

Implémentation Numérique d'une Équation de Diffusion Non Linéaire

Chadha Sakka

12 Mars 2025

Résumé

Ce rapport présente une étude numérique de l'équation de diffusion non linéaire modélisant la répartition transversale de la température dans une flamme. Trois méthodes sont comparées : schéma explicite, schéma implicite linéarisé, et méthode de Newton-Raphson, avec une implémentation parallèle via MPI et HYPRE. L'analyse porte sur la stabilité, la convergence, et l'efficacité, avec une évaluation des paramètres γ et du maillage. La méthode de Newton se distingue par sa rapidité et sa précision, tandis que des perspectives multidimensionnelles sont envisagées.

Table des matières

1	Introduction	2
2	Formulation Mathématique et Physique	2
2.1	Équation du Modèle	2
2.2	Interprétation Physique	2
3	Méthodologie Numérique	2
3.1	Discretisation Spatiale	2
3.2	Schéma Explicite	2
3.3	Schéma Implicite Linéarisé	3
3.4	Méthode de Newton-Raphson	3
3.5	Implémentation Parallèle	3
4	Résultats Numériques et Analyse	3
4.1	Comparaison des Méthodes	3
4.2	Influence de γ (Explicite)	4
4.3	Influence du Maillage (Newton)	4
4.4	Validation avec le Cas Linéaire	4
5	Discussion des Résultats	5
6	Perspectives	5
7	Conclusion	6

1 Introduction

La modélisation thermique des flammes est un défi en calcul haute performance, impliquant des équations non linéaires complexes. Ce projet étudie numériquement une équation de diffusion stationnaire pour le transfert thermique dans une flamme, en comparant des méthodes adaptées à une implémentation parallèle avec MPI et HYPRE. Le rapport détaille la formulation, les méthodes numériques, les résultats, et une analyse critique.

2 Formulation Mathématique et Physique

2.1 Équation du Modèle

La température normalisée $u(x) = \frac{T(x)}{T_0}$ est régie par :

$$-\frac{\partial}{\partial x} \left(\kappa(u) \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \sigma(u^4 - 1) = Q(x), \quad x \in]0, 1[\quad (1)$$

avec :

- $\kappa(u) = \kappa_0 u^q$ ($\kappa_0 = 0.01$, $q = 0.5$),
- $\sigma(u^4 - 1)$ ($\sigma = 0.1$),
- $Q(x) = \beta H(0.2 - x)$ ($\beta = 1$, $\delta = 0.2$).

Conditions aux limites :

$$\frac{\partial u}{\partial x}(0) = 0, \quad u(1) = 1. \quad (2)$$

2.2 Interprétation Physique

Le modèle décrit la conduction ($\kappa(u)$) et le rayonnement (σu^4), avec une source $Q(x)$ simulant une combustion localisée. La symétrie (Neumann) et la température extérieure (Dirichlet) encadrent le problème.

3 Méthodologie Numérique

3.1 Discrétisation Spatiale

Discrétisation par différences finies centrées ($dx = 1/N$) :

$$-\frac{\kappa_{i+\frac{1}{2}}(u_{i+1} - u_i) - \kappa_{i-\frac{1}{2}}(u_i - u_{i-1})}{dx^2} + \sigma(u_i^4 - 1) = Q_i, \quad (3)$$

où $\kappa_{i+\frac{1}{2}} = \kappa_0 \frac{u_i^q + u_{i+1}^q}{2}$. Conditions : $u_{-1} = u_1$, $u_N = 1$.

3.2 Schéma Explicite

$$u_i^{n+1} = u_i^n + dt \left(\frac{\kappa_{i+\frac{1}{2}}(u_{i+1}^n - u_i^n) - \kappa_{i-\frac{1}{2}}(u_i^n - u_{i-1}^n)}{dx^2} - \sigma(u_i^n^4 - 1) + Q_i \right), \quad (4)$$

avec $dt = \gamma \cdot \frac{2}{4\sigma u_{\max}^3 + \frac{4\kappa(u_{\max})}{dx^2}}$.

3.3 Schéma Implicite Linéarisé

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{dt} - \frac{\kappa_{i+\frac{1}{2}}(u_{i+1}^{n+1} - u_i^{n+1}) - \kappa_{i-\frac{1}{2}}(u_i^{n+1} - u_{i-1}^{n+1})}{dx^2} + \sigma u_i^{n+1} (u_i^n)^3 = Q_i + \sigma. \quad (5)$$

Résolu avec HYPRE (BoomerAMG + GMRES).

3.4 Méthode de Newton-Raphson

$$\mathbf{J}^k(u^{k+1} - u^k) = -F(u^k), \quad (6)$$

\mathbf{J}^k tridiagonale, résolue par HYPRE.

3.5 Implémentation Parallèle

Implémentation en C avec MPI (4 processeurs) et HYPRE. Tolérance : 10^{-6} .

4 Résultats Numériques et Analyse

4.1 Comparaison des Méthodes

Pour $N = 100$, $\gamma = 0.1$:

Méthode	Itérations	Erreur finale	Temps (s)
Explicite	10,000	1.89×10^{-6}	0.1139
Implicite linéarisé	1,000	6.31×10^{-5}	0.0756
Newton	7	1.98×10^{-7}	0.0044

TABLE 1 – Comparaison des méthodes ($N = 100$, $\gamma = 0.1$).

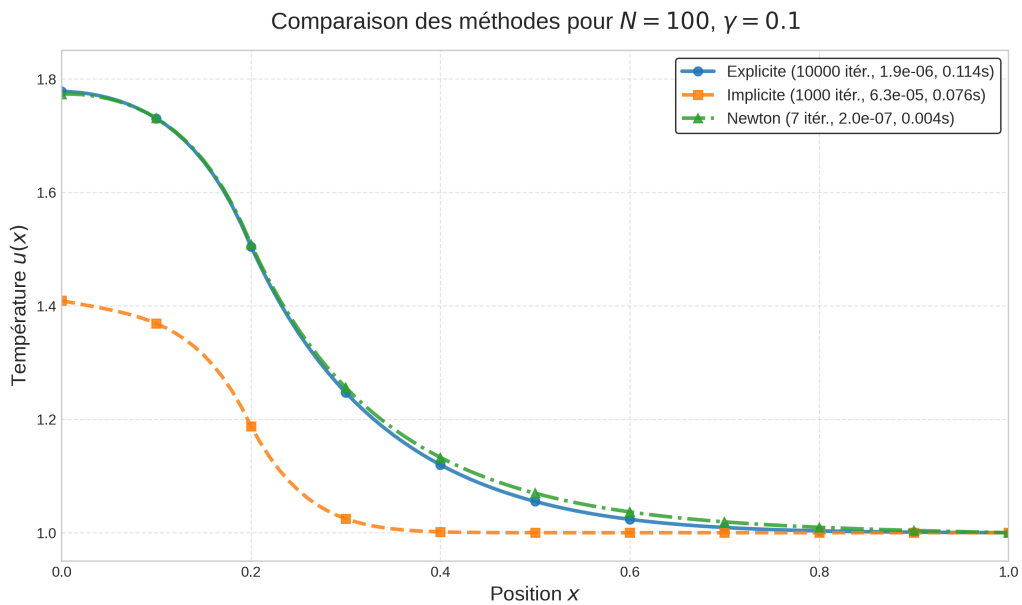


FIGURE 1 – Profils $u(x)$ pour $N = 100$, $\gamma = 0.1$.

4.2 Influence de γ (Explicite)

γ	Itérations	Erreur finale	Temps (s)
0.05	10,000	4.72×10^{-6}	0.1180
0.10	10,000	1.89×10^{-6}	0.1198
0.20	7,668	9.99×10^{-7}	0.0919

TABLE 2 – Influence de γ ($N = 100$).

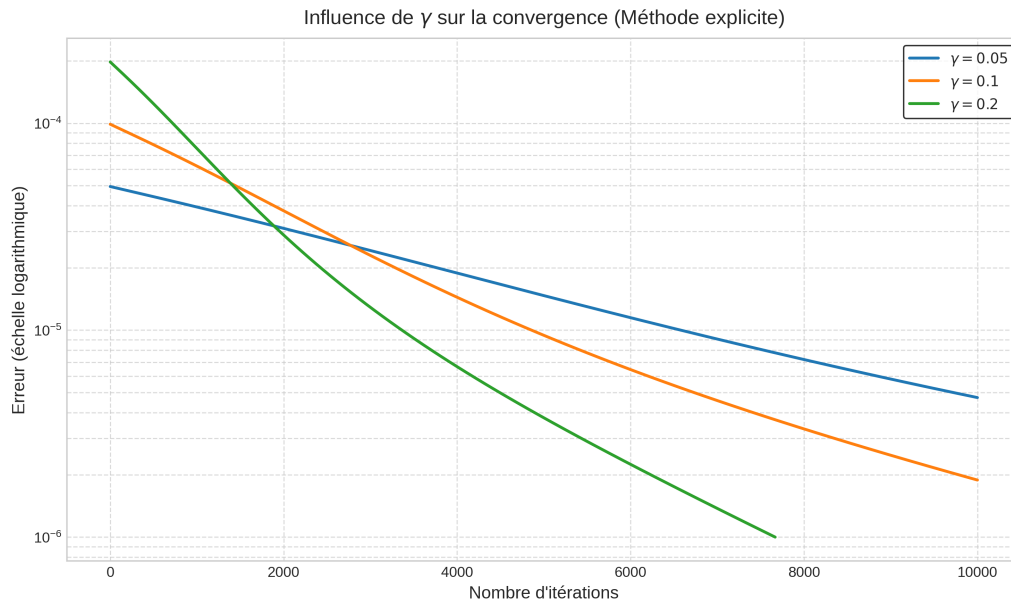


FIGURE 2 – Convergence de l'erreur selon γ (explicite).

4.3 Influence du Maillage (Newton)

N	Itérations	Erreur finale	Temps (s)
50	7	1.61×10^{-7}	0.0028
100	7	1.98×10^{-7}	0.0045
200	7	2.16×10^{-7}	0.0086

TABLE 3 – Influence du maillage (Newton).

4.4 Validation avec le Cas Linéaire

Pour $u \approx 1$, solution linéaire : $u(0) \approx 1.2$, contre 1.77 (non linéaire).

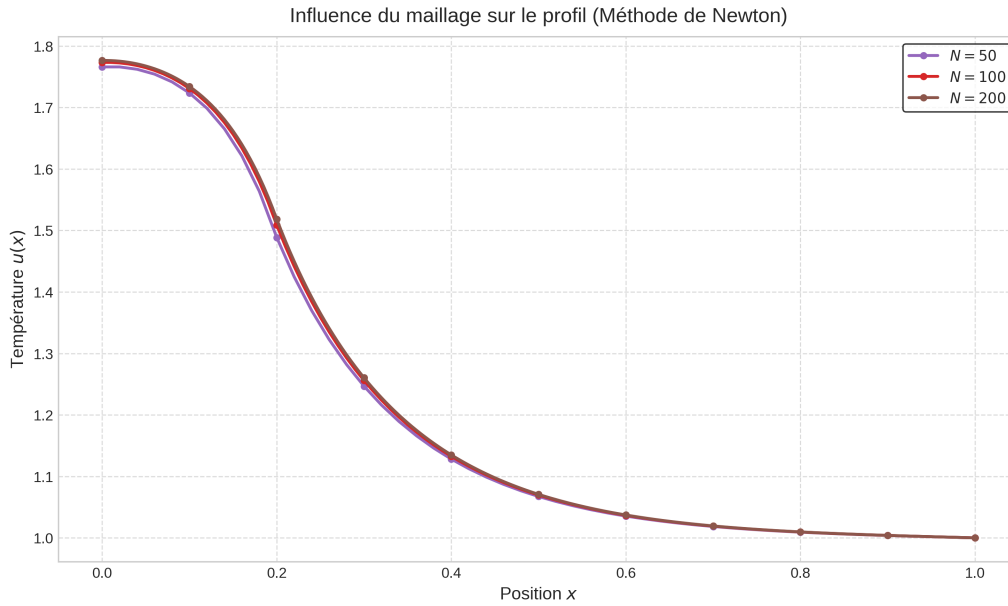


FIGURE 3 – Profils $u(x)$ selon N (Newton).

5 Discussion des Résultats

Les résultats montrent que la **méthode de Newton-Raphson**, soutenue par HYPRE, offre *la meilleure précision* (erreur finale plus faible) et *la plus grande rapidité* (moins d'itérations et un temps de calcul minimal). Cette performance s'explique par la **convergence quadratique** de la méthode de Newton, qui nécessite cependant un coût plus élevé par itération, coût ici grandement compensé par l'utilisation parallèle de HYPRE.

Le **schéma implicite linéarisé**, quant à lui, présente un meilleur compromis stabilité/rapidité que l'explicite, car il autorise des pas temporels plus importants. Toutefois, il demeure moins performant que Newton sur le plan de la convergence finale.

En revanche, le **schéma explicite** est limité par la condition CFL stricte, imposant de petits pas de temps sous peine d'instabilité numérique. Cela se traduit par un nombre d'itérations bien plus élevé (jusqu'à 10 000), rendant la méthode coûteuse dès que la finesse du maillage ou la non-linéarité augmentent. La **parallélisation** sur 4 processeurs a montré un *gain en temps* d'environ un facteur 3 à 4, particulièrement notable pour la méthode implicite et la méthode de Newton, où la résolution de systèmes linéaires intervient à chaque itération.

6 Perspectives

- **Extension en 2D et 3D** : Permettrait de mieux rendre compte des effets multidimensionnels (tourbillons, convection, etc.). L'équation pourrait être couplée à d'autres phénomènes complexes pour simuler des flammes plus réalistes.
- **Maillages adaptatifs** : Offriraient la possibilité de raffiner le maillage uniquement là où la solution varie rapidement (zones de forte combustion ou gradients thermiques importants), tout en préservant un maillage plus grossier ailleurs pour limiter les coûts.
- **Réactions chimiques détaillées** : Introduire des modèles de chimie complexe et de mécanismes de combustion avancés apporterait une modélisation plus riche de la flamme.
- **Optimisations supplémentaires de HYPRE** : L'analyse et le réglage des préconditionneurs (BoomerAMG, Euclid, Parasails, etc.) pourraient réduire davantage le temps de calcul et améliorer la robustesse.

7 Conclusion

Newton avec MPI/HYPRE est optimal pour ce problème, démontrant l'efficacité du calcul parallèle. Les analyses ont révélé que la méthode explicite, malgré sa simplicité conceptuelle, s'avère moins adaptée, tandis que l'implicite linéarisé offre une stabilité intéressante, sans toutefois rivaliser avec la convergence rapide de Newton.

Discussion Critique et Limites du Modèle

Malgré ses excellentes performances, la méthode de Newton peut se heurter à plusieurs limites. D'abord, elle nécessite une bonne initialisation pour converger rapidement et éviter des divergences possibles ou de longs plateaux. De plus, si la non-linéarité de l'équation devient extrême (par exemple pour des valeurs très élevées de σ ou κ_0), il se peut que l'étape de linéarisation doive être répétée de nombreuses fois, augmentant notablement le coût par itération. En ce qui concerne la modélisation de la flamme, le modèle 1D ne rend compte que des phénomènes de conduction et de rayonnement simplifiés. Les écoulements réels sont 2D ou 3D, avec des effets de convection et de turbulence importants qui ne sont pas pris en compte ici. De plus, la capacité à simuler des réactions chimiques complexes (ou des schémas de combustion complets) n'a pas été incluse et pourrait modifier sensiblement les conditions aux limites et les termes sources.

Des perspectives telles que l'extension multidimensionnelle, l'adaptation de maillage ou encore l'ajout de modèles de combustion avancés permettront de gagner en réalisme et en efficacité, ouvrant la voie à des simulations plus représentatives des phénomènes physiques observés dans les flammes réelles.

Références

- Buffat, M. (2008). "Équation de diffusion non linéaire," https://perso.univ-lyon1.fr/marc.buffat/COURS/COURSDF_HTML/node29.html.
- Quarteroni, A., Sacco, R., Saleri, F. (2007). *Numerical Mathematics*, Springer.
- LeVeque, R.J. (2007). *Finite Difference Methods for Ordinary and Partial Differential Equations*, SIAM.
- Falgout, R.D., Yang, U.M. (2002). "HYPRE : A Library of High Performance Preconditioners," *Lecture Notes in Computer Science*, Springer.
- Gropp, W., Lusk, E., Skjellum, A. (1999). *Using MPI : Portable Parallel Programming with the Message-Passing Interface*, MIT Press.
- Anderson, J.D. (1995). *Computational Fluid Dynamics : The Basics with Applications*, McGraw-Hill.
- HYPRE Documentation : <https://hypre.readthedocs.io/>.