ÉCOLE CENTRALE LYON

2012-2013

Dynamique des systèmes non-linéaires

Bureau d'études 2 : Explosion thermique

1 Résolution numérique d'équations de réaction-diffusion

On considère une équation de réaction-diffusion du type

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

On peut mettre en place l'approximation de ce problème en couplant les méthodes décrites plus haut.

1.1 Schéma totalement explicite

Il consiste à utiliser une méthode explicite pour les parties diffusive et réactive. Pour la méthode d'Euler explicite, on obtient par exemple

$$U^{n+1} = U^n - \frac{\delta t}{\delta x^2} A U^n + \delta t f(t_n, U^n),$$

si U^n désigne l'approximation du vecteur semi-discrétisé en espace au temps t_n, et

$$f(t_n, U^n) = \big(f(t_n, U_1^n), f(t_n, U_2^n), \ldots, f(t_n, U_K^n)\big)^{\top}.$$

Ce schéma, très simple, est très facile à mettre en œuvre, mais fournit des résultats peu précis soumis à une forte CFL.

1.2 Schéma semi-implicite

Afin de pallier à la CFL, on peut utiliser une méthode implicite pour la partie diffusive, par exemple

$$U^{n+1} = U^n - \frac{\delta t}{\delta x^2} A U^{n+1} + \delta t f(t_n, U^n).$$

Ce schéma fournit des résultats acceptables lorsque le problème n'est pas raide.

1.3 Schéma totalement implicite

Si le problème est raide, il peut être judicieux d'opter pour une méthode totalement implicite, plus coûteuse, mais plus stable :

$$U^{n+1} = U^n - \frac{\delta t}{\delta x^2} A U^{n+1} + \delta t f(t_n, U^{n+1}).$$

1.4 Techniques de splitting

Il s'agit d'une méthode générale pour la prendre en compte un couplage additif : si l'on considère un problème du type

$$\partial_t U = AU + BU,$$

où A et B sont deux opérateurs. La solution s'écrit

$$U(t) = \exp\big(t(A+B)\big)U_0.$$

De la même manière, on sait résoudre les problèmes découplés

$$\partial_t V = AV \quad \text{et} \quad \partial_t W = BW,$$

en $V = \exp(tA)V_0$ et $W = \exp(tB)W_0$. En général, les opérateurs A et B ne commutent pas, et on a

$$\exp\big(t(A+B)\big) \neq \exp(tA)\exp(tB).$$

Toutefois, pour $t = \delta t$ petit, les deux quantités satisfont

$$\begin{aligned} \exp\big(\delta t(A+B)\big) &= I + \delta t(A+B) + \mathcal{O}(\delta t^2) \\ \exp(\delta t A)\exp(\delta t B) &= I + \delta t(A+B) + \mathcal{O}(\delta t^2). \end{aligned}$$

Il paraît ainsi raisonnable de remplacer la résolution couplée par la succession des résolutions individuelles sur un pas de temps δt. Précisément, on définit la méthode numérique suivante :

$$U^{n+1} = \exp(\delta t A)\exp(\delta t B)U^n,$$

dit *Splitting de Lie*. Signalons que des méthodes d'ordre plus élevé existent, comme par exemple le *Splitting de Strang* :

$$U^{n+1} = \exp\left(\frac{\delta t}{2}A\right)\exp(\delta t B)\exp\left(\frac{\delta t}{2}A\right)U^n,$$

Bien sûr, il faut veiller à ce que les approximations numériques des flots exacts $\exp(tA)$ et $\exp(tB)$ soient d'ordre suffisant.

Dans le cas d'une équation de réaction-diffusion, si l'on utilise le splitting de Lie, avec Euler implicite pour la partie diffusive et Euler explicite pour la partie réactive, on retrouve le schéma semi-implicite déjà évoqué.

2 Programme de travail

2.1 Explosion thermique

On considère le modèle simplifié de combustion en une dimension d'espace :

$$\begin{cases} \partial_t u - \Delta u = e^u & \text{dans }]-L, L[\times]0, +\infty[, \\ u|_{t=0} = 0 & \text{pour } x \in [-L, L], \\ u|_{x=\pm L} = 0 & \text{pour } t > 0. \end{cases} \tag{1}$$

Calcul du paramètre critique On peut montrer que la solution de (2) reste bornée si et seulement si $L < L_c$, où L_c est donnée par

$$L_c = \max_{u \geq 0} \left\{ \sqrt{2} e^{-\frac{u}{2}} \operatorname{ath} \left(\sqrt{1 - e^{-u}} \right) \right\}$$

Estimer numériquement L_c avec précision.

Mise en évidence de l'explosion thermique Afin de résoudre l'équation (2), on mettra en œuvre les méthodes suivantes :

- ◇ Schéma complètement explicite.
- ◇ Schéma semi-implicite en espace.
- ◇ Schéma complètement implicite.
- ◇ Schémas de Splitting où la partie réactive est traitée de manière implicite.

On montrera les limitations de la CFL pour les méthodes explicites, et on comparera les temps d'explosion dans le cas où la longueur est sur-critique : $L > L_c$.

2.2 Ondes progressives pour l'équation de Fisher-KPP

On considère l'équation de Fisher :

$$\begin{cases} \partial_t u - \Delta u = u(1-u) & \text{dans }]-L, L[\times]0, +\infty[, \\ u|_{t=0} = u_0(x) & \text{pour } x \in [-L, L], \\ u|_{x=\pm L} = 0 & \text{pour } t > 0. \end{cases} \tag{2}$$

Mettre en œuvre une méthode numérique pour la résolution de ce problème, où la donnée initiale u_0 est à support compact. Observer le phénomène de propagation.