Vincent G. Chapin et Wolfgang Hamm
Ecole Nationale Supérieure d'Ingénieurs de Constructions Aéronautiques
Place Emile Blouin, 31056 Toulouse Cedex, France
chapin@ensica.fr
http ://www.ensica.fr/~chapin/

Rendement des schémas numériques d'ordre élevé.

Toulouse, le 15 janvier 1996

Depuis quelques années, on note un regain d'intérêt et de nouveaux développements sur les schémas numériques d'ordre élevé. Le moteur de ces recherches est d'abord, la naissance de l'aéroacoustique numérique, mais aussi, la croissance rapide de la puissance des ordinateurs qui favorise l'émergence de nouvelles approches dites de simulation des grandes échelles ou de simulation directe, de la turbulence. Ces nouveaux champs d'étude nécessitent des schémas capables de capturer une large gamme d'échelles physiques, spatiales et temporelles, avec des niveaux de dissipation et de dispersion faibles. Contrairement aux schémas classiques d'ordre 2, ces nouveaux schémas résolvent les petites échelles avec moins de points de maillage, diminuant d'autant les coûts en mémoire.

Le gain en mémoire de ces schémas est établi, mais le gain en temps de calcul n'est pas démontré. Pourtant les problèmes pour lesquels le temps de calcul est une contrainte forte sont nombreux. Aussi, l'objectif de ce papier est de faire une analyse comparative de schémas d'ordre élevé et/ou compacts par rapport aux schémas classiques en terme de temps de calcul nécessaire pour capturer une gamme d'échelles spatiales fixée avec une précision fixée et un temps physique simulé fixé. Pour cela, il nous faudra définir une mesure de qualité de la solution numérique vis-à-vis de la solution physique recherchée.

1 Schémas spatiaux étudiés

La formulation suivante définit une classe de schémas à 5 paramètres pour évaluer la dérivée première d'une fonction f(x) quelconque :

$$\beta f'_{i-2} + \alpha f'_{i-1} + f'_i + \alpha f'_{i+1} + \beta f'_{i+2} = \frac{a}{2\Delta x}\left(f_{i+1} - f_{i-1}\right) + \frac{b}{4\Delta x}\left(f_{i+2} - f_{i-2}\right) + \frac{c}{6\Delta x}\left(f_{i+3} - f_{i-3}\right) \tag{1}$$

Elle a été introduite par Lele (1992) et inclut à la fois les schémas classiques et ceux plus récents proposés par Tam, Webb et Dong (1993), Tam et Webb (1993), Lockard, Bretner et Atkins (1995), Kim et Lee (1995), suivant la valeur des 5 paramètres (α, β, a, b, c). L'ordre de l'erreur de troncature de cette classe de schémas impose les relations suivantes entre coefficients :

$$a + b + c = 1 + 2\alpha + 2\beta \quad (\Delta x^2) \tag{2}$$

$$a + 2^2 b + 3^2 c = 2\frac{3!}{2!}(\alpha + 2^2\beta) \quad (\Delta x^4) \tag{3}$$

$$a + 2^4 b + 3^4 c = 2\frac{5!}{4!}(\alpha + 2^4\beta) \quad (\Delta x^6) \tag{4}$$

$$a + 2^6 b + 3^6 c = 2\frac{7!}{6!}(\alpha + 2^6\beta) \quad (\Delta x^8) \tag{5}$$

$$a + 2^8 b + 3^8 c = 2\frac{9!}{8!}(\alpha + 2^8\beta) \quad (\Delta x^{10}) \tag{6}$$

De plus, si l'on remplace f(x) par une série de Fourier dans l'équation (1), on obtient l'approximation discrète d'un nombre d'onde $\kappa' = k'\Delta x$ en fonction du nombre d'onde réel $\kappa = k\Delta x$:

$$\kappa'(\kappa) = \frac{a\ sin\,(\kappa) + (b/2)\, sin\,(2\kappa) + (c/3)\, sin\,(3\kappa)}{1 + 2\alpha\ cos\,(\kappa) + 2\beta\ cos\,(2\kappa)} \tag{7}$$

Pour cette étude, nous avons utilisé deux schémas centrées classiques, d'ordre 2 (STD2) et d'ordre 4 (STD4), deux schémas compacts pentadiagonaux de Lele, l'un haute résolution d'ordre 4 (LELESP45) et l'autre d'ordre 10 (LELE105) et le schéma compact tridiagonal d'ordre 6 de Kim et Lee (KILE63). Certaines propriétés et résultats sur ces schémas sont répertoriées dans le tableau ci-dessous :

schémas	ordre	$e_S(\epsilon)$	type	T/T_{std4}	ν_{stab}
$STD2 - RK_{25}$	2	0.080	explicit		4.00
$STD4 - RK_{44}$	4	0.230	explicit	1	2.07
$KILE63 - RK_{44}$	6	0.763	tridiag.	≈ 10	1.22
$LELE105 - RK_{44}$	10	0.680	pentadiag.	≈ 16	1.22
$LELESP45 - RK_{44}$	4	0.830	pentadiag.	≈ 16	1.07

Avec $\nu_{stab} = \Delta t_{stab}/\Delta x$ le nombre de CFL de stabilité, T/T_{std4} le coût de calcul par point de chaque schéma relativement au schéma STD4. $e_S(\epsilon)$ est le pourcentage d'échelles spatiales résolues avec une erreur $\mid \kappa' - \kappa \mid \leq \epsilon$. Elle est obtenue avec l'équation (7). Dans le tableau ci-dessus, nous avons choisi $\epsilon = 1\%$. Les schémas temporels utilisés dans cette étude sont deux schémas de Runge-Kutta. Le premier d'ordre 2 à 5 pas (RK_{25}) et le second d'ordre 4 à 4 pas (RK_{44}).

2 Analyse des résultats

Dès 1974, Orszag et Israeli (1974) ont souligné les avantages des schémas d'ordre élevé et compacts lorsque l'on souhaite résoudre une large gamme d'échelles avec précision sur des temps d'intégration longs. Une analyse de l'erreur **spatiale** des schémas centrés d'ordre 2 et 4 et d'un schéma compact d'ordre 4 sur une équation d'onde linéaire monodimensionnelle leurs permet de définir le critère approximatif suivant : "Le schéma d'ordre 2 nécessite 20 points de maillage par longueur d'onde, tandis que le schéma d'ordre 4 en nécessite 10 et le schéma d'ordre 4 compact en nécessite 7". Cette analyse n'est pas suffisante car les schémas d'ordre élevé ont souvent une erreur dominante de nature temporelle (ou dissipative) pour un CFL proche du CFL de stabilité. Il est donc nécessaire de considérer l'erreur globale (spatiale + temporelle).Pour ce faire, nous avons dans un premier temps utiliser comme mesure de qualité, la norme euclidienne des écarts entre solution numérique $f(x_i)$ et solution exacte $f_e(x_i)$:

$$ErrL2 = \log\left(\frac{1}{Ni}\sqrt{\sum_{i=1}^{Ni}(f(x_i) - f_e(x_i))^2}\right) \tag{8}$$

2.1 Comparaisons dans l'espace physique et spectral

Une analyse de la propagation d'un paquet d'onde gaussien sur une longueur de 40 fois son rayon dans l'espace physique et spectral montre clairement (fig.1, fig.3, fig.4, fig.2) que l'ordre de troncature n'est pas la seule grandeur à piloter l'erreur de la solution numérique. La meilleur solution est obtenue avec le schéma haute résolution d'ordre 4 (LELESP45), figure (4). On peut donc affirmer que c'est un compromis entre l'erreur de troncature et la résolution des échelles qui caractérise la performance globale d'un schéma spatial.

2.2 CFL optimal, temps de calcul et précision

Un autre élément d'optimisation du couple schéma spatial et temporel est le choix du nombre de points d'espace et de temps pour résoudre à la fois les échelles spatiales et temporelles du problème, notamment lorsque l'ordre de troncature de ces deux schémas diffère. Une première analyse découplée du problème consiste à choisir le CFL de manière à égaler les erreurs de troncatures des deux schémas. On abouti alors au CFL optimal du tableau suivant :

Ordre des schémas	ν_{opt}
$(\Delta t)^2(\Delta x)^2$	≈ 1
$(\Delta t)^2(\Delta x)^4$	$\approx (\Delta x)$
$(\Delta t)^4(\Delta x)^4$	≈ 1
$(\Delta t)^4(\Delta x)^6$	$\approx (\Delta x)^{1/2}$
$(\Delta t)^4(\Delta x)^8$	$\approx (\Delta x)$
$(\Delta t)^4(\Delta x)^{10}$	$\approx (\Delta x)^{3/2}$

Cependant, des calculs sur le transport d'un paquet d'onde gaussien montre (fig.(5)) que le couplage entre le schéma spatial et le schéma temporel ne peut pas toujours être négligé. En effet, on constate pour le schéma haute résolution (LELESP45) que les calculs donne une valeur du CFL optimal plus faible ($\approx \nu_{stab}/2$=0.54) que la valeur fournie par l'analyse découplée ($\approx$ 1.0). On remarque aussi qu'il est intéressant d'utiliser le CFL optimal des schémas compacts pour atteindre le meilleur compromis entre la précision maximale et le temps de calcul minimal (temps de calcul $\approx$ 2 fois plus faible à précision fixée).

Les figures (5 et 6) fournissent de nombreuses informations sur le rendement des différents schémas numériques. Elle montre qu'à précision fixée (ici trait pointillé à $10^{-5.5}$), le schéma d'ordre 4 classique (STD4) nécessite environ 4 fois plus de points en espace et 1.4 fois plus de points en temps que les deux schémas compacts pentadiagonaux de Lele (LELE105, LELESP45). Malgré cela, le temps de calcul du schéma STD4 est environ 2 fois plus faible que pour les schémas de Lele. On constate aussi que le schéma d'ordre 2 (STD2-RK_{25}) est cher en temps de calcul et peu précis.

3 Conclusions

Nous avons défini et montré l'intérêt du CFL optimal. Nous avons montré que le gain en capacité de résolution des petites échelles, même des meilleurs schémas haute résolution actuels, ne suffit pas pour compenser le surcoût de calcul par point de maillage. Une combinaison de schémas classique (STD4-RK44) demande environ deux fois moins de temps de calcul malgré le nombre de points quatre fois supérieur en espace qu'un schéma haute résolution. Les schémas compacts d'ordre élevé sont donc intéressants pour réduire de façon importante le coût en mémoire, pour atteindre de très grandes précisions, mais **pas pour réduire le temps de calcul**. Ils sont intéressants pour la recherche sur des problèmes que l'on ne peut pas aborder sans eux, par contre dans l'immédiat, ils ne semblent pas mûrs pour une utilisation industrielle.

Des études supplémentaires sont en cours sur la définition d'une mesure de qualité plus fine qui devrait nous permettre d'aboutir au meilleur compromis (ordre de troncature, résolution des échelles spatiales et temporelles) et au choix du couple schéma spatial et temporel le mieux adapté à la simulation numérique de problémes instationnaires en fonction du niveau de précision souhaité.

Références

KIM, J.W. ET LEE, D.J. (1995) Optimized compact finite difference schemes for solving wave equations, *AIAA Paper 95-009, p65-74, 1995.*

LELE, S.K. (1992) Compact finite differences schemes with spectral-like resolution, *J.C.P. n°103, p16-42, 1992.*

Lockard, D.P., Bretner, K.S. et Atkins, H.L. (1995) High-accuracy algoritms for computational aeroacoustics, *A.I.A.A. Journal, Vol. 33, No. 2, p246-251, February 1995.*

Orszag, S.A. et Israeli, M. (1974) Numerical simulation of viscous incompressible flows, *Ann. Rev. Fluid Mech., ?, p280-318, 1974.*

Tam, C.K.W. et Webb, J.C. (1993) Dispersion-relation-preserving finite difference schemes for computational aeroacoustics, *Journal of Computational Physics, Vol. 107, p262-281, 1993.*

Tam, C.K.W., Webb, J.C. et Dong, Z. (1993) A study of the short wave components in computational aeroacoustics, *Journal of Computational Acoustics, Vol. 1, n°1, p1-30, 1993.*

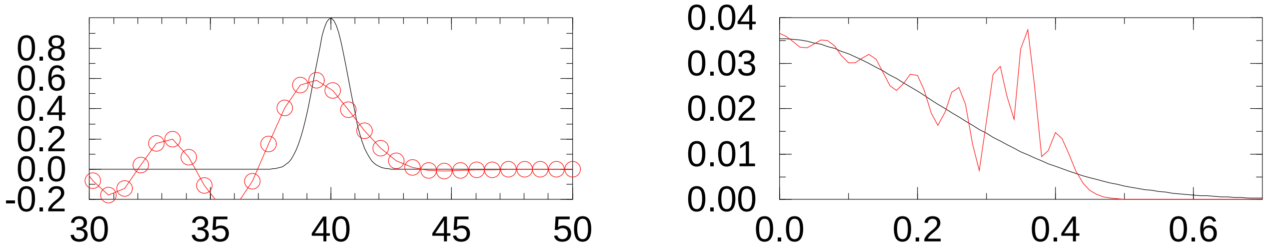

Fig. 1. STD4, Ni=151, ν=0.1, ErrL2=-3.11, T_{CPU}=0.10

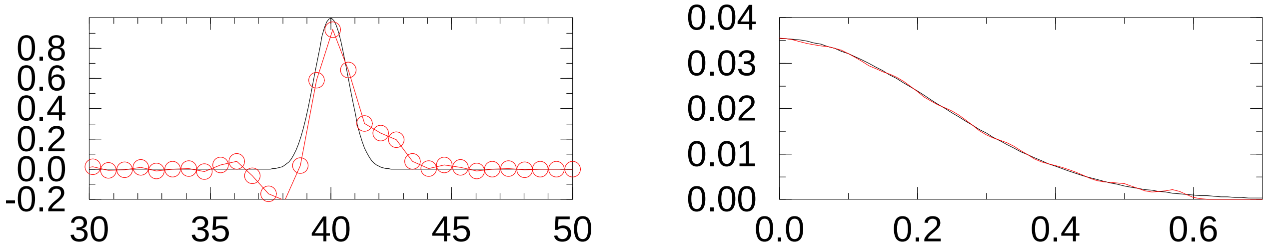

Fig. 2. KILE63, Ni=151, ν=0.1, ErrL2=-3.49, T_{CPU}=0.71

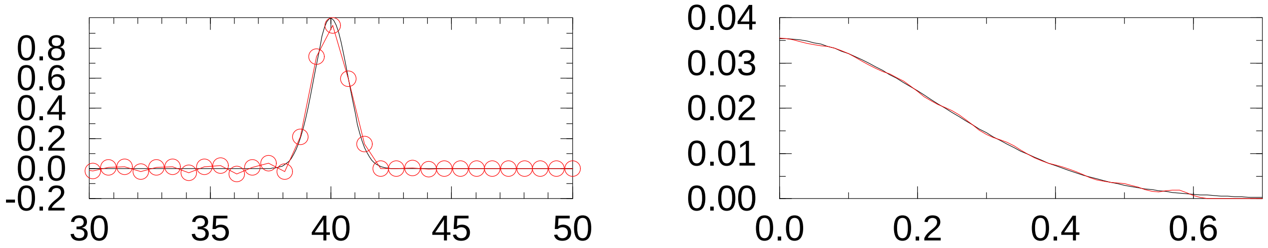

Fig. 3. LELE105, Ni=151, ν=0.1, ErrL2=-4.14, T_{CPU}=0.97

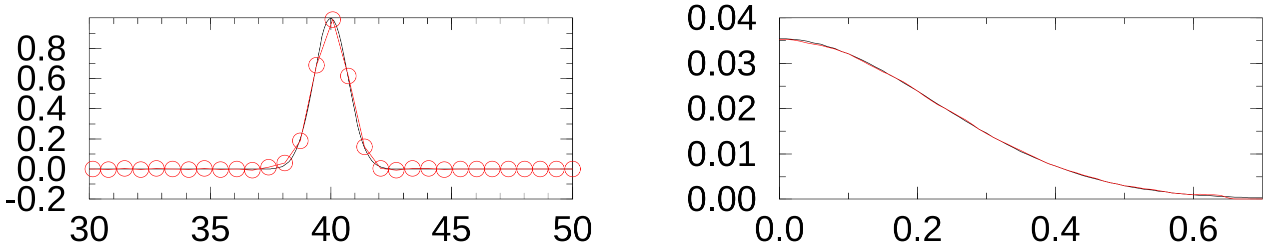

Fig. 4. LELESP45, Ni=151, ν=0.1, ErrL2=-4.51, T_{CPU}=1.08

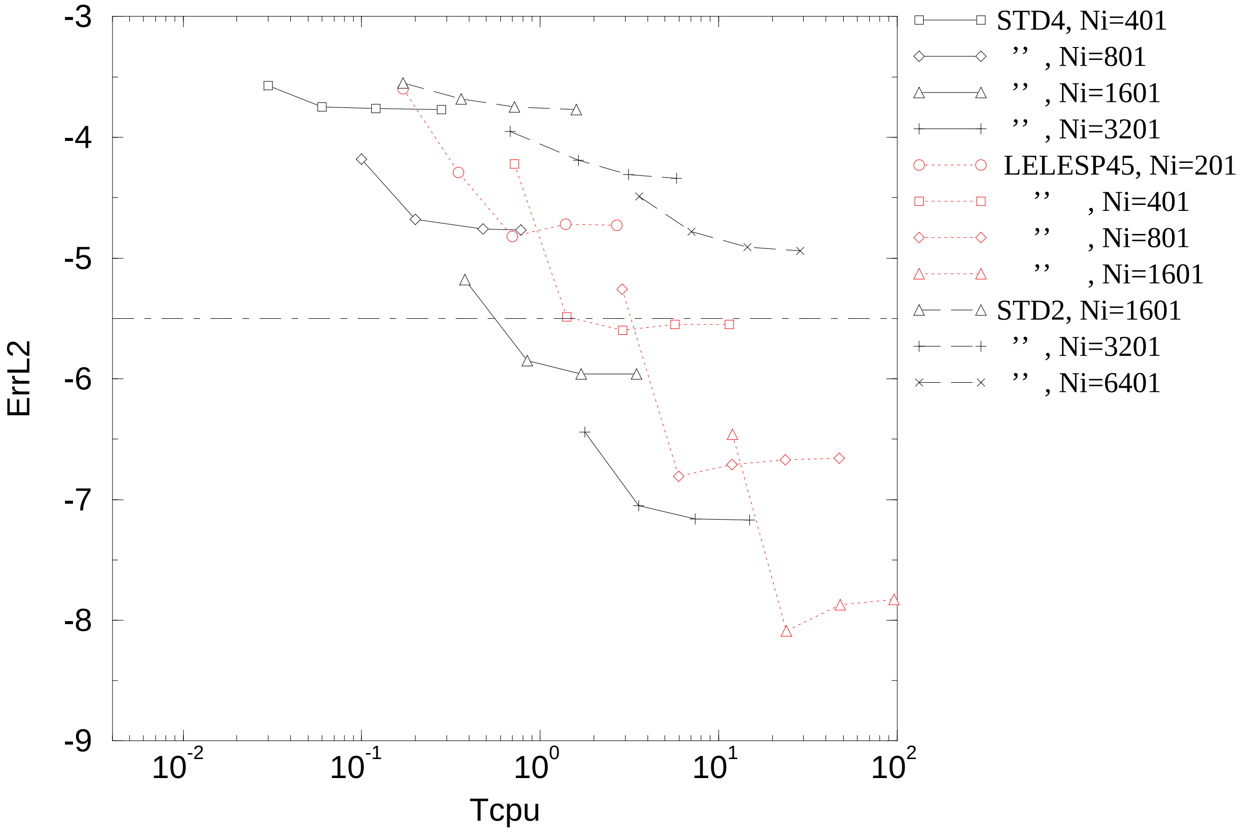

FIG. 5. $ErrL2 = f(T_{CPU})$ en fonction de Ni et du CFL. Chaque courbe est à nombre de points en espace Ni=Cte et CFL variant de gauche à droite suivant la suite (ν_{stab}, $\nu_{stab}/2$, $\nu_{stab}/4$, ...).

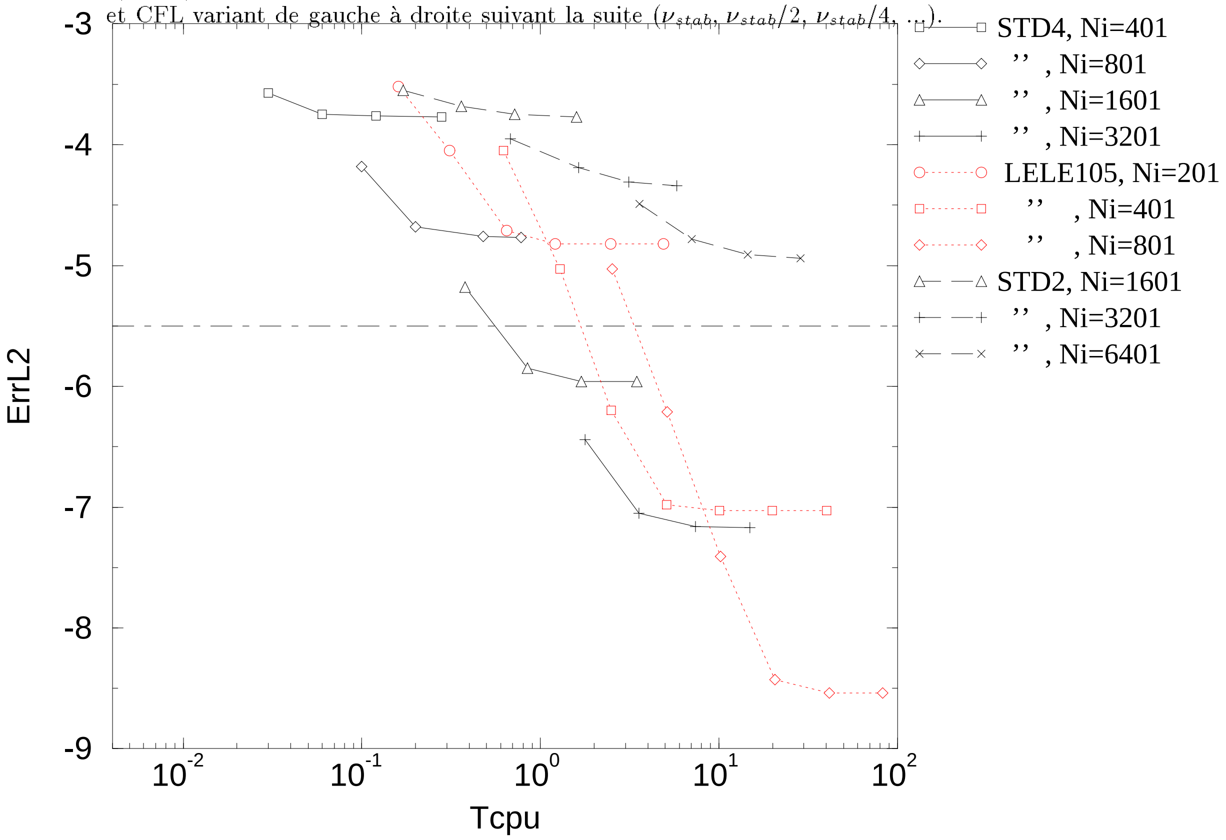

FIG. 6. $ErrL2 = f(T_{CPU})$ en fonction de Ni et du CFL. Chaque courbe est à nombre de points en espace Ni=Cte et CFL variant de gauche à droite suivant la suite (ν_{stab}, $\nu_{stab}/2$, $\nu_{stab}/4$, ...).