

Modélisation et simulation des écoulements de fluides dans la géosphère

M. Kern, E. Mouche

13 janvier 2025

Des scripts Python à compléter, ainsi que des notebook permettant de tester ces scripts sont disponibles sur la page <https://who.rocq.inria.fr/Michel.Kern/Pages/Enseignements.html>

Le but du TP est d'étudier diverses méthodes numériques pour des équations de diffusion transitoire. Pour simplifier, on se placera en dimension 1 d'espace. Dans tout le TP, on se place sur un intervalle $[0, L]$ (on prendra en général $L = 1$).

On étudie l'équation de diffusion transitoire (équation de la chaleur non-homogène), avec un coefficient de diffusion $\mathbf{D} = \mathbf{D}(x)$:

$$\frac{\partial T}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \left(\mathbf{D} \frac{\partial T}{\partial x} \right) = 0, \quad 0 < x < L, \quad 0 < T < t_f.$$

avec des conditions aux limites à chaque extrémité de type Dirichlet ou Neumann :

En $x = 0$ Dirichlet : $T(0, t) = T_g(t)$, Neumann $D \frac{\partial T}{\partial x}(0, t) = g_g(t)$,

En $x = L$ Dirichlet : $T(L, t) = T_d(t)$, Neumann $-D \frac{\partial T}{\partial x}(L, t) = g_L(t)$,

et une condition initiale

$$u(x, 0) = u_0(x), \quad x \in]0, L[.$$

Pour la discrétisation en espace, on utilisera une méthode de volumes finis centrée sur les mailles. Pour cela, on prend un maillage de l'intervalle en question. On définit des volumes de contrôle $J_i = [x_{i-1/2}, x_{i+1/2}]$ pour $i = 1, \dots, N$, de centre $x_i = 1/2(x_{i-1/2} + x_{i+1/2})$. Toujours pour simplifier, on se restreindra au cas d'un maillage uniforme, de pas $h = x_{i+1/2} - x_{i-1/2}$. En notant $T_i(t) = \frac{1}{h} \int_{J_i} T(x, t) dx$, et $c_{\mathcal{T}}(t) = (c_1(t), \dots, c_N(t))$ le vecteur correspondant, on obtient un système semi-discrétisé en espace de la forme

$$M_{\mathcal{T}} \frac{dT_{\mathcal{T}}(t)}{dt} + A_{\mathcal{T}} T_{\mathcal{T}}(t) = b(t),$$

où la matrice de masse $M_{\mathcal{T}}$ est diagonale et donnée par

$$M_{\mathcal{T}} = \text{diag}\left(\frac{1}{h_1}, \dots, \frac{1}{h_N}\right)$$

et la matrice de rigidité $A_{\mathcal{T}}$ est celle qui a été étudiée dans le problème stationnaire.

Rappels : le θ -schéma

Pour discrétiser le système différentiel précédent, on se donne un pas de temps Δt , choisi de sorte que $N_t \Delta t = t_f$ pour un entier N_t , on définit les pas de temps $t^n = n \Delta t$, $n = 0, \dots, N_t$ et on note $T_{\mathcal{T}}^n$ une approximation de $T_{\mathcal{T}}(t^n)$. Pour calculer $T_{\mathcal{T}}(t^n)$, on utilise le θ -schéma (où $\theta \in [0, 1]$ est un paramètre), défini par

$$M_{\mathcal{T}} \frac{T_{\mathcal{T}}^{n+1} - T_{\mathcal{T}}^n}{\Delta t} + A_{\mathcal{T}} (\theta T_{\mathcal{T}}^{n+1} + (1 - \theta) T_{\mathcal{T}}^n) = f^{n+\theta} := \theta f(t^{n+1}) + (1 - \theta) f^n.$$

On remarque que pour $\theta = 0$, on retrouve la **méthode d'Euler explicite**, et pour $\theta = 1$ on retrouve la **méthode d'Euler implicite**. Pour $\theta = 1/2$, la méthode porte le nom de Crank-Nicolson. On voit aussi que la méthode est comme son nom l'indique explicite pour $\theta = 0$, et implicite (on doit résoudre un système linéaire à chaque pas de temps) pour les autres valeurs de θ

On rappelle les principales propriétés de ce schéma :

Nombre de Fourier Dans le cas d'un milieu homogène (D constant) et d'un maillage uniforme (h constant), on introduit le nombre $F = D \Delta t / h^2$, appelé *nombre de Fourier*.

Stabilité Pour $\theta = 0$, le schéma est stable sous une condition de stabilité $D \Delta t \leq 1/2 h^2$.

Il est **inconditionnellement stable** pour $\theta \geq 1/2$.

Ordre Le θ -schéma est d'ordre 1 en temps pour $\theta \neq 1/2$, et d'ordre 2 en temps pour $\theta = 1/2$.

Les trois valeurs les plus intéressantes pour choisir θ sont

$\theta = 0$ Le schéma est explicite, sa mise en oeuvre est particulièrement économique. Mais il est soumis à une condition de stabilité *très* restrictive ;

$\theta = 1/2$ Le schéma est stable sans condition, et d'ordre 2. On peut donc s'attendre à une meilleure précision. Il faut toutefois rester prudent, car $\theta = 1/2$ représente la limite de stabilité, et le calcul de solution peu régulières peut présenter des oscillations, comme on le verra dans un exercice.

$\theta = 1$ Le schéma reste stable sans condition, mais n'est que d'ordre 1. Ce choix peut rester intéressant pour ses excellentes propriétés de stabilité.

Pour quantifier l'erreur obtenue après un calcul, on peut calculer la norme discrète suivante, appelée « norme L^∞ - L^2 » :

$$\|c - T_{\mathcal{T}}\|_{2,\infty} = \max_{n=0,\dots,N_t} \sqrt{\sum_{i=1}^N |T_i^n - T(x_i, t^n)|^2 h}$$

Si le schéma de discrétisation en espace est d'ordre q (en principe $q = 1$ pour le schéma VF, mais on peut observer $q = 2$ dans des situations favorables), l'erreur obtenue sera donc

Pour $\theta \neq 1/2$ $\|T - T_{\mathcal{T}}\|_{2,\infty} = O(\Delta t + h^q)$;

Pour $\theta = 1/2$ $\|T - T_{\mathcal{T}}\|_{2,\infty} = -O(\Delta t^2 + h^q)$;

En pratique, il est souvent raisonnable de chercher à équilibrer les erreurs.

Exercice 1 : Convergence des schémas

Le notebook TP1_transitoire permet de mettre en oeuvre la méthode précédente, en utilisant des fonctions auxiliaires du fichier `heat1D.py`.

On se place tout d'abord dans une situation où la solution exacte est connue. On prendra $T(x, t) = \exp(-\pi^2 t/4) \sin(\pi/2x) + \frac{1}{2} \exp(-4\pi^2 t) \sin(2\pi x)$.

1 Mise en route Les deux cellules permettent de résoudre le problème défini ci-dessus. Vous devez compléter la deuxième cellule pour calculer l'erreur par rapport à la solution exacte.

2 Instabilité Constater l'instabilité du schéma d'Euler explicite quand le nombre de Fourier dépasse 0.5.

Vérifier également que le θ -schéma reste stable pour $\theta \geq 1/2$.

3 Convergence et stabilité : Euler implicite et explicite Comparer les schémas explicites et implicites, pour deux valeurs du nombre de Fourier : $F = 0.4$ et $F = 5$. Vous devez calculer l'erreur après chaque calcul (dans le tableau `ErrEulExp` ou `ErrEulImp`, ainsi que les taux de convergence, défini pour une famille de paramètres de discrétisation h^n , Δt^n comme

$$\rho^n = \frac{e^n}{e^{n+1}}, \quad \rho^0 = 0$$

où e^n est l'erreur correspondant à h^n et Δt^n .

Lorsqu'elles convergent, quel est l'ordre observé des deux méthodes ? Commentez ces résultats.

4 Comparaison Euler et Crank-Nicolson On compare cette fois les schémas d'Euler implicite et de Crank-Nicolson.

Il ya deux manières de faire varier le pas de temps en fonction du pas d'espace :

- On prend d'abord un nombre de Fourier fixe, par exemple $F = 5$, puisque les deux schémas sont stables ;
- On peut aussi prendre $\Delta t = \Delta x$ (avec ici $D = 1$).

Commenter les résultats obtenus .

5 Les surprises de Crank-Nicolson On illustre ensuite une difficulté que l'on peut rencontrer avec Crank-Nicolson pour des conditions initiales discontinues. Comparer le comportement avec $\theta = 0.5$, $\theta = 1$, et des valeurs intermédiaires de θ (proche de 0.5).

Remarque : Il est possible d'améliorer les résultats avec en démarrant l'intégration avec deux pas de Euler implicite avec un pas de $\Delta t/2$ (voir le livre¹ pour plus de détails).

Exercice 2 : Applications physiques

On aborde maintenant deux applications. Pour les deux questions de cet exercice, vous devrez compléter le code des cellules, en vous inspirant des exemples précédents.

1 Chauffage par un flux imposé On impose un flux constant sur le bord gauche du domaine, de valeur F_0 . Dans le cas d'un milieu semi-infini, la solution exacte est donnée par

$$u_{\text{ex}} = 2F_0 \left[\sqrt{t/(D\pi)} \exp(-x^2/(4Dt)) - x/(2D) \operatorname{erfc} \left(x/(2\sqrt{Dt}) \right) \right].$$

Implémenter les fonctions manquantes pour résoudre le problème (voir les données dans le notebook). En ce qui concerne les conditions aux limites, on prend donc une condition de Neumann à gauche, et il faut choisir une condition sur le bord droit, qui est censé être « loin ». Le plus simple est d'imposer une condition de flux nul.

Étudier l'influence du temps de simulation et de la longueur du segment sur le comportement de la solution au bord droit. Expliquer vos observations

Dans ce cas très particulier, on peut « tricher » et imposer comme condition à la limite à droite la valeur de la solution exacte en domaine semi-infini. Quel effet cela-a-t-il ?

2 Forçage périodique Cet exemple simule l'évolution de la température dans le sous-sol en fonction des variations annuelles de température. L'intervalle $[0, L]$ sera vu comme vertical. On prend une condition aux limites périodique « en haut »

$$u(0, t) = T_0 + T_1 \cos(\omega t),$$

avec $u(L, t) = T_0$ et $u(x, 0) = T_0$.

1. Griffiths, Dold, Sylvester, *Essential Partial Differential Equations* (Springer), pp. 256–257

On peut démontrer que, après un transitoire, la solution devient quasi-stationnaire et s'approche de la solution

$$u_{QS} = T_0 + T_1 \exp(-\sqrt{\omega/(2D)}x) \cos(\omega t - \sqrt{\omega/(2D)}x)$$

Une application amusante (utile?) est de déterminer la profondeur à laquelle il faut creuser pour que la température dans une cave à vin reste approximativement constante. Le résultat dépend de la nature du sous-sol, et de la fréquence des perturbations.

Implémenter les fonctions pour résoudre ce problème.

Observer la convergence vers l'état quasi-stationnaire. Faire varier la conductivité (la période est fixée à un an), et fixer la taille de l'intervalle correspondant.

Exercice 3 : Équation de diffusion non-linéaire

On considère la diffusion capillaire de l'eau dans une colonne horizontale remplie d'un matériau poreux. La diffusion capillaire est décrite par l'équation de Richards :

$$(1) \quad C(h) \frac{\partial h}{\partial t} - \vec{\nabla} \cdot \left(K(h) \vec{\nabla} (h + z) \right) = 0$$

où $h = p/\rho g$ est la pression d'eau (en mètres), positive dans la zone saturée en eau et négative dans la zone non saturée. $C(h)$ est la capacité capillaire et $K(h) = K_{sat} k_r(h)$ est la perméabilité où K_{sat} est la perméabilité à saturation et $k_r(h)$ la perméabilité relative.

Lorsque le problème est en zone non saturée uniquement (notre cas) on peut transformer l'équation de Richards en l'équation de la diffusivité capillaire avec la teneur en eau θ comme variable du problème.

$$(2) \quad \frac{\partial \theta}{\partial t} - \vec{\nabla} \cdot \left(D(\theta) \vec{\nabla} \theta \right) = 0$$

où $D(\theta)$ est la diffusivité capillaire. On rappelle $0 \leq \theta \leq \omega$ où ω est la porosité. On considère donc une colonne de longueur $L = 1$ et de teneur en eau initiale θ_i . On applique une teneur en eau en $x = 0$ égale à la porosité ω (contact avec un réservoir rempli d'eau).

On considérera trois cas :

1. Diffusion linéaire : $D(\theta) = 1$, $\theta_i = 0$, $\omega = 1$. La condition en $x = L$ est flux nul, $D\partial\theta/\partial x = 0$.
2. Diffusion non linéaire : $D(\theta) = \theta$, $\theta_i = 0$, $0.1, 0.5$, $\omega = 1$. La condition en $x = L$ est teneur en eau égale à la teneur en eau initiale, $\theta = \theta_i$.
3. Même conditions que en 2) (cas $\theta_i = 0.2$) mais flux nul en $x = L$, $D(\theta)\partial\theta/\partial x = 0$.

On testera un algorithme explicite et un algorithme implicite (Méthode de Picard).