ÉCOLE CENTRALE LYON

2012-2013

Dynamique des systèmes non-linéaires

Bureau d'études 1 : Méthodes numériques élémentaires

1 Contexte

On s'intéresse à la résolution numérique d'équations de réaction-diffusion en une dimension d'espace. Le but du travail est de mettre en évidence le phénomène d'explosion thermique sur un modèle de combustion très simple.

Le mise au point de méthodes numériques pour la résolution des équations de réaction-diffusion requiert une bonne connaissance de l'approximation des équations différentielles (pour le terme de réaction), et de l'équation de la chaleur (pour la partie diffusive). On propose dans un premier temps un panorama des techniques classiques dans ces deux domaines, puis différentes manières de coupler ces méthodes pour la résolution de l'équation de combustion.

2 Rappels sur quelques méthodes numériques

2.1 Approximation numérique d'équations différentielles

On considère un système d'équations différentielles de la forme

$$\begin{cases} y'(t) = f\big(t, y(t)\big) \text{ pour } t > 0, \\ y(0) = y_0, \end{cases} \tag{1}$$

Pour un pas de temps δt, on considère la discrétisation uniforme $t_n = n\delta_t$, et les méthodes d'approximation suivantes :

Euler explicite $\quad y_{n+1} = y_n + hf(t_n, y_n)$

Heun $\quad y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}\Big[f(t_n, y_n) + f(t_{n+1}, y_n + hf(t_n, y_n))\Big]$

RK4 $\quad \left| \begin{array}{lcl} k_1^n & = & f(t_n, y_n) \\ k_2^n & = & f(t_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2}k_1^n) \\ k_3^n & = & f(t_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2}k_2^n) \\ k_4^n & = & f(t_{n+1}, y_n + hk_3^n) \\ y_{n+1} & = & y_n + \frac{h}{6}\Big(k_1^n + 2k_2^n + 2k_3^n + k_4^n\Big) \end{array} \right.$

Euler implicite $\quad y_{n+1} = y_n + hf(t_{n+1}, y_{n+1})$

Crank-Nicolson $\quad \left| \begin{array}{lcl} y_{n+\frac{1}{2}} & = & y_n + \frac{h}{2}f\left(t_n + \frac{h}{2}, y_{n+\frac{1}{2}}\right) \\ y_{n+1} & = & y_n + hf\left(t_n + \frac{h}{2}, y_{n+\frac{1}{2}}\right) \end{array} \right.$

Toutes ces méthodes s'écrivent sous la forme générale des méthodes à un pas

$$y_{n+1} = y_n + h\phi(t_n, y_n, h).$$

On montre facilement la stabilité des méthodes dans le cas où la fonction f définissant l'équation différentielle est lipschitzienne ; la consistance peut être reliée à ϕ et ses dérivées en $h = 0$ (*cf* les conditions d'ordre).

Dans le cas où le problème (1) est *raide*, les méthodes explicites souffrent d'un défaut de stabilité asymptotique, exigeant un pas δt petit. Les méthodes implicites sont asymptotiquement inconditionnellement stables.

2.2 Résolution numérique de l'équation de la chaleur

On considère l'équation de la chaleur sur un segment :

$$\begin{cases} \partial_t u - \Delta u = 0 & \text{dans }]-L, L[\times]0, +\infty[, \\ u|_{t=0} = u_0(x) & \text{pour } x \in [-L, L], \\ \text{C.L.} & \text{en } \pm L. \end{cases} \tag{2}$$

Les conditions aux limites (C.L.) peuvent être de différents types (Dirichlet, Neumann, périodiques, Robin-Fourier, homogènes ou non). La description qui suit vaut pour les conditions de Dirichlet homogènes.

Après semi-discrétisation en espace (on note $x_0, x_1, \ldots, x_{K+1}$ les nœuds), on obtient par différences finies (ou éléments finis $\mathbb{P}_1$)

$$\begin{cases} \partial_t U + \frac{(K+1)^2}{4L^2} AU = 0 & \text{dans }]-L, L[\times]0, +\infty[\\ U|_{t=0} = U_0 & \text{dans } [-L, L], \end{cases} \tag{3}$$

où $U = (u_1, u_2, \ldots, u_K)^\top$ et $U_0 = (u_0(x_1), u_0(x_2), \ldots, u_0(x_K))^\top$, et la matrice tridiagonale A est telle que $A_{i,i} = 2$, $A_{i,i+1} = A_{i,i-1} = -1$.

La résolution du système d'équations différentielles s'effectue alors selon une méthode de type Runge-Kutta. Les méthodes explicites ne nécessitent pas la résolution d'un système linéaire, mais sont assujetties à une condition de stabilité (CFL) sévère qui contraint le pas de temps δt en fonction du pas d'espace δx du type :

$$\delta t \leq \mathrm{C}^{\mathrm{ste}} \times \delta x^2.$$

3 Programme de travail

3.1 Équations différentielles

Programmer les différentes méthodes numériques proposées, et tester leur ordre de convergence sur un exemple simple où la solution exacte est connue, puis sur l'exemple suivant

$$\begin{cases} y_1' &= & y_1(1 - 2y_2), \\ y_2' &= & -y_2(1 + y_1). \end{cases}$$

Tester le comportement en temps long des différents schémas sur l'exemple précédent, ainsi que sur le suivant, issu de la cinétique chimique

$$\begin{cases} y_1' = -\ 0.04 y_1 + 10^4 y_2 y_3 & y_1(0) = 1 \\ y_2' = \quad 0.04 y_1 - 10^4 y_2 y_3 - 3 \cdot 10^7 y_2^2 & y_2(0) = 0 \\ y_3' = \qquad\qquad\qquad\qquad 3 \cdot 10^7 y_2^2 & y_3(0) = 0. \end{cases}$$

N.B. pour les méthodes implicites, y_{n+1} satisfait une équation non-linéaire du type

$$y = \phi(y, y_n, h).$$

On comparera les deux méthodes suivantes pour la résolution numérique :

- ◇ Itération simple : $y^{\ell+1} = \phi(y^\ell, y_n, h)$
- ◇ Itération de Newton : $\nabla_1 \phi(y^\ell, y_n, h)(y^{\ell+1} - y^\ell) = -\phi(y^\ell, y_n, h)$.

3.2 Équation de la chaleur

Tester la résolution par différences finies explicites et implicites. Mettre en évidence la CFL dans le premier cas, la stabilité asymptotique inconditionnelle dans le second. On pourra aussi adapter la méthode à d'autres conditions aux limites :

- ◇ Conditions de Dirichlet non-homogènes : $u_{x=-L} = a$ et $u_{x=L} = b$.
- ◇ Conditions de Neumann : $\partial_x u|_{x=\pm L} = 0$.
- ◇ Conditions de Robin-Fourier : $(u + \alpha \partial_x u)|_{x=\pm L} = 0$ pour $\alpha > 0$.
- ◇ Conditions périodiques : $u_{x=-L} = x_{x=L}$ et $\partial_x u_{x=-L} = \partial_x u_{x=L}$.

On testera l'ordre (en temps et en espace) des différentes méthodes pour une donnée initiale unimodale pour laquelle la solution exacte – correspondant aux conditions de Dirichlet homogènes – est connue :

$$u_0(x) = \cos\left(\frac{\pi x}{2L}\right).$$