Université catholique de Louvain

Ecole de physique

Simulation numérique en physique [lphy2371]

Equation d'Advection-Diffusion et Prédictibilité

Auteurs :
Arnaud Schils
Valéry Materne

Enseignant :
Pr. Michel Crucifix

Décembre 2016

Première partie

Equation d'Advection-Diffusion

1.1 Fournissez un schéma numérique explicite d'ordre $\mathcal{O}(h+k)$. Donnez-en le stencil. Nous pouvons introduire les facteurs $\lambda_d = Dk/h^2$ et $\lambda_b = bk$. Quelles importances ces facteurs ont-ils pour la condition de stabilité ?

Dans cette section un schéma numérique explicite est fourni pour l'équation aux dérivées partielles suivantes :

$$D\frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2} - a\frac{\partial u(x,t)}{\partial x} - bu(x,t) = \frac{\partial u(x,t)}{\partial t} \tag{1}$$

où D, a, b sont des constantes et D est positive. Dans la suite de ce texte les dépendances en x et t de la fonction u ne seront pas toujours mentionnées explicitement.

Schéma numérique explicite

Les dérivées de l'Equation 1 sont remplacées par leurs expressions en différences finies. Soient $u(x_i, t_j) \equiv U_{i,j}$, h le pas d'espace et k le pas de temps, ces expressions sont :

$$\left.\frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2}\right|_{x=x_i,t=t_j} = \frac{U_{i-1,j} - 2U_{i,j} + U_{i+1,j}}{h^2} + \mathcal{O}(h^2) \tag{2}$$

$$\left.\frac{\partial u(x,t)}{\partial x}\right|_{x=x_i,t=t_j} = \frac{U_{i+1,j} - U_{i,j}}{h} + \mathcal{O}(h) \tag{3}$$

$$\left.\frac{\partial u(x,t)}{\partial t}\right|_{x=x_i,t=t_j} = \frac{U_{i,j+1} - U_{i,j}}{k} + \mathcal{O}(k)\ . \tag{4}$$

Notons que pour la dérivée seconde par rapport à x, la formule à trois points d'ordre $\mathcal{O}(h^2)$ a été choisie au lieu de celles d'ordre $\mathcal{O}(h)$ afin d'obtenir à la fin une matrice tridiagonale. En injectant ces différences finies dans l'Equation 1 on obtient :

$$D\frac{U_{i-1,j}-2U_{i,j}+U_{i+1,j}}{h^2}+\mathcal{O}(h^2)-a\frac{U_{i+1,j}-U_{i,j}}{h}+\mathcal{O}(h)-bU_{i,j} = \frac{U_{i,j+1}-U_{i,j}}{k}+\mathcal{O}(k)\ . \quad (5)$$

En multipliant l'expression par le pas de temps k, en isolant $U_{i,j+1}$ et en négligeant l'erreur en $\mathcal{O}(h^2)$ car elle est d'ordre supérieur à $\mathcal{O}(h)$ on obtient :

$$U_{i,j+1}=\frac{Dk}{h^2}(U_{i-1,j}-2U_{i,j}+U_{i+1,j})-\frac{ak}{h}(U_{i+1,j}-U_{i,j})-bkU_{i,j}+U_{i,j} + \mathcal{O}(h+k)\ . \quad (6)$$

En définissant $\lambda_d=\frac{Dk}{h^2}$, $\lambda_a=\frac{ak}{h}$ et $\lambda_b=bk$ l'expression devient :

$$U_{i,j+1}=\lambda_d(U_{i-1,j}-2U_{i,j}+U_{i+1,j})-\lambda_a(U_{i+1,j}-U_{i,j})-\lambda_bU_{i,j}+U_{i,j} + \mathcal{O}(h+k)\ . \quad (7)$$

Sans spécifier l'ordre de l'erreur et en réarrangeant l'expression on a :

$$U_{i,j+1}=U_{i-1,j}\lambda_d+U_{i,j}(-2\lambda_d+\lambda_a-\lambda_b+1)+U_{i+1,j}(\lambda_d-\lambda_a)\ . \quad (8)$$

En imposant les conditions aux bords constantes $\forall j, U_{0,j}=0$ et $\forall j, U_{N+1,j}=0$, le schéma numérique peut s'écrire sous forme matricielle comme ceci :

$$M=\begin{pmatrix} 1 & 0 & ... & 0 & 0 \\ \lambda_d & -2\lambda_d+\lambda_a-\lambda_b+1 & \lambda_d-\lambda_a & 0 & ... \\ . & . & . & . & . \\ . & . & . & . & . \\ . & . & . & . & . \\ 0 & ... & \lambda_d & -2\lambda_d+\lambda_a-\lambda_b+1 & \lambda_d-\lambda_a \\ 0 & 0 & ... & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (9)$$

$$
\begin{pmatrix} U_{0,j+1} \\ U_{1,j+1} \\ . \\ . \\ . \\ U_{N,j+1} \\ U_{N+1,j+1} \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} U_{0,j} \\ U_{1,j} \\ . \\ . \\ . \\ U_{N,j} \\ U_{N+1,j} \end{pmatrix} \tag{10}
$$

où M est une matrice tridiagonale. Notons que les $U_{i,0}$ sont connus grâce aux conditions initiales.

Stencil

Le stencil de ce schéma explicite est présenté à la Figure 1. Chaque $U_{i,j+1}$ dépend en effet des $U_{i-1,j}$, $U_{i,j}$ et $U_{i+1,j}$.

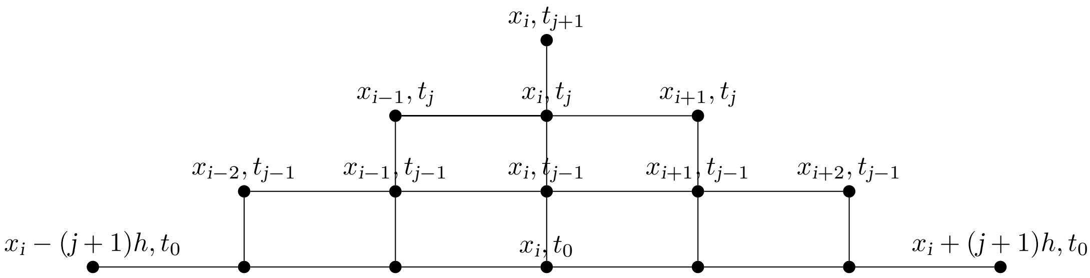

FIGURE 1 – Stencil du schéma numérique explicite.

Importance des facteurs λ_d, λ_a et λ_b pour la condition de stabilité

Ces facteurs sont reliés aux conditions de stabilité A et de stabilité L de la méthode aux différences finies. Pour le montrer, prenons comme condition initiale :

$$
u(x_i, 0) = U_{i,0} = g(x_i) = \omega_0 \exp(I r x_i) \ , \tag{11}
$$

où $I \equiv \sqrt{-1}$. Partons de l'Equation 8 pour $j = 0$:

$$U_{i,1} = U_{i-1,0}\lambda_d + U_{i,0}(-2\lambda_d + \lambda_a - \lambda_b + 1) + U_{i+1,0}(\lambda_d - \lambda_a)\ . \tag{12}$$

Depuis la condition initiale (Equation 11) on a que :

$$\begin{aligned} U_{i\text{-}1,0} = &\quad g(x_i - h) = \omega_0 \exp\left(Ir(x_i - h)\right) = U_{i,0}\exp(-Irh) && (13)\\ U_{i+1,0} = &\quad g(x_i + h) = \omega_0 \exp\left(Ir(x_i + h)\right) = U_{i,0}\exp(Irh) && (14)\end{aligned}$$

En injectant ces expressions de $U_{i\text{-}1,0}$ et $U_{i+1,0}$ dans l'Equation 12 on obtient :

$$\begin{aligned} U_{i,1} &= U_{i,0}\left(\lambda_d \exp(-Irh) - 2\lambda_d + \lambda_a - \lambda_b + 1 + (\lambda_d - \lambda_a)\exp(Irh)\right)\\ &= U_{i,0}\left(2\lambda_d(\cos(rh) - 1) + \lambda_a(1 - \exp(Irh)) - \lambda_b + 1\right)\\ &= U_{i,0}\left(1 - 4\lambda_d \sin^2(rh/2) + \lambda_a(1 - \exp(Irh)) - \lambda_b\right) = (1-q)\,U_{i,0} \end{aligned} \tag{15}$$

avec $q \equiv 4\lambda_d \sin^2(rh/2) - \lambda_a(1 - \exp(Irh)) + \lambda_b$. Par un développement similaire on en déduit que :

$$U_{i,j} = (1-q)^j U_{i,0} \tag{16}$$

La méthode numérique est dite A-stable si les x_i restent bornés dans le problème de décroissance radioactive. C'est à dire si :

$$|1-q| \leq 1 \implies -1 \leq 1-q \leq 1 \implies 0 \leq q \leq 2 \tag{17}$$

$$\implies \boxed{0 \leq 4\lambda_d \sin^2(rh/2) - \lambda_a(1 - \exp(Irh)) + \lambda_b \leq 2} \tag{18}$$

La méthode est donc conditionnellement A-stable, en fonction des valeurs de λ_d, λ_a et λ_b. La méthode est dite L-stable si :

$$\lim_{q\to\infty} f(q) = 0\ . \tag{19}$$

Ce qui n'est trivialement pas le cas ici, la méthode n'est pas L-stable :

$$\lim_{q\to\infty} (1-q)^j \neq 0\ . \tag{20}$$

1.2 Fournissez la solution analytique de l'équation, ainsi que la relation de dispersion. Discutez brièvement les cas particuliers déjà vus au cours (D=0, b=0, etc.).

L'équation aux dérivées partielles à résoudre est l'Equation 1. Les conditions aux bords suivantes sont imposées :

$$\begin{cases} u(x,0) = g(x) \\ u(0,t) = u(l,t) = 0 \end{cases} \tag{21}$$

où $l > 0$. La solution u est donc recherchée dans le domaine :

$$\begin{cases} t \geq 0 \\ 0 < x < l \end{cases} \tag{22}$$

L'Equation 1 peut-être résolue par la méthode de séparation de variables. La solution u est supposée être de la forme :

$$u(x,t) = v(x)w(t) \tag{23}$$

En injectant cette forme de u dans l'Equation 1 on obtient :

$$Dw(t)\frac{\partial^2 v(x)}{\partial x^2} - aw(t)\frac{\partial v(x)}{\partial x} - bv(x)w(t) = v(x)\frac{\partial w(t)}{\partial t} \tag{24}$$

En divisant cette équation par $v(x)w(t)$ on obtient :

$$\frac{D}{v}\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} - \frac{a}{v}\frac{\partial v}{\partial x} - b = \frac{1}{w}\frac{\partial w}{\partial t} \equiv C_1 \tag{25}$$

Chaque partie de l'équation est en effet égale à une constante C_1 puisque la partie gauche ne dépend que de x et la partie droite ne dépend que de t. L'équation peut maintenant être résolue en résolvant séparément la partie qui dépend du temps t et la partie qui dépend de la position x. Pour la partie dépendante du temps on a :

$$\frac{1}{w}\frac{\partial w}{\partial t} = C_1 \tag{26}$$
$$\frac{\partial w}{\partial t} = C_1 w \tag{27}$$
$$w(t) = C_2 e^{C_1 t} \tag{28}$$

où C_2 est une constante. Pour la partie dépendante de la position x on a :

$$\frac{D}{v}\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} - \frac{a}{v}\frac{\partial v}{\partial x} = C_1 + b \tag{29}$$
$$D\frac{d^2 v}{dx^2} - a\frac{dv}{dx} - (C_1 + b)v = 0 \tag{30}$$

C'est une équation différentielle linéaire homogène du 2ème ordre. Sa solution dépend donc de son polynôme caractéristique :

$$Dr^2 - ar - (C_1 + b) = 0 \tag{31}$$
$$\rho = a^2 + 4D(C_1 + b) \tag{32}$$

Les deux racines de ce polynôme sont :

$$r_{1,2} = \frac{a \pm \sqrt{\rho}}{2D} \tag{33}$$

En fonction du signe de ρ la solution de l'équation peut avoir trois formes.

Si $\rho > 0$

$$v(x) = C_3 e^{r_1 x} + C_4 e^{r_2 x} \tag{34}$$

où C_3 et C_4 sont des constantes. En utilisant la condition au bord $u(0,t) = 0 = v(0)w(t) \implies v(0) = 0$ on a :

$$C_4 = -C_3 \implies v(x) = C_3(e^{r_1 x} - e^{r_2 x}) \tag{35}$$

Et en utilisant la condition au bord $u(l,t) = 0 = v(l)w(t) \implies v(l) = 0$ on a :

$$C_3(e^{r_1 l} - e^{r_2 l}) = 0 \implies C_3 = 0 \implies v(x) = 0 \tag{36}$$

Cette solution n'est donc pas intéressante par rapport à nos conditions aux bords.

<u>Si $\rho = 0, r_1 = r_2 \equiv r$</u>

$$v(x) = (C_3 + C_4 x)e^{rx} \tag{37}$$

où C_3 et C_4 sont des constantes. En utilisant la condition au bord $u(0,t) = 0 = v(0)w(t) \implies v(0) = 0$ on a :

$$C_3 = 0 \implies v(x) = C_4 x e^{rx} \tag{38}$$

Et en utilisant la condition au bord $u(l,t) = 0 = v(l)w(t) \implies v(l) = 0$ on a :

$$C_4 l e^{rl} = 0 \implies C_4 = 0 \implies v(x) = 0 \tag{39}$$

Cette solution n'est donc pas intéressante par rapport à nos conditions aux bords.

<u>Si $\rho < 0$</u>

On définit

$$r_{1,2} \equiv \alpha \pm i\beta \tag{40}$$

avec

$$\alpha = \frac{a}{2D}\,, \tag{41}$$

$$\beta = \frac{\sqrt{-a^2 - 4D(C_1 + b)}}{2D}\,. \tag{42}$$

On a alors comme solution pour $v(x)$:

$$v(x) = (C_3 \cos(\beta x) + C_4 \sin(\beta x))e^{\alpha x} \ . \tag{43}$$

En utilisant la condition au bord $u(0,t) = 0 = v(0)w(t) \implies v(0) = 0$ on a :

$$C_3 = 0 \implies v(x) = C_4 \sin(\beta x)e^{\alpha x} \tag{44}$$

Et en utilisant la condition au bord $u(l,t) = 0 = v(l)w(t) \implies v(l) = 0$ on a :

$$\sin(\beta l) = 0 \implies \beta l = m\pi \implies \beta = \frac{m\pi}{l}, m \in \mathbb{N}^* \ . \tag{45}$$

On notera que $\beta > 0$ car $\rho < 0$ et $D > 0$.
La solution générale pour la partie de l'équation dépendante de la position est donc :

$$v(x) = \sum_{m=1}^{\infty} C_{4_m} \sin\left(\frac{m\pi x}{l}\right) e^{\alpha x} \tag{46}$$

où les C_{4_m} sont des constantes. Utilisons maintenant la condition au bord $u(x,0) = g(x)$ afin de déterminer les valeurs de ces constantes C_{4_m} :

$$u(x,0) = v(x)w(0) = v(x)C_2 = g(x) \ . \tag{47}$$

On a alors,

$$g(x) = \sum_{m=1}^{\infty} C_{4_m} C_2 \sin\left(\frac{m\pi x}{l}\right) e^{\alpha x} \ . \tag{48}$$

En définissant $C_m = C_{4_m} C_2$ on obtient :

$$g(x) = \sum_{m=1}^{\infty} C_m \sin\left(\frac{m\pi x}{l}\right) e^{\alpha x} \tag{49}$$

On voit dès lors que les coefficients C_m sont obtenus en projetant la fonction $g(x)e^{-\alpha x}$ sur la base des fonctions $\sin\left(\frac{m\pi x}{l}\right)$:

$$C_m = \frac{2}{l}\int_0^l g(x)\sin\left(\frac{m\pi x}{l}\right)e^{-\alpha x}dx \tag{50}$$

La fonction $u(x,t)$ peut alors s'écrire :

$$u(x,t) = \sum_{m=1}^{\infty} C_m \sin\left(\frac{m\pi x}{l}\right)e^{\alpha x}e^{C_{1_m}t} \tag{51}$$

Nous devons maintenant déterminer l'expression de la constante C_{1_m} qui dépend de β et donc de m. En partant de l'expression de β (42), on obtient :

$$C_{1_m} = \frac{-a^2 - 4D^2\beta^2}{4D} - b \tag{52}$$

et avec $\beta = \frac{m\pi}{l}$, on a :

$$C_{1_m} = -\frac{a^2}{4D} - \frac{Dm^2\pi^2}{l^2} - b\ . \tag{53}$$

En injectant l'expression de C_{1_m} dans celle de u on a alors :

$$u(x,t) = \sum_{m=1}^{\infty} C_m \sin\left(\frac{m\pi x}{l}\right)\exp\left(\frac{ax}{2D} + \left(-\frac{a^2}{4D} - \frac{Dm^2\pi^2}{l^2} - b\right)t\right) \tag{54}$$

$$\boxed{u(x,t) = \sum_{m=1}^{\infty} C_m \sin\left(\frac{m\pi x}{l}\right)\exp\left(\frac{a}{2D}\left(x - \frac{a}{2}t\right) - \left(\frac{Dm^2\pi^2}{l^2} + b\right)t\right)} \tag{55}$$

avec

$$\boxed{C_m = \frac{2}{l}\int_0^l g(x)\sin\left(\frac{m\pi x}{l}\right)\exp\left(-\frac{a}{2D}x\right)dx}\ . \tag{56}$$

Relation de dispersion

On utilise, comme solution à l'équation d'advection-diffusion (1), une onde plane de la forme :

$$u(x,t) = e^{i(kx-\omega t)} \tag{57}$$

avec k le nombre d'onde qui est relié à la longueur d'onde λ par la relation $\lambda = 2\pi/k$ et ω la fréquence de l'onde.

On obtient alors l'expression suivante :

$$\omega = ak - i\left(Dk^2 + b\right) \tag{58}$$

qui est la relation de dispersion de l'équation (1). Elle détermine la fréquence ω en fonction de k pour une onde plane prise comme solution.

Cas particuliers

Si $D = 1$, $a = b = 0$ on retrouve l'équation de la chaleur adimensionnelle et homogène :

$$\frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2} = \frac{\partial u(x,t)}{\partial t} \; . \tag{59}$$

En injectant ces valeurs de D, a et b dans l'Equation 55 on a :

$$u(x,t) = \sum_{m=1}^{\infty} C_m \sin\left(\frac{m\pi x}{l}\right) \exp\left(-\left(\frac{m^2\pi^2}{l^2}\right) t\right) \tag{60}$$

avec

$$C_m = \frac{2}{l}\int_0^l g(x) \sin\left(\frac{m\pi x}{l}\right) dx \; . \tag{61}$$

On retombe donc bien sur la solution de l'équation de la chaleur adimensionnelle homogène du cours si l'on pose $l = 1$.

Si $D = 0 = b$ on retrouve la forme générale de l'équation d'advection :

$$\frac{\partial u(x,t)}{\partial t} + a\frac{\partial u(x,t)}{\partial x} = 0 \ . \tag{62}$$

La solution présentée à l'Equation 55 n'est alors plus valide car celle-ci n'est valable que si $D > 0$ et $\rho < 0$. La solution de l'Equation 62 est $u(x,t) = g(x - at)$ avec comme condition initiale $u(x,0) = g(x)$ (démonstration faite en séance d'exercices).

1.3 **Fournissez un schéma implicite. Est-il toujours stable ?**

1.4 **Illustrez votre propos avec plusieurs simulations numériques, comparant schémas numériques implicites et explicites.**

1.5 **Montrez, dans ces schéma numériques, quels termes sont responsables de la diffusion numérique. Quel est son ordre de grandeur par rapport à la diffusion explicitement modélisée par le terme D ?**

1.6 **Comparez vitesse de groupe numérique avec celle du système original. Le schéma est-il dispersif ?**

1.7 **Le terme de diffusion D peut-il être responsable d'un comportement instable ? Expliquer.**

1.8 **Fournissez un schéma de Lax-Wendroff à trois points $(\boldsymbol{i}-1, \boldsymbol{i}, \boldsymbol{i}+1)$ dans l'espace. Quel est l'ordre de ce schéma ? Est-il monotone ? Discutez les avantages et les inconvénients au schéma que vous avez donné au point 1 ci-dessus.**

Deuxième partie

Prédictibilité

Introduction

2.9 todo

Conclusion