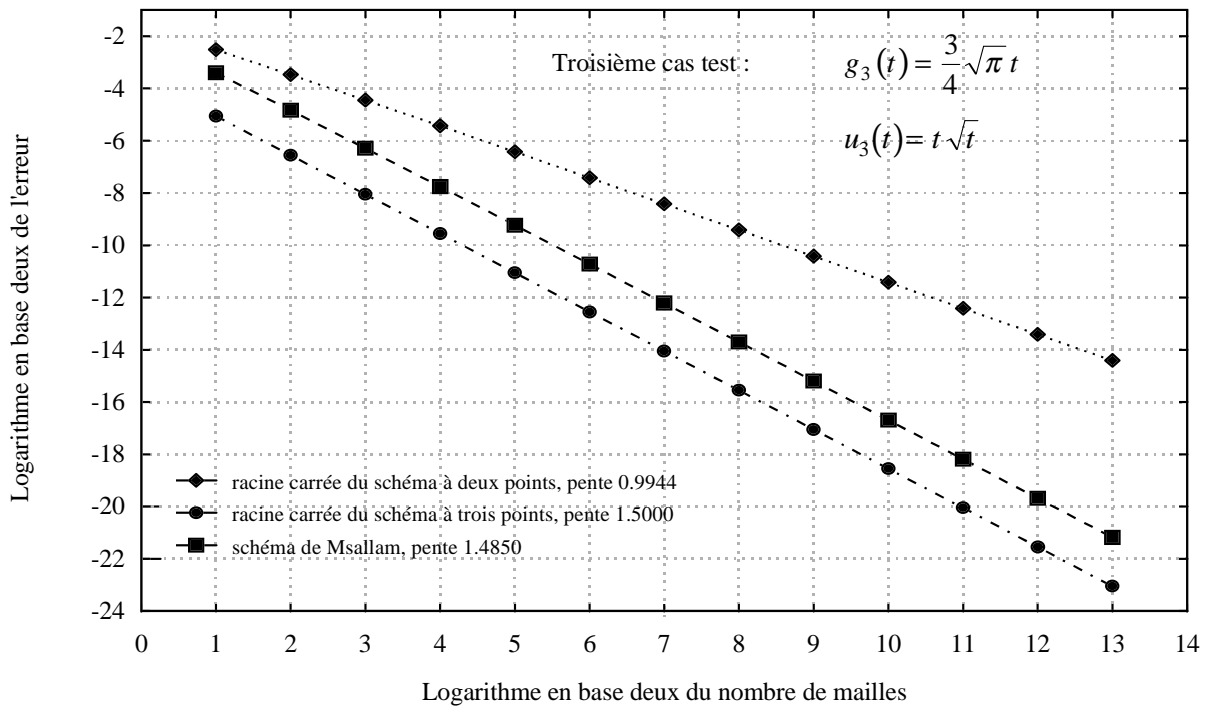


Figure 11 : erreurs en norme L^2 , cas test n°4

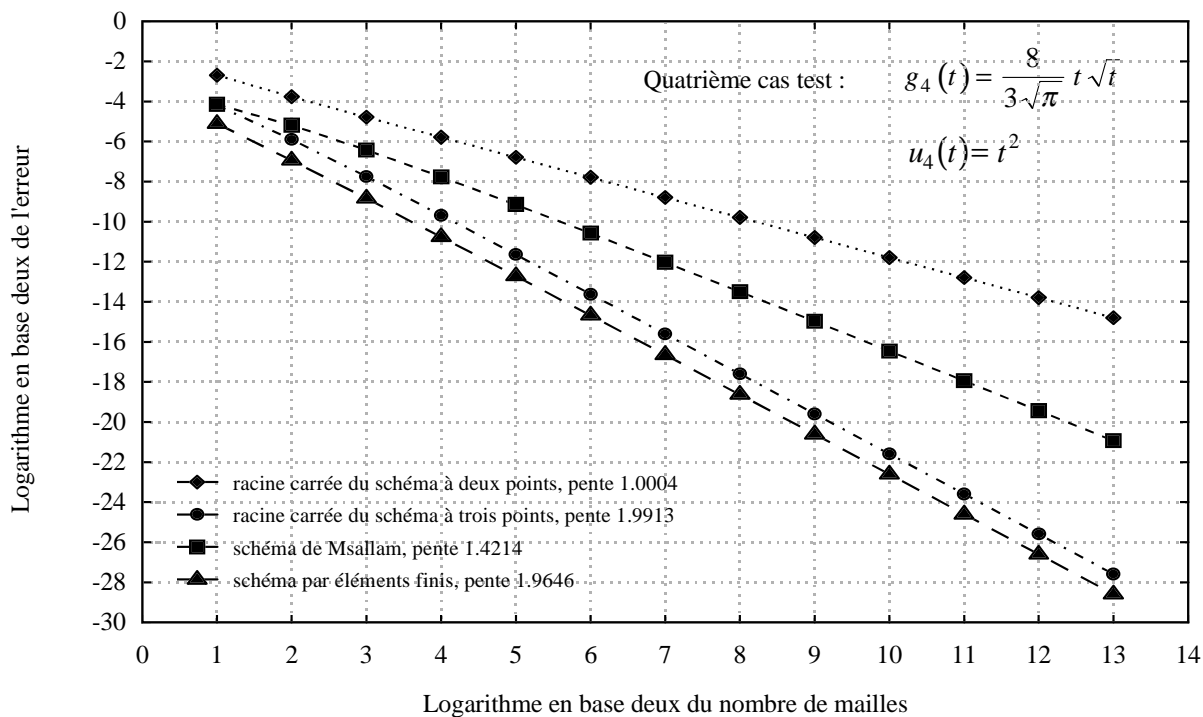


Figure 12 : erreurs en norme L^∞ , cas test n°4

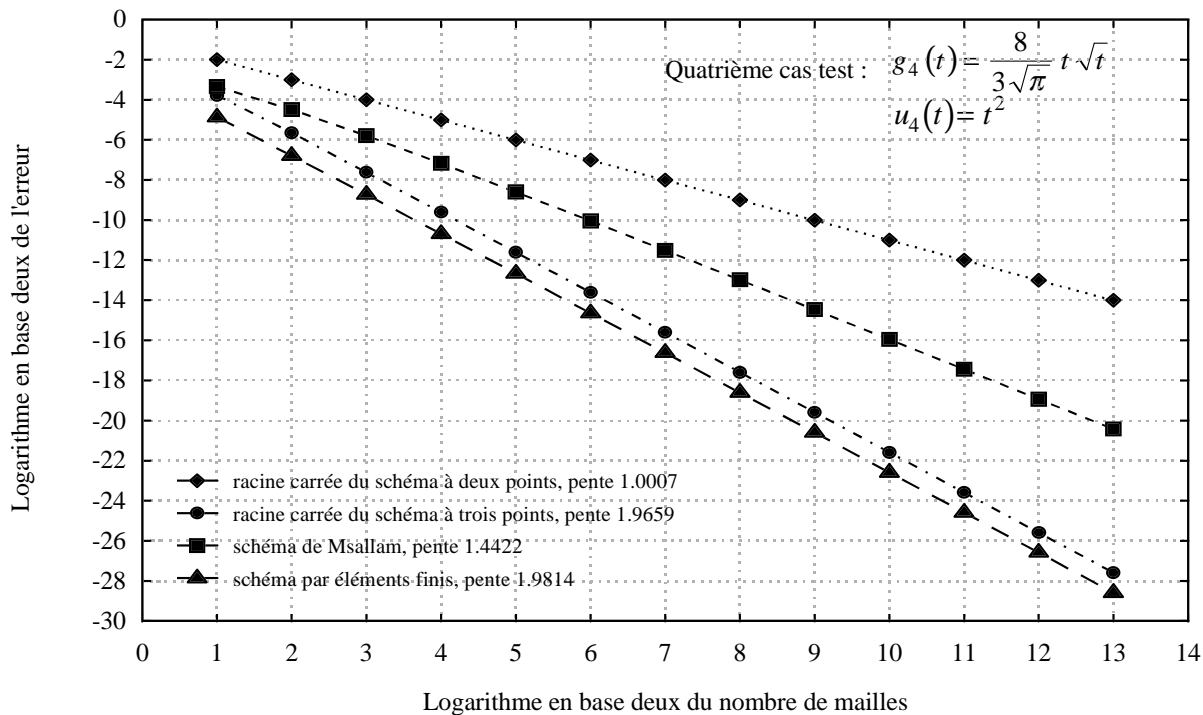


Figure 13 : erreurs en norme L^2 , cas test n°5

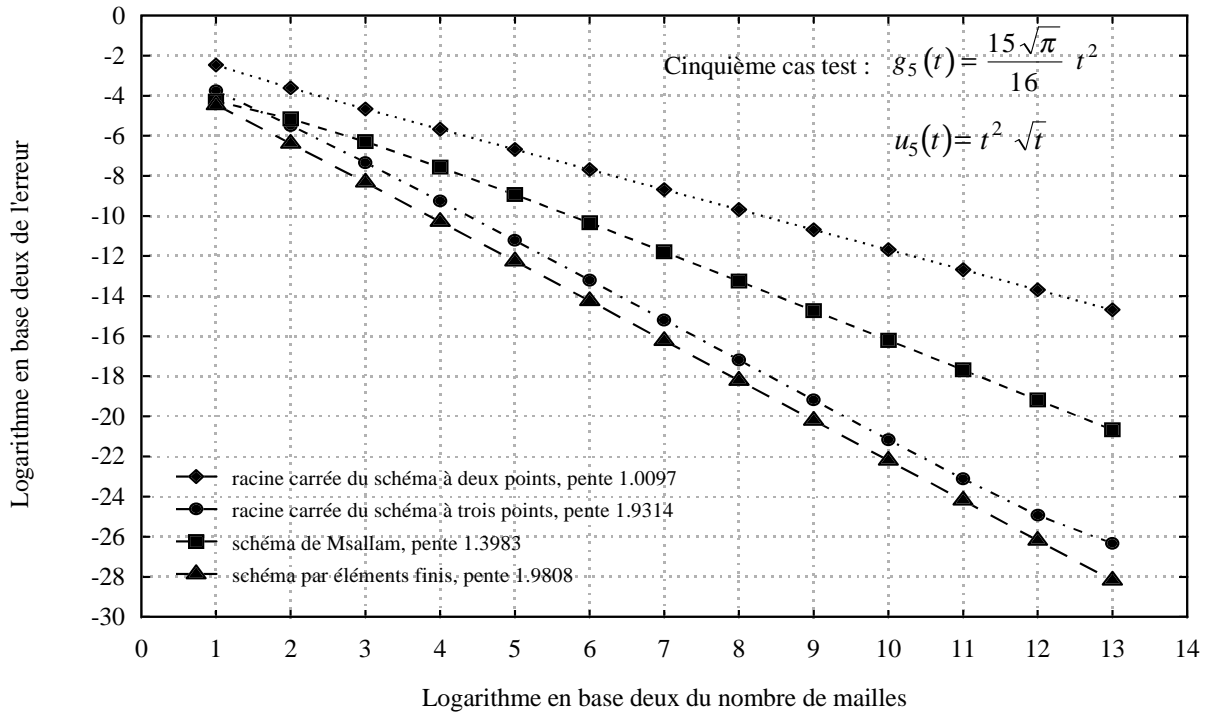


Figure 14 : erreurs en norme L^∞ , cas test n°5

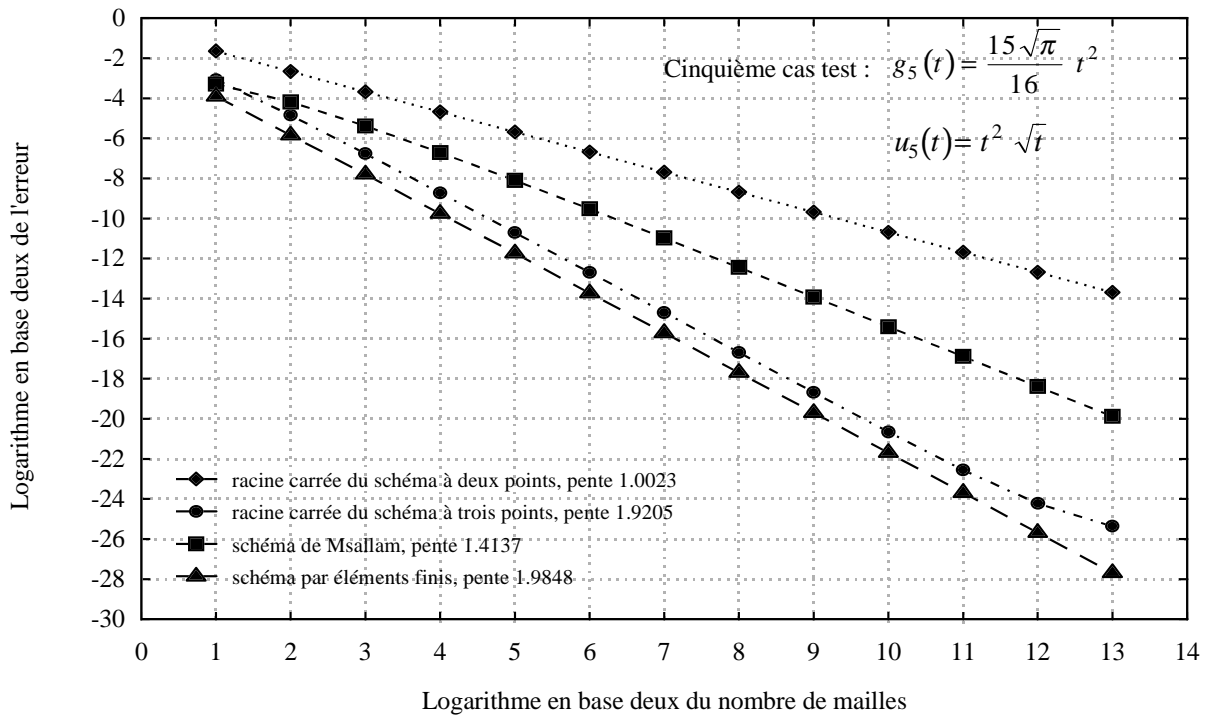


Figure 15 : solutions exacte et approchées de l'équation $(D^{1/2} u_1)(t) = f_1(u_1)$

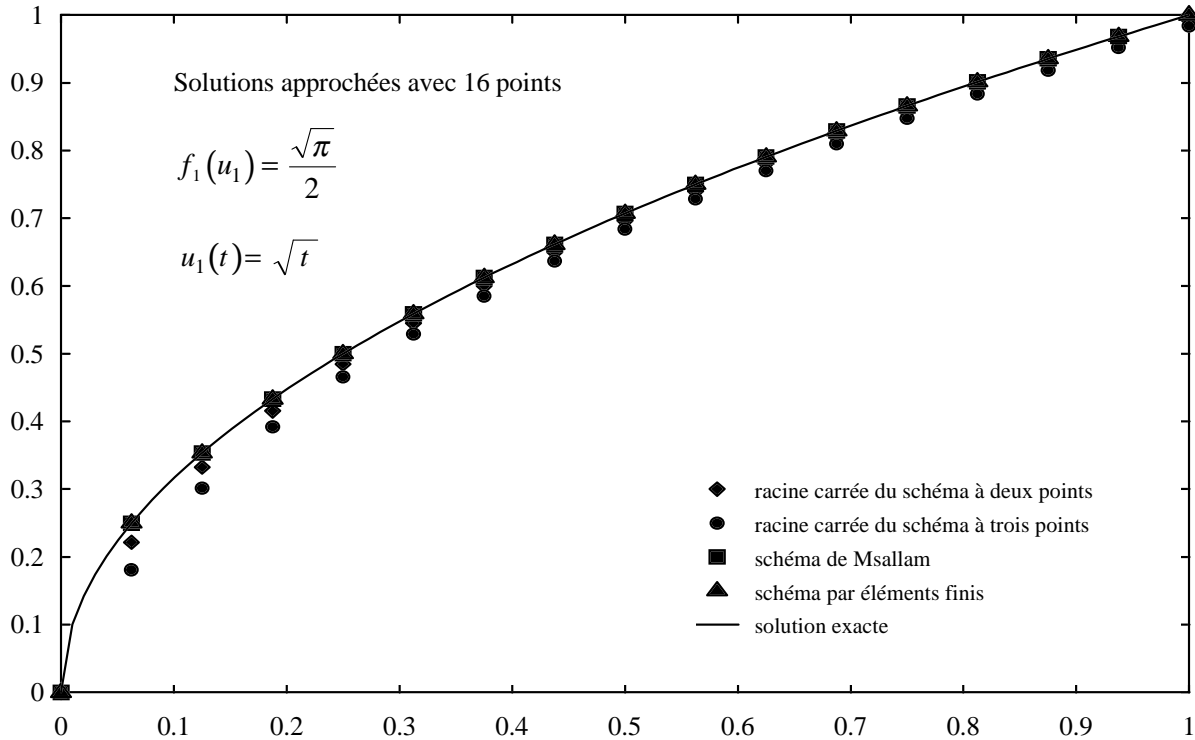


Figure 16 : solutions exacte et approchées de l'équation $(D^{1/2} u_2)(t) = f_2(u_2)$

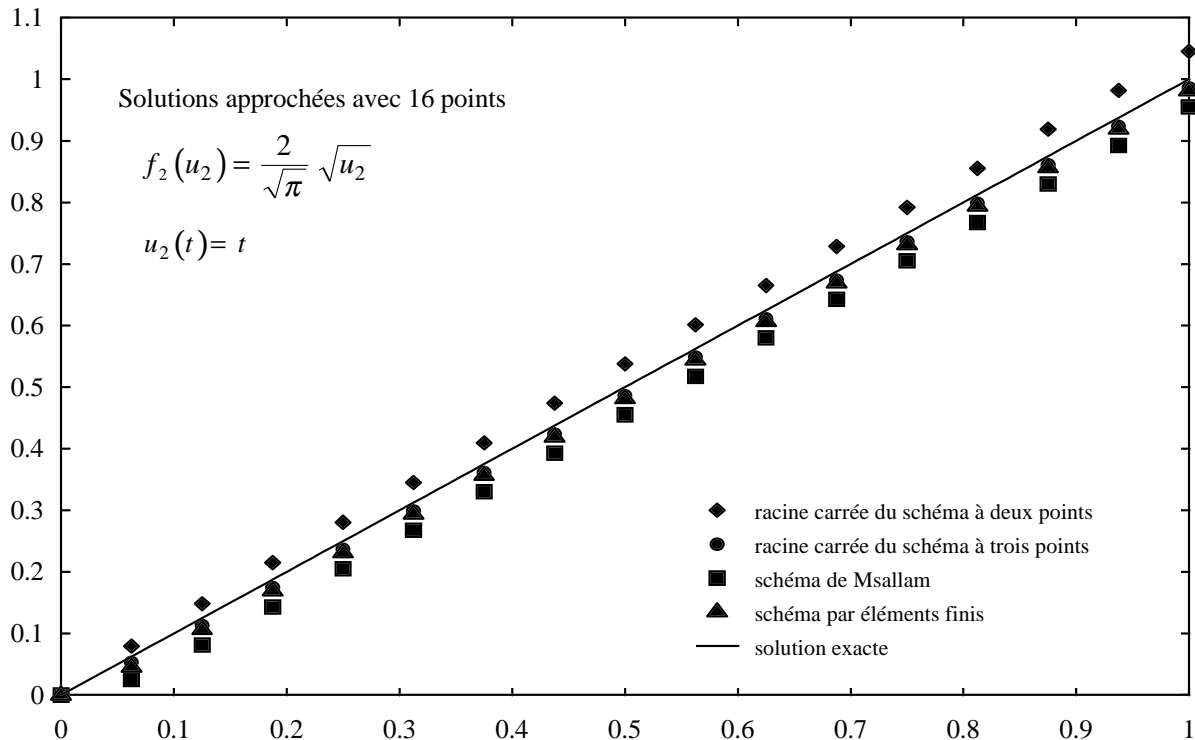


Figure 17 : solutions exacte et approchées de l'équation $(D^{1/2}u_3)(t) = f_3(u_3)$

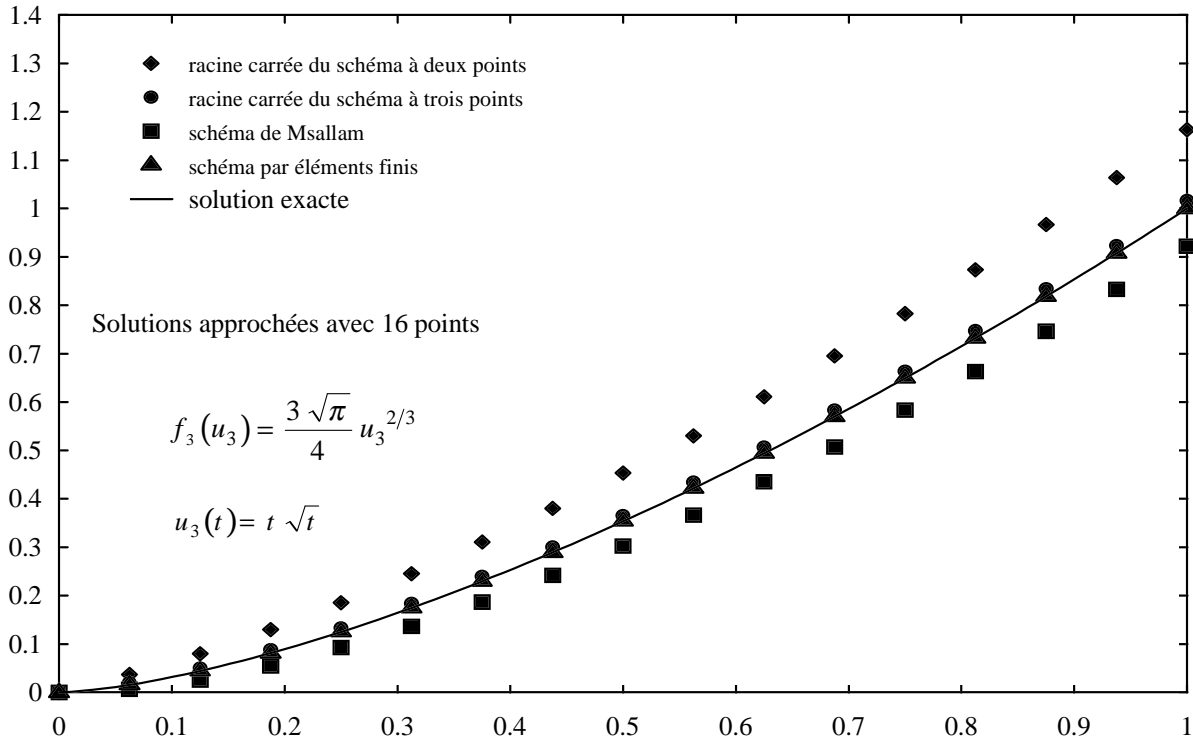


Figure 18 : solutions exacte et approchées de l'équation $(D^{1/2}u_4)(t) = f_4(u_4)$

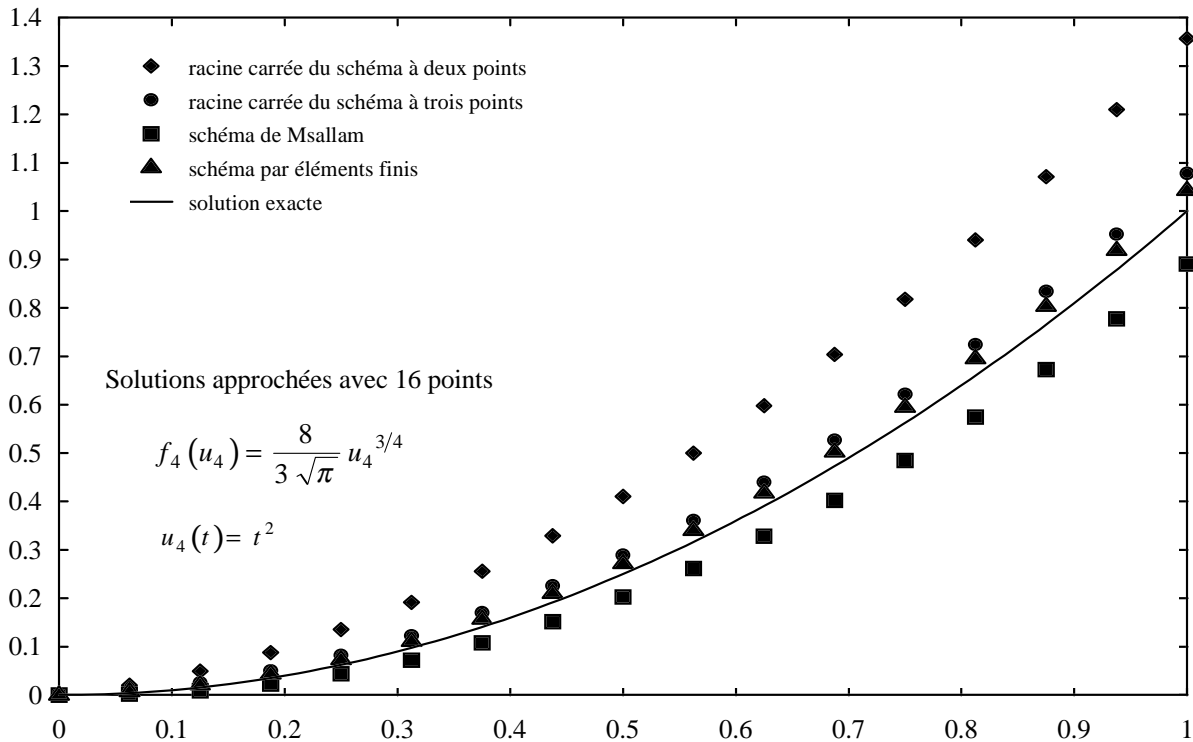


Figure 19 : solutions exacte et approchées de l'équation $(D^{1/2}u_5)(t) = f_5(u_5)$

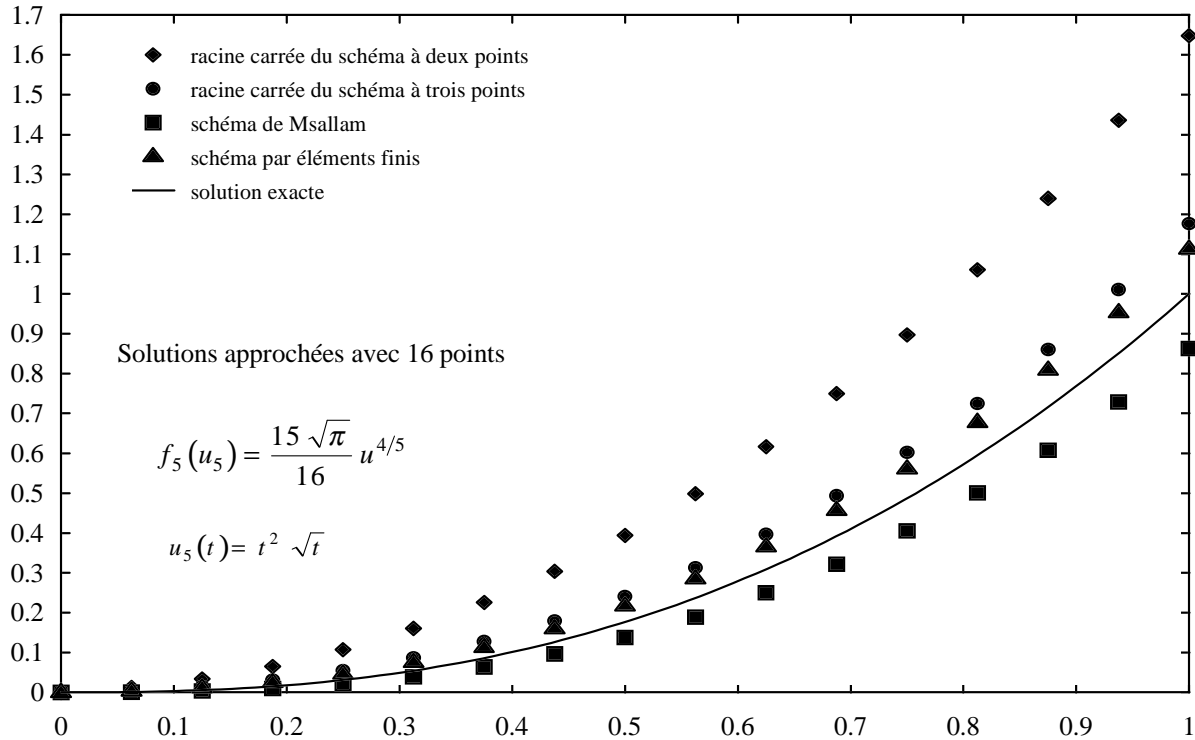


Figure 20 : erreurs en norme L^2 et L^∞ , cas test n°1

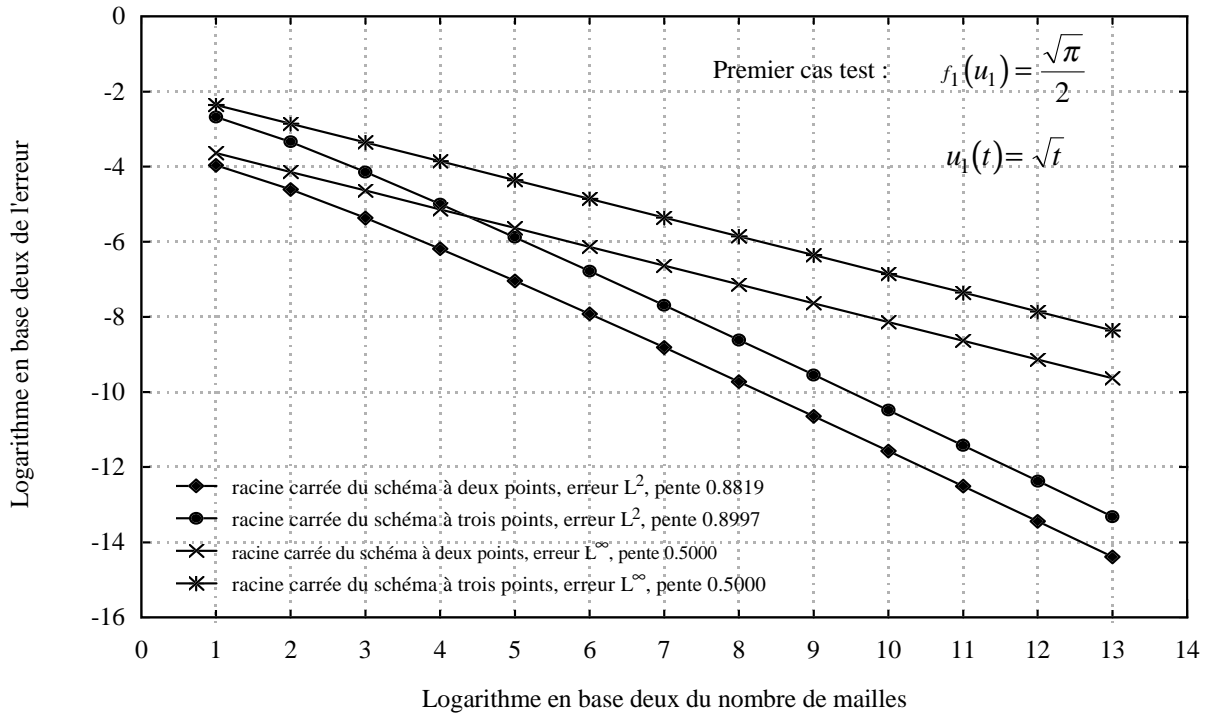


Figure 21 : erreurs en norme L^2 , cas test n° 2

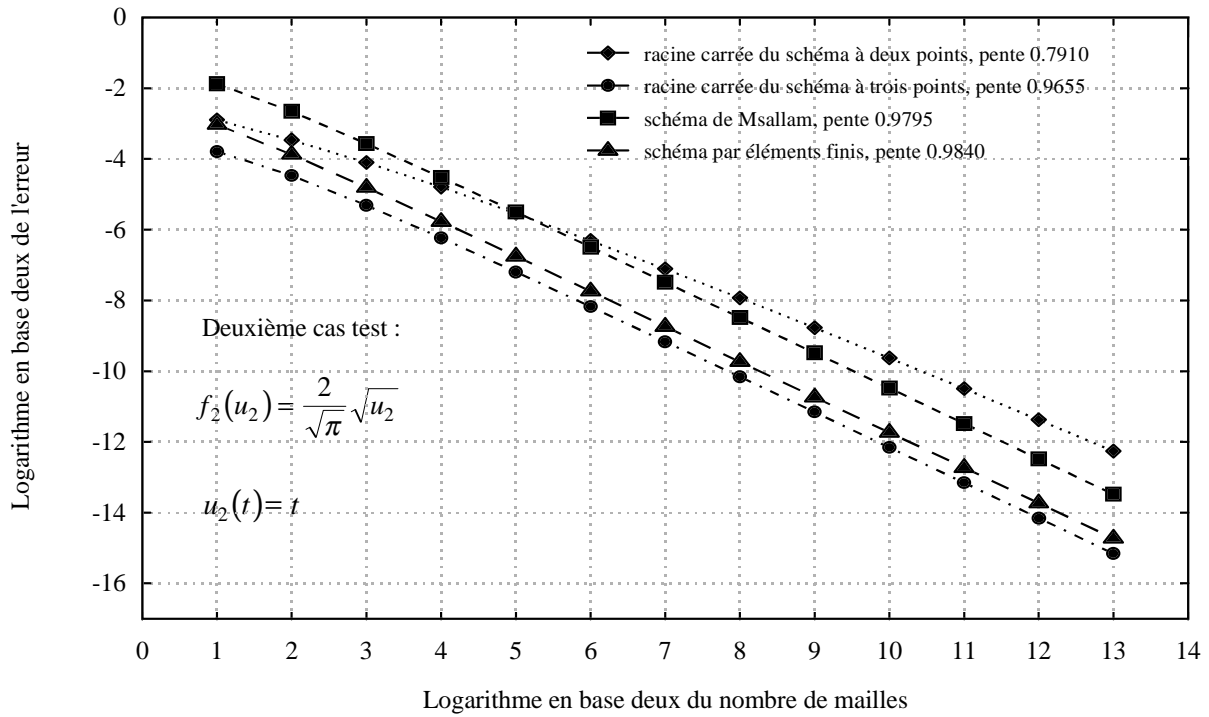


Figure 22 : erreurs en norme L^∞ , cas test n° 2

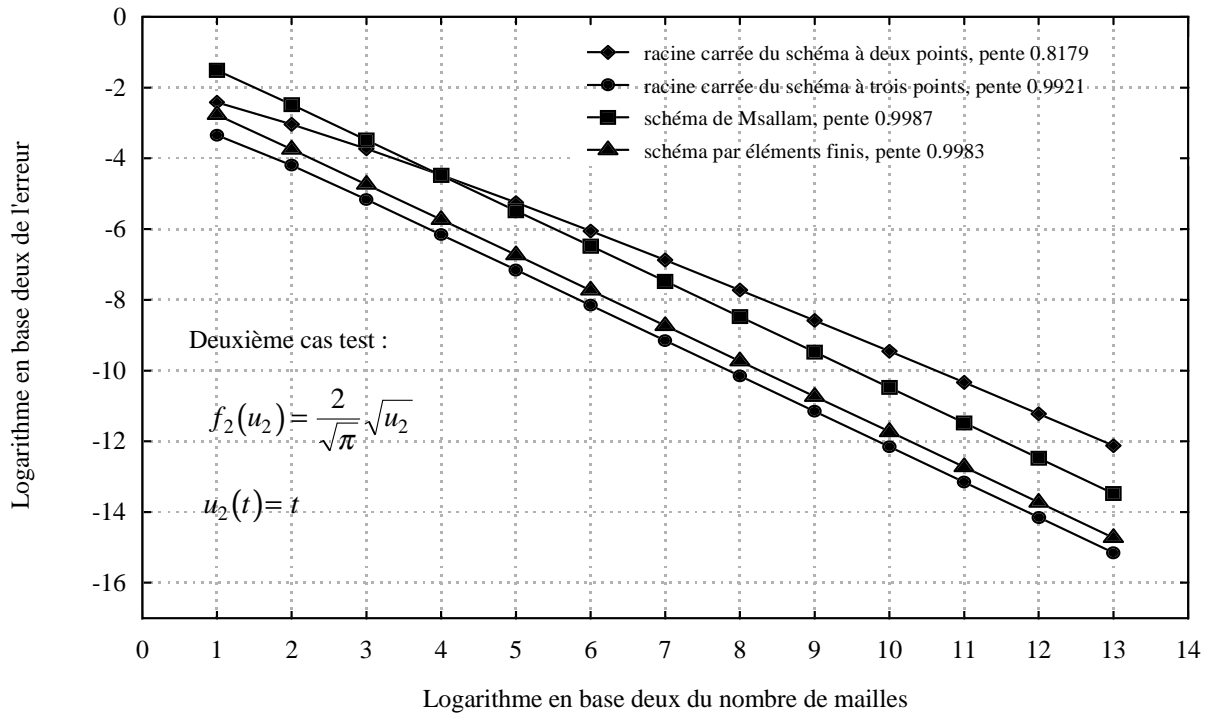


Figure 23 : erreurs en norme L^2 , cas test n°3

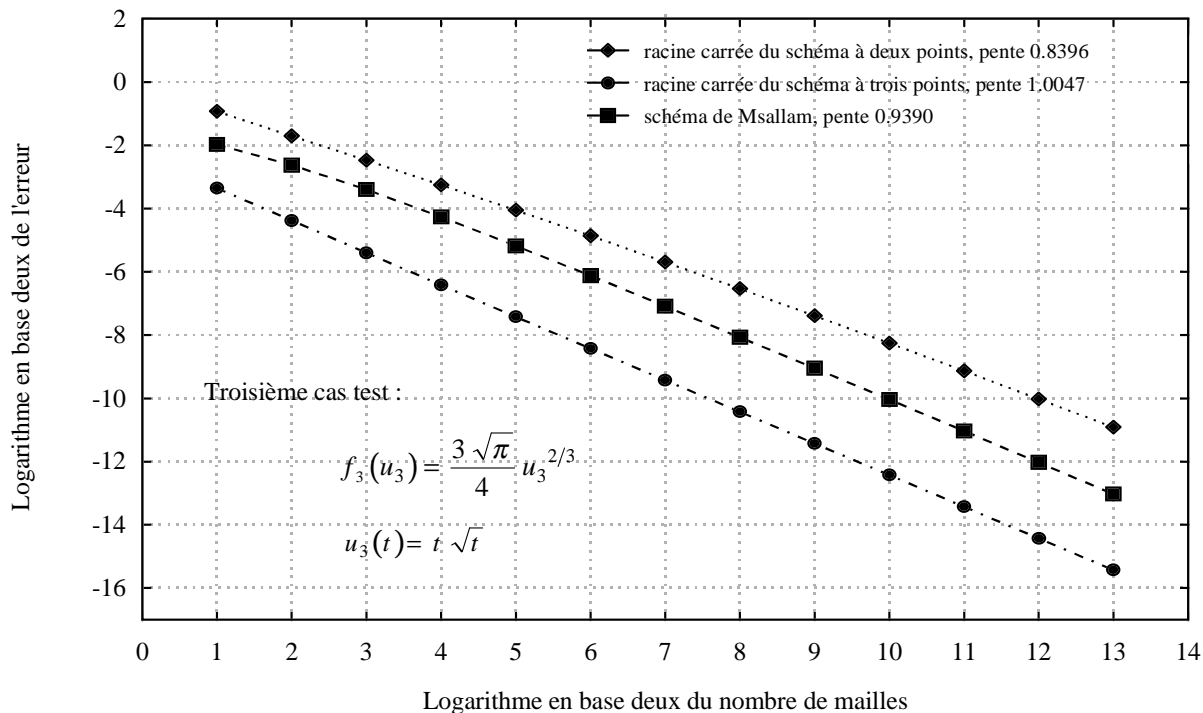


Figure 24 : erreurs en norme L^∞ , cas test n°3

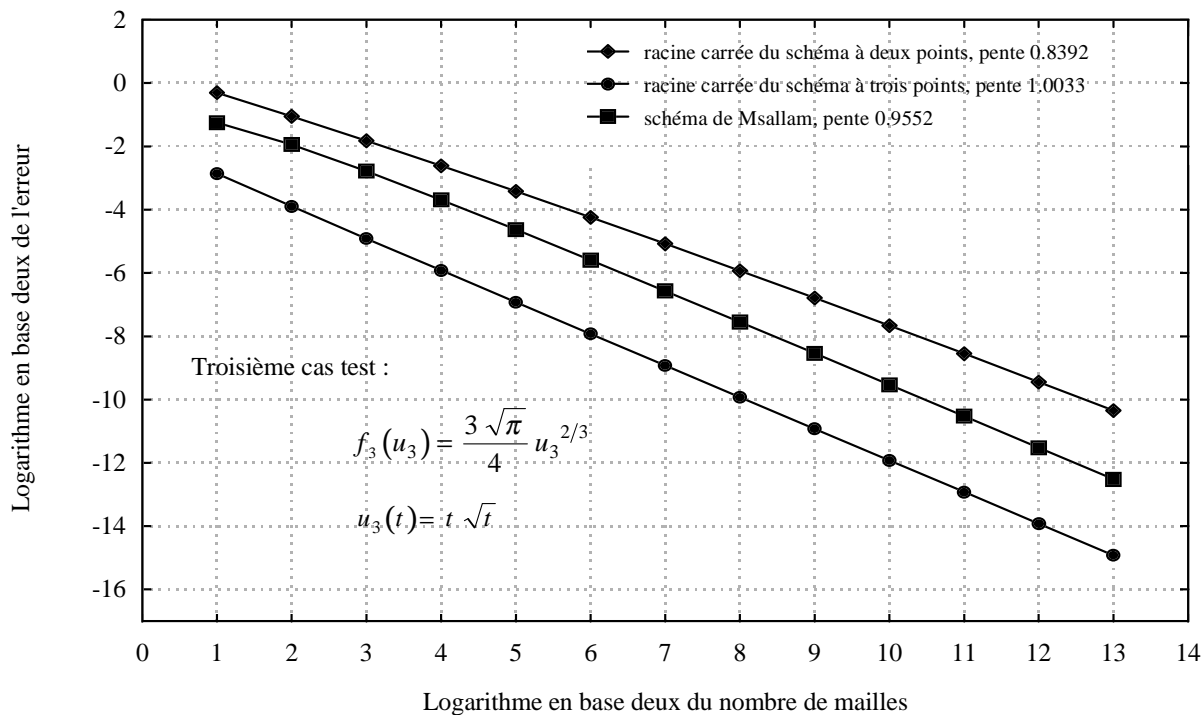


Figure 25 : erreurs en norme L^2 , cas test n°4

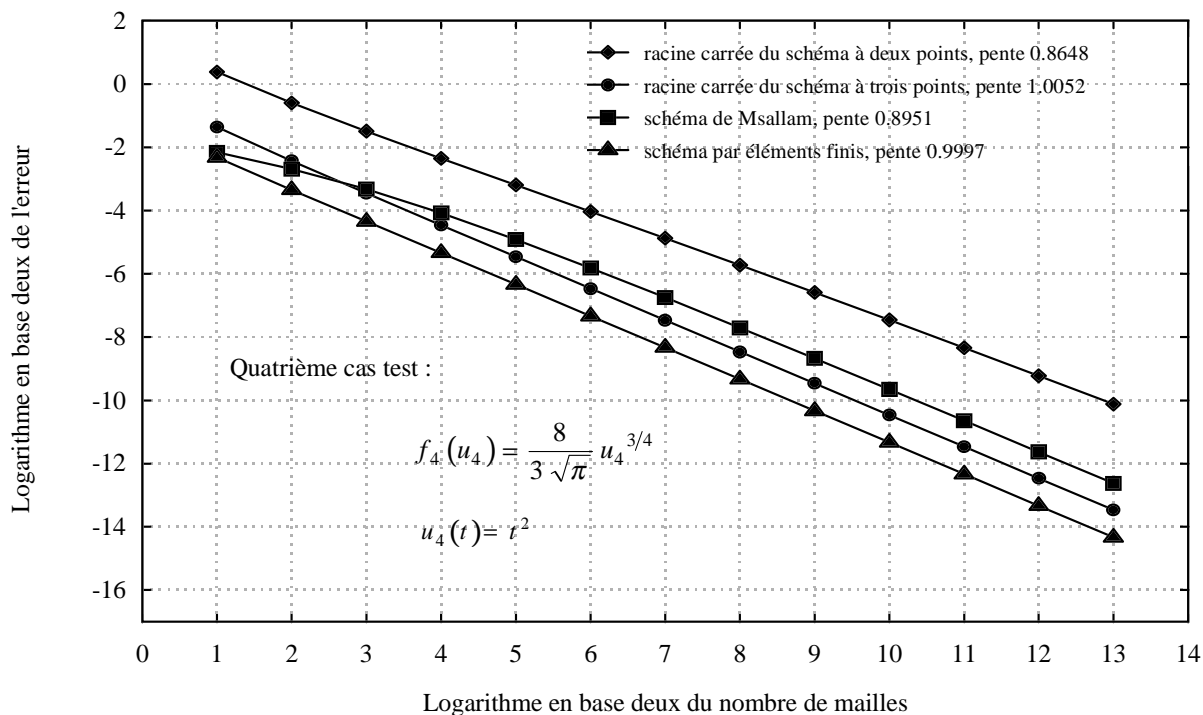


Figure 26 : erreurs en norme L^∞ , cas test n°4

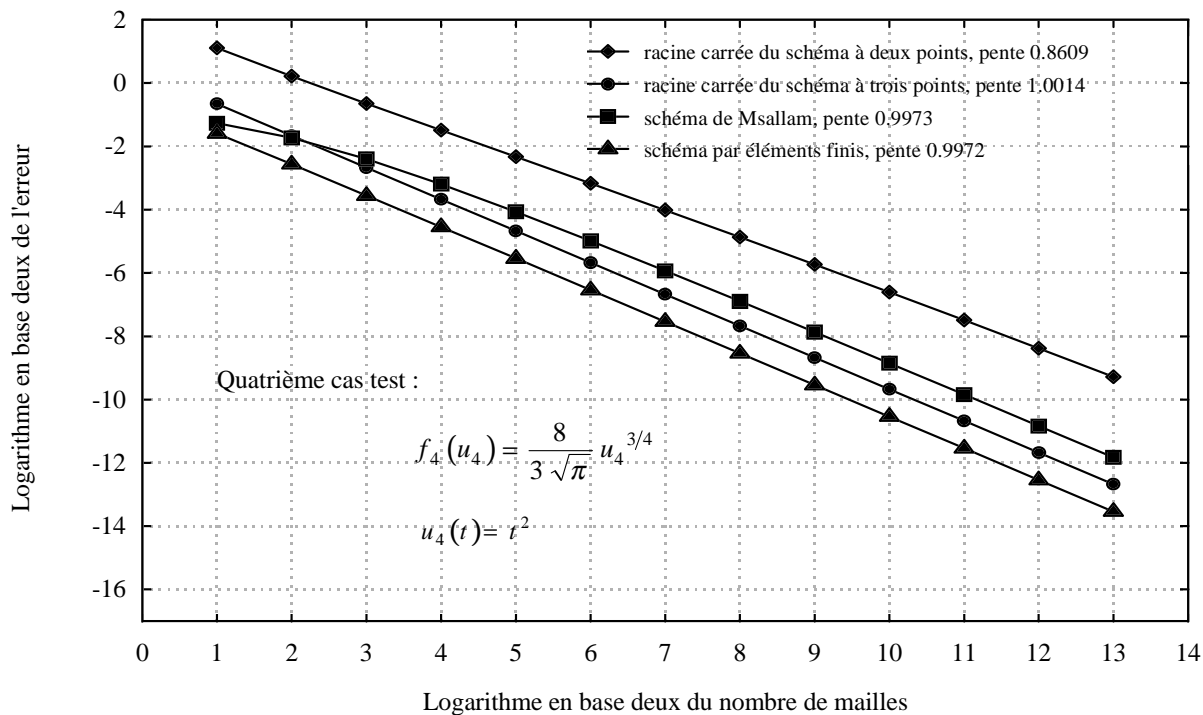


Figure 27 : erreurs en norme L^2 , cas test n°5

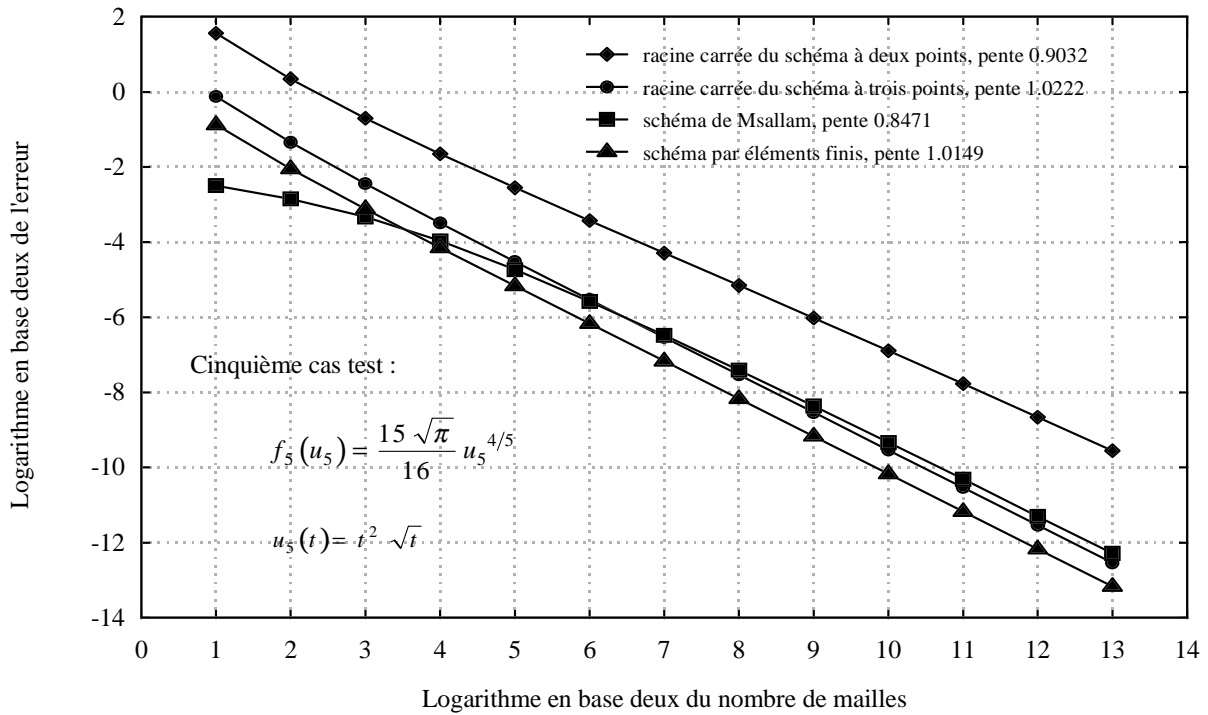


Figure 28 : erreurs en norme L^∞ , cas test n°5

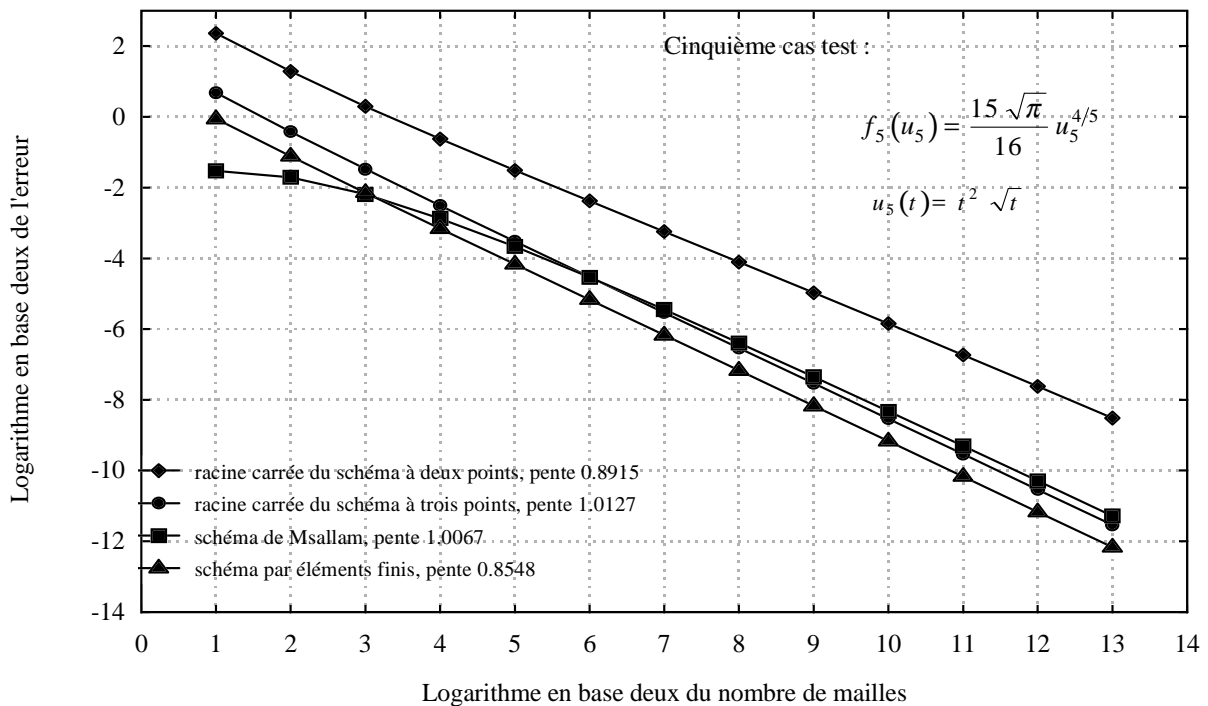


Figure 29 : solution de l'équation $(D^{1/2} u)(t) = \Phi(u(t), t) = \theta_f f(u) + \theta_g g(t)$

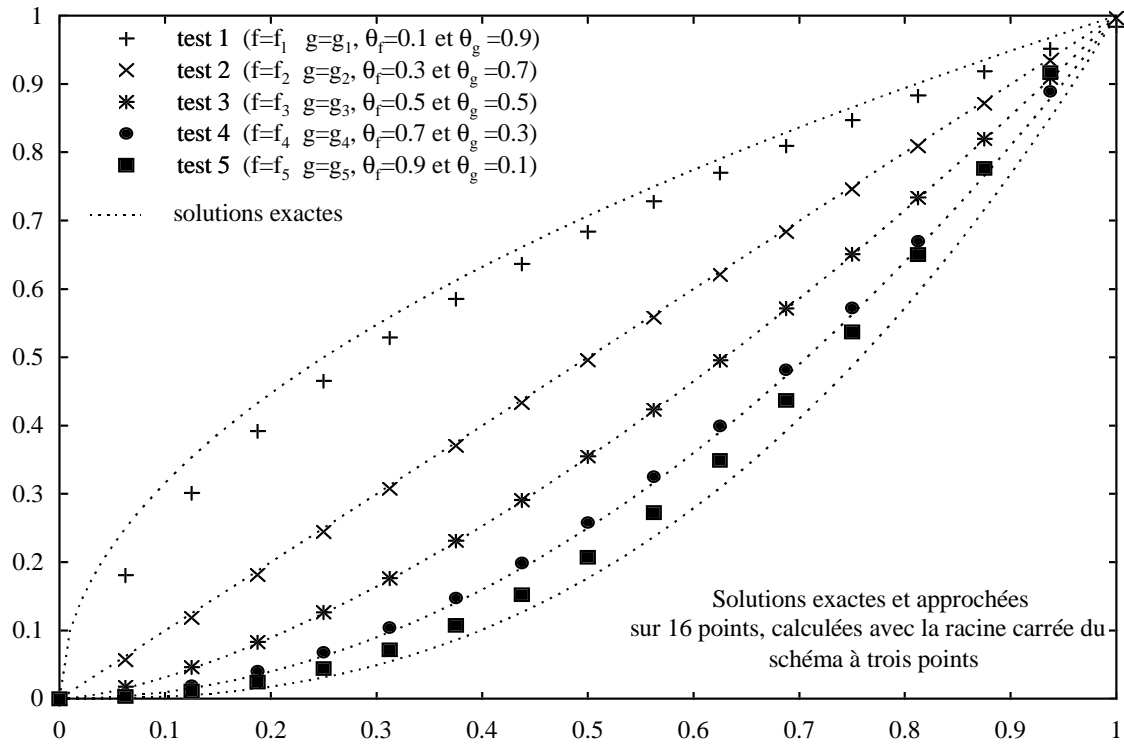


Figure 30 : $(D^{1/2} u)(t) = \Phi(u(t), t) = \theta_f f(u) + \theta_g g(t)$ erreurs en norme L^2

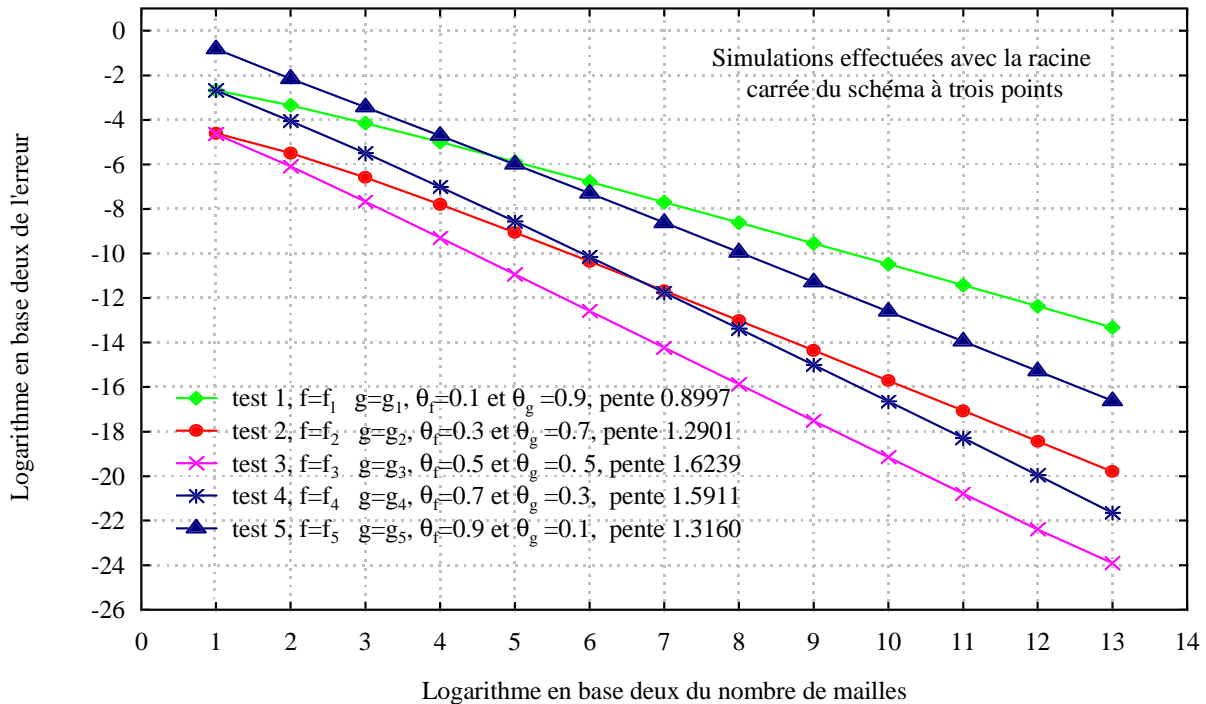
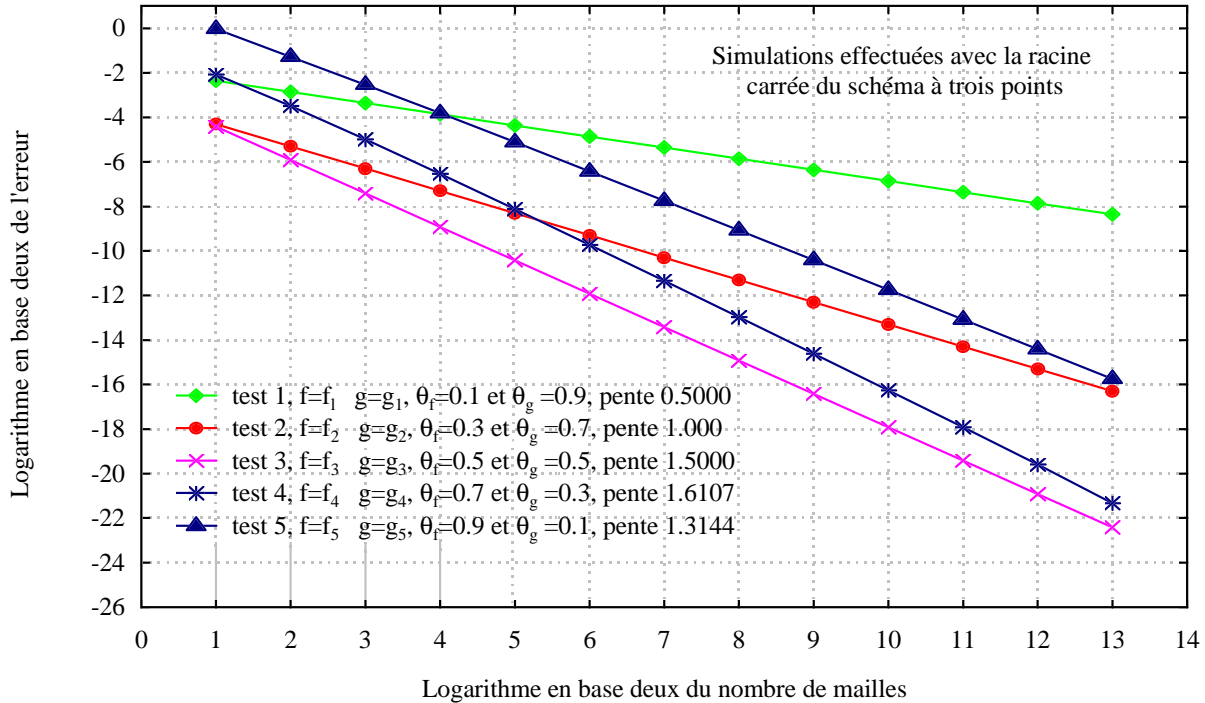


Figure 31 : $(D^{1/2} u)(t) = \Phi(u(t), t) = \theta_f f(u) + \theta_g g(t)$, erreurs en norme L^∞


5) CONCLUSION.

- Nous avons proposé dans ce mémoire deux idées pour construire des schémas aux différences finies en vue de l'approximation d'équations semi-différentielles ordinaires, c'est à dire de la forme $(D^{1/2} u)(t) = \Phi(u(t), t)$. La première idée utilise les racines carrées formelles d'opérateurs aux différences classiques et la seconde une représentation intégrale traitée ensuite avec des méthodes de quadrature. Nous avons détaillé les calculs algébriques et les algorithmes nécessaires à la mise en œuvre numérique sur ordinateur. Nous avons mis en évidence divers ordres de convergence pour les normes quadratique et du maximum dans le cas où la dynamique se ramène à une quadrature ou bien demande une véritable approche par un système dynamique dans cinq cas particuliers où la solution $t \mapsto u(t)$ est un monôme de degré inférieur ou égal à 5 en \sqrt{t} .

- Nous insistons ici sur le fait que tous les schémas aux différences finies utilisés dans ce mémoire conservent la propriété de causalité qui respecte le passé. Mais une équation semi-différentielle d'ordre un demi possède la dynamique d'un

système à mémoire ; en effet, il est a priori nécessaire d'utiliser (donc de stocker) l'ensemble des valeurs u^0, u^1, \dots, u^N pour avancer dans le temps. En conséquence, si on a effectué le calcul de la solution approchée u^j jusqu'à l'instant $N\Delta t$, il est très facile de le prolonger ensuite d'un pas de temps jusqu'à l'instant discret $(N+1)\Delta t$ ou même de plusieurs.

- Il faudra dans la suite de ce travail aborder des dynamiques où des singularités sont présentes, comme par exemple pour le cas proposé par Joulin [Jo85] en combustion et traité récemment par Audounet et Roquejoffre [AR98] avec des représentations diffusives telles que décrites par Montseny [Mo98].

6) RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES.

- [AR98] J. Audouet, J.M. Roquejoffre. An asymptotic fractional differential model of spherical flame, *ESAIM Proceedings*, vol 5, p. 15-27, URL : [http : //www.emath.fr/proc/vol5](http://www.emath.fr/proc/vol5), december 1998.
- [GDR2K] URL du GDR de calcul fractionnaire, 2000.
- [HNW87] E. Hairer, S.P. Nørsett, G. Wanner. *Solving ordinary differential equations I, Nonstiff problems*, Springer Verlag, New York, 1987.
- [Jo85] G. Joulin. Point source initiation of lean spherical flames of light reactants : an asymptotic theory, *Combustion Sci. and Techn.*, p. 99-113, 1985.
- [Li78] J. Lighthill. *Waves in fluids*, Cambridge University Press, 1978.
- [LM68] J.L. Lions and E. Magenes. *Problèmes aux limites non homogènes et applications*, Dunod, Paris, 1968.
- [Mo98] G. Montseny. Diffusive representations of pseudo-differential time-operators, *ESAIM Proceedings*, vol 5, p. 159-175, URL : [http : //www.emath.fr/proc/vol5](http://www.emath.fr/proc/vol5), december 1998.
- [MD99] R. Msallam, F. Dubois. Mathematical model for coupling a quasi-unidimensional perfect flow with an acoustic boundary layer, Rapport interne de l'Institut aérotechnique, numéro 326-99, juillet 1999.
- [OS74] K.B. Oldham, J. Spanier. *The fractional calculus*, Academic Press, New York and London, 1974.
- [Ou95] A. Oustaloup. *La dérivation non entière*, Hermès, Paris, 1995.
- [RT83] P.A. Raviart, J.M. Thomas. *Introduction à l'analyse numérique des équations aux dérivées partielles*, Masson, Paris, 1983.