INSA TOULOUSE Département STPI
3ème année MIC

TP2 : Méthode de Monte-Carlo et méthodes de différences finies pour l'équation de la chaleur

L'objet de ce TP est la comparaison de deux méthodes numériques pour la résolution de l'équation de la chaleur. Soit $L = 1$. Soient $\Omega =]0, L[\times]0, L[$ et T un réel strictement positif. Le problème à résoudre est le suivant :

$$\frac{\partial u}{\partial t} + V \cdot \nabla u - D\Delta u = f, \mathrm{sur}[0, T] \times \Omega,$$

avec la condition initiale

$$u(0, x, y) = 0, \quad \forall (x, y) \in \Omega,$$

et les conditions aux limites

$$\begin{array}{llll} \text{en} \quad x = 0 \quad \text{et} \quad x = L, & \forall t \in [0, T],\ \forall y \in [0, L] & \dfrac{\partial u}{\partial x}(t, 0, y) = 0, & \dfrac{\partial u}{\partial x}(t, L, y) = 0, \\ \text{en} \quad y = 0 \quad \text{et} \quad y = L, & \forall t \in [0, T],\ \forall x \in [0, L] & u(t, x, 0) = 0, & u(t, x, L) = 1. \end{array}$$

Le coefficient D, strictement positif, correspond à la diffusivité thermique du fluide. Sa valeur est la suivante :

$$D = 0.2$$

$V = (V_1, V_2)$ représente le champ de vitesse du fluide. Ses composantes V_1 et V_2 ont pour expression :

$$V_1(t, x, y) = V_1(x, y) = -V_0 \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right) \cos\left(\frac{\pi y}{L}\right),$$
$$V_2(t, x, y) = V_2(x, y) = V_0 \cos\left(\frac{\pi x}{L}\right) \sin\left(\frac{\pi y}{L}\right),$$

avec $V_0 = 1$. f désigne la source de chaleur et a pour expression :

$$\forall (t, x, y) \in [0, T] \times \Omega,\ f(t, x, y) = f(x, y) = 256 \left(\frac{x}{L}\right)^2 \left(\frac{y}{L}\right)^2 \left(1 - \frac{x}{L}\right)^2 \left(1 - \frac{y}{L}\right)^2$$

1 Méthode des différences finies

Dans cette première partie, on s'intéresse à la résolution par différences finies du problème ci-dessus. On définit tout d'abord la grille de discrétisation. Soit K un entier strictement positif. Les sommets de la grille sont par définition les $(K+1)^2$ points $X_{i,j}$ de coordonnées (ih, jh) avec $h = \dfrac{L}{K}$ et $i \in \{0, \ldots, K\}$, $j \in \{0, \ldots, K\}$. On considère le schéma aux différences finies défini par les relations suivantes.
On note tout d'abord $V^1_{i,j} = V_1(X_{i,j})$, $V^2_{i,j} = V_2(X_{i,j})$ et $f_{i,j} = f(X_{i,j})$.

- pour tout $(i,j) \in \{1,\ldots,K-1\}^2$ (points intérieurs) :

$$\begin{aligned} u_{i,j}^{n+1} &= u_{i,j}^n - \Delta t V_{i,j}^1 \frac{u_{i+1,j}^n - u_{i-1,j}^n}{2h} - \Delta t V_{i,j}^2 \frac{u_{i,j+1}^n - u_{i,j-1}^n}{2h} \\ &\quad + \Delta t D \frac{u_{i+1,j}^n + u_{i,j+1}^n - 4u_{i,j}^n + u_{i-1,j}^n + u_{i,j-1}^n}{h^2} + \Delta t f_{i,j}, \end{aligned} \tag{1}$$

- pour tout (i,j) avec $i \in \{0,K\}$ et $j = 0$ (points sur la frontière $y = 0$) ou $j = K$ (points sur la frontière $y = L$) :

$$u_{i,0}^{n+1} = 0, \text{ et } u_{i,K}^{n+1} = 1, \tag{2}$$

- pour tout (i,j) avec $k \in \{1, K-1\}$ et $i = 0$ (points sur la frontière $x = 0$) :

$$\begin{aligned} u_{i,j}^{n+1} &= u_{i,j}^n - \Delta t V_{i,j}^2 \frac{u_{i,j+1}^n - u_{i,j-1}^n}{2h} \\ &\quad + \Delta t D \frac{u_{i+1,j}^n + u_{i,j+1}^n - 3u_{i,j}^n + u_{i,j-1}^n}{h^2} + \Delta t f_{i,j}, \end{aligned} \tag{3}$$

- pour tout (i,j) avec $k \in \{1, K-1\}$ et $i = K$ (points sur la frontière $x = L$) :

$$\begin{aligned} u_{i,j}^{n+1} &= u_{i,j}^n - \Delta t V_{i,j}^2 \frac{u_{i,j+1}^n - u_{i,j-1}^n}{2h} \\ &\quad + \Delta t D \frac{u_{i,j+1}^n - 3u_{i,j}^n + u_{i-1,j}^n + u_{i,j-1}^n}{h^2} + \Delta t f_{i,j}, \end{aligned} \tag{4}$$

Afin de regrouper toutes les valeurs de la solution discrète (à chaque instant $t = n\Delta t$) dans un unique vecteur, on associe à tout couple $(i,j) \in \{0,\ldots,K\}^2$ un entier $k = k(i,j)$ compris entre 0 et $(K+1)^2 - 1$ défini par

$$k(i,j) = i + (K+1)j.$$

Réciproquement, on note $ij(k)$ le couple (i,j) associé à l'entier k et on pose $u_k^n = u_{ij(k)}^n$. Enfin, on note U^n le vecteur de dimension $(K+1)^2$ de composantes $(u_0^n, \ldots, u_{(K+1)^2-1}^n)$.

Question 1

Montrer qu'il existe une matrice creuse $A \in M_{(K+1)^2}(\mathbb{R})$ et un vecteur S de dimension $(K+1)^2$ tels que pour tout entier $n \in \mathbb{N}$, le schéma défini par les relations 1-2-3-4 soit équivalent à la relation vectorielle suivante :

$$U^{n+1} = AU^n + S$$

Vous donnerez l'expression des coefficients de A et de S

Question 2

On pose $\lambda = \dfrac{4D\Delta t}{h^2}$ et $Pe = \frac{V_0 h}{D}$. établir des conditions suffisantes sur les valeurs de λ et Pe pour que le schéma (1) soit monotone (c'est-à-dire pour que tous ses coefficients soient positifs). Que pensez-vous ici de la condition sur Pe compte-tenu des valeurs de V_0 et D.

Question 3

Ecrire un programme en Python permettant de calculer la solution discrète à l'aide du schéma (1)-(2)-(3)-(4). Le programme comprendra obligatoirement les éléments suivants :

- une fonction *vitesse* permettant de calculer les composantes de la vitesse en tout point;
- une fonction *source* permettant de calculer la valeur de la fonction f en tout point;
- une fonction *indk* permettant de calculer l'indice k correspondant à un couple (i, j) donné;
- une fonction *MatA* permettant de calculer la matrice A à partir de la donnée de K, h, Δt, D, L et V_0 faisant appel aux fonctions *vitesse* et *indk*.
- une fonction *secmb* permettant de calculer le second membre S à partir de la donnée de K, h, Δt, D et L et faisant appel aux fonctions *source* et *indk*;
- une fonction *MatU* qui à un vecteur de dimension $(K+1)^2$ (contenant la température en tout sommet du maillage) associe une matrice M_U de dimension $(K+1) \times (K+1)$ telle que $M_U(i+1, j+1) = U_{k(i,j)}$;
- la fonction réciproque de *matU* que l'on nommera *vecU*;
- un script comprenant l'appel au calcul de la matrice A et du second membre S ainsi qu'une boucle sur l'indice n pour le calcul itératif du vecteur U^n à partir de la formule (1)-(2)-(3)-(4).

Question 4

A l'aide de ce programme, vous calculerez la solution numérique correspondant aux instants $t = 0.5$, $t = 1$, $t = 1.5$ et $t = 2$, pour trois valeurs du pas de maillage h : $h = \frac{1}{10}$, $h = \frac{1}{20}$ et $h = \frac{1}{30}$. Pour chacun de ces trois instants, vous créerez trois figures différentes correspondant aux profils de température $U_{x_0}(y) = U(x_0, y)$ en $x_0 = 0.25L$, $x_0 = 0.5L$, $x_0 = 0.75L$. Dans chaque cas, vous superposerez sur la même figure les profils obtenus avec les trois valeurs différentes de h. Vous commenterez les résultats obtenus. Comment varie (en théorie) le temps de calcul lorsqu'on divise le pas de maillage par deux ?

2 Méthode de Monte-Carlo

On rappelle que cette méthode consiste à considérer un ensemble de K particules fictives (appelées particules numériques) animées d'un mouvement aléatoire et dont la température θ varie le long de leur trajectoire en fonction des valeurs de la source de chaleur modélisée par la fonction f.

On note (x_k^n, y_k^n) le vecteur position à l'instant $t^n = n\Delta t$ de la particule k et θ_k^n sa température. D'après le cours, x_k^n, y_k^n, et θ_k^n vérifent le schéma numérique suivant:

Etape prédicteur

$$\left\{ \begin{array}{lcl} x_k^{n+1,*} & = & x_k^n + \Delta t V_1(x_k^n, y_k^n) + \sqrt{2D\Delta t}\alpha_k^n \\ y_k^{n+1,*} & = & y_k^n + \Delta t V_2(x_k^n, y_k^n) + \sqrt{2D\Delta t}\beta_k^n \\ \theta_k^{n+1,*} & = & \theta_k^n + \Delta t f(x_k^n, y_k^n) \end{array} \right. \tag{5}$$

où les α_k^n et les β_k^n sont des variables aléatoires normales centrées réduites indépendantes deux à deux.

Etape correcteur (pour tenir compte des conditions aux limites)

$$\left\{\begin{array}{l} x_k^{n+1} = min(L, max(x_k^{n+1,*}, 0)) \\ y_k^{n+1} = min(L, max(y_k^{n+1,*}, 0)) \end{array}\right. \tag{6}$$

et

$$\left\{\begin{array}{lll} \theta_k^{n+1} = \theta_k^{n+1,*} & si & 0 < x_k^{n+1,*} < 1 \\ \theta_k^{n+1} = 0 & si & x_k^{n+1,*} \leq 0 \\ \theta_k^{n+1} = 1 & si & x_k^{n+1,*} \leq 1 \end{array}\right. \tag{7}$$

A l'instant initial, les coordonnées initiales x_k^0 et y_k^0 sont tirées selon une loi uniforme sur $[0, L]$ et on pose:

$$\theta_k^0 = T_0(x_k^0, y_k^0) = 0.$$

Pour calculer une approximation du champ de température $T(t, x, y)$, la méthode de Monte-Carlo (la variante vue en cours) consiste à diviser le domaine $\Omega =]0, L[\times]0, L[$ en M^2 cellules identiques de dimensions $\epsilon \times \epsilon$ avec $\epsilon = L/M$. La température discrète, T_{ij}^n, dans la cellule C_{ij} de centre $X_{ij} = (x_{ij}, y_{ij}) = ((i - 1/2)\epsilon, (j - 1/2)\epsilon))$ et à l'instant $t^n = n\Delta t$ est définie comme la température moyenne des particules p_k situées à l'instant t^n dans la cellule C_{ij}, c'est-à-dire par:

$$T_{ij}^n = \frac{1}{K_{ij}^n} \sum_{p_k \in C_{ij}} \theta_k^n \tag{8}$$

où K_{ij}^n désigne le nombre de particules situées à l'instant t^n dans la cellule C_{ij}.

Question 5

Que se passe-t-il si à N fixé, on laisse tendre ϵ vers 0. Inversement, que se passe-t-il si à N fixé, on laisse tendre ϵ vers l'infini.

Question 6

Ecrire un programme en PYTHON permettant de calculer le champ de températaure à l'aide de la méthode de Monte-Carlo décrite ci-dessus. Ce programme devra faire appel aux fonctions PYTHON suivantes:

- une fonction appelée *posinit* ayant pour aguments L et K et retournant deux vecteurs, $X0$ et $Y0$, de dimension K, contenant respectivement les abscisses et les ordonnées initiales des K particules numériques à l'instant initial (tirées aléatoirement entre 0 et L selon une loi uniforme).

- une fonction appelée *evolution* ayant pour aguments $X, Y, THETA$ (vecteurs de dimension K contenant respectivement les abscisses, ordonneées et températures des K particules numériques à l'instant courant), L, D, V_0, dt (pas de temps) et K, et retournant les vecteurs X, Y, $THETA$ mis à jour avec les valeurs à l'instant suivant calculées selon le schéma (5)-(6)-(7).

- une fonction appelée *tmoy* ayant pour aguments $THETA$, X, Y, L, M et K, et retournant une matrice de dimension $M \times M$ contenant les valeurs des températures T_{ij}^n dans les M^2 cellules du maillage cartésien de pas $\epsilon = L/M$.

Question 7

A l'aide de ce programme, calculer le champ de température aux instants $t = 0.5$, $t = 1$ et $t = 1.5$ pour (K,M) = (10000,10), (100000,10), (10000,20) et (100000,20) respectivement. Pour le pas de temps, vous prendrez: $\Delta t = \frac{\epsilon^2}{4D}$. Justifiez par un argument qualitatif que ce choix est pertinent. Comme pour la méthode des différences finies, vous tracerez le profil de température en fonction de la variable y aux instants demandés en $x = L/4$, $x = L/2$ et $x = 3L/4$. Vous superposerez les solutions correspondant aux quatre couples (K, M) ainsi que la solution différences finies pour le maillage de pas $h = 1/30$ (solution de référence). Vous commenterez les résultats obtenus. Que pensez vous de la précision et du coût de cette variante de la méthode de Monte-Carlo pour le problème considéré ?

Question 8

Cette question est facultative mais peut apporter des points bonus. Pour le couple (K,M) = (100000,20), vous testerez l'influence de la valeur du pas de temps Δt sur la précision de la solution. Vous prendrez respectivement $\Delta t = \dfrac{10\epsilon^2}{D}$, $\Delta t = \dfrac{\epsilon^2}{D}$ et $\Delta t = \dfrac{\epsilon^2}{10D}$. Essayez d'expliquer qualitativement les résultats observés.

Question 9

Cette question est facultative mais peut apporter des points bonus. Sachant que le problème étudié possède une solution stationnaire qui est atteinte aux environs de $t \simeq 3$, quelle variante de la méthode permettrait de fortement gagner en précision à nombre de particules numériques fixé, à condition de se limiter au calcul d'une approximation de la solution stationnaire ? Programmez cette variante et vérifiez votre hypothèse.