

Physique Numérique - Exercice 5

Diffusion de polluant

Jonas Gruetter, Chloe Mondon
jonas.grutter@epfl.ch, chloe.mondon@epfl.ch

1er avril 2020

Table des matières

1	Introduction	1
2	Programmation	2
3	Convergence et stabilité du schéma explicite à deux niveaux	3
3.1	Convergence en Δt de la densité n en un point de Ω à $t = 5s$	3
3.2	Limite de stabilité en Δt	4
4	Convergence de l'algorithme de sur-relaxation	5
4.1	Convergence du résidu en fonction des itérations pour $\alpha = 1.0$ et $\alpha = 1.8$	5
4.2	Valeur optimale de α pour une $p = 2 \times 10^{15}$	6
4.3	Étude de convergence de la densité n_s en fonction de p , pour $\alpha = 1.805$	7
4.4	Étude de convergence de la densité n_s en fonction de $N_{intervalles}$, pour $\alpha = 1.805$	8
5	Flux de particules	8
6	Facultatif	9
6.1	Modification du schéma pour laisser évoluer librement la densité de particules sur l'usine et le système dépolluant	9
7	Conclusion	10
8	Annexe	11

1 Introduction

Le but de cet exercice est d'étudier le comportement du flux de matière dans un milieu homogène. Ici, les émissions de fumée liées à une usine sont étudiées. Pour ce faire, on considère une boîte carrée de longueur $L = 100m$ qui contient deux corps rectangulaires : une usine, à

densité constante n_1 émettant des particules de fumée et un système de dépollution, à densité constante n_2 , qui a pour but de nettoyer l'air. Le bord du carré est aussi à densité constante n_b . Ω est le domaine des points intérieurs du carré, sans compter les deux rectangles. Tous les points du domaines Ω sont initialisés à une densité initiale ($n(x, y, t = 0) = n_0, \forall (x, y) \in \Omega$) et l'évolution de la densité en ces points sera étudiée. Le flux de particule \vec{j} est décrit par $\vec{j} = -D\nabla n$ ou n est la densité et $D = \text{const}$ est le coefficient de diffusion. Le champ de densité satisfait l'équation de densité :

$$\frac{\partial n(\vec{x}, t)}{\partial t} = D\nabla^2 n(\vec{x}, t) \quad (1)$$

Et dans la limite des temps longs, la densité tend vers une distribution stationnaire $\lim_{t \rightarrow \infty} n(\vec{x}, t) = n_s(\vec{x}, t)$ et satisfait l'équation de Laplace :

$$\nabla^2 n_s = 0 \quad (2)$$

Au niveau physique, les objectifs sont d'étudier le comportement du flux de matière et de vérifier que la solution de l'équation de diffusion Eq.(1) tend bien vers la solution stationnaire Eq.(2). Au niveau numérique, les objectifs sont d'écrire un schéma à deux niveaux pour résoudre Eq.(1) et un schéma de Gauss-Siedel avec sur-relaxation pour résoudre Eq.(2).

2 Programmation

La partie programmation consiste à coder en C++ les deux schémas utilisés dans la suite de l'exercice : le schéma explicite à deux niveaux et le schéma de Gauss-Seidel avec sur-relaxation. Le champ de densité satisfait l'éq.(1). Pour la dérivée temporelle, un schéma de différences finies progressive est utilisé et un schéma de différence finie centrée est utilisé pour le calcul du Laplacien. La notation suivante est utilisée : $n_{i,j}^k$ où k est un indice représentant le temps, i et j représentent les positions en x et y respectivement. On obtient donc les équations suivantes :

$$\begin{cases} \frac{\partial n}{\partial t} &= \frac{n_{i,j}^{k+1} - n_{i,j}^k}{\Delta t} \\ \nabla^2 n &= \frac{n_{i-1,j}^k + n_{i+1,j}^k + n_{i,j-1}^k + n_{i,j+1}^k - 4n_{i,j}^k}{h^2} \end{cases} \quad (3)$$

où $h = \Delta x = \Delta y$. Où Δx et Δy sont la distance entre les noeuds du maillage selon x et y respectivement.

En combinant l'eq.(1) et eq.(3) on obtient le schéma explicite à 2 niveaux :

$$n_{i,j}^{k+1} = \frac{D\Delta t}{h^2} (n_{i-1,j}^k + n_{i+1,j}^k + n_{i,j-1}^k + n_{i,j+1}^k - 4n_{i,j}^k) + n_{i,j}^k \quad (4)$$

Le schéma à 2 niveaux fonctionne de deux manière différente : soit on simule jusqu'à un temps final $t = t_{fin}$ et un nombre de pas de temps n_{steps} donnés, soit il existe une condition d'arrêt de l'évolution temporelle lorsque $\max_{x \in \Omega} |\frac{\partial n}{\partial t}|$ est inférieur à une tolérance p donnée.

Le schéma de Gauss-Seidel avec sur-relaxation aussi appelé (SOR) est donné par l'équation suivante :

$$\begin{aligned} n^{(*)} &= \frac{1}{4}(n_{i-1,j}^{(k)} + n_{i+1,j}^{(k+1)} + n_{i,j-1}^{(k)} + n_{i,j+1}^{(k+1)}) \\ n_{i,j}^{(k+1)} &= n_{i,j}^{(k)} + \alpha(n_{i,j}^{(*)} - n_{i,j}^{(k)}) \end{aligned} \quad (5)$$

avec α une constante comprise entre $1 < \alpha < 2$ donnée par l'utilisateur.

3 Convergence et stabilité du schéma explicite à deux niveaux

3.1 Convergence en Δt de la densité n en un point de Ω à $t = 5s$

Dans cette sous-section, une étude de convergence en Δt sur la densité en un point du domaine Ω est effectuée afin de connaître l'ordre de convergence du schéma à deux niveaux. Contrairement aux anciens exercices, la solution analytique pour la densité en un temps donné (ici $t = 5s$) et en un point donné n'est pas connue. On ne peut donc pas calculer une erreur et la représenter en fonction du pas de discrétisation. Dans ce cas, il faut représenter la quantité désirée (ici la densité) en fonction de $(\Delta t)^m$ sur une échelle linéaire-linéaire. Si dans la limite des petits Δt , les points du graphes forment une droite, alors l'ordre de convergence du schéma utilisé est m . La Fig.1 montre, pour le point au milieu du domaine Ω ($(x, y) = (50, 50)m$), la densité n en fonction de Δt^1 pour des petits Δt ($\simeq 10^{-4}s$). Il est possible de voir que les points forment une droite. Donc l'ordre de convergence du schéma explicite à deux niveaux est 1. Notons que pour les simulations de cette section, le nombre d'intervalles dans chaque direction N est de $N = 40$. De plus, en supposant que le comportement des points en fonction de $(\Delta t)^m$ est identique lorsque Δt tend vers 0, il est alors possible d'extrapoler les données dans la limite Δt tend vers 0. Ainsi, en prenant l'intersection entre la droite extrapolée et l'axe des ordonnées, il est possible de trouver la valeur convergée de la grandeur désirée (ici la densité). Grâce à l'équation du fit linéaire effectué sur la Fig.1 et en posant $x = 0$, on trouve que la valeur convergée $n(\text{convergee}) = 1.029 \cdot 10^{20}$. Cette valeur correspond en quelque sorte à une "solution analytique". Il est alors possible de définir une erreur relative entre la valeur convergée et la valeur donnée pour un Δt donné et la représenter en fonction de Δt sur un diagramme log-log. Dans ces graphiques, la valeur de la pente représente m , l'ordre de convergence du schéma. La Fig.2 représente ce genre d'étude de convergence avec l'erreur relative définie comme la densité moins la valeur convergée divisée par la valeur convergée. Grâce au fit linéaire effectué sur la Fig.2, il est possible de vérifier ici que la pente est bien $m = 1$, l'ordre de convergence trouvé précédemment.

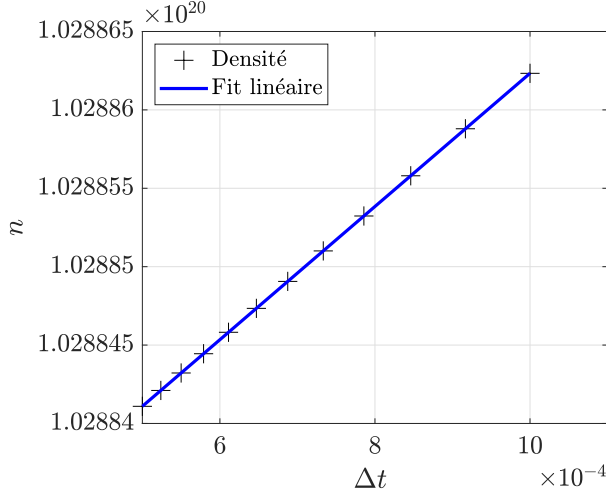


FIGURE 1 – Etude de convergence en Δt pour la densité en $(x, y) = (50, 50)m$ sans solution analytique. Fit linéaire : $y = (0.04 \cdot x + 1.029) \cdot 10^{20}$

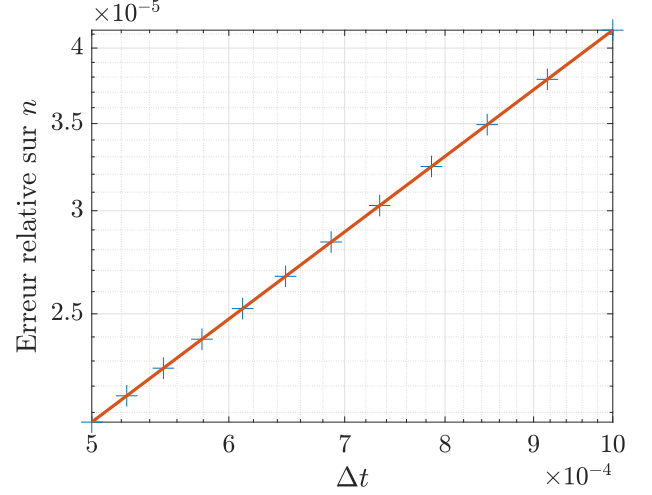


FIGURE 2 – Etude de convergence en Δt pour la densité en $(x, y) = (50, 50)m$ avec solution analytique. Fit linéaire : $y = 1.00 \cdot x - 1.4$

3.2 Limite de stabilité en Δt

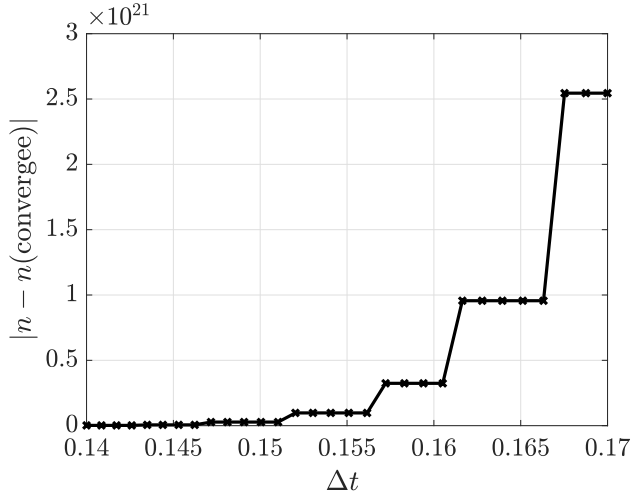


FIGURE 3 – Erreur sur la densité en $(x, y) = (50, 50)m$ en fonction de Δt pour $N = 40$

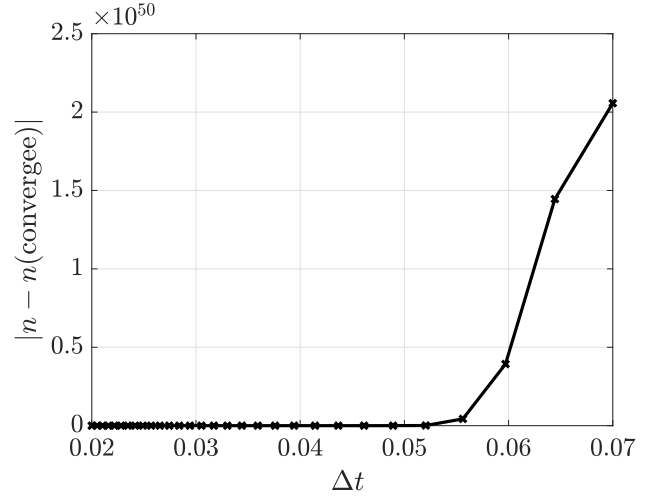


FIGURE 4 – Erreur sur la densité en $(x, y) = (50, 50)m$ en fonction de Δt pour $N = 80$

La limite de stabilité en Δt est le pas de temps Δt à partir duquel la solution devient numériquement instable. C'est à dire le Δt à partir duquel la solution numérique oscille avec une amplitude qui croît exponentiellement.

Pour trouver ce Δt , on trace l'erreur entre la valeur convergée de la densité trouvée précédemment à $t = 5s$ (Section 3) et la valeur de la densité à $t = 5s$ pour un Δt donné. Ensuite, on re-

garde à partir de quel Δt l'erreur se met à croître. Les simulations sont effectuées pour deux nombres d'intervalles dans chaque direction N différents : $N = 40$ et $N = 80$.

La Fig.3 et la Fig.4 représentent l'erreur sur la densité au point $(x, y) = (50, 50)\text{m}$ en fonction de Δt pour $N = 40$ et $N = 80$ respectivement. Il est possible de voir que l'erreur commence à croître de manière exponentielle autour de $\Delta t = 0.15\text{s}$ et $\Delta t = 0.05\text{s}$ pour $N = 40$ et $N = 80$ respectivement. La limite de stabilité en Δt pour $N = 40$ est donc $\Delta t \simeq 0.15\text{s}$. Et pour $N = 80$ de $\Delta t \simeq 0.05\text{s}$.

4 Convergence de l'algorithme de sur-relaxation

Dans cette section le but est d'observer la convergence de l'algorithme de Gauss-Seidel avec sur-relaxation. Cette section est composée de 4 parties différentes. Dans les 3 premières parties le nombre d'intervalles pour le maillage est fixé à $N = 80$. Premièrement, la convergence du résidu en fonction des itérations pour $\alpha = 1$ et $\alpha = 1.8$ est étudiée. Deuxièmement, la valeur optimale de α pour une tolérance $p = 10^{-5} \cdot n_1 = 2 \times 10^{15}$ est cherchée. Troisièmement, en utilisant la valeur optimal de α trouvée, une étude de convergence en variant p pour la valeur de la densité n_s en un point donné $(x, y) = (50, 50)\text{m}$ est effectuée. Pour finir, une étude de convergence de la densité n_s au point $(x, y) = (50, 50)\text{m}$ en variant le nombre d'intervalle du maillage est réalisée.

4.1 Convergence du résidu en fonction des itérations pour $\alpha = 1.0$ et $\alpha = 1.8$

La Fig.5 et la Fig.6 représentent le résidu en fonction du nombre d'itérations pour deux différentes valeurs de α : $\alpha_1 = 1$ et $\alpha_{1.8} = 1.8$. La tolérance donnée est respectivement $p_0 = 2 \times 10^5$ et $p_1 = 2 \times 10^4$. Sur la Fig.5, on observe que pour α_1 le résidu converge plus lentement vers p_0 . En effet, le nombre d'itérations requise pour atteindre p_0 est $N_{iterations} = 4617$ pour α_1 contre $N_{iterations} = 576$ pour $\alpha_{1.8}$. Le même constat peut être fait pour la Fig.6.

Une différence entre les deux figure est a notée. Sur la Fig.5 la courbe représentant le résidu en fonction du nombre d'itérations pour $\alpha_{1.8}$ atteint un palier. Cela signifie que dans ce cas précis, le schéma SOR atteint sa limite. Le résidu ne sera jamais inférieur à p_0 . En comparaison, la courbe représentant le résidu en fonction du nombre d'itérations pour α_1 n'atteint pas encore de palier. Un pallier est observée pour α_1 sur la Fig.6.

Il est à présent intéressant de discuter des observations faites sur la Fig.5 et la Fig.6. Tout d'abord, il faut discuter de la raison pour laquelle la convergence est plus rapide lorsque la valeur de $\alpha_{1.8}$ est utilisée. En choisissant α_1 , le schéma utilisé n'est pas celui de Gauss-Seidel avec sur-relaxation éq.(5) mais celui de Gauss-Seidel. En effet, afin d'utiliser SOR, la valeur

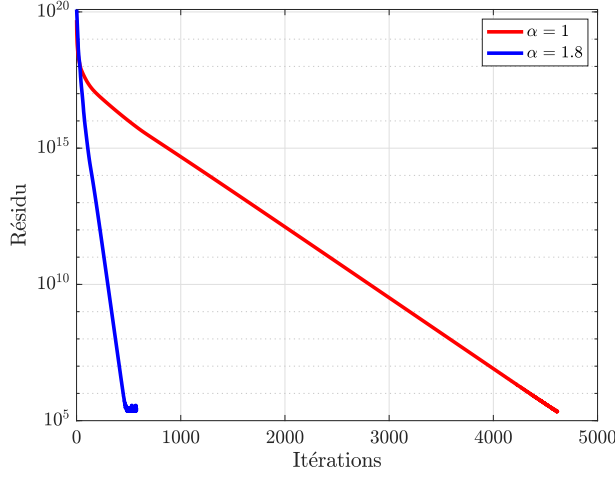


FIGURE 5 – Résidu en fonction du nombre d'itérations pour $\alpha = 1$ et $\alpha = 1.8$ pour une tolérance $p = 2 \times 10^5$

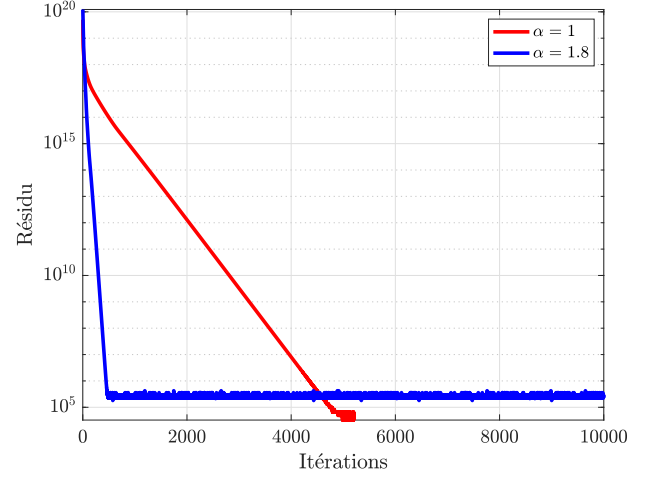


FIGURE 6 – Résidu en fonction du nombre d'itérations pour $\alpha = 1$ et $\alpha = 1.8$ pour une tolérance $p = 2 \times 10^4$

de α doit être comprise entre $1 < \alpha < 2$. L'implémentation de la sur-relaxation permet d'accélérer la convergence. Néanmoins, cette accélération se fait au détriment de la précision comme le montre les paliers atteints sur les Fig.5 et Fig.6. On peut donc conclure que si le but est d'obtenir une convergence plus rapide avec une complexité de calcul plus faible il faut opter pour la méthode de Gauss-Seidel avec sur-relaxation. Si le but est d'atteindre une tolérance plus basse il faut opter pour la méthode de Gauss-Seidel sans sur-relaxation.

4.2 Valeur optimale de α pour une $p = 2 \times 10^{15}$

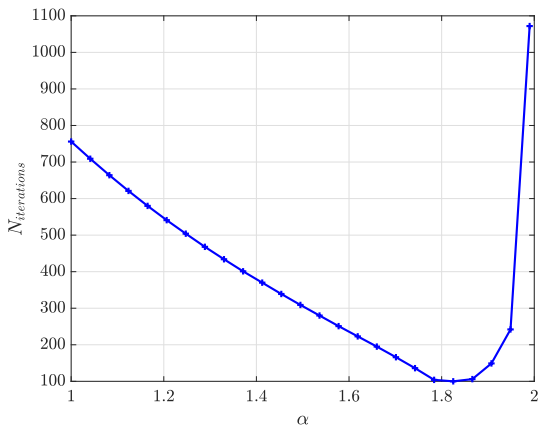


FIGURE 7 – Nombre d'itérations en fonction du paramètre $1 < \alpha < 2$ pour une tolérance $p = 2 \times 10^{15}$

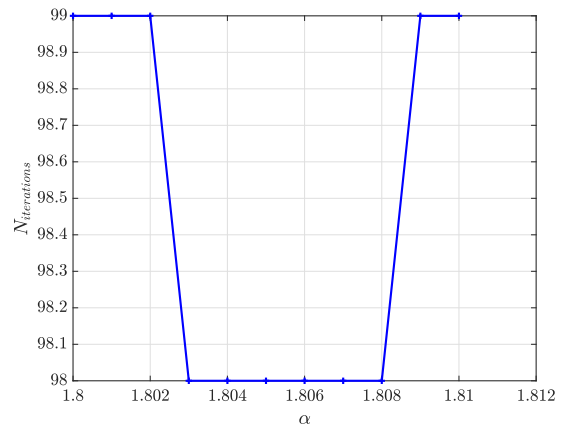


FIGURE 8 – Nombre d'itérations en fonction du paramètre $1.80 < \alpha < 1.81$ pour une tolérance $p = 2 \times 10^{15}$

Dans cette sous-section, il s'agit de fixer la tolérance à $p = 2 \times 10^{15}$ et d'observer comment le nombre d'itérations pour atteindre p change avec le paramètre α de sur-relaxation. Le but est de trouver l'alpha optimal tel que le nombre d'itération est minimal. La Fig.7 représente cette variation pour $1 < \alpha < 2$. On observe que le nombre d'itérations diminue jusqu'à une certaine valeur de α puis augmente à nouveau. La zone où le nombre d'itérations est minimum se trouve autour de la valeur $\alpha = 1.8$. Par dichotomie, une simulation est faite entre $1.8 < \alpha < 1.81$ (Fig.8). En étudiant Fig.8 il est noté que le nombre d'itération est minimale pour $1.803 < \alpha < 1.808$ il vaut $N_{iterations} = 98$. Pour la suite de l'exercice la valeur optimale pour α choisie est $\alpha = 1.805$.

4.3 Étude de convergence de la densité n_s en fonction de p , pour $\alpha = 1.805$

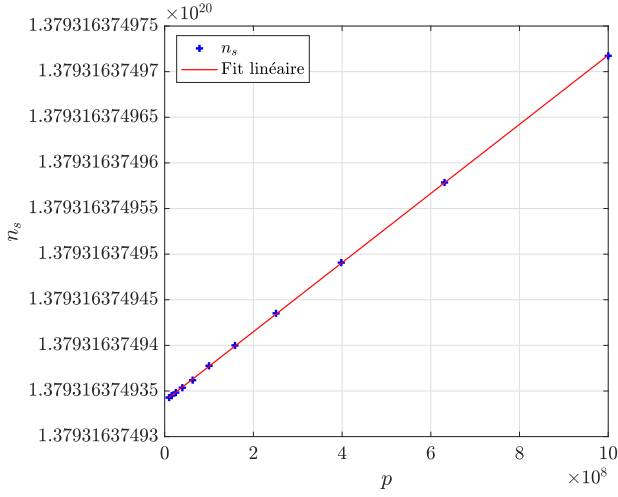


FIGURE 9 – Étude de convergence sur la densité n_s au point $(x, y) = (50, 50)m$ en fonction de p pour $N = 80$ et $\alpha = 1.805$ sans solution analytique. Fit linéaire : $y = 3.79 \cdot x + 1.3793 \times 10^{20}$

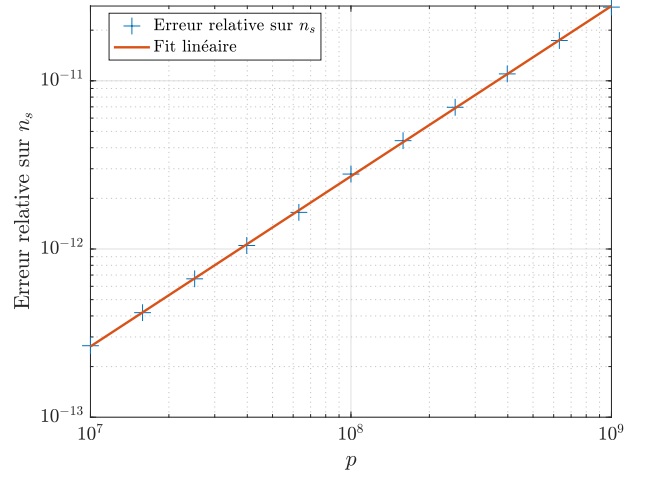


FIGURE 10 – Étude de convergence sur la densité n_s au point $(x, y) = (50, 50)m$ en fonction de p pour $N = 80$ et $\alpha = 1.805$ avec solution analytique. Fit linéaire : $y = 1.08 \cdot x - 20.45$

Dans cette sous-section il s'agit de réaliser une étude de convergence de la densité n_s en fonction de p pour la valeur optimale $\alpha = 1.805$ trouvée précédemment. Cette étude de convergence est réalisée en un point précis : $(x, y) = (50, 50)m$ (ce qui correspond exactement au centre du domaine). Comme dans la section 3 la solution analytique n'est pas connue. On procède donc exactement de la même manière. Grâce au fit linéaire effectué sur la Fig.9 et en posant $x = 0$, on trouve la valeur convergée $n_s(\text{convergé}) = 1.3793 \times 10^{20}$. On remarque que l'algorithme de Gauss-Seidel converge à l'ordre 1 pour les mêmes raisons que dans la section 3. En utilisant $n_s(\text{convergé})$ comme solution analytique, l'erreur relative entre la valeur convergée et la valeur donnée pour une p donné est calculée. La Fig.10 représente l'erreur relative sur n_s en fonction de p . Cette figure est un diagramme log-log et par conséquent

la valeur de la pente représente l'ordre de convergence du schéma. La valeur du fit linéaire réalisé sur la Fig.10, confirme que le schéma SOR converge à l'ordre 1.

4.4 Étude de convergence de la densité n_s en fonction de $N_{intervalles}$, pour $\alpha = 1.805$

L'objectif de cette sous-section est d'étudier la convergence de la densité n_s au point $(x, y) = (50, 50)m$ en variant le nombre d'intervalles du maillage $N_{intervalles}$. La tolérance est fixée à $p = 2 \times 10^9$. Afin d'éviter les interpolations linéaires, il est important que $N_{intervalles}$ soit pair. Pour ce faire, $N_{intervalles}$ varie entre $2 \times (5, 75)$. La Fig.11 représente l'erreur relative sur n_s à la position $(x, y) = (50, 50)m$ en fonction du nombre d'intervalles. On remarque que l'erreur diminue si le nombre d'intervalles augmente. En ne gardant que les valeurs aux crêtes la diminution de l'erreur est exponentielle.

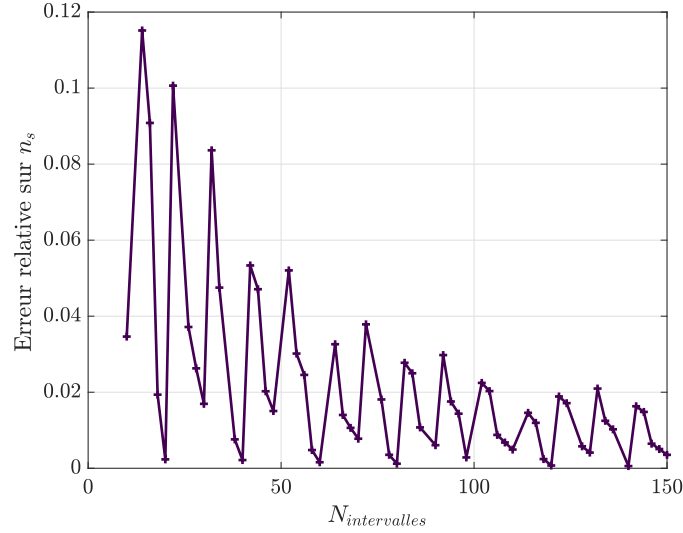


FIGURE 11 – Erreur relative sur n_s à la position $(x, y) = (50, 50)m$ en fonction du nombre d'intervalles

5 Flux de particules

Dans cette section, le flux de particules stationnaires $\vec{j}_s(x, y) = -D \cdot \nabla n_s(\vec{x})$ est représenté graphiquement. Les composantes j_x et j_y du flux ont été obtenues par différences finies centrées aux points milieux des faces du maillage selon x et y respectivement. Ensuite, les valeurs j_x et j_y au centre des cellules du maillage ont été trouvées par interpolation linéaire. Les Fig.12 et 13 représentent le flux de particules, le nombre d'intervalles dans chaque direction $N = 80$. Pour atteindre une solution stationnaire, l'algorithme de Gauss-Siedel avec SOR a été utilisé avec une petite tolérance ($1 \cdot 10^5$) et $\alpha = 1.805$. Ces figures permet

de voir d'une part que les flèches représentant le flux 'sortent' de l'usine (divergence positive) et donc que de la pollution est émise par l'usine. D'autre part, les flèches représentant le flux 'rentrent' dans le système de dépollution (divergence négative) et donc que le système nettoie bien la pollution émise par l'usine.

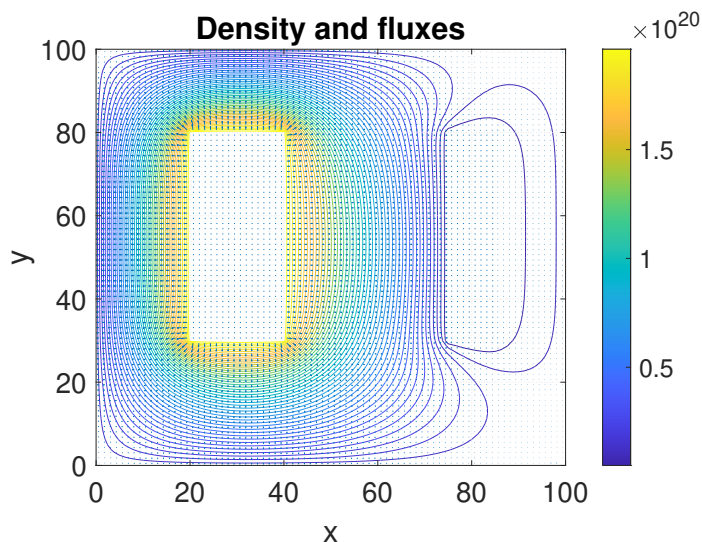


FIGURE 12 – Représentation du flux de particules. Les lignes représentent les densités

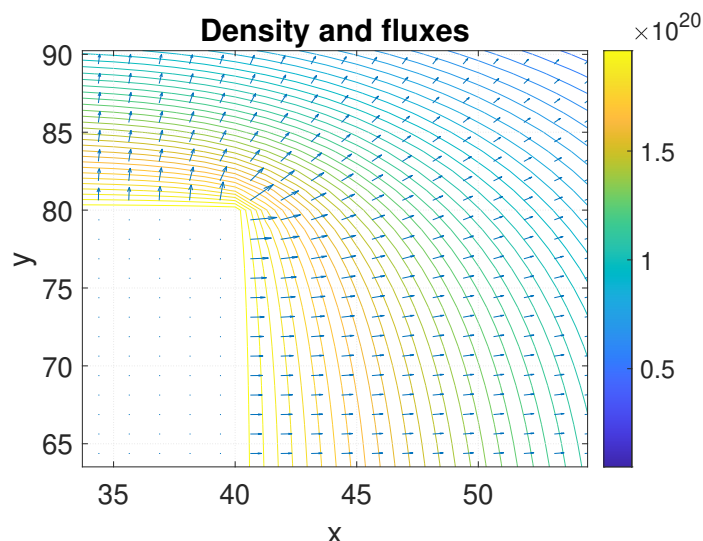


FIGURE 13 – Zoom effectué sur la Fig.12

6 Facultatif

6.1 Modification du schéma pour laisser évoluer librement la densité de particules sur l'usine et le système dépolluant

Ici, on modifie le schéma pour laisser évoluer librement la densité de particules sur l'usine et le système dépolluant. Les densités n_1 et n_2 de l'usine et du système dépolluant ne sont alors plus que des conditions initiales. Pour ce faire, il faut modifier la fonction "initialiseSolutions()" du code C++ afin de modifier l'initialisation de l'attribut flag. On va donc initialiser l'attribut `flag[i][j]` à False (et non à True comme dans le reste de l'exercice) pour les cases de l'usine et du dépolluant afin qu'elles puisse être modifiées tout en les initialisant quand même aux densités n_1 et n_2 . Dans notre code, pour passer à la partie facultative, commentez les lignes 421 et 425 et décommentez les lignes 422 et 426.

La Fig.14 et la Fig.15 représentent des simulations effectuées dans les conditions présentées précédemment en utilisant le schéma SOR avec $\alpha = 1.805$. La Fig.15 représente la densité de l'air lorsque la tolérance à atteindre est $p = 5 \times 10^4$. On remarque que les lignes représentant les différentes densités ne sont pas nettes et que le système tend vers une uniformisation.

Ceci est confirmé par la Fig.14 où l'on observe uniquement deux densités différentes. On peut donc émettre l'hypothèse que le système devrait tendre vers une même densité, ce qui est logique puisque l'on laisse évoluer librement la densité de particules sur l'usine et le système dépolluant. Cette densité serait celle du bord, car seul le bord est maintenu constant. Avec $\alpha = 1.805$ il n'est pas possible d'observer cela mais en diminuant le α le système serait capable d'atteindre une tolérance plus faible et nous pourrions donc vérifier l'hypothèse.

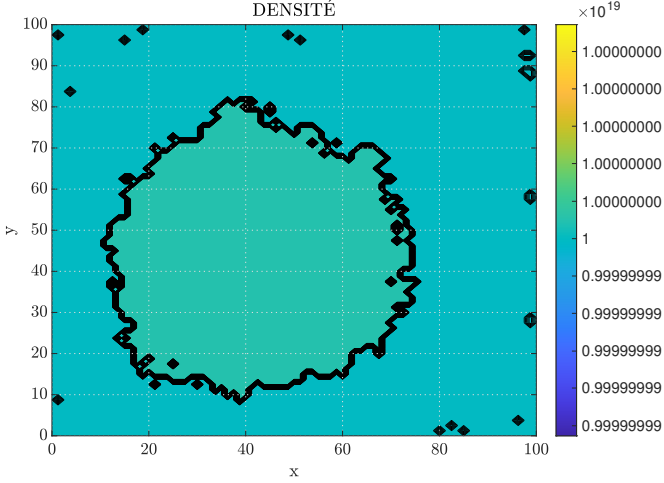


FIGURE 14 – Densité de l'air pour une tolérance de $p = 2 \times 10^4$

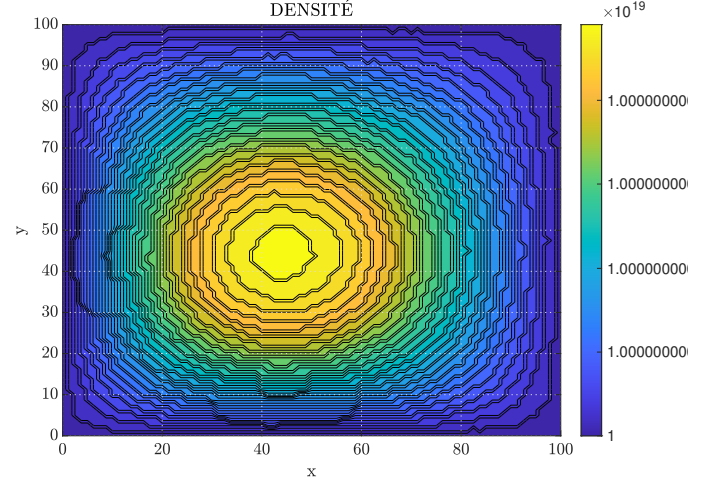


FIGURE 15 – Densité de l'air pour une tolérance de $p = 5 \times 10^4$

7 Conclusion

Cette étude permet de mieux comprendre l'évolution du flux de matière dans un milieu homogène. Elle a permis d'implémenter le schéma à deux niveaux permettant de résoudre l'équation de diffusion et le schéma de Gauss-Seidel avec sur-relaxation permettant de résoudre l'équation de Laplace. Dans un premier temps la convergence et la stabilité du schéma à deux niveaux ont été étudiés. Ce schéma converge à l'ordre 1 et la stabilité dépend du nombre d'intervalles du maillage. Puis dans un second temps, la convergence de l'algorithme SOR a été étudiée. On peut en conclure que pour $\alpha = 1.8$ le résidu converge plus rapidement vers une convergence donnée que pour $\alpha = 1$. La valeur optimale de α trouvée est $\alpha = 1.805$. L'étude de convergence de la densité en fonction de p permet de déterminer que l'algorithme de Gauss-Seidel avec sur-relaxation converge à l'ordre 1. De plus, on a pu observer que l'erreur relative sur n_s diminue de manière exponentielle en fonction du nombre d'intervalles du maillage. Dans un troisième temps, en appliquant la méthode des différences finies centrées aux points milieux des faces de maillage, le flux a pu être calculé et observé. Pour finir, en modifiant le code C++ de sorte que la densité de l'usine et du système dépolluant soient aussi modifiées par les algorithmes on remarque que le système tend vers une homogénéité de sa densité.

8 Annexe

Références

- [1] A. Duschmoll, R. Schnok, *Phys. Rev. Lett.* **112** 010015 (2010)
- [2] D.D. Abi, *et al*, *Science* **22** 1242 (2007)