

# LMECA2660 - Numerical methods in fluid mechanics

## Convection and Diffusion Equation

Thanh-Son Tran 8116-12-00

Mars 2017

### 1 Introduction

Au cours de ce homework, nous avons été invité à simuler une convection associé avec une diffusion en résolvant ainsi l'équation:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + c \frac{\partial u}{\partial x} = \nu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (1)$$

Pour se faire, nous allons utilisé une fonction de Gauss discrétisé, et des méthodes numériques, de ce fait nous commencerons en grande partie à analyser ces outils numériques afin de mieux comprendre le comportement de nos simulations. Nous analyserons ensuite les résultats obtenus, à la fois pour la convection pure, et pour la convection-diffusion.

### 2 Discrete Fourier Series

La fonction de Gauss est une fonction initialement défini sur un domaine non borné tel que:

$$u(x) = \frac{Q}{\sqrt{\pi\sigma_0^2}} \exp\left(-\frac{x^2}{\sigma_0^2}\right) \quad (2)$$

Toutefois, si on veut l'encoder dans un ordinateur, il va falloir le discrétiser, ainsi nous allons l'étudier à l'aide des séries de Fourier.

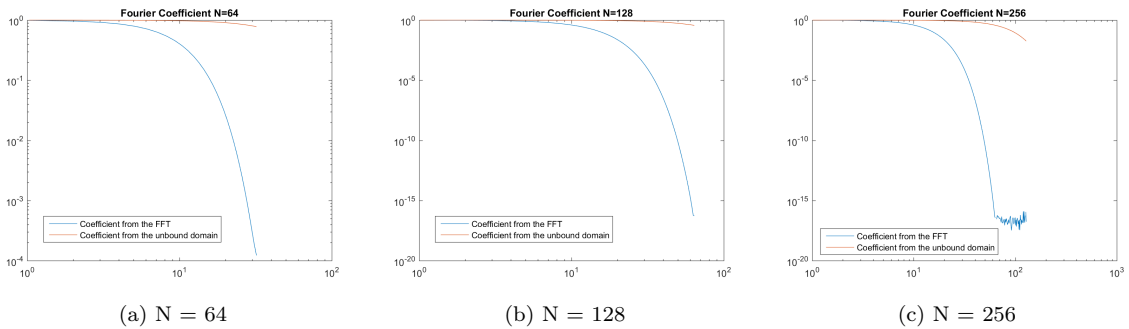


Figure 1: Comparaison entre la série de Fourier et des coefficients de Fourier pour un  $N = 64, 128$  et  $256$

*Toutefois, au vue des graphs dans la figure 1, il semblerait que je n'ai pas effectué correctement ce qui était demander. Je possède encore quelques lacunes dans cette matière.*

### 3 Centered and Partially Decentered Scheme

Afin calculer le terme convectif,  $\frac{\partial u}{\partial x}$ , nous utiliserons les différences finies que nous connaissons bien les schémas centrés classique d'ordre 2, et 4, pour une dérivée première défini respectivement ci-dessous.

$$\begin{aligned}\frac{\partial u}{\partial x} &= \frac{U_{i+1} - U_{i-1}}{2h} \\ \frac{\partial u}{\partial x} &= \frac{-U_{i+2} + 8U_{i+1} - 8U_{i-1} + U_{i+1}}{12h}\end{aligned}\quad (3)$$

Toutefois, nous nous intéresserons à un modèle décentré qui ne requiert que  $U_{i-2}$ ,  $U_{i-1}$ ,  $U_i$ , et  $U_{i+1}$ . Nous allons donc développé ces termes à l'aide des polynômes de Taylor si bien que nous retrouvons les polynômes suivants:

$$\begin{aligned}U_{i+1} &= U_i + \frac{\partial u}{\partial x}h + \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \frac{h^2}{2} + \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \frac{h^3}{6} + \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} \frac{h^4}{24} + \dots \\ U_{i-1} &= U_i - \frac{\partial u}{\partial x}h + \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \frac{h^2}{2} - \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \frac{h^3}{6} + \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} \frac{h^4}{24} + \dots \\ U_{i-2} &= U_i - 2\frac{\partial u}{\partial x}h + 4\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \frac{h^2}{2} - 8\frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \frac{h^3}{6} + 16\frac{\partial^4 u}{\partial x^4} \frac{h^4}{24} + \dots\end{aligned}\quad (4)$$

De ce fait, nous pouvons établir une relation entre eux afin d'obtenir une expression de la dérivée première, si bien que nous retrouvons donc un systèmes d'équations représenté ci-dessous:

$$\begin{aligned}&= \alpha(U_{i+1} - U_i) + \beta(U_{i-1} - U_i) + \gamma(U_{i-2} - U_i) \\ &= (\alpha - \beta - 2\gamma)\frac{\partial u}{\partial x}h + (\alpha + \beta + 4\gamma)\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \frac{h^2}{2} + (\alpha - \beta - 8\gamma)\frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \frac{h^3}{6} + \mathcal{O}(h^4)\end{aligned}\quad (5)$$

Ainsi, en éliminant les autres termes de dérivée que  $\frac{\partial u}{\partial x}$ , nous obtenons un schéma décentré suivant:

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{U_{i-2} - 6U_{i-1} + 3U_i + 2U_{i+1}}{6h} + \mathcal{O}(h^4)\quad (6)$$

Le schéma obtenu est d'ordre  $\mathcal{O}(h^3)$ , avec une erreur de troncation de  $\mathcal{O}(h^4)$  comme nous pouvons le constater dans la formulation obtenu. Nous étudierons maintenant la stabilité de ce schéma, pour se faire pour faisons une analyse modale. Pour  $u_i(t) = \sum_j \hat{U}_j(t)e^{ik_j x_i}$ , nous obtenons les relations suivantes en utilisant le schéma décentré que nous avons trouvé :

$$\begin{aligned}\frac{\partial u}{\partial x} &= \frac{\hat{U}_j(t)e^{ik_j x_{i-2}} - 6\hat{U}_j(t)e^{ik_j x_{i-1}} + 3\hat{U}_j(t)e^{ik_j x_i} + 2\hat{U}_j(t)e^{ik_j x_{i+1}}}{6h} \\ &= \hat{U}_j(t)\frac{e^{ik_j x_{i-2}} - 6e^{ik_j x_{i-1}} + 3e^{ik_j x_i} + 2e^{ik_j x_{i+1}}}{6h} \\ &= \hat{U}_j(t)\frac{e^{-2ik_j h} - 6e^{-ik_j h} + 3 + 2e^{ik_j h}}{6h}e^{ik_j x_i}\end{aligned}\quad (7)$$

En utilisant la relation,  $\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial \hat{U}}{\partial t}e^{ik_j x_i}$ , nous obtenons les résultats suivant:

$$\begin{aligned}\frac{\partial \hat{U}}{\partial t}e^{ik_j x_i} &= (-c)\hat{U}_j(t)\frac{e^{-2ik_j h} - 6e^{-ik_j h} + 3 + 2e^{ik_j h}}{6h}e^{ik_j x_i} \\ \frac{\partial \hat{U}}{\partial t} &= (-c)\hat{U}_j(t)\frac{e^{-2ik_j h} - 6e^{-ik_j h} + 3 + 2e^{ik_j h}}{6h} \\ \lambda &= (-c)\frac{e^{-2ik_j h} - 6e^{-ik_j h} + 3 + 2e^{ik_j h}}{6h}\end{aligned}\quad (8)$$

En sachant qu'en pure convection, nous avons  $\frac{\partial u}{\partial t} = \lambda \hat{U}$  pour le cas exact, nous pouvons maintenant, grâce aux résultats obtenu analyser les erreurs de phases et d'amplitude. Pour obtenir le graphe des erreurs d'amplitudes, nous calculons le module des  $\lambda_k$  de chaque méthodes.

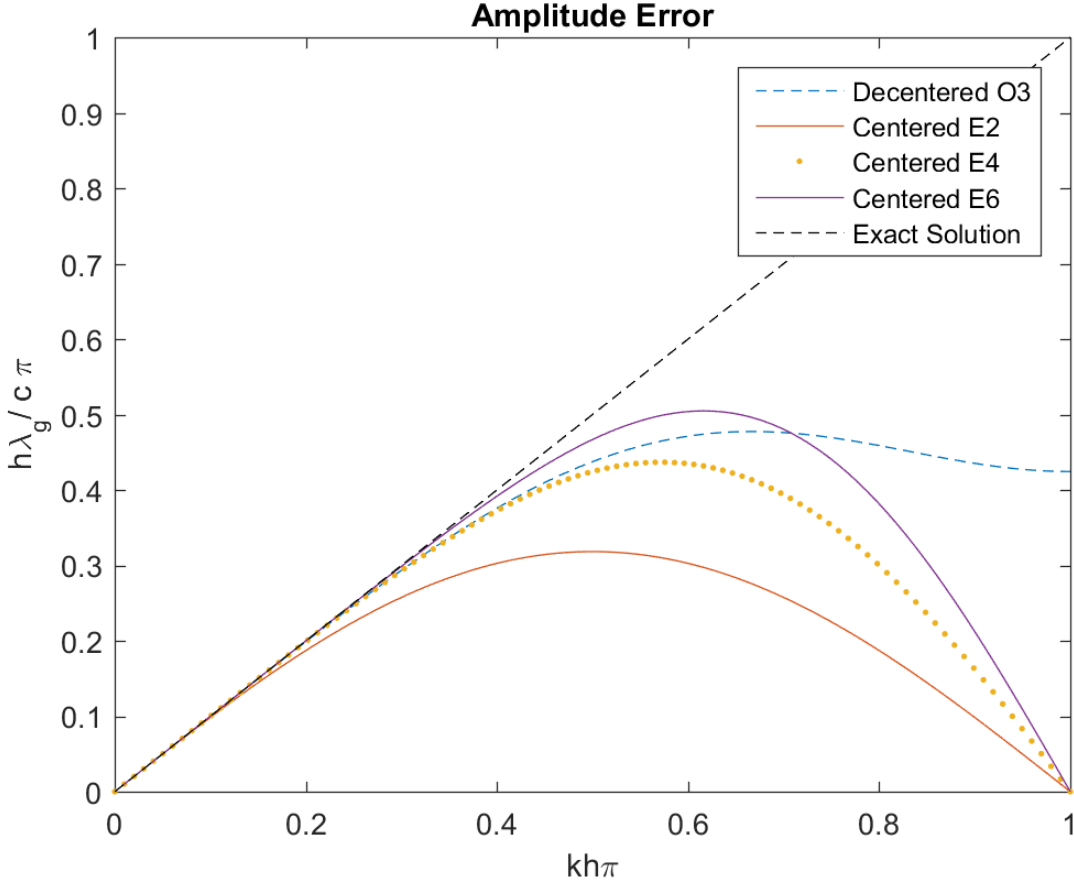


Figure 2: Erreur d'amplitude des schémas décentrée d'ordre 3, E2, E4 et E6

Ainsi, à l'aide de la figure 2 sur l'erreur d'amplitude, nous observons que les nombres d'ondes auront tendance à diminuer petit à petit au fur et à mesure qu'ils deviennent grand, pour le schéma décentré d'ordre 3, à partir de  $\frac{kh}{\pi} = 0.30$ , vis à vis de la solution exacte, pour ensuite se stabiliser dans les alentours de  $\frac{kh}{\pi} = 0.67$ . Les autres schémas, E2, E4 et E6, ont par contre la tendance à diminuer très fortement jusqu'à s'annuler si bien que, pour ces schémas classiques, on aura des valeurs complètement erronées pour les grandes vitesses ce qui peut être désastreux pour la simulation même si le schéma d'ordre 6 est plus longtemps à la solution exacte. Le schéma décentré, qui possède une sorte de plateau, semble bien plus stable puisque les grands nombres d'ondes vont juste s'arrêter à un certain point tel qu'il donne l'impression qu'on fait une sorte de "cut-off" dans les nombres d'onde. Nous notons aussi que la précision du schéma E2 est vraiment faible puisqu'il s'écarte déjà de la solution exacte dès 0.15.

Nous poursuivons maintenant notre chemin avec une analyse de stabilité, en regardant le comportement de ces dernières fonctions sur le plan complexe, présenté à la figure 3. Comme nous le doutions déjà, la zone de stabilité des schémas centrés est une droite confondant avec l'axe imaginaire. Dépendant du schéma centré, ils ne vont que s'allonger sur cette droite. Le schéma décentré possède par contre une partie réelle, donnant lieu à toute une surface de stabilité. Ainsi, nous voyons bien que les schémas centrés sont instables, tandis que notre modèle décentré est conditionnellement stable bien que ce dernier possède une diffusion numérique importante.

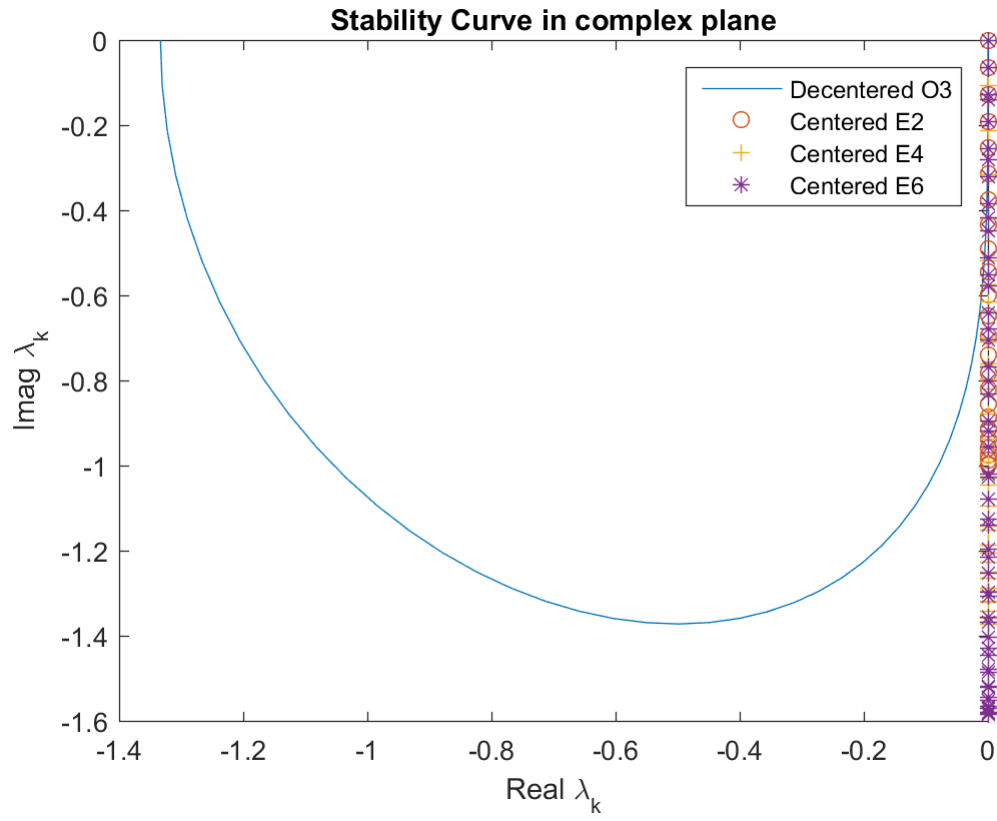


Figure 3: Courbe de stabilité dans le plan complexe pour  $0 < \frac{kh}{\pi} < 1$

## 4 Simulation de la convection

### 4.1 Taille des meshes

Ainsi, nous allons pouvoir concevoir notre simulation numérique des effets de convection et de diffusion. Pour ce faire, nous utiliserons, pour chacun des schémas de différence finies, l'intégrateur numérique Runge-Kutta 4 (RK4). Dans un premier temps, si bien que nous allons plus nous intéresser à la partie convective, nous fixons ainsi temporairement  $\nu = 0$ . Pour nous aider dans la confection de cette simulation, nous nous aiderons des relations adimensionnelles suivant:  $\frac{h}{\sigma}$ , le rapport entre la taille de la "mesh" sur  $\sigma$ ,  $N$ , le nombre d'éléments discrétisés, obtenu par  $N = \frac{L}{h}$ , CFL, pour  $CFL = \frac{c\Delta t}{h}$ , la condition de Courant-Friedrichs-Lewy,  $\frac{c\Delta t}{L}$ , le temps adimensionnelisé, **qui, par facilité de notation, sera appelé dans ce rapport par  $\tau$** . Enfin, nous fixons notre  $\sigma$  à  $\frac{L}{32}$  un domaine assez large pour qu'on puisse définir un domaine numérique périodique, de même que notre CFL sera de 1.

Nous utiliserons 5 schémas de différence finie différents que nous comparerons chacun par rapport aux uns et aux autres, mais aussi à la solution exacte analytique: la Déc centré d'ordre 3, Euler Explicite Centré 2 (E2), Euler Explicite Centré 4 (E4), Euler Implicite 4 (I4), et Euler Implicite 6 (I6). En ce qui concerne les schémas implicites, nous utiliserons l'algorithme de Thomas pour résoudre le système tridimensionnel qui nous garantis une complexité temporelle de  $\mathcal{O}(n)$ . Dans un premier temps, nous allons nous intéresser à l'influence de  $h$  dans notre simulation numérique. De ce fait, nous allons observer le comportement de chacun des schémas pour  $\frac{h}{\sigma} = \frac{1}{2}, \frac{1}{4}$ , et  $\frac{1}{8}$  correspondant au nombre de point  $N = 64, 128$ , et  $256$ . Afin de mieux visualiser les éléments, les graphes seront en fonction de  $n$ , le  $n$ -ième éléments du domaine discrétisé, puisque nous travaillons dans une "box" de taille  $L$ , contenant  $N$  éléments. Afin de faciliter la lecture, nous adimensionnerons  $U$  par  $U' = \frac{\sqrt{\pi\sigma^2}}{Q}U$ .

Comme nous le voyons sur les figures 4, 5, et 6, la représentation des points pour  $\tau=0.25$ , nous observons une nette amélioration entre 64 points et 256 points. De fait, pour 64 points, figure 4, tous nos schémas de différence finie s'écartent drastiquement de la solution exacte. Bien que les schémas implicites essayent de rester le plus fidèle possible, les schémas centrés ont explosé et commencent à osciller sur la gauche de la courbe. De plus, le schéma décentré lui aussi éprouve des difficultés à se maintenir stable. La situation s'améliore dans le cas avec 128 points, figure 5, où seul E2 est instable. Toutefois, le schéma décentré ne nous donne toujours pas la bonne solution contrairement aux schémas implicites, et E4 qui tendent de plus en plus, bien que ce n'est pas encore parfaite comme nous pouvons voir sur le zoom-in, figure 7. C'est avec 256 points, figure 6, que les schémas implicites, et E4, se confondent avec la solution exacte. Nous pouvons aussi remarquer que le schéma E2 possède encore des imprécisions, puisqu'il semble même avoir un retard par rapport à la solution exacte comme on peut le voir sur le zoom-in, figure 8. Bien que son amplitude n'est pas exacte, le schéma décentré d'ordre 3 a ses points bien alignés avec ceux de la solution exacte et des autres schémas implicites. Toutefois, nous avons vu, un peu au dessus, que la solution décentrée a une tendance à diffuser, ce qui semble apparaître ici.

*Note: Le code en C, ci-joint, a été programmé pour être compatible avec un ordinateur fonctionnant sous linux (WSL Ubuntu 14.04), il se peut qu'il y ait des bibliothèques qui manquent lors de la compilation du code si on le fait sur un autre OS.*

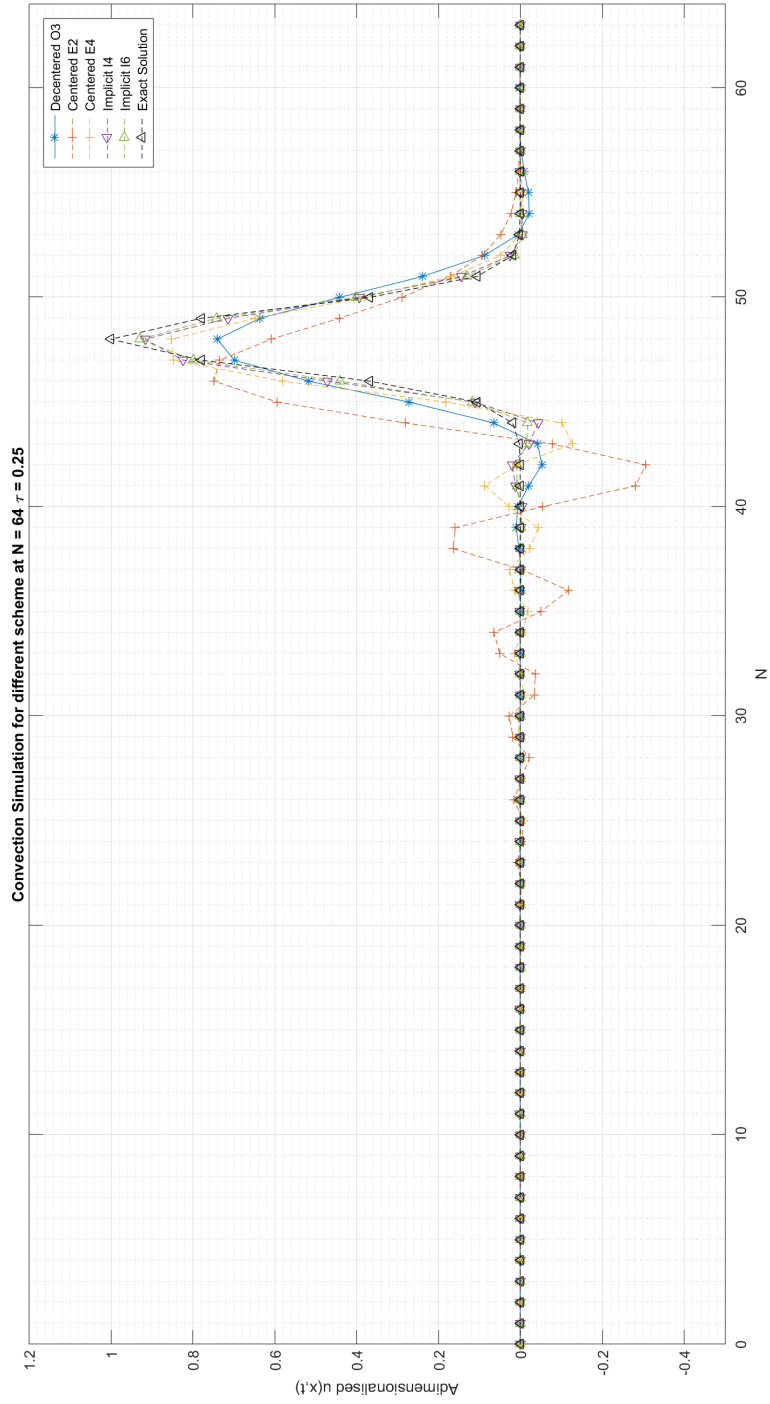


Figure 4: Représentation de  $\frac{\sqrt{\pi\sigma^2}}{Q}U$  à  $\tau = 0.25$   $N = 64$

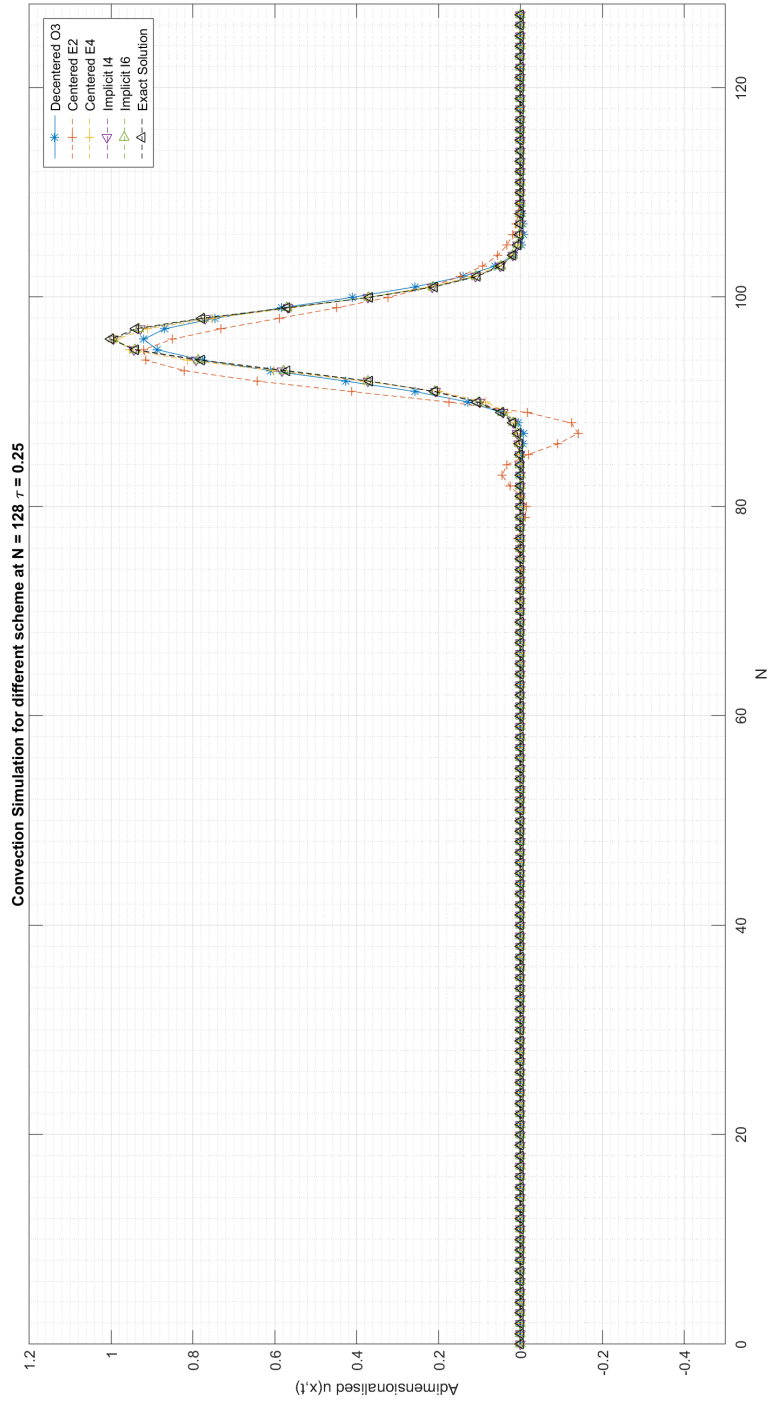


Figure 5: Représentation de  $\frac{\sqrt{\pi\sigma^2}}{Q}U$  à  $\tau = 0.25$   $N = 128$

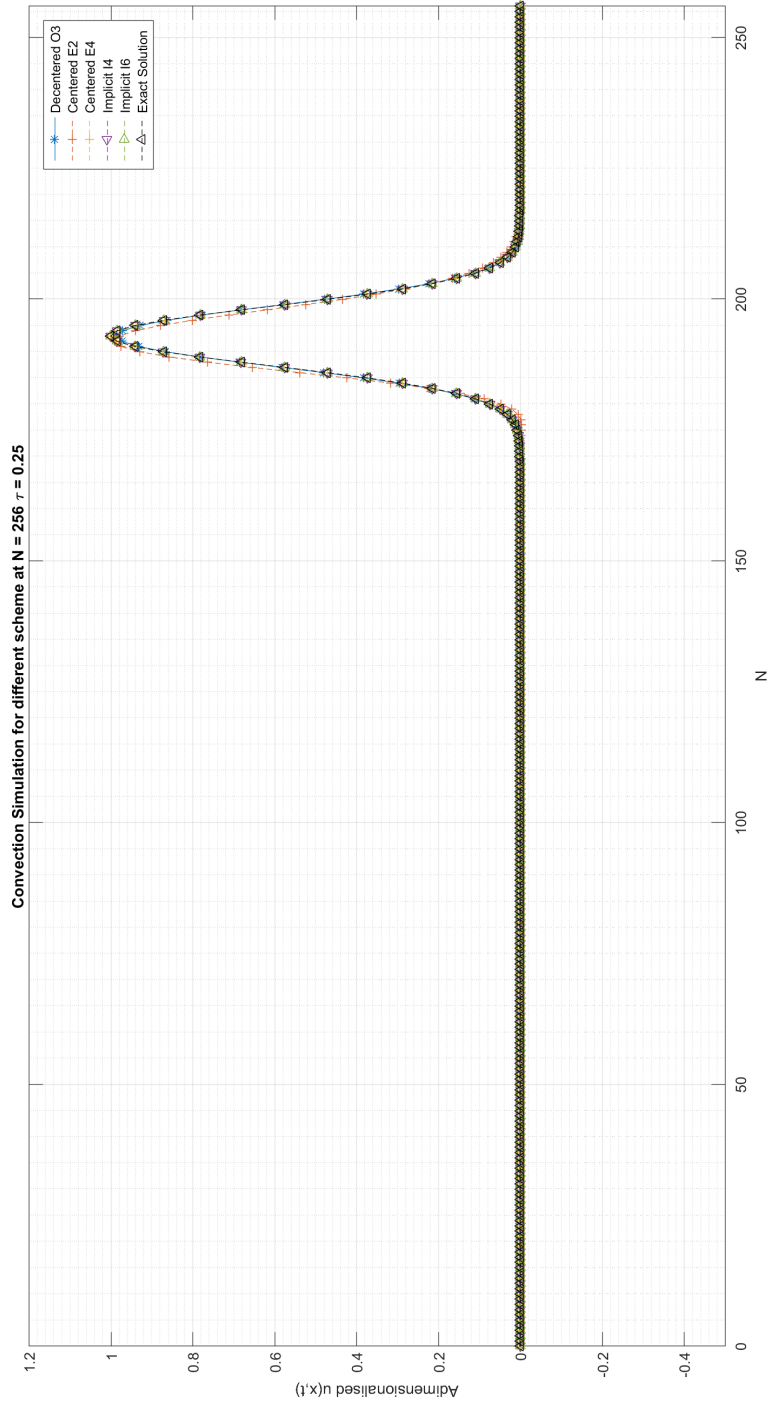


Figure 6: Représentation de  $\frac{\sqrt{\pi\sigma^2}}{Q}U$  à  $\tau = 0.25$   $N = 256$



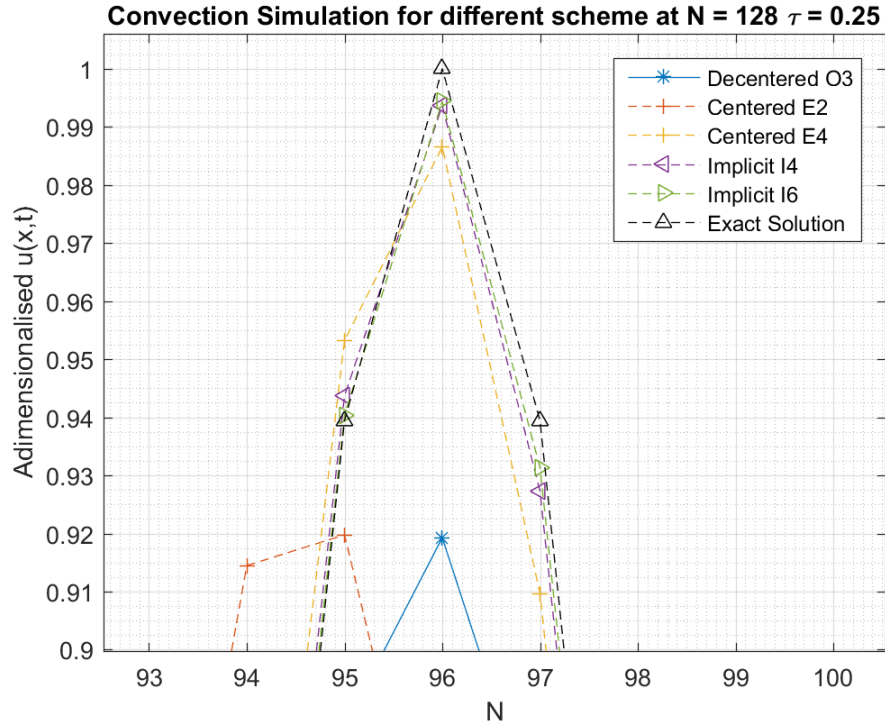


Figure 7: Représentation de  $\frac{\sqrt{\pi\sigma^2}}{Q}U$  à  $\tau = 0.25$  N = 128 , zoom-in

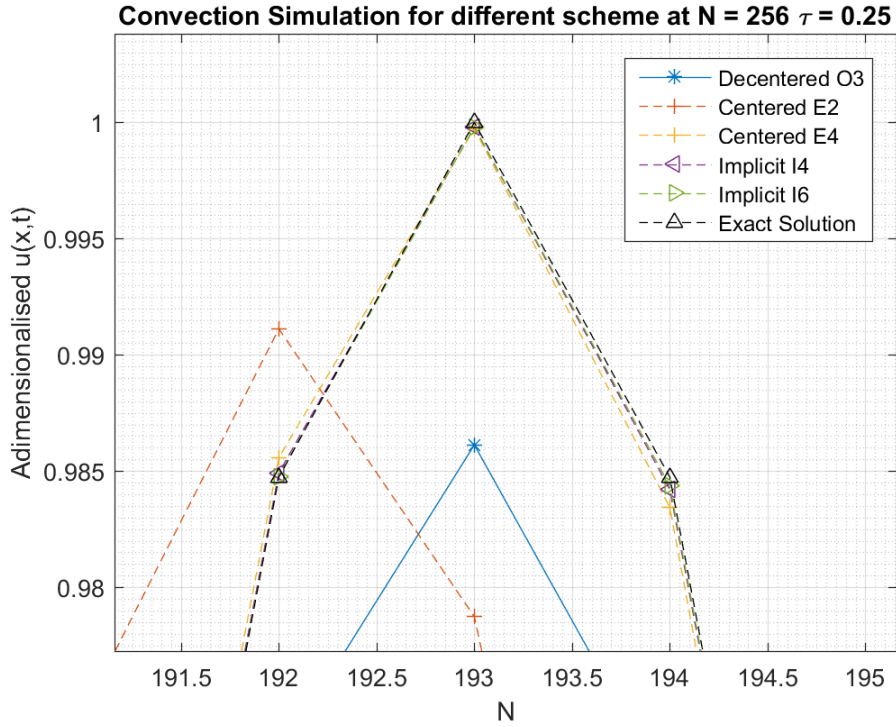


Figure 8: Représentation de  $\frac{\sqrt{\pi\sigma^2}}{Q}U$  à  $\tau = 0.25$  N = 256 , zoom-in

## 4.2 Convection à travers plusieurs temps

Nous allons maintenant nous intéresser aux comportements de nos schémas sur quelques temps spécifiques. Pour se faire, nous utiliserons 256 points que nous simulerons pour  $\frac{ct}{L} = \tau = 0.25, 0.50, 0.75, 1.00$ , ce qui correspond respectivement à un quart de période, demi période, trois-quart de période, et un période entier. Comme nous pouvons voir sur les figures 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, alors que la E2 était à peu près stable 16, une instabilité apparaît dès qu'il travers la frontière, qui s'intensifie de plus en plus au cours du temps. Les autres schémas restent par contre stable malgré le passage à travers de la frontière du domaine, de même que les schémas implicites, et le schéma E4 restent toujours fidèles à la solution exacte. Enfin, le schéma décentré d'ordre possède une amplitude bien plus petite comme on l'avait déjà remarquer.

*Note: Pour avoir une visibilité des schémas, les graphes on été séparé en deux: les schémas explicites centrés d'un coté, et les schéma implicites de l'autre, avec la solution exacte et le schéma décentré sur chacun des deux pour pouvoir mieux comparer.*

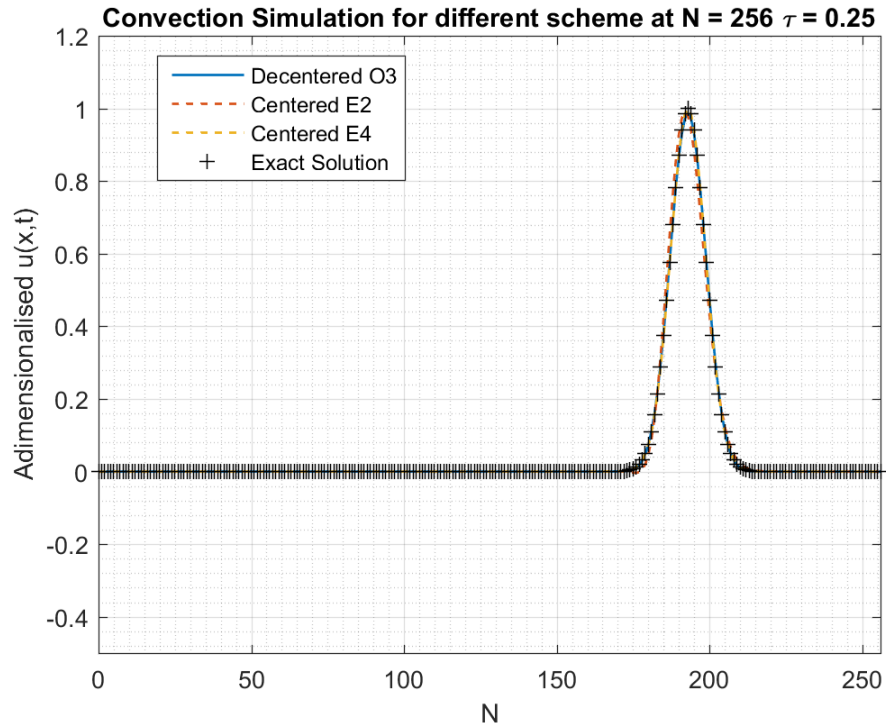


Figure 9: Représentation de  $\frac{\sqrt{\pi\sigma^2}}{Q}U$  à  $\tau = 0.25$   $N = 256$  - Schéma Explicite

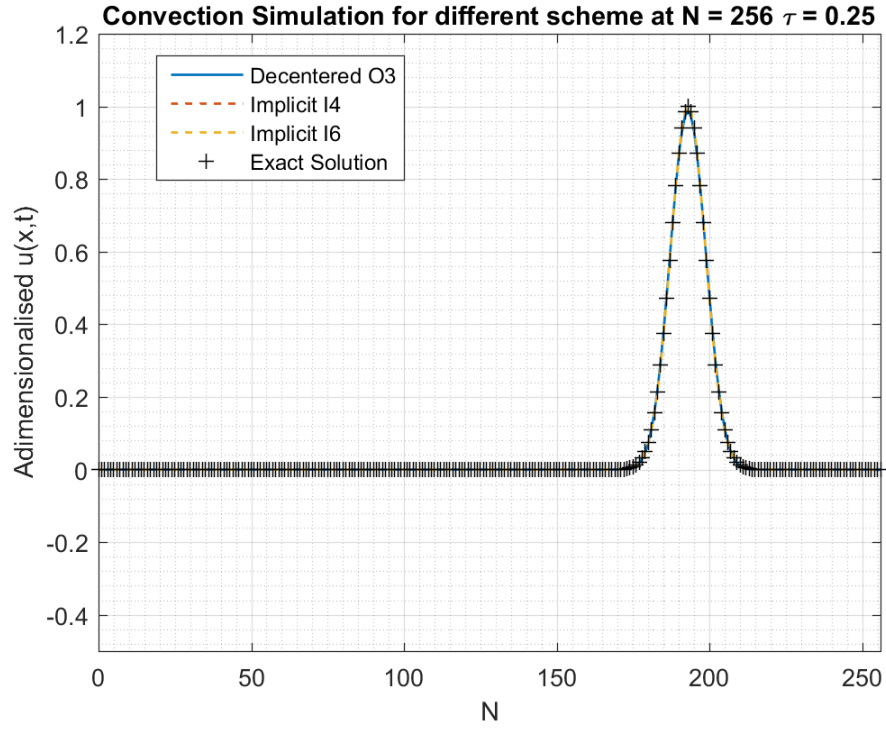


Figure 10: Représentation de  $\frac{\sqrt{\pi\sigma^2}}{Q}U$  à  $\tau = 0.25$  N = 256 - Schéma Implicite

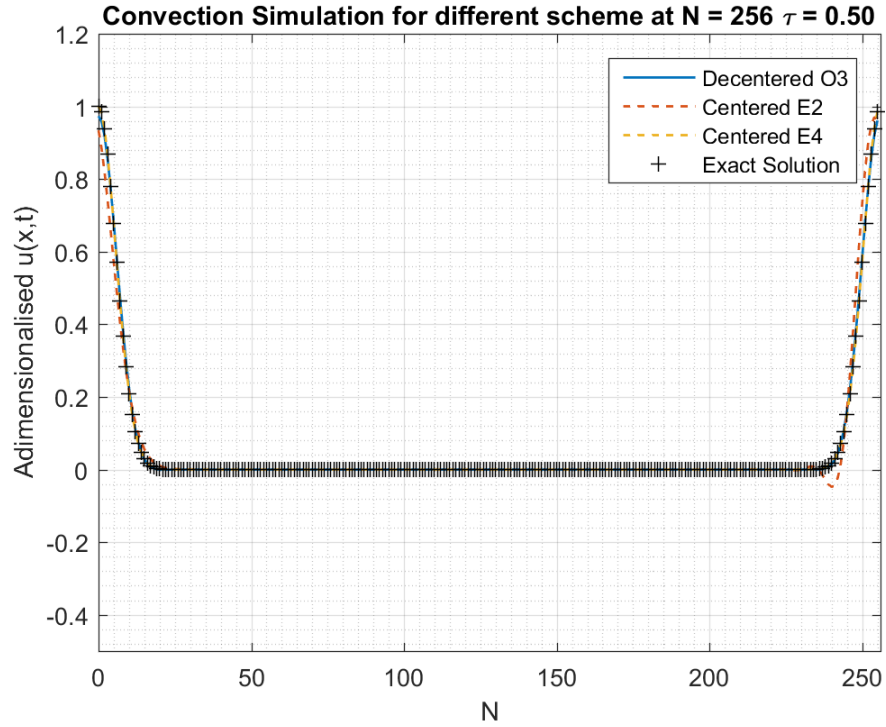


Figure 11: Représentation de  $\frac{\sqrt{\pi\sigma^2}}{Q}U$  à  $\tau = 0.50$  N = 256 - Schéma Explicite

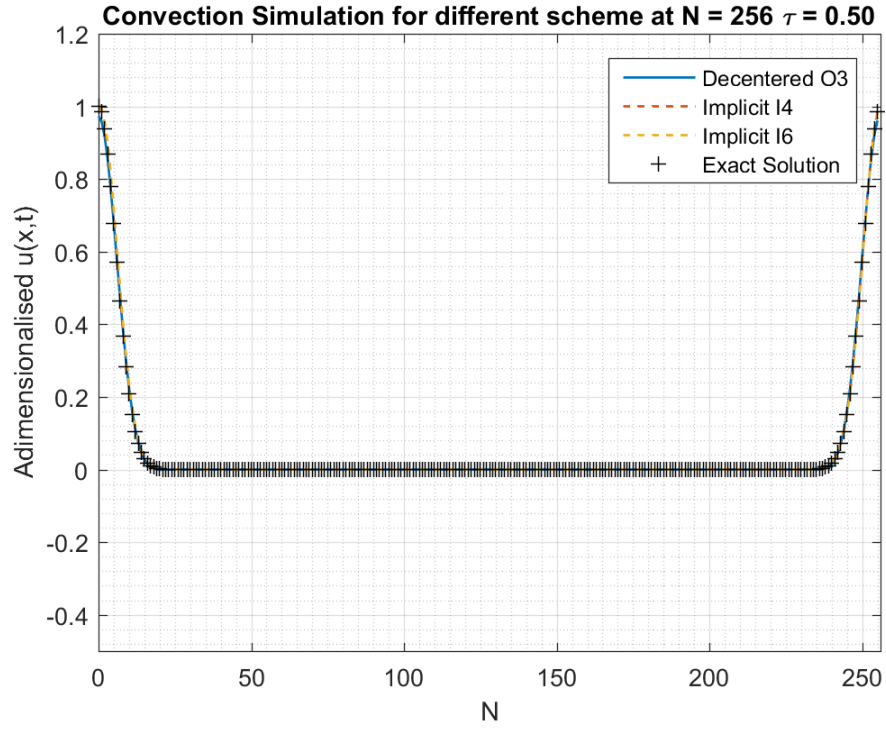


Figure 12: Représentation de  $\frac{\sqrt{\pi\sigma^2}}{Q}U$  à  $\tau = 0.50$  N = 256 - Schéma Implicite

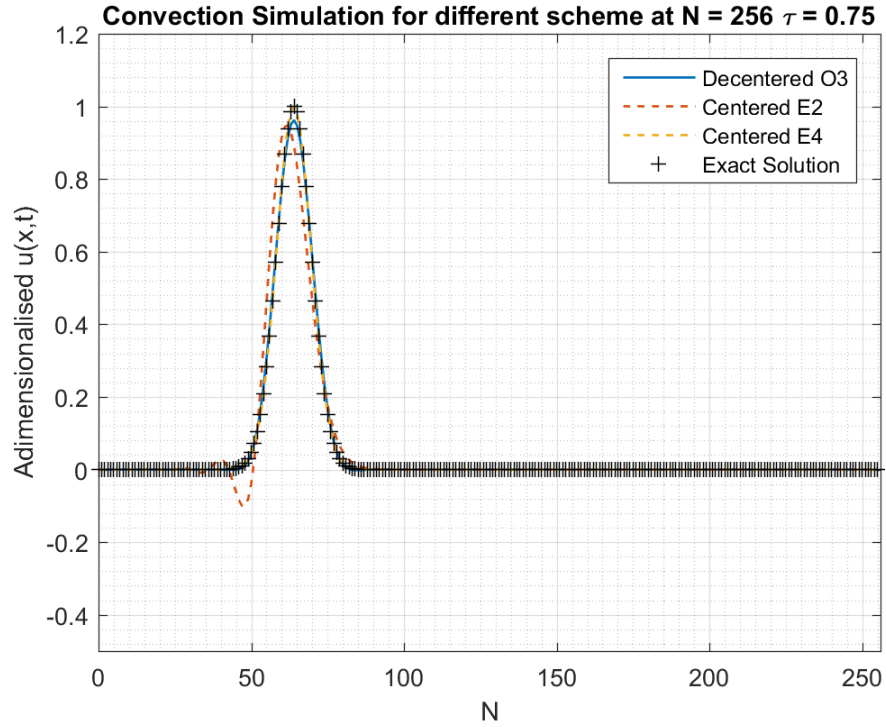


Figure 13: Représentation de  $\frac{\sqrt{\pi\sigma^2}}{Q}U$  à  $\tau = 0.75$  N = 256 - Schéma Explicite

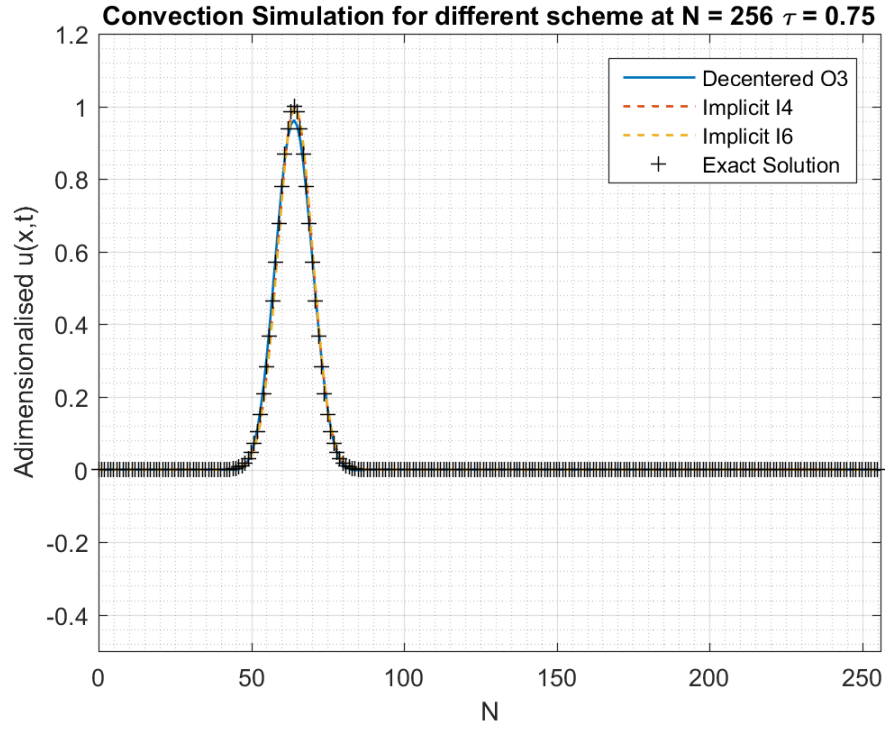


Figure 14: Représentation de  $\frac{\sqrt{\pi\sigma^2}}{Q}U$  à  $\tau = 0.75$  N = 256 - Schéma Implicite

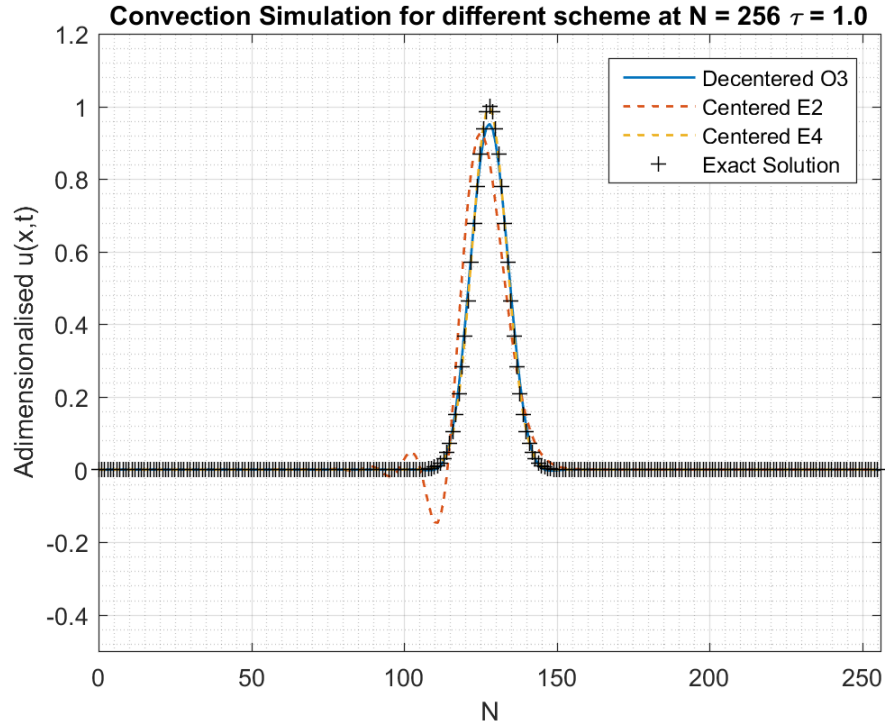


Figure 15: Représentation de  $\frac{\sqrt{\pi\sigma^2}}{Q}U$  à  $\tau = 1.00$  N = 256 - Schéma Explicite

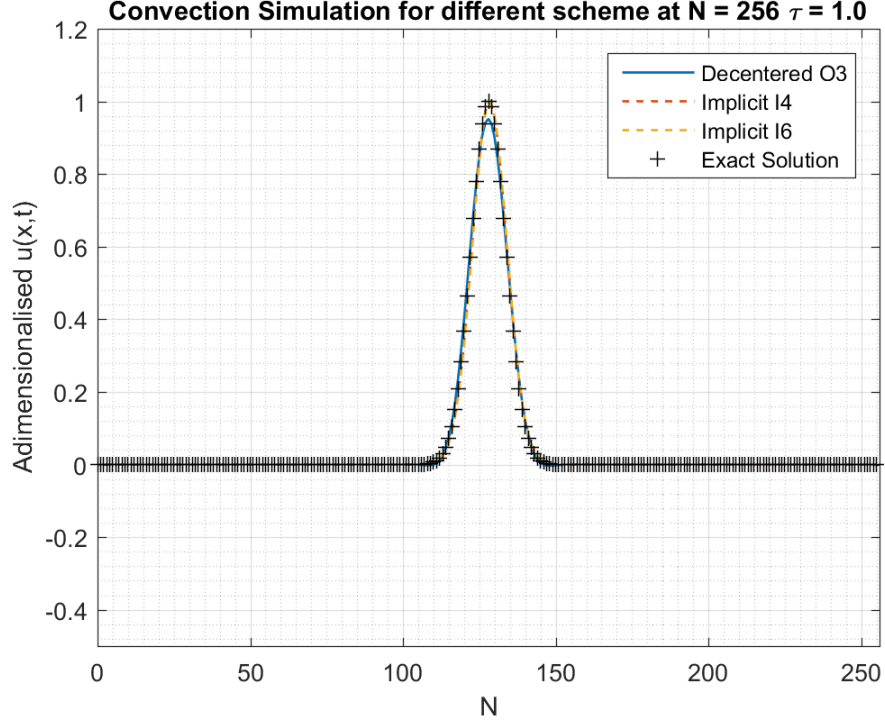


Figure 16: Représentation de  $\frac{\sqrt{\pi\sigma^2}}{Q}U$  à  $\tau = 1.00$   $N = 256$  - Schéma Implicite

Maintenant, nous analyserons en détails le comportement de nos schémas en appliquant de petit éléments de diagnostique définis comme suit:

$$\begin{aligned}
 Q_h^n &= h \sum_i u_i^n \\
 E_h^n &= h \sum_i \frac{(u_i^n)^2}{2} \\
 R_h^n &= \sqrt{h \sum_i (u_i^n - u(x_i, t^n))^2}
 \end{aligned} \tag{9}$$

Ces derniers sont donc calculés à chaque pas de temps, si bien que nous obtenons au final une évolution temporelle de ces éléments de diagnostique, représentés ci-dessous par les figures 17, 18, et 19. Nous remarquons dans un premier lieu que le  $Q$  reste constant pour chacun des schémas. Toutefois, ce n'est pas le cas pour  $E_h^n$  où on remarque clairement que la méthode décentrée décroît alors que les autres restent constants. Ce qui confirme le fait que le schéma semble bel et bien décroître, et qu'il y a donc une diffusion numérique comme on l'avait annoncé avec les graphes d'erreur d'amplitude et de stabilité. En ce qui concerne  $R_h^n$ , il nous montre bien que le schéma E2 dégénère complètement au fil du temps, de même que l'erreur faite par le schéma décentré est relativement grande comparée aux autres schémas. En utilisant la figure 20, on voit qu'on a un ordre de convergence d' $\mathcal{O}(10^{-1})$  pour E4 et la décentrée d'ordre 3, et un ordre de convergence qui tourne autour de  $\mathcal{O}(10^{-2})$  pour I4 et I6, et enfin la E2 aurait un ordre de  $\mathcal{O}(1)$ .

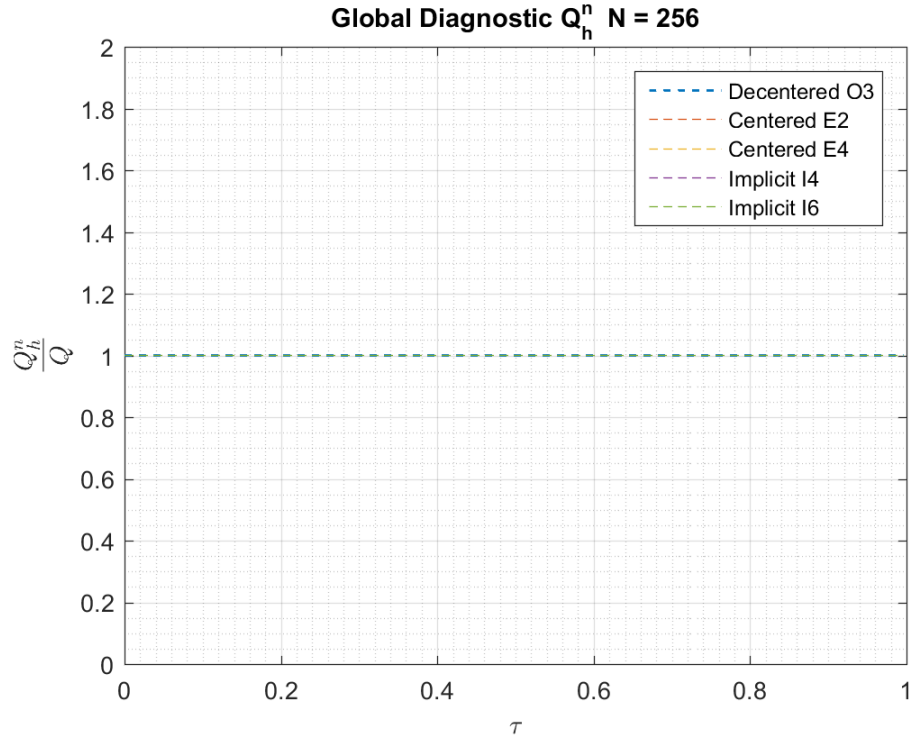


Figure 17: Diagnostique Globale  $\frac{Q_h^n}{Q}$   $N = 256$

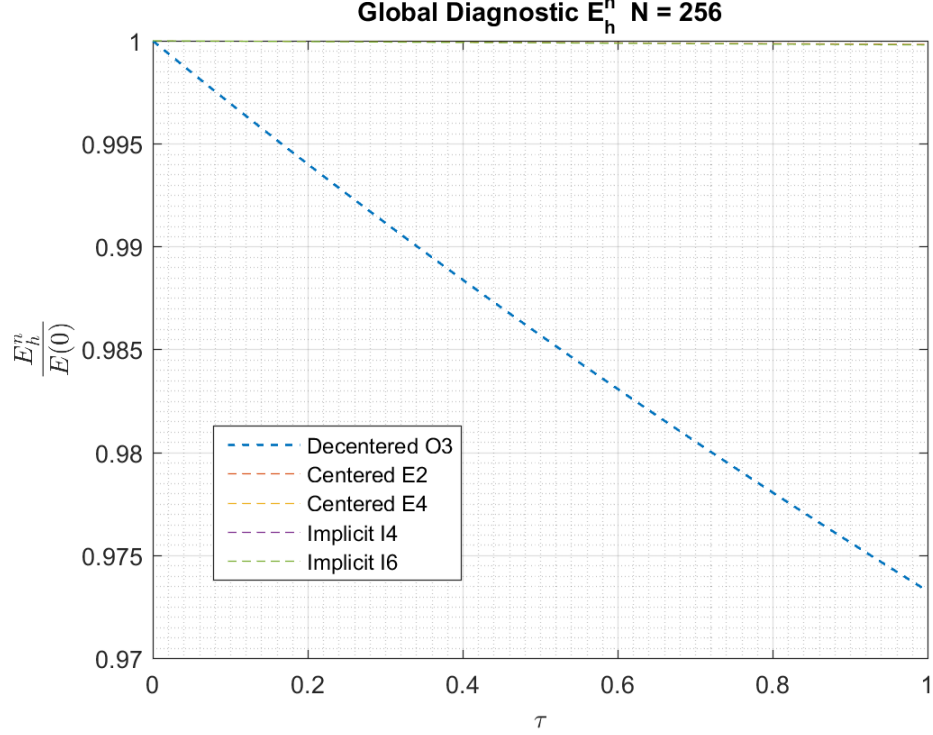


Figure 18: Diagnostique Globale  $\frac{E_h^n}{E(0)}$   $N = 256$



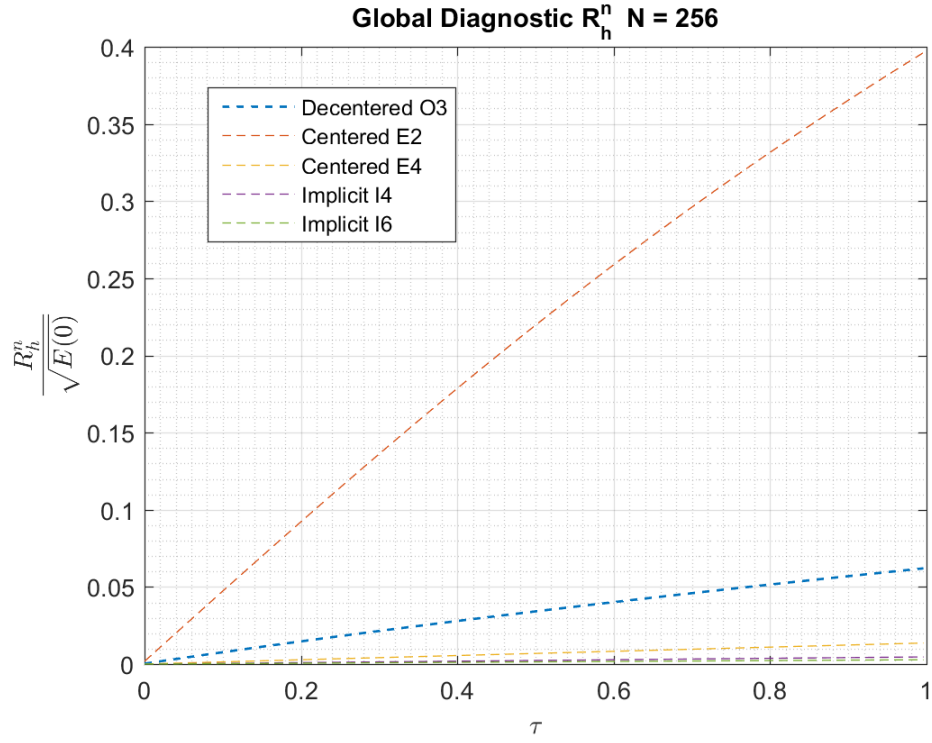


Figure 19: Diagnostique Globale  $\frac{R_h^n}{\sqrt{E(0)}}$   $N = 256$

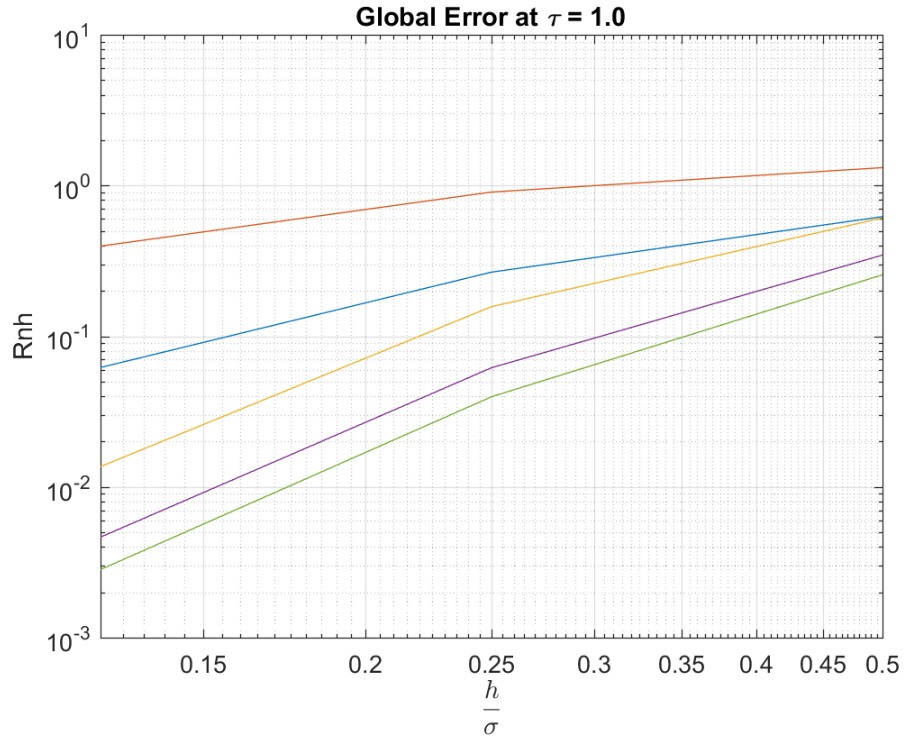


Figure 20: Évolution de l'erreur globale à  $\tau = 1.0$  en fonction de  $\frac{h}{sigma}$



## 5 Simulation de la convection et de la diffusion

Pour cette partie, on prendra à la place un  $\frac{h}{\sigma} = 1/4$ , c'est à dire  $N = 128$ , avec un  $Re_\sigma = 40$ . Nous utiliserons aussi une E2 pour déterminer notre dérivée seconde exprimé de la manière suivante:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{U_{i+1} - 2U_i + U_{i-1}}{h^2} \quad (10)$$

Puisque nous utilisons une différence finie d'ordre 2 pour la dérivée seconde, on se limitera au schéma de convection de E2, E4 et décentrée. Dès lors nous retrouvons les représentations suivantes, sur les figures 21, 22, 23, et 24. Contrairement à la convection pure, la décentré d'ordre 3 accouplé avec la E2 de diffusion semble moins dégénérer, si bien qu'elle suit relativement bien la solution exacte, certes pas aussi bien que la E4 de convection. Toutefois la E2 de convection s'éloigne toujours d'un peu la solution exacte. De plus, on remarque aussi que les instabilités de la E2 de convection s'atténue grâce à la diffusion. C'est un comportement qui se confirme avec les diagnostique globale des figures 25, 26, et 27. En effet, alors que  $Q_h^n$  reste bien constant,  $E_h^n$  décrois quadratiquement pour les trois schémas, ce qui est due à la diffusion, et enfin nous apercevons bien que  $R_h^n$  se stagne sur une sorte de plateau pour les 3 schémas, comme si il y avait une sorte d'amortissement pour l'erreur. Nous remarquons aussi que les valeurs sont aussi plus petites, mais nous investirons cela dans un autre point.

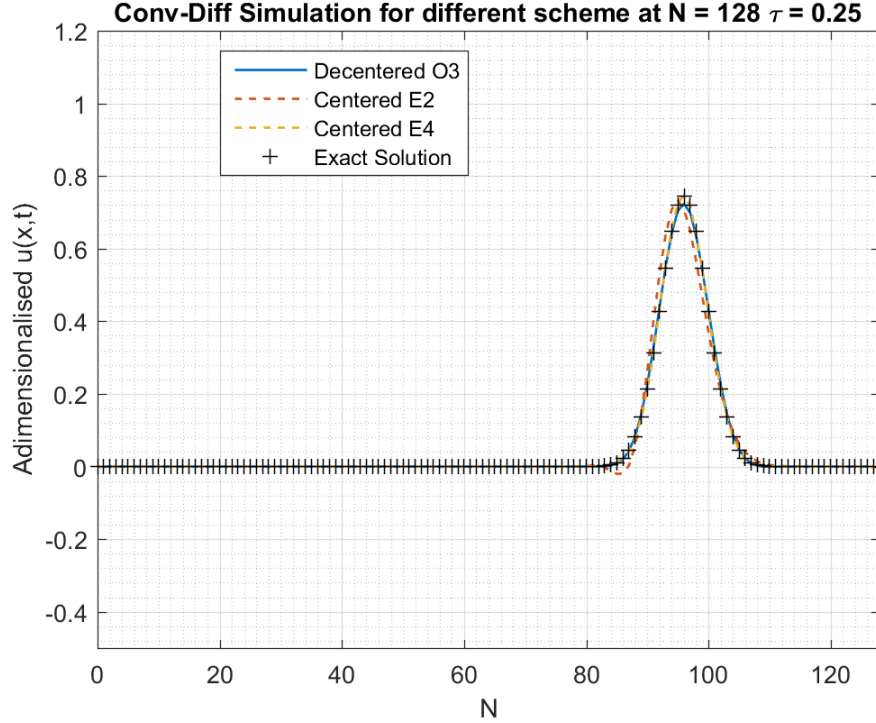


Figure 21: Représentation de  $\frac{\sqrt{\pi\sigma^2}}{Q}U$  à  $\tau = 0.25$

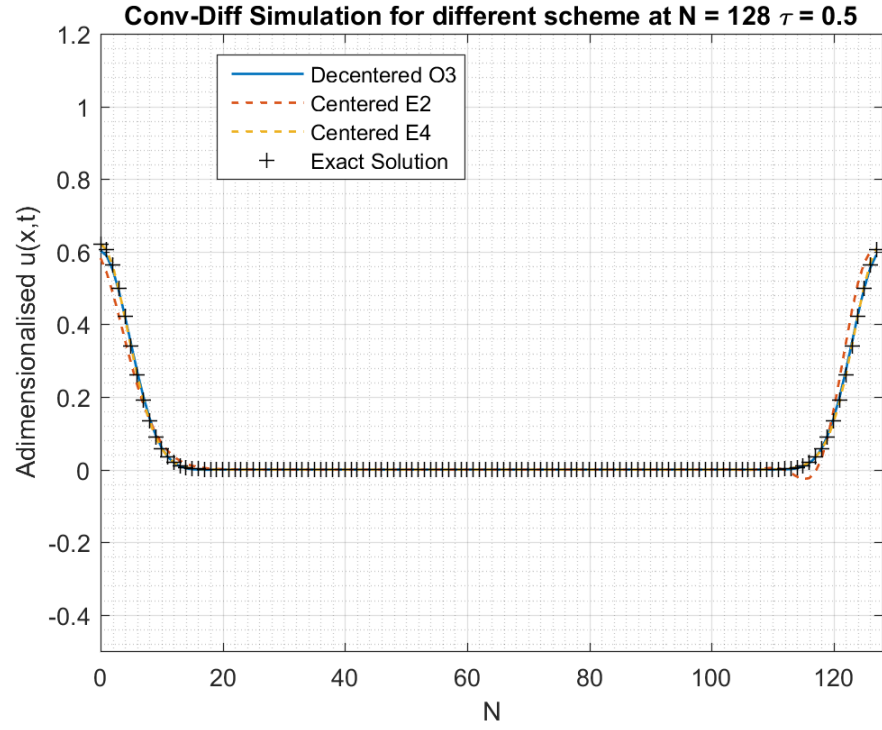


Figure 22: Représentation de  $\frac{\sqrt{\pi\sigma^2}}{Q}U$  à  $\tau = 0.50$

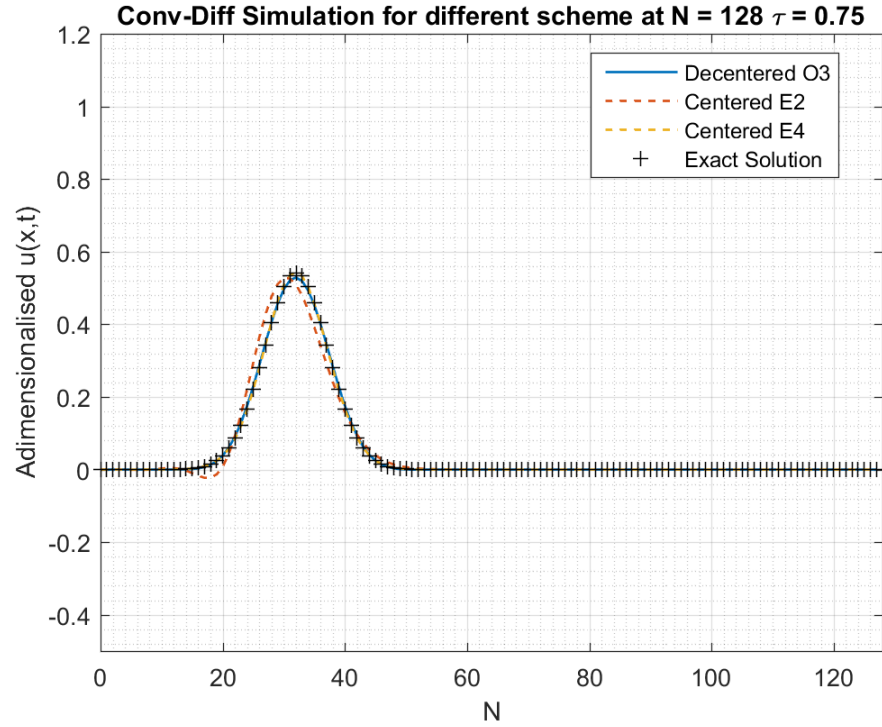


Figure 23: Représentation de  $\frac{\sqrt{\pi\sigma^2}}{Q}U$  à  $\tau = 0.75$

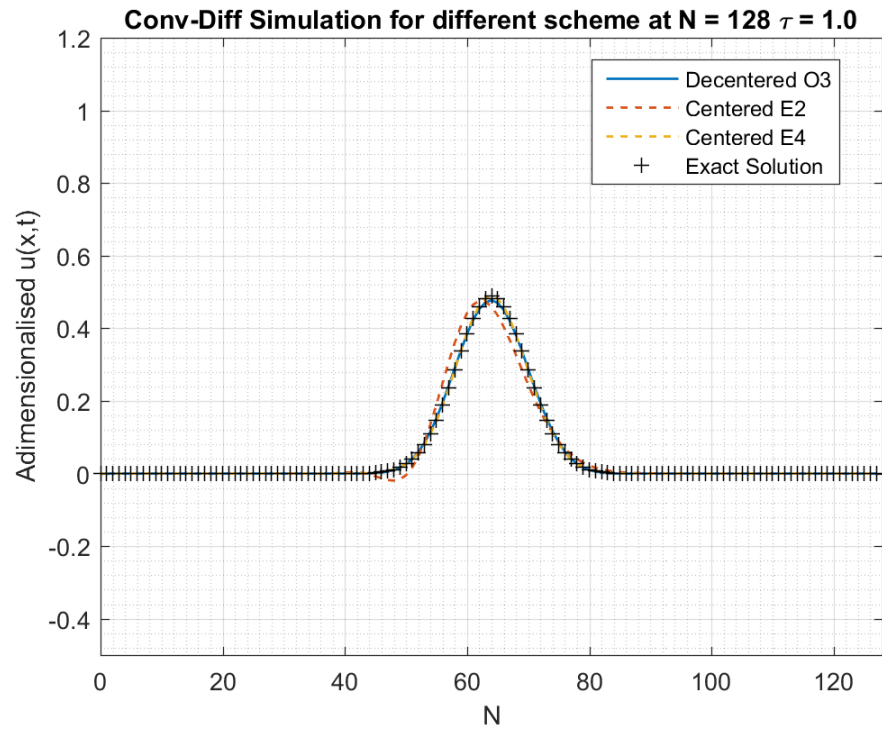


Figure 24: Représentation de  $\frac{\sqrt{\pi\sigma^2}}{Q}U$  à  $\tau = 1.00$

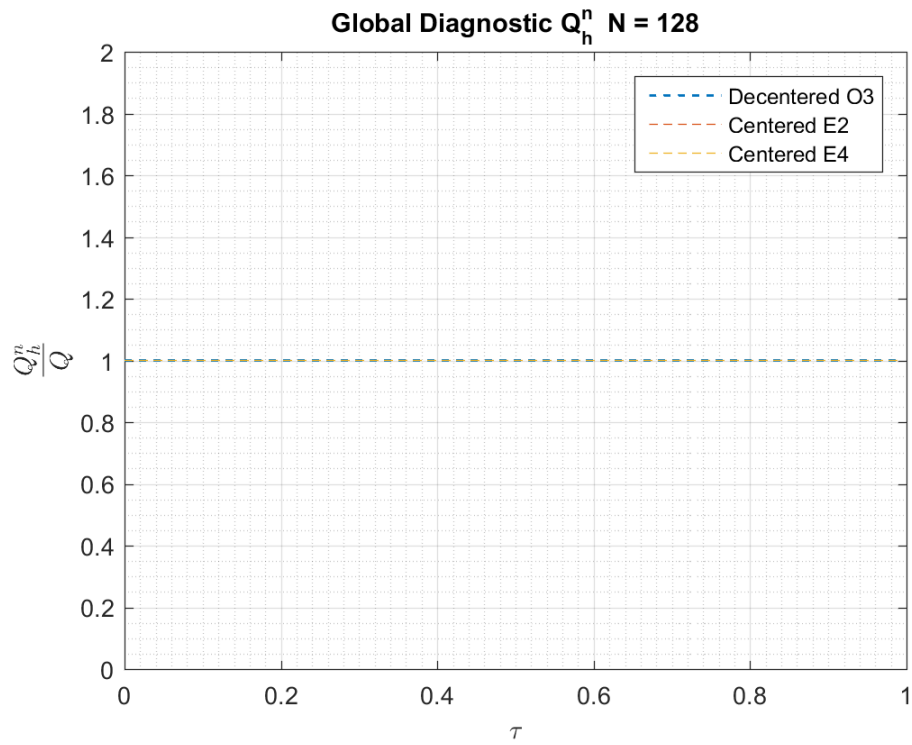


Figure 25: Diagnostique Globale  $\frac{Q_h^n}{Q}$  N = 128

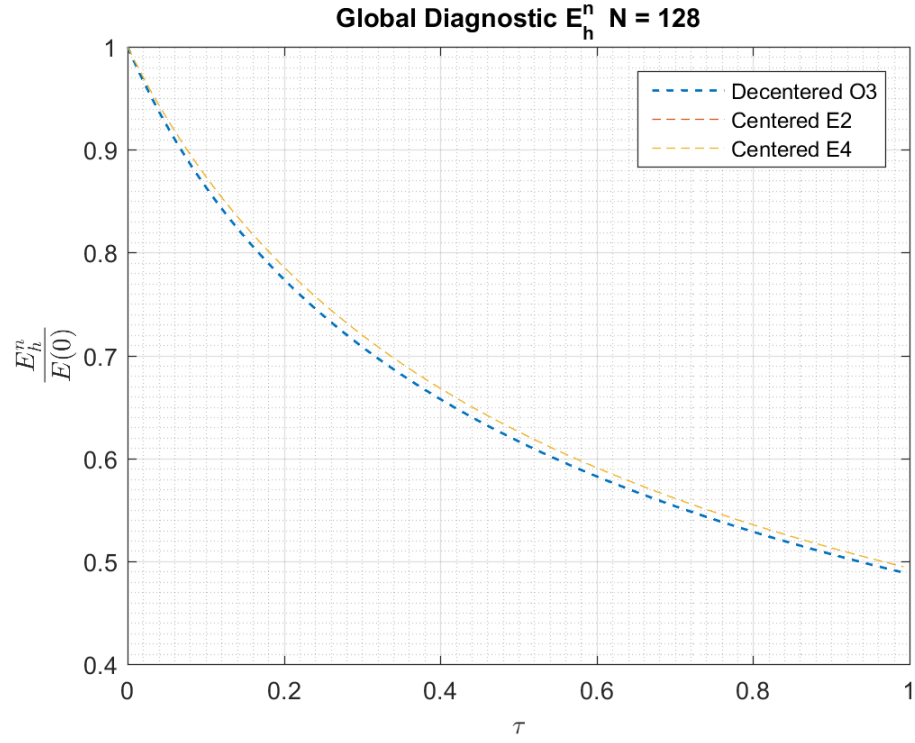


Figure 26: Diagnostique Globale  $\frac{E_h^n}{Q}$  N = 128

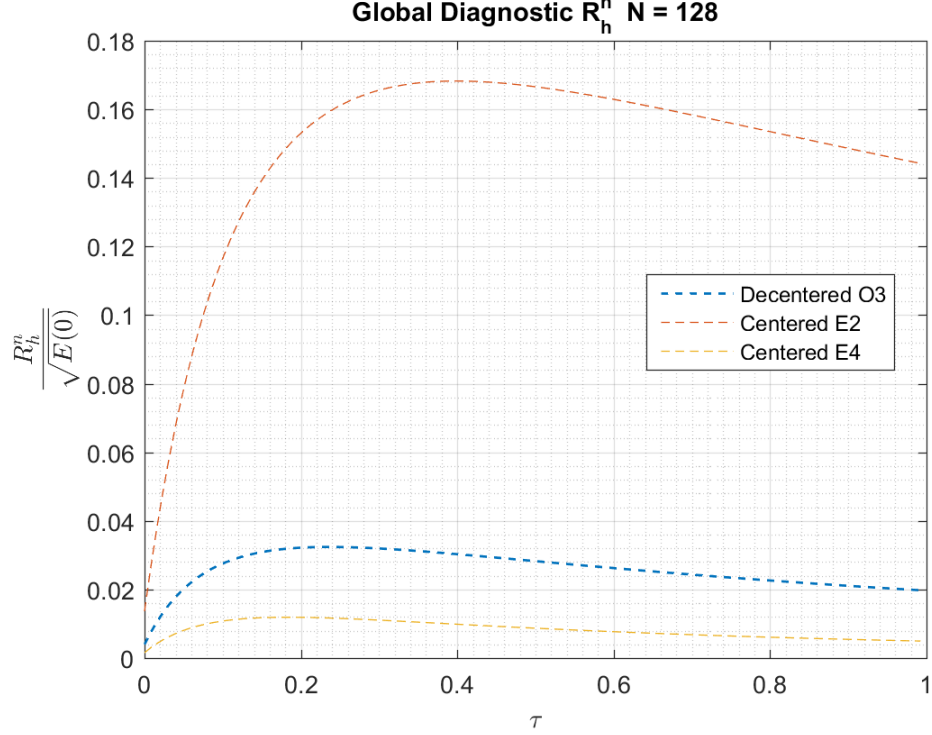


Figure 27: Diagnostique Globale  $\frac{R_h^n}{Q}$  N = 128

## 6 Comparison Pure Convection vs Convection & Diffusion

Nous allons maintenant comparer notre convection-diffusion avec une convection pure, de ce fait nous allons utilisé dans les deux cas la décentrée d'ordre 3 pour le terme convectif, au temps  $\tau = 0.75$  avec comme  $N = 128$  ( $\frac{h}{\sigma} = \frac{1}{4}$ ). D'un premier coup d'oeil, on s'aperçoit, sur la figure 28, que la Conv-Diff possède une bien plutôt petite amplitude, de même qu'elle est un peu plus élargie que son voisin purement convectif. En observant les graphes de diagnostique, nous avons toujours un  $Q_h^n$  constant, toutefois nous remarquons aussi que la pure convection semble diminuer plus rapidement en  $E_h^n$  que la convection-diffusion. De même que nous voyons que l'erreur globale de la convection-diffusion s'atténue bel et bien, et possède une plus petites valeurs que son voisin, comme on le remarquait précédemment, si bien qu'il a même l'impression de se corriger.

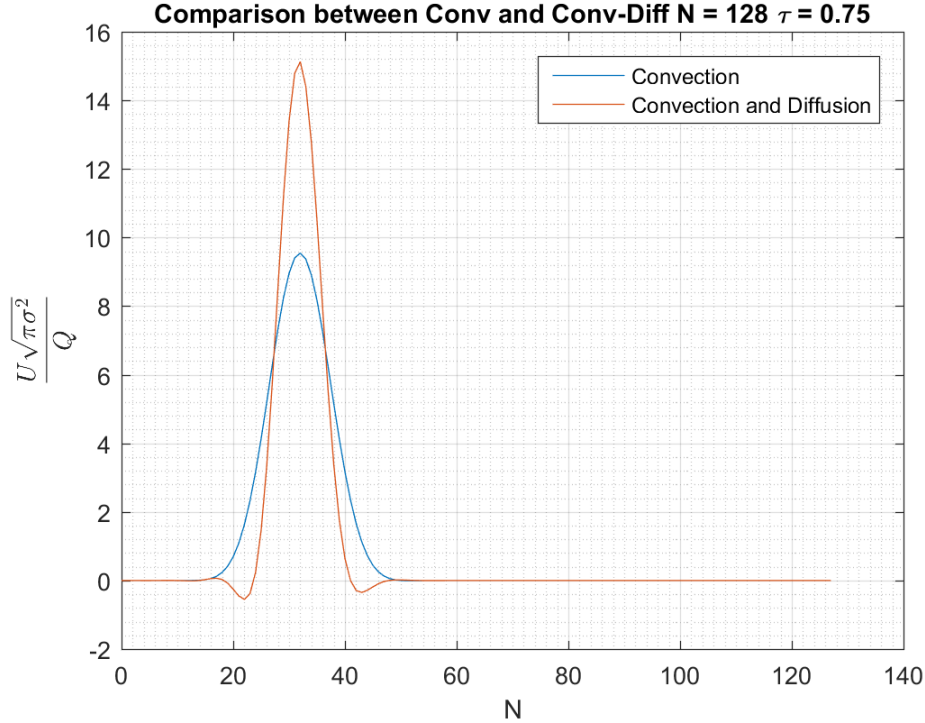


Figure 28: Représentation de  $\frac{\sqrt{\pi\sigma^2}}{Q}U$  Pure-Conv vs Conv-Diff à  $\tau = 0.75$   $N = 128$

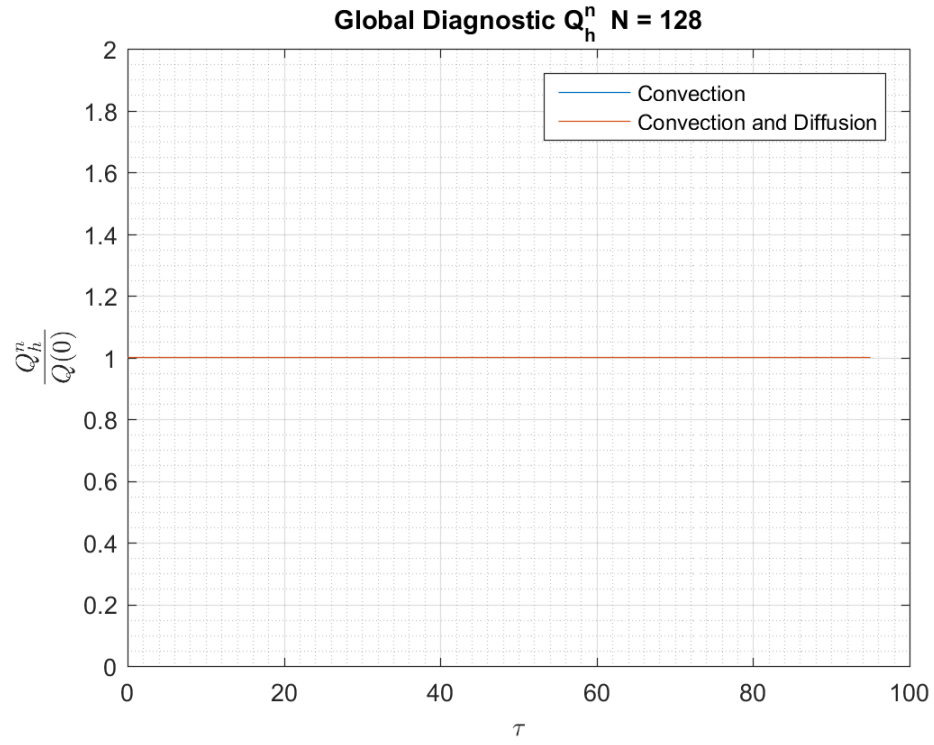


Figure 29: Diagnostique Globale  $\frac{Q_h^n}{Q}$  Pure-Conv vs Conv-Diff N = 128

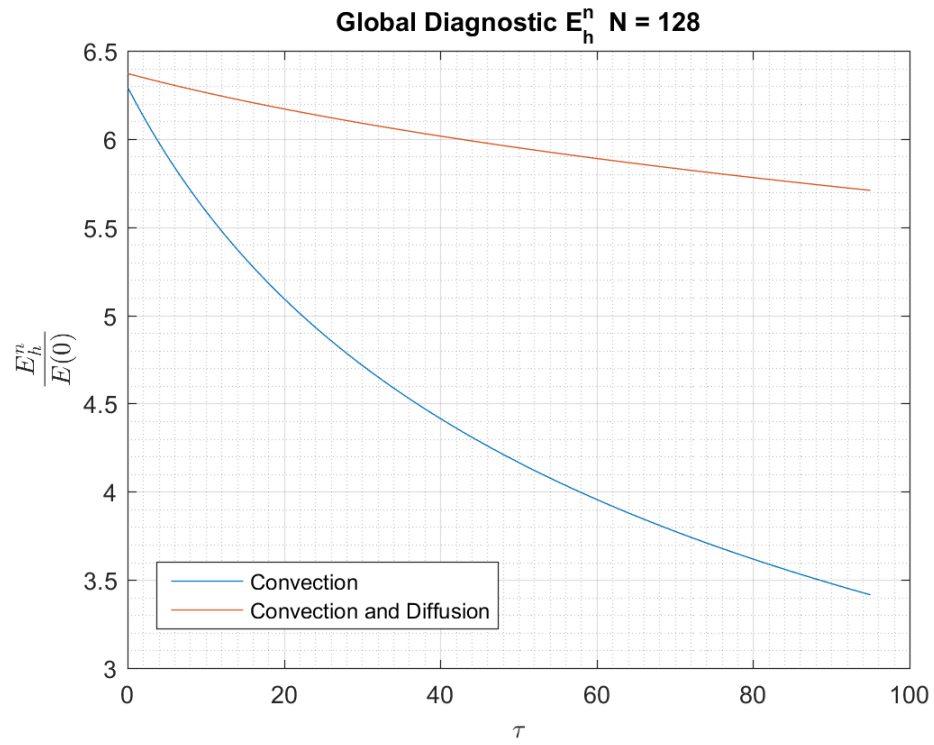


Figure 30: Diagnostique Globale  $\frac{E_h^n}{Q}$  Pure-Conv vs Conv-Diff N = 128

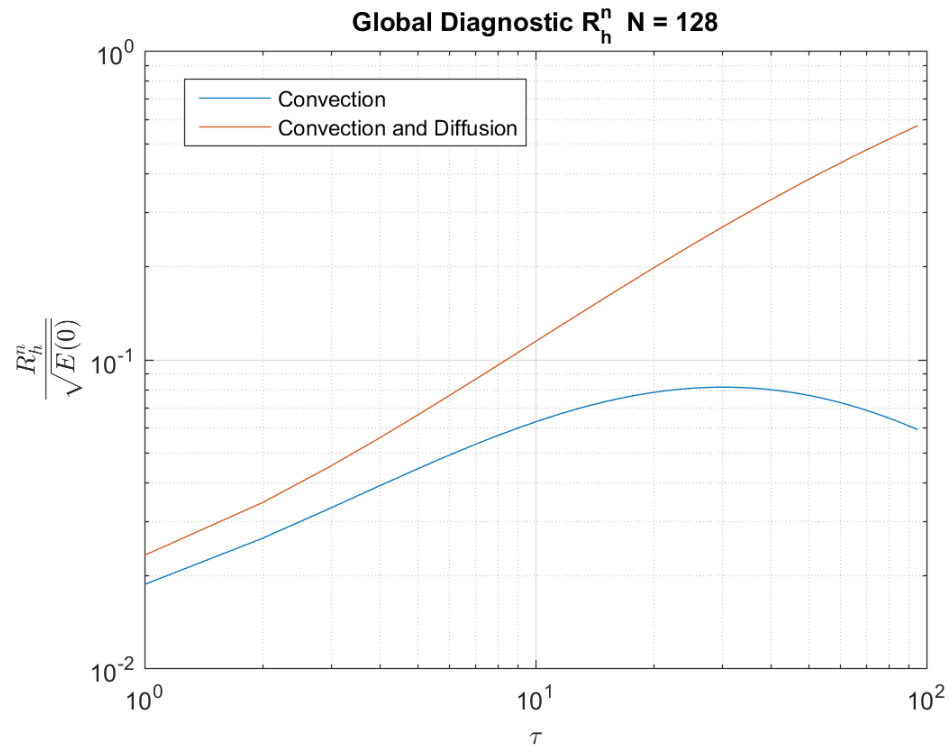


Figure 31: Diagnostique Globale  $\frac{R_h^n}{Q}$  Pure-Conv vs Conv-Diff  $N = 128$

## 7 Bibliographie

Un grand merci à tous ceux avec qui j'ai pu discuter et comparer mes résultats:

Julien Demey

Maxime Lejeune

Mathieu ????

Jérémie Waltzing