

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 définie 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.

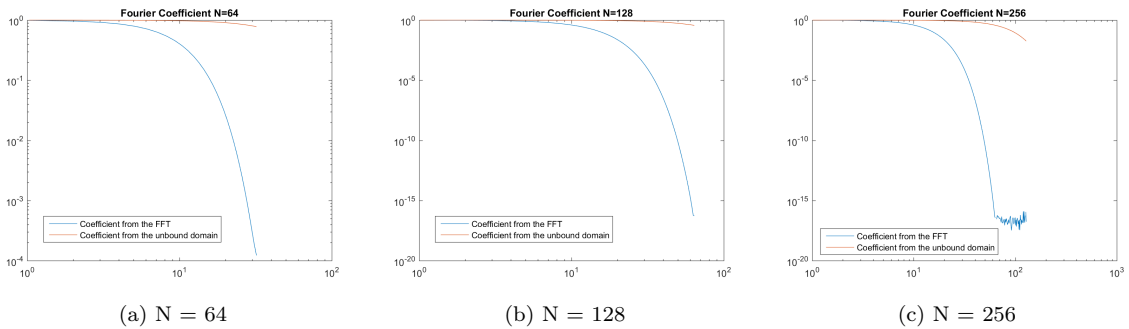


Figure 1: Comparaison entre la série de Fourier et des coefficients de Fourier pour un N = 64, 128 et 256

Toutefois, au vue des graphs dans la figure 1, il semblerait que je n'ai pas effectué correctement ce qui était demander. J'observe que je possède encore quelques lacunes dans cette matière. Ainsi, je préfère pas m'attarder sur des résultats que je considère erronés.

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 λ_k de chaque méthodes.

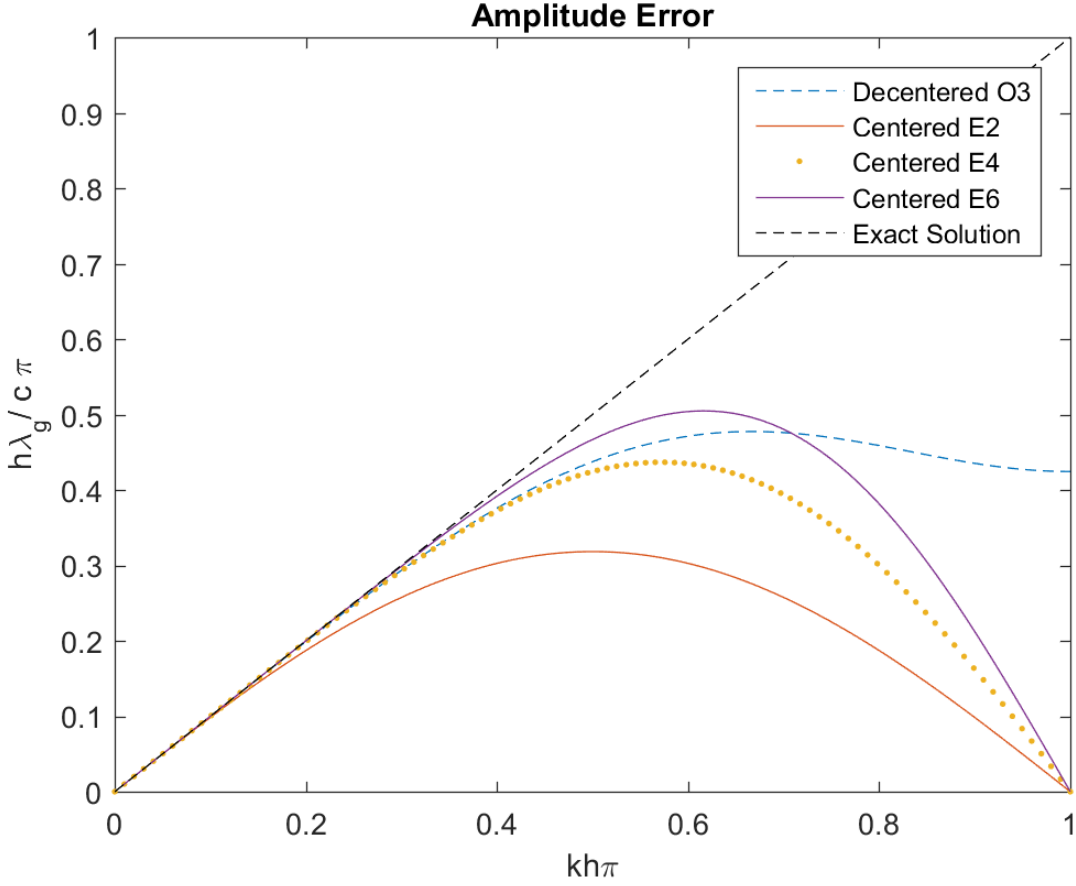


Figure 2: Erreur d'amplitude des schémas décentrée d'ordre 3, E2, E4 et E6

Ainsi, à l'aide de la figure 2 sur l'erreur d'amplitude, nous observons un grand écart entre la solution exacte pour les grands nombres d'ondes dans le schéma décentré d'ordre 3. Les valeurs commencent à s'écarter à partir de $\frac{kh}{\pi} = 0.30$, vis à vis de la solution exacte, pour ensuite stagner sur une valeur dans les alentours de $\frac{kh}{\pi} = 0.67$. Les autres schémas, E2, E4 et E6, ont des nombres d'ondes effectives qui diminuent très fortement jusqu'à s'annuler pour les grands nombres d'onde exact, si bien que, pour ces schémas classiques, on aura des valeurs similaires entre les petits et les grands longueurs d'onde, ce qui peut être désastreux pour la simulation même si le schéma d'ordre 6 fidèle plus longtemps à la solution exact. 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 qui se confondent avec l'axe imaginaire, si bien que ils ne vont que s'allonger sur cet axe, dépendant du schéma centré. 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 instable, tandis que notre modèle décentré est conditionnellement stable bien que ce dernier possède une diffusion numérique importante.

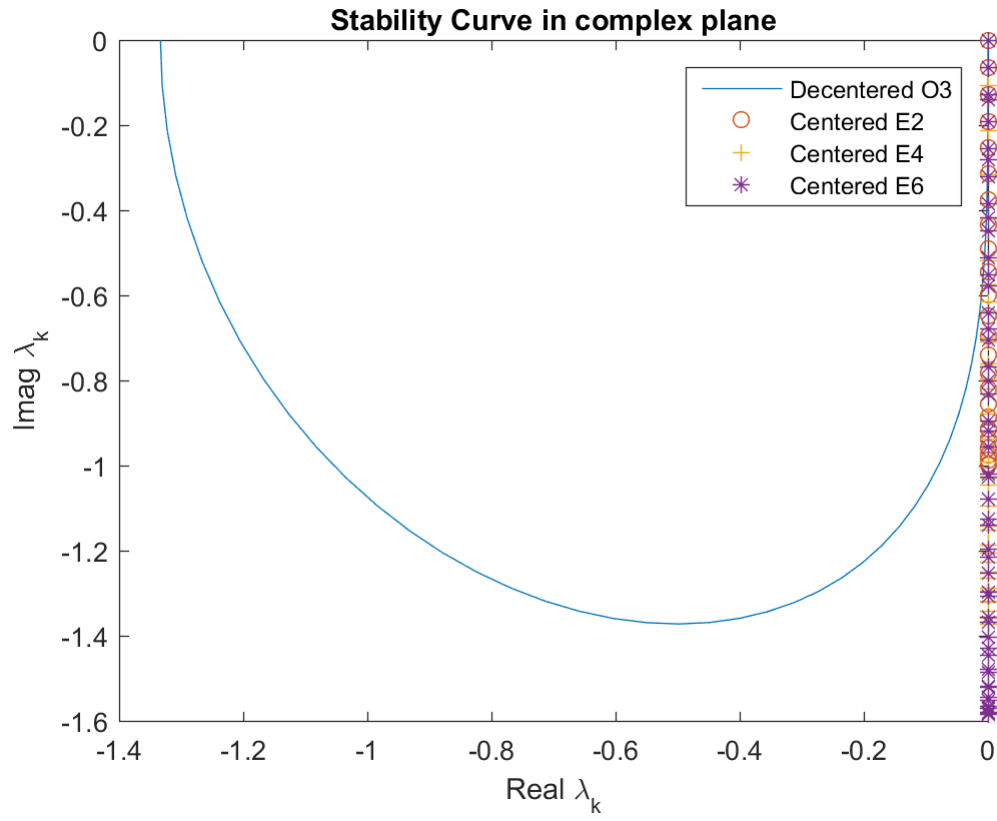


Figure 3: Courbe de stabilité dans le plan complexe pour $0 < \frac{kh}{\pi} < 1$

4 Simulation de la convection

4.1 Taille des meshes

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, nous allons nous intéresser à la partie convective, si bien que nous fixons ainsi temporairement $\nu = 0$. Pour nous aider dans la confection de cette simulation, nous utiliserons les relations adimensionnelles suivant: $\frac{h}{\sigma}$, le rapport entre la taille de la "mesh" sur σ , 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, et $\frac{ct}{L}$, le temps adimensionnelisé, **qui sera appelé dans ce rapport par τ par facilité de notation**. Enfin, nous fixons notre σ à $\frac{L}{32}$ pour que le domaine soit assez large afin de 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, et à la solution exacte analytique: la Déc centré d'ordre 3, Euler Explicite Centr é 2 (E2), Euler Explicite Centr é 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 $\mathcal{O}(n)$.

Maintenant, 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 partie de 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. E4 tend à se rapprocher de plus en plus à la solution exacte, 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, précédemment, que la solution décentrée a une tendance à diffuser fortement, ce qui semble apparaître ici. Nous concluons donc que h joue un rôle majeur dans la qualité de la simulation.

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. Le programme a aussi été conçu pour être compilé avec un terminal avec comme commande `"gcc src/HM.c -o Main -Wall -std=gnu99 -lm"`. Normalement, il n'y a pas non plus de leak possible puisqu'il a été vérifié avec valgrind.

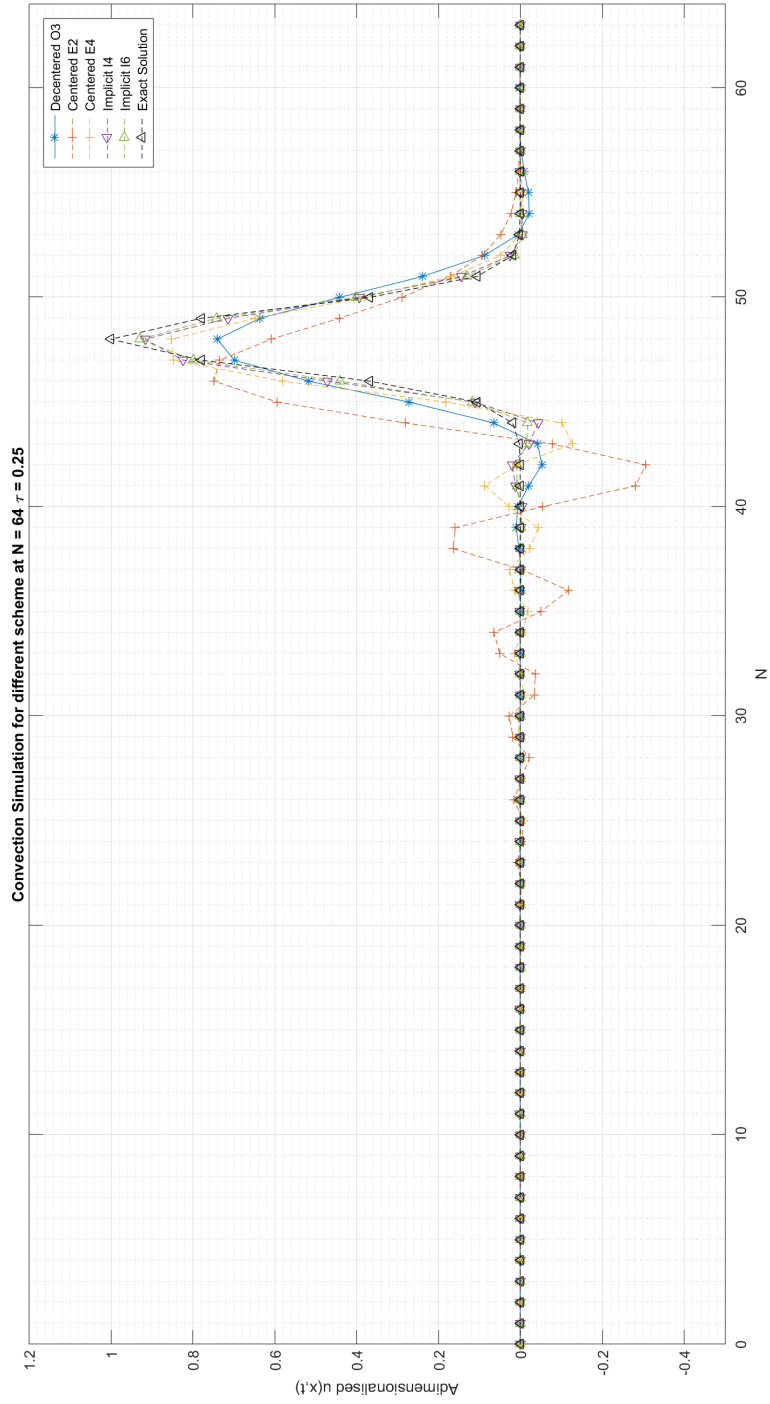


Figure 4: Représentation de $\frac{\sqrt{\pi\sigma^2}}{Q}U$ à $\tau = 0.25$ $N = 64$

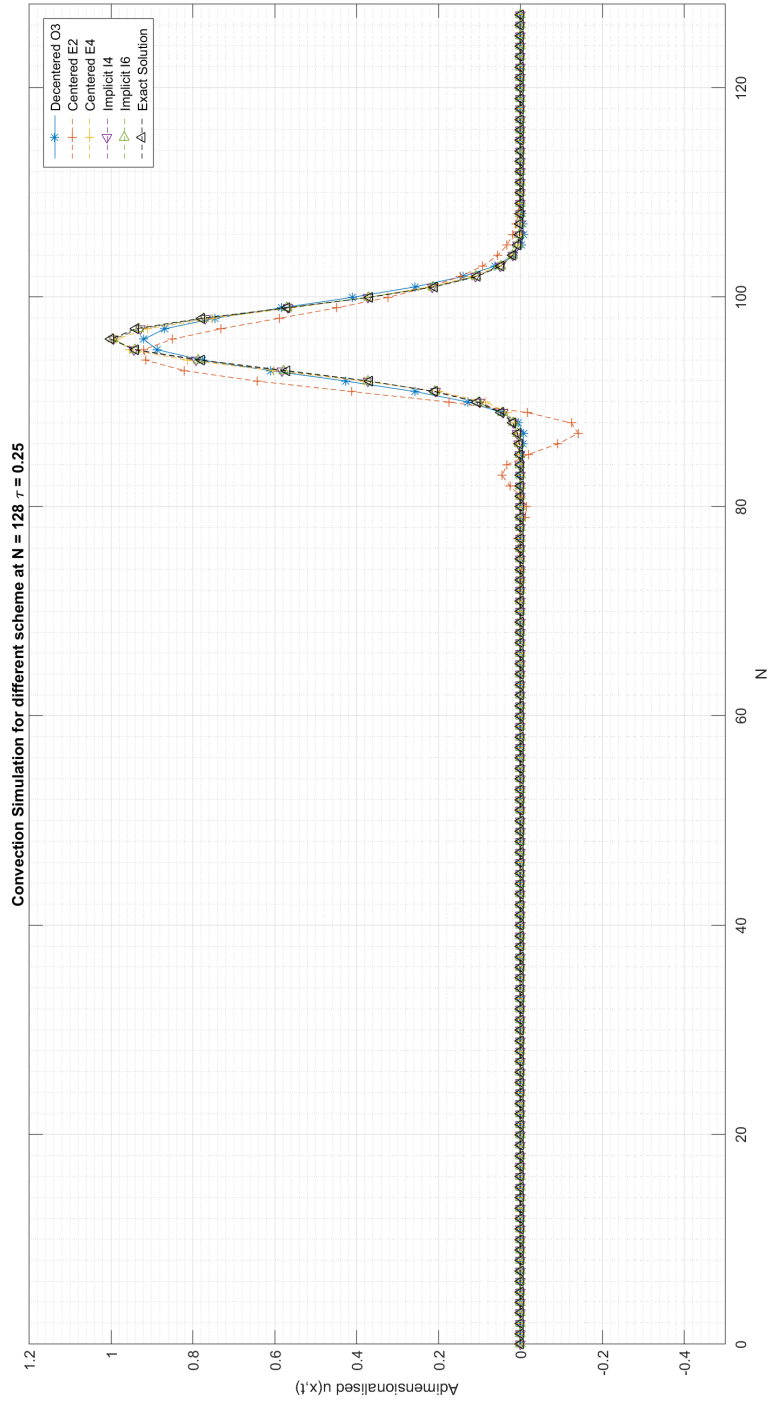


Figure 5: Représentation de $\frac{\sqrt{\pi\sigma^2}}{Q}U$ à $\tau = 0.25$ $N = 128$

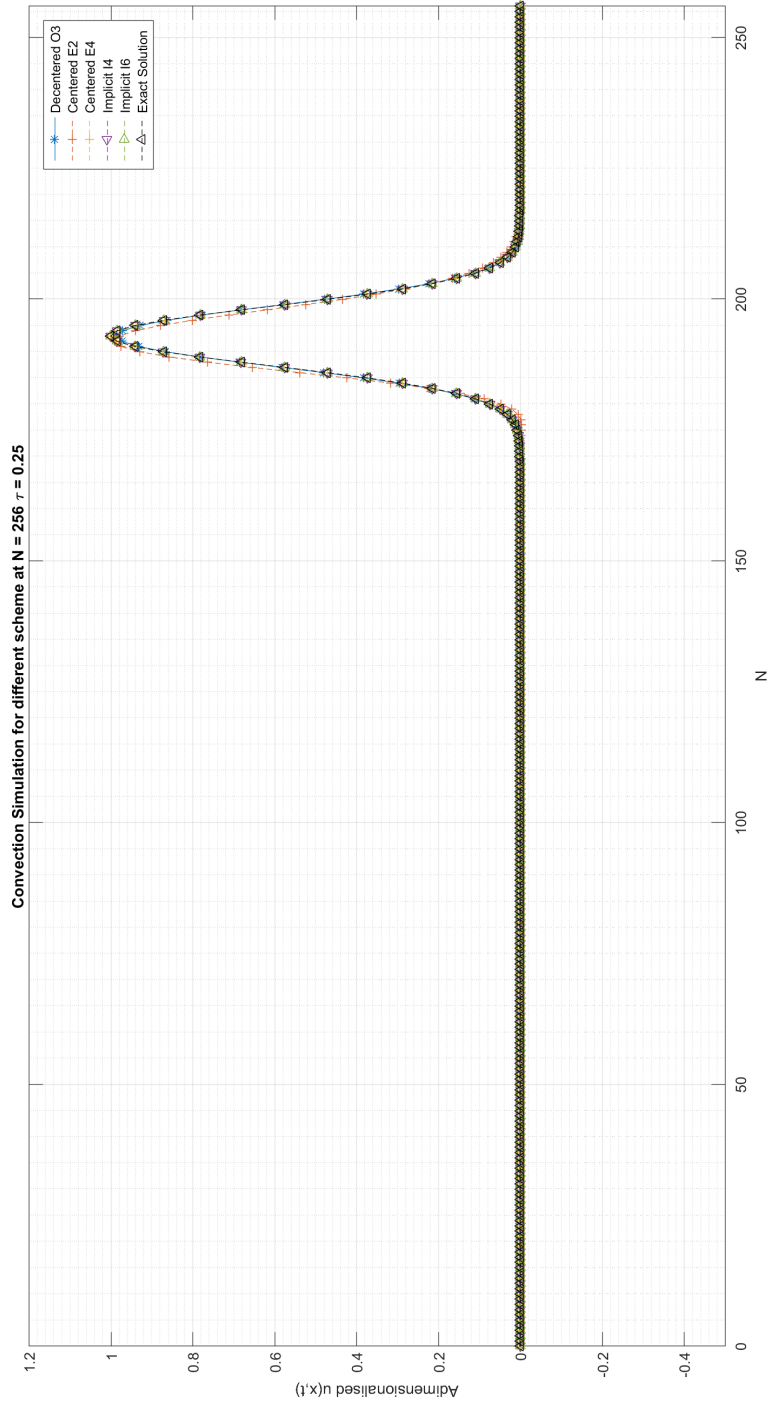


Figure 6: Représentation de $\frac{\sqrt{\pi\sigma^2}}{Q}U$ à $\tau = 0.25$ $N = 256$

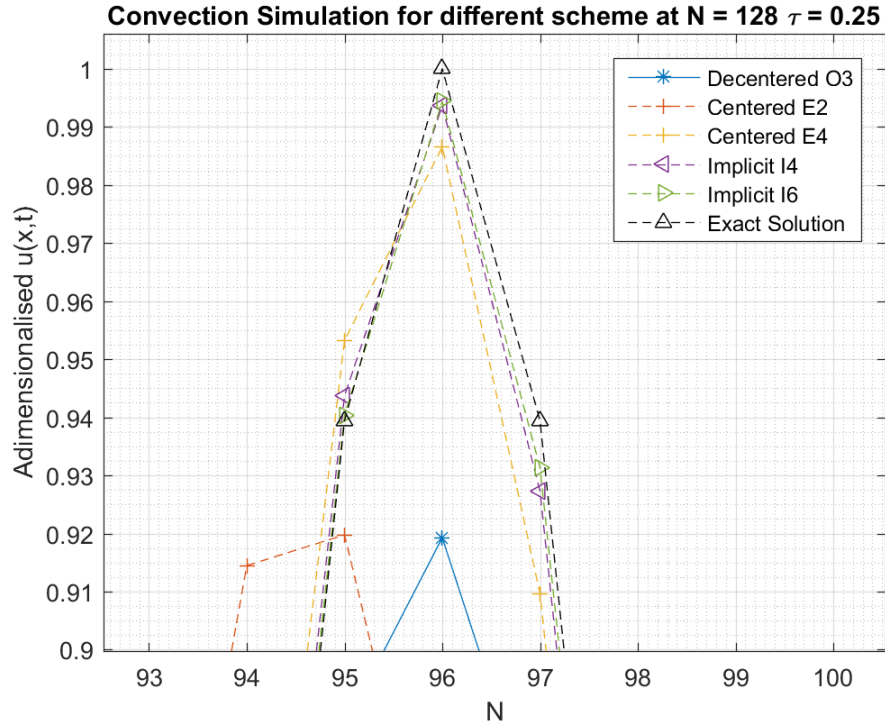


Figure 7: Représentation de $\frac{\sqrt{\pi\sigma^2}}{Q}U$ à $\tau = 0.25$ N = 128 , zoom-in

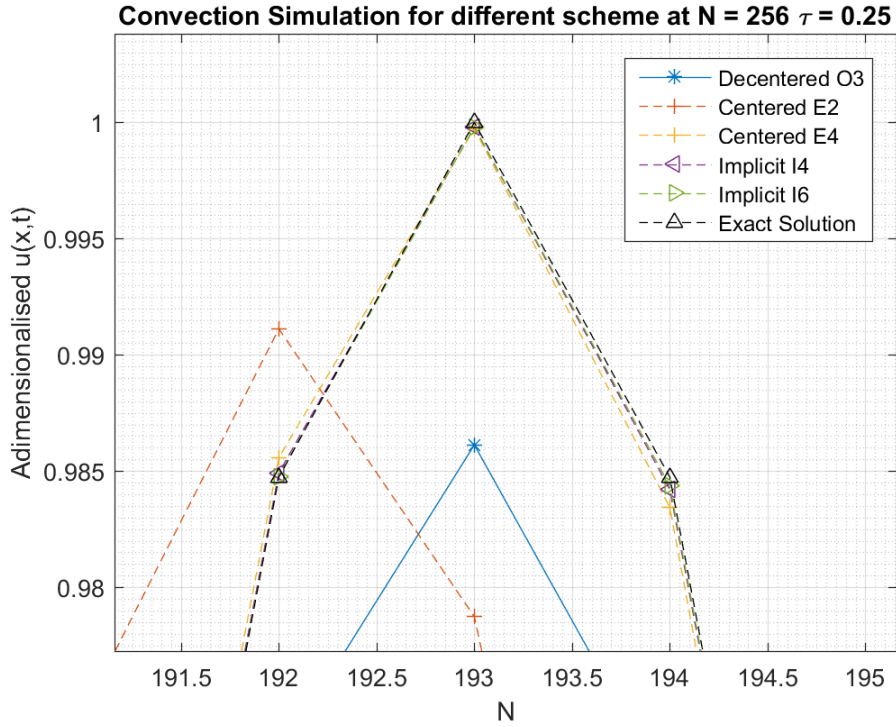


Figure 8: Représentation de $\frac{\sqrt{\pi\sigma^2}}{Q}U$ à $\tau = 0.25$ N = 256 , zoom-in

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 un domaine avec 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, et 16, une instabilité apparaît dans les alentours de $\tau = 0.50$ pour E2, alors qu'il était à peu près stable avant, de même que cet instabilité s'intensifie de plus en plus au cours du temps, comme nous le voyons très bien entre $\tau = 0.25$ et $\tau = 1.00$. Les autres schémas restent par contre stable, de même que les schémas implicites, et le schéma E4 restent toujours fidèles à la solution exacte. Enfin, le schéma décentré d'ordre 3 possède toujours une amplitude bien plus petite que celle de la solution exacte.

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

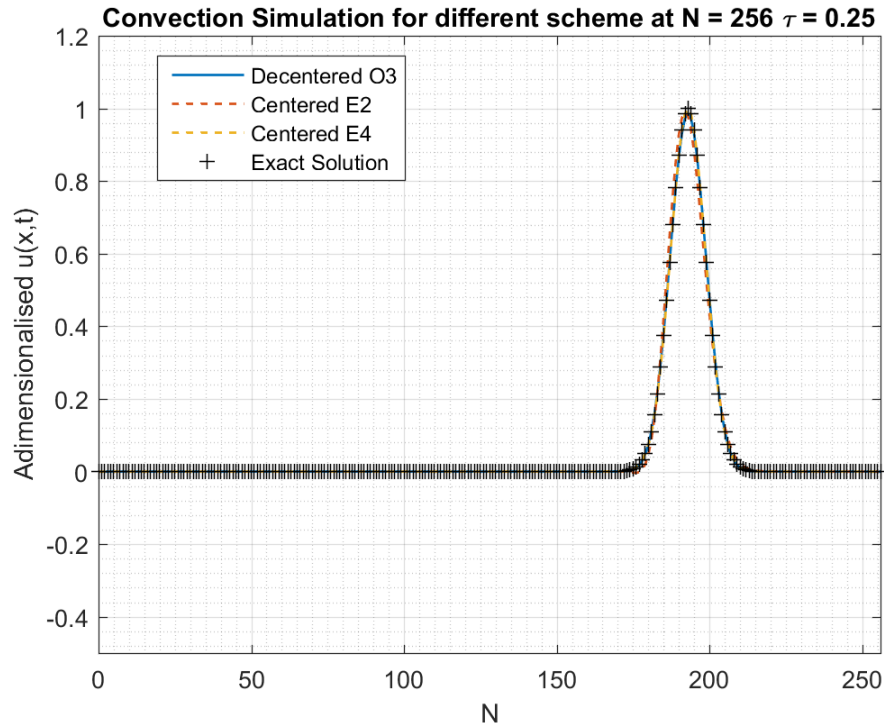


Figure 9: Représentation de $\frac{\sqrt{\pi\sigma^2}}{Q}U$ à $\tau = 0.25$ $N = 256$ - Schéma Explicite

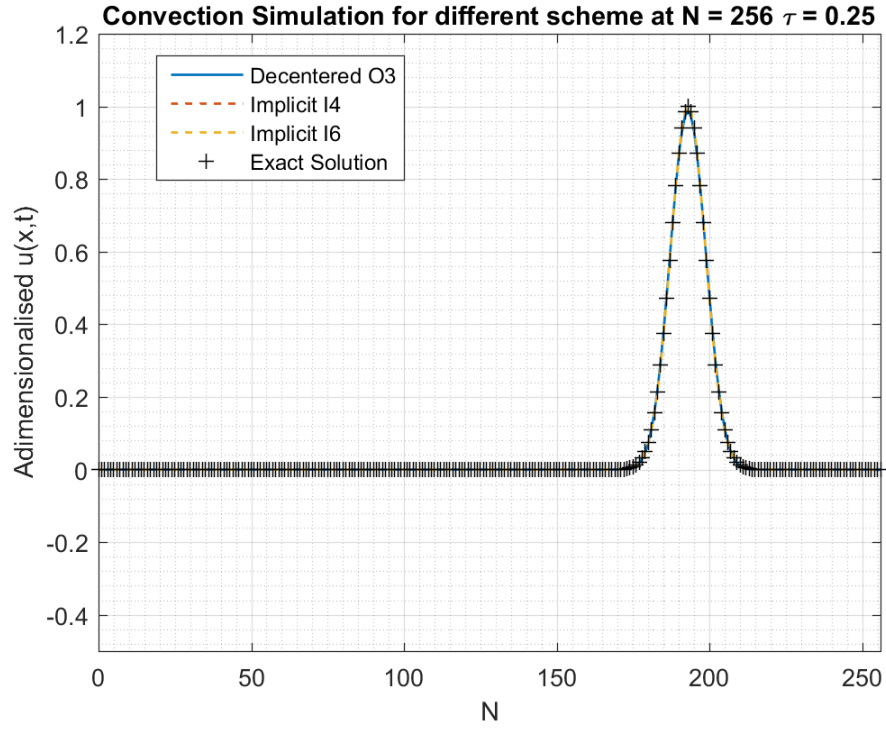


Figure 10: Représentation de $\frac{\sqrt{\pi\sigma^2}}{Q}U$ à $\tau = 0.25$ $N = 256$ - Schéma Implicite

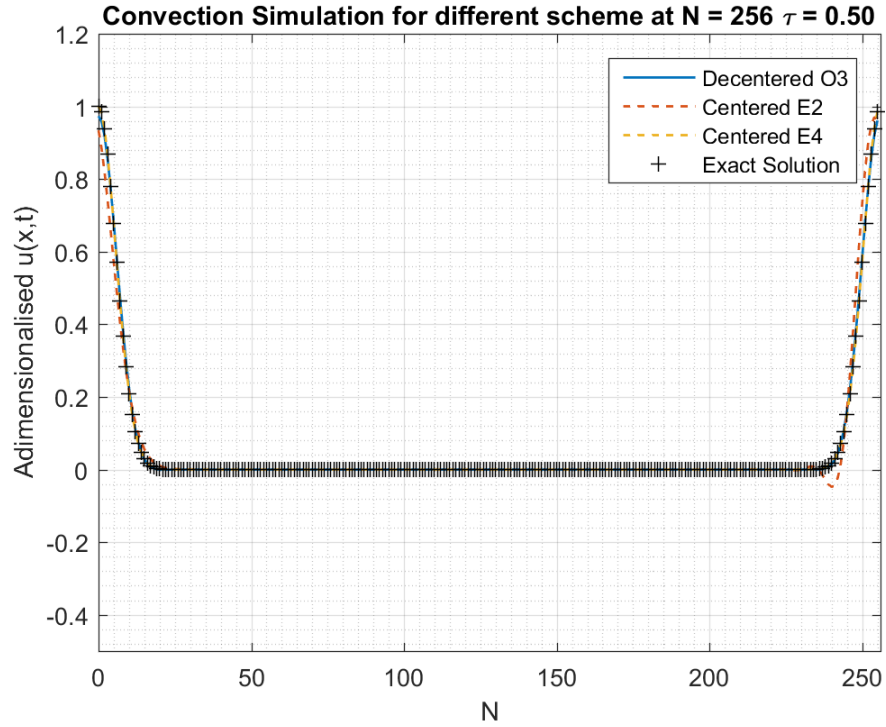


Figure 11: Représentation de $\frac{\sqrt{\pi\sigma^2}}{Q}U$ à $\tau = 0.50$ $N = 256$ - Schéma Explicite

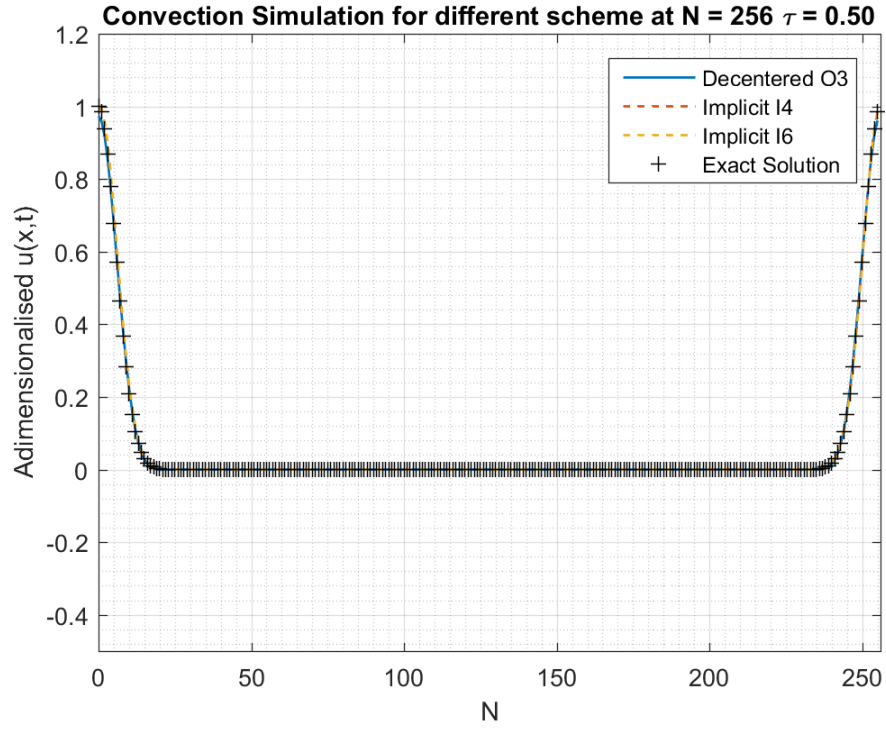


Figure 12: Représentation de $\frac{\sqrt{\pi\sigma^2}}{Q}U$ à $\tau = 0.50$ N = 256 - Schéma Implicite

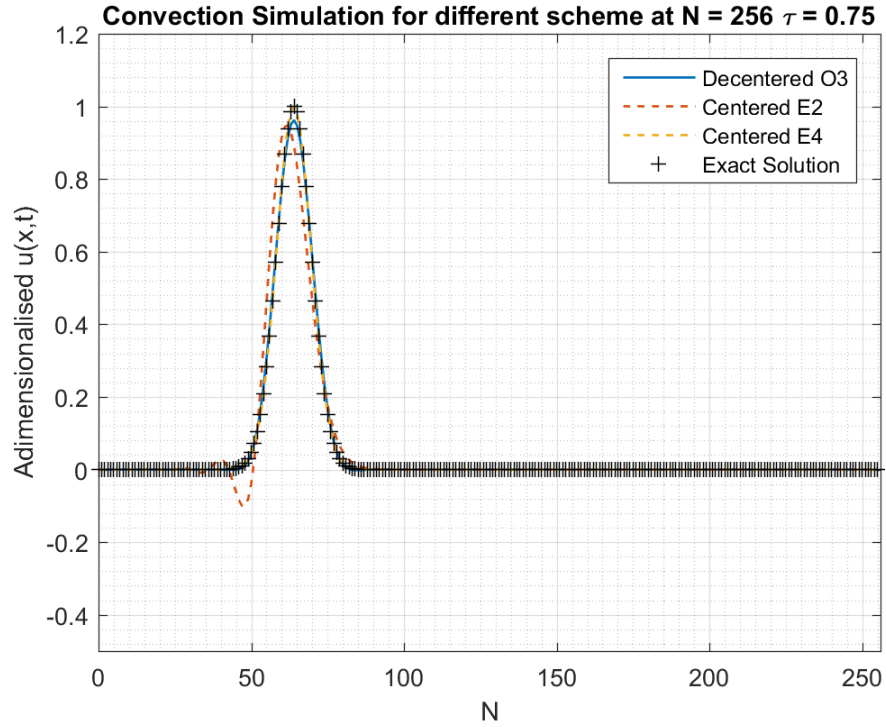


Figure 13: Représentation de $\frac{\sqrt{\pi\sigma^2}}{Q}U$ à $\tau = 0.75$ N = 256 - Schéma Explicite

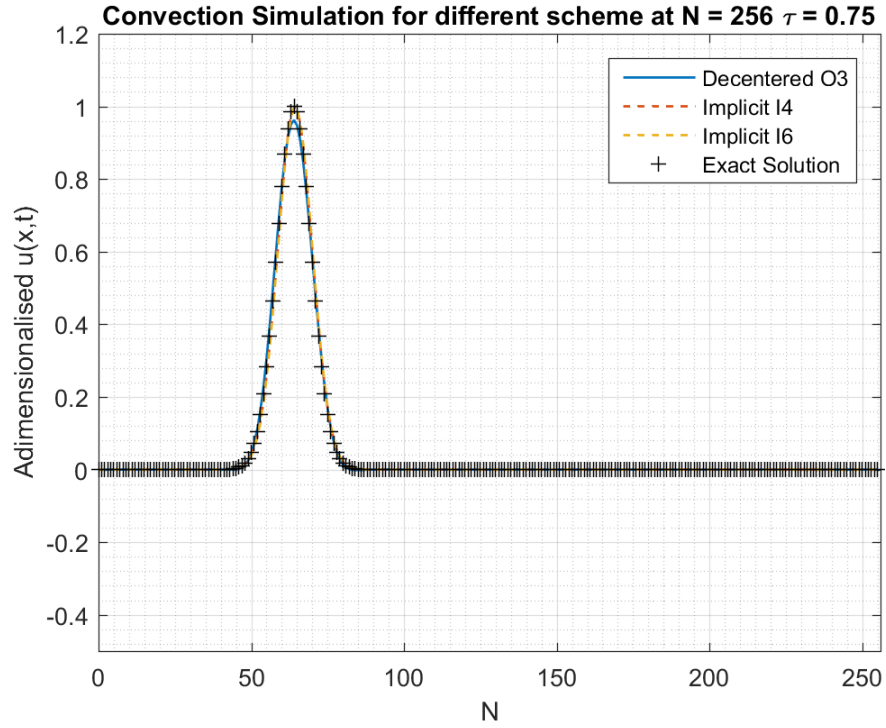


Figure 14: Représentation de $\frac{\sqrt{\pi\sigma^2}}{Q}U$ à $\tau = 0.75$ N = 256 - Schéma Implicite

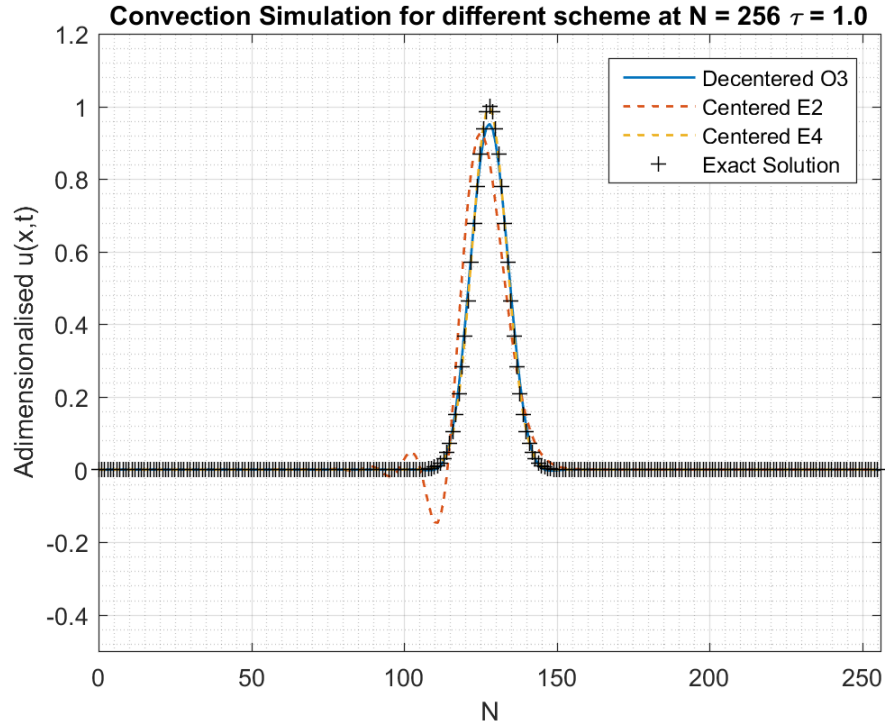


Figure 15: Représentation de $\frac{\sqrt{\pi\sigma^2}}{Q}U$ à $\tau = 1.00$ N = 256 - Schéma Explicite

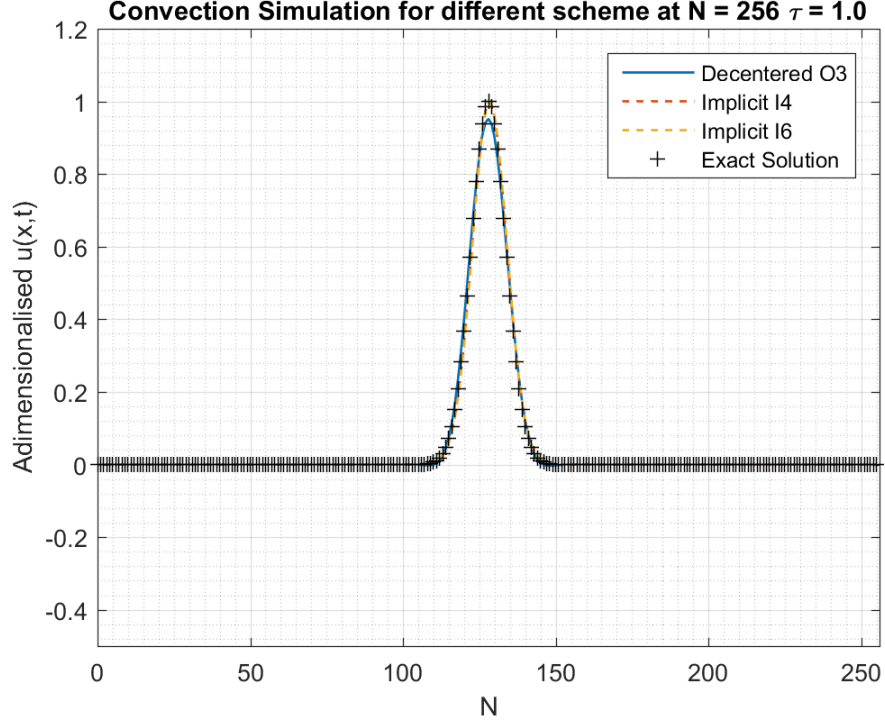


Figure 16: Représentation de $\frac{\sqrt{\pi\sigma^2}}{Q}U$ à $\tau = 1.00$ $N = 256$ - Schéma Implicite

Maintenant, nous analyserons en détails le comportement de nos schémas en appliquant des diagnostics 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 calculé à chaque pas de temps, si bien que nous obtenons au final une évolution temporelle de ces éléments de diagnostique, représenté ci dessous par les figures 17, 18, et 19. Nous remarquons dans un premier lieu que le Q reste constant pour chacun des schémas, ce qui montre que nos méthodes respectes le fait que cet intégral soit toujours conservé au cours du temps. Ensuite, pour E_h^n , on remarque que la méthode décentrée décroît fortement alors que le reste ne décroît que très légèrement. Ce qui confirme le fait que le schéma a une diffusion numérique plus importante que les autres comme on l'avait annoncé. En ce qui concerne de R_h^n , il nous montre bien que le schéma E2 dégénère complètement au fil du temps, de même que l'erreur fait par le schéma décentrée est relativement grand comparé aux restes des schémas. En utilisant la figure 20, on voit qu'on a un ordre de convergence d' $\mathcal{O}(10^{-1})$ pour E4 et la décentré 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 $\mathcal{O}(1)$.

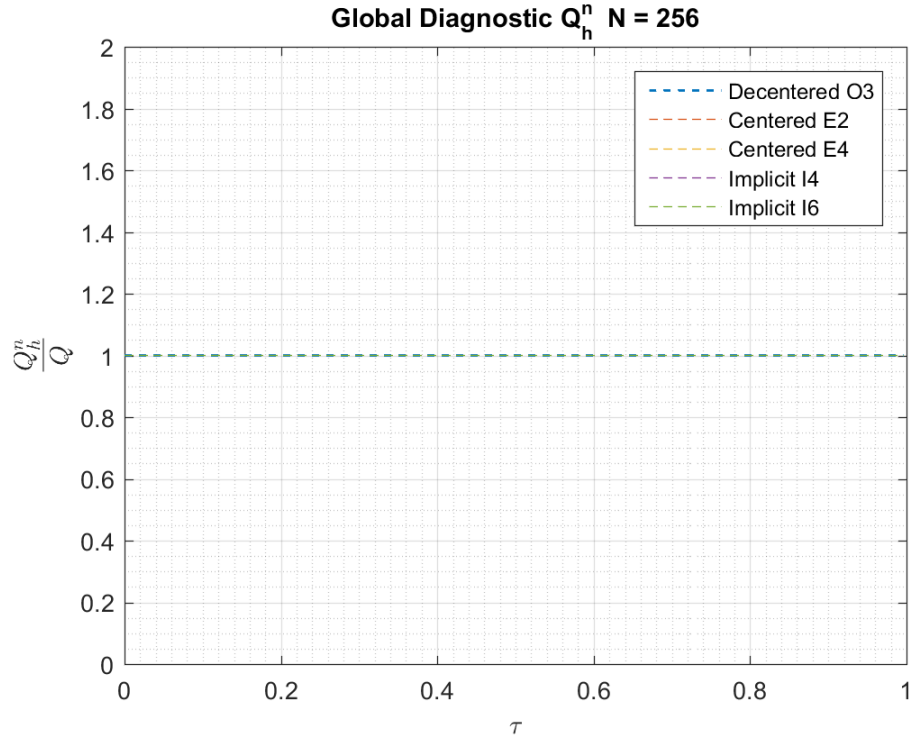


Figure 17: Diagnostique Globale $\frac{Q_h^n}{Q}$ $N = 256$

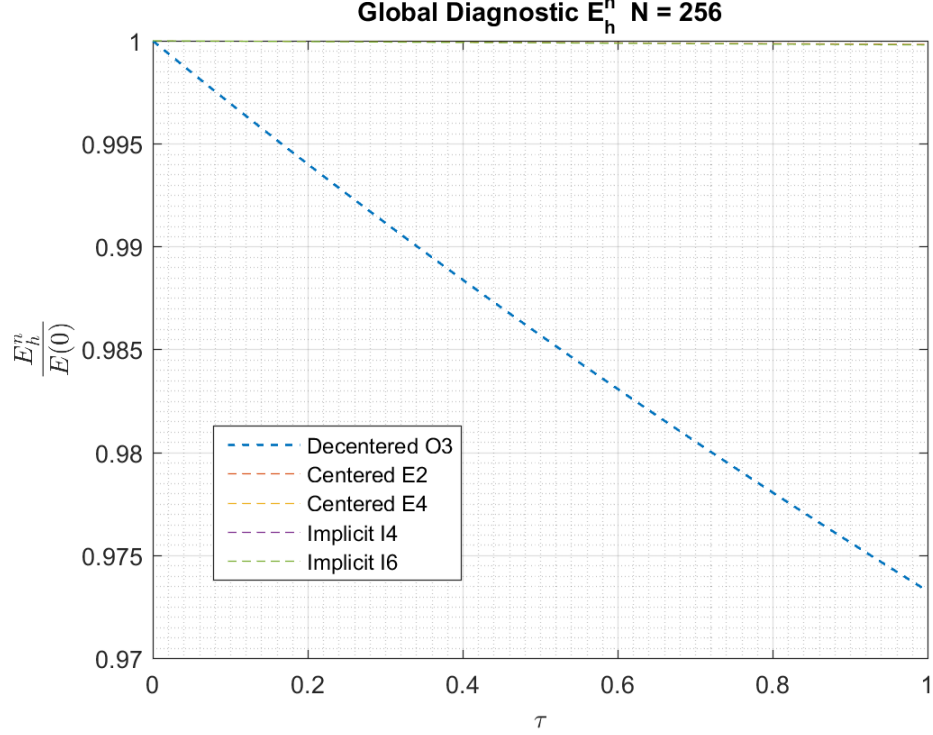


Figure 18: Diagnostique Globale $\frac{E_h^n}{E(0)}$ $N = 256$

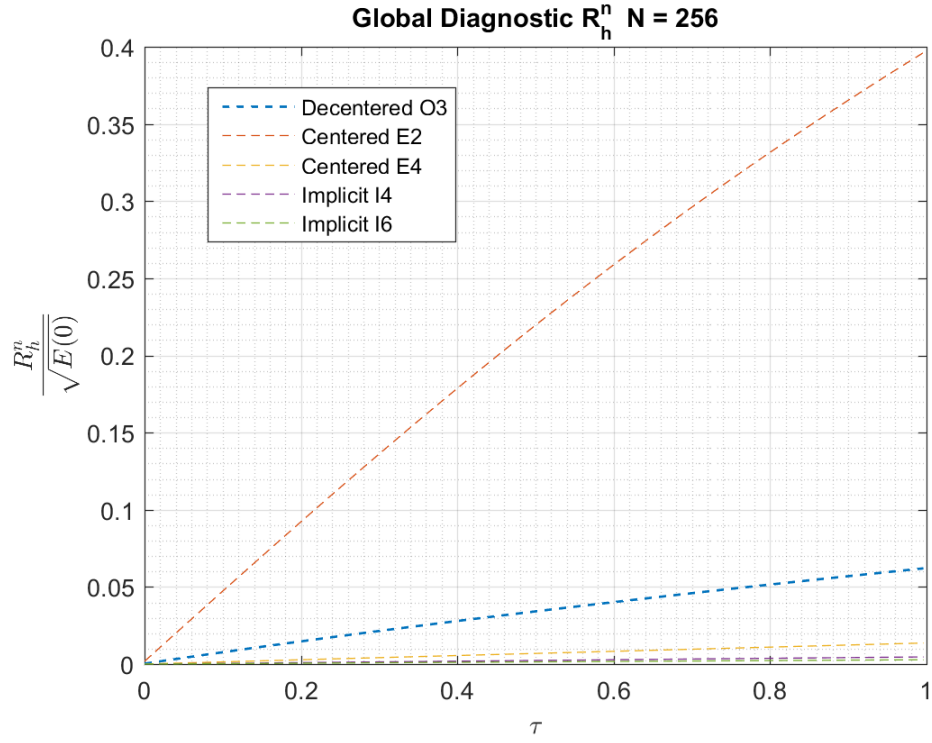


Figure 19: Diagnostique Globale $\frac{R_h^n}{\sqrt{E(0)}}$ $N = 256$

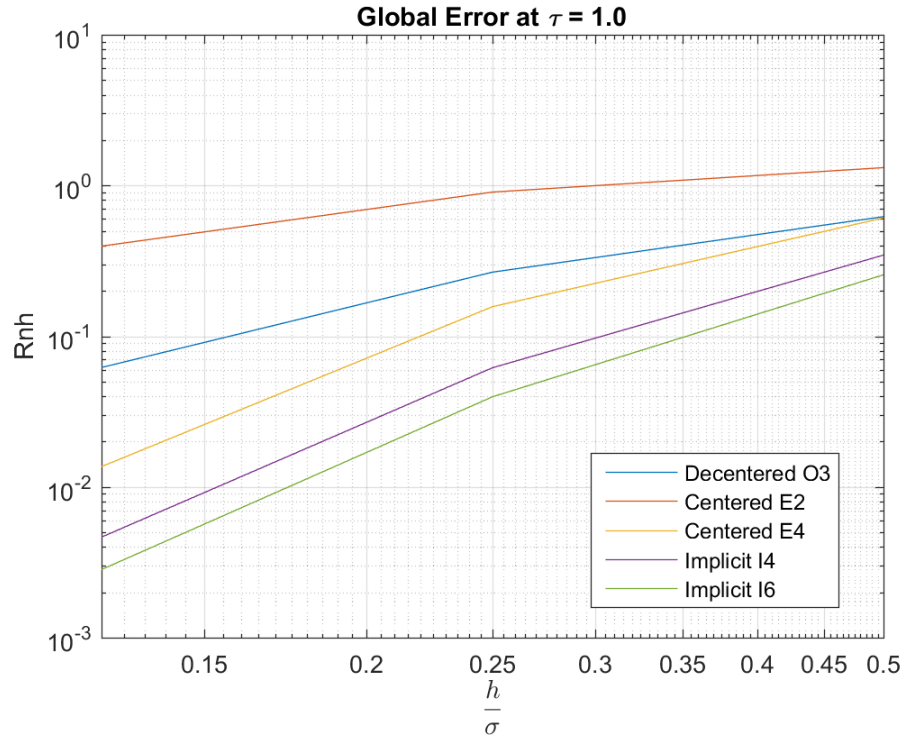


Figure 20: Évolution de l'erreur globale à $\tau = 1.0$ en fonction de $\frac{h}{sigma}$

5 Simulation de la convection et de la diffusion

Pour cette partie, nous utilisons un $\frac{h}{\sigma} = 1/4$, c'est à dire $N = 128$, avec un $Re_\sigma = 40$. Nous utiliserons aussi une différence finie 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. En effet, on aurait des schémas de convection bien trop précis pour un schéma de diffusion d'ordre 2. 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, mais elle n'est 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, comme on l'espérait, 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.

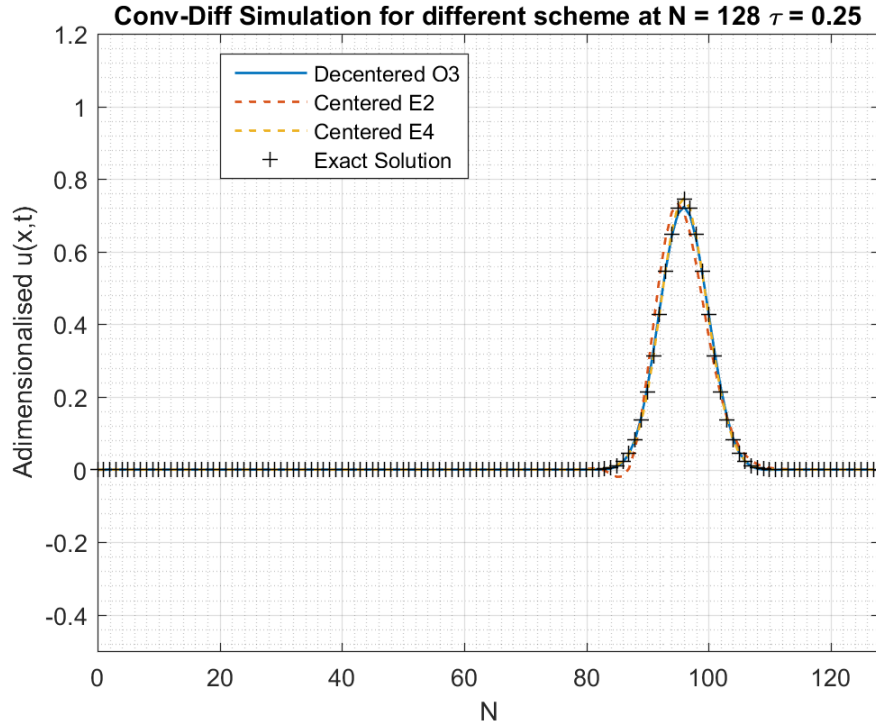


Figure 21: Représentation de $\frac{\sqrt{\pi\sigma^2}}{Q}U$ à $\tau = 0.25$

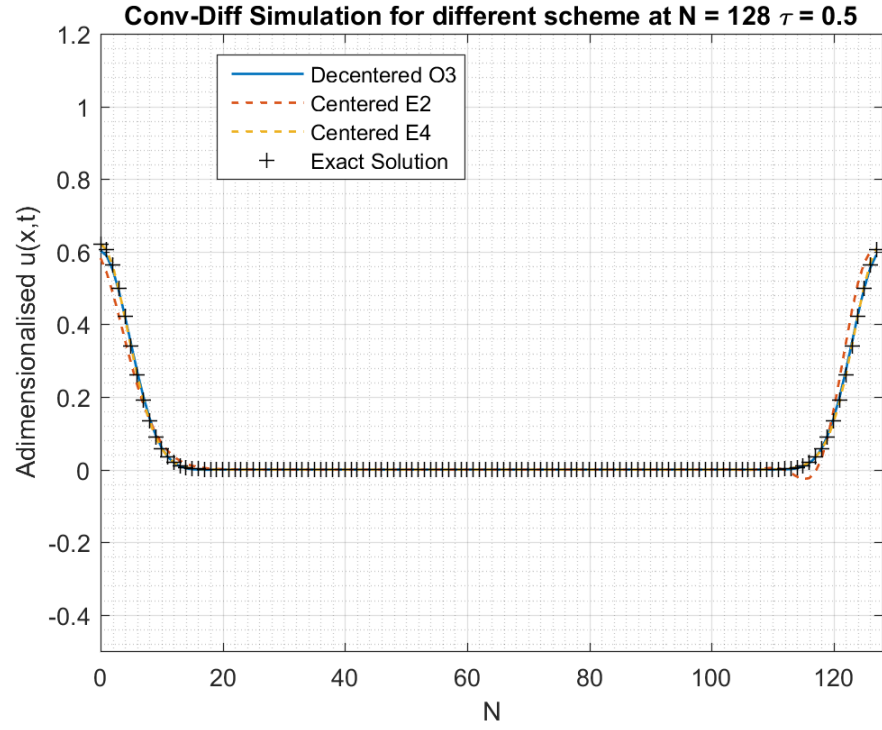


Figure 22: Représentation de $\frac{\sqrt{\pi\sigma^2}}{Q}U$ à $\tau = 0.50$

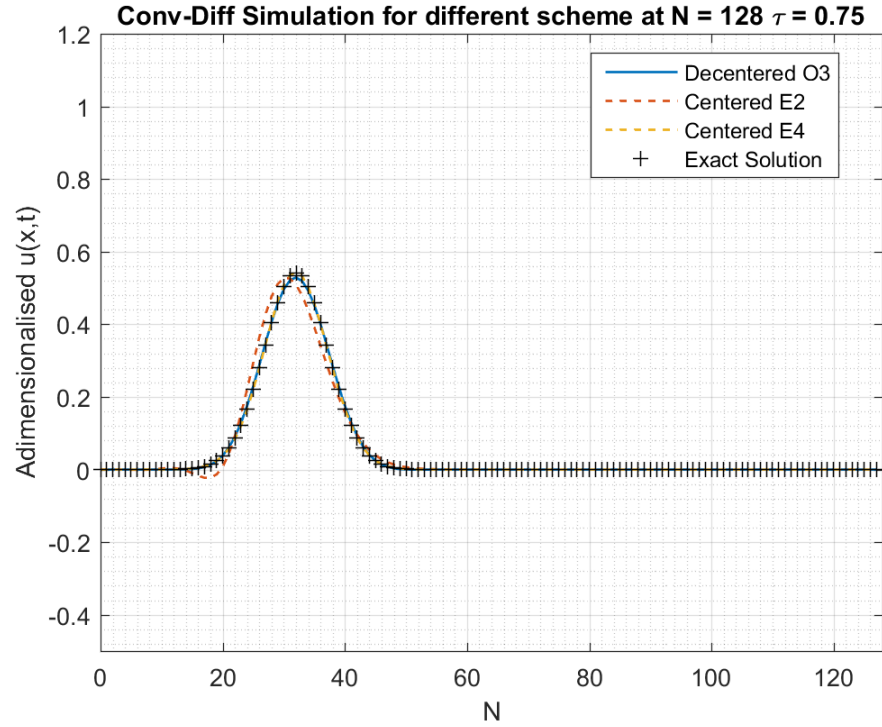


Figure 23: Représentation de $\frac{\sqrt{\pi\sigma^2}}{Q}U$ à $\tau = 0.75$

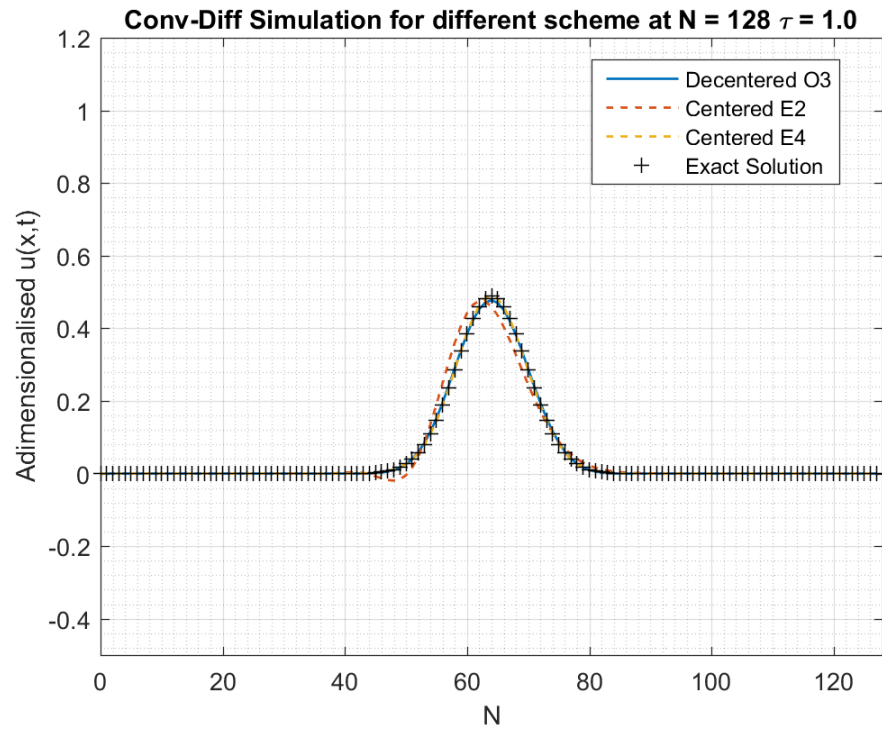


Figure 24: Représentation de $\frac{\sqrt{\pi\sigma^2}}{Q}U$ à $\tau = 1.00$

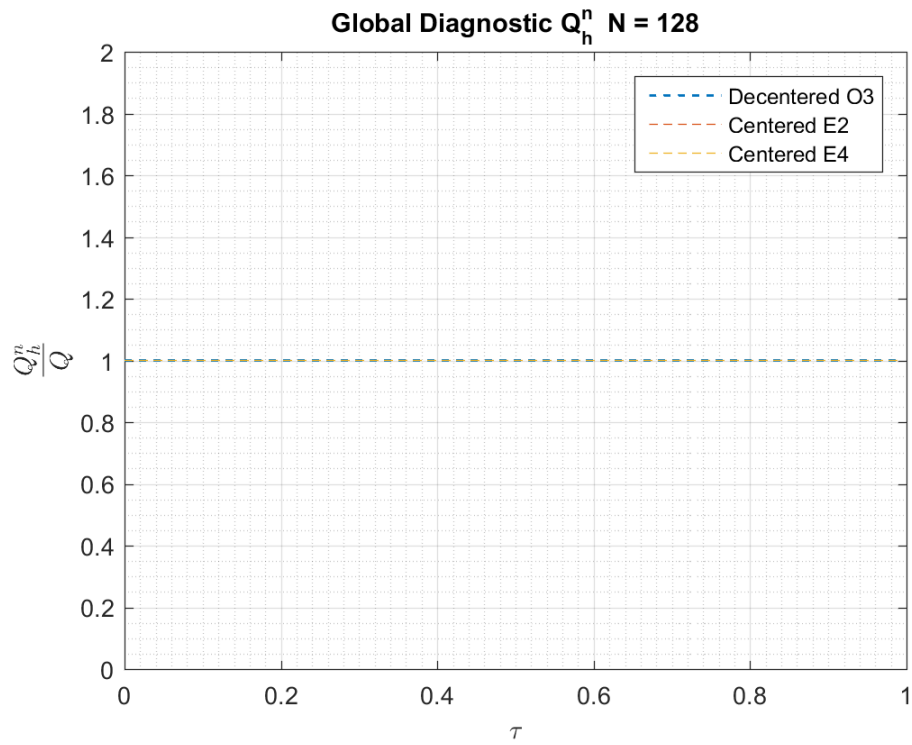


Figure 25: Diagnostique Globale $\frac{Q_h^n}{Q}$ N = 128

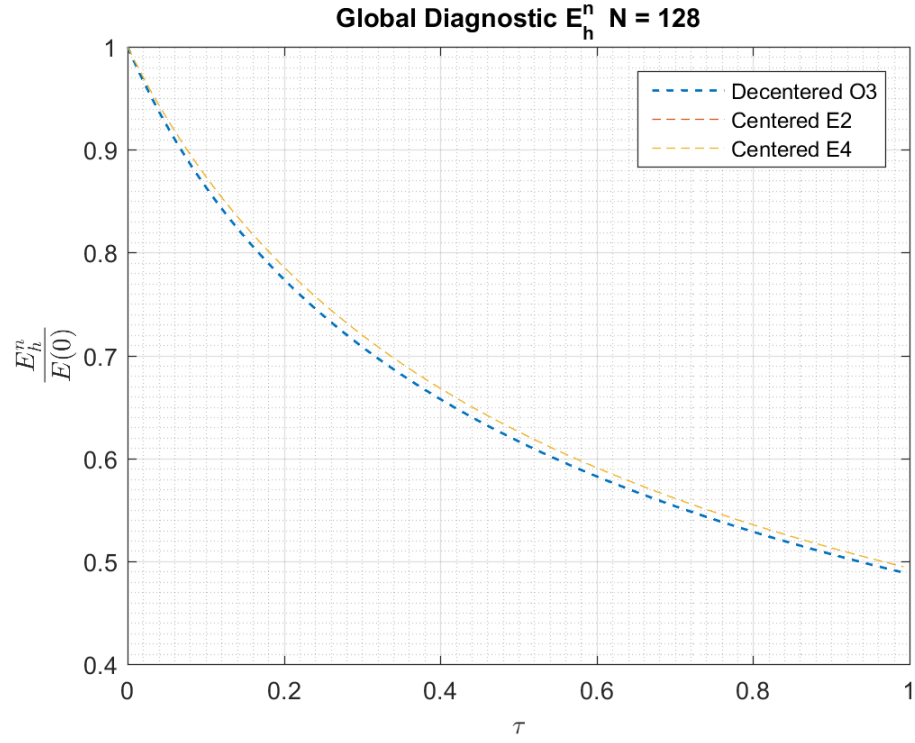


Figure 26: Diagnostique Globale $\frac{E_h^n}{Q}$ N = 128

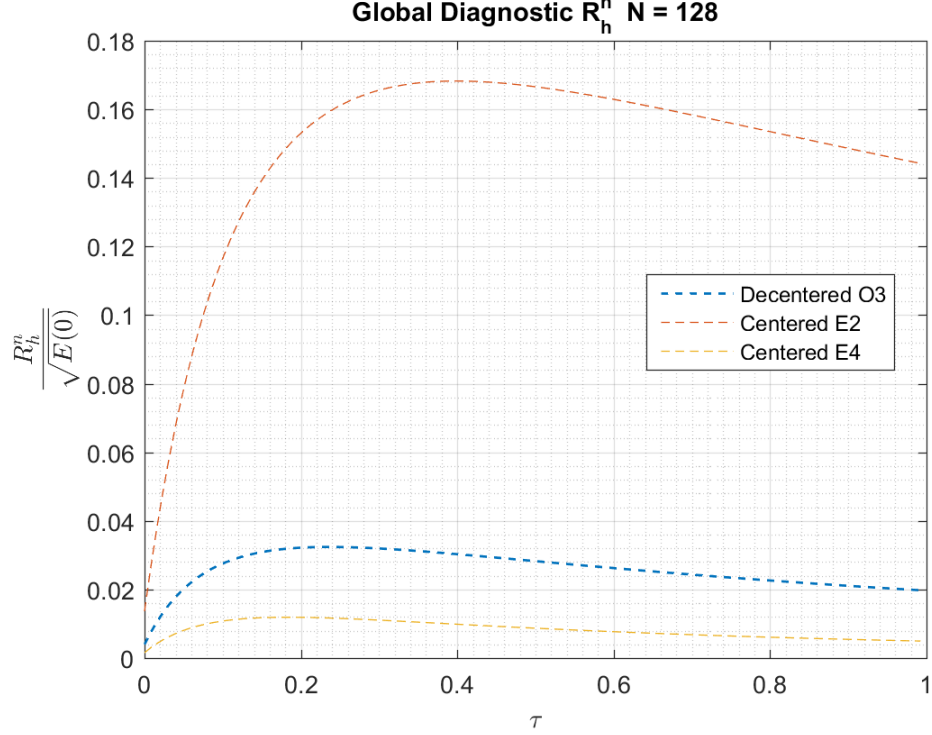


Figure 27: Diagnostique Globale $\frac{R_h^n}{Q}$ N = 128

6 Comparison Pure Convection vs Convection & Diffusion

Nous allons maintenant comparer notre convection-diffusion avec le cas d'une convection pure, de ce fait nous allons utiliser 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, ce qui est normal puisqu'on est entrain de diffusé. En observant les graphes de diagnostique, nous avons toujours un Q_h^n constant, toutefois nous remarquons aussi que la E_h^n de la pure convection semble diminuer plus rapidement en que celle de la convection-diffusion. Il semblerait donc que la diffusion atténue aussi la perte d'énergie. Enfin, 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 puisque la courbe diminue légèrement vers $\tau = 30$.

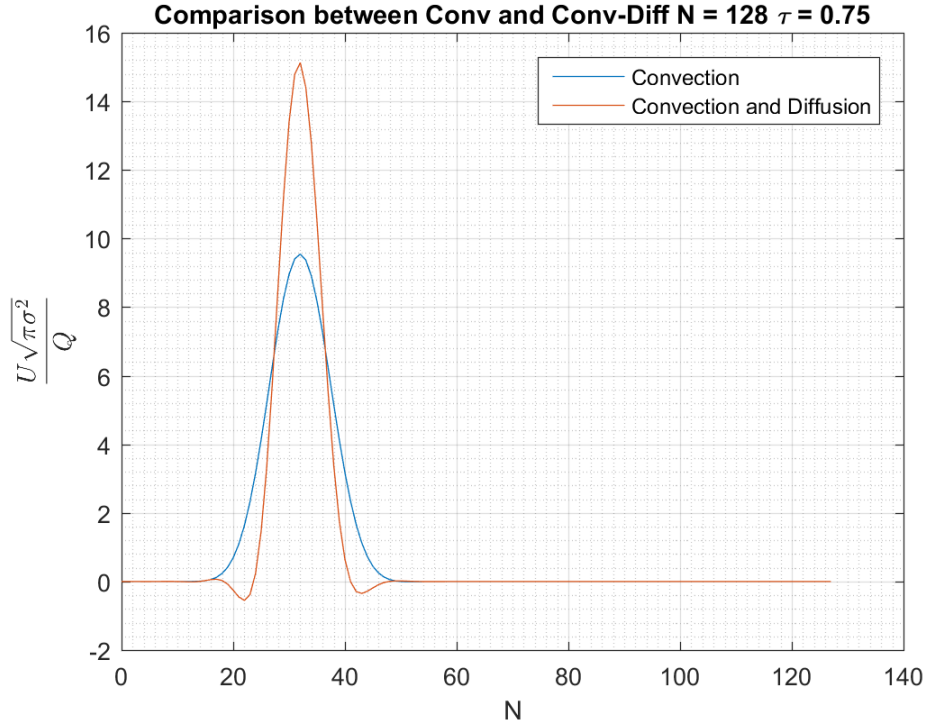


Figure 28: Représentation de $\frac{\sqrt{\pi\sigma^2}}{Q}U$ Pure-Conv vs Conv-Diff à $\tau = 0.75$ $N = 128$

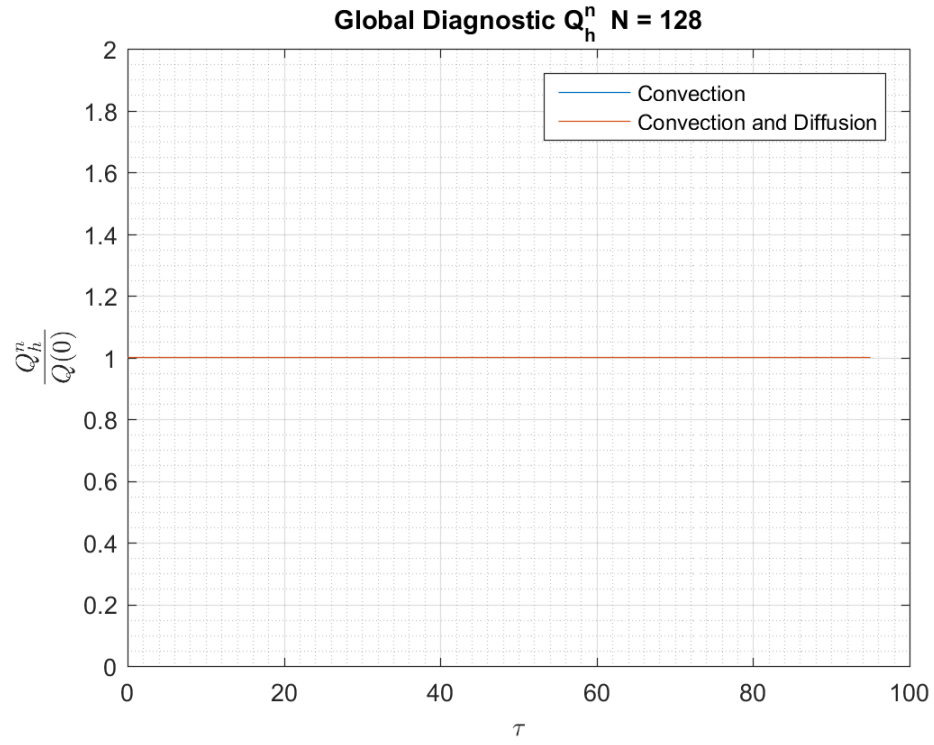


Figure 29: Diagnostique Globale $\frac{Q_h^n}{Q}$ Pure-Conv vs Conv-Diff N = 128

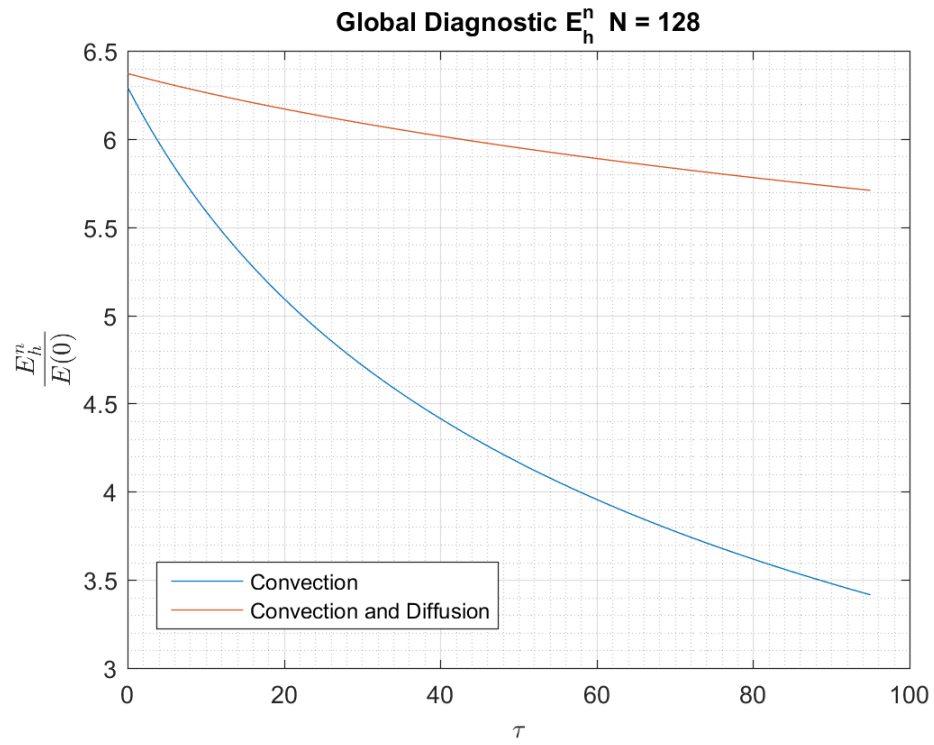


Figure 30: Diagnostique Globale $\frac{E_h^n}{Q}$ Pure-Conv vs Conv-Diff N = 128

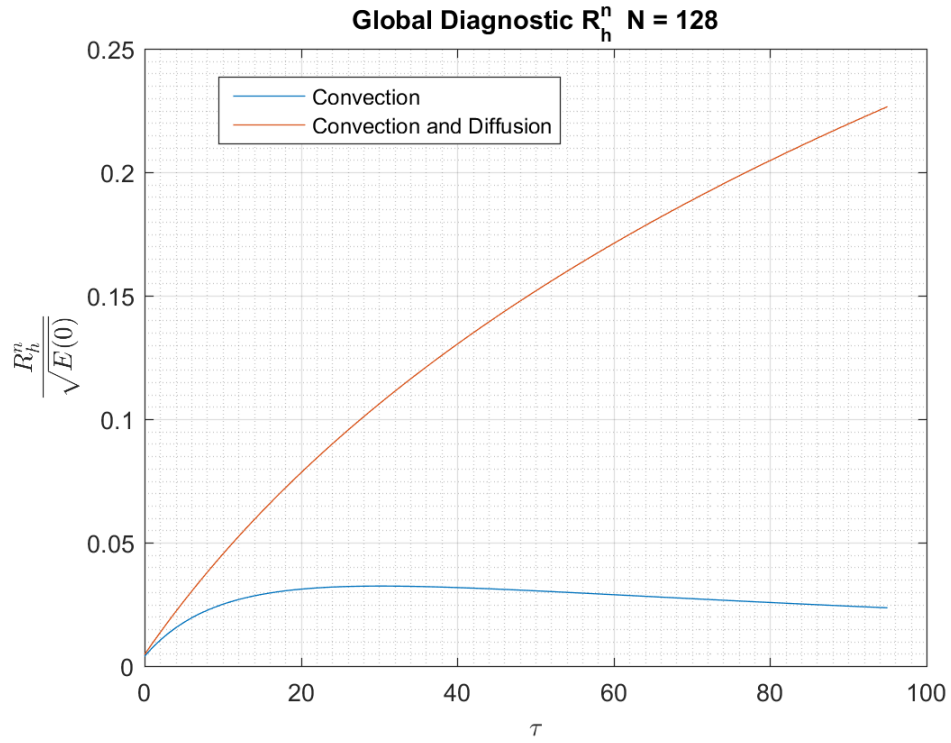


Figure 31: Diagnostique Globale $\frac{R_h^n}{Q}$ Pure-Conv vs Conv-Diff N = 128

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