Physique Numérique I-II semaine 16

- Remarques sur l'Ex.5
- Quelques simulations de l'advection et de la diffusion avec le schema de Langevin
- Relation entre les descriptions macroscopique (coefficient de diffusion D) et microscopique (marche aléatoire): au tableau
- Schéma différences finies explicite à 2 niveaux
- Notes de cours: **4.1** et **Annexe D**

Exercice 5

Partie analytique

- On doit supposer que la vitesse des particules est bornée, en d'autres termes qu'il n'y a aucune particule à l'infini.
- On doit supposer que la fonction f est une fonction de probabilité, donc que son intégrale sur tout l'espace des vitesses v est finie (elle vaut 1).
- Mathématiquement parlant, on suppose que la fonction f et sa dérivée tendent vers zéro lorsque v tend vers +- l'infini. On suppose même que

$$\lim_{\mathrm{v}\to\pm\infty} P(v)f(v,t)=0, \forall t, \forall\, polynôme\; P(v)$$

- En particulier, c'est le cas de la solution stationnaire, qui est une distribution Gaussienne (Maxwellienne)
- Attention: $f(v,t)$, v et t sont des variables indépendantes. En particulier, $\frac{\partial f}{\partial v}$ est défini, $\frac{\partial f}{\partial t}$ est défini, mais $\frac{\partial v}{\partial t}$ n'existe pas!

v n'est PAS fonction de t

Marche aléatoire et diffusion (1)

Succession de M pas, $\{\xi_i\}, i = 1..M$, variables aléatoires

de moyenne (espérance math) nulle $< \xi_i > = 0$

de même variance non-nulle $< \xi_i^2 > = \sigma^2 \neq 0$

statistiquement indépendantes $< \xi_i \xi_j > = 0, \forall i \neq j$

La position finale est $x = \sum_{i=1}^{M} \xi_i$.

sa moyenne est nulle: $< x >= \sum_{i=1}^{M} < \xi_i > = 0$

sa variance est: $< x^2 > = < \left(\sum_{i=1}^{M} \xi_i\right) \left(\sum_{j=1}^{M} \xi_j\right) >$

$= \sum_{i=1}^{M} < \xi_i^2 > + \sum_{i=1}^{M} \sum_{j \neq i}^{M} < \xi_i \xi_j > = M\sigma^2$

L'écart-type σ est appelé libre parcours moyen, noté λ_{mfp}

Soit τ le temps entre 2 pas successifs. Pour une durée t, il y a $M = t/\tau$ pas.

Donc

$$\boxed{< x^2 > (t) = \frac{\lambda_{mfp}^2}{\tau}\, t}$$

Marche aléatoire et diffusion (2)

Dans la description macroscopique continue, on a

Soit $N = \int_{-\infty}^{+\infty} n(x,t)dx$ le nombre de particules.

On définit la moyenne de x^2 comme $\overline{x^2}(t) = \frac{1}{N}\int_{-\infty}^{+\infty} x^2 n(x,t)dx$

Relation avec la marche aléatoire: $\overline{x^2}(t) = < x^2 > (t)$, et $\overline{x^2}(0) = 0$.

On obtient une équation pour $\overline{x^2}(t)$ en multipliant l'Eq. de diffusion (*) par x^2 et en intégrant sur x. (Calculs faits au tableau).

$\frac{\partial}{\partial t}\overline{x^2}(t) = 2\,D$, et donc $$\boxed{\overline{x^2}(t) = \overline{x^2}(0) + 2D\,t}$$

En comparant avec $$< x^2 > (t) = \frac{\lambda_{mfp}^2}{\tau}\,t$$

On obtient $$\boxed{D = \frac{\lambda_{mfp}^2}{2\tau}}$$

Advection

- Transport d'une quantité scalaire $f(\vec{x},t)$, p.ex. la densité
- Quantié conservée au cours du mouvement → éq. de continuité

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{j} = 0$$

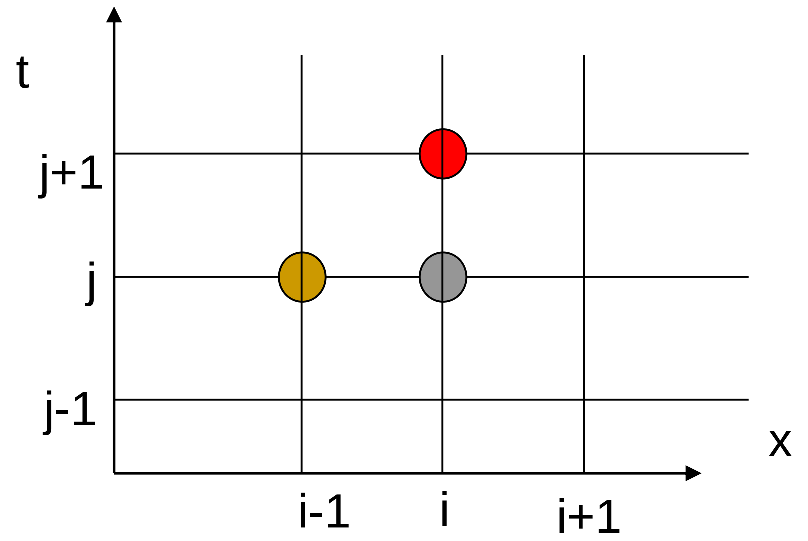
- Avec le flux $\vec{j} = f\,\vec{v}$, dans un écoulement. (p.ex.$\vec{v}$ vitesse du vent)
- Dans le cas incompressible, cela donne: $$\frac{\partial f}{\partial t} + (\vec{v}\cdot\nabla)\,f = 0$$
- Dans le cas incompressible 1D, v=const:

$$\boxed{\frac{\partial f}{\partial t} + v\frac{\partial f}{\partial x} = 0}$$

- Avec la condition initiale $f(x,0) = f_0(x)\,\text{donné}$
- La solution exacte est $f(x,t) = f_0(x - vt)$
- … une simple translation de la condition initiale, à la vitesse v

Advection - Schéma explicite à 2 niveaux

- Discrétisation $\{x_i,\ t_j\}$
- Différences finies



$$\frac{\partial f}{\partial t} \approx \frac{f_{i,j+1} - f_{i,j}}{\Delta t}$$ "forward"

$$\frac{\partial f}{\partial x} \approx \frac{f_{i,j} - f_{i-1,j}}{\Delta x}$$ "backward"

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v\frac{\partial f}{\partial x} = 0$$

$$\boxed{f_{i,j+1} = f_{i,j} - \frac{v\Delta t}{\Delta x}\left(f_{i,j} - f_{i-1,j}\right)}$$

- Paramètre CFL (Courant, Friedricks, Lewy)

$$\boxed{\beta = \frac{v\Delta t}{\Delta x}}$$

Advection – Schéma explicite 2 niveaux

$$f_{i,j+1} = f_{i,j} - \beta\left(f_{i,j} - f_{i-1,j}\right)$$

- **Paramètre CFL (Courant, Friedrichs, Lewy)**

$$\boxed{\beta = v\frac{\Delta t}{\Delta x}}$$

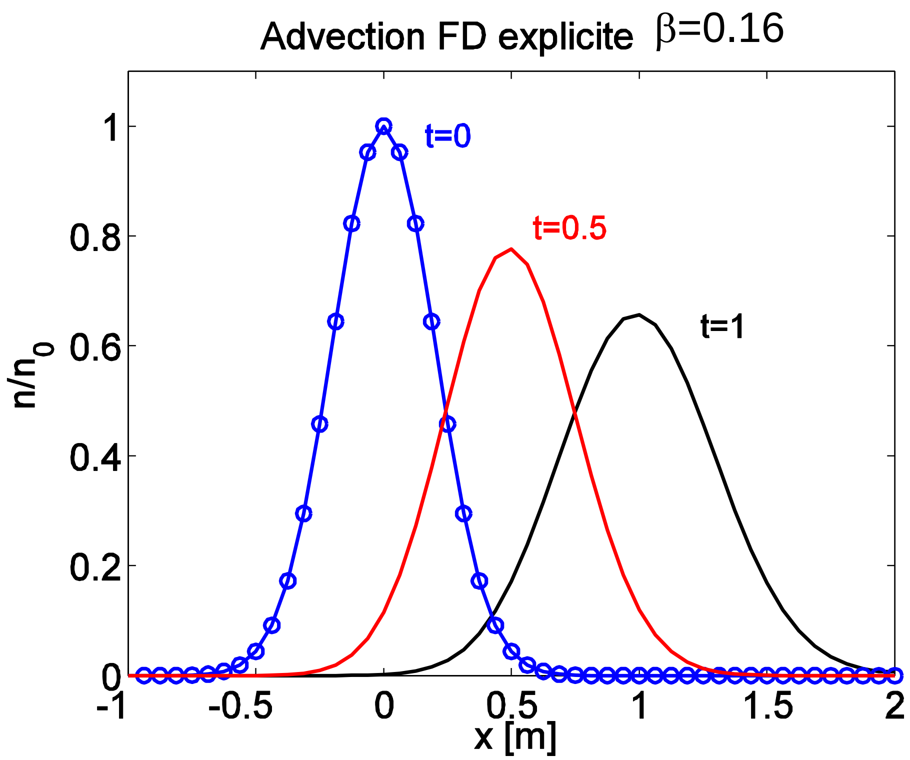
- **On verra que ce schéma est instable si β>1 ou si β<0**
- **On verra aussi que ce schéma, lorsqu'il est stable, introduit de la diffusion non-physique («diffusion numérique»)**

Testons le schéma explicite 2 niveaux pour l'advection!

- (Démos)
- (Testons empiriquement la limite de stabilité)

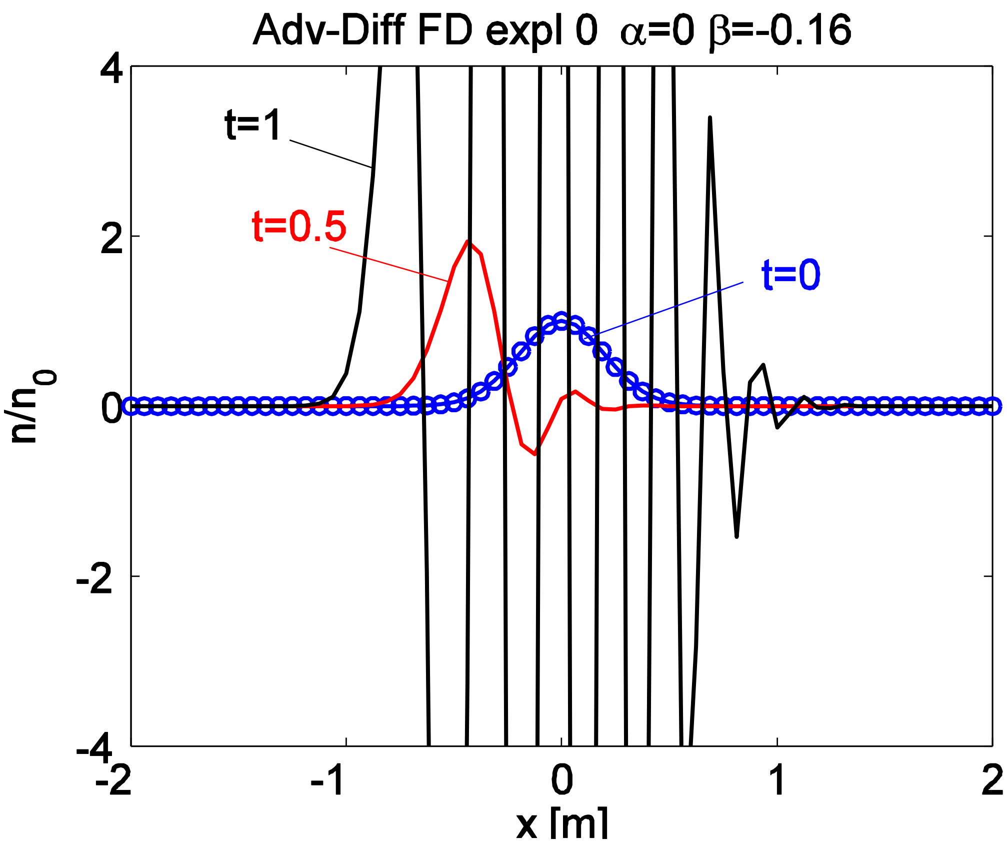
4.1.1 Advection

- **Différences finies, explicite 2 niveaux, u=+1**
  - **Forward (t)**
  - **Backward (x)**



Advection

- **Différences finies, explicite 2 niveaux, u=-1**
  - **Forward (t)**
  - **Backward (x)**

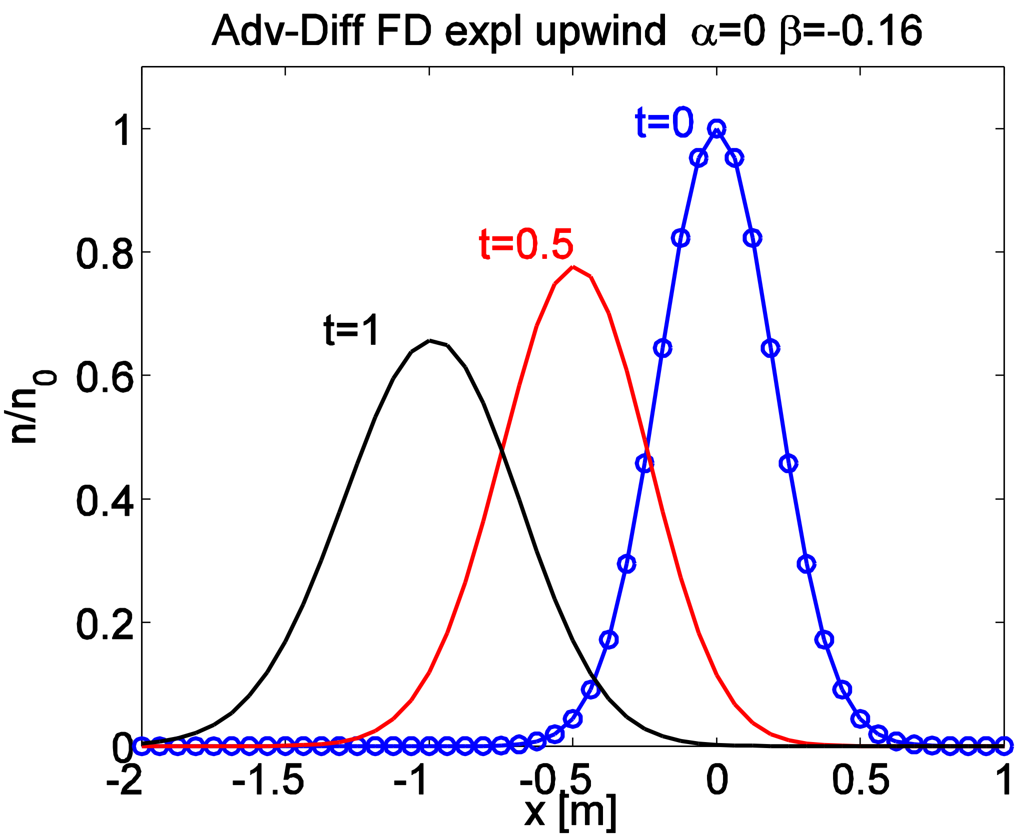


Advection

- **Différences finies, explicite 2 niveaux, u=-1**
  - **Forward (t)**
  - **Forward (x) (UPWIND)**

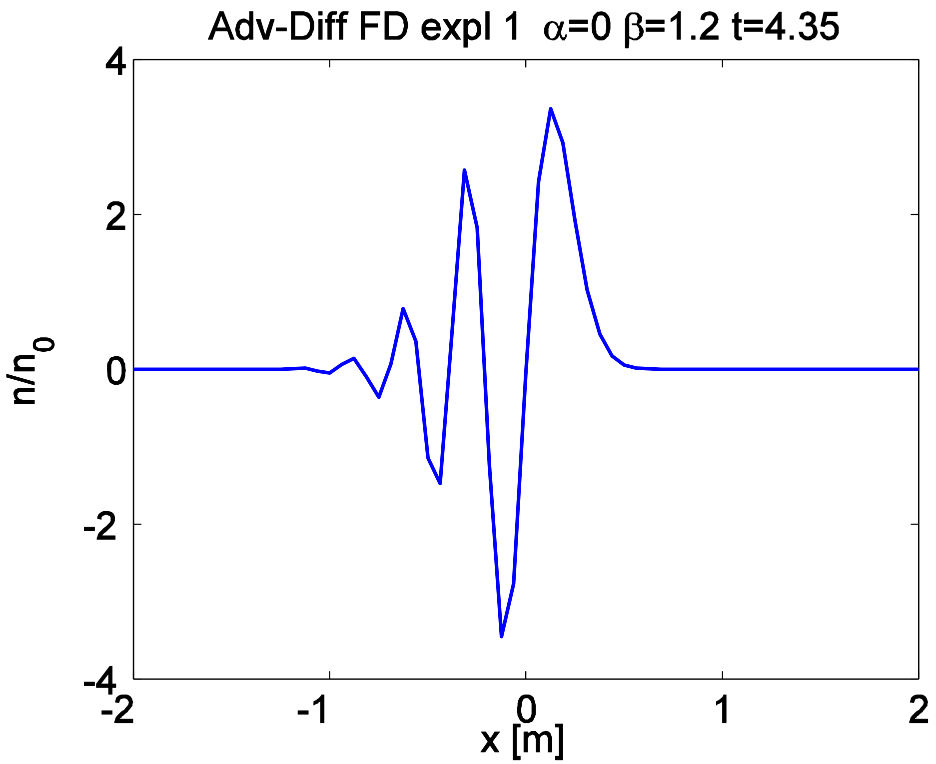
$$f_{i,j+1} = f_{i,j} - \beta \left(f_{i,j} - f_{i-1,j} \right) \quad \text{si} \quad \beta \geq 0$$

$$f_{i,j+1} = f_{i,j} - \beta \left(f_{i+1,j} - f_{i,j} \right) \quad \text{si} \quad \beta < 0$$



Advection

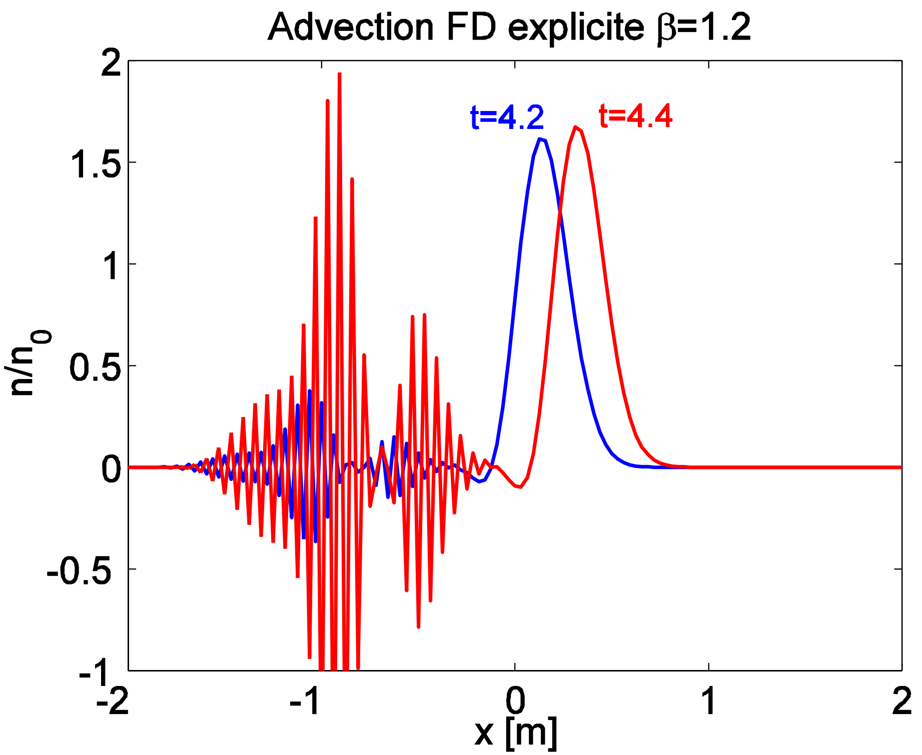
- **Différences finies, explicite 2 niveaux, u=1**
  - **Forward (t)**
  - **Forward (x) (UPWIND) CFL=1.2 nx=64**



- **Le schéma est instable pour |CFL|>1.0**

Advection

- **Différences finies, explicite 2 niveaux, u=1**
  - **Forward (t)**
  - **Forward (x) (UPWIND) CFL=1.2 nx=128**



- **Le schéma est instable pour |CFL|>1.0**

Advection et Diffusion

4.1.1- 4.1.2

Flux de matière: $\vec{j} = f\,\vec{v} - \mathrm{D}\,\vec{\nabla} f$

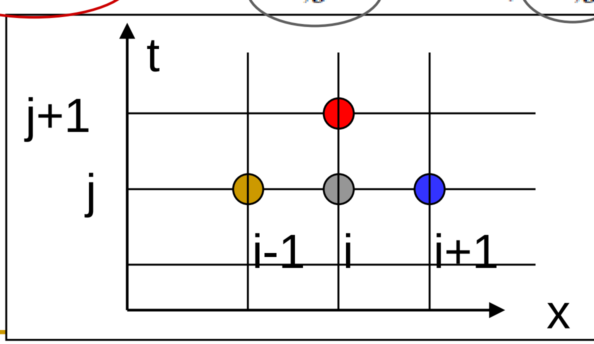
Conservation de la masse (Eq. Continuité): $\dfrac{\partial f}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{j} = 0$

Cas 1D, incompressible, D=const, v=const :

$$\boxed{\frac{\partial f}{\partial t} + v\frac{\partial f}{\partial x} - D\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} = 0} \qquad (4.19)$$

Différences finies Schéma explicite 2 niveaux

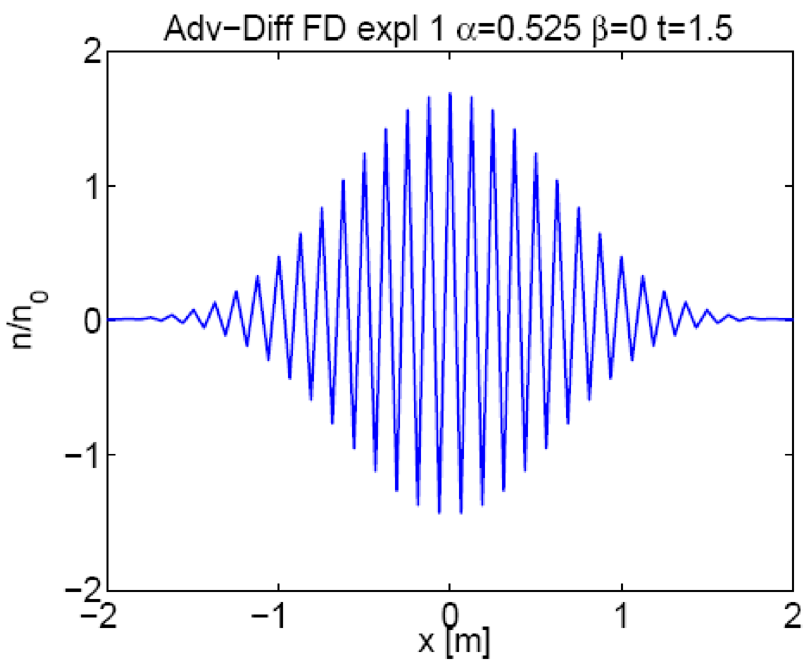
$$f_{i,j+1} = f_{i,j} - \beta\left(f_{i,j} - f_{i-1,j}\right) + \alpha\left(f_{i-1,j} - 2f_{i,j} + f_{i+1,j}\right)$$

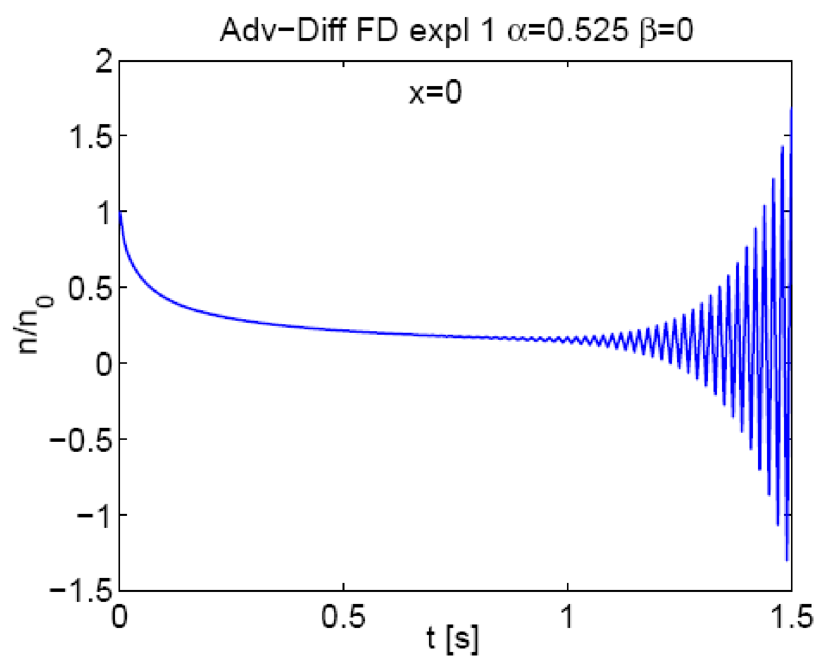


$$\boxed{\beta = v\frac{\Delta t}{\Delta x}} \textbf{ (CFL)} \qquad \boxed{\alpha = \frac{D\Delta t}{\Delta x^2}}$$

Diffusion. Instabilité

- **Différences finies, explicite 2 niveaux. Diffusion seule**





Croissance exponentielle dans le temps d'une perturbation de courte longueur d'onde (2 points de maillage par longueur d'onde)

Advection et diffusion. Différences finies. Schéma explicite 2 niveaux. Critères de **stabilité** numérique.

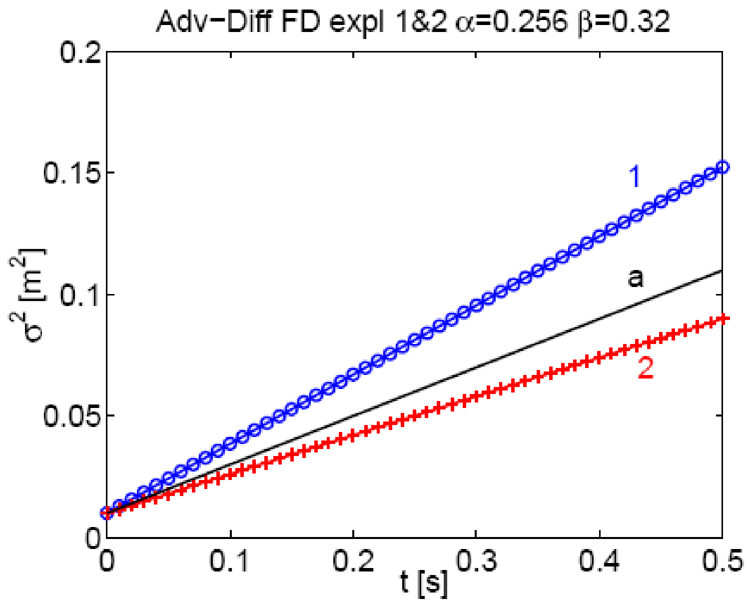
$$\boxed{0 \leq \beta \leq 1} \qquad \beta = v\frac{\Delta t}{\Delta x} \qquad \textbf{CFL}$$

Courant-Friedrichs-Lewy

$$\boxed{0 \leq \alpha \leq \frac{1}{2}} \qquad \alpha = \frac{D\Delta t}{\Delta x^2}$$

La démonstration sera présentée ultérieurement. Voir Notes de Cours 4.1.3

Advection-Diffusion. Diffusion numérique



- Evolution de la variance: (a) solution analytique, (1) solution numérique avec schéma explicite à 2 niveaux et advection upwind, (2) advection centrée
- Le surcroît de diffusion est un artefact dû à la diffusion numérique créée par le schéma de l'advection upwind

Schéma différences finies explicite 2 niveaux

4.1.2 Advection et Diffusion - résumé

$$\boxed{\frac{\partial n}{\partial t} + v\frac{\partial n}{\partial x} - D\frac{\partial^2 n}{\partial x^2} = 0} \ . \qquad (4.19)$$

Paramètre CFL : $\beta = v\dfrac{\Delta t}{\Delta x}$ $\qquad \alpha = \dfrac{D\Delta t}{\Delta x^2}$

Courant-Friedrichs-Lewy

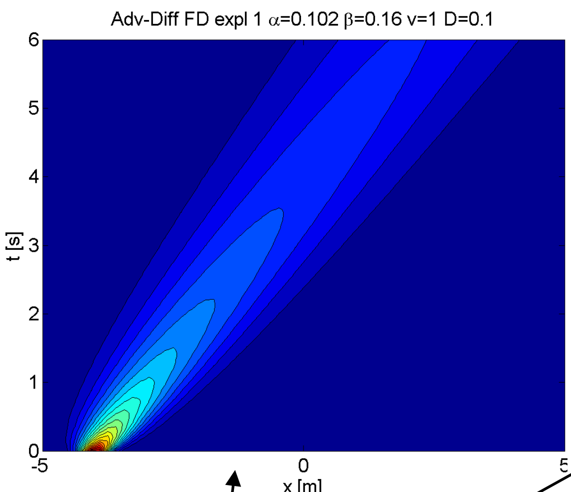
$$n_{i,j+1} = n_{i,j} - \beta\left(n_{i,j} - n_{i-1,j}\right) + \alpha\left(n_{i-1,j} - 2n_{i,j} + n_{i+1,j}\right)$$

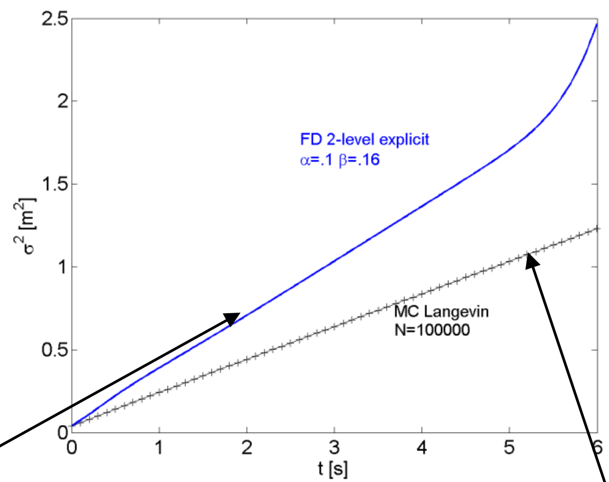
- **Il peut y avoir instabilité numérique!**
- **Le schéma explicite upwind pour l'advection stabilise, mais introduit de la diffusion numérique**
- **Conditions de stabilité**

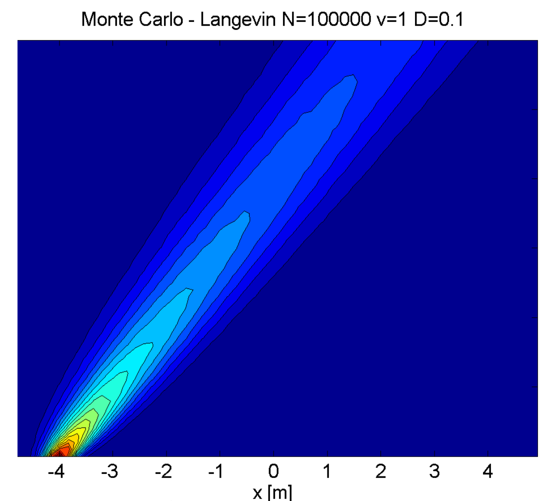
$$\boxed{0 \le \beta \le 1} \quad \boxed{0 \le \alpha \le \frac{1}{2}}$$

Euler ou Lagrange? Radar ou mouchard?

Comparaison entre schéma numérique «Eulérien» et schéma numérique «Lagrangien» ou «particle»

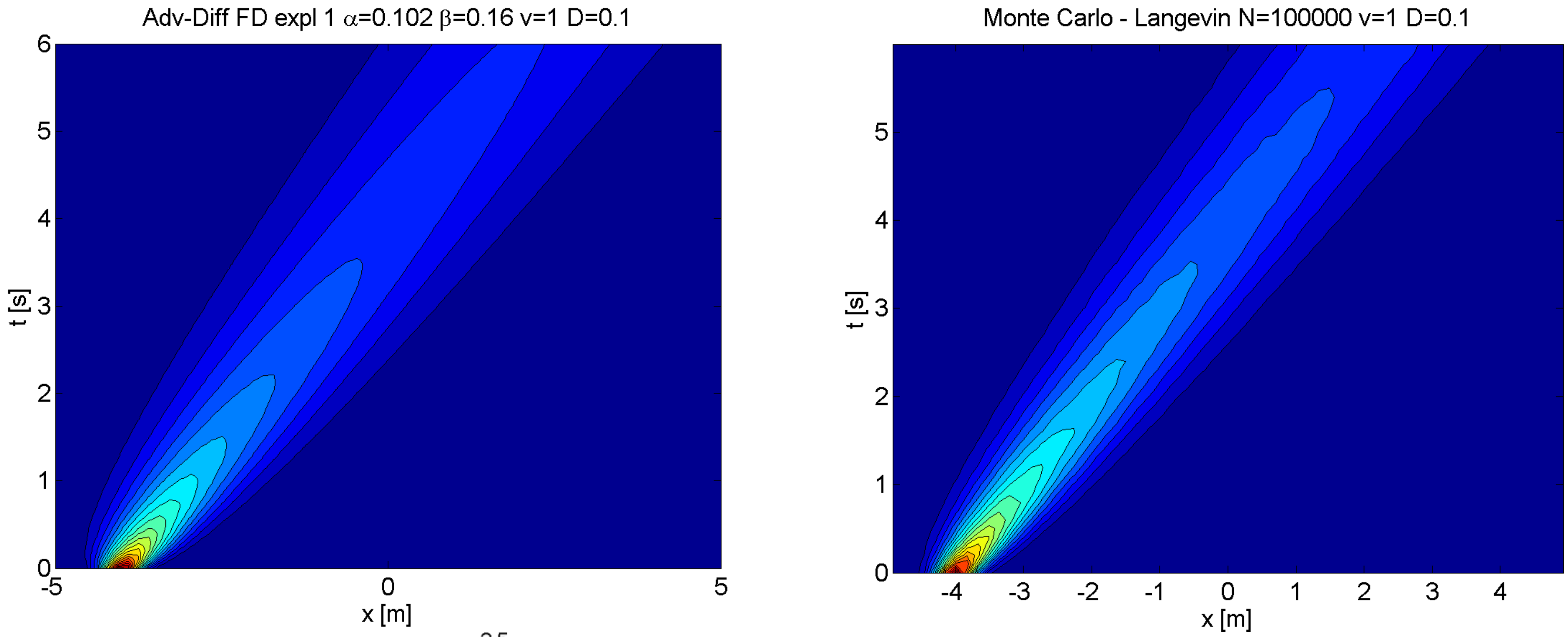


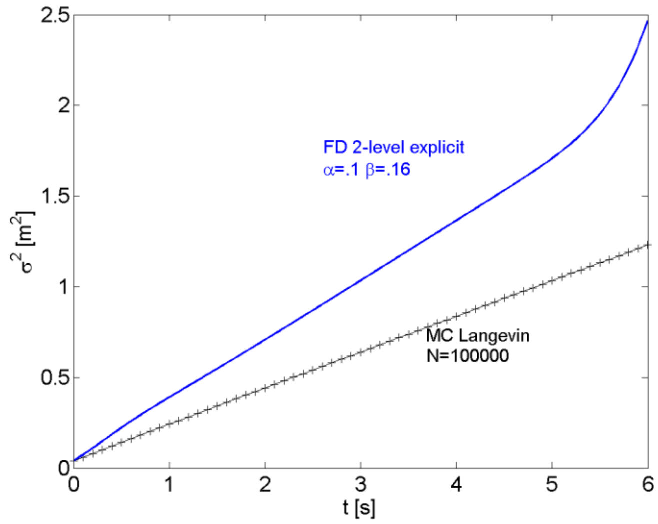




Eulerien, différences finies
explicite 2 niveaux
Limite de stabilité
Diffusion numérique

Lagrangien, Langevin: Pas de diffusion numérique
Pas de limite de stabilité CFL! (Δt arbitraire)





Langevin: pas de diffusion numérique
Pas de limite de stabilité CFL! (Δt arbitraire)