

Rapport de projet

Simulation numérique du transport et de la diffusion d'un polluant

Master 1 MMM

Auteurs :

YU JIACHEN

CAO GUANGYU

Table des matières

1 Introduction.....	4
2 Partie 1 — Validation en dimension 1.....	4
2.1 Travail théorique	4
2.1.1 Écriture du schéma numérique.....	4
2.1.2 Consistance du schema	5
2.1.3 Ordre du schéma	6
2.1.4 Stabilité du schéma	7
2.1.5 Condition CFL	7
2.2 Travail numérique	8
2.2.1 Implémentation du schéma	8
2.2.2 Comparaison avec la solution exacte	9
2.2.3 Calcul de l'erreur en norme L2	10
2.2.4 Étude de l'ordre de convergence en espace	10
2.2.5 Étude de l'ordre de convergence en temps	11
2.2.6 Conclusion	12
3 Partie 2 — Transport en dimension 2	12
3.1 Travail théorique	12
3.1.1 Écriture du schéma numérique.....	12
3.1.2 Consistance du schema	13
3.1.3 Ordre du schéma	13

3.1.4 Stabilité du schéma	14
3.1.5 Condition CFL	14
3.2 Travail numérique	14
3.2.1 Mise en œuvre numérique.....	15
3.2.2 Calcul des solutions numérique et exacte	15
3.2.3 Visualisation des résultats	16
3.2.4 Calcul de l'erreur	17
3.2.5 Influence des paramètres.....	18
3.2.6 Conclusion	19
4 Conclusion générale.....	19

1 Introduction

Ce projet a pour objectif la simulation numérique du transport et de la diffusion d'un polluant à l'aide de méthodes numériques étudiées dans le cadre du cours. Il s'agit d'étudier le comportement d'une concentration soumise à des phénomènes de convection et de diffusion, en utilisant des schémas numériques adaptés.

Dans une première partie, on s'intéresse à l'équation d'advection–diffusion en dimension 1. L'objectif est de valider un schéma de différences finies en comparant la solution numérique à une solution analytique connue. Cette étape permet d'analyser la précision du schéma, ainsi que sa consistance, sa stabilité et son ordre de convergence en temps et en espace.

Dans une seconde partie, on considère le problème en dimension 2. Le transport du polluant est simulé à l'aide d'un schéma de volumes finis, permettant de prendre en compte la conservation des flux. La solution correspond à une distribution gaussienne transportée par le champ de vitesse et étalée par la diffusion.

Enfin, une étude numérique est menée afin d'évaluer l'influence des différents paramètres du modèle, tels que la vitesse de transport, le coefficient de diffusion et le maillage spatial, ainsi que de visualiser l'évolution de la concentration du polluant.

2 Partie 1 — Validation en dimension 1

2.1 Travail théorique

Dans cette partie, on étudie les propriétés du schéma numérique choisi pour l'équation d'advection–diffusion en dimension 1.

On analyse successivement l'écriture du schéma, sa consistance, son ordre de convergence, sa stabilité ainsi que la condition CFL associée.

2.1.1 Écriture du schéma numérique

On considère l'équation d'advection–diffusion en dimension 1 :

$$\frac{\partial u}{\partial t} + a \frac{\partial u}{\partial x} = v \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad x \in [0,1], t > 0$$

On introduit un maillage uniforme en espace et en temps défini par :

$$x_j = j\Delta x, \quad j = 0, \dots, N$$

$$t^n = n\Delta t \quad n \in N$$

On note alors $u_j^n \approx u(x_j, t^n)$

Dans ce projet, on choisit un schéma d'Euler explicite pour la discrétisation en temps, un schéma amont pour le terme d'advection, en supposant $a > 0$, et un schéma centré pour le terme de diffusion.

La dérivée temporelle est approchée par :

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x_j, t^n) \approx \frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t}$$

Le terme d'advection est discrétisé par un schéma amont :

$$\frac{\partial u}{\partial x}(x_j, t^n) \approx \frac{u_j^n - u_{j-1}^n}{\Delta x}$$

Le terme de diffusion est discrétisé par une différence centrée d'ordre 2 :

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_j, t^n) \approx \frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{\Delta x^2}$$

En remplaçant ces approximations dans l'équation, on obtient :

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + a \frac{u_j^n - u_{j-1}^n}{\Delta x} = v \frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{\Delta x^2}$$

En posant

$$\lambda = \frac{a\Delta t}{\Delta x}, \quad \mu = \frac{v\Delta t}{\Delta x^2}$$

le schéma numérique final s'écrit :

$$u_j^{n+1} = u_j^n - \lambda(u_j^n - u_{j-1}^n) + \mu(u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n)$$

Ce schéma est utilisé avec des conditions aux limites périodiques, c'est-à-dire que les valeurs aux extrémités du domaine sont identifiées.

2.1.2 Consistance du schéma

On étudie la consistance du schéma lorsque $\Delta t \rightarrow 0$ et $\Delta x \rightarrow 0$.

L'objectif est de vérifier que le schéma numérique approche bien l'équation continue.

Terme temporel

En utilisant le développement de Taylor, on obtient :

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} = u_t + \mathcal{O}(\Delta t)$$

Ainsi, la discrétisation en temps est consistante d'ordre 1.

Terme d'advection

$$\frac{u_j^n - u_{j-1}^n}{\Delta x} = u_x + \mathcal{O}(\Delta x)$$

Le terme de diffusion est consistant d'ordre 2 en espace.

Conclusion

L'erreur de troncature du schéma est donnée par :

$$\tau = \mathcal{O}(\Delta t) + \mathcal{O}(\Delta x) + \mathcal{O}(\Delta x^2)$$

Le terme dominant étant en $\mathcal{O}(\Delta x)$, le schéma est globalement d'ordre 1 en espace.

Par conséquent, le schéma est consistant.

2.1.3 Ordre du schéma

D'après l'étude de consistance, on peut déterminer l'ordre du schéma.

Le schéma d'Euler explicite est d'ordre 1 en temps.

Le schéma amont pour le terme d'advection est d'ordre 1 en espace.

Le schéma centré pour le terme de diffusion est d'ordre 2 en espace.

Ainsi, l'ordre global du schéma est limité par le terme dominant.

Le schéma est donc d'ordre 1 en temps et d'ordre 1 en espace.

2.1.4 Stabilité du schéma

On effectue une analyse de stabilité de type Von Neumann.

On suppose une solution sous la forme :

$$u_j^n = G^n e^{ikx_j}$$

où G est le facteur d'amplification.

En injectant cette forme dans le schéma numérique, on obtient une condition de stabilité :

$$|G| \leq 1$$

Cette condition impose des contraintes sur les paramètres du schéma.

On obtient :

$$\lambda \leq 1 \quad \mu \leq \frac{1}{2}$$

Le schéma est donc stable sous ces conditions.

2.1.5 Condition CFL

Les conditions de stabilité permettent de déduire une contrainte sur le pas de temps.

Pour le terme d'advection :

$$\lambda = \frac{a\Delta t}{\Delta x} \leq 1$$

On obtient :

$$\Delta t \leq \frac{\Delta x}{a}$$

Pour le terme de diffusion :

$$\mu = \frac{v\Delta t}{\Delta x^2} \leq \frac{1}{2}$$

On obtient :

$$\Delta t \leq \frac{\Delta x^2}{2v}$$

Finalement, le pas de temps doit vérifier :

$$\Delta t \leq \min\left(\frac{\Delta x}{a}, \frac{\Delta x^2}{2v}\right)$$

En pratique, on choisit un pas de temps plus restrictif :

$$\Delta t = \min\left(0.8 \frac{\Delta x}{a}, 0.4 \frac{\Delta x^2}{v}\right)$$

2.2 Travail numérique

Dans cette partie, le schéma numérique précédent est implémenté en Python afin de résoudre l'équation d'advection-diffusion en dimension 1 avec conditions aux limites périodiques. La solution numérique obtenue est ensuite comparée à la solution analytique afin de valider le schéma.

2.2.1 Implémentation du schéma

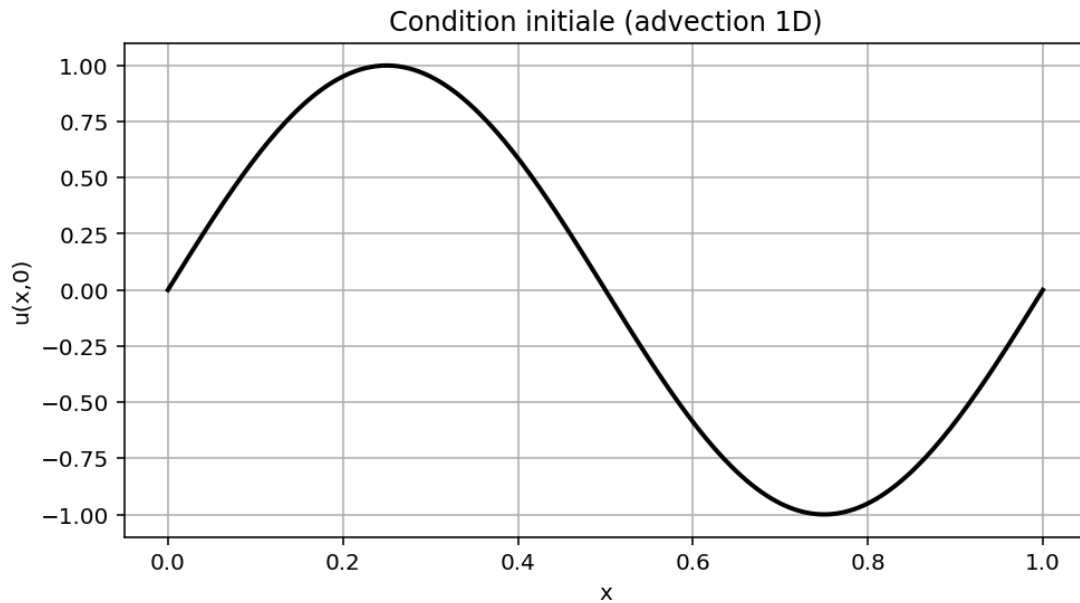
Le schéma numérique est implémenté en Python en utilisant un maillage uniforme en espace et un schéma explicite en temps.

Les paramètres du problème sont définis comme suit :

- domaine spatial $[0,1]$
- vitesse a constante
- coefficient de diffusion v
- condition initiale $u(x, 0) = \sin(2\pi x)$
- La solution exacte utilisée pour la validation est donnée par :

$$u(x, t) = e^{-4\pi^2 vt} \sin(2\pi(x - at))$$

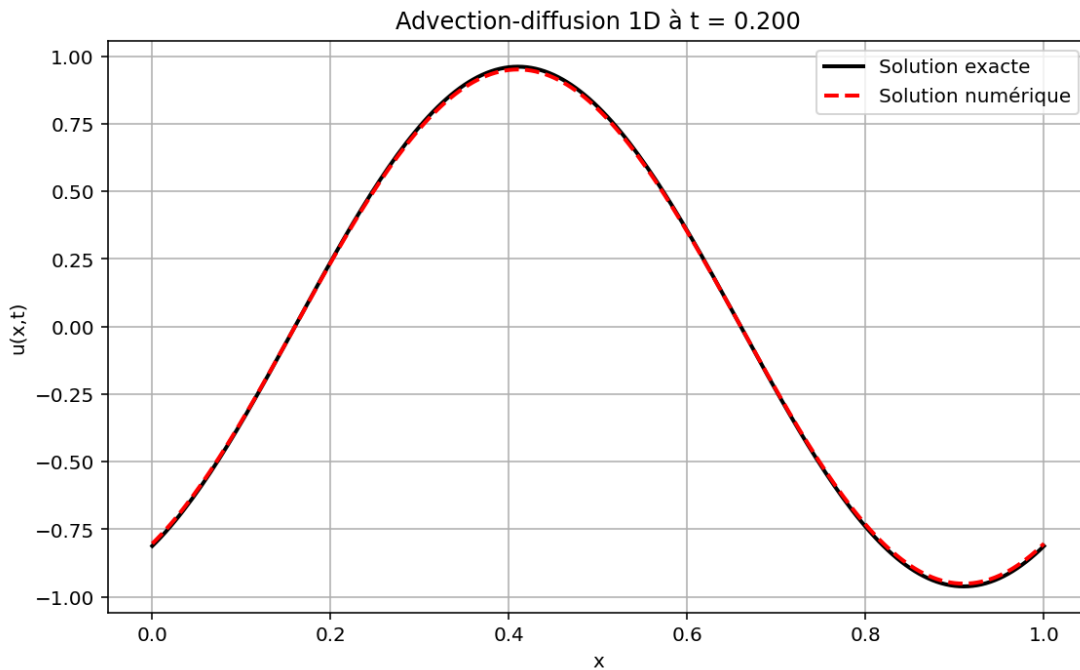
Le schéma est ensuite implémenté sous forme d'une fonction permettant de calculer la solution numérique à chaque pas de temps.



(Figure 1 --Condition initial (advection 1D))

2.2.2 Comparaison avec la solution exacte

La solution numérique est comparée à la solution analytique au temps final.



(Figure—2 Comparaison entre la solution numérique et la solution exacte)

La comparaison montre que la solution numérique suit correctement la solution exacte. On observe néanmoins un léger amortissement de l'amplitude, dû à la diffusion numérique introduite par le schéma amont.

2.2.3 Calcul de l'erreur en norme L^2

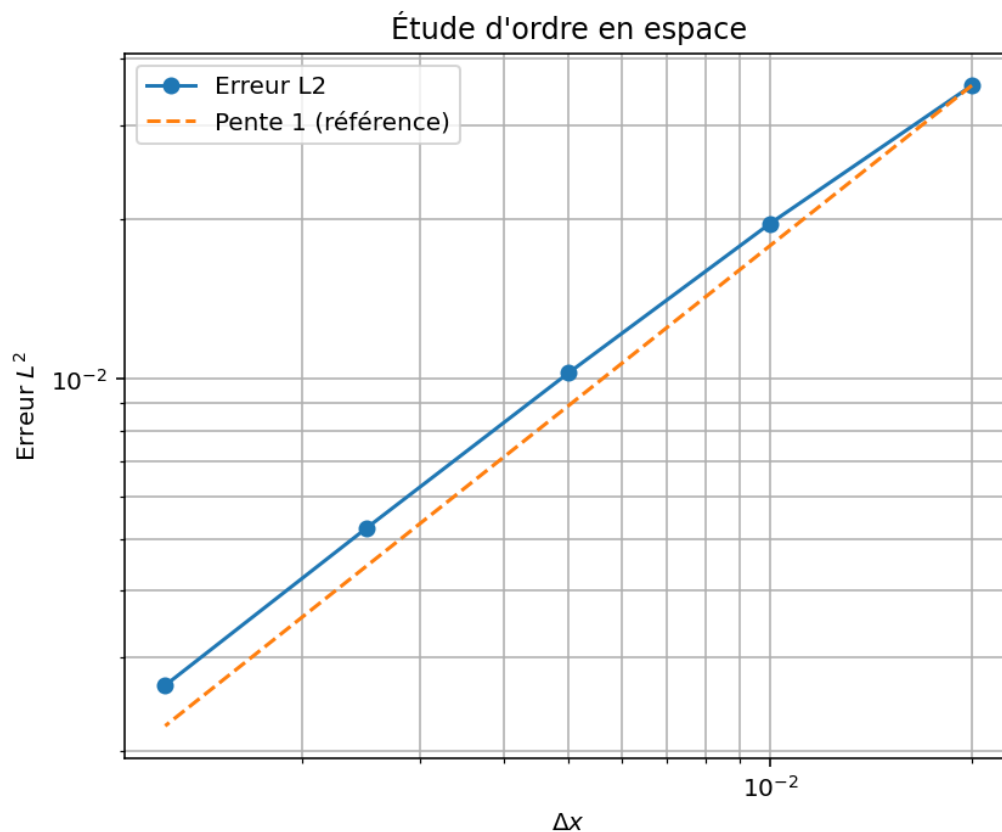
L'erreur entre la solution numérique et la solution exacte est mesurée à l'aide de la norme discrète L^2 :

$$|e|_{L^2} = \left(\Delta x \sum_{j=0}^N (u_j^{num} - u_j^{exact})^2 \right)^{1/2}$$

Cette erreur permet de quantifier précisément la précision du schéma au temps final.

2.2.4 Étude de l'ordre de convergence en espace

Pour étudier la convergence en espace, on fait varier le nombre de points du maillage tout en choisissant un pas de temps suffisamment petit.

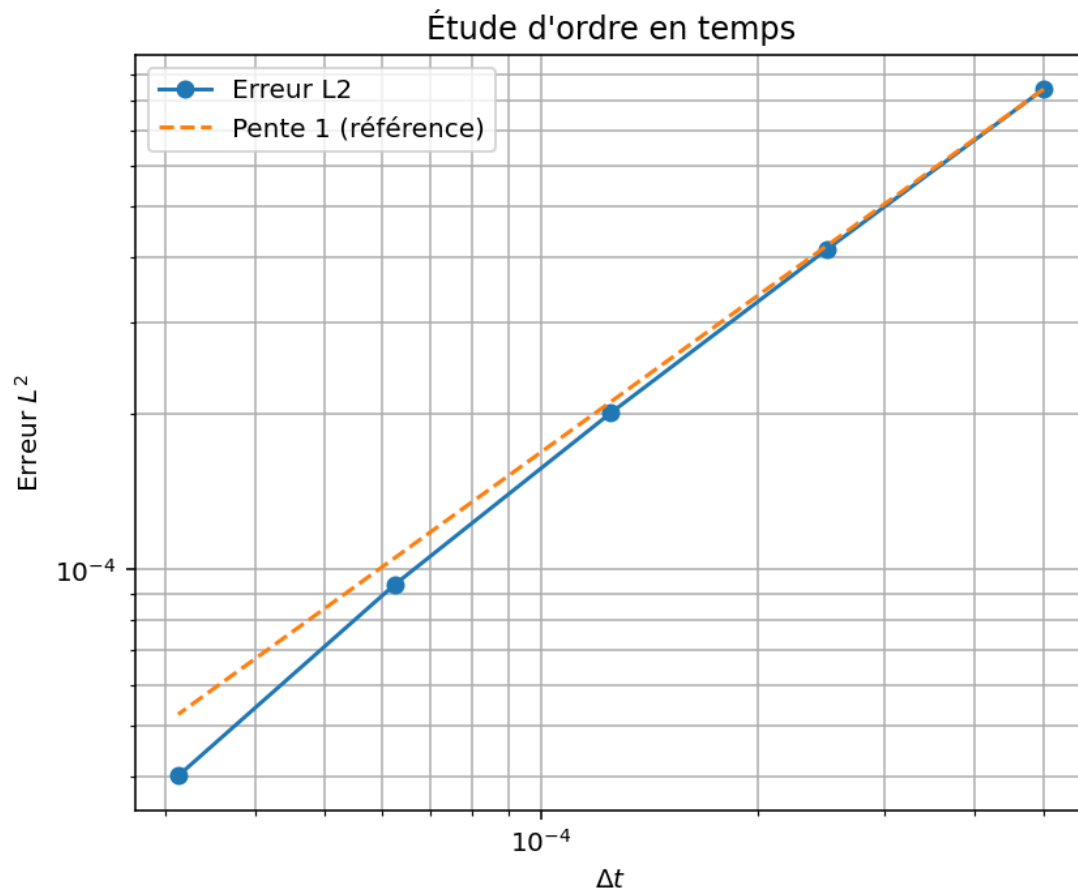


(Figure—3 Étude de convergence en espace)

On observe que l'erreur décroît linéairement en échelle log-log, avec une pente proche de 1. Cela confirme que le schéma est d'ordre 1 en espace, ce qui est cohérent avec l'utilisation du schéma amont pour le terme d'advection.

2.2.5 Étude de l'ordre de convergence en temps

Pour l'étude en temps, on fixe un maillage spatial suffisamment fin et on fait varier le pas de temps Δt .



(Figure4--Étude de convergence en temps)

On observe une pente proche de 1, ce qui montre que le schéma est d'ordre 1 en temps. Ce résultat est cohérent avec l'utilisation du schéma d'Euler explicite.

2.2.6 Conclusion

Les résultats numériques sont en accord avec l'analyse théorique. Le schéma permet de reproduire correctement la solution exacte, et les études de convergence confirment que le schéma est d'ordre 1 en temps et en espace.

3 Partie 2 — Transport en dimension 2

3.1 Travail théorique

3.1.1 Écriture du schéma numérique

On considère l'équation d'advection–diffusion en dimension 2 :

$$\frac{\partial u}{\partial t} + a \frac{\partial u}{\partial x} + b \frac{\partial u}{\partial y} = v \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right)$$

On introduit un maillage uniforme :

$$x_i = i\Delta x, \quad y_j = j\Delta y, \quad t^n = n\Delta t$$

On note :

$$u_{i,j}^n \approx u(x_i, y_j, t^n)$$

On utilise :

Euler explicite en temps

schéma upwind pour l'advection

différences centrées pour la diffusion

Discretisation

Temps : $\frac{u_{i,j}^{n+1} - u_{i,j}^n}{\Delta t}$

Advection en x (si $a > 0$) : $\frac{u_{i,j}^n - u_{i-1,j}^n}{\Delta x}$

Advection en y (si $b > 0$) : $\frac{u_{i,j}^n - u_{i,j-1}^n}{\Delta y}$

Diffusion : $\frac{u_{i+1,j}^n - 2u_{i,j}^n + u_{i-1,j}^n}{\Delta x^2} + \frac{u_{i,j+1}^n - 2u_{i,j}^n + u_{i,j-1}^n}{\Delta y^2}$

Schéma final

$$u_{i,j}^{n+1} = u_{i,j}^n - \lambda_x(u_{i,j}^n - u_{i-1,j}^n) - \lambda_y(u_{i,j}^n - u_{i,j-1}^n) + \mu_x(u_{i+1,j}^n - 2u_{i,j}^n + u_{i-1,j}^n) + \mu_y(u_{i,j+1}^n - 2u_{i,j}^n + u_{i,j-1}^n)$$

avec : $\lambda_x = \frac{a\Delta t}{\Delta x}$, $\lambda_y = \frac{b\Delta t}{\Delta y}$, $\mu_x = \frac{v\Delta t}{\Delta x^2}$, $\mu_y = \frac{v\Delta t}{\Delta y^2}$

3.1.2 Consistance du schema

On étudie la consistance lorsque $\Delta t \rightarrow 0, \Delta x \rightarrow 0, \Delta y \rightarrow 0$.

Temps : $\frac{u_{i,j}^{n+1} - u_{i,j}^n}{\Delta t} = u_t + \mathcal{O}(\Delta t)$

Advection : $\frac{u_{i,j}^n - u_{i-1,j}^n}{\Delta x} = u_x + \mathcal{O}(\Delta x)$ $\frac{u_{i,j}^n - u_{i,j-1}^n}{\Delta y} = u_y + \mathcal{O}(\Delta y)$

Diffusion : $\frac{u_{i+1,j}^n - 2u_{i,j}^n + u_{i-1,j}^n}{\Delta x^2} = u_{xx} + \mathcal{O}(\Delta x^2)$ $\frac{u_{i,j+1}^n - 2u_{i,j}^n + u_{i,j-1}^n}{\Delta y^2} = u_{yy} + \mathcal{O}(\Delta y^2)$

Conclusion : $\tau = \mathcal{O}(\Delta t) + \mathcal{O}(\Delta x) + \mathcal{O}(\Delta y)$

Le schéma est consistant.

3.1.3 Ordre du schéma

Le schéma est :

d'ordre 1 en temps (Euler explicite)

d'ordre 1 en espace (schéma upwind dominant)

Donc le schéma est globalement d'ordre 1 en temps et en espace.

3.1.4 Stabilité du schéma

On effectue une analyse de stabilité de type Von Neumann.

On suppose :

$$u_{i,j}^n = G^n e^{i(kx_i + ly_j)}$$

La condition de stabilité impose :

$$|G| \leq 1$$

On obtient les contraintes :

$$\lambda_x + \lambda_y \leq 1$$

$$\mu_x + \mu_y \leq \frac{1}{2}$$

3.1.5 Condition CFL

On en déduit les conditions sur le pas de temps.

Advection :

$$\frac{a\Delta t}{\Delta x} + \frac{b\Delta t}{\Delta y} \leq 1$$

Diffusion :

$$v\Delta t \left(\frac{1}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta y^2} \right) \leq \frac{1}{2}$$

Finalement :

$$\Delta t \leq \min \left(\frac{1}{\frac{a}{\Delta x} + \frac{b}{\Delta y}}, \frac{1}{2v \left(\frac{1}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta y^2} \right)} \right)$$

3.2 Travail numérique

Dans cette partie, le schéma numérique présenté précédemment est implémenté en

Python afin de simuler le transport et la diffusion d'un polluant en dimension 2 sur le domaine carré $[0,1]^2$. La concentration initiale est choisie sous la forme d'une gaussienne localisée, ce qui permet de visualiser clairement son déplacement sous l'effet de l'advection ainsi que son étalement sous l'effet de la diffusion.

3.2.1 Mise en œuvre numérique

Le domaine est discrétisé à l'aide d'un maillage uniforme de taille $N_x \times N_y$. Dans notre simulation, on choisit un maillage cartésien régulier et un schéma explicite en temps. Les termes d'advection sont discrétisés par un schéma upwind, tandis que les termes diffusifs sont approchés à l'aide de flux centrés.

La condition initiale est donnée par :

$$u(x, y, 0) = \exp(-50((x - x_0)^2 + (y - y_0)^2))$$

Cette fonction représente une source localisée de polluant centrée initialement au point (x_0, y_0) .

Les conditions aux limites périodiques sont imposées numériquement à l'aide de cellules fantômes. Ce choix permet d'assurer la continuité du transport lorsque la concentration atteint les frontières du domaine.

Le pas de temps est choisi de manière à respecter les contraintes de stabilité liées à l'advection et à la diffusion. Dans le code, il est déterminé comme le minimum entre la contrainte CFL associée au transport et la contrainte de type Fourier associée à la diffusion.

3.2.2 Calcul des solutions numérique et exacte

À partir de la condition initiale, la solution numérique est calculée jusqu'au temps final $t = t_{final}$ par itérations successives du schéma explicite. La solution exacte est également évaluée au même instant afin de permettre une comparaison directe.

Dans le cas considéré, la solution analytique s'écrit :

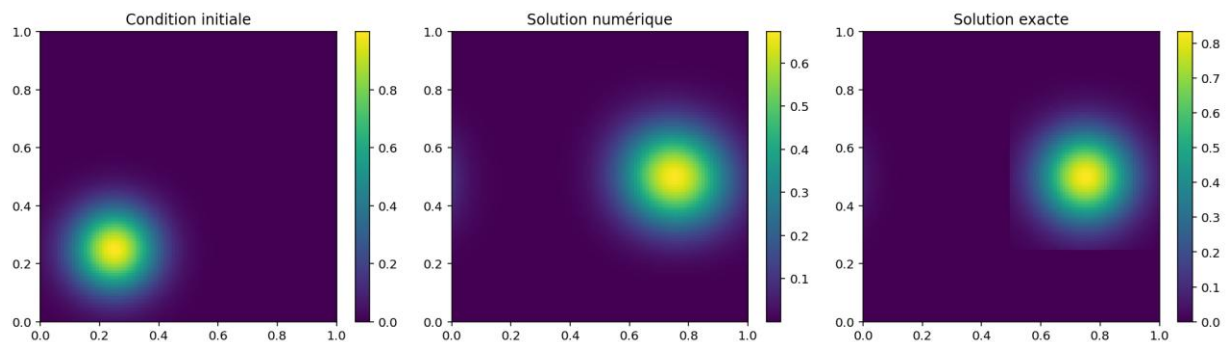
$$u(x, y, t) = \frac{1}{1 + 200vt} \exp\left(-\frac{50((x - x_0 - at)^2 + (y - y_0 - bt)^2)}{1 + 200vt}\right)$$

Comme des conditions aux limites périodiques sont imposées, la position de la

gaussienne transportée est repliée dans le domaine à l'aide d'une opération modulo dans les directions x et y .

3.2.3 Visualisation des résultats

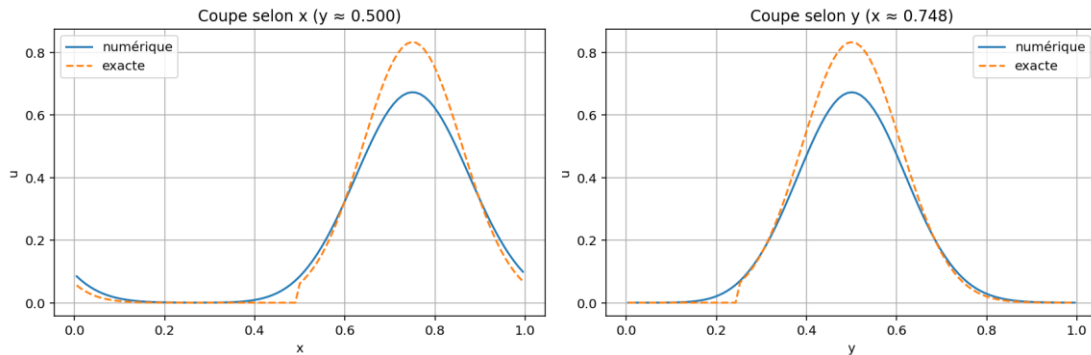
La première étape de l'analyse consiste à représenter la condition initiale, la solution numérique au temps final et la solution exacte correspondante.



(Figure 5-- Condition initiale, solution numérique et solution exacte)

Cette figure montre clairement le déplacement de la gaussienne sous l'effet du champ de vitesse (a,b). La concentration initialement centrée en (x_0, y_0) est transportée vers une nouvelle position, tout en s'élargissant sous l'effet de la diffusion. La comparaison entre la solution numérique et la solution exacte met en évidence un bon accord global sur la position et la forme de la tache de polluant. On observe néanmoins que la solution numérique est légèrement plus étalée et présente une amplitude un peu plus faible, ce qui traduit la diffusion numérique introduite par le schéma upwind.

Afin d'affiner cette comparaison, on représente également des coupes unidimensionnelles de la solution selon les directions x et y , au voisinage du maximum de concentration.



(Figure 5 -- Comparaison des profils numériques et exacts selon x et selon y)

Les profils obtenus montrent que la position du maximum est correctement reproduite par la méthode numérique. En revanche, l'amplitude de la solution numérique est légèrement inférieure à celle de la solution exacte, et le profil apparaît un peu plus diffusé. Ce comportement est cohérent avec l'utilisation d'un schéma upwind, connu pour introduire une dissipation numérique supplémentaire.

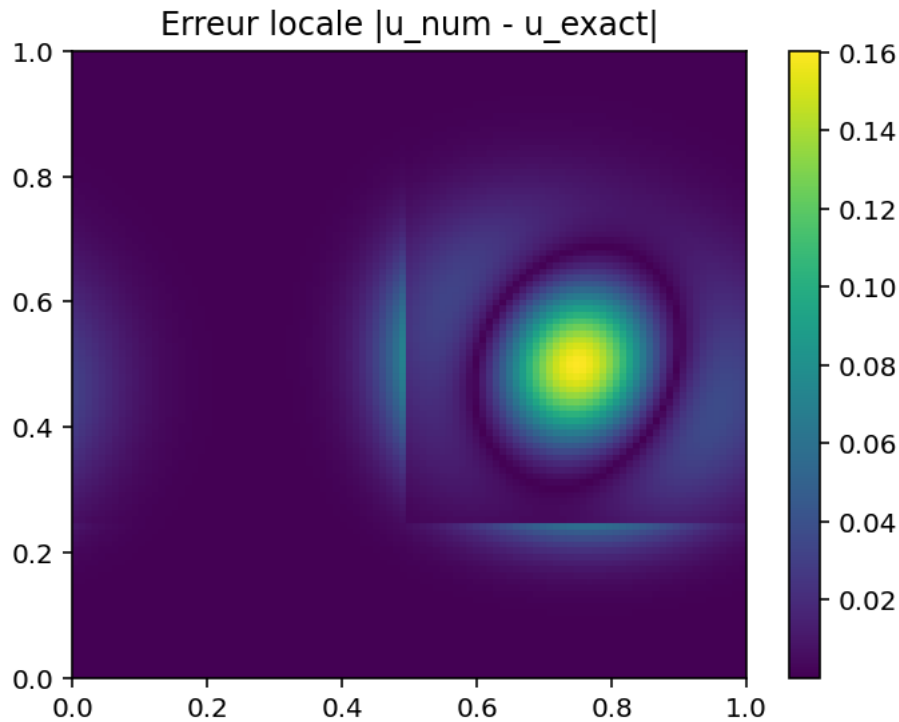
3.2.4 Calcul de l'erreur

L'erreur entre la solution numérique et la solution exacte est mesurée à l'aide de la norme discrète L^2 définie par :

$$|e|_{L^2} = \left(\Delta x \Delta y \sum_{i,j} (u_{i,j}^{num} - u_{i,j}^{exact})^2 \right)^{1/2}$$

Cette quantité permet d'obtenir une mesure globale de la précision de la simulation au temps final.

En complément de cette mesure globale, il est utile de représenter la répartition spatiale de l'erreur locale :



(Figure 6 — Carte de l'erreur locale $|u_{num} - u_{exact}|$)

3.2.5 Influence des paramètres

Les simulations réalisées permettent également d'interpréter qualitativement l'influence des paramètres physiques et numériques.

Lorsque les vitesses aaa et bbb augmentent, le centre de la gaussienne se déplace plus rapidement dans le domaine. Le transport domine alors davantage la dynamique de la solution.

Lorsque le coefficient de diffusion ν_{nuv} augmente, la tache de polluant s'élargit plus fortement et son amplitude maximale diminue. La solution devient alors plus lisse.

Le maillage joue également un rôle important : un maillage plus fin permet de mieux représenter les gradients de concentration et d'améliorer la précision de la solution numérique.

Enfin, le choix de conditions aux limites périodiques permet de modéliser un transport continu dans le domaine sans perte de matière aux frontières, ce qui est cohérent avec la forme de la solution analytique utilisée.

3.2.6 Conclusion

Les résultats numériques obtenus en dimension 2 montrent que le schéma choisi permet de reproduire correctement le transport et la diffusion d'un polluant. Les cartes de concentration, les coupes unidimensionnelles et la carte d'erreur mettent en évidence un bon accord entre la solution numérique et la solution exacte. Les écarts observés restent cohérents avec les propriétés du schéma upwind, qui introduit une diffusion numérique modérée.

Ainsi, la mise en œuvre numérique valide le schéma utilisé pour simuler l'évolution du polluant en dimension 2.

4 Conclusion générale

Dans ce projet, nous avons étudié numériquement l'équation d'advection–diffusion en dimension 1 et en dimension 2 à l'aide de différentes méthodes numériques.

Dans la première partie, nous avons mis en œuvre un schéma de différences finies explicite combinant une discrétisation amont pour le terme d'advection et une discrétisation centrée pour le terme de diffusion. L'analyse théorique a permis de vérifier la consistance et la stabilité du schéma, tandis que les résultats numériques ont confirmé un ordre 1 en temps et en espace, en accord avec les résultats attendus.

Dans la seconde partie, nous avons étendu l'étude à la dimension 2 à l'aide d'un schéma de volumes finis. Les simulations ont permis de reproduire le transport d'une gaussienne ainsi que son étalement dû à la diffusion. La comparaison avec la solution exacte, ainsi que l'analyse des profils et de l'erreur, ont montré un bon accord global, malgré la présence d'une diffusion numérique inhérente au schéma utilisé.

Au-delà des résultats obtenus, ce projet nous a permis de mieux comprendre concrètement les notions de stabilité, de condition CFL et d'ordre de convergence. La mise en œuvre numérique a également mis en évidence les limites pratiques des schémas explicites, notamment en termes de contraintes sur le pas de temps.

En tant qu'étudiants de Master 1, ce travail a constitué une première expérience complète de modélisation numérique, depuis l'analyse théorique jusqu'à la simulation et l'interprétation des résultats. Il nous a permis de mieux appréhender le lien entre les modèles mathématiques et leur implémentation numérique.