TP 1 : Etude et comparaison de schémas numériques pour la résolution de l'équation de transport linéaire

Avertissement. Ce sujet comporte deux parties indépendantes (à l'exception de l'analyse des résultats numériques) : une partie théorique portant sur l'étude des propriétés spectrales des schémas en relation avec le TD1, une partie numérique dans laquelle vous aurez à programmer en PYTHON trois schémas aux différences finies. Il est vivement conseiller de commencer ce TP par les questions relatives à la mise en œuvre informatique de ces schémas (section 3), la partie théorique pouvant être traitée en tant que travail personnel en dehors des créneaux horaires dédiés aux séances de TP. Dans l'évaluation du compte rendu, une attention particulière sera accordée à la qualité de la rédaction et au soin apporté à la présentation des résultats et à leur analyse.

1. Présentation du problème

L'objet de ce TP est l'étude de trois schémas numériques pour la résolution de l'équation de transport linéaire monodimensionnelle :

(1) $$\frac{\partial u}{\partial t} + a\frac{\partial u}{\partial x} = 0, \qquad x \in]0,1[$$

où a est une constante strictement positive représentant la vitesse de convection. Les phénomènes de transport convectif jouent un rôle fondamental dans de très nombreux phénomènes d'origine naturelle ou industrielle. L'équation (1) en constitue le modèle le plus simple mais néanmoins générique. Le développement de schémas numériques précis et "robustes" pour cette équation constitue une étape essentielle dans la construction de schémas numériques plus complexes adaptés à la résolution des équations (ou des systèmes d'équations) de transport non linéaires intervenant en mécanique des fluides par exemple.

Dans cette étude, on complète l'équation (1) par la condition aux limites de périodicité

(2) $$\forall t \geq 0, u(t,-1) = u(t,1),$$

et par la condition initiale

(3) $$\forall x \in [-1,1], u(0,x) = u_0(x),$$

où u_0 est une fonction qui sera définie dans la suite, telle que $u_0(1) = u_0(-1)$.

On note Δx le pas de discrétisation spatiale et Δt le pas de discrétisation temporelle. On pose : $\Delta x = \frac{1}{I}$ où, par définition, $J = 2I+1$ désigne le nombre de points de discrétisation spatiale sur l'intervalle [-1, 1], indicés par convention **de $i=0$ à $i = J-1$**$=2I$. On note u_i^n la valeur de la solution discrète au nœud i

(c'est-à-dire en $x_i = i\ \Delta x$) à l'instant $t^n = n\ \Delta t$ et on considère les trois schémas aux différences finies suivants :

$$(4) \qquad \forall i \in [1, J-1], \qquad u_i^{n+1} = u_i^n - \alpha(u_i^n - u_{i-1}^n)$$

$$(5) \qquad \forall i \in [1, J-2], \qquad u_i^{n+1} = u_i^n - \frac{\alpha}{2}(u_{i+1}^n - u_{i-1}^n) + \frac{\alpha^2}{2}(u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n)$$

$$(6) \qquad \forall i \in [2, J-2], \qquad u_i^{n+1} = u_i^n - \alpha(u_i^n - u_{i-1}^n) - \frac{\alpha(1-\alpha)}{4}(u_{i+1}^n - u_i^n - u_{i-1}^n + u_{i-2}^n)$$

où afin d'alléger les notations, on a posé $\alpha = \dfrac{a\Delta t}{\Delta x}$. α est appelé nombre de Courant-Friedrichs-Lewy ou encore nombre CFL.

Pour les nœuds 0, 1 et J-1, on conserve les mêmes schémas mais on tient compte de la condition aux limites de périodicité en posant :

$$(7) \qquad u_{-1}^n = u_{J-2}^n \ , \qquad u_{-2}^n = u_{J-3}^n \qquad \text{et} \qquad u_J^n = u_1^n$$

On pourra facilement vérifier par récurrence que si $u_0(1) = u_0(-1)$, on a bien pour tout $n > 0$, $u_0^n = u_{J-1}^n$.

2. Etude théorique des propriétés dispersives et dissipatives des schémas

On sait que la solution exacte de (1) a pour expression : $u(t,x) = u_0(x - at)$. Si on considère comme condition initiale la fonction $u_0(x) = A_0 \exp(ikx)$ où A_0 est un complexe et k un réel quelconque (de la forme $k = s\pi$ avec s entier pour que u_0 soit périodique de période 2), la solution exacte a donc pour expression:

$$u(t,x) = A(t) \exp(ikx), \text{ avec } A(t) = A_0 \exp(-iakt)$$

En clair cela signifie qu'au cours du transport, l'amplitude de l'onde A(t) reste constante en module, seule sa phase évolue. En particulier, entre deux instants voisins, on a :

$$(8) \qquad A(t^{n+1}) = \exp(-iak\Delta t) A(t^n)$$

Considérons maintenant un schéma explicite à un pas de la forme :

$$(9) \qquad u_j^{n+1} = \sum_{p=-P}^{p=P} a_p u_{j+p}^n$$

Si on suppose que pour tout j on a $u^n_j = A_n \, exp[ik(j\Delta x)]$, où A_n est une constante complexe quelconque, on obtient :

$$u_j^{n+1} = A_{n+1} \exp(ikj\Delta x) \qquad \text{avec} \qquad A_{n+1} = F(k\Delta x)A_n \tag{10}$$

où F est la fonction de transfert du schéma (voir TD1) définie (pour $k \in \left[0, \frac{2\pi}{\Delta x}\right]$) par :

$$F(k\Delta x) = \sum_{p=-P}^{p=P} a_p \exp(ikp\Delta x) \tag{11}$$

Pour ce qui est de la solution discrète, on déduit donc de (11) qu'entre deux instants voisins, l'amplitude d'une onde monochromatique de nombre d'onde k est multipliée par le coefficient complexe $F(k\Delta x)$. Compte tenu de (8), il est donc naturel d'appeler (à α fixé)

- Erreur d'amplitude : le nombre $E_A(k\Delta x) = 1 - |F(k\Delta x)|$
- Erreur de phase : le nombre $E_\varphi(k\Delta x) = Arg[F(k\Delta x)] + ak\Delta t = Arg[F(k\Delta x)] + \alpha k\Delta x$

3.1. Calcul des fonctions de transfert. Calculer la fonction de transfert des schémas (4), (5) et (6) à partir de la formule (11).

3.2 Quelle est la relation entre le nombre $\zeta = k\Delta x$ et le rapport $\frac{\Delta x}{\lambda}$, où λ désigne la longueur d'onde de l'onde de nombre d'onde k. **Expliquer pourquoi les erreurs qui compte réellement en pratique sont celles commises pour les faibles valeurs de $\zeta = k\Delta x$ et qu'au contraire les erreurs commises pour ξ proche de sa valeur maximale $2\pi/\Delta x$ ne sont pas significatives.**

3.3. Erreur d'amplitude. Pour chacun des schémas, calculer l'erreur d'amplitude en fonction de $\xi=k\Delta x$ et α. **Pour les schémas (1) et (2)**, sous quelle condition sur α, a-t-on : $|F(k\Delta x)| \le 1$, pour toute valeur de $k\Delta x$? Pourquoi dit-on d'un schéma qu'il est "dissipatif" lorsque le module de sa fonction de transfert est strictement inférieur à 1 ?
Pour α=0.2, α=0.5 et α=0.8, tracer avec PYTHON les graphes correspondant à la fonction $E_A(\zeta)$ pour $\zeta = k\Delta x \in [0, \pi/8]$). On fera trois figures différentes correspondant aux trois valeurs de α. Commenter les figures obtenues.

3.4. Erreur de phase. Pour chacun des schémas, calculer l'erreur de phase en fonction de $\xi=k\Delta x$ et α. Pour α=0.2, α=0.5 et α=0.8, tracer les graphes correspondants à $E_\varphi(\zeta)$ pour $\zeta \in [0, \pi/8]$). Commenter les figures obtenues.

3. Mise en œuvre des schémas numériques et analyse des résultats

3.1. Programmation des schémas. Dans le fichier « tp1_lib.py », écrire pour chacun des trois schémas, une fonction PYTHON, ayant pour argument α, J et $U0 = (u_0^n,\ldots\ldots,u_{J-1}^n)$, le vecteur constitué des valeurs de la solution discrète à l'instant t^n, et renvoyant comme résultat le vecteur U1 (correspondant mathématiquement à U^{n+1}) constitué des valeurs de la solution discrète à l'instant t^{n+1}. On prendra soin d'éviter l'utilisation de boucles afin de ne pas pénaliser le temps de calcul. On prendra garde au fait qu'en PYTHON les listes telles que *U0* commencent à l'indice 0.

Soit la condition initiale u_0 définie par :

$$u_0(x) = 256(x-1/4)^2(x+1/4)^2\,\chi(x)$$

où χ est la fonction indicatrice de l'intervalle [- ¼ , ¼].

Dans le fichier « tp1_lib.py », écrire une fonction PYTHON, "condini1.m", ayant pour argument le vecteur X (de longueur J) contenant les abscisses des nœuds du maillage et renvoyant le vecteur U0 (de longueur J) contenant la valeur de u_0 en chacun des nœuds.

Enfin, dans le fichier «tp1.py », écrire un script PYTHON, s'appuyant sur les 4 fonctions écrites précédemment, permettant de calculer les solutions numériques associés aux schémas (4), (5) et (6) jusqu'à un instant T donné.

3.2 Premier test numérique. On fixe $J = 201$, $a = 2$, $\alpha = 0.8$. A l'aide de votre programme, calculer pour chaque schéma les solutions numériques aux instants T = 1, 5 et 10. Pour chaque instant, afficher sur un même graphe les solutions obtenues ainsi que la solution théorique (qui n'est autre ici que la solution initiale !). Comparer la précision des différents schémas. Commentez les résultats en vous appuyant sur les notions de dissipation et de dispersion vues en TD et dans la partie 2.

Même question en prenant: $\alpha = 0.5$ puis $\alpha = 0.2$.

3.3 Second test numérique. On fixe toujours $J = 201$, $a = 2$, $\alpha = 0.8$ et on prend maintenant pour condition initiale la fonction u_0 définie par :

$$u_0(x) = \chi(x)$$

où χ est la fonction indicatrice de l'intervalle [- ¼ , ¼].

Ecrire tout d'abord une fonction PYTHON "condini2.py" sur le modèle de « condini1.py » associée à cette nouvelle condition initiale. A partir de votre programme, calculez pour cette nouvelle condition initiale les solutions numériques données par les trois schémas aux instants T = 1, 5 et 10 et pour chacun de ces instants, afficher sur un même graphe les solutions obtenues ainsi que la solution théorique. Commenter les résultats obtenus et expliquer en particulier pourquoi les phénomènes numériques observés à la question 2 sont accentués.

Fonction de transfert des différents schémas

a) Schéma de Courant (4)

$$F_1(\xi) = 1 - \alpha(1 - \cos(\xi)) - i\alpha \sin(\xi)$$

b) Schéma de Lax Wendroff (5)

$$F_2(\xi) = 1 - \alpha^2(1 - \cos(\xi)) - i\alpha \sin(\xi)$$

c) Schéma décentré du 2ème ordre (6)

$$F_3(\xi) = 1 - \alpha(1 - \cos(\xi)) + \frac{\alpha(1-\alpha)}{2}\sin^2(\xi) - i\left[\alpha \sin(\xi) + \frac{\alpha(1-\alpha)}{2}\sin(\xi)(1 - \cos(\xi))\right]$$

Erreur d'amplitude des différents schémas

d) Schéma de Courant (4)

$$E_{A,1}(\xi) = 1 - \sqrt{1 - 2\alpha(1-\alpha)(1 - \cos(\xi))}$$

e) Schéma de Lax Wendroff (5)

$$E_{A,2}(\xi) = 1 - \sqrt{1 - \alpha^2(1-\alpha^2)(1 - \cos(\xi))^2}$$

f) Schéma décentré du 2ème ordre (6)

$$E_{A,3}(\xi) = 1 - \sqrt{\left[1 - 2\alpha \sin^2(\theta)[1 - (1-\alpha)\cos^2(\theta)]\right]^2 + 4\alpha^2 \sin^2(\theta)\cos^2(\theta)[1 + (1-\alpha)\sin^2(\theta)]^2}$$

avec $\theta = \xi/2$.

Erreur de phase des différents schémas

Rque : si $z = a + i\,b$ et si on cherche arg(z) dans $[-\pi,\pi]$, deux cas sont possibles :

- si $b > 0$, $\arg(z) = \arccos(a/|z|)$,
- si $b < 0$, $\arg(z) = -\arccos(a/|z|)$,

puisque $x \rightarrow \arccos(x)$ est une bijection de $[-1,1]$ dans $[0, \pi]$.

g) Schéma de Courant (4)

$$E_{\varphi,1}(\xi) = \alpha\xi - \arccos\left(\frac{1-\alpha(1-\cos(\xi))}{\sqrt{1-2\alpha(1-\alpha)(1-\cos(\xi))}} \right)$$

h) Schéma de Lax Wendroff (5)

$$E_{\varphi,2}(\xi) = \alpha\xi - \arccos\left(\frac{1-\alpha^2(1-\cos(\xi))}{\sqrt{1-\alpha^2(1-\alpha^2)(1-\cos(\xi))^2}} \right)$$

i) Schéma décentré du 2$^{\text{ème}}$ ordre (6)

$$E_{\varphi,3}(\xi) = \alpha\xi - \arccos\left(\frac{1-2\alpha\sin^2(\theta)[1-(1-\alpha)\cos^2(\theta)]}{\sqrt{\left[1-2\alpha\sin^2(\theta)[1-(1-\alpha)\cos^2(\theta)]\right]^2 + 4\alpha^2\sin^2(\theta)\cos^2(\theta)[1+(1-\alpha)\sin^2(\theta)]^2}} \right)$$

avec $\theta = \xi/2$.