



COMPTE RENDU DE CALCUL SCIENTIFIQUE
**Schémas numériques appliqués à une équation de
transport à une dimension**

Courtois Thibault, Imperatore Valentin

2022-2023

Professeur :
Monsieur ERSOY

1 Résumé

Les équations différentielles à dérivées partielles (EDP) sont des équations mathématiques qui décrivent le comportement de systèmes physiques et naturels. Leur résolution est essentielle dans de nombreux domaines scientifiques tels que la physique, la chimie, la mécanique des fluides, l'ingénierie, la finance, etc.

Au fil du temps, plusieurs méthodes numériques ont été développées pour résoudre les EDP. Voici un historique des principales méthodes numériques de résolution d'EDP :

Méthode des différences finies : Cette méthode a été développée au 18ème siècle par Euler pour résoudre les équations différentielles ordinaires. Elle a ensuite été étendue aux EDP par Richardson en 1910. La méthode consiste à discrétiser l'espace et le temps, puis à approximer les dérivées par des différences finies. Les EDP sont alors transformées en un système d'équations linéaires qui peut être résolu par des algorithmes de résolution de systèmes linéaires.

Méthode des éléments finis : Cette méthode a été introduite dans les années 50 par Courant et Hilbert pour certains problèmes de physique. Elle consiste à subdiviser le domaine de résolution en éléments finis triangulaires ou quadrilatéraux, puis à approximer la solution par une combinaison linéaire de fonctions d'interpolation à support local (dans chaque triangle / quadrilatère de la subdivision du domaine). La méthode des éléments finis est très populaire dans l'ingénierie et la mécanique des fluides.

Méthode des volumes finis : Cette méthode a été développée dans les années 70 pour résoudre les problèmes de la mécanique des fluides. Elle consiste à discrétiser le domaine de résolution en volumes finis et à approximer les flux de quantités physiques à travers les faces de ces volumes finis. La méthode des volumes finis est très utile pour résoudre les problèmes de transport de masse et d'énergie.

Dans ce TP, nous avons utilisé la méthode des différences finies pour résoudre une équation de transport linéaire à coefficients constants.

Table des matières

1	Résumé	1
2	Introduction	3
3	Etude du schéma S1	6
3.1	Etude analytique du schéma numérique S1	6
3.1.1	Erreur de consistance	6
3.1.2	Stabilité	7
3.2	Etude numérique du schéma numérique S1	8
4	Etude du schéma S3	9
4.1	Etude analytique du schéma numérique S3	9
4.1.1	Erreur de consistance	9
4.1.2	Stabilité	9
4.2	Etude analytique du schéma numérique S3	10
5	Etude du schéma S5	12
5.1	Etude analytique du schéma numérique S5	12
5.1.1	Erreur de consistance	12
5.1.2	Stabilité	12
5.2	Etude analytique du schéma numérique S5	13
6	Equation de diffusion à coefficient non constant	14
7	Conclusion	15

2 Introduction

Pour simplifier les notations dans la suite de ce rapport, on notera :

$$\frac{\partial u}{\partial x} = u_x, \quad \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = u_{xx} \text{ etc.}$$

Dans ce TP, on va s'intéresser en particulier à une équation de transport linéaire à coefficients constants :

$$\begin{cases} u_t + c(x, t)u_x = 0 & , x \in [0, 10], t \in [0, 5] \\ u(0, x) = u_0(x) \in [0, 10] \end{cases} \quad (1)$$

On considère 5 schémas numériques basés sur cette équation de transport linéaire :

$$\text{(S1)} : \frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\delta t} + c \frac{u_{i+1}^n - u_i^n}{\delta x} = 0 \text{ (explicite décentré aval)}$$

$$\text{(S2)} : \frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\delta t} + c \frac{u_{i+1}^n - u_{i-1}^n}{2\delta x} = 0 \text{ (explicite centré)}$$

$$\text{(S3)} : \frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\delta t} + c \frac{u_i^n - u_{i-1}^n}{\delta x} = 0 \text{ (explicite décentré amont)}$$

$$\text{(S4)} : \frac{u_i^{n+1} - u_{i-1}^{n-1}}{2\delta t} + c \frac{u_{i+1}^n - u_{i-1}^n}{2\delta x} = 0 \text{ (saute mouton)}$$

$$\text{(S5)} : u_i^{n+1} = u_i^n - \frac{\lambda}{2}(u_{i+1}^n - u_{i-1}^n) + \frac{\lambda^2}{2}(u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n), \text{ avec } \lambda = c \frac{\delta t}{\delta x}$$

Dans ce TP, nous n'étudierons que les schémas S1, S3 et S5. Nous déterminerons systématiquement la consistance et la stabilité des schémas pour pouvoir ensuite comparer les résultats de nos simulations numériques à la théorie.

Les simulations numériques ont été codés sur Fortran et permettent à partir des schémas numériques (et quand ceci convergent) d'approcher la solution exacte de l'équation (1).

Pour chaque schéma, nous allons utiliser le principe des différences finies pour approcher la solution u . Ce principe est basé sur les développements de Taylor :

Théorème 0.1 : Soit $f \in C^0(I, \mathbb{R})$, $x_0 \in \mathbb{R}$, et $h \in \mathbb{R}$, tel que $x_0 + h \in I$. Alors,

$$f(x_0 + h) = f(x_0) + hf'(x_0) + \dots + \frac{h^p}{p!} f^{(p)}(x_0)$$

Etude de la consistance :

Pour analyser la consistance d'un schéma numérique, il faut passer par l'erreur de troncature notée $\epsilon(\delta t, \delta x)$ que l'on étudie au sens des différences finies. Cette erreur de troncature est due à l'approximation par le principe des différences finies de la valeur réelle u_i^n . On notera l'approximation de la valeur réelle $\overline{u_i^n}$.

En faisant tendre $(\delta t, \delta x)$ vers 0 dans son expression, nous pouvons alors déterminer l'ordre de consistance en temps et en espace du schéma considéré.

On rappelle ici la définition d'ordre consistance d'un schéma numérique :

Définition 0.1 : Soit $S_{(\delta t, \delta x)}$ un schéma numérique.
On dit que $S_{(\delta t, \delta x)}$ est consistant d'ordre p en temps et q en espace si pour toute solution ϕ du problème sur lequel est défini le schéma $S_{(\delta t, \delta x)}$ on a :

$$S_{(\delta t, \delta x)}(\phi) = O(\delta t^p) + O(\delta x^q)$$

Etude de la stabilité L^∞ :

Définition 0.2 : Un schéma aux différences finies est stable pour la norme L^∞ si pour tout i et tout n positif on a : $\min(u_i^0) < u_i < \max(u_i^0)$

Etude de la stabilité L^2 :

La stabilité en norme L^∞ implique la stabilité en norme L^2 .

Cependant, si on veut une analyse plus fine de la stabilité d'un schéma numérique, ou si celui-ci n'est pas L^∞ stable, il faut utiliser l'analyse de Fourier.

Si on suppose que le problème est posé sur $[0, 1]$ en espace et muni de conditions aux limites périodiques, on peut définir la fonction suivante :

$$u^n(x) = u_i^n \mathbb{1}_{m_i}(x), \text{ où } m_i = (x_i - \frac{\delta x}{2}, x_i + \frac{\delta x}{2}) \text{ et } \mathbb{1} \text{ est la fonction indicatrice.}$$

S1 est un schéma numérique explicite décentré avale :

$$(S1) : \frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\delta t} + c \frac{u_{i+1}^n - u_i^n}{\delta x} = 0$$

Cette fonction appartient à $L^2(0, 1)$ donc elle admet une décomposition en série de Fourier :

$$\begin{cases} u^n(x) = \sum_{k \in \mathbb{Z}} \nu^n(k) \exp(2ik\pi x) \\ \nu^n(k) = \int_0^1 u^x \exp(-2ik\pi x) dx \end{cases} \quad (2)$$

Donc en utilisant le théorème de Plancherel, on obtient :

$$\|u_n\|_2^2 = \|\nu_n\|_2^2$$

Cependant, pour étudier la stabilité d'un schéma numérique, on a besoin d'une équation modifiée.

Pour trouver cette équation, on suppose que u est solution de l'équation de transport (1). On a alors :

$$\begin{aligned} u_t + cu_x = 0 &\iff u_t = -cu_x \\ \implies u_{tt} &= -c(u_x)_t \\ &= -c(u_t)_x \\ &= -c(-cu_x)_x \\ &= c^2(u_x)_x \\ &= c^2u_{xx} \end{aligned}$$

On peut alors remplacer le terme $\frac{\delta t}{2}(\overline{u_{tt}})_i^n$ par $c^2\frac{\delta t}{2}(\overline{u_{xx}})_i^n$ dans le terme prépondérant de l'erreur de troncature.

Théorème 0.2 : *Théorème de LAX : Un schéma consistant et stable converge.*

Ainsi à partir de la détermination théorique de la consistance et de la stabilité des schémas numériques, nous pourrions savoir dans quelles conditions les schémas convergent vers la solution de l'équation de transport linéaire.

3 Etude du schéma S1

3.1 Etude analytique du schéma numérique S1

3.1.1 Erreur de consistance

Soit u la solution de l'équation de transport. On note $u_i^n = u(x_i, t_n)$.

On note $\epsilon(\delta t, \delta x) = \frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\delta t} + c \frac{u_{i+1}^n - u_i^n}{\delta x}$ l'erreur de troncature de S1.

A partir de développements limités par rapport à t et x , on obtient les expressions suivantes :

$$u_i^{n+1} = u_i^n + \delta t (u_t)_i^n + \frac{\delta t^2}{2} (u_{tt})_i^n + O(\delta t^3) \quad (3)$$

$$u_{i+1}^n = u_i^n + \delta x (u_x)_i^n + \frac{\delta x^2}{2} (u_{xx})_i^n + O(\delta x^3) \quad (4)$$

On en déduit que :

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\delta t} = \delta t (u_t)_i^n + \frac{\delta t^2}{2} (u_{tt})_i^n + O(\delta t^3)$$

$$\frac{u_{i+1}^n - u_i^n}{\delta x} = \delta x (u_x)_i^n + \frac{\delta x^2}{2} (u_{xx})_i^n + O(\delta x^3)$$

En faisant (3) + c x (4) on obtient :

$$\epsilon(\delta t, \delta x) = (u_t)_i^n + c (u_x)_i^n + \frac{\delta t}{2} (u_{tt})_i^n + \frac{\delta x^2}{2} (u_{xx})_i^n + O(\delta t^2, \delta x^2)$$

Ainsi, lorsque $(\delta t, \delta x) \rightarrow (0, 0)$, $\epsilon(\delta t, \delta x) \rightarrow (0, 0)$.

Donc le schéma S1 est consistant d'ordre 1 en temps et en espace.

3.1.2 Stabilité

Pour étudier la stabilité du schéma, il est nécessaire de passer par une équation modifiée (voir introduction).

Pour le schéma 1, l'équation modifiée est : $u_t + cu_x + c\frac{\delta x}{2}(c\frac{\delta t}{\delta x} + 1)u_{xx} = 0$.

On pose $\alpha = c\frac{\delta x}{\delta t}$. La condition de stabilité de Courant-Friedrich-Levy (CFL) impose $\alpha \in]0, 1]$. De plus, lorsque $\alpha \rightarrow 1$ la diffusion est faible, et inversement quand $\alpha \rightarrow 0$.

Ici, dans l'équation modifiée, le coefficient de viscosité est :

$$c\frac{\delta x}{2}(c\frac{\delta t}{\delta x} + 1) > 0$$

Donc si $c > 0$, $\forall \delta t, \forall \delta x$, le schéma est instable quelque soit la norme L^p .

Mais pour $c < 0$ et si $\frac{\delta t}{\delta x} > -1$ alors le coefficient de viscosité est négatif.

Dans ce cas, le schéma est L^∞ stable car diffusif. Un schéma diffusif avec le coefficient de viscosité négatif vérifie le principe de maximum discret :

$$\min(u_i^0) < u_i^n < \max(u_i^0)$$

Un schéma qui vérifie ce principe est L^∞ stable et donc L^2 stable.

Démonstration :

On peut réécrire le schéma S1 sous la forme :

$$u_i^{n+1} = (1 + \alpha)u_i^n - \alpha u_{i+1}^n, \text{ avec } \alpha = c\frac{\delta t}{\delta x} \text{ comme décrit précédemment.}$$

En utilisant l'analyse de Fourier on obtient :

$$\forall k \in \mathbb{Z}, \hat{u}^{n+1}(k) = (1 + \alpha)\hat{u}_i^n(k) - \alpha e^{2\pi I k \delta x} \hat{u}^n(k)$$

Donc :

$$\hat{u}^{n+1}(k) = \underbrace{(1 + \alpha(1 - e^{2\pi I k \delta x}))}_{A(k) \text{ facteur d'amplification}} \hat{u}^n(k)$$

Ainsi, \hat{u}^n est borné si et seulement si $|A(k)| < 1, \forall k \in \mathbb{Z}$. En effet, dans ce cas on a :

$$\|u^n\|_2^2 < \|u^0\|_2^2$$

Conclusion : Si $c > 0$, le schéma S1 est instable quelque soit la norme L^p

Si $c < 0$, le schéma S1 est stable L^∞ donc L^2 stable.

3.2 Etude numérique du schéma numérique S1

Dans chacune des études numériques, on va supposer que $c = 1$ et que la donnée initiale est discontinue telle que :

$$u_0(x) = e^{-50(x-3)^{20}} + \begin{cases} 1, & \text{si } x \in [1, 2], \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

On va jouer sur le paramètre $\alpha = c \frac{\delta t}{\delta x}$ pour observer dans quels cas le schéma converge ou diverge et comparer avec la théorie.

Et sur le paramètre N , le nombre d'étape de la simulation numérique.

Pour chacun des schémas, nous avons effectué des simulations numériques pour $\alpha \in [0.5, 0.9, 1.2]$, et $N \in [100, 500, 1000]$.

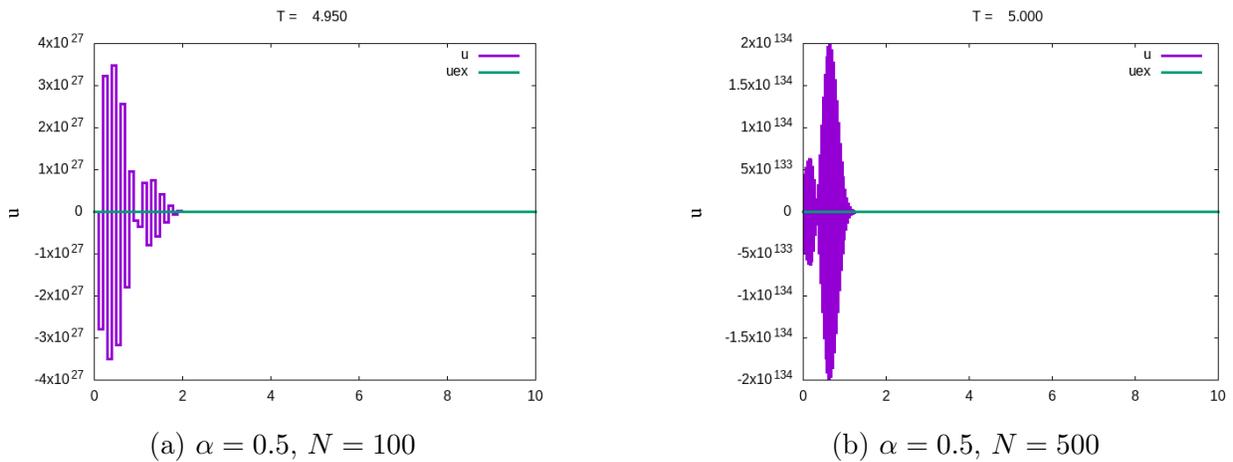


FIGURE 1 – Solutions numériques de S1 pour $\alpha = 0.5$

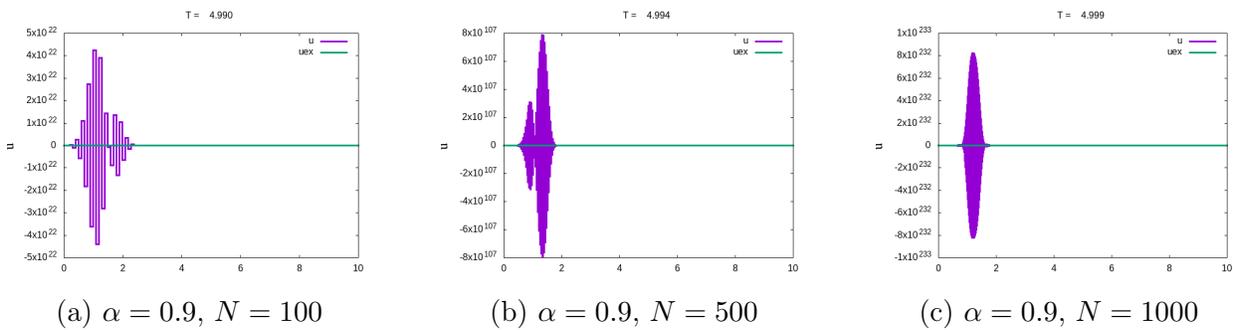


FIGURE 2 – Solutions numériques de S1 pour $\alpha = 0.9$

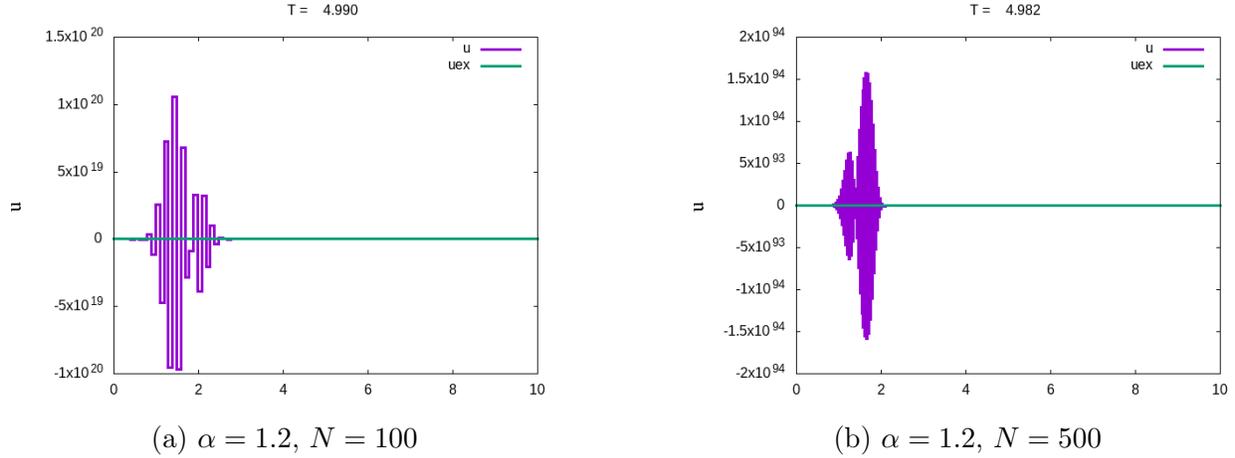


FIGURE 3 – Solutions numériques de S1 pour $\alpha = 1.2$

On observe que dans les trois cas simulés, la solution diverge. Ce résultat est en accord avec la théorie puisque le schéma est censé converger pour $c < 0$. Autrement le facteur d'amplification explose complètement la solution trouvée.

4 Etude du schéma S3

S3 est un schéma numérique explicite décentré amont :

$$(S3) : \frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\delta t} + c \frac{u_i^n - u_{i-1}^n}{\delta x} = 0$$

4.1 Etude analytique du schéma numérique S3

On va utiliser les mêmes outil que le schéma S1 pour déterminer la consistance puis la stabilité du schéma S3.

4.1.1 Erreur de consistance

Les calculs sont les mêmes que pour le schéma S1.

Le schéma S3 est consistant à l'ordre 1 en temps et en espace

4.1.2 Stabilité

On passe par l'équation modifiée :

$$u_t + cu_x + \underbrace{c \frac{\delta x}{2} \left(c \frac{\delta t}{\delta x} - 1 \right)}_{\text{coefficient de viscosité}} u_{xx} = 0$$

Le coefficient de viscosité change par rapport au schéma S1. Ainsi, si $c < 0$ et $c \frac{\delta t}{\delta x} < 1$ alors le coefficient de viscosité est négatif.

Donc dans ce cas, le schéma est L^∞ stable car diffusif à coefficient de viscosité négatif. Et un schéma diffusif et à coefficient de viscosité négatif vérifie le principe du maximum discret : $min u_i^0 \leq u_i^n \leq max u_i^0$.

Un schéma qui vérifie ce principe est L^∞ stable et donc L^2 stable.

Mais, si $c < 0$, alors $\forall \delta t, \forall \delta x$ le schéma est instable pour toute norme L^p (comme pour le schéma 1).

Conclusion : Si $c < 0$, le schéma S3 est instable quelque soit la norme L^p .

Si $c > 0$, donc si le coefficient de viscosité est négatif, le schéma est L^∞ stable donc L^2 stable.

4.2 Etude analytique du schéma numérique S3

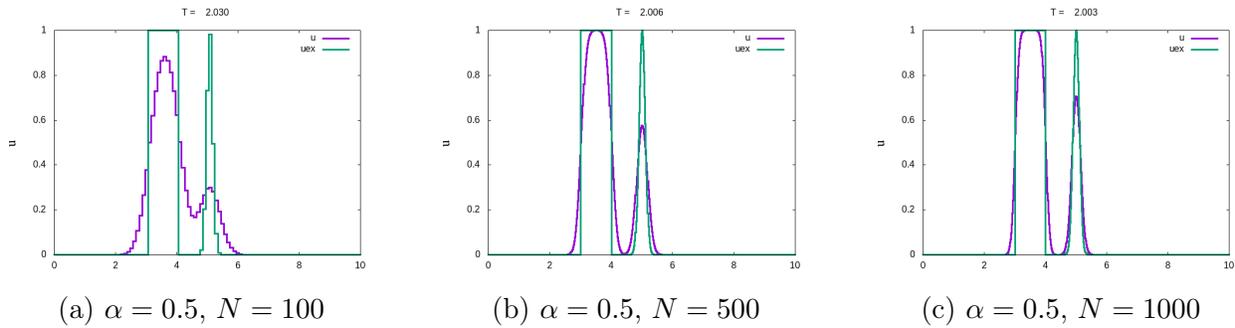


FIGURE 4 – Solutions numériques de S3 pour $\alpha = 0.5$

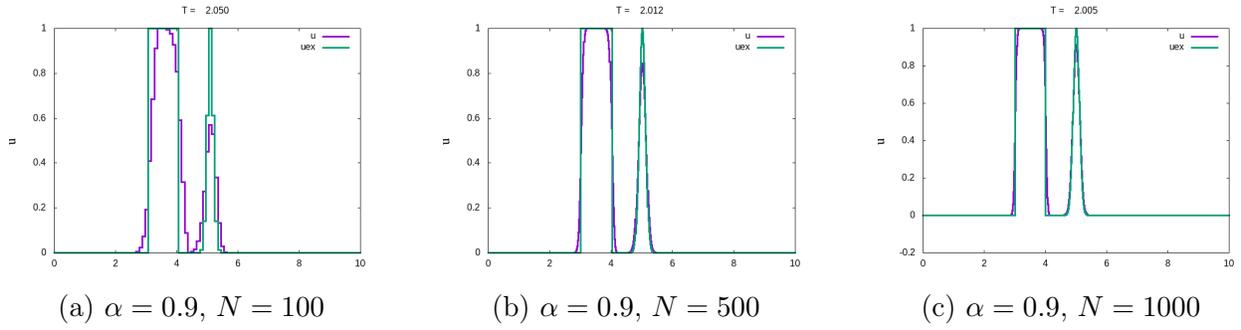


FIGURE 5 – Solutions numériques de S3 pour $\alpha = 0.9$

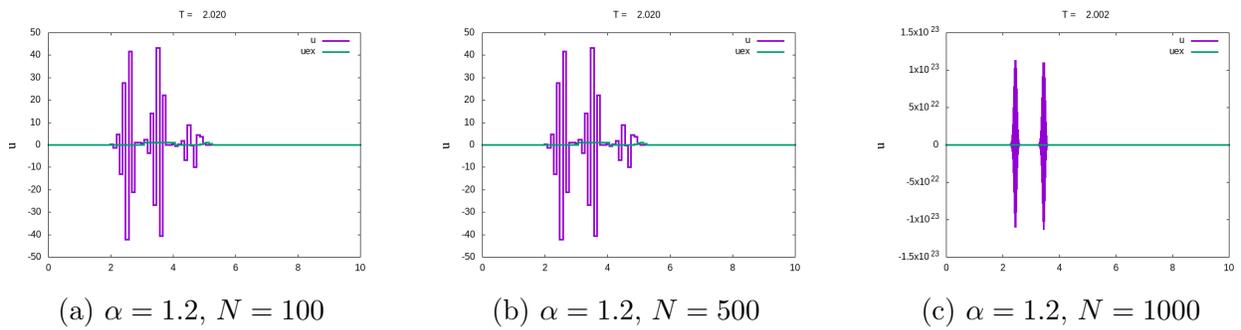


FIGURE 6 – Solutions numériques de S3 pour $\alpha = 1.2$

On observe qu'il y a une convergence d'autant plus précise que N est grand pour $\alpha = 0.5$ et $\alpha = 0.9$ ce qui est cohérent avec l'étude théorique. La divergence pour $\alpha = 1.2$ est dû au non respect de la condition de stabilité de Courant-Friedrich-Levy.

5 Etude du schéma S5

S5 à pour expression l'équation suivante :

$$(S5) : u_i^{n+1} = u_i^n - \frac{\lambda}{2}(u_{i+1}^n - u_{i-1}^n) + \frac{\lambda^2}{2}(u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n), \text{ avec } \lambda = c \frac{dt}{dx}$$

5.1 Etude analytique du schéma numérique S5

5.1.1 Erreur de consistance

On utilise deux développements de Taylors :

$$u_{i+1}^n = u_i^n + (u_x)_i^n \delta x + (u_{xx})_i^n \frac{\delta x^2}{2} + (u_{xxx})_i^n \frac{\delta x^3}{6} + O(\delta x^4) \quad (5)$$

$$u_{i-1}^n = u_i^n - (u_x)_i^n \delta x + (u_{xx})_i^n \frac{\delta x^2}{2} - (u_{xxx})_i^n \frac{\delta x^3}{6} + O(\delta x^4) \quad (6)$$

Donc à partir de (3), (4) et (1) (tout la haut dans la partie 2.1.1), on en déduit que :

$$\frac{u_{i+1}^n - u_{i-1}^n}{2\delta x} = (u_x)_i^n + (u_{xxx})_i^n \frac{\delta x^2}{6} + O(\delta x^3) = (u_x)_i^n + O(\delta x^2)$$

$$\frac{u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n}{2\delta x^2} = (u_{xx})_i^n + O(\delta x^2)$$

D'où :

$$\epsilon(\delta x, \delta t) = (u_t)_i^n + (u_{tt})_i^n \frac{\delta t}{2} + c(u_x)_i^n - c^2(u_{xx})_i^n + O(\delta x^2, \delta t^2)$$

Donc le schéma S5 est consistant à l'ordre 2 en temps et en espace

5.1.2 Stabilité

L'équation modifiée de ce schéma est $c \frac{\delta t x^2}{6} u_{xxx} = 0$ c'est une équation dispersive de coefficient de dispersion $c \frac{\delta t x^2}{6}$. Puisque l'équation est purement dispersive, ce schéma ne peut pas être stable L^∞ . Un schéma dispersif ne respecte pas la principe du maximum.

Par la méthode d'analyse de Fourier, on peut montrer que :

Pour $|\lambda = c \frac{\delta t}{\delta x}| > 1$, le schéma est L^2 instable et pour $|\lambda = c \frac{\delta t}{\delta x}| \leq 1$, le schéma est L^2 stable.

Conclusion : Le schéma S5 est L^∞ instable mais
 Si $|\lambda| > 1$, le schéma est L^2 instable.
 Si $|\lambda| \leq 1$, le schéma est L^2 stable.

5.2 Etude analytique du schéma numérique S5

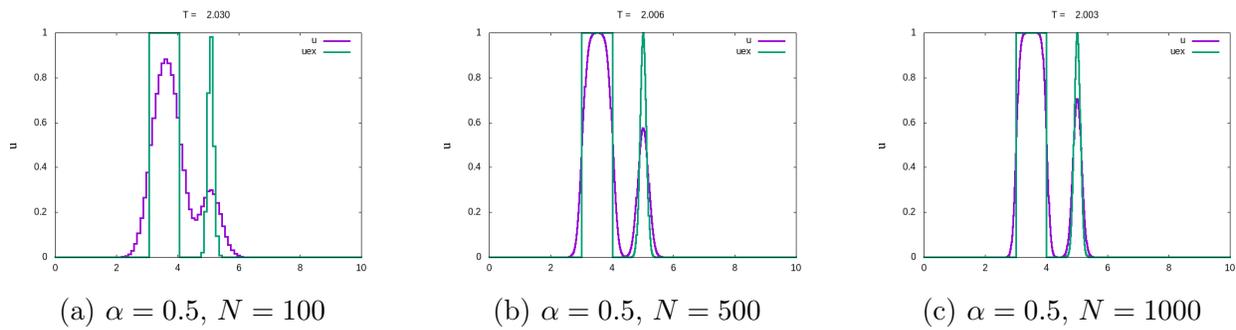


FIGURE 7 – Solutions numériques de S5 pour $\alpha = 0.5$

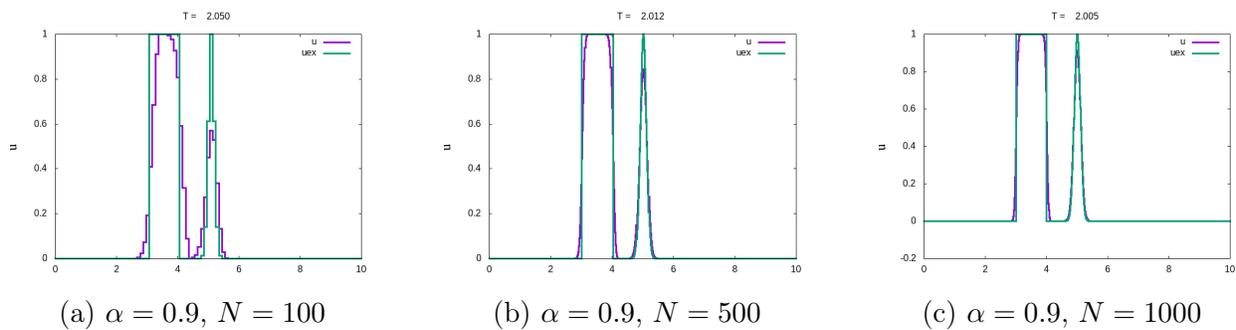


FIGURE 8 – Solutions numériques de S5 pour $\alpha = 0.9$

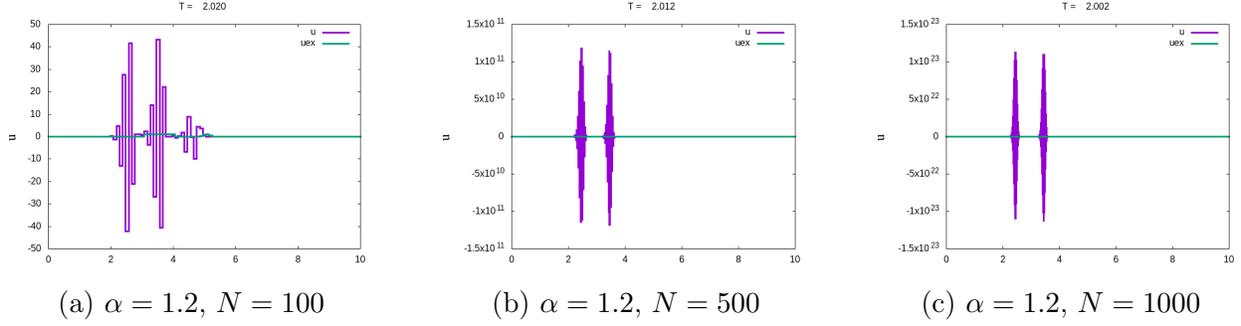


FIGURE 9 – Solutions numériques de S5 pour $\alpha = 1.2$

Mêmes observations que pour le schéma 3, même si le schéma S5 n'est que L^2 stable et non L^∞ comme le schéma 3, la convergence est similaire en terme de précision et rapidité.

6 Equation de diffusion à coefficient non constant

Dans cette section nous allons nous intéresser à une équation de diffusion 1D à coefficients non constant :

$$\begin{cases} u_t + \sin(x)u_x = 0 & , x \in [0, L], t \in [0, T] \\ u_0(x) = \mathbb{1}_{[\frac{1}{2}, \frac{L}{2}]}(x) \end{cases} \quad (7)$$

Détermination d'un schéma numérique pour cette nouvelle équation :

Supposons que u soit solution de l'équation (7).

Alors :

$$u_t(x_i, t_n) = -\sin(x_i)u_x(x_i, t_n)$$

et

$$\begin{aligned} u_{tt}(x_i, t_n) &= -\frac{\partial}{\partial t}(\sin(x_i)u_x(x_i, t_n)) \\ &= -\sin(x_i)\frac{\partial}{\partial x}(u_t(x_i, t_n)) \\ &= -\sin(x_i)\frac{\partial}{\partial x}(-\sin(x_i)u_x(x_i, t_n)) \\ &= \sin(x_i)[- \cos(x_i)u_x(x_i, t_n) - \sin(x_i)u_{xx}(x_i, t_n)] \\ &= -\sin(x_i)\cos(x_i)u_x(x_i, t_n) - \sin^2(x_i)u_{xx}(x_i, t_n) \end{aligned}$$

Puis en utilisant le développement de Taylor suivant,

$$u_i^{n+1} = u_i^n + \delta t (u_t)_i^n + \frac{\delta t^2}{2} (u_{tt})_i^n + O(\delta t^3) \quad (8)$$

et en remplaçant les expressions des dérivés partielles temporelles trouvées précédemment on obtient :

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\delta t} + \sin(x_i) u_x(x_i, t_n) + \sin(x_i) \cos(x_i) u_x(x_i, t_n) \frac{\delta t}{2} + \sin^2(x_i) u_{xx}(x_i, t_n) \frac{\delta t}{2} = O(\delta t^2)$$

Enfin, en utilisant les développements de Taylors suivants :

$$u_{i+1}^n = u_i^n + \delta x (u_x)_i^n + \frac{\delta x^2}{2} (u_{xx})_i^n + O(\delta x^3)$$

$$u_{i-1}^n = u_i^n - \delta x (u_x)_i^n + \frac{\delta x^2}{2} (u_{xx})_i^n + O(\delta x^3)$$

On trouve un schéma numérique consistant d'ordre 2 en temps et en espace :

$\text{(S)} : \frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\delta t} + \sin(x_i) \frac{(1 + \cos(x_i)) \delta t}{2} \frac{u_{i+1}^n - u_{i-1}^n}{2 \delta x} + \frac{(\sin^2(x_i) \delta t)}{2} \frac{u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n}{2 \delta x^2} = O(\delta t^2, \delta x^2)$
--

7 Conclusion

Les schémas S1, S3 et S5 présentent des domaines de stabilités différents dans le cas où le coefficient c est constant. Ces domaines de stabilités ont été démontrés théoriquement et observés numériquement par l'intermédiaire du coefficient α . Dans leur domaines de stabilités respectifs, les schémas convergent tous vers la solution exacte avec une précision qui dépend du paramètre N . Dans le cas où le coefficient c n'est pas une constante de l'espace, la résolution numérique de l'équation de transport nécessite un autre schéma numérique mais une analyse locale du coefficient c peut dans certains cas permettre la réutilisations des schémas S1, S3 et S5 pour approcher numériquement la solution.