TD2

Discrétisation d'équations et transport d'un polluant

Exercice 1 : introduction à la discrétisation

Dans cette partie du TD, nous allons nous familiariser avec les méthodes de discrétisation par différences finies. Pour commencer nous allons nous proposer de déterminer numériquement la dérivée d'une fonction analytique quelconque. Prenons par exemple

$$f(x) = e^x \sin^2 x \ \text{ sur } 0 \leq x \leq \pi. \tag{1}$$

1. Calculer analytiquement la dérivée de cette fonction. Sur un même graphique, tracer $f(x)$ ainsi que sa dérivée $f'(x)$.
2. On va maintenant déterminer la dérivée de $f(x)$ de manière approchée en se servant de la définition de la dérivée, à savoir
$$f'(x) = \lim_{\substack{h\to 0\\ h>0}} \frac{f(x+h) - f(x)}{h}.$$
Dans Matlab, choisir une petite valeur de h (par exemple $h = 0{,}1$) et calculer $f'(x)$ en se servant de la définition de la dérivée. Sur le même graphique, tracer $f'(x)$ obtenue de cette façon ainsi que la définition analytique de $f'(x)$. Commenter. Refaire la même chose en choisissant $h = 10^{-3}$ et $h = 10^{-6}$. Commenter.

Exercice 2 : introduction aux différences finies - schéma d'Euler progressif

Nous nous intéressons maintenant à la discrétisation d'équations différentielles ainsi qu'à leur résolution numérique. Considérons l'équation différentielle

$$\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x} = y \tag{2}$$

définie sur l'intervalle $0 \leq x \leq 1$ et sujette à la condition de bord

$$y(0) = 1\,.$$

La première étape de la résolution numérique est de discrétiser cette équation différentielle. Le développement en série de Taylor d'une fonction f au voisinage d'un point x_0 est

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(x_0)}{n!}(x - x_0)^n\,.$$

En choisissant $x = x_0 + h$ on peut écrire cette série sous la forme

$$f(x_0 + h) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(x_0)}{n!} h^n = f(x_0) + \frac{f'(x_0)}{1!} h + O(h^2),$$

où $O(h^2)$ représente les termes restant de la série et indique que le terme dominant est d'ordre h^2. À partir de la série de Taylor, on obtient une expression approchée de la dérivée au premier ordre

$$f'(x_0) = \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h} + O(h^2). \tag{3}$$

Cette approximation de la dérivée est appelée *schéma progressif* car on se sert de la valeur de f en un point x_0 pour déterminer la valeur de f en un point $x_0 + h$ situé à sa droite, d'où le nom de « schéma progressi ». On peut donc se servir de cette expression de la dérivée pour résoudre l'équation différentielle (2).

1. Résoudre analytiquement l'équation différentielle (2).

2. En se servant de l'approximation (3), montrer que l'expression discrétisée de l'équation différentielle (2) s'écrit comme

$$y(x_0 + h) = y(x_0) + hy(x_0). \tag{4}$$

3. Nous allons maintenant résoudre cette équation sur un domaine discret pour la valeur $h = 0{,}1$. Discrétiser l'intervalle $[a,\, b]$ en n éléments x_i (avec $a = 0$, $b = 2$ et $i = 1,\, 2, \cdots n$) de sorte que $n = (b - a)/h + 1$. On va résoudre l'équation différentielle trouvée à la question précédente en partant de $y(x_0) = y_0$, ce qui permettra de calculer le prochain terme jusqu'à la fin du domaine considéré. Tracer sur un graphique la solution numérique trouvée ainsi que la solution analytique déterminée à la question 1. Commenter le graphique. Refaire la résolution numérique pour $h = 0{,}01$ et $h = 0{,}001$. Commenter les résultats trouvés.

Exercice 3 : introduction aux différences finies - schéma d'Euler régressif

Dans cet exercice, nous nous intéressons à la discrétisation de l'équation différentielle (2), mais cette fois ci en utilisant un schéma régressif. Pour ce faire, nous exprimons une expression approchée de la dérivée à l'aide de la série de Taylor (comme à l'exercice précédent), seulement cette fois on l'exprime en fonction du point précédent. Cela donne au premier ordre

$$f'(x_0) = \frac{f(x_0) - f(x_0 - h)}{h} + O(h^2). \tag{5}$$

Cette approximation de la dérivée est appelée *schéma régressif* car on détermine la valeur de f en un point x_0 à partir de la valeur de f en un point x_0 situé à sa gauche, d'où le nom de « schéma régressif ». On peut se servir de cette expression de la dérivée pour résoudre l'équation différentielle (2).

1. En se servant de l'approximation (5), montrer que l'expression discrétisée de l'équation différentielle (2) s'écrit comme

$$y(x_0) = \frac{y(x_0 - h)}{1 - h}. \tag{6}$$

2. Nous allons maintenant résoudre cette équation sur un domaine discret pour la valeur $h = 0{,}1$. Discrétiser l'intervalle $[a{,}b]$ en n éléments x_i (avec $a = 0$, $b = 2$ et $i = 1,\, 2, \cdots n$) de sorte que $n = (b - a)/h + 1$. On va résoudre l'équation différentielle trouvée à la question précédente en partant de $y(x_0 - h) = y_0$, ce qui permettra de calculer le prochain terme jusqu'à la fin du domaine considéré. Tracer sur un graphique la solution numérique trouvée ainsi que la solution analytique déterminée à la question 1. Commenter le graphique. Refaire la résolution numérique pour $h = 0{,}01$ et $h = 0{,}001$. Commenter les résultats trouvés.
3. Sur le même graphique, comparer les résultats des schémas progressifs et régressifs par rapport à la solution analytique pour les valeurs de h suivantes : $h = 0{,}1$, $h = 0{,}01$ et $h = 0{,}001$. Commenter.
4. *Question facultative :* comparer les temps de calculs des schémas progressifs et régressifs. Pour cela, se servir de la fonction tic-toc dans Matlab.

Exercice 4 : advection-diffusion d'un polluant

Nous allons nous intéresser dans cet exercice à la propagation d'un polluant dans un tronçon de rivière de longueur L. Pour simplifier les équations, nous nous limiterons au cas unidimensionnel. L'équation régissant la concentration de cette substance s'écrit

$$\frac{\mathrm{d}c}{\mathrm{d}t} = D\frac{\partial^2 c}{\partial x^2}, \tag{7}$$

où c est la concentration, D le coefficient de diffusion moléculaire, v la vitesse de l'écoulement de la rivière, et $\mathrm{d}/\mathrm{d}t$ la dérivée matérielle. Les conditions de bord et initiale sont données par les équations suivantes

$$c(x = 0,\, t) = c_0, \tag{8}$$

$$c(x = L,\, t) = c_L, \tag{9}$$

$$c(x,\, t = 0) = c_i. \tag{10}$$

Nous considérons que la longueur du tronçon de rivière est $L = 100$ m, la vitesse de l'écoulement est $v = 0{,}1$ m/s, la concentration initiale $c_i = 2$ mg/l, les concentrations aux limites $c_0 = 10$ mg/l et $c_L = 0$ mg/l . Afin de résoudre numériquement cette équation, nous allons la discrétiser par la méthode des différences finies. Deux schémas numériques seront ici utilisés, un schéma explicite et un schéma implicite.

Schéma explicite progressif

Nous allons maintenant résoudre numériquement ce problème à l'aide d'un schéma progressif (voir le livre de Zwillinger[1], p. 188).

1. Développer l'équation (7) afin d'arriver à une équation de la forme
$$\frac{\partial c}{\partial t} = D\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - v\frac{\partial c}{\partial x}. \tag{11}$$
Exprimer cette équation différentielle sous forme de différences finies avec un schéma progressif.
2. On va maintenant s'atteler à résoudre cette équation. Dans Matlab, créer un vecteur $\boldsymbol{C} = (C_1, \ldots, C_{n+2})$ de dimensions $n+2$ où $n = L/\Delta x$ et Δx est le pas d'espace. On ajoute deux éléments au vecteur $\boldsymbol{C}$ pour lui appliquer les conditions de bord.
3. Créer une fonction nommée « bc.m » qui applique les conditions de bord au vecteur $\boldsymbol{C}$ pour les positions 1 et $n+2$.
4. Pour la suite de l'exercice l'indice i représente la position dans l'espace du vecteur et l'exposant k représente la position dans le temps. Donc par exemple C_1^2 représente la concentration au temps 2 à la position 1. Établir l'expression de la dérivée temporelle de C_i^k en fonction de C_i^k, C_i^{k+1} et Δt le pas de temps.
5. Établir l'expression des dérivées spatiale de C_i^n en fonction de C_{i+1}^k, C_i^k, C_{i-1}^k et Δx le pas d'espace.
6. Sur Matlab programmer la boucle principale de résolution de l'équation discrétisée. Pour choisir le pas de temps et le pas d'espace, on va se servir des critères suivants
$$D\frac{\Delta t}{\Delta x^2} \leq \frac{1}{2} \text{ et } v\frac{\Delta t}{\Delta x} \leq 1.$$
7. Sur un graphique tracer l'évolution de la concentration en fonction du temps aux points $x = (10, 30, 50, 70, 90)$.
8. Refaire la résolution numérique mais cette fois ci en choisissant des pas de temps que ne respectent pas les critères de la question 5. Que remarque-t-on ?

Schéma implicite

Nous allons maintenant résoudre numériquement ce même problème à l'aide d'un schéma implicite particulier, un schéma de Crank-Nicolson (voir le livre de Zwillinger p. 192).

1. Exprimer l'équation différentielle (11) sous forme de différences finies avec un schéma implicite de Crank-Nicolson. Utiliser pour cela les équations 197.2 du livre de Zwillinger (p. 191) avec $\lambda_1 = \lambda_2 = 1/2$.
2. Montrer que l'on peut écrire ce schéma sous la forme d'un équation matricielle
$$\boldsymbol{A} \cdot \boldsymbol{C}^{k+1} = \boldsymbol{B}\boldsymbol{C}^k.$$
On voit donc que pour déterminer la concentration au temps successif il nous faut inverser la matrice $\boldsymbol{A}$ et résoudre le système linéaire
$$\boldsymbol{C}^{k+1} = \boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{B} \cdot \boldsymbol{C}^k.$$
3. On va maintenant programmer cette équation matricielle. Dans Matlab, créer un vecteur $\boldsymbol{C}$ de dimensions $n+2$ où $n = L/\Delta x$ et Δx est le pas d'espace. On ajoute deux éléments au vecteur $\boldsymbol{C}$ pour lui appliquer les conditions de bord. Pour cela, on va d'abord créer une fonction « bc.m » qui applique les conditions de bord aux positions 1 et $n+2$.
4. On va maintenant programmer la boucle de résolution de l'équation discrétisée, l'idée étant qu'à chaque itération, l'algorithme résolve l'équation matricielle
$$\boldsymbol{C}^{k+1} = \boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{B}\boldsymbol{C}^k.$$
On part donc de l'état initial $\boldsymbol{C}^0$ pour déterminer l'état au temps suivant $\boldsymbol{C}^1$ et ainsi de suite. On arrête la boucle quand le système arrive à un état stationnaire que l'on détermine avec la condition
$$|\boldsymbol{C}^{k+1} - \boldsymbol{C}^k| < \varepsilon$$
avec $\varepsilon = 10^{-8}$.

1. Zwillinger, D., *Handbook of differential equations*, 775 pp., Academic Press, Boston, 1992.

5. Sur un graphique tracer l'évolution de la concentration en fonction du temps aux points $x = (10, 30, 50, 70, 90)$.
6. Refaire la résolution numérique en changeant le pas d'espace. Que remarque-t-on ? La discrétisation spatiale semble-t-elle affecter la stabilité de la résolution numérique ?
7. Comparer les temps de calcul de la méthode explicite ainsi que de la méthode implicite. Quelle méthode semble la plus avantageuse de ce point de vue ? Quelle méthode semble la plus stable ?