



Méthodes de discrétisation en fluides

5. Equation d'advection-diffusion stationnaire

Marc A. Habisreutinger

Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne
Section de génie mécanique, CH-1015 Lausanne

Jeudi 21 mars 2024



Contenu

Equation d'advection-diffusion

- Formulation forte
- Solution analytique
- Formulation intégrale
- Discretisation spatiale
- Comparaison éléments/différences finis

Equation modifiée

- Définition
- Dérivation
- Interprétation

Solution des équations discrètes

- Dérivation
- Monotonicité

Méthodes de régularisation

- Principe général
- Méthode Upwind du premier ordre
- Méthode de Sharfeter–Gummel

Références

Equations de Navier–Stokes

Fluides visqueux Newtoniens, écoulements incompressibles

contrainte

$$\overbrace{\nabla \cdot \mathbf{v}} = 0$$

$$\rho \underbrace{\left(\frac{\partial_t \mathbf{v}}{\text{variation}} + \overbrace{\mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v}}^{\text{advection}} \right)} = \underbrace{-\nabla p}_{\text{source}} + \overbrace{\mu \nabla^2 \mathbf{v}}^{\text{diffusion}} + \underbrace{\rho \mathbf{g}}_{\text{source}}$$

$$\rho c_v \underbrace{\left(\frac{\partial_t T}{\text{variation}} + \overbrace{\mathbf{v} \cdot \nabla T}^{\text{advection}} \right)} = \underbrace{2\mu \mathbf{D} : \mathbf{D}}_{\text{source}} + \overbrace{\lambda \nabla^2 T}^{\text{diffusion}}$$



Equation de conservation de l'énergie

Advection-diffusion d'une grandeur scalaire

- Forme dimensionnelle

$$\underbrace{\left[\frac{\Theta}{T}\right]}_{\partial_t T} + \underbrace{\mathbf{v} \cdot \nabla T}_{\left[\frac{V\Theta}{L}\right]} = \underbrace{\nu \nabla^2 T}_{\left[\frac{\nu\Theta}{L^2}\right]}, \quad \nu = \frac{\lambda}{\rho c_v}$$

- Forme adimensionnelle

Haut nombre de Péclet (temps d'advection)

$$\left(\frac{\Theta}{T}\right) \partial_{\hat{t}} \hat{T} + \left(\frac{V\Theta}{L}\right) \hat{\mathbf{v}} \cdot \hat{\nabla} \hat{T} = \left(\frac{\nu\Theta}{L^2}\right) \hat{\nabla}^2 \hat{T}$$

$$\partial_{\hat{t}} \hat{T} + \hat{\mathbf{v}} \cdot \hat{\nabla} \hat{T} = \underbrace{= \frac{\nu}{VL}}_{\text{Pe}^{-1}} \hat{\nabla}^2 \hat{T}$$

$$\mathbf{x} = L \hat{\mathbf{x}}$$

$$t = T \hat{t}$$

$$\mathbf{v} = V \hat{\mathbf{v}}$$

$$T = \Theta \hat{T}$$

$$T = \frac{L}{V}$$

$$\text{Pe} = \frac{VL}{\nu}$$



Equation d'advection-diffusion

$$\partial_t T - \nu \nabla^2 T + \mathbf{v} \cdot \nabla T = 0$$

Formulation forte

On considère l'équation d'advection-diffusion stationnaire, en une dimension spatiale, dont la formulation forte est donnée par

$$\begin{cases} A(u) = -\nu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + c \frac{\partial u}{\partial x} = 0, & \Omega = [0, 1] \\ u(0) = 0, \quad u(1) = 1 \end{cases}$$

avec la solution

$$u(x) \in C^2(\Omega)$$



Equation d'advection-diffusion

Solution analytique

La solution analytique est donnée par

$$u(x) = \frac{\exp\left(\frac{c}{\nu}x\right) - 1}{\exp\left(\frac{c}{\nu}\right) - 1}$$

- Diffusion dominante : $c/\nu \ll 1$

$$u(x) \simeq x$$

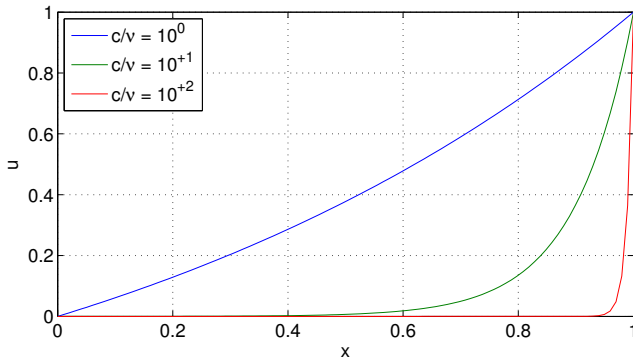
- Advection dominante : $c/\nu \gg 1$

$$u(x) \simeq \frac{\exp\left(\frac{c}{\nu}x\right)}{\exp\left(\frac{c}{\nu}\right)} = \exp\left(-\frac{c}{\nu}(1-x)\right)$$



Equation d'advection-diffusion

Solution analytique





Equation d'advection-diffusion

$$u(x) \simeq \exp\left(-\frac{c}{\nu}(1-x)\right)$$

Solution analytique

Lorsque l'advection est dominante, on a un problème de couche limite.
En écrivant le rapport

$$r = \frac{u(1-\delta)}{u(1)} \simeq \exp\left(-\frac{c\delta}{\nu}\right)$$

puis en isolant δ , on trouve

$$\delta(r) = \ln(1/r) \frac{\nu}{c} \approx \frac{\nu}{c}$$

L'épaisseur caractéristique de la couche est donc $\nu/c \ll 1$.



Equation d'advection-diffusion

Formulation intégrale

$$\begin{cases} A(u) = -\nu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + c \frac{\partial u}{\partial x} = 0 \\ u(0) = 0, \quad u(1) = 1 \end{cases}$$

La formulation intégrale est obtenue par produit scalaire par une fonction test (pondération). On obtient ainsi

$$(A(u), v) = \int_{\Omega} \left(-\nu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + c \frac{\partial u}{\partial x} \right) \cdot v \, dV = \int_{\Omega} f \cdot v \, dx, \quad \forall v \in L^2(\Omega)$$



Equation d'advection-diffusion

Formulation intégrale

$$\begin{cases} A(u) = -\nu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + c \frac{\partial u}{\partial x} = 0 \\ u(0) = 0, u(1) = 1 \end{cases}$$

La formulation intégrale s'écrit donc sous la forme

$$\begin{cases} (A(u), v) = (f, v), \quad \forall v \in L^2(\Omega) \\ u(0) = 0, u(1) = 1 \end{cases}$$

avec la solution

$$u(x) \in H^2(\Omega)$$



Equation d'advection-dif.

$$\int_{\Omega} \left(-\nu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + c \frac{\partial u}{\partial x} \right) \cdot v \, dV = \int_{\Omega} f \cdot v \, dx$$

Discrétisation spatiale

En utilisant les fonctions test des méthodes de colocation, il vient

$$\int_{\Omega} \left(-\nu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + c \frac{\partial u}{\partial x} \right) \cdot \delta(x_i) \, dx = \int_{\Omega} f \cdot \delta(x_i) \, dx, \quad i = 2, \dots, p-1$$

Avec les conditions aux limites, on a donc les p équations

$$\begin{cases} A(u)|_{x_i} = -\nu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Big|_{x_i} + c \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{x_i} = f_i, & i = 2, \dots, p-1 \\ u_1 = 0, \, u_p = 1 \end{cases}$$



Equation d'advection-diffusion

Discrétisation spatiale

Pour approcher la dérivée première, on écrit les séries de Taylor

$$u_{i+1} = u_i + \frac{h}{1!} \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{x_i} + \frac{h^2}{2!} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Big|_{x_i} + \frac{h^3}{3!} \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \Big|_{x_i} \pm \mathcal{O}(h^4)$$

$$u_{i-1} = u_i - \frac{h}{1!} \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{x_i} + \frac{h^2}{2!} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Big|_{x_i} - \frac{h^3}{3!} \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \Big|_{x_i} \pm \mathcal{O}(h^4)$$

dont la différence permet d'obtenir

$$\frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{x_i} = \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2h} - \underbrace{\frac{h^2}{3!} \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \Big|_{x_i}}_{\epsilon = \mathcal{O}(h^2)} \pm \mathcal{O}(h^4)$$



Equation d'advection-diffusion

Discrétisation spatiale

Pour approcher la dérivée seconde, on se sert des mêmes séries

$$u_{i+1} = u_i + \frac{h}{1!} \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{x_i} + \frac{h^2}{2!} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Big|_{x_i} + \frac{h^3}{3!} \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \Big|_{x_i} \pm \mathcal{O}(h^4)$$

$$u_{i-1} = u_i - \frac{h}{1!} \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{x_i} + \frac{h^2}{2!} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Big|_{x_i} - \frac{h^3}{3!} \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \Big|_{x_i} \pm \mathcal{O}(h^4)$$

dont la somme permet d'obtenir

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Big|_{x_i} = \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{h^2} - \underbrace{\frac{2h^2}{4!} \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} \Big|_{x_i}}_{\epsilon = \mathcal{O}(h^2)} \pm \mathcal{O}(h^4)$$



Equation d'advection-diffusion

Discrétisation spatiale

$$\frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{x_i} = \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2h} + \mathcal{O}(h^2)$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Big|_{x_i} = \frac{u_{i-1} - 2u_i + u_{i+1}}{h^2} + \mathcal{O}(h^2)$$

On obtient ainsi le système d'équations algébriques

- sous forme indicielle

$$\begin{cases} -\nu \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{h^2} + c \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2h} = f_i, & i = 2, \dots, p-1 \\ u_1 = 0, \quad u_p = 1 \end{cases}$$

- sous forme matricielle : $\mathbf{A}\mathbf{u} = \mathbf{M}\mathbf{f}$, avec $\mathbf{M} = \mathbf{I}$ et

$$\mathbf{A} = -\frac{\nu}{h^2} \begin{pmatrix} 1 & & & & \\ \cdot & +1 & -2 & +1 & \\ & \cdot & \cdot & \cdot & \\ & & & \cdot & \\ & & & & 1 \end{pmatrix} + \frac{c}{2h} \begin{pmatrix} 0 & & & & \\ \cdot & -1 & 0 & +1 & \\ & \cdot & \cdot & \cdot & \\ & & & \cdot & \\ & & & & 0 \end{pmatrix}$$



Equation d'advection-diffusion

Comparaison éléments/différences finis

- Différences finies du second ordre

$$\begin{cases} -\nu \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{h^2} + c \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2h} = f_i, & i = 2, \dots, p-1 \\ u_1 = 0, u_p = 1 \end{cases}$$

- Eléments finis linéaires

$$\begin{cases} -\nu \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{h} + \frac{c}{2} (u_{i+1} - u_{i-1}) = \frac{h}{6} (f_{i-1} + 4f_i + f_{i+1}), & i = 2, \dots, p-1 \\ u_1 = 0, u_p = 1 \end{cases}$$



Equation modifiée

Définition

L'équation modifiée est l'équation réellement résolue après discrétisation

- Discrétisation spatiale

$$A(u) = f \quad \rightarrow \quad A(u_h) = f$$

- Equation modifiée

$$A(u_h) = A(u) + E_h(u) = f$$

- Convergence

$$\lim_{h \rightarrow 0} E_h(u) = 0$$



Equation modifiée

Dérivation

$$\begin{aligned}
 -\nu \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{h^2} + c \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2h} &= 0 \\
 \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{x_i} &= \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2h} - \frac{h^2}{3!} \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \Big|_{x_i} \pm \mathcal{O}(h^4) \\
 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Big|_{x_i} &= \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{h^2} - \frac{2h^2}{4!} \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} \Big|_{x_i} \pm \mathcal{O}(h^4)
 \end{aligned}$$

En utilisant les développements de Taylor, il vient

$$\left(-\nu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + c \frac{\partial u}{\partial x} \right)_{x_i} + \left(-\nu \frac{2h^2}{4!} \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} + c \frac{h^2}{3!} \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \right)_{x_i} \pm \mathcal{O}(h^4) = 0$$

A l'ordre dominant, on a

$$A(u_h) = A(u) + E_h(u) = \underbrace{-\nu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + c \frac{\partial u}{\partial x}}_{\text{physique}} + \underbrace{-\nu \frac{2h^2}{4!} \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} + c \frac{h^2}{3!} \frac{\partial^3 u}{\partial x^3}}_{\text{numérique}} = 0$$



Equation modifiée

$$\alpha_3 = c \frac{h^2}{3!}, \quad \alpha_4 = \nu \frac{2h^2}{4!}$$

Interprétation

Avec cette discrétisation, l'équation réellement résolue s'écrit

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \nu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + c \frac{\partial u}{\partial x} - \alpha_4 \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} + \alpha_3 \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} = 0$$

En considérant une solution de la forme $u = \hat{u} e^{i(kx - \omega t)}$, on obtient

$$(-i\omega + \nu k^2 + ick - \alpha_4 k^4 - i\alpha_3 k^3) \hat{u} = 0$$

dont on déduit la relation de dispersion

$$\omega = \underbrace{ck - \alpha_3 k^3}_{\text{advection}} + i \overbrace{(-\nu k^2 + \alpha_4 k^4)}^{\text{diff./ampl.}}$$



Equation modifiée

Interprétation

$$\omega = ck - \alpha_3 k^3 + i(-\nu k^2 + \alpha_4 k^4)$$

On déduit la vitesse de phase à partir de la relation de dispersion

$$v_\phi = \frac{\omega}{k} = c - \overbrace{\alpha_3 k^2}^{\text{disp.}} + i(-\nu k + \overbrace{\alpha_4 k^3}^{\text{anti-dif.}})$$

- Dispersion numérique proportionnelle à α_3
- Anti-diffusion numérique proportionnelle à α_4



Solution équations discrètes

Dérivation

$$Pe = \frac{VL}{\nu}$$

$$-\nu \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{h^2} + c \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2h} = 0$$

On reformule les équations discrètes pour faire apparaître le nombre de Péclet local

$$(\widehat{Pe} - 1)u_{i+1} + 2u_i - (\widehat{Pe} + 1)u_{i-1} = 0, \quad \widehat{Pe} = \frac{ch}{2\nu}$$

Avec une solution de la forme

$$u_i = s^i$$

on obtient la relation

$$(\widehat{Pe} - 1)s^2 + 2s - (\widehat{Pe} + 1) = 0$$



Solution équations discrètes

$$(\widehat{\text{Pe}} - 1)s^2 + 2s - (\widehat{\text{Pe}} + 1) = 0$$

Dérivation

dont les racines sont données par

$$s_1 = 1, \quad s_2 = \frac{1 + \widehat{\text{Pe}}}{1 - \widehat{\text{Pe}}}$$

Par linéarité, la solution des équations discrètes s'écrit comme une combinaison linéaire des racines

$$u_i = C_1 s_1^i + C_2 s_2^i$$

En utilisant les conditions aux limites, on obtient

$$C_1 = -C_2, \quad C_2 = \frac{1}{s_2^{p-1} - 1}$$



Solution équations discrètes

$$\widehat{Pe} = \frac{ch}{2\nu}$$

Monotonicité

La solution des équations discrètes devient donc

$$u_i = \frac{1 - \left(\frac{1 + \widehat{Pe}}{1 - \widehat{Pe}} \right)^{i-1}}{1 - \left(\frac{1 + \widehat{Pe}}{1 - \widehat{Pe}} \right)^{p-1}}$$

$\widehat{Pe} < 1 \rightarrow$ solution monotone

$\widehat{Pe} > 1 \rightarrow$ solution oscillante

Pour avoir une solution monotone, on a donc la restriction

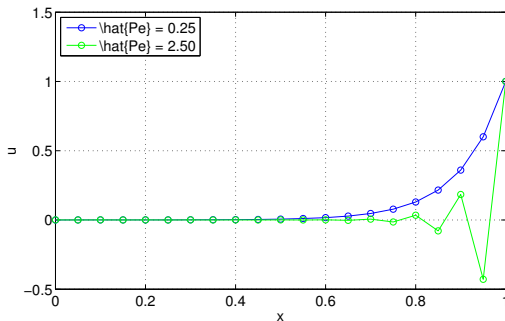
$$h < \frac{2\nu}{c} \ll 1$$

pouvant devenir prohibitive lorsque l'advection est dominante.



Solution équations discrètes

Monotonicité



Le comportement oscillatoire est lié à

- l'épaisseur de la couche limite (gradient élevé)
- la direction de propagation privilégiée donnée par le signe de c



Méthodes de régularisation

Principe général

A la limite $c/\nu \rightarrow \infty$, dans le cas instationnaire, on a l'équation

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} + c \frac{\partial u}{\partial x} = 0 \\ u(x, t_0) = u_0(x) \end{cases}$$

dont la solution générale vaut

$$u(x, t) = u_0(x - ct)$$

Les conditions initiales sont donc advectées à la vitesse de phase c .



Méthodes de régularisation

Principe général

$$\frac{\partial u}{\partial t} + c \frac{\partial u}{\partial x} = 0$$

$$u(x, t) = u_0(x - ct)$$

Par comparaison avec les équations de Riemann

$$\frac{\partial r_i}{\partial x} + \lambda_i \frac{\partial r_i}{\partial y} = 0, \quad \lambda_i = \frac{dy}{dx}$$

on voit que l'équation d'advection n'admet qu'une famille de courbes caractéristiques \mathcal{C} donnée par

$$x - ct = \text{const}$$

sur lesquelles l'invariant de Riemann vaut trivialement

$$r = u$$



Méthodes de régularisation

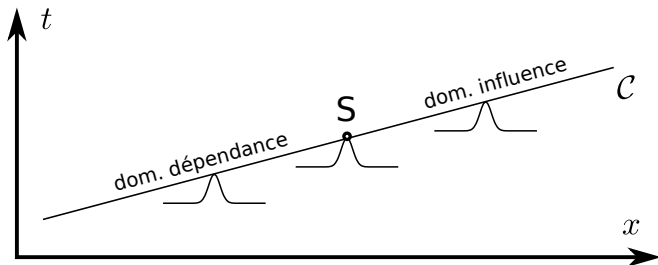
Principe général

$$\frac{\partial u}{\partial t} + c \frac{\partial u}{\partial x} = 0$$

$$u(x, t) = u_0(x - ct)$$

$$x - ct = \text{const}$$

$$r = u$$



L'idée générale des méthodes de régularisation est de décentrer la discrétisation vers le domaine de dépendance (à l'amont) en espace et en temps.



Méthodes de régularisation

Méthode Upwind du premier ordre

- Schéma centré

$$\begin{cases} -\nu \frac{u_{i-1} - 2u_i + u_{i+1}}{h^2} + c \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2h} = 0, & i = 2, \dots, p-1 \\ u_1 = 0, \quad u_p = 1 \end{cases}$$

- Schéma Upwind du premier ordre $c > 0$

$$\begin{cases} -\nu \frac{u_{i-1} - 2u_i + u_{i+1}}{h^2} + c \frac{u_i - u_{i-1}}{h} = 0, & i = 2, \dots, p-1 \\ u_1 = 0, \quad u_p = 1 \end{cases}$$

- Schéma Upwind du premier ordre $c < 0$

$$\begin{cases} -\nu \frac{u_{i-1} - 2u_i + u_{i+1}}{h^2} + c \frac{u_{i+1} - u_i}{h} = 0, & i = 2, \dots, p-1 \\ u_1 = 0, \quad u_p = 1 \end{cases}$$



Méthodes régularisation

Méthode Upwind du premier ordre

$$-\nu \frac{u_{i-1} - 2u_i + u_{i+1}}{h^2} + c \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2h} = 0$$

$$-\nu \frac{u_{i-1} - 2u_i + u_{i+1}}{h^2} + c \frac{u_i - u_{i-1}}{h} = 0$$

$$-\nu \frac{u_{i-1} - 2u_i + u_{i+1}}{h^2} + c \frac{u_{i+1} - u_i}{h} = 0$$

Il est possible de reformuler les schémas Upwind du premier ordre comme un schéma centré dont le coefficient de diffusion est modifié

$$-\nu \frac{u_{i-1} - 2u_i + u_{i+1}}{h^2} + c \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2h} - |c| \frac{u_{i-1} - 2u_i + u_{i+1}}{2h} = 0$$

qui s'écrit sous la forme

$$-\overbrace{\left(\nu + \frac{|c|h}{2} \right)}^{= \nu + \nu_h} \frac{u_{i-1} - 2u_i + u_{i+1}}{h^2} + c \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2h} = 0$$



Méthodes de régularisation

$$\widehat{\text{Pe}} = \frac{ch}{2\nu}$$

Méthode Upwind du premier ordre

- Convergence dégradée à l'ordre 1 à cause du coefficient de diffusion numérique

$$\nu_h = \frac{|c|h}{2}$$

- Monotonicité garantie

$$\widehat{\text{Pe}}_h = \frac{|c|h}{2(\nu + \nu_h)} = \frac{|c|h}{2\nu + |c|h} < 1, \quad \forall h > 0$$

- Problème physique affecté, voire détruit, par la diffusion numérique

$$\nu \rightarrow \nu + \nu_h$$



Méthodes de régularisation

$$\widehat{\text{Pe}} = \frac{ch}{2\nu}$$

Méthode de Sharfeter–Gummel

- Méthode Upwind du premier ordre

$$\nu_h = \frac{|c|h}{2} = \nu \widehat{\text{Pe}} = \nu f(\widehat{\text{Pe}})$$

avec

$$f(\widehat{\text{Pe}}) = \widehat{\text{Pe}}$$

- Méthode de Sharfeter–Gummel

$$f(\widehat{\text{Pe}}) = \widehat{\text{Pe}} - 1 + b(2\widehat{\text{Pe}})$$

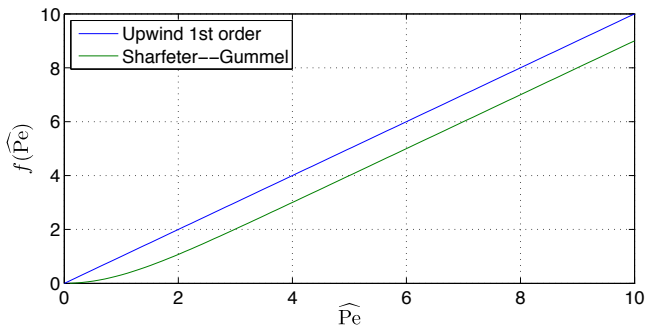
avec la fonction de Bernoulli

$$b(\theta) = \begin{cases} \frac{\theta}{e^{\theta}-1} & \theta > 0 \\ 1 & \theta = 0 \end{cases}$$



Méthodes de régularisation

Méthode de Sharfeter–Gummel



On voit graphiquement que la méthode de Sharfeter–Gummel permet de récupérer le second ordre lorsque $\widehat{Pe} \rightarrow 0$



Méthodes de régularisation

Méthodes de Sharfeter–Gummel

Les méthodes de diffusion artificielle (Upwind, SG)

- sont faciles à implémenter
- sont efficaces pour obtenir une solution monotone
- mais introduisent souvent trop de diffusion numérique

Comme alternative, on utilise classiquement les méthodes

- Upwind d'ordre élevé

Total Variation Diminishing (TVD), ...

- Galerkin généralisées

Streamline-Upwind Petrov-Galerkin (SUPG), Galerkin Least-Squares (GLS), ...



Références

- *Numerical approximation of partial differential equations*, A. Quarteroni and A. Valli, Springer, 1997