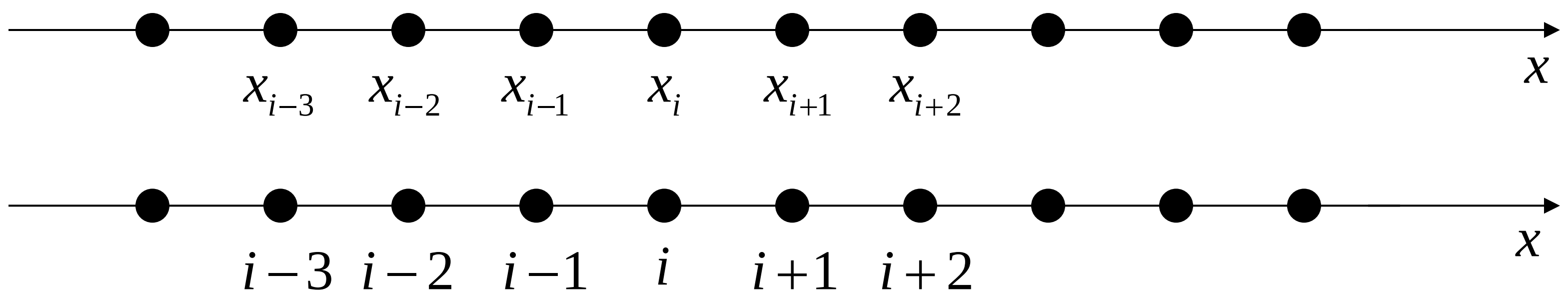
Approximations aux différences finies

A la fin du chapitre, l'étudiant doit être capable de:

1. Etablir une formule aux différences finies pour des dérivées
2. Calculer l'ordre de convergence d'une approximation
3. Calculer la vitesse de propagation effective d'un schéma de discrétisation de l'équation de convection-diffusion 1D
4. Comprendre le lien entre ordre et vitesse de propagation effective

Différences finies

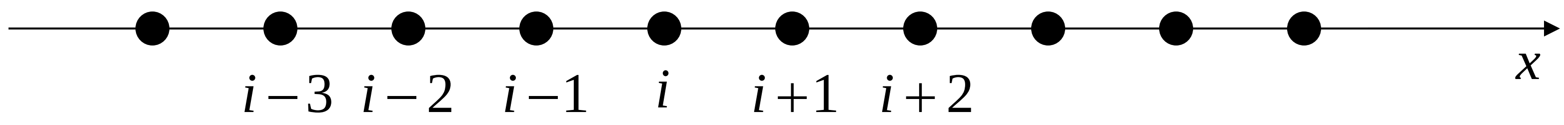
- L'idée est de remplacer les dérivées partielles aux points de maillage par des développement de Taylor



- Plutôt que de chercher *f(x)*, on cherche les valeurs de *f* aux nœuds du maillage, soit $f_i = f(x_i)$

Dérivées premières

- Développement de Taylor au nœud i:



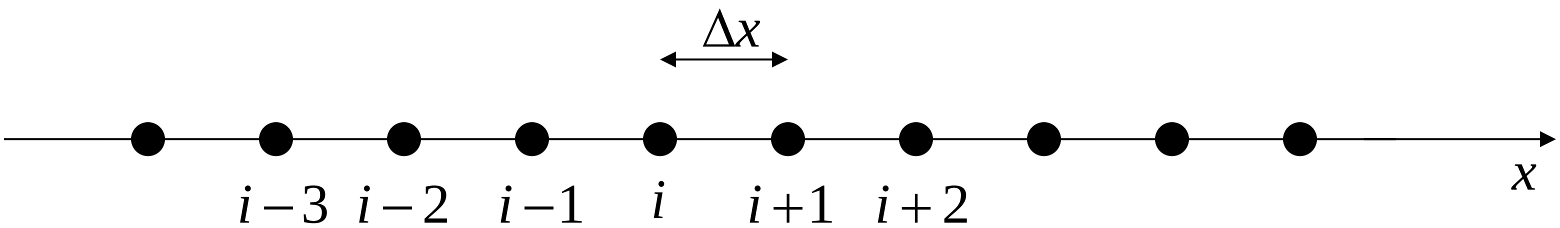
$$f_{i+1} = f_i + \left(x_{i+1} - x_i\right)\left.\frac{df}{dx}\right|_{x_i} + \frac{\left(x_{i+1} - x_i\right)^2}{2}\left.\frac{d^2 f}{dx^2}\right|_{x_i} + O\left(\left(x_{i+1} - x_i\right)^3\right)$$

$$f_{i-1} = f_i + \left(x_{i-1} - x_i\right)\left.\frac{df}{dx}\right|_{x_i} + \frac{\left(x_{i-1} - x_i\right)^2}{2}\left.\frac{d^2 f}{dx^2}\right|_{x_i} + O\left(\left(x_{i-1} - x_i\right)^3\right)$$

- Ces développements font apparaître les dérivées de *f* au nœud *i* uniquement

Dérivées premières

- Si les nœuds sont régulièrement espacés



$$f_{i+1} = f_i + \Delta x \left.\frac{df}{dx}\right|_{x_i} + \frac{\Delta x^2}{2} \left.\frac{d^2 f}{dx^2}\right|_{x_i} + O\left(\Delta x^3\right)$$

$$f_{i-1} = f_i - \Delta x \left.\frac{df}{dx}\right|_{x_i} + \frac{\Delta x^2}{2} \left.\frac{d^2 f}{dx^2}\right|_{x_i} + O\left(\Delta x^3\right)$$

$$f_{i+1} - f_{i-1} = 0 + 2\Delta x \left.\frac{df}{dx}\right|_{x_i} + 0 + O\left(\Delta x^3\right)$$

Dérivées premières

- Si les nœuds sont régulièrement espacés, la dérivée de f au nœud i est approximée par

$$\boxed{\left.\frac{df}{dx}\right|_{x_i} = \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2\Delta x} + O(\Delta x^2)}$$

- Erreur d'approximation est O(Δx^2)
- Schéma centré d'ordre 2

- <u>NOTATION</u>: O(X) signifie « de l'ordre de X »

Ordres plus élevés

- Maillage régulier

- En conservant plus de termes dans les développements on obtient les schémas à l'ordre 4 et 6 suivants

$$\left.\frac{df}{dx}\right|_{x_i} = \frac{-f_{i+2} + 8f_{i+1} - 8f_{i-1} + f_{i-2}}{12\Delta x} + O(\Delta x^4)$$

$$\left.\frac{df}{dx}\right|_{x_i} = \frac{f_{i+3} - 9f_{i+2} + 45f_{i+1} - 45f_{i-1} + 9f_{i-2} - f_{i-3}}{60\Delta x} + O(\Delta x^6)$$

Formules décentrées

- $$\left.\frac{df}{dx}\right|_{x_i} = \frac{f_{i+1} - f_i}{\Delta x} + O(\Delta x)$$ **ordre 1 aval**

- $$\left.\frac{df}{dx}\right|_{x_i} = \frac{f_i - f_{i-1}}{\Delta x} + O(\Delta x)$$ **ordre 1 amont**

- $$\left.\frac{df}{dx}\right|_{x_i} = \frac{-f_{i+2} + 4f_{i+1} - 3f_i}{2\Delta x} + O(\Delta x^2)$$ **ordre 2 aval**

- La partie de l'image avec l'ID de relation rId8 n'a pas été trouvé dans le fichier. **ordre 2 amont**

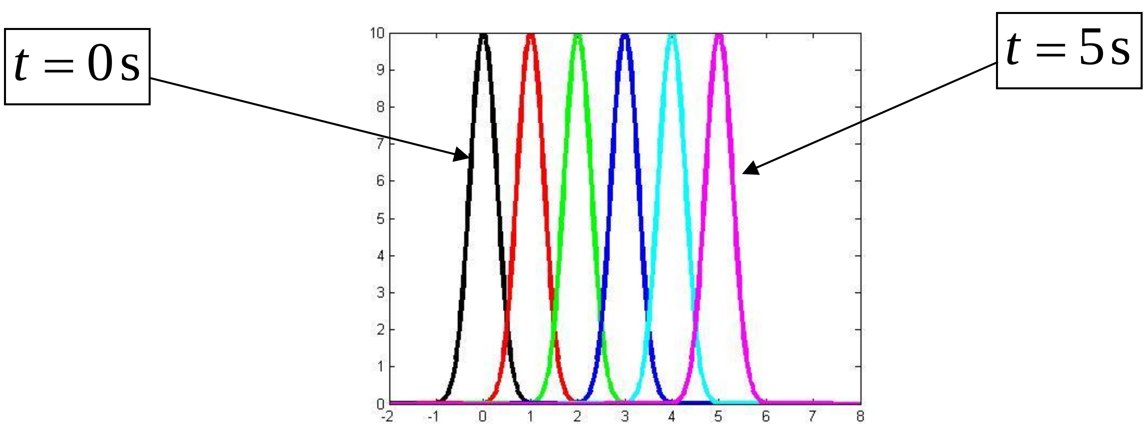
Comparaison des schémas

- Problème modèle 1D: Eq. de convection

$$\frac{\partial f}{\partial t} + U_0 \frac{\partial f}{\partial x} = 0, \quad -2\,\mathrm{m} \le x \le 8\,\mathrm{m}, \quad U_0 = 1\,\mathrm{m/s}$$

- Conditions limites et initiale:

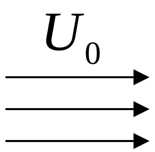
$$f(x,0) = \exp\left(-x^2/4a^2\right), \quad a = 0.2\,\mathrm{m} \qquad\qquad f(-2,t) = f(8,t) = 0$$



Exemple de résolution analytique

- Equation de convection diffusion 1D dans un domaine infini

$$\lim_{x \to \pm\infty} f(x,t) = 0 \qquad\qquad f(x,0) = f_0(x)$$



$$f(x,t) \quad ?$$

$$\boxed{\frac{\partial f}{\partial t} + U_0 \frac{\partial f}{\partial x} = D \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}}$$

Exemple de résolution analytique

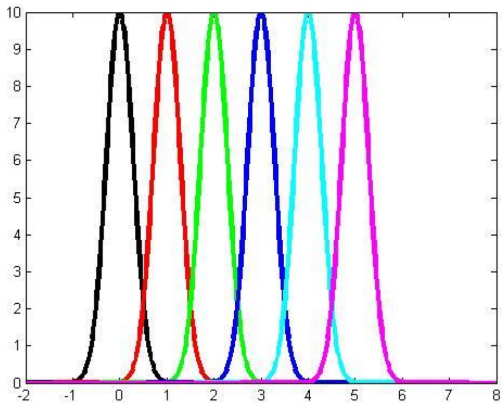
- Si la concentration est initialement de la forme $f(x,0) = f_0(x) = f_0 \exp\left(-x^2/4a^2\right)$ on peut obtenir la solution analytique …

$$\boxed{f(x,t) = C_0 \sqrt{\frac{a^2}{a^2 + Dt}} \exp\left(-\frac{\left(x - U_0 t\right)^2}{4\left(a^2 + Dt\right)}\right)}$$

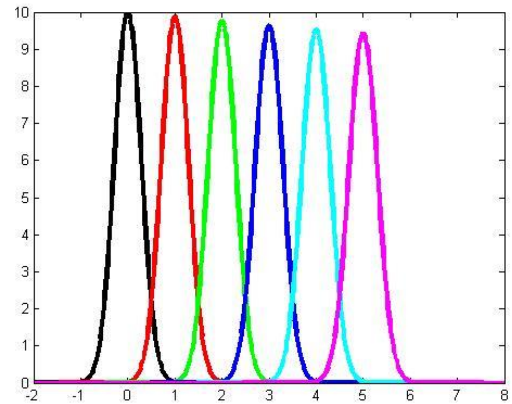
Exemple de résolution analytique

- Effet de la diffusion $\mathrm{Re} = \dfrac{U_0 \times a}{D}$

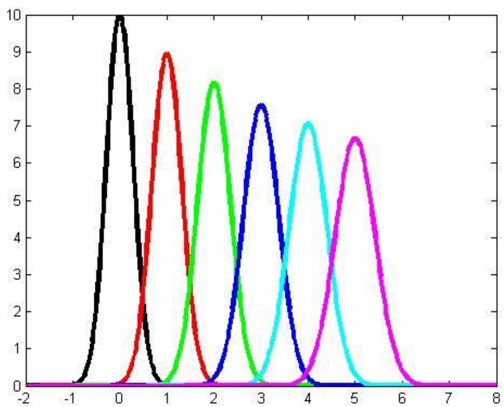
$\mathrm{Re} = +\infty$



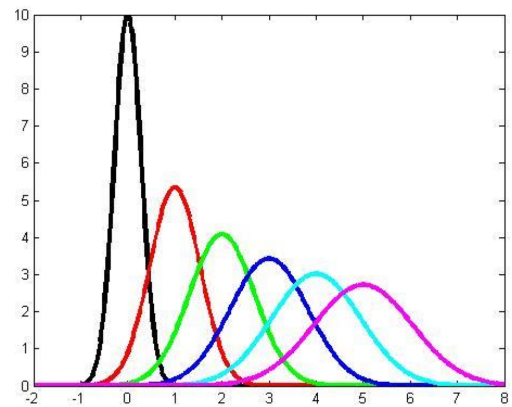
$\mathrm{Re} = 200$



$\mathrm{Re} = 20$

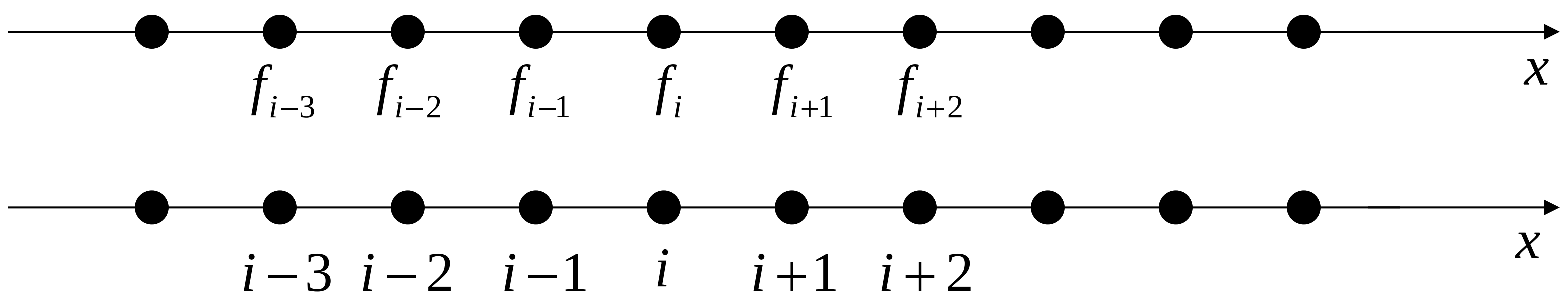


$\mathrm{Re} = 2$



Test numérique

- Équation semi-discrète $$\frac{df_i}{dt} + U_0 f_i^{'(num)} = 0, \quad \forall i$$



- On calcule les f_i entre *t=0* et *t=5* s à partir des deux schémas

$$\frac{df_i}{dt} + U_0 \frac{f_i - f_{i-1}}{\Delta x} = 0$$

amont ordre 1

$$\frac{df_i}{dt} + U_0 \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2\Delta x} = 0$$

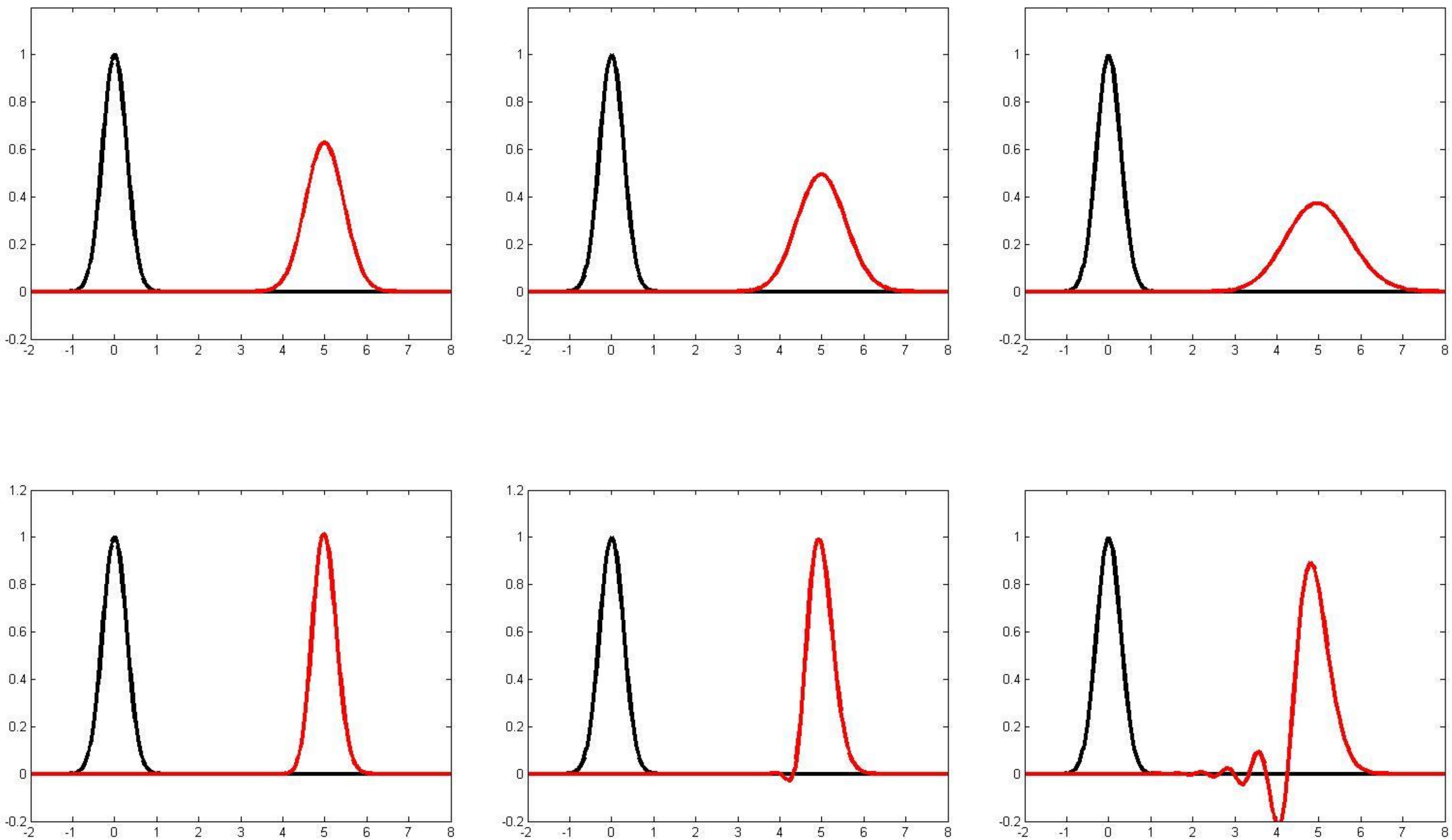
centré ordre 2

Test numérique

400 noeuds | **200 noeuds** | **100 noeuds**

amont ordre 1

centré ordre 2



Ordre 2 centré / Ordre 1 amont

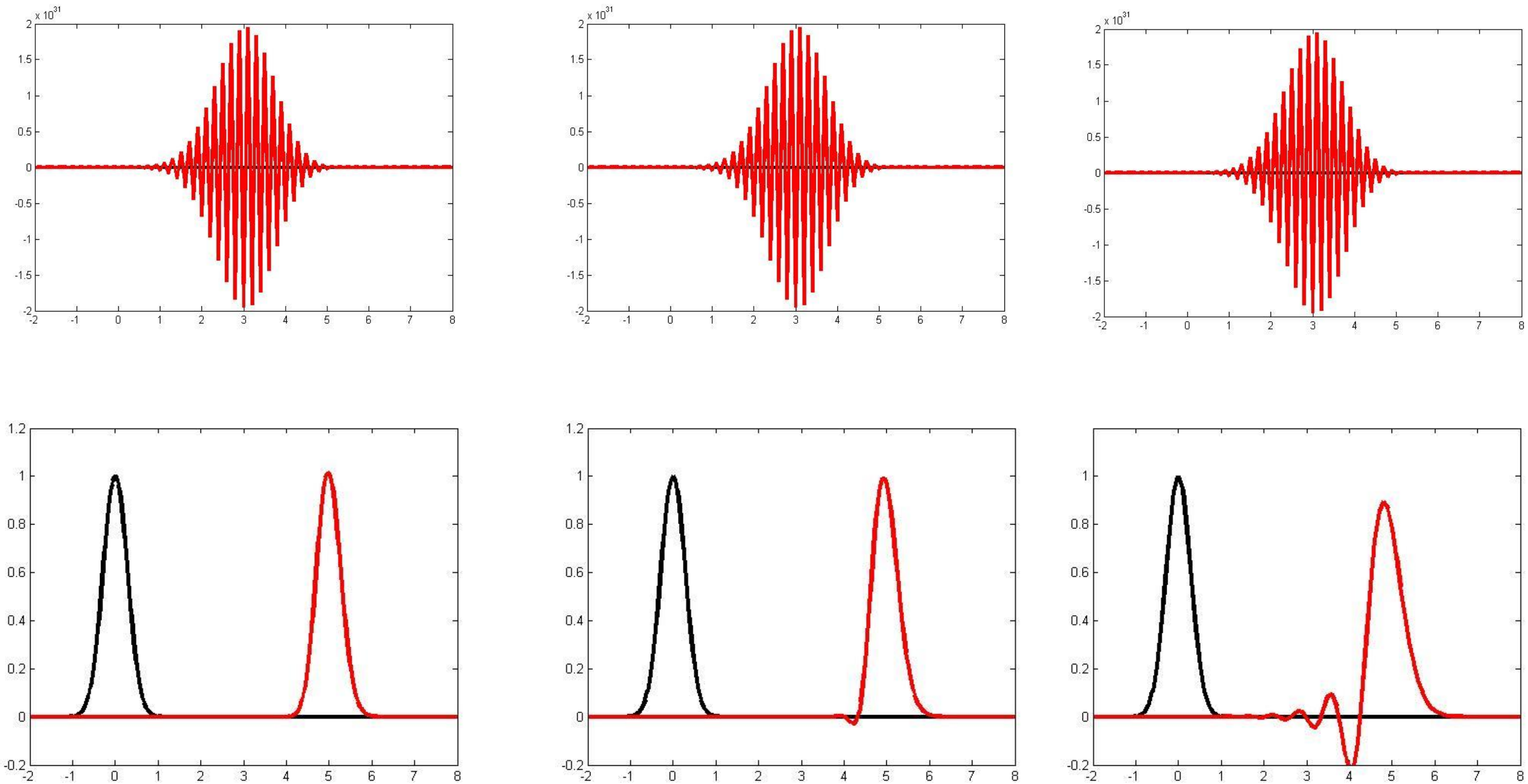
- Ordre 1 introduit de la diffusion … (cf solution analytique avec Re=2)
- Ordre 2 centré « exact » avec 400 points
- Ordre 2 centré déforme le signal si le nombre de points est plus petit
- Ordre 2 meilleur que ordre 1

Test numérique

400 noeuds | **200 noeuds** | **100 noeuds**

aval ordre 1

centré ordre 2



Ordre 2 centré / Ordre 1 aval

- Ordre 1 aval ne permet pas d’obtenir de solution « acceptable » à t=5

- L’amplitude obtenue est très grande

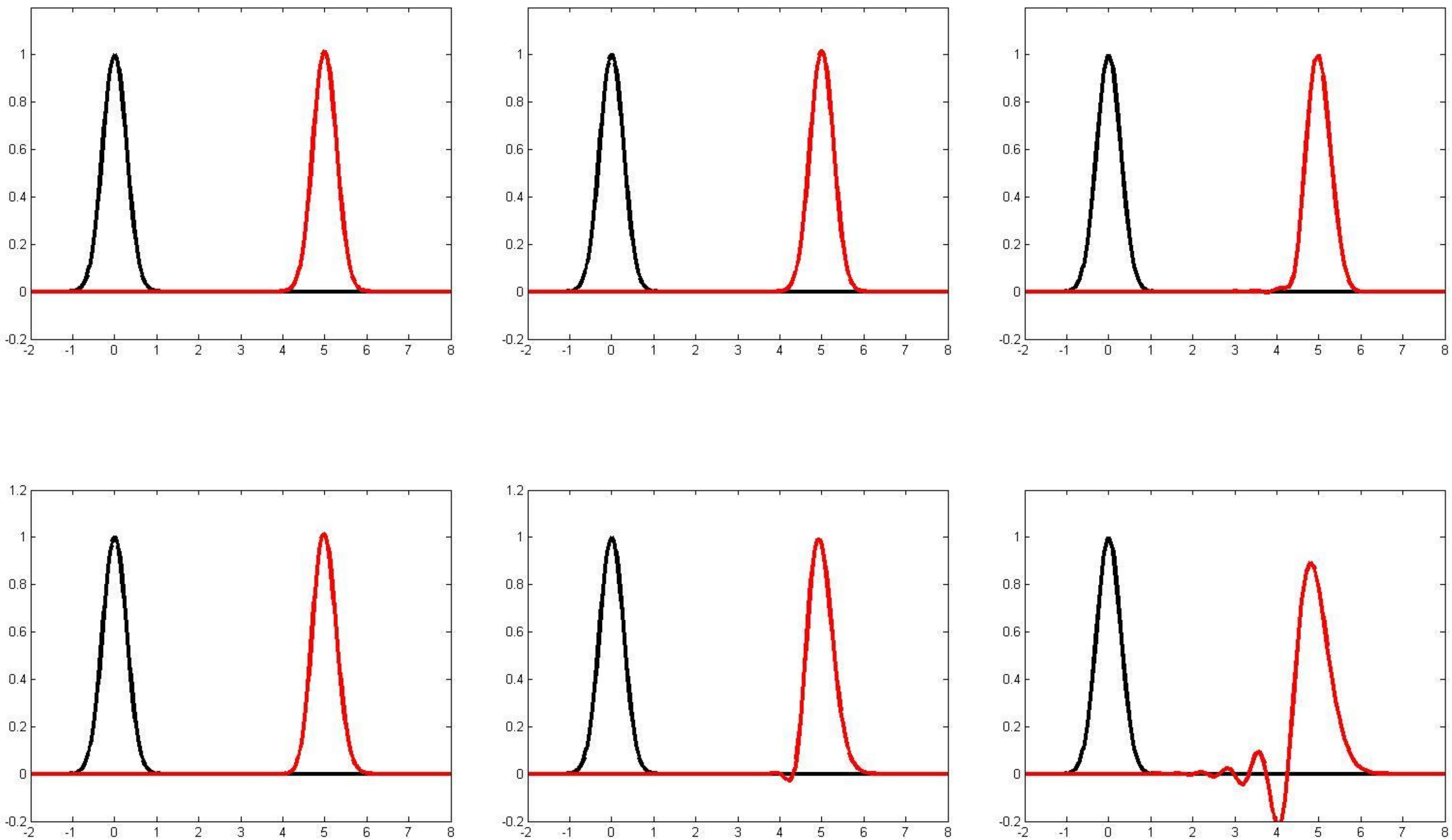
- Le signal n’est pas la forme d’une Gaussienne

Test numérique

400 noeuds **200 noeuds** **100 noeuds**

centré ordre 4

centré ordre 2



Ordre 2 centré / Ordre 4 centré

- Ordre 4 « exact » dans tous les cas considérés ici

- Ordre 2 centré « exact » avec 400 points

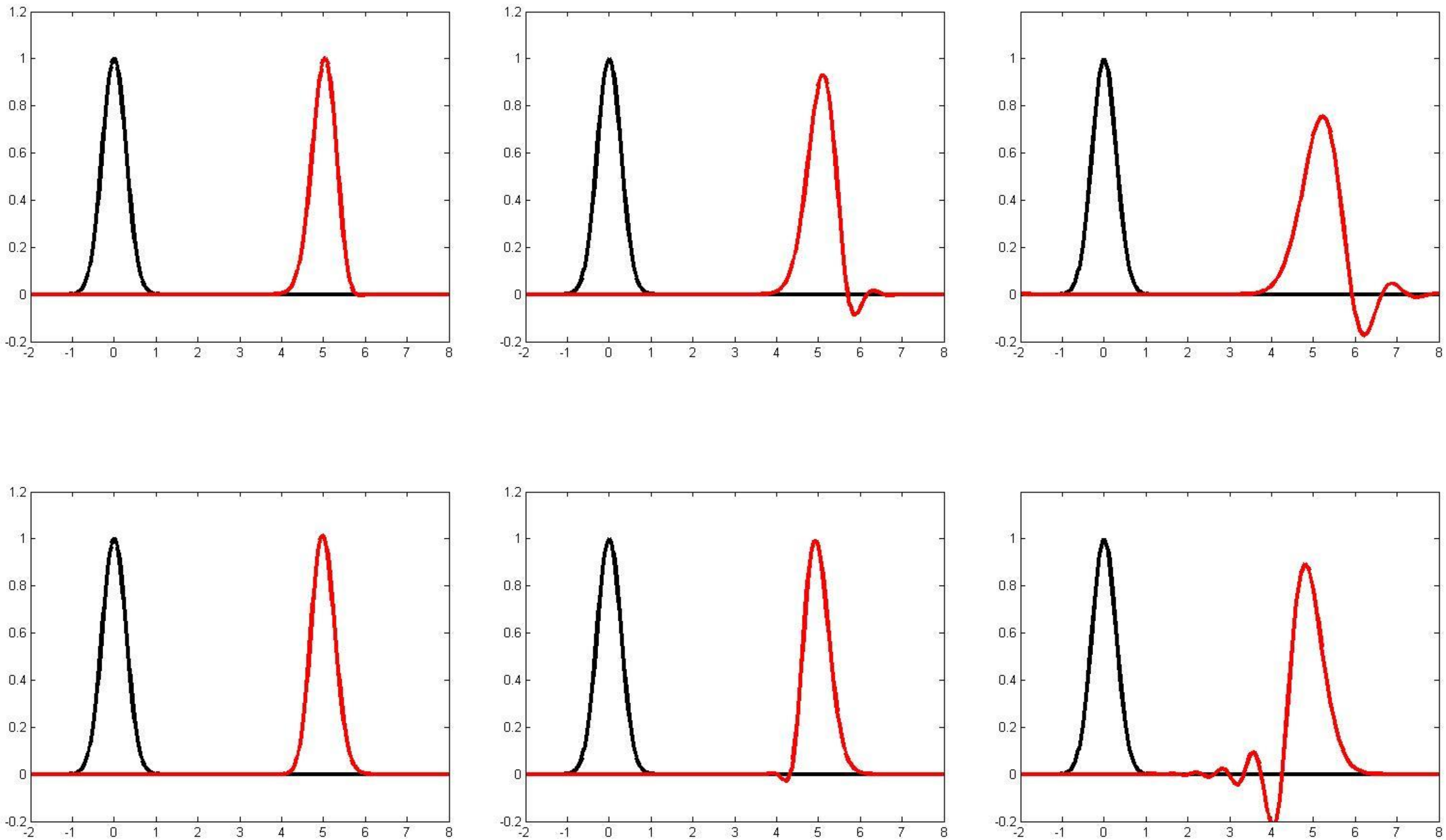
- Ordre 4 meilleur que ordre 2

Test numérique

400 noeuds | **200 noeuds** | **100 noeuds**

amont ordre 2

centré ordre 2



Ordre 2 centré / Ordre 2 amont

- Ordre 2 centré et amont « exacts » avec 400 points
- Ordre 2 centré et amont déforment le signal si le nombre de points est plus petit, mais pas de la même manière
- Ordre 2 amont amortit plus le signal
- L’ordre ne dit pas tout sur un schéma …

Analyse spectrale

- Cas d'une fonction harmonique

$$f(x) = \mathrm{Re}\left[\exp(jkx)\right] \Rightarrow \frac{df}{dx} = \mathrm{Re}\left[jk\exp(jkx)\right]$$

- Schéma centré d'ordre 2

$$f_i = \mathrm{Re}\left[\exp(jki\Delta x)\right], \quad \left.\frac{df}{dx}\right|_{x_i} \approx \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2\Delta x}$$

$$\left.\frac{df}{dx}\right|_{x_i} \approx \mathrm{Re}\left[jk\frac{\sin(k\Delta x)}{k\Delta x}\exp(jki\Delta x)\right]$$

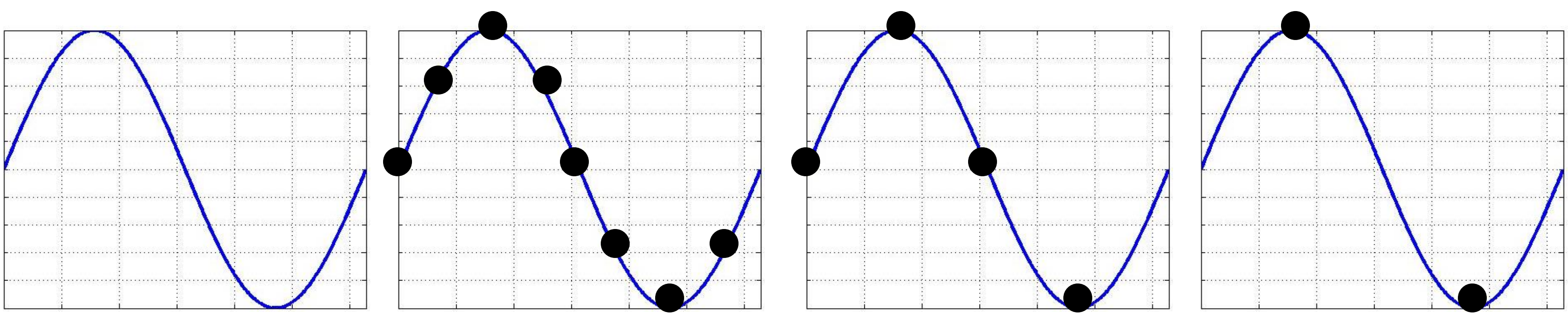
Fonction erreur associée au schéma

- L'erreur numérique commise revient à multiplier $\frac{df}{dx}$ par $\frac{\sin(k\Delta x)}{k\Delta x}$
- … ou la vitesse U_0 par la même quantité !!!

Signification de $k\Delta x$

- Sinusoïde de période L décrite avec N points

- $\Delta x = L / N, \quad k = 2\pi/L$ donc $k\Delta x = 2\pi / N$



$k\Delta x \to 0$

$N \to \infty$

(exact)

$k\Delta x = \dfrac{\pi}{4}$

$N = 8$

$k\Delta x = \dfrac{\pi}{2}$

$N = 4$

$k\Delta x = \pi$

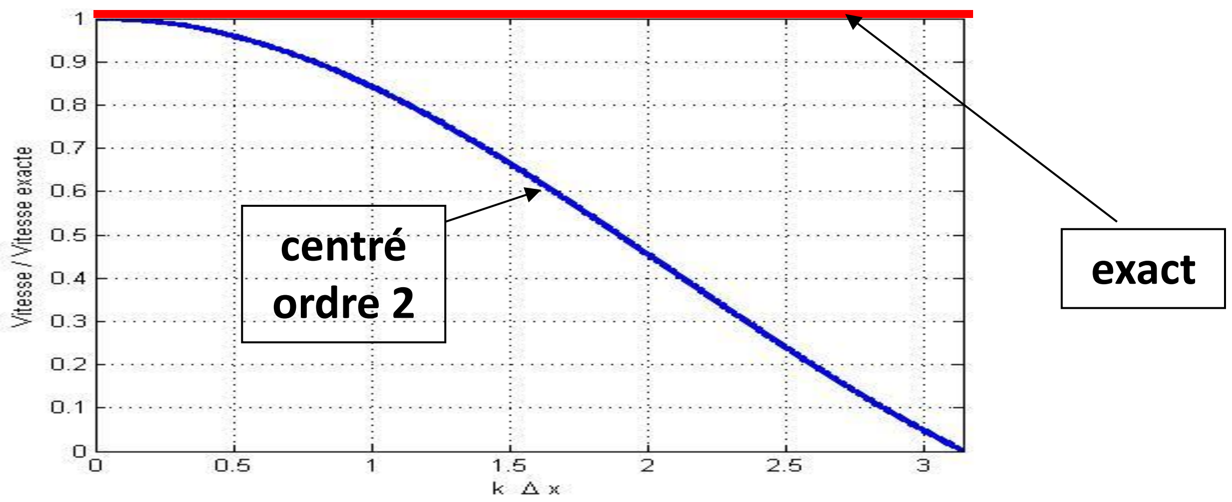
$N = 2$

Analyse spectrale

- Tout se passe comme si on résolvait l'équation

$$\boxed{\frac{\partial f}{\partial t} + U_0 \frac{\sin(k\Delta x)}{k\Delta x} \frac{\partial f}{\partial x} = 0}$$

- Les différentes longueurs d'onde ne se déplacent pas à la même vitesse



Analyse spectrale

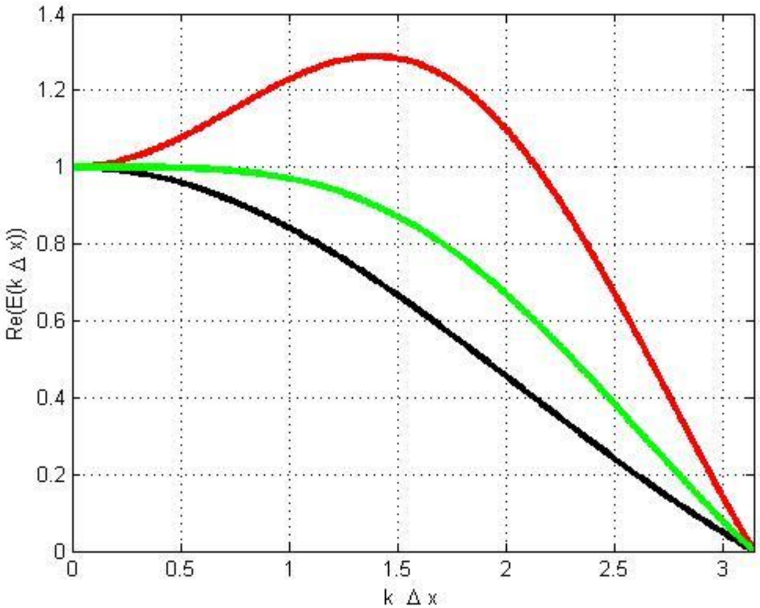
Vitesse effective de propagation de l'information

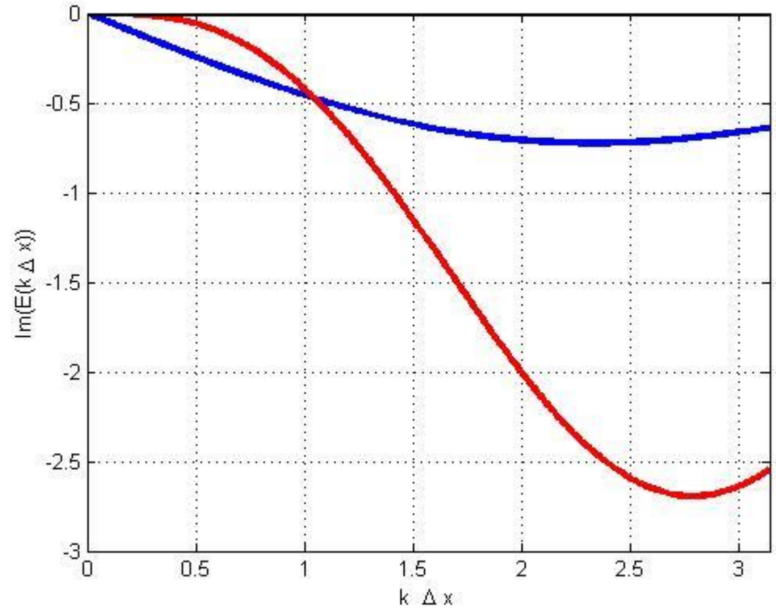
- Équation effective $$\boxed{\frac{\partial f}{\partial t} + U_0 E(k\Delta x)\frac{\partial f}{\partial x} = 0}$$

--> E = Ueff/Uo

SCHEMA	$\mathrm{Re}\left[E(k\Delta x)\right]$	$\mathrm{Im}\left[E(k\Delta x)\right]$
Centré ordre 2	$\frac{\sin(k\Delta x)}{k\Delta x}$	0
Amont ordre 1	$\frac{\sin(k\Delta x)}{k\Delta x}$	$\frac{\cos(k\Delta x)-1}{k\Delta x}$
Amont ordre 2	$\frac{\sin(k\Delta x)}{k\Delta x}\left(2-\cos(k\Delta x)\right)$	$\frac{-\cos(2k\Delta x)+4\cos(k\Delta x)-3}{2k\Delta x}$
Centré ordre 4	$\frac{\sin(k\Delta x)}{3k\Delta x}\left(4-\cos(k\Delta x)\right)$	0

Analyse spectrale





Lien avec l'ordre du schéma

- Dans la limite $k\Delta x \to 0$, la vitesse de propagation effective tend vers U_0 <=> E(k.deltaX) --> 1

- La vitesse avec laquelle l'erreur tend vers zéro lorsque $k\Delta x \to 0$ dépend de l'ordre *n* du schéma et on montre que:

$$E(k\Delta x) = 1 + O(\Delta x^n)$$

<=> E(k.deltaX) - 1 = O(deltaX^n)

- Les schémas centrés sont non dissipatifs: $\mathrm{Im}[E(k\Delta x)] = 0$

- *si U_0>0, les schémas stables sont tels que:* $\mathrm{Im}[E(k\Delta x)] \leq 0$

Dispersion

- La vitesse de propagation effective n'est égale à la vitesse théorique que dans la limite $k\Delta x \to 0$
- Une perturbation peut donc être propagée trop lentement ou trop vite
- Les fonctions e^{jkx} et $e^{jk'x}, k \neq k'$ ne sont pas propagées à la même vitesse en général
- Que se passe-t-il lorsque l'on convecte $f(x)$?

Déformation du signal

- On peut décomposer cette fonction comme une somme de fonctions harmoniques (en rendant *f* périodique éventuellement)

$$f(x) = \sum \hat{f}_k e^{jkx}$$

- La solution théorique après *t* secondes de simulation est

$$f(x - U_0 t) = \sum \hat{f}_k e^{jk(x - U_0 t)}$$

- Numériquement le mode e^{jkx} devient $e^{jk(x - E(k\Delta x) U_0 t)}$

- La solution numérique est donc

$$g(x - U_0 t) = \sum \underbrace{\hat{f}_k e^{jk(1 - E(k\Delta x)) U_0 t}}_{\hat{g}_k \neq \hat{f}_k} e^{jk(x - U_0 t)} \neq f(x - U_0 t)$$

Dérivées secondes

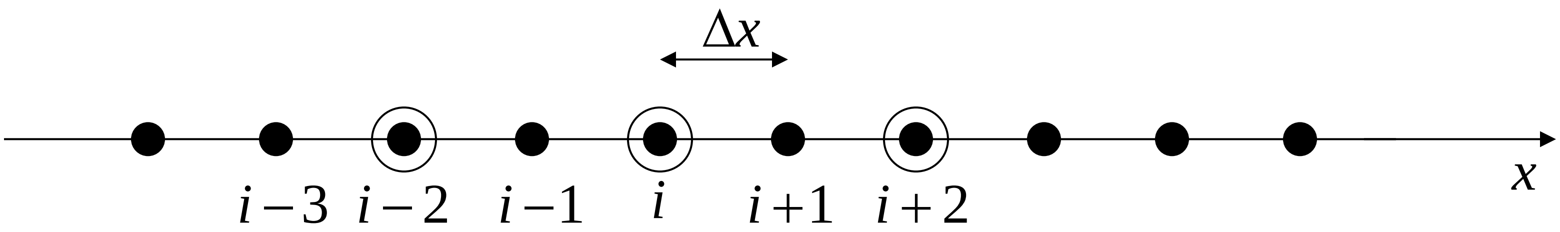
- Maillage régulier
- On utilise le fait que $\left.\frac{d^2 f}{dx^2}\right|_{x_i} = \frac{d}{dx}\left[\frac{df}{dx}\right]\Big|_{x_i}$
- En appliquant l'opérateur 2 fois le schéma centré d'ordre 2:

$$\left.\frac{d^2 f}{dx^2}\right|_{x_i} \approx \frac{f'_{i+1} - f'_{i-1}}{2\Delta x} + O(\Delta x^2)$$

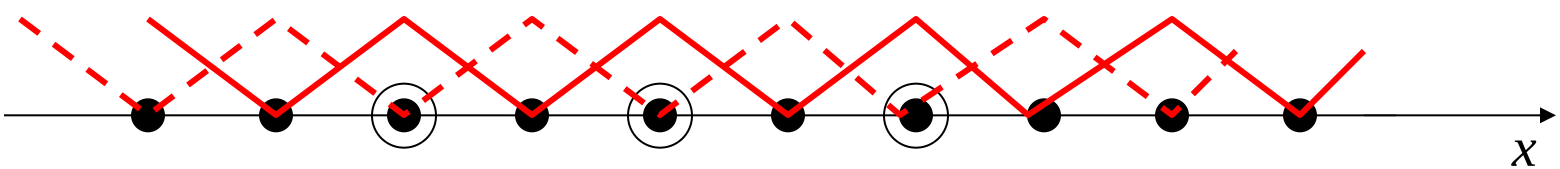
$$\boxed{\left.\frac{d^2 f}{dx^2}\right|_{x_i} = \frac{f_{i+2} - 2 f_i + f_{i-2}}{4\Delta x^2} + O(\Delta x^2)}$$

Problème de localité

- Si les nœuds sont régulièrement espacés



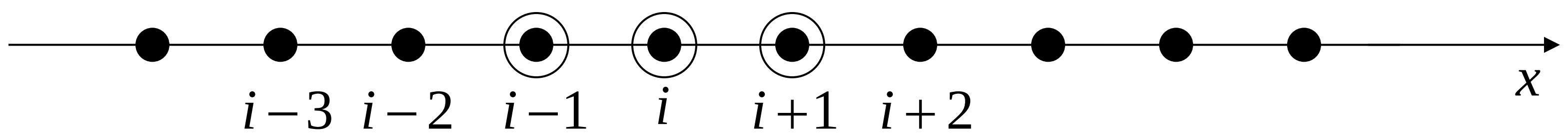
$$\left.\frac{d^2 f}{dx^2}\right|_{x_i} \approx \frac{f_{i+2} - 2 f_i + f_{i-2}}{4\Delta x^2}$$



La dérivée seconde approximée de cette fonction est nulle !!

Dérivées secondes

- Déduire la dérivée seconde des développements de Taylor



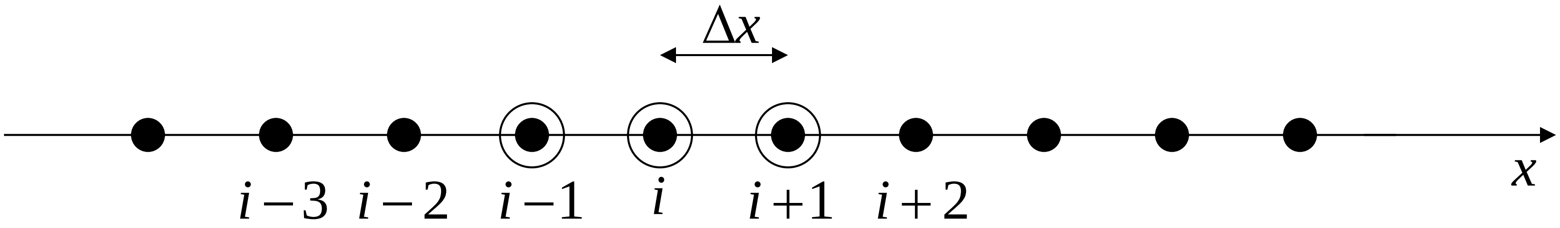
$$f_{i+1} = f_i + \Delta x \left.\frac{df}{dx}\right|_{x_i} + \frac{\Delta x^2}{2}\left.\frac{d^2 f}{dx^2}\right|_{x_i} + \frac{\Delta x^3}{6}\left.\frac{d^3 f}{dx^3}\right|_{x_i} + O\left(\Delta x^4\right)$$

$$f_{i-1} = f_i - \Delta x \left.\frac{df}{dx}\right|_{x_i} + \frac{\Delta x^2}{2}\left.\frac{d^2 f}{dx^2}\right|_{x_i} - \frac{\Delta x^3}{6}\left.\frac{d^3 f}{dx^3}\right|_{x_i} + O\left(\Delta x^4\right)$$

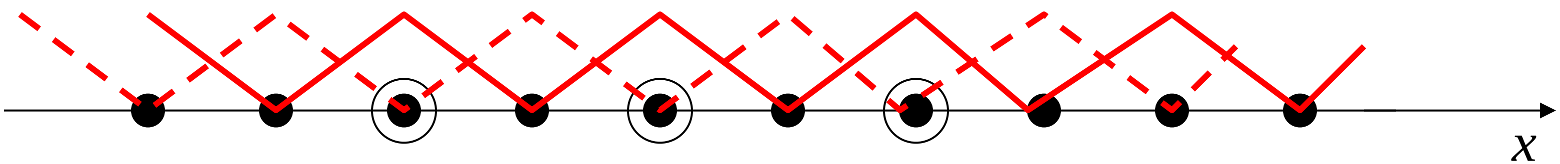
$$\boxed{\left.\frac{d^2 f}{dx^2}\right|_{x_i} = \frac{f_{i+1} - 2 f_i + f_{i-1}}{\Delta x^2} + O(\Delta x^2)}$$

Problème de localité

- Si les nœuds sont régulièrement espacés



$$\left.\frac{d^2 f}{dx^2}\right|_{x_i} \approx \frac{f_{i+1} - 2 f_i + f_{i-1}}{\Delta x^2}$$



La dérivée seconde approximée de cette fonction est non nulle, mais pas infinie …

Analyse spectrale

- Cas d'une fonction harmonique

$$f(x) = \mathrm{Re}\left[\exp(jkx)\right] \quad \Rightarrow \quad \frac{d^2 f}{dx^2} = \mathrm{Re}\left[-k^2 \exp(jkx)\right]$$

- Schéma centré d'ordre 2 à 2Δ

$$f_i = \mathrm{Re}\left[\exp(jki\Delta x)\right], \quad \left.\frac{d^2 f}{dx^2}\right|_{x_i} \approx \frac{f_{i+1} - 2 f_i + f_{i-1}}{\Delta x^2}$$

$$\left.\frac{d^2 f}{dx^2}\right|_{x_i} \approx \mathrm{Re}\left[2\frac{\cos(k\Delta x) - 1}{\Delta x^2} \exp(jki\Delta x)\right]$$

- L'erreur numérique commise revient à multiplier $\frac{d^2 f}{dx^2}$ par $2\frac{1-\cos(k\Delta x)}{k^2 \Delta x^2}$
- … ou la viscosité *a* par la même quantité !!

Analyse spectrale

- Schéma centré d'ordre 2 à 4Δ

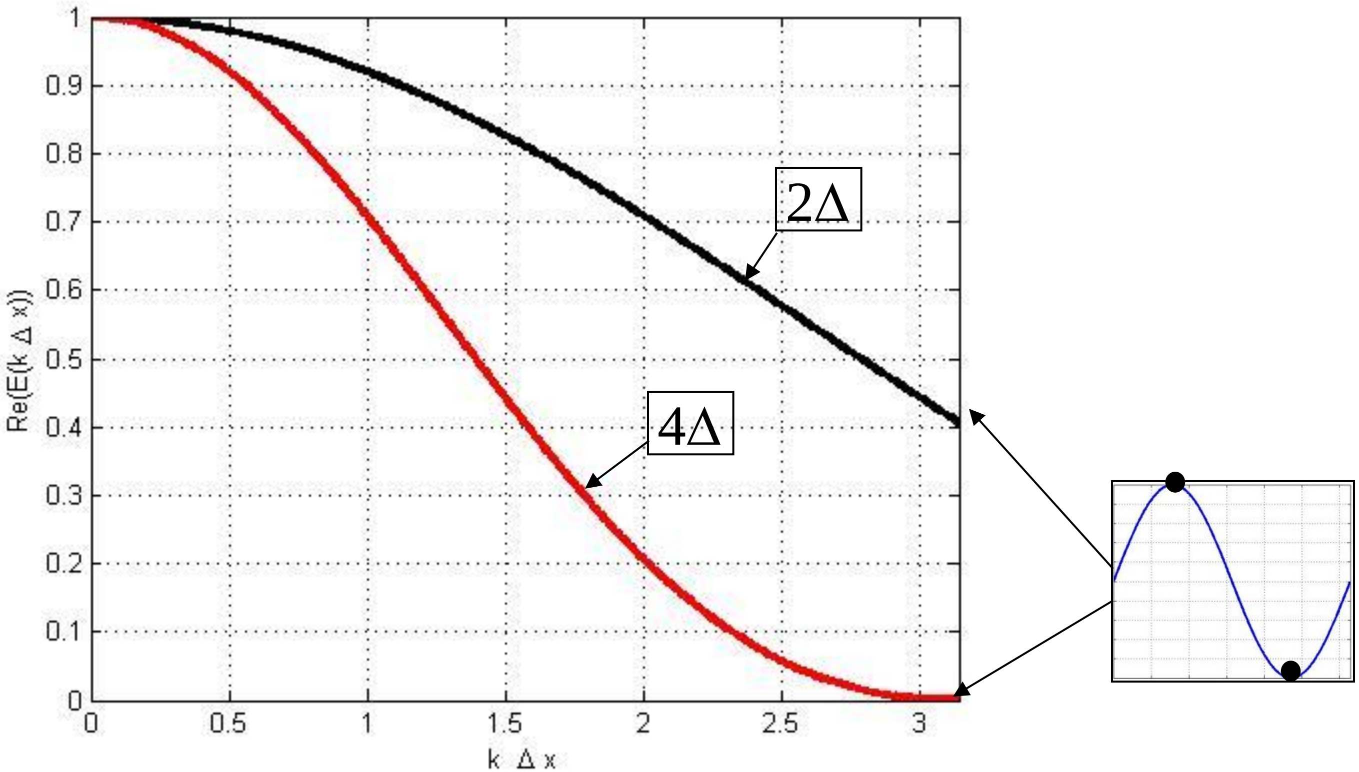
$$f_i = \mathrm{Re}\left[\exp(jki\Delta x)\right], \quad \left.\frac{d^2 f}{dx^2}\right|_{x_i} \approx \frac{f_{i+2} - 2f_i + f_{i-2}}{4\Delta x^2}$$

$$\left.\frac{d^2 f}{dx^2}\right|_{x_i} \approx \mathrm{Re}\left[\frac{1}{2}\frac{\cos(2k\Delta x) - 1}{\Delta x^2}\exp(jki\Delta x)\right]$$

- L'erreur numérique commise revient à multiplier $\frac{d^2 f}{dx^2}$ par $\frac{1-\cos(2k\Delta x)}{2k^2\Delta x^2}$

Analyse spectrale

- Les erreurs sont réelles uniquement, donc pas de convection numérique



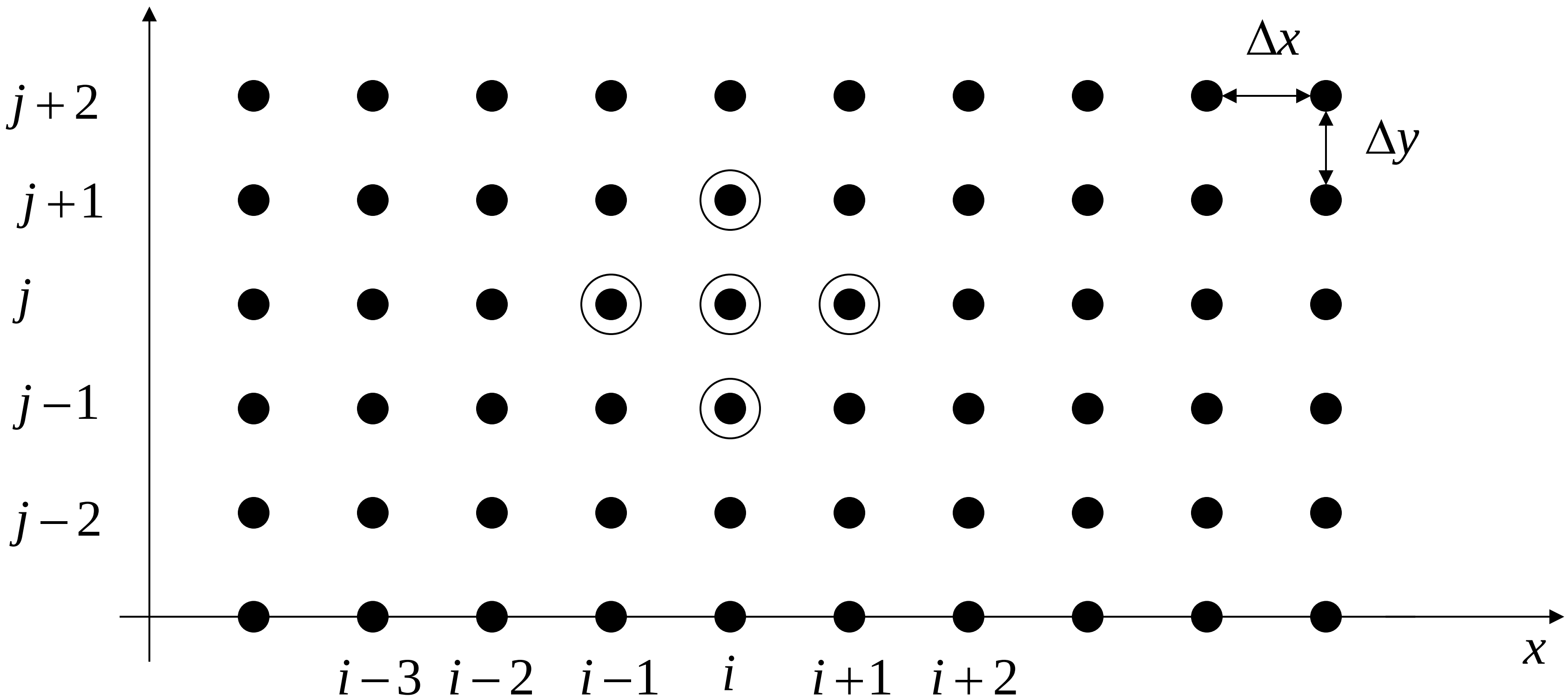
Retour sur le schéma amont ordre 1

- Rappel: ce schéma introduit beaucoup de dissipation par comparaison avec le centré d'ordre 2
- En effet: $$\frac{f_i - f_{i-1}}{\Delta x} = \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2\Delta x} - \frac{\Delta x}{2}\frac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{\Delta x^2}$$
- Utiliser ce schéma revient donc à résoudre

$$\frac{\partial f}{\partial t} + U_0\frac{\partial f}{\partial x} = \underbrace{\frac{U_0 \Delta x}{2}}_{D}\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}$$

avec un schéma centré d'ordre 2

Laplacien



$$\boxed{\Delta f\Big|_{x_i} \approx \frac{f_{i+1,j} - 2f_{i,j} + f_{i-1,j}}{\Delta x^2} + \frac{f_{i,j+1} - 2f_{i,j} + f_{i,j-1}}{\Delta y^2} + O(\Delta x^2, \Delta y^2)}$$

Réalisations sous Matlab

1. Créer un programme qui trace une fonction analytique et sa dérivée analytique
2. Créer une fonction qui calcule par différences finies (DF) la dérivée d'une fonction f sur maillage uniforme.
3. Pour différentes fonctions f, tracer sur le même graphe la dérivée analytique de f et la dérivée issue d'une formule aux DF
4. Vérification de l'ordre de convergence :
    1. En vérifiant que l'écart entre DF et analytique est « nul » pour une fonction polynomiale bien choisie
    2. En traçant l'évolution de l'écart entre DF et analytique pour différentes valeurs de dx pour une fonction non polynomiale
5. Vérifier numériquement les expressions théoriques des fonctions erreurs issues de l'analyse spectrale. On utilisera pour cela des formules aux différences finies de type périodique sur un domaine de longueur $2\pi/k$ appliquées à la fonction test sin kx.