

Mini-Projet d'analyse numérique Convection-diffusion en dimension 2

Proposé par Ludovic Sacchelli
ludovic.sacchelli@polytechnique.edu

L'équation de convection diffusion nous permet de modéliser la dispersion simplement. Elle lie l'évolution d'une concentration à des phénomènes diffusifs, comme observés lors de l'homogénéisation du milieu, et convectifs, eux entraînés par des variations du courant dans le milieu.

On supposera que l'on s'intéresse ici la dispersion d'un produit chimique dans un fleuve. On peut naturellement modéliser le fleuve par un milieu unidimensionnel dans lequel le courant est donné par le sens de parcours du fleuve. Dans certains cas il est pertinent de s'intéresser aux effets des composantes transverses à la direction globale de l'écoulement, par exemple pour observer l'influence de la topographie à plus basse échelle. L'objectif de ce projet est donc d'observer les différences d'évolution de la solution d'une équation de convection-diffusion lorsque le milieu est modélisé par compact de dimension 1 ou 2.

On modélisera l'évolution de la concentration du produit chimique $u = u(t, x)$ au temps t et à la position $x \in \mathbb{R}^d$, $d = 1, 2$, par une équation de convection-diffusion

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} + V \cdot \nabla u - \nu \Delta u = f, \\ u|_{t=0} = u_0. \end{cases} \quad (1)$$

Ici V est la vitesse de convection, représentant la vitesse du courant et qui pourrait donc dépendre de la position et du temps, ν est le coefficient de diffusion, f est la source et u_0 en est la concentration initiale.

La partie 1 du problème est consacrée à l'étude du cas $d = 1$, le produit chimique s'écoule dans un fleuve modélisé comme uni-dimensionnel. La partie 2 est quant à elle consacrée à $d = 2$, lorsque l'on souhaite tenir compte des variations du courant. Dans les deux cas, on cherche à simuler l'évolution de la concentration du produit chimique déversé dans le fleuve via des schémas aux différences finies.

Il est attendu des élèves qu'ils transmettent leurs réponses aux questions sous la forme d'un rapport qui sera agrémenté de d'interprétations et de captures pertinentes de leurs résultats. Il est également entendu que la section 2 est bien plus technique et les élèves sont invités à y porter un maximum d'attention.

1 Évolution de la concentration dans le fleuve unidimensionnel

Afin d'observer le comportement de différents schémas on étudie dans un premier temps l'équation de convection dont on peut aisément calculer des solutions explicites.

1.1 Équation de convection uni-dimensionnelle

Nous simplifions le problème en négligeant les termes de diffusion et de source ($\nu = 0$ et $f = 0$), ainsi qu'en supposant la vitesse constante et positive, $V > 0$. On obtient alors l'équation de convection

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t}(t, x) + V \frac{\partial u}{\partial x}(t, x) = 0, & \forall x \in \mathbb{R}, \forall t > 0, \\ u(t = 0, x) = u_0(x) & \forall x \in \mathbb{R}. \end{cases} \quad (2)$$

On suppose que u_0 est de classe C^1 sur \mathbb{R} . Dans ce cas on peut résoudre explicitement l'équation (2) via la méthode des caractéristiques. Nous allons donc pouvoir comparer les solutions explicites avec des

résolutions numériques obtenues par différences finies. Pour résoudre numériquement cette équation, nous allons nous borner à un intervalle d'espace $[0, L]$ et de temps $[0, T]$, avec une condition initiale à support dans $[0, L]$. On note alors

- Δt le pas de discrétisation en temps ;
- Δx le pas de discrétisation en espace ;
- $N = \frac{L}{\Delta x} - 1$ la taille de la maille ;
- $t^n = n\Delta t$ et $x_j = j\Delta x$ les coordonnées des points de la maille ;
- u_j^n l'approximation de $u(t^n, x_j)$;
- $U^n = (u_j^n)_{1 \leq j \leq N}$ le vecteur approchant $u(t^n, \cdot)$.

On impose dans un premier temps les conditions au bord de Dirichlet $u_0^n = u_{N+1}^n = 0$ pour tout $n \in \mathbb{N}$.

Dans les questions **Q1** à **Q3**, on pourra accomplir les applications numériques avec $L = 50$, $T = 25$, $V = 1$, $\nu = 1$, $\Delta x = 0.1$, $\Delta t = 0.025$ et la condition initiale $u_0 = f_{x_0, \sigma}$ pour

$$f_{x_0, \sigma}(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(x - x_0)^2}{2\sigma^2}\right) \quad (3)$$

avec $x_0 = 20$ et $\sigma = 1$.

Q1 On rappelle l'expression du schéma explicite centré :

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + V \frac{u_{j+1}^n - u_{j-1}^n}{2\Delta x} = 0.$$

Calculez la matrice K_c pour laquelle U^{n+1} peut être obtenu par la relation de récurrence

$$U^{n+1} = (I_N - V\Delta t K_c)U^n$$

pour tout $n \in \mathbb{N}$. Utilisez cette relation pour tester le schéma numérique avec les paramètres numériques donnés. Justifiez du phénomène observé.

Q2 On rappelle l'expression du schéma explicite décentré amont :

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + V \frac{u_j^n - u_{j-1}^n}{\Delta x} = 0.$$

Rappelez les conditions de convergence du schéma, ainsi que son ordre et son équation équivalente. Calculez la matrice K_d pour laquelle U^{n+1} peut être obtenu par la relation de récurrence

$$U^{n+1} = (I_N - V\Delta t K_d)U^n$$

pour tout $n \in \mathbb{N}$. Servez vous de cette relation pour tester le schéma numérique avec les paramètres numériques donnés. Illustrez la condition de stabilité du schéma.

Q3 On introduit le schéma de Crank-Nicholson

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + \frac{V}{2} \left(\frac{u_{j+1}^n - u_{j-1}^n}{2\Delta x} + \frac{u_{j+1}^{n+1} - u_{j-1}^{n+1}}{2\Delta x} \right) = 0.$$

Vérifiez que U^{n+1} est donné par la relation de récurrence

$$\left((I_N + \frac{V\Delta t}{2} K_c) U^{n+1} = (I_N - \frac{V\Delta t}{2} K_c) U^n \right).$$

pour tout $n \in \mathbb{N}$. Montrer que le schéma est inconditionnellement stable en norme L^2 . Calculer son ordre et son équation équivalente. Testez le schéma à l'aide de la relation de récurrence.

Q4 En imposant $\frac{V\Delta t}{\Delta x} = 0.25$, cherchez à observer numériquement les ordres de convergence des schémas décentré amont et Crank-Nicholson.

1.2 Équation de convection-diffusion uni-dimensionnelle

On s'intéresse à présent à l'équation de convection-diffusion en une dimension d'espace :

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t}(t, x) + V \frac{\partial u}{\partial x}(t, x) - \nu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(t, x) = 0, & \forall x \in \mathbb{R}, \forall t > 0, \\ u(t = 0, x) = u_0(x) & \forall x \in \mathbb{R}. \end{cases} \quad (4)$$

Dans les mêmes conditions que la section précédente, on utilise le schéma de Crank-Nicholson

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + \frac{V}{2} \left(\frac{u_{j+1}^n - u_{j-1}^n}{2\Delta x} + \frac{u_{j+1}^{n+1} - u_{j-1}^{n+1}}{2\Delta x} \right) - \frac{\nu}{2} \left(\frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{\Delta x^2} + \frac{u_{j+1}^{n+1} - 2u_j^{n+1} + u_{j-1}^{n+1}}{2\Delta x^2} \right) = 0.$$

Q5 Calculez la matrice A pour laquelle U^{n+1} peut être obtenu par la relation de récurrence

$$\left(I_N + \frac{V\Delta t}{2} K_c - \frac{\nu\Delta t}{2} A \right) U^{n+1} = \left(I_N - \frac{V\Delta t}{2} K_c + \frac{\nu\Delta t}{2} A \right) U^n.$$

pour tout $n \in \mathbb{N}$. Tester le schéma pour $\nu = 1$. Qu'observe-t-on au bord du domaine ?

Le comportement observé à la sortie ($x = L$) n'est pas le comportement attendu pour une solution définie sur \mathbb{R} . On choisit donc d'utiliser en $x = L$ des conditions de type Neumann homogène qui reviennent à imposer

$$\frac{u_{N+1} - u_N}{\Delta x} = 0.$$

Q6 Modifier les matrices K_c et A pour tenir compte de ces nouvelles conditions et reprendre la simulation une fois ces modifications apportées.

Afin de simuler l'action d'une usine déversant un produit chimique, on suppose que la concentration à $t = 0$ est nulle et on introduit un terme de source $f(t, x)$.

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t}(t, x) + V \frac{\partial u}{\partial x}(t, x) - \nu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(t, x) = f(t, x), & \forall x \in \mathbb{R}, \forall t > 0, \\ u(t = 0, x) = 0 & \forall x \in \mathbb{R}. \end{cases} \quad (5)$$

Q7 A l'aide d'une discrétisation $f_j^n = f(t_n, x_j)$ de f , modifiez le schéma de Crank-Nicholson pour tenir compte du terme source. Modifiez l'équation de récurrence obtenue en question **Q5** en conséquence et testez numériquement le schéma avec comme terme source $f(t, x) = f_{x_0, \sigma}(x)$. Pour simuler l'action d'une usine ne fonctionnant que la moitié du temps dans une journée, tester le schéma avec

$$f(t, x) = \begin{cases} f_{x_0, \sigma}(x) & \text{si } [t] \text{ est pair,} \\ 0 & \text{si } [t] \text{ est impair.} \end{cases}$$

Proposez ensuite une durée de fonctionnement et une durée de pause (ici initialement 1 et 1) de façon à assurer que la concentration en $x = 50$ ne dépasse pas 0.4 une fois le régime stationnaire atteint.

2 Évolution de la concentration dans le fleuve bidimensionnel

On néglige toujours la profondeur du fleuve, mais on souhaite connaître l'influence des courants provoqués par la topographie sur l'évolution de la concentration de produit chimique. On cherche toujours à employer des schémas de type Crank-Nicholson pour leur bonnes propriétés mais leur caractère implicite nous impose un travail préliminaire.

Vous êtes invités dans cette section à privilégier des affichages du type imshow ou contourf pour faciliter la lisibilité et éviter des erreurs d'interprétation.

2.1 Discrétisation du Laplacien en dimension 2

On cherche à simuler via différences finies une fonction $u(x, y)$ solution de l'équation de Laplace

$$\begin{cases} -\Delta u(x, y) = f(x, y), & \forall (x, y) \in \Omega =]0, L[\times]0, L[, \\ u(x, y) = 0 & \forall (x, y) \in \partial\Omega. \end{cases} \quad (6)$$

Pour résoudre numériquement cette équation, nous utilisons alors

- h le pas de discrétisation en espace commun aux deux directions ;
- $N = \frac{L}{h} - 1$ la taille de la maille ;
- $x_i = ih$ et $y_j = jh$ les coordonnées des points de la maille, $0 \leq i, j \leq N + 1$;
- $u_{i,j}$ l'approximation de $u(x_i, y_j)$;
- $f_{i,j} = f(x_i, y_j)$ la discrétisation de f aux points de la maille

On utilise pour calculer les $(u_{i,j})_{1 \leq i, j \leq N}$ le schéma aux différences finies

$$-\frac{u_{i-1,j} - 2u_{i,j} + u_{i+1,j}}{h^2} - \frac{u_{i,j-1} - 2u_{i,j} + u_{i,j+1}}{h^2} = f_{i,j}, \quad 1 \leq i, j \leq N.$$

On introduit le vecteur U de taille N^2 qui est donné par la concaténation des lignes de la matrice $(u_{i,j})_{1 \leq i, j \leq N}$:

$$U_{(i-1)N+j} = u_{i,j} \text{ pour } 1 \leq i, j \leq N.$$

Q8 Calculez la matrice A et le vecteur b pour lesquels U est solution du système linéaire

$$-AU = b.$$

Utilisez ce système pour résoudre numériquement l'équation de Laplace avec un terme source bien choisi permettant de comparer la résolution numérique et la solution exacte. Rappelez l'ordre de convergence du schéma et cherchez à l'observer numériquement.

2.2 Équation de convection diffusion bi-dimensionnelle

Nous pouvons à présent simuler le comportement de la concentration de polluant lorsqu'il s'écoule dans le fleuve en dimension 2. On modélise son évolution par l'équation de réaction diffusion sur un domaine $\Omega =]0, L[\times]0, l[$ avec conditions de Dirichlet au bord :

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} + V^x \frac{\partial u}{\partial x} + V^y \frac{\partial u}{\partial y} - \nu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \nu \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0, & \forall (x, y) \in \Omega, \forall t > 0, \\ u(t = 0, x, y) = u_0(x, y), & \forall (x, y) \in \Omega, \\ u(t, x, y) = 0, & \forall (x, y) \in \partial\Omega, \forall t > 0. \end{cases} \quad (7)$$

Nous simplifier l'application numérique, nous allons supposer que la maille possède N points dans chaque direction et $l = L$. Pour des affichages plus conformes à notre modélisation, on pourra employer le ratio $L = 5l$. Pour résoudre numériquement cette équation nous utilisons de plus

- Δt le pas de discrétisation en temps ;

- $t^n = n\Delta t$ les coordonnées du maillage temporel;
- $u_{i,j}^n$ l'approximation de $u(t^n, x_i, y_j)$;
- $V_{i,j}^x = V^x(x_i, y_j)$ et $V_{i,j}^y = V^y(x_i, y_j)$ la discrétisation de $V = (V^x, V^y)$;
- U^n de taille N^2 donné par la concaténation des lignes de la matrice $(u_{i,j}^n)_{1 \leq i,j \leq N}$, pour chaque $n \in \mathbb{N}$.

Le schéma de Crank-Nicholson correspondant s'écrit dans ce cas

$$\begin{aligned} \frac{u_{i,j}^{n+1} - u_{i,j}^n}{\Delta t} + \frac{V_{i,j}^x}{2} \left(\frac{u_{i+1,j}^n - u_{i-1,j}^n}{2\Delta x} + \frac{u_{i+1,j}^{n+1} - u_{i-1,j}^{n+1}}{2\Delta x} \right) + \frac{V_{i,j}^y}{2} \left(\frac{u_{i,j+1}^n - u_{i,j-1}^n}{2\Delta x} + \frac{u_{i,j+1}^{n+1} - u_{i,j-1}^{n+1}}{2\Delta x} \right) \\ - \frac{\nu}{2} \left(\frac{u_{i+1,j}^n - 2u_{i,j}^n + u_{i-1,j}^n}{\Delta x^2} + \frac{u_{i+1,j}^{n+1} - 2u_{i,j}^{n+1} + u_{i-1,j}^{n+1}}{\Delta x^2} \right) \\ - \frac{\nu}{2} \left(\frac{u_{i,j+1}^n - 2u_{i,j}^n + u_{i,j-1}^n}{\Delta x^2} + \frac{u_{i,j+1}^{n+1} - 2u_{i,j}^{n+1} + u_{i,j-1}^{n+1}}{\Delta x^2} \right) = 0. \end{aligned}$$

Q9 On suppose dans un premier temps que $V = (1, 0)$. Calculer les matrices K_c^x et K_c^y pour lesquelles on a la relation de récurrence

$$(I_N + \frac{\Delta t}{2}(K_c^x + K_c^y) - \frac{\nu \Delta t}{2}A) U^{n+1} = (I_N - \frac{\Delta t}{2}(K_c^x + K_c^y) + \frac{\nu \Delta t}{2}A) U^n.$$

Q10 Tester le schéma pour calculer une approximation de la solution de (7) sur $[0, T]$. On effectuera les simulations avec $\nu = 1$, $L = 100$, $T = 25$, $\Delta x = 0.5$, $\Delta y = 0.1$, $\Delta t = 0.05$ et la condition initiale $u_0 = f_{x_0, y_0, \sigma}$ pour

$$f_{x_0, y_0, \sigma}(x) = \frac{1}{\sigma \sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(x - x_0)^2 + (y - y_0)^2}{2\sigma^2}\right)$$

avec $x_0 = y_0 = L/2$, et $\sigma = 1$.

On supposera par la suite que la condition initiale est nulle.

Q11 Afin de modéliser le déversement du produit chimique dans le fleuve, modifier le schéma afin de prendre en compte la participation du terme source f . Le terme source est donné par $f = f_{x_0, y_0, \sigma}$ avec $x_0 = 20$ et $y_0 = L$ et $\sigma = 1$.

Q12 Pour modéliser le fait que l'on n'observe qu'une troncation du fleuve, de la même manière qu'en partie 1, modifier les matrices K_c^x , K_c^y et A afin d'imposer des conditions de type Neumann aux bords $x = 0$ et $x = L$. Tester cette modification avec des couples vitesse $V = (V_x, 0)$ - temps final T adaptés.

L'objectif final du projet est d'observer les effets du courant sur la dispersion, en particulier lorsque celui-ci dépend de la position. Le cas qui nous intéresse est la présence d'îles qui peuvent courber les courants.

On propose les champs de vitesses suivants (voir Figure 1). Soit

$$g(x) = e^{-x^2/10}, \quad h(x) = \begin{cases} g\left(x - \frac{L}{8}\right) & \text{si } x < \frac{L}{8}, \\ g\left(\left(x - \frac{L}{8}\right)/10\right) & \text{si } x > \frac{L}{8}, \end{cases}$$

et

$$v(x, y) = \left(1, -\sin\left(\frac{2\pi y}{L}\right) \sin\left(\frac{4\pi x}{L}\right)\right), \quad v_1(x, y) = \begin{cases} v(x, y) & \text{si } x < \frac{L}{2}, \\ v(0, 0) & \text{si } x > \frac{L}{2}. \end{cases}$$

On modélise la présence d'un îlot modifiant le courant en $(L/8, L/2)$ par la présence d'un champ de vitesses

$$V_1(x, y) = (1 - h(x)g(y - L/2)) \cdot v_1(x, y).$$

On modélise la présence de deux îlots modifiant le courant en $(L/8, L/2)$ et $(5L/8, L/2)$ par la présence d'un champ de vitesses

$$V_2(x, y) = [1 - h(x)g(y - L/2)][1 - h(x - L/2)g(y - L/2)] \cdot v(x, y).$$

Q13 Modifiez à présent les matrices K_c^x et K_c^y pour prendre en compte la dépendance de V vis-à-vis de la position pour les champs V_1 et V_2 . Commentez les différences d'évolution de la densité observées sur la rive opposée au point source ($y = 0$) entre le cas à un îlot et le cas à deux îlots. (Vous pouvez éventuellement modifier les données ν , T , et autres, pour mettre en évidence ces différences.)

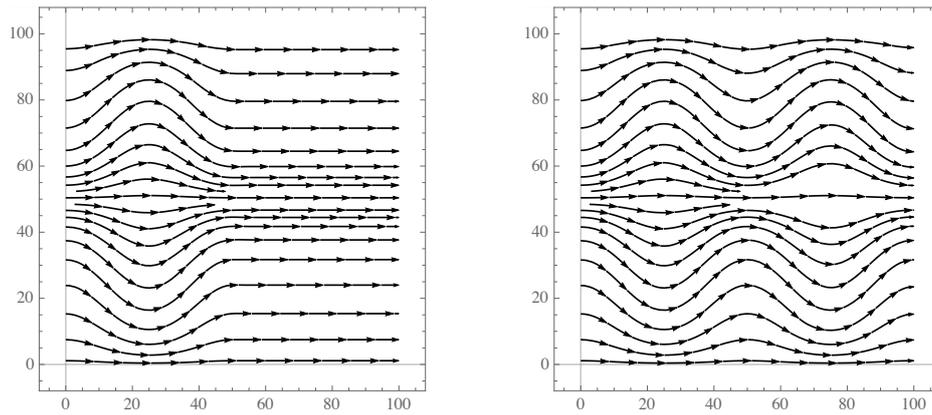


FIGURE 1 – Aperçu des lignes de champs pour les champs de vitesses proposés V_1 et V_2 .