Sorbonne Université, Master 1 Mathématiques et applications 2023–2024
4MA006 Fondements des méthodes numériques

Projet TP

Notation. On rappelle que votre note de TP correspond à 30% de votre note de 4MA006 et que cette note de TP est incompressible, c'est à dire sans rattrapage. Votre projet est individuel et il sera évalué comme suit :

- rapport et code : clarté, lisibilité, organisation.
- soutenance orale : aisance à utiliser le code, pertinence des explications et réponses aux questions, recul sur le lien entre résultats théoriques et observations numériques. La soutenance orale représentera une très large moitié de la note finale.

Vous êtes bien sûr autorisé à discuter du projet entre vous et avec l'équipe enseignante de l'UE mais par individuel on entend que toutes similitudes trop importantes pour être considérées comme le fruit d'un heureux hasard, et ceci que ce soit au niveau du code et/ou du rapport, seront considérées comme de la triche et donc sanctionnées sévèrement au niveau de la note.

Le code. Le code doit être envoyé sous la forme d'un ou plusieurs fichiers et doit être développé en `Python 3` (extention `.py`). La réponse de chaque exercice doit pouvoir être visualisée par lancement d'un fichier au nom de celui-ci (par exemple `exercice1.py`).
Votre code doit être agréable à lire (noms de variables explicites, indentation, un minimum de commentaires,...). Pour éviter tout problème d'encodage, ne pas utiliser d'accent dans vos commentaires.

Le rapport. Le rapport doit être retourné en format `.pdf`. Il peut prendre aussi la forme d'un notebook, extension `.ipynb` (**en plus** des fichiers de code `.py`). Dans le cas d'un rapport pdf, de préférence utiliser LaTeX mais vous pouvez également envoyer des notes manuscrites scannées (soigneuses).

Deadline. Le nom de tous vos fichiers doit débuter par `NOM prenom`. Vos fichiers, code et rapport, seront à déposer sur la page Moodle de 4M006 **avant le 30/12/2023.**

Tout retard, ou non respect des consignes décrites ici, sera sanctionné dans votre note de TP.

Le sujet comporte des parties indépendantes. L'important n'est pas de le finir, l'évaluation portera plus sur la qualité du travail rendu que sa quantité. Pour toute question ou commentaire sur ce projet, il ne faut pas hésiter à prendre contact via Moodle ou par mail :

sidi-mahmoud.kaber@sorbonne-universite.fr
ruiyang.dai@sorbonne-universite.fr

1 L'équation de Fisher-Kolmogorov-Petrovski-Piskunov.

On considère une région de l'espace remplie avec deux espèces chimiques A, B. Ces espèces réagissent selon l'équation:

$$A + B \to 2A. \tag{1}$$

On appèle $u(x,t)$ la proportion de particules de l'espèce A dans un point x de l'espace, au temps t. La concentration de particules de l'espèce B est donc $1-u$. On remarque ici que $0 \leq u(x,t) \leq 1$. On a, à l'instant $t=0$ une concentration $u_0(x)$ de l'espèce A. On veut determiner une équation aux dérivées partielles qui décrit l'évolution en espace-temps de la concentration de particules A. La concentration de A évolue suite à deux mécanismes:

1. Diffusion: les particules de l'espèce A tendent à diffuser des regions à plus forte concentration à des regions à plus faible concentration.
2. Réaction chimique: en chaque point x, la proportion de particules A tend à augmenter proportionnellement à $u(1-u)$.

Le limite déterministe de ces deux mécanismes s'écrit comme suit. Soit $\nu \in \mathbb{R}^+$ le coefficient de diffusion et $\gamma \in \mathbb{R}^+$ le taux de reaction. Nous avons:

$$\partial_t u = \nu \Delta u + \gamma u(1-u). \tag{2}$$

Il s'agit de l'équation de Fisher-Kolmogorov-Petrovski-Piskunov (FKPP), qui est un example important d'équation de réaction-diffusion.

2 Domaine 1d, différences finies.

Soit $\overline{\Omega} = [0,1]$ le domaine spatiale et $t \in [0, 1.0]$ le temps. Nous considérons les données aux bords suivantes: $u(0,t) = u(1,t) = 0,\ \forall t \in [0, 1.0]$. Le coefficient de diffusion est $\nu = 0.01$ et le coefficient de réaction est $\gamma = 10$. La condition initiale est:

$$u(x,0) = 0.25 \sin(\pi x) \exp(-20(x-0.5)^2).$$

L'équation s'écrit donc:

$$\begin{cases} \partial_t u = \nu \partial_x^2 u + \gamma u(1-u) \\ u(0,t) = u(1,t) = 0 \\ u(x,0) = 0.25 \sin(\pi x) \exp(-20(x-0.5)^2) \end{cases} \tag{3}$$

On introduit la discretisation temporelle: on divise l'intervalle de temps $[0,1]$ en $N_t + 1$ points et on définie $\Delta t = \frac{1}{N_t}$. On notera $u^{(n)}(x)$ l'approximation numérique de $\overline{u}^{(n)} = u(x, t_n)$.

1. Ecrire l'équation discretisée en temps en utilisant la méthode d'Euler implicite. Ecrire le problème sous la forme: $\mathcal{F}(u^{(n+1)}) = u^{(n)}$. On remarque qu'il s'agit d'un problème non-linéaire. Afin de limiter la complexité de la méthode de résolution, on étudie un schéma alternatif pour discretiser le problème en temps.

2. On considère le schéma suivant:

$$\frac{u^{(n+1)} - u^{(n)}}{\Delta t} = \nu \partial_x^2 u^{(n+1)} + \gamma u^{(n+1)} - \gamma u^{(n)} u^{(n+1)}. \tag{4}$$

Nous remarquons ici que nous avons introduit une approximation semi-implicite consistante du terme quadratique. Le problème est linéaire en $u^{(n+1)}$.

Exercice 1 On discretise le problème (4) en espace en utilisant une méthode des différences finies centrées. Pour cela faire on considère $N_x + 2$ points $\{x_i\}_{0 \le i \le N+1}$ où $x_i = ih$, $i = 0, \dots, N_x + 1$ et $h = 1/(N_x + 1)$. On notera $U_h^{(n+1)}$ le vecteur dont les composantes sont $u_i^{(n+1)}$, approximation numérique de $u(x_i, t_{n+1})$, qu'on rassemble dans un vecteur $\overline{U}_h^{(n+1)}$.

1. Dériver l'expression du schéma discret qu'on utilisera pour calculer l'approximation $u_i^{(n+1)} \approx \overline{u}(x_i, t_{n+1})$. Montrer que le problème peut s'écrire de la manière suivante:

$$\left[A + B^{(n)}\right] U_h^{(n+1)} = U_h^{(n)} + F, \tag{5}$$

où $A \in \mathbb{R}^{N_x \times N_x}$ est une matrice carrée, $B^{(n)} \in \mathbb{R}^{N_x \times N_x}$ est une matrice carrée dont les entrées dependent du vecteur $U^{(n)}$ et $F \in \mathbb{R}^{N_x}$ un vecteur.

2. Coder une fonction dont les inputs sont: $N, U_h^{(n)}$ et qui renvoie, comme output, $A, B^{(n)}, F$.

3. Résoudre numériquement le problème.

4. On se propose d'étudier la convergence de manière empirique. Pour cela, choisir $N_x = 10^3$ et $N_t = 10^3$. On considère cette simulation comme un résultat de référence et on rassemble les valeurs dans le vecteur $\bar{U}^n$. On les comparent avec des simulations obtenues en utilisant des valeurs plus petites de N_x, N_t. Montrer dans un graphique les courbes de convergence, lorsqu'on mesure les erreurs:

$$\varepsilon^{(2)}_{\Delta t, \Delta x} = \max_{n \ge 0} \left(\ \|U^n_{\Delta x} - \bar{U}^n_{\Delta x}\|_{2,\Delta} \ \right), \tag{6}$$

$$\varepsilon^{(2)}_{\Delta t, \Delta x} = \max_{n \ge 0} \left(\ \|U^n_{\Delta x} - \bar{U}^n_{\Delta x}\|_{\infty,\Delta} \ \right), \tag{7}$$

Le vecteur $\bar{U}^n_{\Delta x}$ désigne ici la restriction du vecteur $\bar{U}^n$ au maillage grossier. Faire donc attention à choisir des N_x, N_t telles que les points x_i soient aussi des points utilisés pour obtenir la solution de référence.

Exercice 2 Le splitting de Strang est une manière de decomposer la resolution d'un problème d'évolution en plusieurs étapes, faisant intervenir qu'une partie de l'équation à la fois. Ce procédé appliqué à l'équation de FKPP peut s'écrire de la manière suivante:

$$\begin{aligned} \frac{u^{(n+1/3)} - u^{(n)}}{\Delta t/2} &= \nu \partial_x^2 u^{(n+1/3)}, \\ \frac{u^{(n+2/3)} - u^{(n+1/3)}}{\Delta t} &= \gamma u^{(n+2/3)}(1 - u^{(n+2/3)}), \\ \frac{u^{(n+1)} - u^{(n+2/3)}}{\Delta t/2} &= \nu \partial_x^2 u^{(n+1)}. \end{aligned} \tag{8}$$

Le splitting consiste à effectuer un demi-pas de diffusion pure, suivi par un pas de réaction, suivi par un demi-pas de diffusion. Nous remarquons ici que l'étape de reaction est purement ponctuelle, elle ne fait pas intervenir des opérateurs différentiels en espace. La méthode d'Euler implicite donne lieu, pour cette étape, à un problème non-linéaire qui peut se résoudre à moindre cout. Ecrire les problèmes linéaires et le problème non-linéaire satisfaits par $u^{(n+1/3)}, u^{(n+2/3)}, u^{(n+1)}$.

1. Ecrire le schéma discret en utilisant des différences finies centrées pour discretiser le problème en espace.

2. Coder la méthode. Ecrire deux fonctions, une pour résoudre l'étape de diffusion, l'autre pour résoudre l'étape de réaction. Lorsque on résout l'étape de réaction : on discute du choix parmi les deux solutions possibles de l'équation de deuxième dégrée que l'on doit résoudre dans l'étape d'Euler implicite.

3. Etudier la convergence en reprenant les calculs faits dans l'exercice precedent.

Consigne générale: Écrire de manière claire et concise quelles sont les observations que vous avez faites lors de la résolution du problème par les différentes méthodes proposées. Laquelle choisirez vous dans le cas présent?