

**Bureau d'Etude :**  
**Résolution numérique d'une équation aux dérivées partielles**  
**d'advection-diffusion par une méthode de type Volumes Finis**

*T. Bonometti, A. Bayle, A. Colombie, G. Latour*

On souhaite simuler numériquement le mélange de deux composés chimiques, de concentrations initiales  $C_0$  et  $C_1$ , susceptibles de réagir ensemble dans un système modèle d'épuration. Le polluant (matière organique, composé azoté, micropolluant, etc) a une concentration initiale  $C_0$  et le composé chimique permettant son élimination a une concentration  $C_1$ . L'objectif ici est d'étudier le mélange dans deux dispositifs idéalisés différents (figure 1). **L'étude porte uniquement sur le premier dispositif – système en I.** Le deuxième dispositif pourra éventuellement et à la discrétisation des étudiants être traité en fonction de l'avancement du projet.

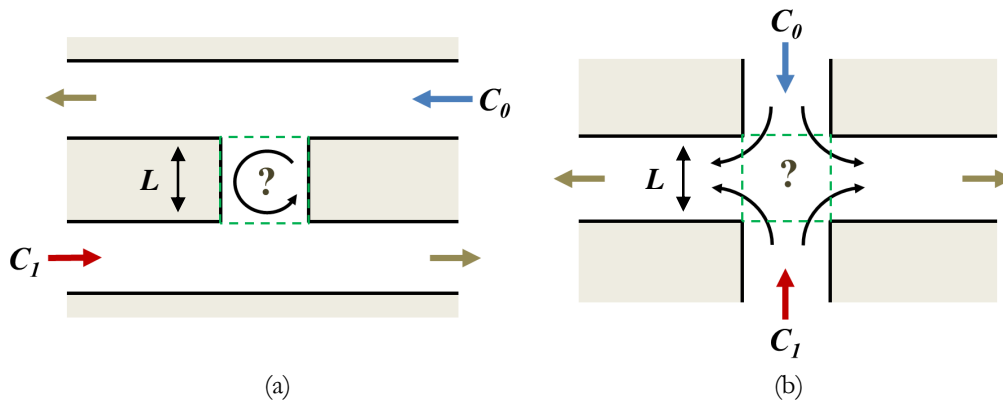


Figure 1 : Les deux dispositifs envisagés : (a) système en I ; (b) système en croix. Deux composés chimiques de concentration  $C_0$  et  $C_1$  sont injectés et se mélangent dans la zone délimitée par le cadre en pointillés verts.

Un fluide transporte à la vitesse  $\mathbf{u}$  deux composés chimiques de diffusivités massiques supposées identiques et notées  $D$  et de concentrations  $C_0(\mathbf{x},t)$  et  $C_1(\mathbf{x},t)$  dans des canaux de largeur caractéristique  $L$ . Pour simplifier le problème, nous supposons ici que nous avons la conditions suivante :  $C_0(\mathbf{x},t) + C_1(\mathbf{x},t) = 1$  en tout point de l'espace et en tout temps. Ceci nous permet de simplifier le problème en ne calculant qu'une seule concentration, notée  $C(\mathbf{x},t)$ . Le domaine de calcul choisi ici correspond au cadre vert de la figure 1 (voir aussi figure 2). Nous noterons la concentration initiale des deux composés chimiques  $C_0$  et  $C_1$  et nous supposerons qu'initialement la concentration dans le domaine de calcul vaut  $C_0$ . Lorsque ce n'est pas précisé, les valeurs par défaut sont :  $D=10^{-2}\text{m}^2/\text{s}$ ,  $C_0=0$ ,  $C_1=1$ ,  $L=1\text{m}$ .

Le problème est supposé bidimensionnel, l'écoulement étant considéré comme invariant dans la profondeur des canaux. Le champ de vitesse  $\mathbf{u} = u \mathbf{e}_x + v \mathbf{e}_y$  est ici modélisé par l'expression suivante

$$u(x, y) = \alpha \sin\left(\frac{\pi x}{L} - \beta \frac{\pi}{2}\right) \cos\left(\frac{\pi y}{L} - \beta \frac{\pi}{2}\right), \quad (1)$$

$$v(x, y) = -\alpha \cos\left(\frac{\pi x}{L} - \beta \frac{\pi}{2}\right) \sin\left(\frac{\pi y}{L} - \beta \frac{\pi}{2}\right), \quad (2)$$

avec  $\alpha$  et  $\beta$  deux constantes positives (par défaut, on prendra  $\alpha=0.1\text{m/s}$ ). Pour le système en I,  $\beta = 0$ , tandis que pour le système en croix,  $\beta = 1$  (voir figure 2).

L'évolution spatio-temporelle de la concentration dans un écoulement de vitesse connue  $\mathbf{u}$  est donnée par l'équation :

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}C) = \nabla \cdot (D \nabla C). \quad (3)$$

Le problème dépend d'un seul paramètre noté  $Pe$  et appelé nombre de Péclet massique défini ici par  $Pe = \alpha L / D$ . Le domaine de calcul est fixe dans le temps et est défini dans l'espace par les points A, B, C et D (figure 2).

On considère les conditions aux limites suivantes :

- frontière en  $y=0$  (AB) : concentration imposée telle que  $C=C_i$  (condition de Dirichlet)
- frontière en  $y=L$  (CD) : concentration imposée telle que  $C=C_o$  (condition de Dirichlet)
- frontières en  $x=0$  (AD) et en  $x=L$  (BC) :
  - système en I : condition d'imperméabilité telle que  $(\partial C / \partial x) = 0$  (condition de Neumann)
  - système en croix : condition de « sortie » telle que  $(\partial C / \partial x)_{ouest} = (\partial C / \partial x)_{est}$ .

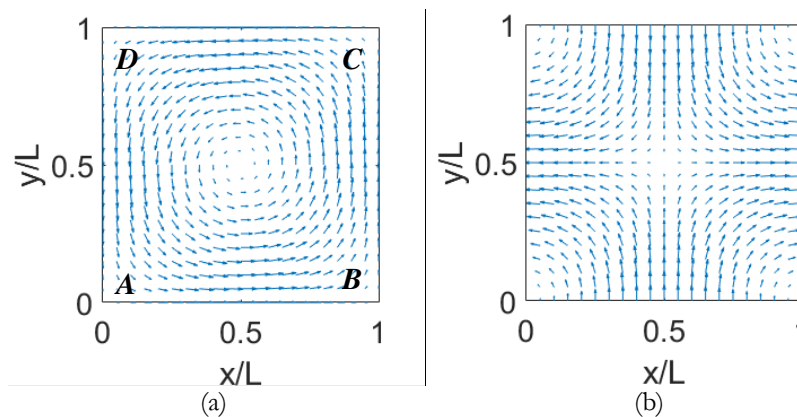


Figure 2 : Géométrie du problème (cf le cadre en pointillés verts de la figure 1) et champs de vitesse (1)-(2) associés : (a) système en I ( $\beta = 0$ ), (b) système en croix ( $\beta = 1$ ).

## Cahier des charges

### Objectifs

Vous devrez produire un code qui calcule la distribution de la concentration  $C$  dans le domaine ABCD pour un temps  $t = t_{final}$ . Pour atteindre cet objectif, vous pourrez donner à votre code le degré de sophistication de votre choix, mais en respectant un niveau minimum :

- Modélisation par la méthode des Volumes Finis
- Maillage régulier en  $x$ , irrégulier en  $y$  (cf équation 4 donnée ci-après)
- Schéma amont pour le terme advectif
- Schéma centré pour le terme diffusif
- Intégration temporelle par la méthode d'Euler explicite

### Travail demandé

Durant les 3 séances en salle de cours, vous devrez discrétiser l'équation (3) en formulation « Volumes Finis » tout en respectant les schémas et les conditions limites définis ci-dessus. Ensuite, vous écrirez un algorithme permettant de résoudre numériquement cette discrétisation ainsi qu'une ébauche du code. Vous présenterez la discrétisation, l'algorithme et l'ébauche du code aux enseignants avant la fin de la troisième séance.

- Vous choisirez votre maillage ( $N_x \times N_y$  volumes de calcul séparés par  $(N_x+1) \times (N_y+1)$  noeuds) de telle sorte que le maillage soit à variables décalées (figure 3).

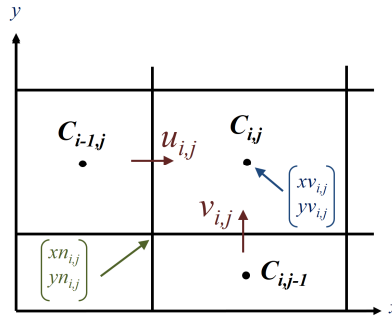


Figure 3 : Maillage à variables décalées : définition de la localisation de la concentration  $C$ , des composantes  $u$  et  $v$  de la vitesse et notation utilisée pour définir la géométrie. Les indices  $i$  et  $j$  correspondent aux numéros de cellules respectivement dans les directions  $x$  et  $y$ .

- L'algorithme proposé sera codé en Fortran 90 (travail en salle machines). Le code doit être monolithique (un seul exécutable), composé de plusieurs unités de programmation (programme principal, sous-routines, fonctions) et doit comporter, d'un point de vue fonctionnel, trois parties :

1. Pré-processeur : lecture des données physiques et numériques à partir d'un fichier texte, construction du maillage, calcul du champ de vitesse en chaque point du maillage, calcul du pas de temps (défini plus bas), initialisation des concentrations.
2. Noyau du calcul (solveur) : calcul des flux, traitement des conditions aux limites, avancement temporel de la solution.
3. Post-processeur : sortie des résultats au format ParaView pour visualiser les champs 2D (subroutine VTSSWriter.f90 fournie, cf Moodle), sortie des résultats en format  $x-y$  pour tracer des courbes avec gnuplot, xmgrace, Python ou ParaView.

Conseil : coder d'abord les parties 1 et 3 (pour visualiser maillage, champs de vitesse et de concentration).

### Quelques étapes de développement

- Maillage non-uniforme en  $y$

Il peut être souhaitable de raffiner le maillage proche des zones de mélange. On utilisera pour cela l'expression suivante donnant la position verticale du noeud de maillage en fonction de celle du noeud de maillage obtenu dans le cas régulier :

$$y_{irreg}(y_{reg}) = y_{reg} + \gamma \frac{L}{3\pi} \sin\left(\frac{2\pi}{L} y_{reg}\right), \quad (4)$$

avec, pour le système en I,  $\gamma = -1$ , et pour le système en croix,  $\gamma = 1$ . Développer une sous-routine de création du maillage. Visualiser le maillage obtenu et vérifier qu'il correspond bien à l'attendu.

- Calcul du pas de temps

Développer une sous-routine pour calculer le pas de temps de la simulation de la façon suivante :

$$\Delta t = \min \left\{ 1 / \left( \frac{|u(x,y)|}{CFL \Delta x} + \frac{|v(x,y)|}{CFL \Delta y} + \frac{D}{R \Delta x^2} + \frac{D}{R \Delta y^2} \right) \right\}, \quad (5)$$

où  $CFL$  et  $R$  sont des paramètres numériques en entrée du problème, appelés respectivement nombre de Courant-Friedrichs-Lewy et nombre de Fourier.

- Construction du champ de vitesse

Développer une subroutine pour construire le champ de vitesse dans l'ensemble du domaine. Visualiser le champ obtenu et vérifier qu'il correspond bien au profil attendu.

### Quelques étapes de validation

*NB : lors de cette étape, il est possible (mais non-obligatoire) de modifier les conditions limites.*

- Advection pure 1D (maillage uniforme)

*NB : Ce test requiert des conditions initiales différentes de celles précisées plus haut.* Fixer  $D=0$ . Initialiser la concentration à  $C_l$  dans la première moitié gauche du domaine et à  $C_0$  dans la seconde moitié droite du domaine ainsi qu'une vitesse uniforme horizontale dans tout le domaine ( $u = \alpha, v = 0$ ). Observer la distribution de la concentration pour différents  $t$ . Comparer les solutions obtenues avec la solution analytique à l'aide de l'analyse des champs 2D et des tracés de  $C(x)_{y=L/2}$ . Analyser l'influence du nombre de Courant (CFL) sur les résultats. Refaire le même test dans la direction  $y$  ( $C_l$  dans la première moitié basse du domaine et  $C_0$  dans la seconde moitié haute du domaine et  $u = 0, v = \alpha$ ).

- Diffusion pure 1D (maillage uniforme)

*NB : Ce test requiert des conditions initiales différentes de celles précisées plus haut.* Fixer  $u=0$  dans tout le domaine. Imposer une concentration  $C_l$  dans la première moitié basse du domaine et  $C_0$  dans la seconde moitié haute du domaine. Observer la distribution de la concentration pour différents  $t$  en s'assurant que les conditions aux limites n'influencent pas la solution au centre du domaine. Comparez la solution obtenue avec la solution analytique à l'aide des tracés  $C(x)_{y=L/2}$ . La solution analytique est donnée par

$$\frac{C(y,t) - C_0}{C_l - C_0} = \frac{1}{2} \left[ 1 - \operatorname{erf} \left( \frac{y - L/2}{2\sqrt{Dt}} \right) \right] \quad \text{avec} \quad \operatorname{erf}(y) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^y \exp(-\tau^2) d\tau. \quad (6)$$

*NB : la fonction « erf » existe en Fortran 90 et n'a pas besoin d'être programmée.*

Analyser l'influence du nombre de Fourier (R) sur les résultats. Refaire le même test dans la direction  $x$  ( $C_l$  dans la première moitié gauche du domaine et  $C_0$  dans la seconde moitié droite du domaine).

### Exploitation du programme

- Calculer le champ stationnaire de concentration pour un nombre de Péclet massique donné. En déduire la concentration moyenne (moyennée sur le domaine de calcul). Proposer un critère permettant de vérifier que la solution stationnaire est atteinte.
- Choisir le nombre des volumes de sorte que la solution ne dépende pas du maillage (convergence en maillage).
- Pour le système choisi, faire une campagne de simulations en prenant comme valeur du nombre de Péclet massique  $Pe=0.5, 5, 50$ , en faisant varier la diffusivité massique, et déterminer le temps  $t_{90\%}$  à partir duquel la concentration moyenne a atteint 90% de la concentration moyenne stationnaire (aux temps « longs »). Commenter les résultats obtenus.
- Répéter les deux études précédentes, en faisant varier non pas la diffusivité massique, mais la vitesse de l'écoulement. Commenter.