

UNIVERSITÉ CATHOLIQUE DE LOUVAIN
ECOLE DE PHYSIQUE

SIMULATION NUMÉRIQUE EN PHYSIQUE [LPHY2371]

Equation d'Advection-Diffusion et Prédicibilité

Auteurs :

Arnaud SCHILS

Valéry MATERNE

Enseignant :

Pr. Michel CRUCIFIX

Décembre 2016



UCL
Université
catholique
de Louvain

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 :

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

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 :

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

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

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

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 :

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

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 :

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

$$\begin{pmatrix} U_{0,j+1} \\ U_{1,j+1} \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ U_{N,j+1} \\ U_{N+1,j+1} \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} U_{0,j} \\ U_{1,j} \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ U_{N,j} \\ U_{N+1,j} \end{pmatrix} \quad (10)$$

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 $U_{i+1,j}$.

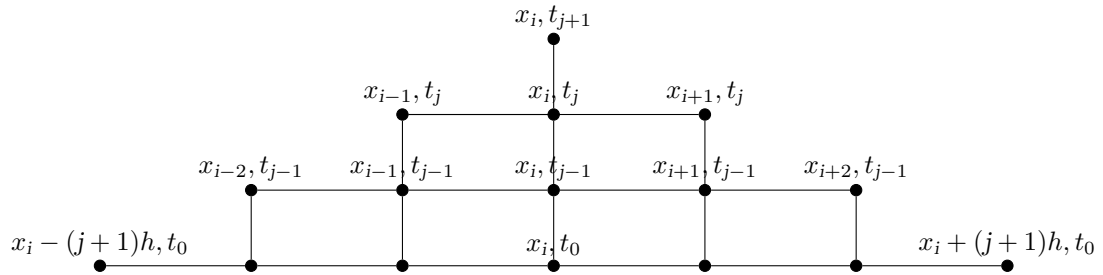


FIGURE 1 – Stencil du schéma numérique explicite.

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

Ces facteurs sont reliés aux conditions de stabilité de la méthode aux différences finies. Pour le montrer, introduisons dans notre schéma numérique une solution de la forme :

$$U_{i,j} = w_0 \exp(Irx_i) , \quad (11)$$

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

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

En remplaçant $U_{i,j}$, $U_{i-1,j-1}$, $U_{i,j-1}$ et $U_{i+1,j-1}$ par l'Equation 11 dans l'Equation 12 on obtient :

$$w_j e^{Irx_i} = w_{j-1} e^{Irx_{i-1}} \lambda_d + w_{j-1} e^{Irx_i} (-2\lambda_d + \lambda_a - \lambda_b + 1) + w_{j-1} e^{Irx_{i+1}} (\lambda_d - \lambda_a) \quad (13)$$

$$\begin{aligned} w_j &= w_{j-1} e^{-Irh} \lambda_d + w_{j-1} (-2\lambda_d + \lambda_a - \lambda_b + 1) + w_{j-1} e^{Irh} (\lambda_d - \lambda_a) \\ &= w_{j-1} (\lambda_d (e^{-Irh} - 2 + e^{Irh}) + \lambda_a (1 - e^{Irh}) - \lambda_b + 1) \\ &= w_{j-1} (1 + \lambda_d (2 \cos^{rh} - 2) + \lambda_a (1 - e^{Irh}) - \lambda_b) \\ &= w_{j-1} (1 - 4\lambda_d \sin^2(rh/2) + \lambda_a (1 - e^{Irh}) - \lambda_b) \end{aligned} \quad (14)$$

Dès lors,

$$w_j = \kappa^j w_0 \quad (15)$$

avec $\kappa \equiv 1 - 4\lambda_d \sin^2(rh/2) + \lambda_a (1 - e^{Irh}) - \lambda_b$. La condition de stabilité se ramène donc à :

$$|\kappa|^2 = (1 - 4\lambda_d \sin^2(rh/2) + \lambda_a (1 - \cos(rh)) - \lambda_b)^2 + \lambda_a^2 \sin^2(rh) \leq 1 . \quad (16)$$

Les valeurs des paramètres λ_d , λ_a et λ_b déterminent donc la stabilité du schéma numérique.

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 :

$$\begin{cases} u(x, 0) = g(x) \\ u(0, t) = u(l, t) = 0 \end{cases} \quad (17)$$

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

$$\begin{cases} t \geq 0 \\ 0 < x < l \end{cases} \quad (18)$$

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

$$u(x, t) = v(x)w(t) \quad (19)$$

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

$$Dw(t)\frac{\partial^2 v(x)}{\partial x^2} - aw(t)\frac{\partial v(x)}{\partial x} - bv(x)w(t) = v(x)\frac{\partial w(t)}{\partial t} \quad (20)$$

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

$$\frac{D}{v} \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} - \frac{a}{v} \frac{\partial v}{\partial x} - b = \frac{1}{w} \frac{\partial w}{\partial t} \equiv C_1 \quad (21)$$

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 :

$$\frac{1}{w} \frac{\partial w}{\partial t} = C_1 \quad (22)$$

$$\frac{\partial w}{\partial t} = C_1 w \quad (23)$$

$$w(t) = C_2 e^{C_1 t} \quad (24)$$

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

$$\frac{D}{v} \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} - \frac{a}{v} \frac{\partial v}{\partial x} = C_1 + b \quad (25)$$

$$D \frac{d^2 v}{dx^2} - a \frac{dv}{dx} - (C_1 + b)v = 0 \quad (26)$$

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

$$Dr^2 - ar - (C_1 + b) = 0 \quad (27)$$

$$\rho = a^2 + 4D(C_1 + b) \quad (28)$$

Les deux racines de ce polynôme sont :

$$r_{1,2} = \frac{a \pm \sqrt{\rho}}{2D} \quad (29)$$

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

Si $\rho > 0$

$$v(x) = C_3 e^{r_1 x} + C_4 e^{r_2 x} \quad (30)$$

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 :

$$C_4 = -C_3 \implies v(x) = C_3 (e^{r_1 x} - e^{r_2 x}) \quad (31)$$

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

$$C_3 (e^{r_1 l} - e^{r_2 l}) = 0 \implies C_3 = 0 \implies v(x) = 0 \quad (32)$$

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

Si $\rho = 0, r_1 = r_2 \equiv r$

$$v(x) = (C_3 + C_4 x)e^{rx} \quad (33)$$

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 :

$$C_3 = 0 \implies v(x) = C_4 x e^{rx} \quad (34)$$

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

$$C_4 l e^{rl} = 0 \implies C_4 = 0 \implies v(x) = 0 \quad (35)$$

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

Si $\rho < 0$

On définit

$$r_{1,2} \equiv \alpha \pm i\beta \quad (36)$$

avec

$$\alpha = \frac{a}{2D}, \quad (37)$$

$$\beta = \frac{\sqrt{-a^2 - 4D(C_1 + b)}}{2D}. \quad (38)$$

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

$$v(x) = (C_3 \cos(\beta x) + C_4 \sin(\beta x))e^{\alpha x}. \quad (39)$$

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

$$C_3 = 0 \implies v(x) = C_4 \sin(\beta x)e^{\alpha x} \quad (40)$$

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

$$\sin(\beta l) = 0 \implies \beta l = m\pi \implies \beta = \frac{m\pi}{l}, m \in \mathbb{N}^* . \quad (41)$$

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 :

$$v(x) = \sum_{m=1}^{\infty} C_{4m} \sin\left(\frac{m\pi x}{l}\right) e^{\alpha x} \quad (42)$$

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

$$u(x, 0) = v(x)w(0) = v(x)C_2 = g(x) . \quad (43)$$

On a alors,

$$g(x) = \sum_{m=1}^{\infty} C_{4m} C_2 \sin\left(\frac{m\pi x}{l}\right) e^{\alpha x} . \quad (44)$$

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

$$g(x) = \sum_{m=1}^{\infty} C_m \sin\left(\frac{m\pi x}{l}\right) e^{\alpha x} \quad (45)$$

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 $\sin\left(\frac{m\pi x}{l}\right)$:

$$C_m = \frac{2}{l} \int_0^l g(x) \sin\left(\frac{m\pi x}{l}\right) e^{-\alpha x} dx \quad (46)$$

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

$$u(x, t) = \sum_{m=1}^{\infty} C_m \sin\left(\frac{m\pi x}{l}\right) e^{\alpha x} e^{C_{1m} t} \quad (47)$$

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 (38), on obtient :

$$C_{1_m} = \frac{-a^2 - 4D^2\beta^2}{4D} - b \quad (48)$$

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

$$C_{1_m} = -\frac{a^2}{4D} - \frac{Dm^2\pi^2}{l^2} - b. \quad (49)$$

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

$$u(x, t) = \sum_{m=1}^{\infty} C_m \sin\left(\frac{m\pi x}{l}\right) \exp\left(\frac{ax}{2D} + \left(-\frac{a^2}{4D} - \frac{Dm^2\pi^2}{l^2} - b\right)t\right) \quad (50)$$

$$\boxed{u(x, t) = \sum_{m=1}^{\infty} C_m \sin\left(\frac{m\pi x}{l}\right) \exp\left(\frac{a}{2D}\left(x - \frac{a}{2}t\right) - \left(\frac{Dm^2\pi^2}{l^2} + b\right)t\right)} \quad (51)$$

avec

$$\boxed{C_m = \frac{2}{l} \int_0^l g(x) \sin\left(\frac{m\pi x}{l}\right) \exp\left(-\frac{a}{2D}x\right) dx}. \quad (52)$$

Relation de dispersion

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

$$u(x, t) = e^{i(kx - \omega t)} \quad (53)$$

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 :

$$\omega = ak - i(Dk^2 + b) \quad (54)$$

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 :

$$\frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} = \frac{\partial u(x, t)}{\partial t} . \quad (55)$$

En injectant ces valeurs de D , a et b dans l'Equation 51 on a :

$$u(x, t) = \sum_{m=1}^{\infty} C_m \sin\left(\frac{m\pi x}{l}\right) \exp\left(-\left(\frac{m^2\pi^2}{l^2}\right)t\right) \quad (56)$$

avec

$$C_m = \frac{2}{l} \int_0^l g(x) \sin\left(\frac{m\pi x}{l}\right) dx . \quad (57)$$

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 :

$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} + a \frac{\partial u(x, t)}{\partial x} = 0 . \quad (58)$$

La solution présentée à l'Equation 51 n'est alors plus valide car celle-ci n'est valable que si $D > 0$ et $\rho < 0$. La solution de l'Equation 58 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 ?

Le schéma implicite est obtenu en discrétisant l'Equation 1 de la façon suivante. La fonction u est remplacée par l'image du point (x_i, t_{j+1}) c'est à dire par $U_{i,j+1}$. Les dérivées sont remplacées par leurs formulations discrètes au temps t_{j+1} :

$$\left. \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} \right|_{x=x_i, t=t_{j+1}} = \frac{U_{i-1,j+1} - 2U_{i,j+1} + U_{i+1,j+1}}{h^2} + \mathcal{O}(h^2) \quad (59)$$

$$\left. \frac{\partial u(x, t)}{\partial x} \right|_{x=x_i, t=t_{j+1}} = \frac{U_{i+1,j+1} - U_{i,j+1}}{h} + \mathcal{O}(h) \quad (60)$$

$$\left. \frac{\partial u(x, t)}{\partial t} \right|_{x=x_i, t=t_{j+1}} = \frac{U_{i,j+1} - U_{i,j}}{k} + \mathcal{O}(k) . \quad (61)$$

On obtient alors :

$$\begin{aligned} \frac{U_{i,j+1} - U_{i,j}}{k} + \mathcal{O}(k) = D \frac{U_{i-1,j+1} - 2U_{i,j+1} + U_{i+1,j+1}}{h^2} + \mathcal{O}(h^2) \\ - a \frac{U_{i+1,j+1} - U_{i,j+1}}{h} + \mathcal{O}(h) - b U_{i,j+1} . \end{aligned} \quad (62)$$

Le schéma est d'ordre $\mathcal{O}(h+k)$. En isolant $U_{i,j}$ et en introduisant les quantités λ_a , λ_b et λ_d depuis leurs définitions on obtient :

$$U_{i,j} = -\lambda_d U_{i-1,j+1} + U_{i,j+1}(1 + 2\lambda_d + \lambda_b - \lambda_a) + U_{i+1,j+1}(\lambda_a - \lambda_d) \quad (63)$$

La matrice M correspondante est présentée ci-dessous.

$$M = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ -\lambda_d & 2\lambda_d - \lambda_a + \lambda_b + 1 & \lambda_a - \lambda_d & 0 & \dots \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & \dots & -\lambda_d & 2\lambda_d - \lambda_a + \lambda_b + 1 & \lambda_a - \lambda_d \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (64)$$

$$\begin{pmatrix} U_{0,j+1} \\ U_{1,j+1} \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ U_{N,j+1} \\ U_{N+1,j+1} \end{pmatrix} = M^{-1} \begin{pmatrix} U_{0,j} \\ U_{1,j} \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ U_{N,j} \\ U_{N+1,j} \end{pmatrix} \quad (65)$$

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

- 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 $(i-1, i, i+1)$ 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