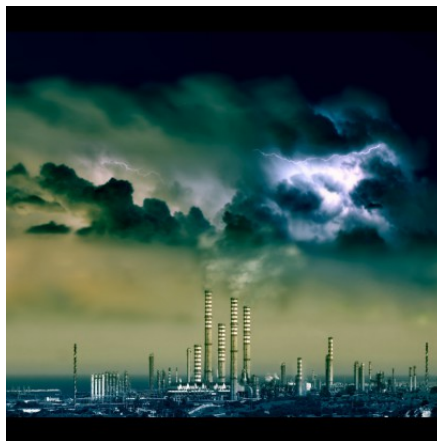


Transport d'une espèce chimique dans un fluide

Lundi 13 Juin 2016



Etudiants	COUDOUX	Antoine
	GIANG	Thanh Binh
	JERÔME	Pauline
	STIEGLER	Nathanaël
Enseignant responsable	GLEYSE	Bernard
Membres jury	BOUSCARRAT	David
	DHAOUADI	Faouzi
	GLEYSE	Bernard
	KELLER	Clément

Date de remise de rapport : Lundi 13 Juin 2016 à midi

Date de soutenance : Lundi 20 Juin 2016 à 10h15 - 12h15 groupe B2

Référence du projet : STPI / P6 / 2016 / 15

Intitulé du projet : Transport d'une espèce chimique dans un fluide

Type de projet : Modélisation

Objectif du projet : L'objectif de notre projet est de modéliser le transport d'une espèce chimique au sein d'un fluide. Pour cela, nous avons repris l'intégralité du travail réalisé l'an passé. Nous avons, tout au long de ce projet, dû intégrer un terme de diffusion à l'équation de transport établi l'an passé. Enfin, nous avons travaillé sur de nouveaux schémas numériques.

Mots-clefs du projet : Convection / Diffusion / Modélisation / Simulation

INSTITUT NATIONAL DES SCIENCES APPLIQUEES DE ROUEN
Département Sciences et Techniques Pour l'Ingénieur
685 avenue de l'Université - 76801 Saint Etienne du Rouvray
tél : +33 (0)2 32 95 97 00 - fax : +33 (0)2 32 95 98 60

Contents

I	Introduction	6
II	Méthodologie, organisation du travail	7
III	Travail réalisé et résultats	8
1	L'équation de transport	8
1.1	Equation homogène sans terme de diffusion	8
1.2	Equation avec terme source et sans terme de diffusion	8
1.3	Justification physique de l'équation de transport sans terme source et avec diffusion	8
1.4	Résolution et solutions de l'équation avec terme source et terme de diffusion	10
2	Résolution numérique de l'équation de transport	10
2.1	Méthode des différences finies	10
2.2	Schéma explicite en dimension 1 du premier ordre	11
2.2.1	Approximation des dérivées partielles	11
2.2.2	Détermination de l'équation	11
2.2.3	Résolution	12
2.3	Schéma de Lax-Friedrichs	12
2.3.1	Stabilité du schéma explicite de Lax-Friedrichs	12
2.4	Schéma explicite en dimension 1 du second ordre	13
2.4.1	Détermination de l'équation	13
3	Comparaison de nos différents résultats	14
3.1	Comparaison de l'explicite de Friedrichs avec le schéma explicite initial	14
3.2	Comparaison de la courbe théorique avec la courbe expérimentale schéma explicite avec un terme de diffusion	21
IV	Applications	23
4	Que représente physiquement l'équation de transport ?	23
5	Application de nos programmes à une situation physique con- crète	24
V	Conclusion et perspectives	25

List of Figures

1	Schéma de la démonstration de la loi de Fick	9
2	Courbe explicite sans terme source exemple 1	15
3	Courbe Friedrich exemple 1	15
4	Superposition courbe exemple 1 théorique (jaune) explicite (rouge) explicite de Friedrich (bleu)	16
5	Courbe explicite sans terme source exemple 2	17
6	Courbe Friedrich exemple 2	17
7	Courbe théorique (jaune) explicite (rouge) explicite de Friedrich (bleu)	18
8	Courbe exemple 1 explicite t=0.1s	19
9	Courbe de Friedrich exemple 1 explicite t=0.1s	19
10	Courbe exemple 2 explicite t=1s	20
11	Courbe de Friedrich exemple 2 explicite t=1s	20
12	Courbe diffusion t=0.02s	21
13	Courbe diffusion t=0.8s	22
14	Processus de convection au sein d'un fluide	23
15	Processus de diffusion au sein d'un fluide	24

Part I

Introduction

Notre projet P6, intitulé « Transport d'une espèce chimique dans un fluide », consiste à étudier l'évolution de la concentration d'une espèce au sein d'un fluide, lorsque ce dernier se déplace le long d'un axe. Il s'agit donc avant tout d'un problème de physique, qui requiert cependant diverses compétences dans les domaines mathématiques et informatiques, c'est pourquoi nous ne le réalisons qu'en milieu de deuxième année. En effet, nous avons déjà eu l'expérience des projets en Mathématiques et en Informatique, ce qui nous a permis de mieux appréhender ce troisième projet d'envergure. Le fait d'avoir un sujet nécessitant l'usage de différentes connaissances nous a également permis d'exploiter les acquis que nous avons pu apprendre durant nos précédents projets et également grâce à nos cours.

Notre projet de P6 constitue une étude plus réaliste du projet déjà réalisé l'année précédente par d'autres élèves. En effet, ces derniers ont travaillé sur la détermination de l'évolution d'une espèce chimique dans un fluide en mouvement en fonction de la position et du temps. Ce modèle physique avait été réalisé en dimension 1.

Notre objectif cette année, a été de nous informer de l'étude réalisée par ces élèves et de l'étendre à un autre phénomène afin de traiter le problème de manière plus réaliste. Pour cela, nous avons dû ajouter un terme de diffusion à l'équation déjà établie l'année précédente.

Nous avons dans un premier temps établi l'équation de transport avec l'ajout d'un terme de diffusion.

Dans une seconde partie nous nous sommes intéressés à différents schémas numériques de résolution de cette équation.

Enfin, nous avons effectué un travail de comparaison avec nos différents résultats.

Part II

Méthodologie, organisation du travail

Afin de répondre aux attentes de notre problème, nous avons procédé en plusieurs étapes. Tout d'abord, il était nécessaire de reprendre l'intégralité du travail réalisé l'année précédente afin de pouvoir traiter le problème correctement. Cette tâche a été non négligeable puisqu'il a fallu s'appropriier toute la partie Mathématiques et comprendre les codes. Nous avons pu rencontrer quelques difficultés puisque c'est un problème qui nécessite l'utilisation de nouveaux outils et connaissances. Pour nous aider, nous nous sommes informés sur différents sites ce qui nous a permis de mieux appréhender le sujet.

Durant cette première étape, l'intégralité du groupe s'est intéressée à la partie théorique et mathématiques. Par la suite, pour des raisons de praticité, nous avons décidé de scinder notre groupe en deux binômes. L'un était chargé de la réalisation du schéma explicite avec le terme de diffusion, l'autre s'intéressait au schéma de Las-Friedrichs. Cependant, nous nous aidions fréquemment en cas de difficultés, afin d'éviter toute perte de temps. Par ailleurs, des réunions de groupe régulières nous permettaient de nous assurer de l'état d'avancement du travail.

Part III

Travail réalisé et résultats

1 L'équation de transport

1.1 Equation homogène sans terme de diffusion

On considère un fluide en mouvement le long d'un axe x . On suit un domaine $]a(t); b(t)[$ d'extrémités régulières, dans son mouvement. L'équation de transport est une équation linéaire d'évolution du premier ordre. On cherche une fonction

u qui vérifie :
$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} + c \frac{\partial u}{\partial x} = 0 & \forall t > 0 \forall x \in \mathbb{R} \\ u(x; 0) = u_0(x) & \forall t > 0 \forall x \in \mathbb{R} \end{cases}$$
 où $c=v(x,t)$ avec $v(x,t)$ le profil vitesse du fluide et où $u(x,t)$ représente le profil densité du fluide.

Les solutions sont des fonctions définies dans $D = \mathbb{R} * \mathbb{R}_+^*$

$$\begin{cases} u(x(t), t) = u_0(x - ct) \\ \forall t : u(x(t), t) = \varphi\left(\frac{ct-x}{c}\right) \end{cases}$$

- On passe d'une solution à l'autre en $t=1/c$

Ces solutions correspondent à l'équation de transport homogène, c'est à dire sans terme source. Il n'y a donc aucune création de masse au cours de la propagation du fluide.

1.2 Equation avec terme source et sans terme de diffusion

Cette fois-ci, l'équation aux dérivées partielles est de la forme : $\frac{\partial u}{\partial t} + c \frac{\partial u}{\partial x} = f(x, t)$ où $f(x,t)$ est une fonction de deux variables représentant la création de masse en fonction du temps et de la position. Les solutions du problème

deviennent :
$$\begin{cases} u(x, t) = u_0(x - ct) + \int_0^t f(x - c(t - \tau), \tau) d\tau \\ u(x, t) = \varphi\left(\frac{ct-x}{c}\right) + \int_0^x f(e, t - \frac{1}{c}(x - e)) de \end{cases}$$
 On passe d'une solution à l'autre en $t=1/c$

1.3 Justification physique de l'équation de transport sans terme source et avec diffusion

Le phénomène de diffusion permet de rendre homogène la concentration d'une espèce chimique au sein d'un fluide. Dans cette partie, on considère le problème de la diffusion de l'espèce chimique dans le liquide en mouvement. On suppose que la vitesse du fluide est selon la direction horizontale et on considère que le fluide diffuse essentiellement selon l'axe x . De plus, on néglige les variations selon les axes y et z .

- On note $U(x,t)$ le profil densité.
- On note $j(x,t)$ la densité de courant de particule.

- On note $\phi(x, t)$ le flux de particules à travers S.
- On note lpm (Libre Parcours Moyen) : Distance moyenne parcourue par une particule entre deux interactions.

La variation du nombre de particules est donnée par : nombre de particules entrantes - nombre de particules sortantes dans dV.

On a donc $\frac{\partial u}{\partial t} \times dV = j(x, t)S - j(x + dx, t)S$ en trois dimensions.

L'équation 1D de conservation locale de particules donne : $\frac{\partial u}{\partial t} = -\frac{\partial j}{\partial x}$
 De plus la loi de Fick nous donne en une dimension : $j = -D\frac{\partial u}{\partial x}$ avec D le coefficient de diffusion en $m^2.s^{-1}$

En combinant les deux équations précédentes nous aboutissons à l'équation différentielle à une dimension suivante : $\frac{\partial u}{\partial t} = D\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$

Démontrons la loi de Fick :

Soit un gaz présentant un gradient 1D de concentration. On étudie la variation de densité localement autour du point x_0 et de la surface élémentaire dS.

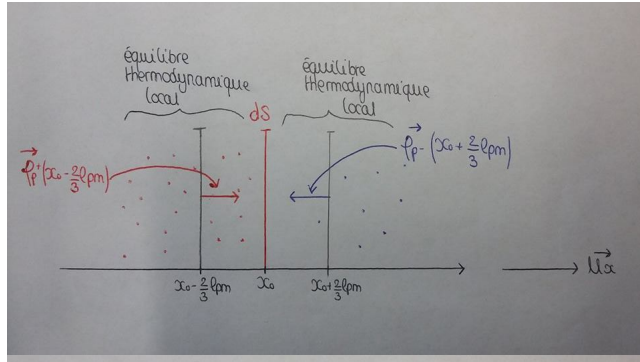


Figure 1: Schéma de la démonstration de la loi de Fick

On rappelle qu'en un point de l'espace, à l'état d'équilibre, la densité de flux de particules est de la forme : $\vec{\varphi}_p^{\pm}(x) = u(x)\frac{\vec{v}}{4}\vec{n}$

La distance minimale de x_0 à laquelle ce flux peut être défini est dx_{min} c'est à dire $\frac{2}{3}lpm$:

$$\vec{\varphi}_p^{\pm}(x_0 + \frac{2}{3}lpm) = -u(x_0 + \frac{2}{3}lpm)\frac{\vec{v}}{4}\vec{u}_x$$

$$\vec{\varphi}_p^{\pm}(x_0 - \frac{2}{3}lpm) = u(x_0 - \frac{2}{3}lpm)\frac{\vec{v}}{4}\vec{u}_x$$

Ainsi, contrairement au flux à l'état d'équilibre (globalement nul) , dans ce cas, le flux global se produisant en x_0 est donc de la forme :

$$\vec{\varphi}_p^{\pm}(x_0) = \vec{\varphi}_p^{\pm}(x_0 - \frac{2}{3}lpm) + \vec{\varphi}_p^{\pm}(x_0 + \frac{2}{3}lpm)$$

$$\begin{aligned} \overrightarrow{\varphi}_p(x_0) &= (u(x_0 - \frac{2}{3}lpm) - u(x_0 + \frac{2}{3}lpm)) \frac{\bar{v}}{4} \overrightarrow{u}_x \\ \text{or } (u(x_0 - \frac{2}{3}lpm) - u(x_0 + \frac{2}{3}lpm)) &= -\frac{du}{dx} 2dx_{min} \end{aligned}$$

$$\overrightarrow{\varphi}_p(x_0) = -\frac{du}{dx} 2 \times \frac{2}{3}lpm \times \frac{\bar{v}}{4} \overrightarrow{u}_x$$

$$\overrightarrow{\varphi}_p(x_0) = -lpm \frac{\bar{v}}{3} \frac{du}{dx} \overrightarrow{u}_x$$

$$\overrightarrow{\varphi}_p(x_0) = -D \frac{du}{dx} \overrightarrow{u}_x \text{ avec } D \text{ le coefficient de diffusion.}$$

Après généralisation : $\overrightarrow{\varphi}_p = -D \overrightarrow{grad}(u)$ avec $D = \frac{lpm \times \bar{v}}{3}$

La loi de Fick s'énonce donc ainsi : la densité de flux de particules dans un fluide est proportionnelle au gradient de la densité particulaire et au coefficient de diffusion. Le processus de diffusion rééquilibre la répartition spatiale de la concentration.

1.4 Résolution et solutions de l'équation avec terme source et terme de diffusion

On cherche à résoudre l'équation : $-\mu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial u}{\partial t} + c \frac{\partial u}{\partial x} = f(x, t)$

$$\text{Avec les conditions } \begin{cases} u(x; 0) = \varphi(x) \\ u(0; t) = \psi(t) \\ u(x; 0) = \beta(t) \end{cases}$$

On a aussi $x \in [0; 1]$ et $t; \epsilon \mathbb{R}^+$.

On cherche des solutions u de classe \mathbb{C}^2 .

Equation homogène :

$$u(x; t) = e^{x-t-\pi t} * \sin(\pi x)$$

$$\text{Avec les conditions : } \begin{aligned} u(0; t) &= u(1; t) = t \\ u(x; 0) &= e^x * \sin(\pi x) \end{aligned}$$

2 Résolution numérique de l'équation de transport

2.1 Méthode des différences finies

Dans cette partie, on cherche à résoudre numériquement l'équation de transport. Pour ce faire, nous avons eu recours à différents schémas numériques.

Principe

On cherche à approximer les dérivées partielles par des quotients finis de la forme $\frac{\partial u}{\partial t} \approx \frac{u(x, t+h) - u(x, t)}{h}$ avec h petit et fixé. Afin de calculer cette approximation, on utilisera par la suite différents schémas.

Avant de débiter ce travail, la première étape consiste à discrétiser l'espace-temps. Pour ce faire, on prend :

- N le nombre de points d'espace
- T la durée totale
- h le pas d'espace
- τ le pas de temps

Discrétiser l'espace

L'intervalle d'origine est $[0,1]$ on choisit donc de prendre un nombre de points $N \in \mathbb{N}$ et on a donc trivialement $h = \frac{1}{N}$. On définit alors la suite des points de l'espace comme suit : $x_n = x_0 + nh = nh$.

On a donc $x_0 = 0$ et $x_N = 1$.

Discrétiser le temps

L'intervalle d'origine est \mathbb{R}^+ . On ne peut pas faire comme pour l'espace étant donné que l'intervalle n'est pas fermé. On fixe donc τ petit. Si possible on choisit un τ dont la représentation machine est exacte. On étudie alors l'équation à T fixé. On définit de même la suite des points de temps : $t_p = p\tau$.

On peut alors poser les deux suites suivantes :

$$u_n^p = u(x_n, t_p) \text{ et } f_n^p = f(x_n, t_p).$$

Nous allons maintenant nous intéresser à deux schémas possibles pour la résolution numérique de notre équation.

2.2 Schéma explicite en dimension 1 du premier ordre

2.2.1 Approximation des dérivées partielles

On utilise les développements de Taylor suivants :

$$u(x_n, t_{p+1}) = u(x_n, t_p) + \tau \frac{\partial u}{\partial t}(x_n, t_p) + o(\tau)$$

$$u(x_{n-1}, t_p) = u(x_n, t_p) - h \frac{\partial u}{\partial x}(x_n, t_p) + o(h)$$

On obtient donc :

$$\frac{\partial u}{\partial t} \approx \frac{u_n^{p+1} - u_n^p}{\tau} \text{ et } \frac{\partial u}{\partial x} \approx \frac{u_n^p - u_{n-1}^p}{h}$$

Les conditions initiales nous donnent les valeurs $u_0^p = u_0(t_p) = u_0(p\tau)$ et les conditions aux limites nous donnent $u_n^0 = \varphi(x_n) = \varphi(nh)$.

2.2.2 Détermination de l'équation

On veut résoudre :

$$\frac{u_n^{p+1} - u_n^p}{\tau} + c \frac{u_n^p - u_{n-1}^p}{h} = f_n^p \Leftrightarrow u_n^{p+1} = \tau f_n^p + u_n^p \left(1 - \frac{c\tau}{h}\right) + \frac{c\tau}{h} u_{n-1}^p$$

On pose $\gamma = \frac{c\tau}{h}$ d'où :

$$u_n^{p+1} = \tau f_n^p + u_n^p (1 - \gamma) + \gamma u_{n-1}^p.$$

Remarque : Dans le cas de l'équation sans terme source, on a $\forall(n, p) \in \mathbb{N}^2, f_n^p = 0$ d'où :

$$u_n^{p+1} = u_n^p(1 - \gamma) + \gamma u_{n-1}^p.$$

2.2.3 Résolution

On peut déduire u_n^{p+1} de u_n^p et u_{n-1}^p . En connaissant les conditions initiales et limites, on déduit une donnée inconnue de deux données connues, d'où le nom de schéma explicite.

Attention : Ce schéma est simple à mettre en oeuvre, mais il présente un inconvénient majeur : il n'est pas toujours stable, il ne converge donc pas toujours vers la solution.

La convergence est acquise quand $\gamma < 1$.

2.3 Schéma de Lax-Friedrichs

Le schéma de Lax-Friedrichs, d'après Peter Lax et Kurt Friedrichs, est défini en analyse numérique comme une technique de résolution numérique des équations aux dérivées partielles de type hyperbolique, basée sur la méthode des différences finies. Cette technique repose sur l'utilisation des différences finies décentrées en temps et centrées en espace.

Soit c la vitesse du fluide avec $c > 0$: On cherche à approximer à l'aide de la méthode des différences finies l'équation suivante : $\frac{\partial u}{\partial t} + c \frac{\partial u}{\partial x} = 0$

Grâce à notre discrétisation de l'espace on peut définir les dérivées partielles comme telles : $\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{u_n^{p+1} - u_n^p}{\tau}$ et $\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{u_{n+1}^p - u_{n-1}^p}{2h}$ ce qui donne l'équation de transport suivante : $\frac{u_n^{p+1} - u_n^p}{\tau} + c * \frac{u_{n+1}^p - u_{n-1}^p}{2h} = f_n^p$

$$\text{Ce qui nous donne : } u_n^{p+1} = u_n^p - \frac{c\tau}{2h} u_{n+1}^p + \frac{c\tau}{2h} u_{n-1}^p + \tau * f_n^p$$

$$\text{En approximant par } u_n^p = \frac{u_{n+1}^p + u_{n-1}^p}{2}$$

$$\text{On obtient } u_n^{p+1} = \frac{u_{n+1}^p + u_{n-1}^p}{2} - \frac{c\tau}{h} \frac{u_{n+1}^p + u_{n-1}^p}{2} + \tau * f_n^p$$

Le terme source étant nul donc $f_n^p = 0$

$$\text{L'équation finale est } u_n^{p+1} = \frac{u_{n+1}^p + u_{n-1}^p}{2} - \frac{c\tau}{h} \frac{u_{n+1}^p + u_{n-1}^p}{2}$$

En posant $\gamma = \frac{c\tau}{h}$ nous avons $u_n^{p+1} = u_{n+1}^p(\frac{1}{2} - \frac{\gamma}{2}) + u_{n-1}^p(\frac{1}{2} + \frac{\gamma}{2})$
Donc schématiquement si on connaît u_{n+1}^p et u_{n-1}^p on connaît u_n^{p+1}

2.3.1 Stabilité du schéma explicite de Lax-Friedrichs

Nous nous sommes intéressés à la définition de ce qu'on peut appeler un schéma stable, et un schéma instable. Il s'avère qu'un schéma de différences finies, comme celui de Lax-Friedrich que l'on manipule, est dit stable si les erreurs

commises en un pas de temps ne font pas augmenter les erreurs au fil des itérations c'est à dire à chaque pas de temps. Si les erreurs diminuent et finissent par s'estomper, le schéma numérique est dit stable. Si au contraire, l'erreur croît à chaque itération, le schéma est dit instable.

Conditions de stabilité

Le schéma de Lax-Friedrichs est explicite et il est d'ordre 1. Le schéma de Lax-Friedrichs est dit stable tant que la condition suivante est satisfaite :

$$|c \frac{\Delta t}{\Delta x}| \leq 1 \text{ soit dans notre cas : } \frac{c\tau}{h} < 1$$

2.4 Schéma explicite en dimension 1 du second ordre

On cherche désormais à approximer l'équation de transport du second ordre toujours à l'aide de la méthode des différences finies.

On utilise les développements de Taylor suivants : $u(x_n; t_{p+1}) = u(x_n; t_p) + \tau \frac{\partial u}{\partial t}(x_n; t_p) + 0(\tau)$

$$u(x_{n-1}; t_p) = u(x_{n+1}; t_p) - 2h \frac{\partial u}{\partial x}(x_n; t_p) + 0(h)$$

$$2u(x_n; t_p) = u(x_{n+1}; t_p) + u(x_{n-1}; t_p) - h^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_n; t_p) + 0(h)$$

On obtient donc :

$$\frac{\partial u}{\partial t} \approx \frac{u_n^{p+1} - u_n^p}{\tau} \text{ et } \frac{\partial u}{\partial x} \approx \frac{u_{n+1}^p - u_{n-1}^p}{2h} \text{ et } \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \approx \frac{u_{n+1}^p - 2u_n^p + u_{n-1}^p}{h^2}$$

Les conditions initiales nous donnent les valeurs suivantes :

$$u_0^p = u_N^p = 0 \text{ et } u_n^0 = e^{nh} \sin \pi^{nh} = \varphi(nh)$$

2.4.1 Détermination de l'équation

On veut résoudre :

$$-\mu \frac{u_{n+1}^p - 2u_n^p + u_{n-1}^p}{h^2} + \frac{u_{n+1}^p - u_n^p}{\tau} + c \frac{u_{n+1}^p - u_{n-1}^p}{2h} = f_n^p$$

$$\Leftrightarrow u_n^{p+1} = u_n^p \left(1 - \frac{2\mu\tau}{h^2}\right) + \left(\frac{\mu\tau}{h^2} - \frac{c\tau}{2h}\right) u_{n+1}^p + \left(\frac{\mu\tau}{h^2} + \frac{c\tau}{2h}\right) u_{n-1}^p + \tau f_n^p$$

$$\text{Or } s = \frac{\mu\tau}{h^2} \text{ et } r = \frac{c\tau}{2h}.$$

$$\text{Soit : } u_n^{p+1} = u_n^p(1 - 2s) + (s - r)u_{n+1}^p + (s + r)u_{n-1}^p + \tau f_n^p$$

Remarque : Dans le cas de l'équation sans terme source, on a $\forall (n; p) \in \mathbb{N}^2, f_n^p = 0$

d'où :

$$u_n^{p+1} = u_n^p(1 - 2s) + (s - r)u_{n+1}^p + (s + r)u_{n-1}^p$$

La convergence est acquise avec les conditions $s \leq \frac{1}{2+r}$ et $rh = c \frac{h}{\mu}$.

3 Comparaison de nos différents résultats

3.1 Comparaison de l'explicite de Friedrichs avec le schéma explicite initial

Les schémas explicites que nous avons réalisés sont testés sur deux exemples.

Pour chaque exemple, il y aura 3 groupes de fichiers.

- Un groupe de fichiers contient les données du modèle explicite de Friedrichs sans terme source.
- Un groupe de fichiers contient les données du modèle explicite sans terme source.
- Un groupe de fichiers contient les données du modèle explicite avec terme de diffusion et sans terme source.

Remarque : A la différence du schéma explicite centré (réalisé l'année dernière), le schéma de Friedrichs a pour but de symétriser le traitement sur la variable temporelle tout en conservant le caractère explicite du schéma, c'est à dire le caractère centré.

Premier exemple :

On prend comme condition initiale $u_0(x) = x$ et comme condition à la limite $\varphi(t) = \sin(10\pi t)$. On prend également $c = 4$. On a, dans cet exemple, $\gamma = c\tau h = 0.8 < 1$, donc le schéma explicite est utilisable.

Deuxième exemple :

On prend comme condition initiale $u_0(x) = 0$, et comme condition aux limites $\varphi := c \times f \times H(t) \times \sin(t) = f \times H(t) \times \sin(t)$, car dans cet exemple, $c = 1$. On a $f \times H(t)$ une fonction échelon, c'est à dire que si $t > 0$, $f \times H(t) = 1$ et sinon $f \times H(t) = 0$. On a, dans cet exemple, $\gamma = c\tau h = 0.2 < 1$. Le schéma explicite est donc utilisable.

Comparons sur l'exemple 1 la méthode explicite sans terme source avec la méthode Friedrich, sans terme source également. Ici nous comparons donc deux méthodes explicites, la première qui a été réalisée l'année dernière, par le groupe qui a travaillé sur le même sujet, et notre méthode qui consiste comme vu précédemment à approximer les dérivées partielles de u_n^p . On s'attendrait donc, puisque la méthode de Friedrich fait une moyenne sur les termes, à ce que notre méthode soit moins précise. Vérifions grâce à la fonction `trace_une_courbe_base.py` et `animation.py` éventuellement si la comparaison est difficile avec la première fonction.

Ci-après sont affichées les courbes au temps $t=0.5s$ de l'explicite sans terme source et de Friedrich de l'exemple 1, l'abscisse représentant l'espace et l'ordonnée la concentration de l'espèce chimique:

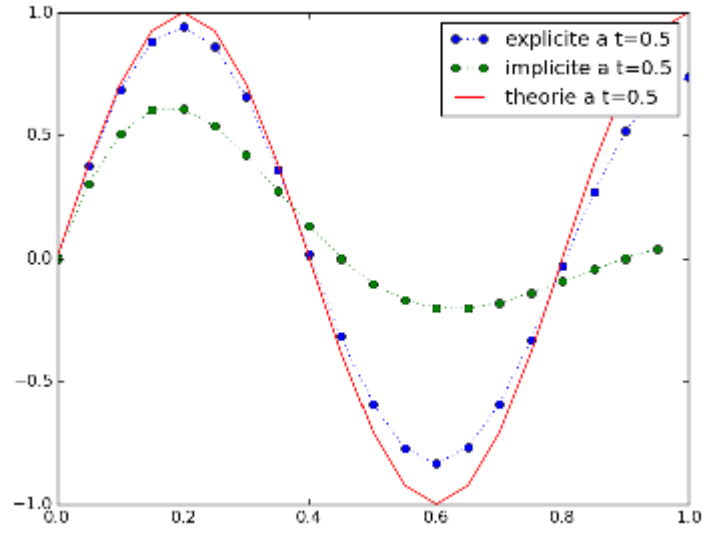


Figure 2: Courbe explicite sans terme source exemple 1

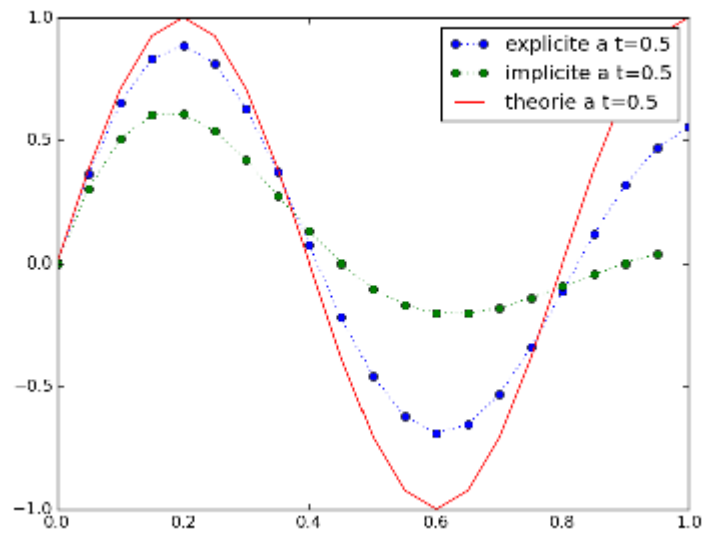


Figure 3: Courbe Friedrich exemple 1

Observations :

Tout d'abord, on remarque que, comme envisagé, la méthode Friedrich offre moins de précision que la méthode explicite. En effet, la courbe de la méthode Friedrich se rapproche moins de la courbe théorique que la méthode explicite. C'est normal car on a fait des moyennes des u_n^p au lieu d'utiliser leurs valeurs exactes. La sinusoïde a moins d'amplitude, est plus écrasée à chaque sommet. Vérifions notre affirmation en superposant les courbes théorique en jaune, explicite en rouge et explicite de Friedrich en bleu grâce au logiciel Matlab :

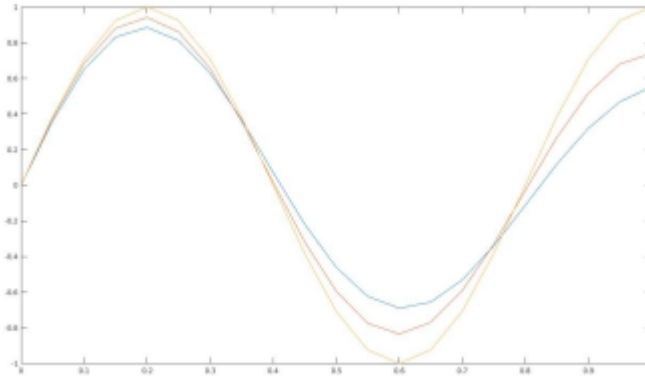


Figure 4: Superposition courbe exemple 1 théorique (jaune) explicite (rouge) explicite de Friedrich (bleu)

Comparons maintenant sur l'exemple 2 de la méthode explicite sans terme source avec la méthode Friedrich, sans terme source également. Ici nous comparons toujours les deux méthodes explicites grâce à la fonction `trace_une_courbe_base.py`, et éventuellement `animation.py` si la comparaison est difficile avec `trace_une_courbe_base.py`.

Ci-après sont affichées les courbes au temps $t=0.5s$ de l'explicite sans terme source et de Friedrich de l'exemple 2 :

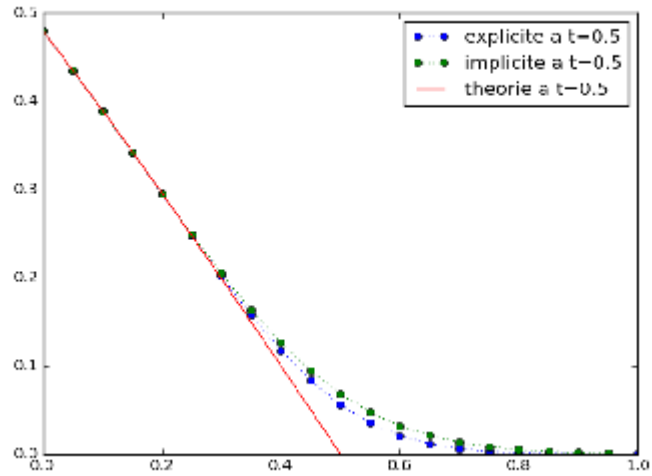


Figure 5: Courbe explicite sans terme source exemple 2

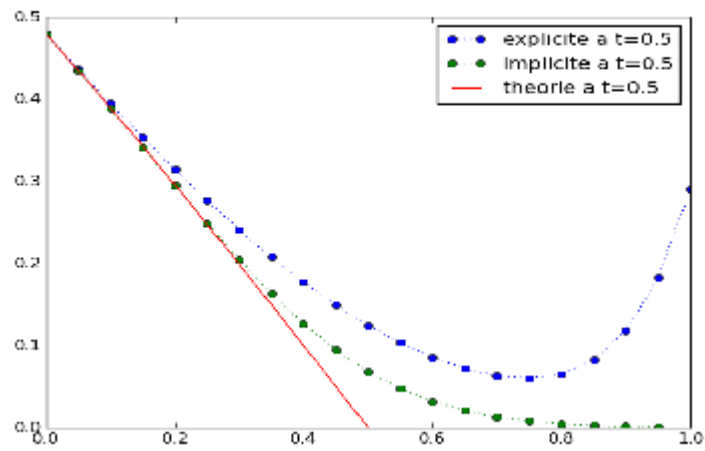


Figure 6: Courbe Friedrichs exemple 2

Observations :

On remarque encore une fois que, comme pressenti, la méthode Friedrichs offre moins de précision que la méthode explicite. En effet, la courbe de la méthode

Friedrich se rapproche moins de la courbe théorique que la méthode explicite. C'est normal car on a fait des moyennes des Unp au lieu d'utiliser leurs valeurs exactes. De plus, on remarque que la courbe explicite de Friedrich s'éloigne de la courbe théorique d'autant plus que l'on se rapproche de $x=1$. On arrive même à une situation critique après $x=0.7$ où la courbe de Friedrich redevient croissante. Vérifions notre affirmation en superposant les courbes théorique en jaune, explicite en rouge et explicite de Friedrich en bleu grâce au logiciel Matlab :

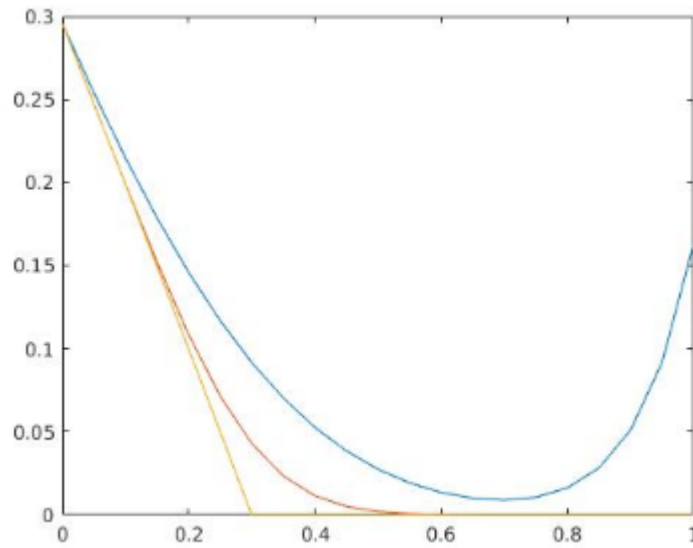


Figure 7: Courbe théorique (jaune) explicite (rouge) explicite de Friedrich (bleu)

Pour vérifier encore nos affirmations précédentes, nous allons faire une comparaison entre les méthodes Friedrich, explicite et la courbe théorique en utilisant d'autres temps. Voyons ci-après les courbes de l'exemple 1 au temps $t=0.1s$:

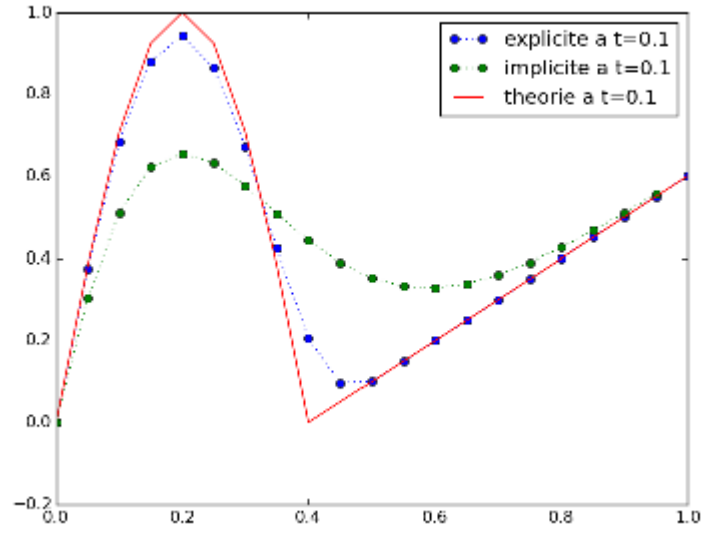


Figure 8: Courbe exemple 1 explicite $t=0.1s$

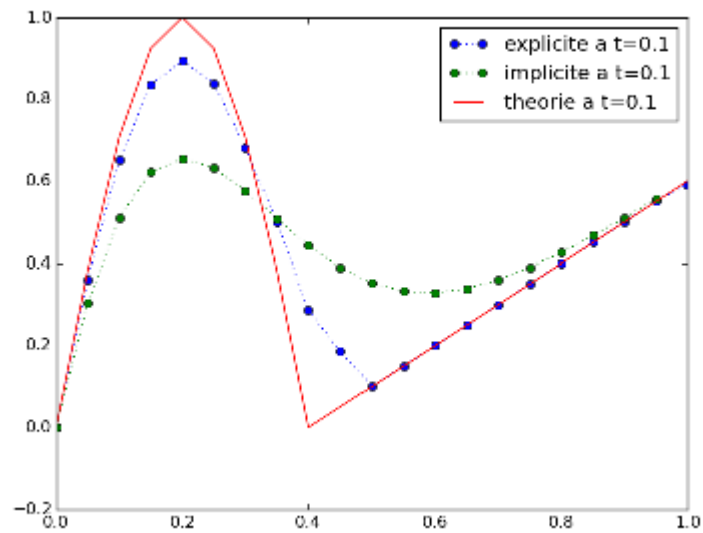


Figure 9: Courbe de Friedrich exemple 1 explicite $t=0.1s$

Et maintenant nous comparons à nouveau la méthode Friedrich et l'explicite sur l'exemple 2 et au temps $t=1s$.

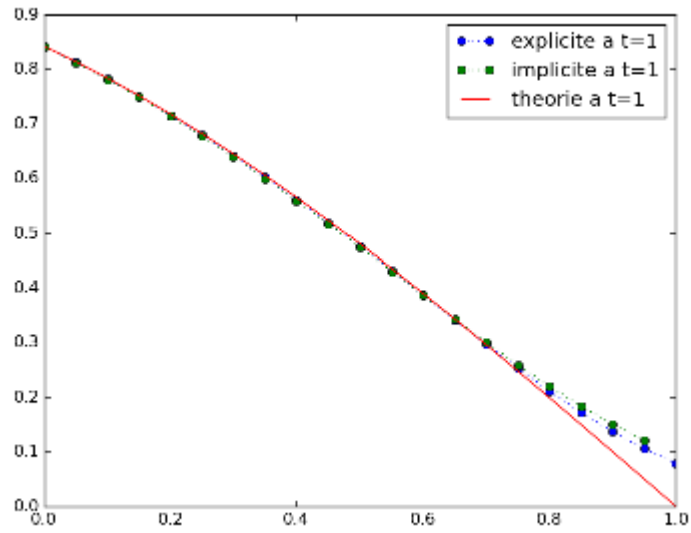


Figure 10: Courbe exemple 2 explicite $t=1s$

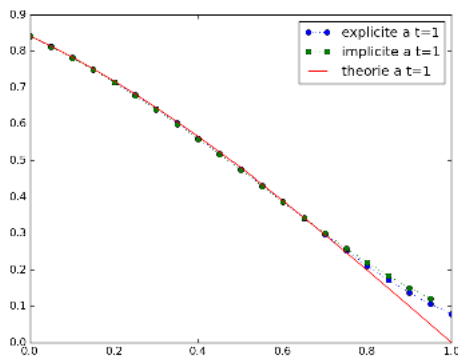


Figure 11: Courbe de Friedrich exemple 2 explicite $t=1s$

Conclusion :

On fait les mêmes observations à deux temps fixés différents et sur les exemple 1 et 2 lorsque l'on compare les méthode explicite qu'utilisait l'ancien groupe sur

ce projet et l'explicite de Friedrich actuelle : la deuxième méthode est moins précise car elle est en tout point moins rapprochée de la courbe théorique. Cela se voit non seulement à l'oeil nu, mais aussi lorsqu'on réalise la superposition des courbes sur Matlab. On fait l'observation suivante : plus x est grand à t fixé ($t=0.5s$ et $t=1s$) sur l'exemple 2, et plus la méthode de l'explicite de Friedrich admet des valeurs très éloignées de la courbe théorique.

3.2 Comparaison de la courbe théorique avec la courbe expérimentale schéma explicite avec un terme de diffusion

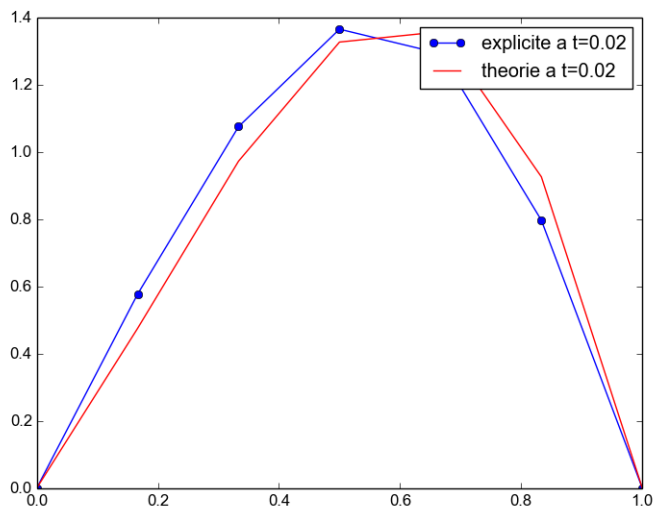


Figure 12: Courbe diffusion $t=0.02s$

L'axe des abscisses représente l'axe des x . L'axe des ordonnées représente la concentration. Le temps est fixé à $0.02s$. On prend comme condition initiale $u_0(x) = \sin(\pi x) * \exp(x)$ et comme condition à la limite $\psi(t) = 0$ et $\beta(t) = 0$. On a également $C = 2$.

Conditions de stabilité du schéma : Avant de comparer les résultats obtenus précédemment, il est important de préciser que le modèle explicite nécessite des conditions de stabilité pour pouvoir être appliqué. On a, dans cet exemple, $s = \frac{\mu\tau}{h^2} = 0.36 < \frac{1}{2+r_h} \approx 0.43$ donc le schéma explicite est utilisable.

Ces courbes ont pu être tracées avec le programme `trace_une_courbe_base.py`. On remarque que ces courbes ressemblent à une sorte de parabole. Pour un temps relativement faible de $0.02s$, on constate que la courbe explicite se rapproche de la courbe théorique. L'approximation avec ce schéma pour un temps

faible est donc plutôt bonne. Cependant, on remarque que si on augmente le temps, par exemple pour un temps de 0.8s, l'approximation devient encore meilleure puisque la courbe théorique et l'expérimentale sont encore plus proches.

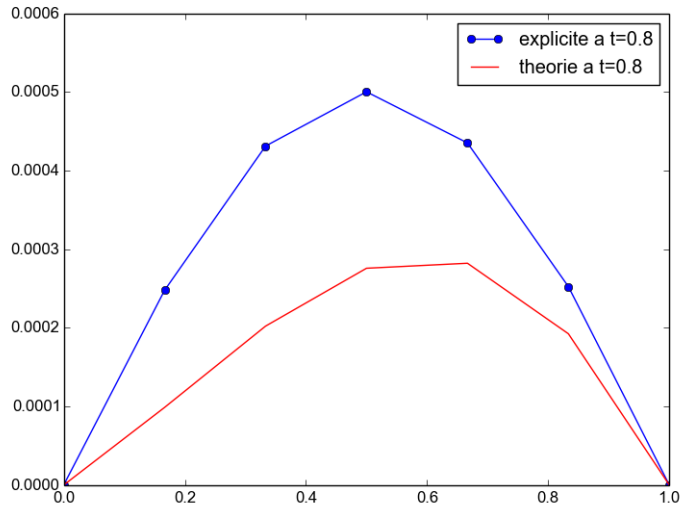


Figure 13: Courbe diffusion $t=0.8$ s

Remarque : Les deux graphiques précédents n'ont pas la même échelle. Cependant si on mesure l'écart entre les deux courbes, on trouve un écart plus faible lorsque le temps vaut 0.8s.

Part IV

Applications

4 Que représente physiquement l'équation de transport ?

L'équation de transport illustre le phénomène de convection. Ce dernier désigne l'ensemble des mouvements générés dans une masse fluide, il peut s'agir d'un liquide ou bien d'un gaz. Ce phénomène se produit du fait des différences de densité présentes en divers endroits de la masse et est également dû aux différences de températures.

Par exemple, si on chauffe une masse de gaz dans sa partie inférieure, le gaz chaud le plus voisin de la source thermique va diminuer.

Si une masse de liquide est réchauffée dans sa partie inférieure, le liquide chaud le plus voisin de la source thermique diminue en densité et tend à remonter en cédant la place à du liquide plus dense et plus froid. C'est ainsi qu'est généré un mouvement continu au sein de la masse, mouvement qui contribue au transport de la chaleur.

Par exemple, si on chauffe une certaine masse de fluide, celle-ci aura sa densité qui va diminuer et va donc monter à la surface. Au contraire, la masse de fluide ayant une température inférieure aura une densité plus élevée et va donc descendre. C'est ainsi qu'on va observer le phénomène de convection. Ceci peut-être illustré avec l'image suivante:

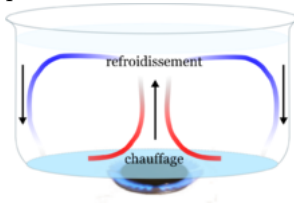


Figure 14: Processus de convection au sein d'un fluide

Il existe deux types de convection selon le type d'écoulement :

- La convection forcée : Cette dernière apparaît en présence d'un agent extérieur, par exemple un ventilateur.
- La convection naturelle : Cette dernière se produit en présence d'une différence de masse volumique au sein du fluide due à des variations de la

température.

Enfin, nous avons ajouter un terme de diffusion à l'équation de transport. Ce phénomène physique est observable lorsqu'il existe une inhomogénéité au sein du fluide. Il peut par exemple s'agir de la densité particulaire. Dès lors, la diffusion particulaire intervient en créant un courant de particules qui va tendre à homogénéiser cette grandeur, même si le fluide n'a pas de mouvements macroscopiques. C'est par exemple le cas lorsqu'on débouche un flacon de parfum. L'odeur va être ressentie, au bout d'un certain temps, à l'autre bout de la pièce, même en l'absence de courants d'air. On peut illustrer ce phénomène à l'aide de l'image suivante :

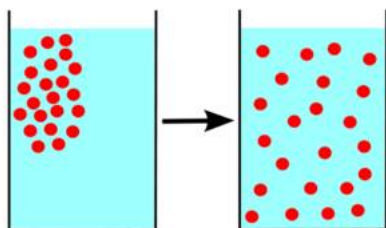


Figure 15: Processus de diffusion au sein d'un fluide

5 Application de nos programmes à une situation physique concrète

Tout comme le groupe de l'année dernière, nous allons nous au transport d'un polluant par le vent.

On considère le cas suivant :

On étudie la quantité de CO₂ au-dessus d'une ville pendant une durée de 1 heure. Cette ville s'étend sur une distance de 10Km. Une usine utilisant des hauts fourneaux 3 fois par heure est située à l'entrée Ouest de la ville. Par conséquent, il y aura une surproduction de CO₂ relâché dans l'air.

Cependant, on doit aussi tenir compte de la pollution engendrée par les voitures dans la ville. On doit donc, en plus de la fonction définie précédemment, ajouter un terme source à notre équation.

Nous n'avons malheureusement pas eu le temps de faire la modélisation physique de ce problème. Il serait donc intéressant pour le prochain groupe en charge de ce projet de se pencher sur cette question.

Part V

Conclusion et perspectives

Travail réalisé

Au cours de ce projet, nous avons pu travailler sur l'équation de transport, jusqu'alors jamais étudiée pour chacun d'entre nous. Il nous a d'abord été demandé de prendre connaissance du travail déjà réalisé par les élèves de l'année précédente. Nous avons, par la suite, travaillé sur l'ajout d'un terme de diffusion à cette équation. Il est en effet intéressant de rajouter un tel terme afin d'adapter au mieux cette équation à un problème physique concret. Ainsi, nous avons travaillé sur l'obtention mathématiques de l'équation de transport en dimension 1. Ensuite, nous nous sommes intéressés à sa résolution numérique en travaillant sur différents schémas numériques, tous explicites. Pour finir, nous nous sommes questionnés sur les différentes situations concrètes auxquelles notre équation pourrait s'appliquer, afin d'avoir une approche plus concrète de notre travail.

Apport personnel de ce projet

Ce projet, étant pour nous le premier dans le domaine de la physique, nous a permis d'approfondir certaines de nos compétences mais a également permis d'en faire émerger de nouvelles.

Sur le plan mathématique, il nous a permis d'appliquer les différents points de cours vus en M10, à un problème physique plus concret. De plus, nous avons pu découvrir une méthode de résolution numérique de ces équations.

Sur le plan informatique, nous avons pu utiliser les connaissances de nos cours d'informatique acquises durant nos deux années à l'INSA.

Sur le plan physique, ce projet a été d'autant plus intéressant puisqu'il reprenait certains aspects de nos cours de mécanique des fluides et de MRI.

Enfin, sur le plan du travail en groupe, ce projet nous a permis de mieux nous organiser en séparant le travail afin que chacun puisse travailler sur un domaine où il se sent plus à l'aise, et ce afin d'être davantage efficace dans l'avancée de notre travail.

Poursuite de ce projet

L'intérêt d'un tel projet est qu'il dispose encore de nombreuses pistes d'évolution. En effet, il serait intéressant d'étendre le modèle à deux ou trois dimensions afin de le rendre davantage réaliste et considérer de nouveaux phénomènes physiques. On peut également s'intéresser à des cas où la vitesse ne serait pas constante. Il pourrait également être intéressant d'étudier d'autres schémas numériques comme celui de Lax Wendroff ou bien ajouter un terme de diffusion virtuel au schéma de Friedrichs, et d'effectuer différentes comparaisons. Pour finir, il serait

aussi possible de faire un travail de modélisation physique à un problème de la vie courante, comme le rejet de polluants par les voitures ou usines par exemple.

Annexes

Programmes réalisés

Exemple 1 avec terme de diffusion

```
program mod1;
uses sysutils;

// Exemple 1

const   P = 100; // nombre de points dans le temps
        N = 6; // nombre de points dans l'espace
        C = 2;
        tau = 0.01;
        k = 1;
        T = P*tau; // longueur de l'intervalle de temps
        L = 1; // longueur de l'intervalle dans l'espace
        h = L/N;

type Matrice = array[0..N, 0..P] of real;

procedure ecrireAnalytiqueT(Uth : Matrice; t : Integer);
var i : Integer;
    nom_fichier : string;
    fichier : TEXT;
Begin   nom_fichier := 'resultat_th_t' + FloatToStr(t*tau) + '.txt';
        assign(fichier, nom_fichier);   rewrite(fichier);
        for i := 0 to N do
            Begin
                writeln(fichier, i*h, ' ', Uth[i][t]);
            end;
        close(fichier);
end;

procedure ecrireExpliciteT(Uexp : Matrice; t : Integer);
var i : Integer;
    nom_fichier : string;
    fichier : TEXT;
Begin   nom_fichier := 'resultat_exp_t' + FloatToStr(t*tau) + '.txt';
        assign(fichier, nom_fichier);
        rewrite(fichier);
        for i := 0 to N do
            Begin
                writeln(fichier, i*h, ' ', Uexp[i][t]);
            end;
end;
```

```

        close(fichier);
end;

var xi, ti : Integer;
    x, s, temps, r, rh: real;
    Uexp, Uth : Matrice;

Begin
    r := (C*tau)/2*h;
    s := (k*tau)/sqr(h);
    rh:= C*h/k;
    // on entre les vecteurs U0 et phi pour la matrice solution explicite
    for xi := 1 to N do
        for ti := 1 to P do
            begin
                x:= xi*h;
                temps:= ti*tau;
                Uexp[0, ti]:=0;
                Uexp[1, ti]:=0;
                Uexp[xi, 0] := SIN(PI*x)*exp(x);
            end;

// on calcule la solution numérique explicite
        for ti := 0 to P do
            for xi := 1 to N-1 do
                Uexp[xi][ti+1] := (1-2*s)*Uexp[xi][ti] + (s+r)*Uexp[xi-1][ti];
            end;

// on calcule la solution analytique
            for ti := 0 to P do
                for xi := 0 to N do
                    begin
                        x := xi * h;
                        temps := ti * tau;
                        Uth[0, ti]:=0;
                        Uth[1, ti]:=0;
                    end;

                end;

            for ti := 0 to P do
                for xi := 0 to N-1 do
                    begin
                        x := xi * h;
                        temps := ti * tau;
                        Uth[xi, ti] := SIN(PI*x)*exp(x-temps-sqr(PI)*temps);
                    end;
                end;
            end;
        end;
    end;
end;

```

```

writeln('On doit avoir  $S < (1/(2+rh))$  ');
writeln('Ici,  $S =$ ', s);
writeln(',  $(1/(2+rh)) =$ ', (1/(2+rh)));
if (s > (1/(2+rh))) then
    writeln('Ce n est pas le cas ici...')
else
Begin
    writeln('La condition est remplie, donc on peut utiliser le mode
for ti := 0 to P do
    ecrireExpliciteT(Uexp, ti);

    for ti := 0 to P do
    ecrireAnalytiqueT(Uth, ti);
end
end.

```

Exemple 1 schéma Lax Friedrichs

```

program mod1; uses sysutils;
// Exemple 1
const   P = 100; // nombre de points dans le temps
        N = 20; // nombre de points dans l'espace
        C = 4;
        tau = 0.01;
        T = P*tau; // longueur de l'intervalle de temps
        L = 1; // longueur de l'intervalle dans l'espace
        h = L/N;

type Matrice = array [0..N, 0..P] of real;

function U0 (x : real) : real;
begin
    U0:=x;
end;
function phi (t : real) : real;
begin
    phi := sin(10*PI*t)
end;

procedure ecrireAnalytiqueT(Uth : Matrice; t : Integer);
var i : Integer;
    nom_fichier : string;

```

```

        fichier : TEXT;
Begin
    nom_fichier := 'resultat_th_t' + FloatToStr(t*tau) + '.txt';
    assign(fichier , nom_fichier);
    rewrite(fichier);
    for i := 0 to N do
    Begin
        writeln(fichier , i*h, ' ', Uth[i][t]);
    end;
    close(fichier);
end;
procedure ecrireExpliciteT(Uexp : Matrice; t : Integer);
var i : Integer;
    nom_fichier : string;
    fichier : TEXT;
Begin
    nom_fichier := 'resultat_exp_t' + FloatToStr(t*tau) + '.txt';
    assign(fichier , nom_fichier);
    rewrite(fichier);
    for i := 0 to N do
    Begin
        writeln(fichier , i*h, ' ', Uexp[i][t]);
    end;
    close(fichier);
end;
procedure ecrireImpliciteT(Uimp : Matrice; t : Integer);
var i : Integer;
    nom_fichier : string;
    fichier : TEXT;
Begin
    nom_fichier := 'resultat_imp_t' + FloatToStr(t*tau) + '.txt';
    assign(fichier , nom_fichier);
    rewrite(fichier);
    for i := 0 to N-1 do
    Begin
        writeln(fichier , i*h, ' ', Uimp[i][t]);
    end;
close(fichier);
end;
var xi, ti : Integer;
    x, temps, r : real;
    Uexp, Uimp, Uth : Matrice;
Begin
    r := (C*tau)/h;
    // on entre les vecteurs U0 et phi pour la matrice solution explicite
    for xi := 1 to N do

```

```

        Uexp[xi,0] := U0(xi*h);
for ti := 1 to P do
    Uexp[0,ti] := phi(ti*tau);
// on entre les vecteurs U0 et phi pour la matrice solution implicite
for xi := 1 to N do
    Uimp[xi,0] := U0(xi*h);
for ti := 1 to P do
    Uimp[0,ti] := phi(ti*tau);
// on calcule la solution numérique explicite
for ti := 0 to P - 1 do
    for xi := 1 to N do
        Uexp[xi][ti+1] := ((1/2)*(1-r))*Uexp[xi+1][ti] + ((1/2)*
// on calcule la solution numérique implicite
for ti := 0 to P-1 do
    for xi := 0 to N-1 do
        Uimp[xi+1,ti+1] := (1/(1+r))*(Uimp[xi+1,ti]+r*Uimp[xi,ti]
// on calcule la solution analytique
for xi := 0 to N do
    for ti := 0 to P do
        begin
            x := xi * h;
            temps := ti * tau;
            if (c*temps) < x then
                Uth[xi,ti] := U0(x - C*temps)
            else
                Uth[xi,ti] := phi(temps - x/C);
        end;
end;

writeln('On doit avoir R < 1');
writeln('Ici , R = ', (C*tau)/h);
if ((C*tau)/h > 1) then
    writeln('Ce n est pas le cas ici...')
else
Begin
    writeln('La condition est remplie , donc on peut utiliser le modè
for ti := 0 to P do
    ecrireExpliciteT(Uexp, ti);
for ti := 0 to P do
    ecrireImpliciteT(Uimp, ti);
for ti := 0 to P do
    ecrireAnalytiqueT(Uth, ti);
end;
end.

```

Exemple 2 schéma Lax Friedrichs

```
program mod1; uses sysutils;
// Exemple 1
const P = 100; // nombre de points dans le temps
N = 20; // nombre de points dans l'espace
C = 4;
tau = 0.01;
T = P*tau; // longueur de l'intervalle de temps
L = 1; // longueur de l'intervalle dans l'espace
h = L/N;

type Matrice = array[0..N, 0..P] of real;

function U0 (x : real) : real;
begin
    U0:=x;
end;
function phi (t : real) : real;
begin
    phi := sin(10*PI*t)
end;

procedure ecrireAnalytiqueT(Uth : Matrice; t : Integer);
var i : Integer;
    nom_fichier : string;
    fichier : TEXT;
Begin
    nom_fichier := 'resultat_th_t' + FloatToStr(t*tau) + '.txt';
    assign(fichier, nom_fichier);
    rewrite(fichier);
    for i := 0 to N do
    Begin
        writeln(fichier, i*h, ' ', Uth[i][t]);
    end;
    close(fichier);
end;

procedure ecrireExpliciteT(Uexp : Matrice; t : Integer);
var i : Integer;
    nom_fichier : string;
    fichier : TEXT;
Begin
    nom_fichier := 'resultat_exp_t' + FloatToStr(t*tau) + '.txt';
```



```

    assign(fichier , nom_fichier);
    rewrite(fichier);
    for i := 0 to N do
    Begin
        writeln(fichier , i*h, ' ', Uexp[i][t]);
    end;
    close(fichier);
end;
procedure ecrireImpliciteT(Uimp : Matrice; t : Integer);
var i : Integer;
    nom_fichier : string;
    fichier : TEXT;
Begin
    nom_fichier := 'resultat_imp_t' + FloatToStr(t*tau) + '.txt';
    assign(fichier , nom_fichier);
    rewrite(fichier);
    for i := 0 to N-1 do
    Begin
        writeln(fichier , i*h, ' ', Uimp[i][t]);
    end;
close(fichier);
end;
var xi, ti : Integer;
    x, temps, r : real;
    Uexp, Uimp, Uth : Matrice;
Begin
    r := (C*tau)/h; // on entre les vecteurs U0 et phi pour la matrice
    for xi := 1 to N do
        Uexp[xi,0] := U0(xi*h);
    for ti := 1 to P do
        Uexp[0,ti] := phi(ti*tau);
// on entre les vecteurs U0 et phi pour la matrice solution implicite
    for xi := 1 to N do
        Uimp[xi,0] := U0(xi*h);
    for ti := 1 to P do
        Uimp[0,ti] := phi(ti*tau);
// on calcule la solution numérique explicite
    for ti := 0 to P - 1 do
        for xi := 1 to N do
            Uexp[xi][ti+1] := ((1/2)*(1-r))*Uexp[xi+1][ti] + ((1/2)*
// on calcule la solution numérique implicite
    for ti := 0 to P-1 do
        for xi := 0 to N-1 do
            Uimp[xi+1,ti+1] := (1/(1+r))*(Uimp[xi+1,ti]+r*Uimp[xi,ti]
// on calcule la solution analytique
    for xi := 0 to N do

```

```

    for ti := 0 to P do
      begin
        x := xi * h;
        temps := ti * tau;
        if (c*temps) < x then
          Uth[xi, ti] := U0(x - C*temps)
        else
          Uth[xi, ti] := phi(temps - x/C);
        end;
      end;

    writeln('On doit avoir  $R < 1$ ');
    writeln('Ici,  $R =$ ', (C*tau)/h);
    if ((C*tau)/h > 1) then
      writeln('Ce n est pas le cas ici...')
    else
      Begin
        writeln('La condition est remplie, donc on peut utiliser le modèle');
        for ti := 0 to P do
          ecrireExpliciteT(Uexp, ti);
        for ti := 0 to P do
          ecrireImpliciteT(Uimp, ti);
        for ti := 0 to P do
          ecrireAnalytiqueT(Uth, ti);
        end;
      end;
    end.

```

Bibliographie

- http://www.ufrmeca.univ-lyon1.fr/~buffat/COURS/COURSDF_HTML/node34.html
- http://www.ufrmeca.univ-lyon1.fr/~buffat/COURS/COURSDF_HTML/node25.html
- <https://tel.archives-ouvertes.fr/tel-00308762/document>
- <https://tel.archives-ouvertes.fr/tel-00092407/document>
- http://www.maths.univ-evry.fr/pages_perso/masgallic/IUP2_EDP.pdf
- http://perso.ensta-paristech.fr/~fliss/Sonia_Fliss_web_page/Enseignement_files/PolyMA103_2012.pdf
- <http://www.cmls.polytechnique.fr/perso/golse/MAT567-11/POLY567.pdf>
- http://laurent.risser.free.fr/THESE/coursM11_2006.pdf
- http://perso.ensta-paristech.fr/~fliss/Sonia_Fliss_web_page/Enseignement_files/Amphi2_TransportM.pdf
- http://irfu.cea.fr/Projets/COAST/methodes_numeriques_PDE_1.pdf