BE : Convection-diffusion en dimension 1D

Consignes générales :

- *Par groupe de 4 étudiants, vous devez rédiger un rapport dans lequel vous répondrez aux questions du sujet et plus globalement au problème demandé. La qualité de rédaction ainsi que tous les compléments que vous apporterez (réflexions, analyses des réponses, tests sur d'autres données, etc...) seront fortement pris en compte. Ce rapport devra être rédigé sous un traitement de texte (les pages manuscrites ne sont pas acceptées) et rendu sous la forme d'un fichier .pdf.*
- *Toutes les fonctions programmées le seront en Python et seront abondamment commentées. Le rendu du projet se fera sous la forme d'un fichier .zip contenant le rapport ainsi que l'ensemble des programmes et données nécessaire à l'exécution des programmes.*
- *Les fonctions programmées doivent l'être dans un fichier librairie ayant pour nom :* ***Ma323_BE_lib.py****. Dans ce fichier les différentes fonctions doivent être regroupés dans des blocs (commande : #%%) correspondants aux parties du sujet.*
- *Les applications numériques des fonctions du sujet seront dans un fichier ayant pour nom :* ***Ma323_BE_main.py****. Dans ce fichier les différents cas d'études doivent être regroupés dans des blocs séparés.*
- *Les noms des différents membres du groupe doivent apparaître en commentaire en début de fichier.*
- *Le non respect des consignes précédentes entraînera des points de pénalités pouvant être conséquents...*
- *Les questions d'analyses de résultats sont généralement ouvertes. La qualité de vos réflexions sera fortement prise en compte pour la notation de ces questions.*
- **Il est impératif de lire le sujet en entier.**

Ce sujet est extrait (mais avec des modifications) de référence .

On supposera que l'on s'intéresse ici la dispersion d'un produit chimique dans un fleuve. On peut naturellement modéliser le fleuve par un milieu unidimensionnel dans lequel le courant est donné par le sens de parcours du fleuve. Dans certains cas il est pertinent de s'intéresser aux effets des composantes transverses à la direction globale de l'écoulement, par exemple pour observer l'influence de la topographie à plus basse échelle. L'objectif de ce projet est donc d'observer les différences d'évolution de la solution d'une équation de convection-diffusion lorsque le milieu est modélisé par un fermé, borné de dimension 1.
On modélisera l'évolution de la concentration du produit chimique $u = u(t,x)$ au temps t et à la position $x \in \mathbb{R}^d$,dans notre cas $d = 1$, par une équation de convection-diffusion

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} + V.\nabla u - \nu \triangle u & = f \\ u(0,x) = u_0(x) \end{cases} \qquad (1)$$

où V est la (fonction) vitesse de convection représentant la vitesse du courant, ν est le coefficient de diffusion, f est la source et u_0 la concentration initiale.

Afin d'observer le comportement de différents schémas on étudie dans un premier temps l'équation de convection dont on peut aisément calculer des solutions explicites puis l'équation de convection-diffusion sans source puis avec.

1 Équation de convection uni-dimensionnelle

Dans cette section nous simplifierons le problème en négligeant les termes de diffusion et de source ($\nu = 0$ et $f = 0$), ainsi qu'en supposant la vitesse constante et positive : $V > 0$. On obtient alors l'équation de convection :

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t}(t,x) + V\frac{\partial u}{\partial x}(t,x) & = 0\,, \quad \forall x \in \mathbb{R}, \forall t > 0 \\ u(0,x) = u_0(x) & \qquad \forall x \in \mathbb{R} \end{cases} \qquad (2)$$

On suppose que u_0 est de classe C^1 sur $\mathbb{R}$. Dans ce cas on peut résoudre explicitement l'équation (2) via la méthode des caractéristiques. Nous allons donc pouvoir comparer les solutions explicites avec des résolutions numériques obtenues par différences finies et ainsi tester la « robustesse » de notre approche sur ce cas simplifié.

1. **Recherche de la solution exacte.** Afin de résoudre l'équation (2) nous allons appliquer la méthode des caractéristiques. On suppose qu'au moins localement x et t sont des fonctions dérivables d'une variable s i.e.

$$s \mapsto x(s) \quad \text{et} \quad s \mapsto t(s)$$

(a) Donner l'expression de la dérivée totale $\dfrac{du}{ds}$ en fonction des dérivées partielles de u et des dérivées de x et de t en fonction de s.

(b) Quelles valeurs doit-on imposer à $\dfrac{dt}{ds}$ et $\dfrac{dx}{ds}$ afin de retrouver l'expression de l'équation (2) ? En déduire que sous ces conditions :

$$u(s) = C$$

où C est une constante.

(c) En imposant $t(0) = 0$ (pourquoi peut-on faire cela sans perdre de généralité ?) déterminer les expressions de t et x en fonction de s. Démontrer alors que la solution de (2) s'écrit :

$$\boxed{u(t,x) = u_0(x - Vt)}$$

pour tout $x \in \mathbb{R}$ et $t \geq 0$.

2. Pour résoudre numériquement cette équation nous allons :
   — nous restreindre à un intervalle d'espace $[0, L]$ et de temps $[0, T]$, avec une condition initiale à support dans $[0, L]$,
   — discrétiser le rectangle $[0, L] \times [0, T]$ en introduisant deux entiers strictement positif M et N. On définit alors les pas de discrétisation en espace et en temps :

$$\Delta x := \frac{L}{M+1} \quad \text{et} \quad \Delta t := \frac{T}{N+1}$$

qui nous permettent de définir :

$$x_j := j\triangle x \qquad \text{et} \qquad t^n := n\triangle t$$

pour tout $j \in [\![0, M+1]\!]$ et pour les instants $n \in [\![0, N+1]\!]$. On cherche alors les approximations de la fonction u :

$$u_j^n :\simeq u(t^n, x_j)$$

pour tout $j \in [\![1, M]\!]$ et $n \in [\![1, N+1]\!]$.

Enfin nous noterons l'ensemble des positions spatiales discrétisée de u pour un temps donnée t^n par :

$$U^n := (u_1^n, u_2^n, \cdots, u_M^n)^T$$

ce vecteur approchant.

On impose dans un premier temps les **conditions au bord de Dirichlet** :

$$u_0^n = u_{M+1}^n = 0$$

pour tout $n \in \mathbb{N}$.

Dans les questions qui suivent on pourra tester les applications numériques avec : $L = 50, T = 25, V = 1, \Delta x = 0,1, \Delta t = 0,025$ et la condition initiale $u_0 = f_{m,\sigma}$ pour

$$f_{m,\sigma}(x) := \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(x-m)^2}{2\sigma^2}}$$

avec $m = 20$ et $\sigma = 1$.

(a) On rappelle l'expression du **schéma explicite centré** :

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\triangle t} + V\frac{u_{j+1}^n - u_{j-1}^n}{2\triangle x} = 0$$

i. Calculer la matrice A_c pour laquelle U^{n+1} peut être obtenu par la relation de récurrence :

$$\boxed{U^{n+1} = (I_M - A_c)\, U^n} \qquad (3)$$

pour tout $n \in [\![0, N+1]\!]$.

ii. Écrire une fonction **Conv1D_schemaC**(V, u_0, L, T, M, N), sous Python qui permet de résoudre (3). Votre fonction devra renvoyer une matrice U de taille $(M+2, N+2)$.

iii. Tester le schéma numérique précédent avec les paramètres numériques donnés et d'autres données que vous choisirez. Tracer le résultat obtenu. On pourra utiliser les commandes suivantes pour le tracer :

```
fig, ax = plt.subplots(1, figsize=(15, 7))

x=np.linspace(0,L,M+2)
point, = ax.plot(x, U[:,0],'r-')

plt.show(block=False)
fig.canvas.draw()
ax.set_xlim(0,L)
ax.set_ylim(-0.5,0.5)

for i in range(1,N+2) :      # p.ex. on pourra remplacer range(1,N+2) par range(1,N+2,10)
            point.set_ydata(U[:,i])
            ax.draw_artist(ax.patch)
            ax.draw_artist(point)
            fig.canvas.draw()
            plt.pause(0.01)
```

iv. Comparer le résultat obtenue avec la solution exacte, qu'observe-t-on ? Justifier du phénomène observé en étudiant la convergence du schéma numérique précédent. On pourra réaliser une sortie vidéo afin de converser vos résultats.

(b) On donne à présent l'expression du **schéma explicite décentré amont :**

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\triangle t} + V\frac{u_j^n - u_{j-1}^n}{\triangle x} = 0$$

i. Étudier la convergence du schéma : consistance et convergence au sens de Von Neuman-Fourier.

ii. Calculez la matrice A_d pour laquelle U^{n+1} peut être obtenu par la relation de récurrence

$$U^{n+1} = (I_M - A_d)\, U^n \qquad (4)$$

pour tout $n \in [\![0, N+1]\!]$.

iii. Écrire une fonction **Conv1D_schemaA**(V, u_0, L, T, M, N) sous Python qui permet de résoudre (4). Votre fonction devra renvoyer une matrice U de taille $(M+2, N+2)$.

iv. Tester le schéma numérique précédent avec les paramètres numériques donnés et d'autres données que vous choisirez. Tracer les résultats obtenus. Comparer le résultat obtenue avec la solution exacte, qu'observe-t-on ? Est-ce cohérent avec la première question ? Quel phénomène trompeur apparaît ?

(c) On introduit le **schéma de Crank-Nicholson :**

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\triangle t} + \frac{V}{2}\left(\frac{u_{j+1}^n - u_{j-1}^n}{2\triangle x} + \frac{u_{j+1}^{n+1} - u_{j-1}^{n+1}}{2\triangle x}\right) = 0$$

i. Étudier la convergence du schéma : consistance et convergence au sens de Von Neuman-Fourier.

ii. Vérifiez que U^{n+1} est donné par la relation de récurrence

$$(I_M + A_{CN})\, U^{n+1} = (I_M - A_{CN})\, U^n \qquad (5)$$

pour tout $n \in [\![0, N+1]\!]$.

iii. Écrire une fonction **Conv1D_schemaCN**(V, u_0, L, T, M, N) sous Python qui permet de résoudre (5). Votre fonction devra renvoyer une matrice U de taille $(M+2, N+2)$.

iv. Tester le schéma numérique précédent avec les paramètres numériques donnés et d'autres données que vous choisirez. Tracer les résultats obtenus. Comparer le résultat obtenue avec la solution exacte, qu'observe-t-on ? Est-ce cohérent avec la première question ?

(d) En imposant : $V = 1$ et $4\Delta t = \Delta x$, chercher à observer numériquement les différences d'ordres de convergence des schémas décentré amont et de Crank-Nicholson et l'écart produit avec la solution exacte.

2 Équation de convection-diffusion uni-dimensionnelle

On s'intéresse à présent à l'équation de convection-diffusion en une dimension d'espace :

$$\left\{\begin{array}{lr} \frac{\partial u}{\partial t}(t,x) + V\frac{\partial u}{\partial x}(t,x) - \nu\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(t,x) &= 0\,,\quad \forall x\in\mathbb{R}, \forall t>0 \\ u(0,x)=u_0(x) & \forall x\in\mathbb{R} \end{array}\right. \tag{6}$$

Dans les mêmes conditions que la section précédente, on utilise le schéma de Crank-Nicholson :

$$\frac{u_j^{n+1}-u_j^n}{\triangle t} + \frac{V}{2}\left(\frac{u_{j+1}^n - u_{j-1}^n}{2\triangle x} + \frac{u_{j+1}^{n+1} - u_{j-1}^{n+1}}{2\triangle x}\right) - \frac{\nu}{2}\left(\frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{\triangle x^2} + \frac{u_{j+1}^{n+1} - 2u_j^{n+1} + u_{j-1}^{n+1}}{\triangle x^2}\right) = 0$$

1. Calculez les matrices A et B pour lesquelles U^{n+1} peut être obtenu par la relation de récurrence suivante :

   $$(I_M + A - B)\,U^{n+1} = (I_M - A + B)\,U^n \tag{7}$$

   pour tout $n \in [\![0, N+1]\!]$.
2. Écrire une fonction **Conv_diff1D_schemaCN**(V,ν,u_0,L,T,M,N) sous Python qui permet de résoudre (7). Votre fonction devra renvoyer une matrice U de taille $(M+2, N+2)$.
3. Tester le schéma pour $\nu = 1$. En augmentant T, qu'observe-t-on au bord du domaine ?
4. Le comportement observé à la sortie $(x = L)$ n'est pas le comportement attendu pour une solution définie sur $\mathbb{R}$. On choisit donc d'utiliser en $x = L$ des conditions que l'on appelle de type Neumann homogène qui reviennent à imposer :

   $$\frac{u_{M+1}^n - u_M^n}{\triangle x} = 0$$

   Dans une fonction **Conv_diff1D_schemaCN_NH**(V,ν,u_0,L,T,M,N) modifier les matrices A et B pour tenir compte de ces nouvelles conditions et relancer la simulation une fois ces modifications apportées. Que constatez-vous ?
5. Afin de simuler l'action d'une usine déversant un produit chimique, on suppose que la concentration à $t = 0$ est nulle et on introduit un terme de source $f(t,x)$.

   $$\left\{\begin{array}{lr} \frac{\partial u}{\partial t}(t,x) + V\frac{\partial u}{\partial x}(t,x) - \nu\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(t,x) &= f(t,x)\,,\quad \forall x\in\mathbb{R}, \forall t>0 \\ u(0,x)=u_0(x) & \forall x\in\mathbb{R} \end{array}\right. \tag{8}$$

   (a) A l'aide d'une discrétisation $f_j^n = f(t_n, x_j)$ de f , modifiez le schéma de Crank-Nicholson pour tenir compte du terme source. Modifiez l'équation de récurrence obtenue en question 1 en conséquence et testez numériquement le schéma avec comme terme source $f(t,x) = f_{m,\sigma}(x)$. Pour simuler l'action d'une usine ne fonctionnant que la moitié du temps dans une journée, tester le schéma avec :

   $$f(t,x) = \left\{\begin{array}{cc} f_{m,\sigma}(x) & \text{si } [t] \text{ est pair} \\ 0 & \text{si } [t] \text{ est impair} \end{array}\right. \qquad \text{ou } [.] \text{ est la partie entiere}$$

   On reprendra la version précédente avec les conditions de Neumann homogènes imposées.

   (b) Proposez ensuite une durée de fonctionnement et une durée de pause (ici initialement 1 et 1) de façon à assurer que la concentration en $x = 50$ ne dépasse pas 0.4 une fois le régime stationnaire atteint. On pourra prendre $T = 250$.