



*Mécanique des Fluides, Energétique et  
Environnement - MF2E 1A*

*Volume fini  
Bureau d'étude*

---

# Résolution numérique d'une équation aux dérivées partielles d'advection-diffusion par une méthode de type Volumes Finis

---

*Auteurs :*

 Arnaud  
TRAN Ugo

*Responsable du BE :*

Pr. Thomas Bonometti

*mars 2024*



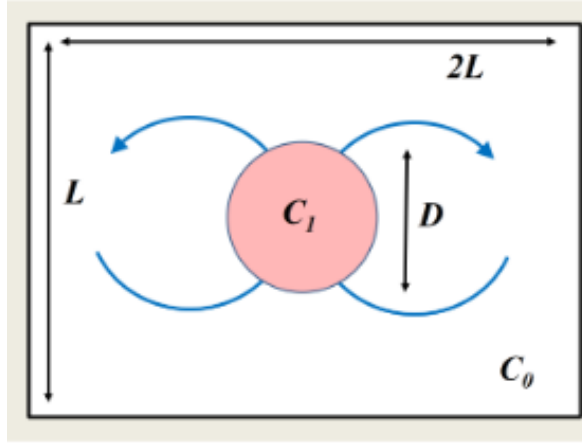
# Contents

<b>1</b>	<b>Présentation des objectifs</b>	<b>3</b>
<b>2</b>	<b>Méthode de Volumes Finis</b>	<b>3</b>
2.1	Etape 1 . . . . .	3
2.2	Etape 2 . . . . .	3
2.3	Etape 3 . . . . .	4
2.4	Etape 4 . . . . .	4
2.5	Etape 5 . . . . .	5
<b>3</b>	<b>Vérifications préalables</b>	<b>5</b>
3.1	Programmes Fortran90 . . . . .	5
3.2	Vitesse . . . . .	5
3.3	Concentration initiale . . . . .	6
<b>4</b>	<b>Etape de validation du système</b>	<b>7</b>
4.1	Advection pure 1D . . . . .	7
4.1.1	Distribution de la concentration de gauche à droite . . . . .	7
4.1.2	Distribution de la concentration de bas en haut . . . . .	8
4.1.3	Analyse des résultats . . . . .	8
4.2	Diffusion pure en 1D . . . . .	11
4.2.1	Distribution de la concentration de gauche à droite . . . . .	11
4.2.2	Distribution de la concentration de bas en haut . . . . .	11
4.2.3	Analyse des résultats . . . . .	12
<b>5</b>	<b>Exploitation du programme</b>	<b>15</b>
5.1	Champ stationnaire . . . . .	15
5.2	Convergence en maillage . . . . .	15
5.3	Influence du nombre de Péclet . . . . .	17
5.3.1	Estimation . . . . .	18
<b>6</b>	<b>Démonstration</b>	<b>18</b>
6.1	Critère de convergence . . . . .	18
6.1.1	Advection pure . . . . .	18
6.1.2	Diffusion pure . . . . .	19
<b>7</b>	<b>Annexes python:</b>	<b>19</b>

## Liste des figures

1	Répresentation de la vitesse $u$ . . . . .	5
2	Répresentation de la vitesse $v$ . . . . .	6
3	Code fortran90 de la formule de la concentration initiale . . . . .	6
4	Concentration à l'instant initial . . . . .	7
5	Répresentation de la concentration en advection pure 1D pour $t \in [0, 19]$ et $CFL=1$ pour les flux est et ouest. . . . .	8
6	Répresentation de la concentration en advection pure 1D pour $t \in [0, 19]$ et $CFL=1$ pour les flux sud et nord. . . . .	8
7	Evolution théorique de la concentration $C(y)$ en $x=L$ . . . . .	9
8	Répresentation de la concentration en advection pure 1D pour différents temps. . . . .	10
9	Répresentation de la concentration en advection pure 1D pour $t=19$ et $CFL \in \{0.5, 1, 1.5\}$ pour les flux est et ouest. . . . .	10
10	Evolution numérique de la concentration pour différent $CFL$ . . . . .	11
11	Répresentation de la concentration en advection pure 1D pour $t=10$ et $CFL \in \{0.5, 1, 1.5\}$ pour les flux sud et nord. . . . .	11
12	Répresentation de la concentration en diffusion pure 1D pour $t \in [0, 80]$ et $R=0.5$ pour les flux est et ouest. . . . .	12
13	Répresentation de la concentration en diffusion pure 1D pour $t \in [0, 80]$ et $R=0.5$ pour les flux sud et nord. . . . .	12
14	Evolution de la concentration en diffusion pure 1D pour $t$ fixé et $R=0.5$ . . . . .	12
15	Répresentation de la concentration en diffusion pure 1D pour $t=80$ et $R \in \{0.25, 0.5, 1, 1.5\}$ pour les flux nord et sud. . . . .	13
16	Répresentation de la concentration en diffusion pure 1D pour $t=80$ et $R \in \{0.25, 0.5, 1, 1.5\}$ pour les flux est et ouest. . . . .	14
17	Evolution théorique de la concentration en 1D en fonction de différent $R$ ( $R_1 > R_2 > R_3$ ) . . . . .	14
18	Evolution numérique de la concentration pour différent $R$ . . . . .	15
19	Programme rajouté dans notre boucle temporelle pour le champ stationnaire . . . . .	15
20	scale=0.7 . . . . .	16
21	Programme rajouté dans la boucle temporelle pour la convergence en maillage . . . . .	16
22	Variation logarithmique des temps adimensionnés en fonction du Peclet . . . . .	18
23	Programme pour tracer en échelle log-log les temps adimensionnels en fonction du Peclet . . . . .	19
24	Programme pour tracer la solution analytique d'advection pure. . . . .	20
25	Programme pour tracer la vitesse $U$ en 3D . . . . .	20
26	Programme pour tracer l'évolution de la concentration pour différent volume . . . . .	20
27	Programme pour tracer la concentration pour différent $R$ . . . . .	21

# 1 Présentation des objectifs



L'objectif de notre étude est de comprendre comment les phénomènes de diffusion et de convection vont mélanger un disque de concentration  $C_1$  dans un milieu de concentration  $C_0$ . L'équation qui régit l'évolution de notre étude est la suivante :

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \nabla \cdot (\underline{u}C) = \nabla \cdot (\kappa \nabla C) \quad (1)$$

avec  $\underline{u} = ue_x + ve_y$  tel que :

$$\begin{cases} u(x, y) = \alpha \sin(\frac{\pi x}{L}) \cos(\frac{\pi y}{L}) \\ v(x, y) = -\alpha \cos(\frac{\pi x}{L}) \sin(\frac{\pi y}{L}) \end{cases}$$

Par soucis de simplification nous prendrons  $C_0(\underline{x}, t) + C_1(\underline{x}, t) = 1$  en tout temps. Par défaut les valeurs suivantes seront prises si nous ne regardons pas leur influence sur le problème :  $\kappa = 10^{-5} m^2.s^{-1}$ ,  $C_0 = 0$ ,  $C_1 = 1$ ,  $L = 1mm$ ,  $D = 0.5mm$ .

De plus, l'équation (1) dépend du nombre de Péclet  $Pe = \frac{\alpha L}{\kappa}$  représentant le rapport du transfert par convection sur le transport par diffusion.

Ainsi cette étude portera dans un premier temps à convertir l'EDP (1) pour pouvoir la traiter à l'aide de la méthode des volumes finis. Après quelques étapes de vérification qui consisteront à vérifier si le code fonctionne correctement, une étude sur l'influence du nombre de Péclet sur notre modèle sera menée.

## 2 Méthode de Volumes Finis

Dans cette partie va être abordé la manière selon laquelle le problème physique a été traduit numériquement afin de pouvoir le résoudre grâce à un programme Fortran 90 et du logiciel paraview.

### 2.1 Etape 1

La première étape consiste à intégrer l'EDP sur un volume  $V$  de référence :

$$\int_V \frac{\partial C}{\partial t} dV + \int_V \nabla \cdot (C\underline{u}) dV = \int_V \nabla \cdot (\kappa \nabla C) dV \quad (2)$$

### 2.2 Etape 2

Puis en appliquant le théorème de la divergence à (1) il vient :

$$\int_V \frac{\partial C}{\partial t} dV + \sum_i \int_{S_i} \underline{u} \cdot \underline{n}_i C dS_i = \sum_i \int_{S_i} \kappa \nabla C \cdot \underline{n}_i dS_i$$

avec  $i \in \text{ouest, est, sud, nord}$

### 2.3 Etape 3

Il faut désormais faire une approximation des intégrales et des flux. Pour les termes advectifs il a été choisi un schéma explicite amont, pour les termes diffusif un schéma explicite centré et l'intégration temporelle se fera via la méthode d'Euler explicite.

Pour le temps :

$$\int_V \frac{\partial C}{\partial t} dV \simeq \frac{C_{i,j}^{n+1} - C_{i,j}^n}{\Delta t} V_{i,j} \quad (4)$$

Pour le flux advectif est :

$$\int_{S_{est}} \underline{u} \cdot \underline{n}_{est} C dS_{est} \simeq \begin{cases} u_{i,j} C_{i,j}^n \Delta y & \text{si } u_{i,j} > 0 \\ u_{i,j} C_{i+1,j}^n \Delta y & \text{sinon} \end{cases} \quad (5)$$

Pour le flux advectif ouest :

$$\int_{S_{ouest}} \underline{u} \cdot \underline{n}_{ouest} C dS_{ouest} \simeq \begin{cases} -u_{i,j} C_{i-1,j}^n \Delta y & \text{si } u_{i,j} > 0 \\ -u_{i,j} C_{i,j}^n \Delta y & \text{sinon} \end{cases} \quad (6)$$

Pour le flux advectif nord :

$$\int_{S_{nord}} \underline{u} \cdot \underline{n}_{nord} C dS_{nord} \simeq \begin{cases} v_{i,j} C_{i,j}^n \Delta X & \text{si } v_{i,j} > 0 \\ v_{i,j} C_{i,j+1}^n \Delta X & \text{sinon} \end{cases} \quad (7)$$

Pour le flux advectif sud :

$$\int_{S_{sud}} \underline{u} \cdot \underline{n}_{sud} C dS_{sud} \simeq \begin{cases} -v_{i,j} C_{i,j-1}^n \Delta X & \text{si } v_{i,j} > 0 \\ -v_{i,j} C_{i,j}^n \Delta X & \text{sinon} \end{cases} \quad (8)$$

Pour le flux diffusif est :

$$\int_{S_{est}} \nabla(C \cdot \underline{n}_{est}) dS_{est} \simeq \kappa(C_{i+1,j} - C_{i,j}) \frac{dy}{dx} \quad (9)$$

Pour le flux diffusif ouest :

$$\int_{S_{ouest}} \nabla(C \cdot \underline{n}_{ouest}) dS_{ouest} \simeq \kappa(C_{i-1,j} - C_{i,j}) \frac{dy}{dx} \quad (10)$$

Pour le flux diffusif nord :

$$\int_{S_{nord}} \nabla(C \cdot \underline{n}_{nord}) dS_{nord} \simeq \kappa(C_{i,j+1} - C_{i,j}) \frac{dx}{dy} \quad (11)$$

Pour le flux diffusif sud :

$$\int_{S_{sud}} \nabla(C \cdot \underline{n}_{sud}) dS_{sud} \simeq \kappa(C_{i,j-1} - C_{i,j}) \frac{dx}{dy} \quad (12)$$

### 2.4 Etape 4

Après avoir approximé les flux, il faut traiter les conditions aux limites. Les conditions de perméabilité sont les suivantes :

$$\begin{cases} y = 0, y = L & \frac{\partial C}{\partial y} = 0 \\ x = 0, x = 2L & \frac{\partial C}{\partial x} = 0 \end{cases} \quad (13)$$

Ce qui se traduit pour les flux diffusifs et advectifs par :

$$\begin{cases} F_{ouest}(1, j) = 0 & \forall j \in [1, N_y] \\ F_{est}(N_x, j) = 0 & \forall j \in [1, N_y] \\ F_{sud}(i, 1) = 0 & \forall i \in [1, N_x] \\ F_{nord}(i, N_y) = 0 & \forall i \in [1, N_x] \end{cases} \quad (14)$$

## 2.5 Etape 5

Maintenant que l'équation ainsi que les conditions limites ont été discrétisées il est possible d'obtenir l'équation numérique suivante :

$$C_{i,j}^{n+1} = C_{i,j}^n + \frac{\Delta t}{\Delta x \Delta y} (F dif sud_{i,j}^n + F dif nord_{i,j}^n + F dif ouest_{i,j}^n + F dif est_{i,j}^n - F adv sud_{i,j}^n - F adv nord_{i,j}^n - F adv ouest_{i,j}^n - F adv est_{i,j}^n) \quad (15)$$

## 3 Vérifications préalables

### 3.1 Programmes Fortran90

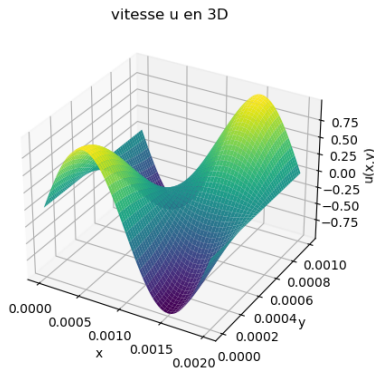
Durant toute l'étude le programme Fortran 90 fonctionnera de la manière suivante :

- mainci : fichier contenant le code principal. C'est dans ce fichier que seront les calculs de la concentration à tous temps ainsi que l'écriture de fichier pour ParaView
- sousroutines : contient tous les sous programme tels que le calcul de la concentration initiale, vitesse, etc...
- VTS Writter : fichier permettant la visualisation de nos résultats sur ParaView
- mtype : fichier permettant le regroupement des paramètres de l'étude
- parametre.dat : fichier contenant les paramètres de l'étude
- makefile : programme qui permettra de faire compiler tous les programmes précédents ensemble

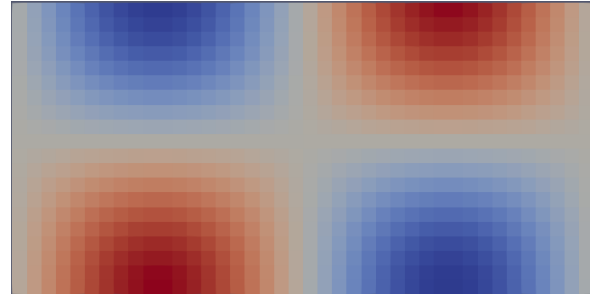
### 3.2 Vitesse

Maintenant que nous sommes dans la partie résolution numérique du problème, nous pouvons tracer les vitesses 3D et les observer sur Paraview pour voir leurs formes.  $\vec{u} = u\vec{e}_x + v\vec{e}_y$ ,

avec  $u = \alpha \sin(\frac{\pi x}{L}) \cos(\frac{\pi y}{L})$  et  $v = -\alpha \cos(\frac{\pi x}{L}) \sin(\frac{\pi y}{L})$ ,  $\alpha = 1m/s$ .



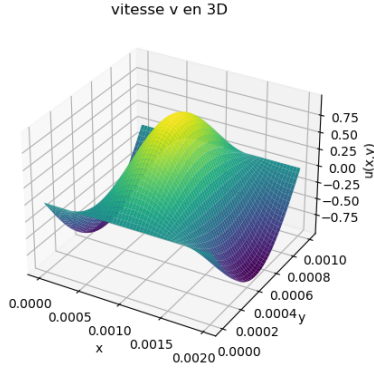
(a) Représentation de vitesse u en 3D



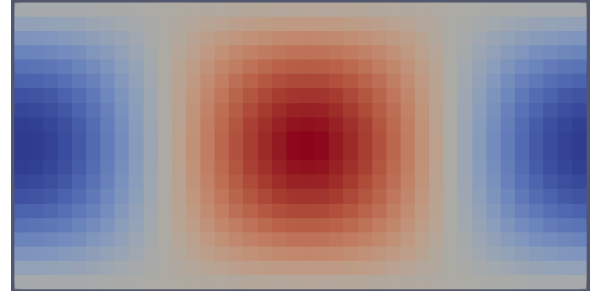
(b) Représentation de la vitesse u sur Paraview

Figure 1: Représentation de la vitesse u.

Nous observons bien que les champs de vitesse suivent la loi donnée.



(a) Représentation de vitesse v en 3D



(b) Représentation de la vitesse v sur Paraview

Figure 2: Représentation de la vitesse v.

### 3.3 Concentration initiale

Il suffit dans cette partie de tracer la concentration initiale pour voir si elle correspond à la solution théorique, un cercle au milieu du notre domaine de concentration  $C_1$ . La solution utilisée pour calculer la concentration initiale est :

$$C(x, y) = C_1 + \frac{1}{2}(C_0 - C_1) \left[ 1 + \operatorname{erf}\left(\frac{\sqrt{(x-L)^2 + (y-L/2)^2}}{\Delta}\right) \right] \quad (16)$$

où  $\operatorname{erf}(y) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^y \exp(-\tau^2) d\tau$  et  $\Delta = \frac{2}{3} \min\left(\frac{2L}{N_x}, \frac{L}{N_y}\right)$ .

Afin de calculer la concentration au centre de nos mailles nous avons dû centrer la concentration initiale de la manière qui suit :

```
do j = 1,P%ny
  do i =1,P%nx
    C_i(i,j) = P%c1 + 0.5*(P%c0-P%c1)*(1 + erf((((i-0.5)*delta_x-P%L)**2 + &
      ((j-0.5)*delta_y-0.5*P%L)**2)**0.5 - P%D*0.5)/delta))
  end do
end do
```

Figure 3: Code fortran90 de la formule de la concentration initiale

En faisant cette démarche, les autres concentrations seront automatiquement calculées au centre des mailles. En compilant le programme et visualisant sur ParaView il apparaît que la concentration initiale est comme ceci :



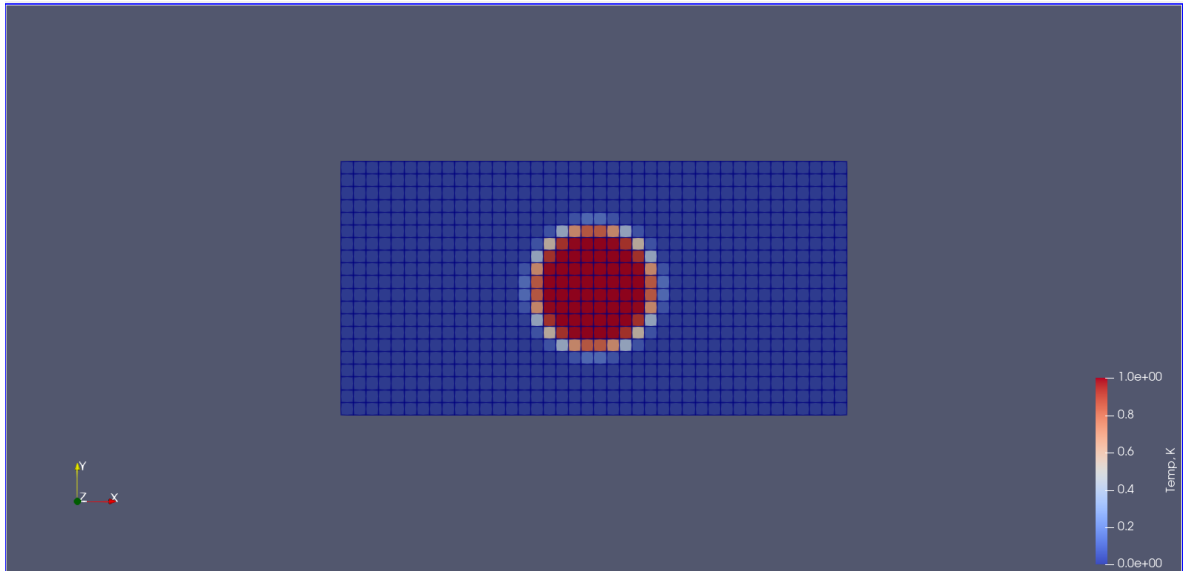


Figure 4: Concentration à l'instant initial

## 4 Etape de validation du système

Nous expliciterons dans cette section quelques étapes de validation avant de poursuivre vers l'exploitation du programme.

Dans toute cette étude nous utilisons les paramètres suivant quand ils ne sont pas stécifiés:

$$C_0 = 0g/m^3$$

$$C_1 = 1g/m^3$$

$$\kappa = 1e - 5m^2/s$$

$$\alpha = 1m/s$$

$$L=1mm$$

$$D=0.5mm$$

$$CFL=1$$

$$R=0.5$$

$$temps=1e-3$$

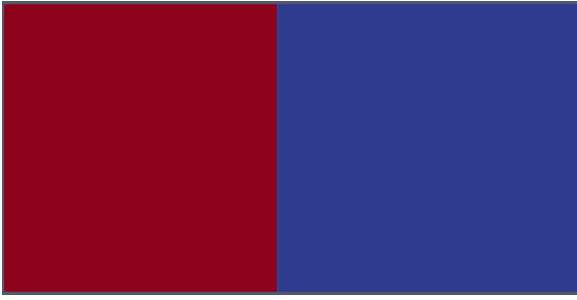
### 4.1 Advection pure 1D

Dans cette partie on fixe  $\kappa = 0$  pour faire disparaître les termes de diffusion dans notre équation aux dérivées partielles finale.

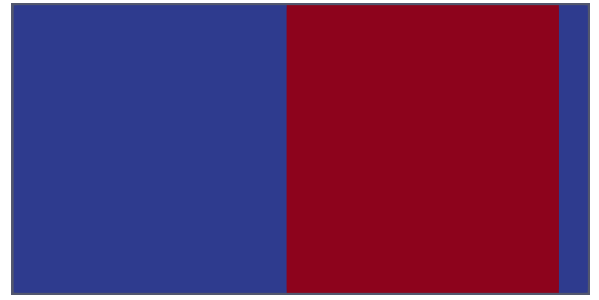
#### 4.1.1 Distribution de la concentration de gauche à droite

On fixe la concentration  $C_1$  dans la partie gauche du maillage,  $C_0$  dans la partie droite,  $u = \alpha$  et  $v = 0$ .

3



(a) Représentation de la concentration à  $t=0$



(b) Représentation de la concentration à  $t=19$

Figure 5: Représentation de la concentration en advection pure 1D pour  $t \in [0, 19]$  et CFL=1 pour les flux est et ouest.

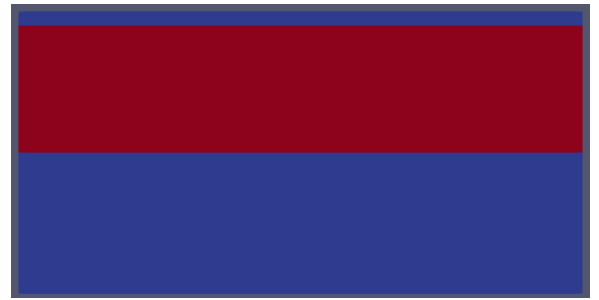
En lançant les simulations numériques, nous observons bien un phénomène d'advection car il y a un transport sans étalement de la concentration  $C_1$  de la gauche vers la droite dans la direction de la vitesse  $u$ . Il est à noter que la persistance de la bande bleu sur la figure 4(b) provient de notre condition au limite.

#### 4.1.2 Distribution de la concentration de bas en haut

Cette fois-ci nous fixons la concentration  $C_1$  en bas,  $C_0$  en haut,  $u = 0$  et  $v = \alpha$ . Ici également on



(a) Représentation de la concentration à  $t=0$



(b) Représentation de la concentration à  $t=10$

Figure 6: Représentation de la concentration en advection pure 1D pour  $t \in [0, 19]$  et CFL=1 pour les flux sud et nord.

observe un déplacement uniforme de la concentration  $C_1$  de bas en haut vers la concentration  $C_0$ . Dans ce cas aussi la bande bleu persistante est due à nos conditions aux limites.

#### 4.1.3 Analyse des résultats

**Solution analytique:** Nous pouvons tracer la solution analytique de la distribution de la concentration en  $y = L/2$  ou en  $x = L$ , nous remarquons que l'évolution de la concentration en fonction de  $y$  (respectivement  $x$ ) est une fonction porte qui se déplace dans le sens croissant de  $y$  (resp.  $x$ )(fig.7). C'est cohérent avec notre simulation car la concentration vaut soit 0 soit 1 et c'est ce qui est observable graphiquement par la théorie (fig.6).

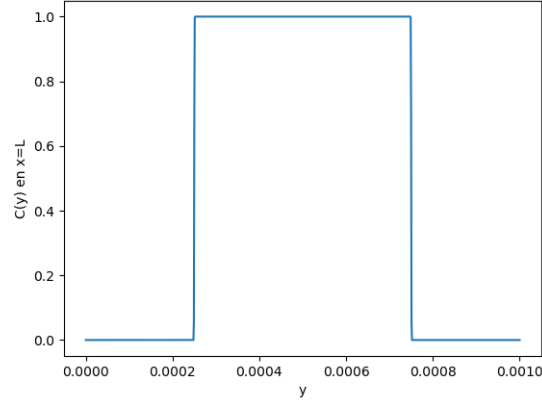


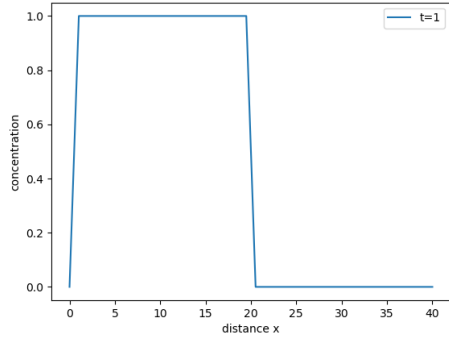
Figure 7: Evolution théorique de la concentration  $C(y)$  en  $x=L$

**Influence de CFL (nombre de Courant):** Nous souhaitons à présent avoir une idée de l'influence du nombre de Courant sur le phénomène d'advection, pour cela nous réitérons les précédentes simulations en faisant varier le CFL. Notre CFL témoin est  $CFL = 1$  car c'est pour ce cas là que nous avons effectuée les précédentes simulations.

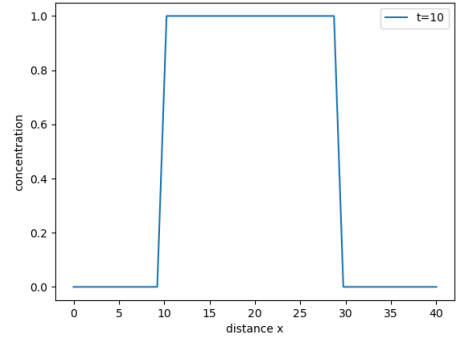
Nous remarquons que quand le CFL diminue, les calculs prennent un peu plus de temps, de plus un phénomène de diffusion apparaît sur les bords de la concentration à un temps donné.

Ainsi graphiquement nous n'aurons plus une fonction porte parfaite. De plus pour  $CFL > 1$  le schéma diverge comme le montre la figure 4(c) avec des valeurs de concentration variant de 0 à 6000. De plus on a d'après la solution théorique 20,  $\boxed{CFL \leq 1}$ , ce qui est donc cohérent.

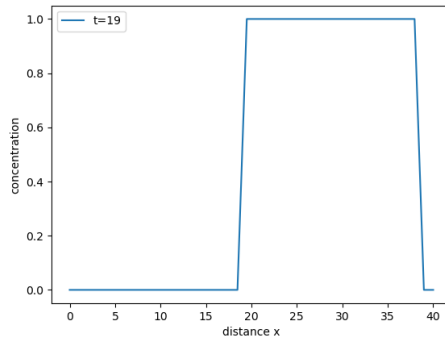
Le même constat est visible pour les flux nord et sud.



(a) Représentation de la concentration, à  $t=1$



(b) Représentation de la concentration, à  $t=10$

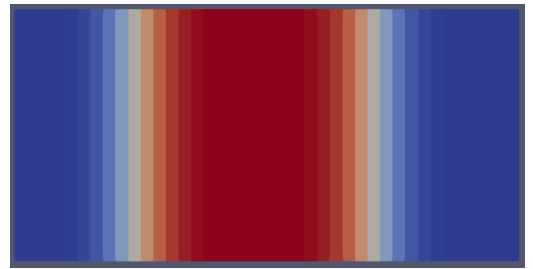


(c) Représentation de la concentration, à  $t=19$

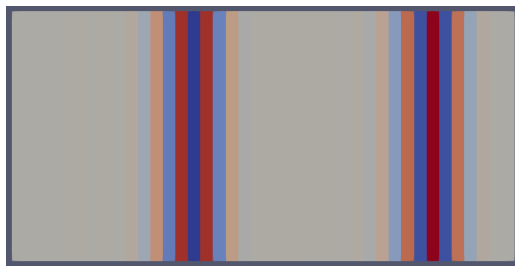
Figure 8: Représentation de la concentration en advection pure 1D pour différents temps.



(a) Représentation de la concentration,  $CFL=1$



(b) Représentation de la concentration,  $CFL=0.5$



(c) Représentation de la concentration,  $CFL=1.5$

Figure 9: Représentation de la concentration en advection pure 1D pour  $t=19$  et  $CFL \in \{0.5, 1, 1.5\}$  pour les flux est et ouest.

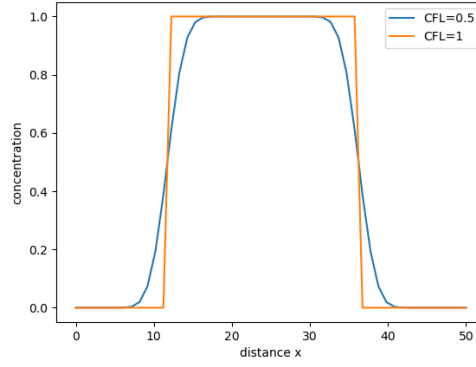
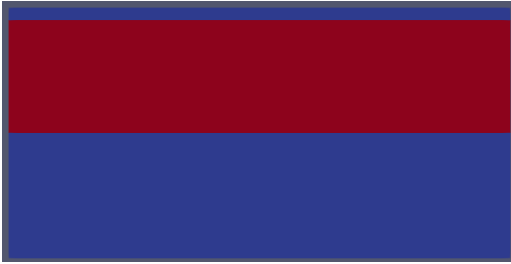
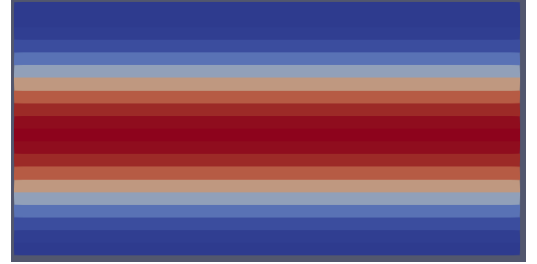


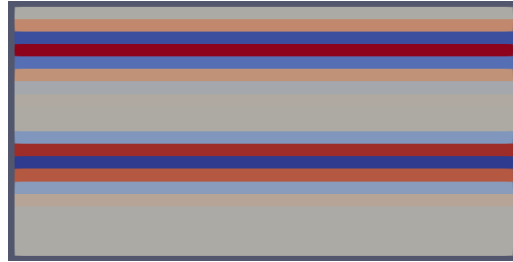
Figure 10: Evolution numérique de la concentration pour différent CFL



(a) Répresentation de la concentration, CFL=1



(b) Répresentation de la concentration, CFL=0.5



(c) Répresentation de la concentration, CFL=1.5

Figure 11: Répresentation de la concentration en advection pure 1D pour  $t=10$  et  $CFL \in \{0.5, 1, 1.5\}$  pour les flux sud et nord.

## 4.2 Diffusion pure en 1D

Nous fixons pour cette fois  $\alpha = 0$  i.e.  $u = v = 0$  pour que les termes d'advections deviennent nuls.

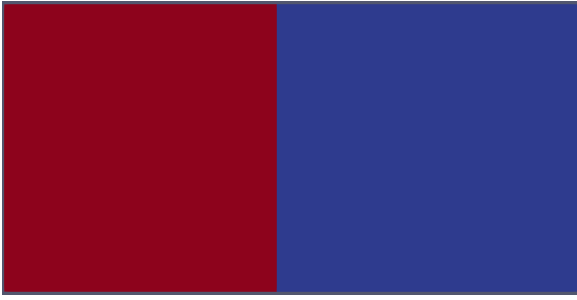
### 4.2.1 Distribution de la concentration de gauche à droite

De même que la partie précédente nous fixons la concentration à gauche puis à droite.

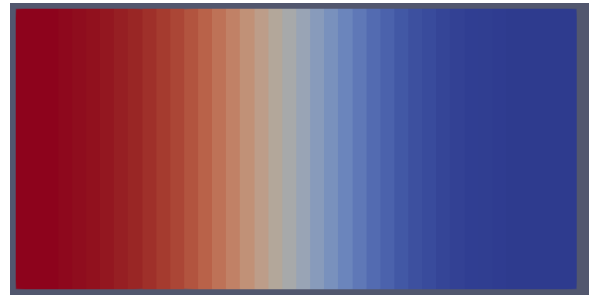
Cette fois-ci, nous n'observons plus un "glissement" de la concentration comme dans le cas de l'advection pure, mais bien un phénomène de diffusion, il y a une diffusion du milieu le plus concentré (rouge) vers le milieu le moins concentré (bleu).

### 4.2.2 Distribution de la concentration de bas en haut

Même constat que avant mais la diffusion se fait de bas en haut.



(a) Représentation de la concentration à  $t=0$

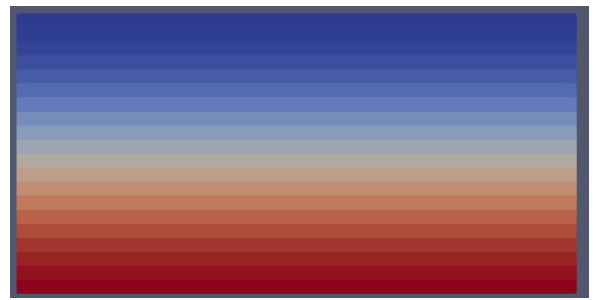


(b) Représentation de la concentration à  $t=80$

Figure 12: Représentation de la concentration en diffusion pure 1D pour  $t \in [0, 80]$  et  $R=0.5$  pour les flux est et ouest.



(a) Représentation de la concentration à  $t=0$



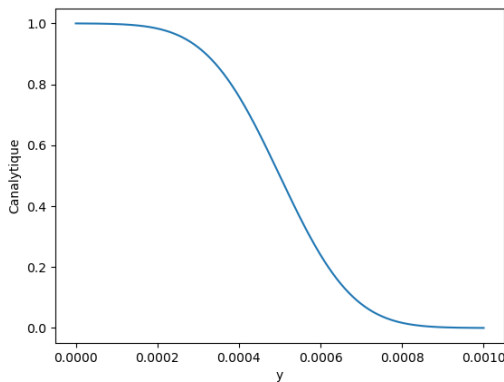
(b) Représentation de la concentration à  $t=80$

Figure 13: Représentation de la concentration en diffusion pure 1D pour  $t \in [0, 80]$  et  $R=0.5$  pour les flux sud et nord.

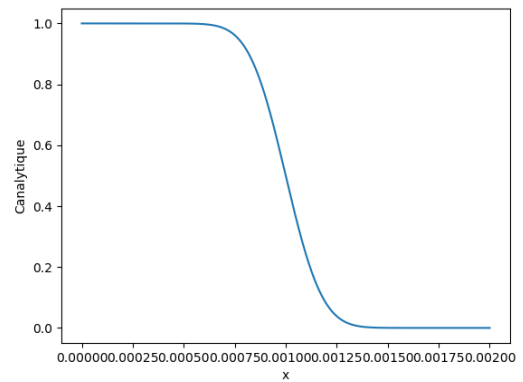
#### 4.2.3 Analyse des résultats

**Solution analytique:** Nous pouvons tracer la solution analytique donné par l'expression suivante:

$$\frac{C(y, t) - C_0}{C_1 - C_0} = \frac{1}{2} \left[ 1 - \operatorname{erf} \left( \frac{y - L/2}{2\sqrt{Dt}} \right) \right] \quad (17)$$



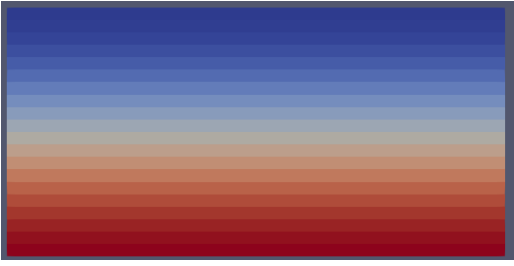
(a) Solution analytique  $C(y)$



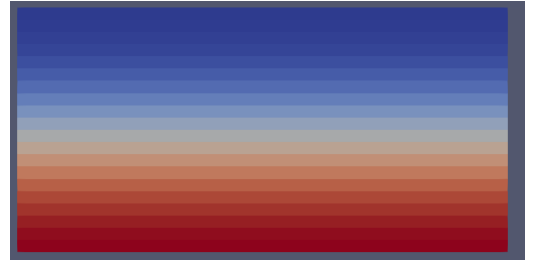
(b) Solution analytique  $C(x)$

Figure 14: Evolution de la concentration en diffusion pure 1D pour  $t$  fixé et  $R=0.5$ .

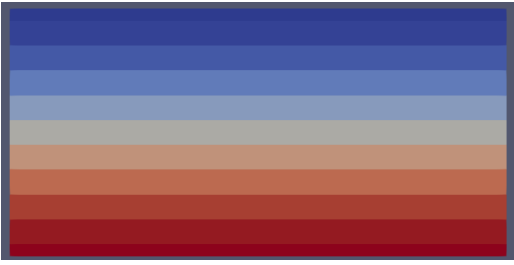
**Influence de R(nombre de Fourier):** Nous pouvons faire varier le nombre de Fourier pour observer son influence sur les simulations numériques,  $R=0.5$  est notre valeur témoin. Nous remarquons que quand  $R$  augmente, le schéma numérique devient de moins en moins cohérent avec des valeurs de plus en plus grandes sur paraview. De plus nous remarquons que quand  $R$  diminue, le phénomène de diffusion augmente, visuellement il y a un plus grand dégradé de couleurs pour  $R=0.25$  que pour  $R=1$ .



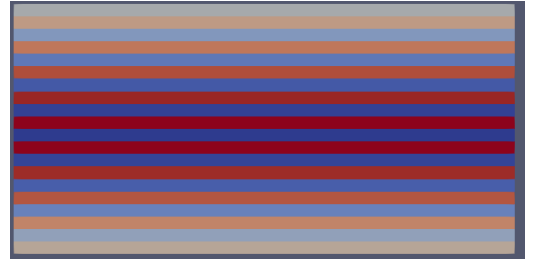
(a) Représentation de la concentration,  $R=0.5$



(b) Représentation de la concentration,  $R=0.25$



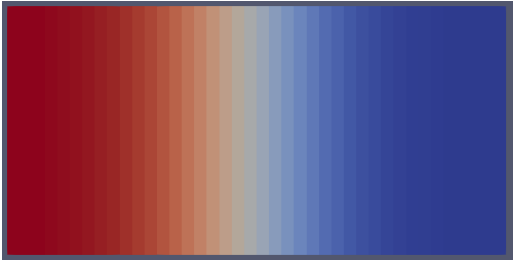
(c) Représentation de la concentration,  $R=1$



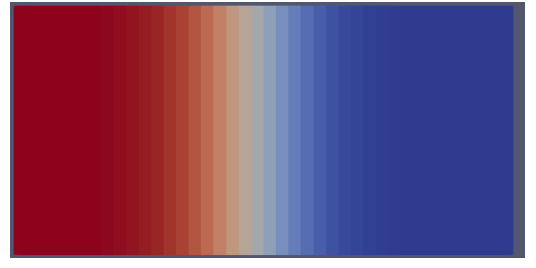
(d) Représentation de la concentration,  $R=1.5$

Figure 15: Représentation de la concentration en diffusion pure 1D pour  $t=80$  et  $R \in \{0.25, 0.5, 1, 1.5\}$  pour les flux nord et sud.

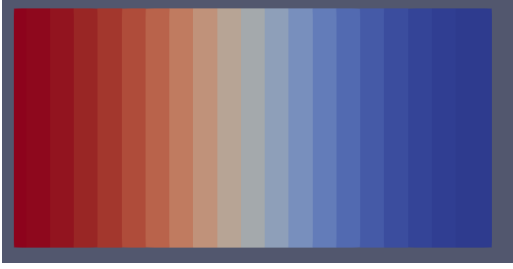
Le constat est le même pour les flux est et ouest.



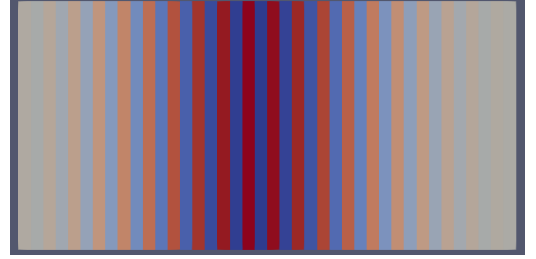
(a) Représentation de la concentration,  $R=0.5$



(b) Représentation de la concentration,  $R=0.25$



(c) Représentation de la concentration,  $R=1$



(d) Représentation de la concentration,  $R=1.5$

Figure 16: Représentation de la concentration en diffusion pure 1D pour  $t=80$  et  $R \in \{0.25, 0.5, 1, 1.5\}$  pour les flux est et ouest.

Solution analytique : Nous allons par la suite tracer pour différents  $R$  la solution analytique et conclure sur la pertinence du nombre de Fourier.

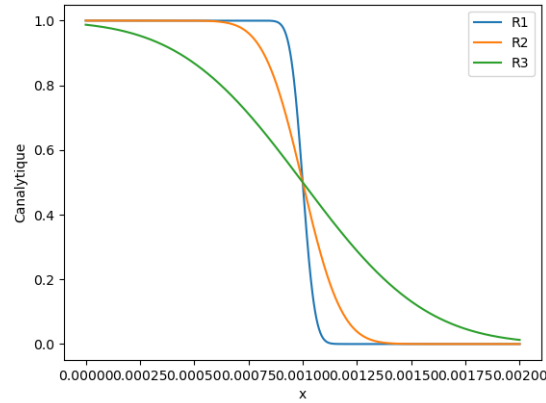


Figure 17: Evolution théorique de la concentration en 1D en fonction de différent  $R$  ( $R_1 > R_2 > R_3$ )

Nous constatons alors que pour  $R = R_2 \approx 0.5$  la courbe théorique se rapproche le plus de la solution numérique. De plus pour  $R=1$  le schéma numérique ne diverge toujours pas. Ainsi on peut conclure que pour  $R > 1$  le schéma diverge. D'après la solution théorique 23 nous avons  $R \leq 0.5$  ce qui ne correspond pas au critère trouvé juste avant, cela s'explique peut être par le fait que le calcul de notre  $\Delta t$  dépend de CFL et  $R$  qui eux théoriquement dépende de  $\Delta t$  donc le calcul numérique de notre code ne calcule peut être par le vrai  $R$ . De plus dans le cours de différence finie comme notre schéma n'est pas linéaire nous n'avons qu'une condition suffit mais pas nécessaire théoriquement c'est pourquoi on trouve  $R \leq 1/2$  mais notre programme converge jusqu'à  $R \leq 1$ .



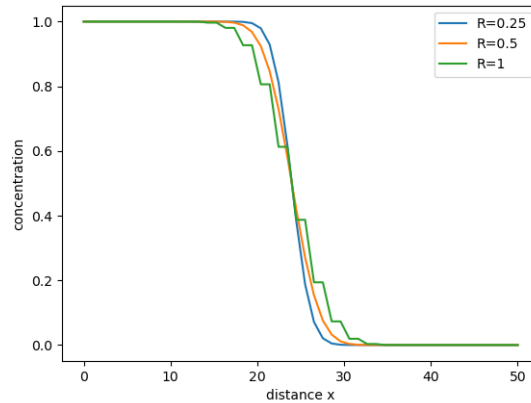


Figure 18: Evolution numérique de la concentration pour différent R

## 5 Exploitation du programme

### 5.1 Champ stationnaire

A l'aide du programme suivant nous avons pu calculer le temps au bout duquel le champ stationnaire était atteint. Pour cela nous nous sommes basé sur le critère suivant: **il fallait que chaque cellule de concentration en tout temps devait être plus ou moins égale a 5% de la concentration finale.** Ainsi nous avons trouvé un temps de  $9.8e - 4s$  pour atteindre la solution stationnaire.

```
! question 1)

ctest = pi*(P%D/2)**2/(2*P*L*P*L) ! Valeur de concentration finale
do i = 1, P%nx
  do j = 1, P%ny
    if (Cf(i,j) < 0.95*ctest .or. Cf(i,j) > 1.05*ctest) then
      print*, "La solution stationnaire n'est pas atteinte"
    else
      print*, "La solution stationnaire est atteinte en", k*delta_t
      exit
    end if
  end do
end do
```

Figure 19: Programme rajouté dans notre boucle temporelle pour le champ stationnaire

Notre concentration finale est défini par la formule suivante :

$C_{finale} = C_{ini} \frac{\pi R^2}{2L^2}$ , avec  $C_{ini}$  la concentration initiale, R le rayon du cerle de concentration de base et L la longueur de la boîte.

### 5.2 Convergence en maillage

Pour observer la convergence du schéma quand le schéma converge en maillage nous avons augmenté le nombre de points en abscisse et en ordonnée et nous avons tracé la concentration au temps  $t=50s$ . Ainsi on peut remarquer que pour un volume entre 12800 et 20000 on commence à avoir un schéma qui converge, effectivement le profil de la concentration tend vers 0 pour ces 2 courbes quand y tend vers  $+\infty$ . *Ainsi à partir d'un maillage  $80 * 160$ , avec  $N_x = 160$  et  $N_y = 80$  on peut conclure que le schéma converge.*

Nous avons utiliser le programme suivant qui permet d'obtenir le vecteur y à  $x=L/2$  pour un temps t constant que l'on peut choisir:

Remarque: pour un volume de 20000 nos simulations commençaient à prendre énormément de temps environ 10-12min pour cette étape. Cela est sans doute du à notre programme qui n'était pas

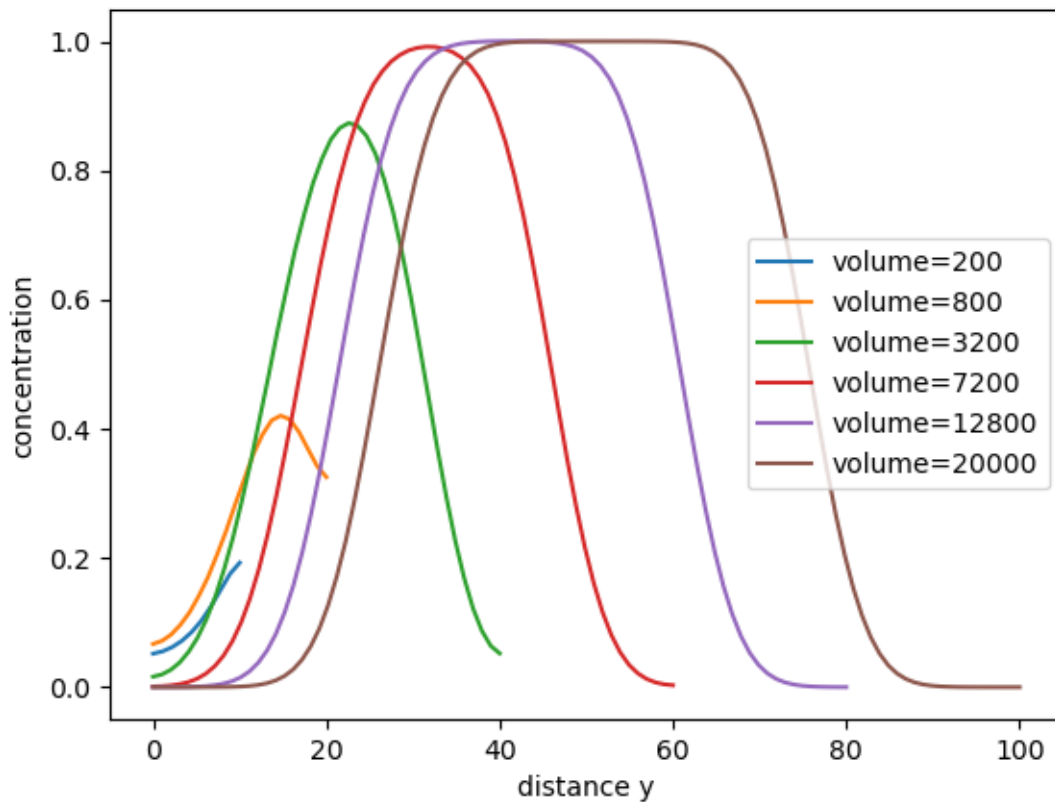


Figure 20: Profil de concentration pour différent volume en  $x=L/2$

```
!question 2)
if (k==50) then
open(10,file='data.dat')
vectx=P%nx/2.
do t=1,P%ny
write(10,*) Cf(int(vectx)+1,t)
end do
end if
close(10)
```

Figure 21: Programme rajouté dans la boucle temporelle pour la convergence en maillage

optimal, par la suite nous avons tenté de réduire au mieux le temps de calcul en enlevant les print inutile, les calculs déjà effectués...

### 5.3 Influence du nombre de Péclet

Nous avons dans cette partie déterminer le temps à partir duquel la concentration maximale ne varie pas au delà de 5%. Nous avons défini pour cela la concentration finale avec la formule suivante:  $C_{finale} = C_{ini} \frac{\pi R^2}{2L^2}$ , avec  $C_{ini}$  la concentration initiale, R le rayon du cerle de concentration de base et L la longueur de la boîte. Ainsi nous avons pu remarquer pour en faisant varier  $\kappa$  i.e. Pe nous avons un  $t_{95\%}$  qui diminue quand Pe augmente.

De même nous avons remarqué qu'en augmenant  $\alpha$  i.e. Pe  $t_{95\%}$  diminue, par la suite nous avons pu tracer en échelle log-log les temps adimensionnels suivant:  $t_{95\%}/\tau_d$  et  $t_{95\%}/\tau_c$ , avec  $\tau_d = L/\alpha$  et  $\tau_c = L^2/\kappa$ .

Pour rappel le nombre de Péclet est  $Pe = \frac{\alpha L}{\kappa}$  et compare le transfert par convection avec le transport par diffusion.

Pour connaître l'impact du phénomène de diffusion sur ce nombre il faut faire varier  $\kappa$  et relever le temps  $t_{95\%}$  pour lequel la concentration maximale ne varie pas de plus de 5%. La démarche pour obtenir l'influence sur le transfert par convection est identique. Ainsi pour les nombres  $Pe = 10^i, i \in [-2, 6]$  les résultats sont les suivants :

Pe	$\kappa$	$t_{95\%}$
$10^{-2}$	$10^{-2}$	$4.10^{-9}$
$10^{-1}$	$10^{-3}$	$4.10^{-8}$
1	$10^{-4}$	$3,96.10^{-7}$
10	$10^{-5}$	$3,63.10^{-7}$
$10^2$	$10^{-6}$	$2.10^{-5}$
$10^3$	$10^{-7}$	$3,64.10^{-5}$
$10^4$	$10^{-8}$	$3,96.10^{-5}$
$10^5$	$10^{-9}$	$4.10^{-3}$
$10^6$	$10^{-10}$	$4.10^{-5}$

Table 1: Tableau répertoriant les  $t_{95\%}$  pour différents Péclet en fonction de  $\kappa$

Pe	$\alpha$	$t_{95\%}$
$10^{-2}$	$10^{-3}$	$3,99.10^{-6}$
$10^{-1}$	$10^{-2}$	$3,99.10^{-6}$
1	$10^{-1}$	$3,96.10^{-6}$
10	1	$3,63.10^{-6}$
$10^2$	10	$2.10^{-6}$
$10^3$	$10^2$	$3,64.10^{-7}$
$10^4$	$10^3$	$3,96.10^{-8}$
$10^5$	$10^4$	$4.10^{-9}$
$10^6$	$10^5$	$4.10^{-10}$

Table 2: Tableau répertoriant les  $t_{95\%}$  pour différents Péclet en fonction de  $\alpha$

Ensuite, afin de comparer ces deux  $t_{95\%}$  nous avons tracer en échelle log-log  $\frac{t_{95\%}}{\tau_d}$  et  $\frac{t_{95\%}}{\tau_c}$  où  $\tau_d = \frac{L}{\alpha}$  et  $\tau_c = \frac{L}{\alpha}$  sont respectivement les temps caractéristiques de la diffusion et de la convection. Le tracé a été fait grâce au programme Python en annexe (fig22) et est le suivant :

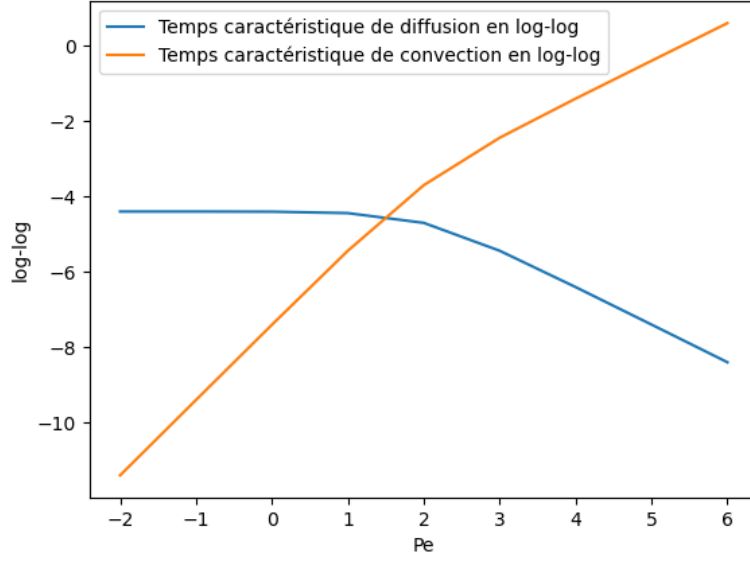


Figure 22: Variation logarithmique des temps adimensionnés en fonction du Peclet

### 5.3.1 Estimation

Si on suppose que le transitoire thermique correspond au transitoire massique par définition, alors oui il est possible d'estimer ce temps.

1er cas: -On calcul le Peclet:  $Pe=100$  On regarde qu'elle ordonnée correspond a ce nombre de Peclet en prennant la courbe de diffusion car à haut peclet la convection l'emporte. Effectivement on a  $\tau_d/\tau_c \gg 1$  (car à  $Pe \gg 1$ ) donc  $\tau_d \gg \tau_c$  donc  $1/\tau_d \ll 1/\tau_c$  donc  $t_{95d\%}/\tau_d \ll t_{95d\%}/\tau_c \ll t_{95c\%}/\tau_c$ . -puis avec le  $\tau_d = L^2/\kappa$  on peut en déduire le nouveau  $t_{95\%} = 1e - 6s$ .

2e cas: - $Pe=2$ , on utilise la courbe de diffusion cette fois-ci car c'est la convection qui l'emporte a petit Reynolds donc comme avec la méthode d'avant on trouve cette fois si grâce à la courbe de diffusion que  $t_{95\%} = 0.027s$ .

## 6 Démonstration

### 6.1 Critère de convergence

#### 6.1.1 Advection pure

En fixant  $\kappa = 0$  on obtient l'équation d'advection suivante:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \nabla \cdot (uC) = 0 \quad (18)$$

En posant  $CFL = \frac{u\Delta t}{\Delta x}$  et par la méthode des différences finies avec un schéma explicite amont on a :

$$C_i^{m+1} = C_i^m - u \cdot \Delta t \left( \frac{C_i^m - C_{i-1}^m}{\Delta x} \right) = (1 - CFL)C_i^m + CFLC_{i-1}^m \quad (19)$$

D'après la méthode de Neumann on a le symbole suivant:  $\rho(\epsilon) = 1 - CFL + CFL e^{-i\epsilon}$ .

Suposons la solution périodique sur le domaine ainsi on a une condition nécessaire et suffisante pour le critère de stabilité:  $|\rho(\epsilon)| < 1$ .

D'après l'inégalité triangulaire,  $|\rho(\epsilon)| = |1 - CFL + CFL e^{-i\epsilon}| \leq |1 - CFL| + CFL \leq 1$ .

Ainsi :  $CFL - 1 \leq 1 - CFL \leq 1 - CFL$ , la condition de gauche donne:

$$\boxed{CFL \leq 1} \quad (20)$$

### 6.1.2 Diffusion pure

En fixant  $\alpha = 0$  nous obtenons l'équation de diffusion suivante:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \nabla \cdot (\kappa \nabla C) \quad (21)$$

En posant  $R = \frac{\kappa \Delta t}{\Delta x^2}$  et par la méthode des différences finies avec un schéma explicite centré il vient:

$$C_i^{n+1} = C_i^n + \Delta t \cdot \kappa \left( \frac{C_{i+1}^n - 2C_i^n + C_{i-1}^n}{\Delta x^2} \right) = (1 - 2R)C_i^n + RC_{i-1}^n + RC_{i+1}^n \quad (22)$$

De même que avant d'après la methode de Neumann nous obtenons le symbole suivant :  $\rho(\epsilon) = 1 - 2R + Re^{-i\epsilon} + Re^{i\epsilon}$ .

D'après l'inégalité triangulaire nous obtenons:

$$|\rho(\epsilon)| = |1 - 2R + Re^{-i\epsilon} + Re^{i\epsilon}| \leq |1 - 2R| + 2R \leq 1$$

Soit:  $2R - 1 \leq 1 - 2R \leq 1 - 2R$ , la condition de gauche donne:

$$R \leq \frac{1}{2} \quad (23)$$

## 7 Annexes python:

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt

L=0.001

kappa=1e-5
a=1

k=[1e-2,1e-3,1e-4,1e-5,1e-6,1e-7,1e-8,1e-9,1e-10]
Pe=[1e-2,1e-1,1,10,100,1000,10000,100000,1000000]
T95k=[4e-9,4e-8,3.96e-7,3.63e-6,2e-5,3.64e-5,3.96e-5,4e-5,4e-5]
TauD=[T95k[i]/((L**2)/k[i]) for i in range(len(k))]
logtauD=[np.log(TauD[i])/np.log(10) for i in range(len(k))]

logPe=[np.log(Pe[i])/np.log(10) for i in range(len(Pe))]

alpha=[1e-3,1e-2,1e-1,1,10,100,1000,10000,100000]
alphaa=[100000,10000,1000,100,10,1,1e-1,1e-2,1e-3]
T95a=[3.99e-6,3.99e-6,3.96e-6,3.63e-6,2e-6,3.64e-7,3.96e-8,4e-9,4e-10]
T95aa=[4e-10,4e-9,3.96e-8,3.64e-7,2e-6,3.63e-6,3.96e-6,3.99e-6,3.99e-6]
Tauc=[T95aa[i]/L/alphaa[i] for i in range(len(alpha))]
logTauc=[np.log(Tauc[i])/np.log(10) for i in range(len(alpha))]
print(np.interp(0.3/np.log(10),logPe,logtauD))
plt.figure()
plt.plot(logPe,logtauD,label='Temps caractéristique de diffusion en log-log')

plt.plot(logPe,logTauc,label='Temps caractéristique de convection en log-log')
plt.ylabel('log-log')
plt.xlabel('Pe')
plt.legend()
plt.show()
```

Figure 23: Programme pour tracer en échelle log-log les temps adimensionnels en fonction du Peclet

```

import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from scipy.optimize import curve_fit
from scipy import special
import math

L=0.001
C0=0
C1=1
D=0.0005
k=10e-5
k1=10e-6
k2=10e-5
k3=10e-4
a=1
Nx=100
Ny=50
t=1e-3

x=np.linspace(0,2*L,Nx)
y=np.linspace(0,L,Ny)

#calcul de delta
delta=(2/3)*min(2*L/Nx,L/Ny)

#definition de la concentration
c1=1-0.5*(1+special.erf(((y-L/2)-D/2)/delta))

plt.figure()
plt.plot(y,c1,label='R1')

plt.xlabel('x')
plt.ylabel('Canalytique')
plt.legend()
plt.show()

```

Figure 24: Programme pour tracer la solution analytique d'advection pure.

```

import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from mpl_toolkits.mplot3d import Axes3D
import math

alpha=1
L=0.001
Nx=1000
Ny=500
x=np.linspace(0,2*L,Nx)
y=np.linspace(0,L,Ny)
X, Y =np.meshgrid(x, y)

u=-alpha*np.cos(math.pi*X/L)*np.sin(math.pi*Y/L)

fig=plt.figure()
ax=fig.add_subplot(111, projection='3d')
ax.plot_surface(X, Y, u, cmap='viridis')
ax.set_xlabel('x')
ax.set_ylabel('y')
ax.set_zlabel('u(x,y)')
plt.title('vitesse v en 3D')
plt.show()

```

Figure 25: Programme pour tracer la vitesse U en 3D

```

import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt

y1=np.linspace(0,10,10)
y2=np.linspace(0,20,20)
y3=np.linspace(0,40,40)
y4=np.linspace(0,60,60)
y5=np.linspace(0,80,80)
y6=np.linspace(0,100,100)

c1=[5.18716611E-02,5.54903857E-02,6.21170141E-02,7.18840584E-02,8.51726159E-02,0.102704577
c2=[ 6.68447390E-02,7.19287321E-02,8.17037076E-02,9.66085047E-02,0.115892887,0.14098
c3=[ 1.62359234E-02,1.97144672E-02,2.69418079E-02,3.83319296E-02,5.47103845E-02,7.657867
c4=[ 1.07504358E-03,1.55280181E-03,2.63721636E-03,4.60120058E-03,7.87319057E-03,1.306651
c5=[ 2.42992865E-05,4.36684313E-05,9.38552257E-05,2.02165349E-04,4.21083212E-04,8.43563117
c6=[ 1.77432312E-07,4.13796329E-07,1.14103830E-06,3.07896653E-06,7.95426513E-06,1.96485416
plt.figure()
plt.plot(y1,c1,label='volume=200')
plt.plot(y2,c2,label='volume=800')
plt.plot(y3,c3,label='volume=3200')
plt.plot(y4,c4,label='volume=7200')
plt.plot(y5,c5,label='volume=12800')
plt.plot(y6,c6,label='volume=20000')
plt.ylabel('concentration')
plt.xlabel('distance y')
plt.legend()
plt.show()

```

Figure 26: Programme pour tracer l'évolution de la concentration pour différent volume

