Chapitre 3

Approche par volumes finis du problème d'advection-diffusion plan et organigrammes de résolution

Après avoir avancé, dans les deux premiers chapitres, un état de l'art sur la problémmatique en question, le présent chapitre 3 de ce rapport de recherche présente notre contribution personnelle. Deux sections y seront présentées et portent respectivement sur l'approche par volumes finis et sur la conception d'organigrammes de résolution.

3.1 Approche par volumes finis

La méthode des volumes finis est basée sur l'intégration des équations écrites sous forme de loi de conservation (établissement du bilan des flux sur des volumes de contrôle). Elle se sert directement des lois de conservation de la mécanique des fluides. Le domaine de calcul doit être complètement couvert de volumes de contrôle et les noeuds de calcul sont définis aux centres de gravité des volumes de contrôle. Les variables sur les frontières des volumes de contrôle sont interpolées des variables des centres de gravité. L'approximation des formulations d'intégrale de surfaces et de volumes apparaissant dans les équations se fait à l'aide des formules de quadratures. Le succès de la méthode se base sur plusieurs propriétés : la méthode est simple, conservative, permet de traiter des géométries complexes avec des volumes de forme quelconque (applicable à des géométries complexes), détermination plus naturelle des conditions aux limites de type Neumann ou mixte et les termes apparaissant dans les équations écrites sous forme intégrale possèdent des significations physiques. Les qualités conservatives de la méthode sont basées sur le fait que l'établissement du bilan se fait sur chaque volume de contrôle : flux de convection et de diffusion entre les volumes de contrôle sur les bords communs sont identiques. Cette approche fournit ainsi de manière naturelle des approximations discrètes conservatives.
Le principe de la méthode est le suivant :

— Dérivation,
— Intégration,
— Interpolation.

3.1.1 Étapes de résolution d'un problème avec la méthode des volumes finis

Généralement, l'approche par volumes finis des problèmes d'advection-diffusion passe par les étapes successives suivantes :

1. Maillage : découpage du domaine en éléments géométriques,
2. Initialiser la grandeur du champ inconnu sur le domaine de calcul,
3. Calcul du bilan de flux maillé par un schéma numérique,
4. Calcul du terme source,
5. Calcul de l'incrément temporel par une méthode d'intégration numérique,
6. Prise en compte des conditions aux limites sur les inconnues. Application des conditions aux limites,
7. Résolution du système linéaire et détermination du champ en tout point,
8. Calcul des dérivées sur les mailles élémentaires.

3.1.2 Forme de divergence de l'équation d'advection-diffusion

L'équation est de la forme

$$\frac{\partial C}{\partial t} + div\vec{Q} = r \tag{3.1}$$

dans laquelle

$$\vec{Q} = C \cdot \vec{U} - D\Delta C = \begin{pmatrix} uC - D\frac{\partial C}{\partial x} \\ vC - D\frac{\partial C}{\partial y} \end{pmatrix}$$

avec les significations suivantes

— C : concentration d'intérêt,
— U : vecteur vitesse du fluide porteur,
— D : coefficient de diffusion,
— r : la source.

3.1.3 Discrétisation

C'est l'élaboration d'un maillage : on découpe le domaine de calcul Ω en éléments géométriques (volumes de contrôle). Ces mailles élémentaires doivent assurer la couverture totale du domaine. On définit les noeuds de calcul (noeuds des variables) aux centres de gravité des volumes de contrôle. Les variables sur les frontières des volumes de contrôle sont interpolées à partir des variables des centres de gravité. Voir figure ci-dessous.

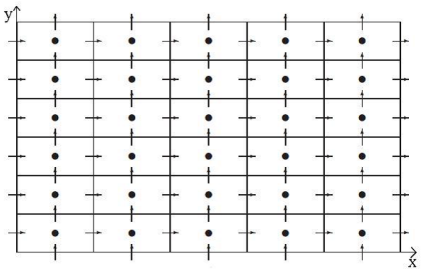


FIGURE 3.1 – Discrétisation des volumes finis.

3.1.4 Théorème de Gauss

Le théorème de Gauss (théorème de flux-divergence, ou théorème d'Ostrogadski) transforme l'intégrale de volume du terme de divergence en intégrale de surface.

$$\int_{\Omega} div\vec{Q} \cdot d\Omega = \int_{S=\partial\Omega} \vec{Q} \cdot d\vec{S} = \int_{S=\partial\Omega} \vec{Q} \cdot \vec{n} dS \tag{3.2}$$

où $\vec{n}$ représente le vecteur normal extérieur à Ω.

3.1.5 Intégration sur les volumes de contrôles

L'intégration des équations fondamentales sous formes de divergence sur les volumes de contrôle est donnée par

$$\int_{\Omega} \frac{\partial C}{\partial t} d\Omega + \int_{\Omega} div\vec{Q} d\Omega = \int_{\Omega} R d\Omega \tag{3.3}$$

Et en appliquant le théorème de Gauss ci-dessus sur le terme de divergence, l'équation précédente se trasforme comme suit

$$\underbrace{\int_{\Omega} \frac{\partial C}{\partial t} d\Omega}_{\text{Terme de la dérivée}} + \underbrace{\int_{S} div\vec{Q} \cdot d\vec{S}}_{\text{Terme de flux}} = \underbrace{\int_{\Omega} R d\Omega}_{\text{Terme source temporelle}} \tag{3.4}$$

Le changement temporel de la concentration C est déterminé par le bilan des flux $\vec{Q}$ sur le bord et par les sources r dans le volume.

3.1.6 Traitement du terme de la dérivée temporelle

Echange des opérateurs d'intégration et de différentiation :

$$\int_{\Omega_{i,j}} \frac{\partial C}{\partial t} d\Omega = \frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega_{i,j}} C d\Omega \tag{3.5}$$

Approximation de l'intégration : ($V_{i,j}$: est le volume de contrôle)

$$\int_{\Omega_{i,j}} C d\Omega = V_{i,j} \cdot C_{i,j} (3.6)$$

Dérivation : (pour des volumes de contrôle temporellement invariables)

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(V_{i,j \cdot C_{i,j}}\right) = V_{i,j}\frac{\partial C_{i,j}}{\partial t} \tag{3.7}$$

Approximation par différence finie pour la dérivée temporelle (différence finie avant) :

$$\frac{\partial C_{i,j}}{\partial t} \approx \frac{C_{i,j}^{k+1} - C_{i,j}^{k}}{\Delta t} \tag{3.8}$$

d'où

$$\int_{\Omega_{i,j}} \frac{\partial C}{\partial t} d\Omega = V_{i,j}\frac{C_{i,j}^{k+1} - C_{i,j}^{k}}{\Delta t} \tag{3.9}$$

avec
V$_{i,j}$: volume de contrôle, et Δt : pas du temps.

3.1.7 Traitement du terme source

La problématique développée dans cette étude concerne tout particulièrement les phénomènes dont l'évolution est liée à la présence d'une source. C'est effectivement le cas de la dispersion atmosphérique, de la diffusion d'un polluant, où la source présente souvent des caractéristiques temporelles et géographiques mal identifiées. Le terme source est traité d'une façon semblable : ($V_{i,j}$ est le volume de contrôle)

$$\int_{\Omega_{i,j}} d\Omega = V_{i,j} \cdot r_{i,j} \tag{3.10}$$

3.1.8 Traitement des termes de flux

L'intégrale représente la somme des flux à travers chaque face de la maille. Le flux est supposé constant sur chaque face, l'intégrale se ramène à une somme discrète du flux sur chaque face volume de contrôle

$$\int_{S=\partial\Omega} \vec{Q} \cdot d\vec{S} = \sum_{m} \int_{S=\partial\Omega} \vec{Q} \cdot d\vec{S} \tag{3.11}$$

dans laquelle m est le nombre de faces (arêtes) du volume de contrôle et $d\vec{S} = dS \cdot \vec{n}$. Puisque les flux dépendent de la concentration et doivent être évalués sur les frontières des mailles, on a alors besoin de schémas d'interpolation convenable. Ceux-ci sont calculés à l'aide des variables définies aux centres de gravité des mailles de calcul.

$$\vec{Q} = \begin{pmatrix} Q_x \\ Q_y \end{pmatrix}$$

où Qx, Qy sont les composantes du vecteur des flux

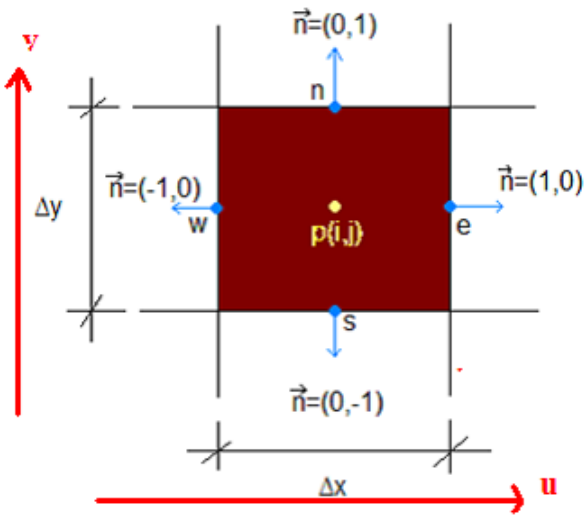


FIGURE 3.2 – Maille de discrétisation 2D équidistant de la méthode des volumes finis.

$$\begin{aligned}\sum_m \int_{S=\partial\Omega} \vec{Q}\cdot d\vec{S} &= [Q_{x,e}\cdot\Delta y - Q_{x,w}\cdot\Delta y] + [Q_{y,n}\cdot\Delta x - Q_{y,s}\cdot\Delta y] \\ &= \left(uC - D\frac{\partial C}{\partial x}\right)_e \cdot\Delta y - \left(uC - D\frac{\partial C}{\partial x}\right)_w \cdot\Delta y + \left(vC - D\frac{\partial C}{\partial y}\right)_n \cdot\Delta x \\ &\quad - \left(vC - D\frac{\partial C}{\partial y}\right)_s \cdot\Delta x \qquad (3.12)\end{aligned}$$

Approximation des flux d'advection et de diffusion :

$$\left(uC - D\frac{\partial C}{\partial x}\right)_e = u\frac{C_{i+1,j}+C_{i,j}}{2} - D\frac{C_{i+1,j}-C_{i,j}}{\Delta x} \qquad (3.13)$$

$$\left(uC - D\frac{\partial C}{\partial x}\right)_w = u\frac{C_{i-1}+C_{i,j}}{2} - D\frac{C_{i,j}-C_{i-1,j}}{\Delta x} \qquad (3.14)$$

$$\left(vC - D\frac{\partial C}{\partial y}\right)_n = v\frac{C_{i,j+1}+C_{i,j}}{2} - D\frac{C_{i,j+1}-C_{i,j}}{\Delta y} \qquad (3.15)$$

$$\left(uC - D\frac{\partial C}{\partial y}\right)_s = v\frac{C_{i,j-1}+C_{i,j}}{2} - D\frac{C_{i,j}-C_{i,j-1}}{\Delta y} \qquad (3.16)$$

d'où

$$\begin{aligned}\sum_m \int_{S=\partial\Omega} \vec{Q}\cdot d\vec{S} &= u\cdot\Delta y\frac{C_{i+1,j}-C_{i-1,j}}{2} - D\cdot\Delta y\frac{C_{i+1,j}-2C_{i,j}+C_{i-1,j}}{\Delta x} \\ &\quad + v\cdot\Delta x\frac{C_{i,j+1}-C_{i,j-1}}{2} - D\cdot\Delta x\frac{C_{i,j+1}-2C_{i,j}+C_{i,j}}{\Delta y} \qquad (3.17)\end{aligned}$$

Après manipulation des résultats des intégrations (terme temporel, terme source, terme des flux), on obtient pour l'équation d'advection-diffusion la relation suivante :

$$(\Delta x \cdot \Delta y)\,\frac{C_{i,j}^{k+1} - C_{i,j}^{k}}{\Delta t} + u \cdot \Delta y \frac{C_{i+1,j} - C_{i-1,j}}{2} - D \cdot \Delta y \frac{C_{i+1,j} - 2C_{i,j} + C_{i-1,j}}{\Delta x}$$
$$+ v \cdot \Delta x \frac{C_{i,j+1} - C_{i,j-1}}{2} - D \cdot \Delta x \frac{C_{i,j+1} - 2C_{i,j} + C_{i,j-1}}{\Delta y} = (\Delta x \cdot \Delta y) \cdot r_{i,j} \quad (3.18)$$

En divisant membre à membre par $(\Delta x \cdot \Delta y)$, l'équation discrète s'écrit

$$\frac{C_{i,j}^{k+1} - C_{i,j}^{k}}{\Delta t} + u \frac{C_{i+1,j} - C_{i-1,j}}{2\Delta x} - D \frac{C_{i+1,j} - 2C_{i,j} + C_{i-1,j}}{\Delta x^2} + v \frac{C_{i,j+1} - C_{i,j-1}}{2\Delta y}$$
$$- D \frac{C_{i,j+1} - 2C_{i,j} + C_{i,j-1}}{\Delta y^2} = r_{i,j} \quad (3.19)$$

et en adoptant les notations suivantes
$C_{i,j} = C_P; C_{i+1,j} = C_E; C_{i-1,j} = C_w; C_{i,j+1} = C_N; C_{i,j-1} = C_S; r_{i,j} = r_P$
l'équation discrète ci-dessus prend la forme
$\frac{C_P^{k+1} - C_P^k}{\Delta t} + u \frac{C_E - C_W}{2\Delta x} - D \frac{C_E - 2C_P + C_W}{\Delta x^2} + v \frac{C_N - C_S}{2\Delta y} - D \frac{C_N - 2C_P + C_S}{\Delta y^2} = r_P$
Gardons le terme temporel dans le côté gauche et transportons le reste vers la droite, on a

$$\frac{C_P^{k+1} - C_P^k}{\Delta t} = -u \frac{C_E - C_W}{2\Delta x} + D \frac{C_E - 2C_P + C_W}{\Delta x^2} - v \frac{C_N - C_S}{2\Delta y} + D \frac{C_N - 2C_P + C_S}{\Delta y^2} + r_P$$

En multipliant membre à membre par Δt, la relation devient

$$C_P^{k+1} - C_P^k = -u \frac{C_E - C_W}{2\Delta x} \cdot \Delta t + D \frac{C_E - 2C_P + C_W}{\Delta x^2} \cdot \Delta t - v \frac{C_N - C_S}{2\Delta y} \cdot \Delta t$$
$$+ D \frac{C_N - 2C_P + C_S}{\Delta y^2} \cdot \Delta t + r_P \cdot \Delta t$$

et en réarrangeant, elle se présente comme suit

$$C_P^{k+1} + C_P^k = \left(\frac{-u\Delta t}{2\Delta x} + \frac{D\Delta t}{\Delta x^2} \right) \cdot C_E + \left(\frac{u\Delta t}{2\Delta x} + \frac{D\Delta t}{\Delta x^2} \right) C_W + \left(\frac{-2D\Delta t}{\Delta x^2} + \frac{-2D\Delta t}{\Delta y^2} \right) C_P$$
$$+ \left(\frac{-v\Delta t}{2\Delta y} + \frac{D\Delta t}{\Delta y^2} \right) C_N + \left(\frac{v\Delta t}{2\Delta y} + \frac{D\Delta t}{\Delta y^2} \right) C_S + r_P \cdot \Delta t$$

ou encore

$$C_P^{k+1} = \left(\frac{-u\Delta t}{2\Delta x} + \frac{D\Delta t}{\Delta x^2}\right) \cdot C_E + \left(\frac{u\Delta t}{2\Delta x} + \frac{D\Delta t}{\Delta x^2}\right) C_W + \left(1 + \frac{-2D\Delta t}{\Delta x^2} + \frac{-2D\Delta t}{\Delta y^2}\right) C_P + \left(\frac{-v\Delta t}{2\Delta y} + \frac{D\Delta t}{\Delta y^2}\right) C_N + \left(\frac{v\Delta t}{2\Delta y} + \frac{D\Delta t}{\Delta y^2}\right) C_S + r_P \cdot \Delta t \tag{3.20}$$

qui est finalement l'équation discrète de l'advection-diffusion en $2D$. Elle peut prendre la forme simplifiée ci-dessous en identifiant les coefficients de C_E, C_W, C_P, C_P, C_S dans les deux équations.

$$C_P^{k+1} = a_E \cdot C_E + a_W \cdot C_W + a_P \cdot C_P + a_N \cdot C_N + a_S \cdot C_S + r_P \cdot \Delta t \tag{3.21}$$

3.1.9 Discrétisation de l'équation d'advection pure

Dans le chapitre précédent, nous avons vu qu'en advection pure, le processus de diffusion n'intervient pas. Donc il suffit d'enlever le terme de diffusion du flux total pour obtenir le flux d'advection pure, et en suivant la même procédure que précédemment, on obtient l'équation d'advection pure discrétisée ci-dessous :

$$C_P^{k+1} = \frac{-u\Delta t}{2\Delta x} \cdot C_E + \frac{u\Delta t}{2\Delta x} \cdot C_W + 1 \cdot C_P + \frac{-v\Delta t}{2\Delta y} \cdot C_N + \frac{v\Delta t}{2\Delta y} \cdot C_S + r_P \cdot \Delta t \tag{3.22}$$

ou encore sous forme simplifiée ci-dessous, en identifiant les coefficients de C_E, C_W, C_P, C_P, C_S dans les deux équations.

$$C_P^{k+1} = a_E \cdot C_E + a_W \cdot C_W + a_P \cdot C_P + a_N \cdot C_N + a_S \cdot C_S + r_P \cdot \Delta t \tag{3.23}$$

3.1.10 Discrétisation de l'équation de diffusion pure

De même, on a vu qu'en diffusion pure, il n'y a pas de processus d'advection, donc il suffit à son tours d'enlever du flux total le terme d'advection pour obtenir le flux de diffusion pure, et en suivant la même procédure que précédemment, on obtient l'équation de diffusion pure discrétisée ci-dessous

$$C_P^{k+1} = \frac{D\Delta t}{2\Delta x^2} \cdot C_E + \frac{D\Delta t}{\Delta x^2} \cdot C_W + \left(1 + \frac{-2D\Delta t}{\Delta x^2} + \frac{-2D\Delta t}{\Delta x^2}\right) \cdot C_P + \frac{D\Delta t}{\Delta y^2} \cdot C_N + \frac{D\Delta t}{\Delta y^2} \cdot C_S + r_P \cdot \Delta t \tag{3.24}$$

ou encore sous une forme simplifiée ci-dessous, en identifiant les coefficients de C_E, C_W, C_P, C_P, C_S dans les deux équations.

$$C_P^{k+1} = a_E \cdot C_E + a_W \cdot C_W + a_P \cdot C_P + a_N \cdot C_N + a_S \cdot C_S + r_P \cdot \Delta t \tag{3.25}$$

3.1.11 Conditions aux limites

La notion de conditions aux limites se perçoit ici comme les conditions sur une frontière délimitant la zone d'observation et non comme celles d'une frontière physique entrainant un changement brutal du milieu. Numériquement, nous allons considérer un domaine discret, fermé, sur lequel nous effectuons les calculs de concentration. Ce domaine sera délimité par une frontière virtuelle discrète $\partial\Omega$, d'épaisseur une maille autour de Ω. L'ensemble constitue donc un domaine $\partial\Omega + \Omega$ fermé, de taille $(L_x + 2)\,(L_y + 2)$ mailles.
Pour $i = 1$, $j = 1$, $j = L_y + 1$ et $i = L_x + 1$, le schéma numérique fait intervenir les conditions aux limites.

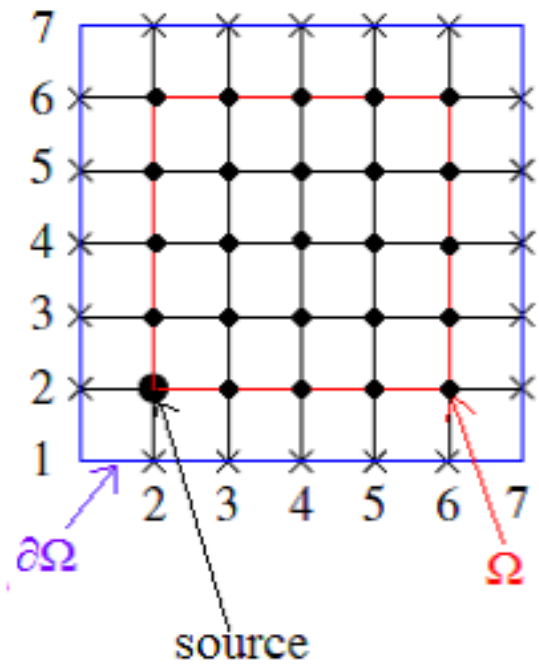


FIGURE 3.3 – Mise en évidence des conditions aux limites.

Aucune information sur la concentration du contour $\partial\Omega$, nous fixerons toutes les concentrations à la valeur 0. Les calculs s'effectueront alors réellement sur le domaine $\partial\Omega$ de taille $(L_x \cdot L_y)$ mailles. Toutes les concentrations aux points situés sur le bord de Ω seront calculées avec une équation "tronquée" (pour le point $(2;2)$ de la figure 3.3) de la forme

$$C_{2,2}^{k+1} = a_E \cdot C_{3,2} + a_P \cdot C_{2,2} + a_N \cdot C_{2,3} + r_P \cdot \Delta t \tag{3.26}$$

Ceci revient en fait à considérer comme nulles toutes les concentrations extérieures ($C_{1,2}^{k} = 0$ et $C_{2,2}^{k+1} = 0$) dans l'équation

$$C_{2,2}^{k+1} = a_E \cdot C_{3,2} + a_W \cdot C_{1,2} + a_P \cdot C_{2,2} + a_S \cdot C_{2,1} + a_N \cdot C_{2,3} + r_P \cdot \Delta t. \tag{3.27}$$

Le problème est donc bien posé puisqu'il est possible de déterminer $C_{i,j}^{k+1}$, même si le point (i,j) appartient à la frontière fermée.

3.2 Hypotèse de l'écoulement et organigrammes de résolution

3.2.1 Hypothèse de l'écoulement

On se place ici sous les quatre conditions suivantes :

— Écoulement à deux dimensions plan,
— Vitesse constante suivant les deux directions,
— Écoulement permanant,
— Coefficient de diffusivité constant.

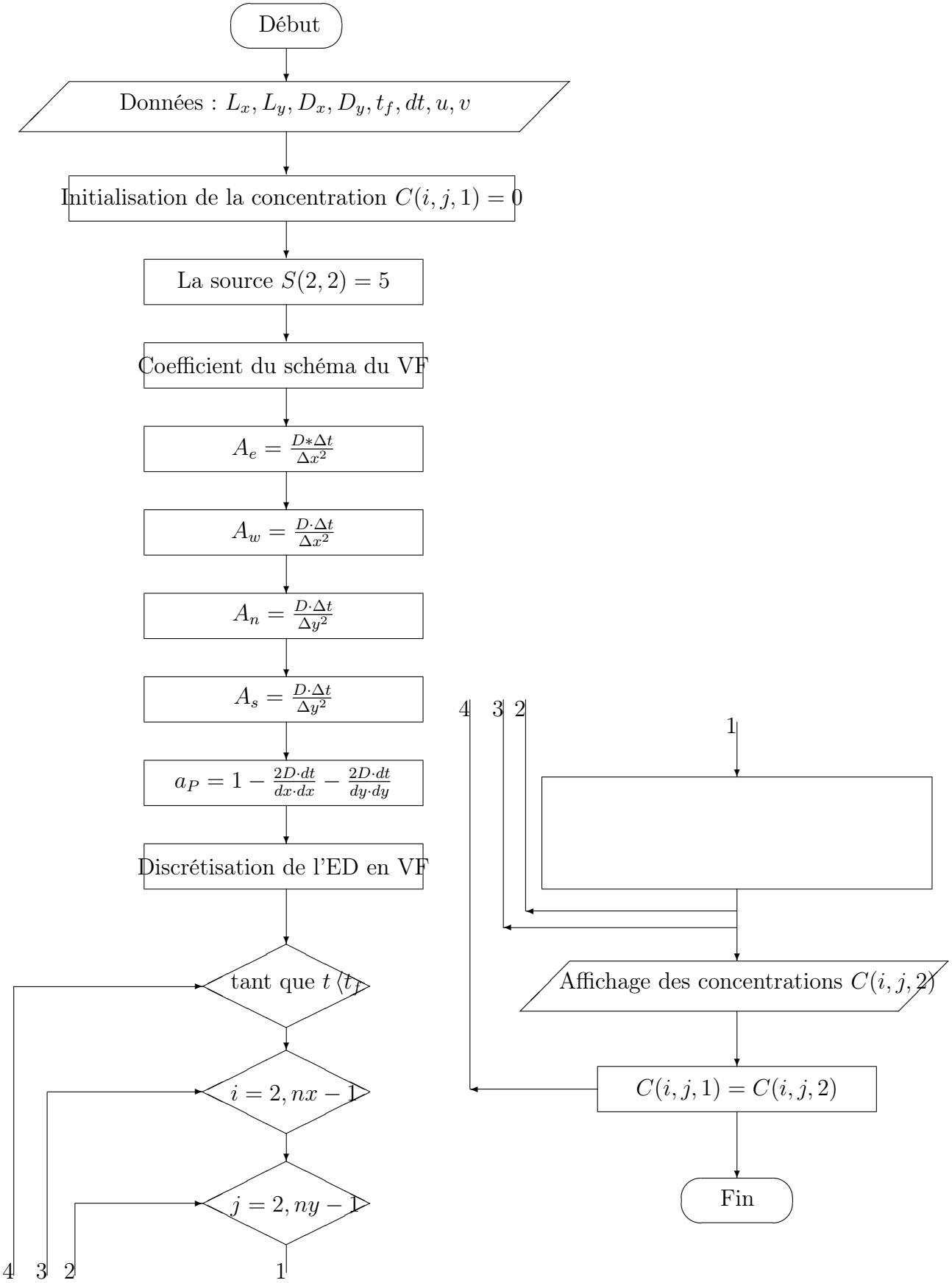
3.2.2 Organigrammes

Dans cette sous-section, nous avons conçu trois organigrammes de résolution. Non seulement pour une méilleure présentation mais également en terme de petit espace mémoire occupé pour le nombre d'octets, nous avons directement programmé toutes les images desdits organigrammes sous l'environnement LaTeX. Ces trois organigrammes portent respectivement sur la diffusion pure, l'advection pure et l'advection-diffusion.

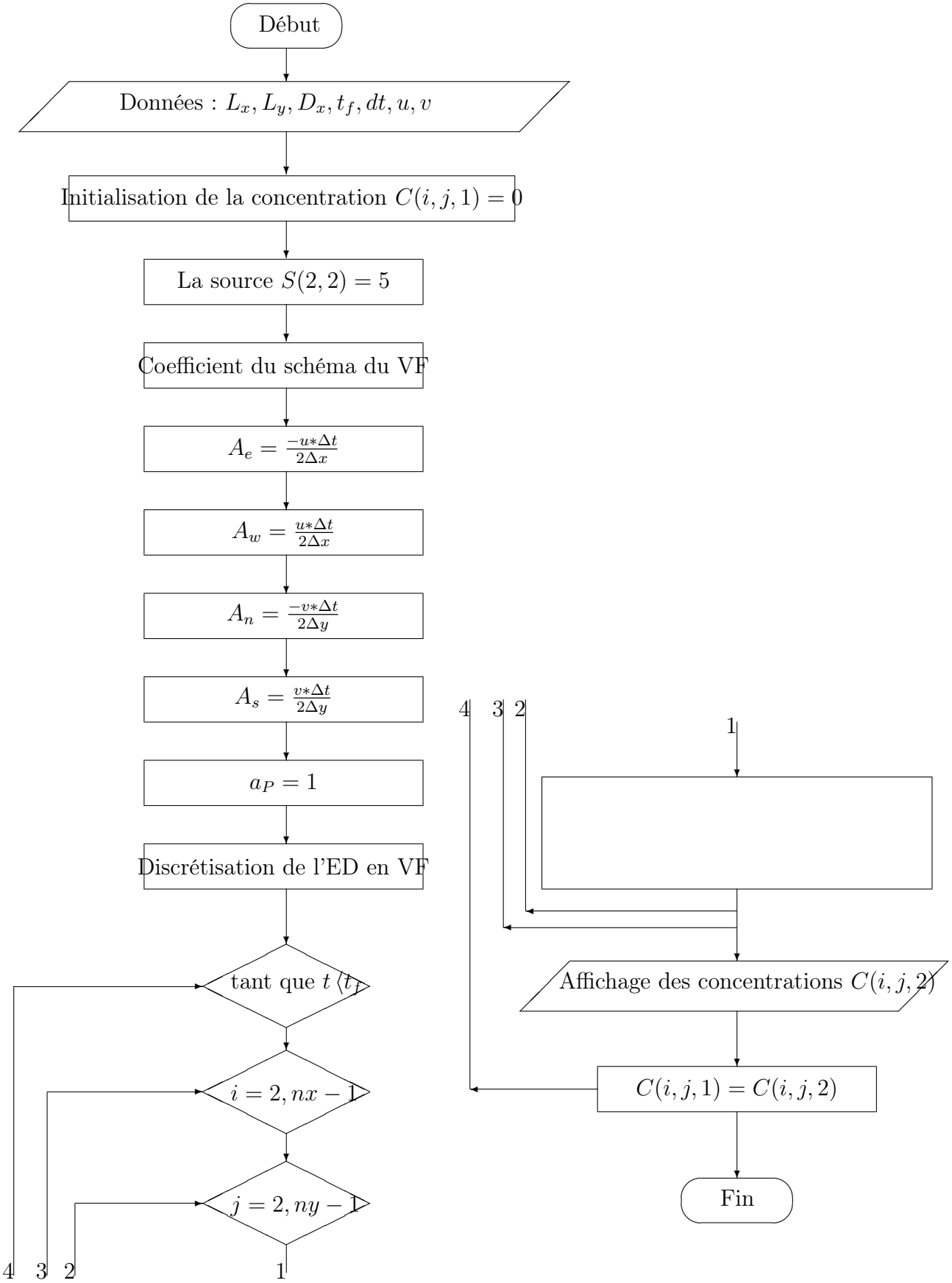
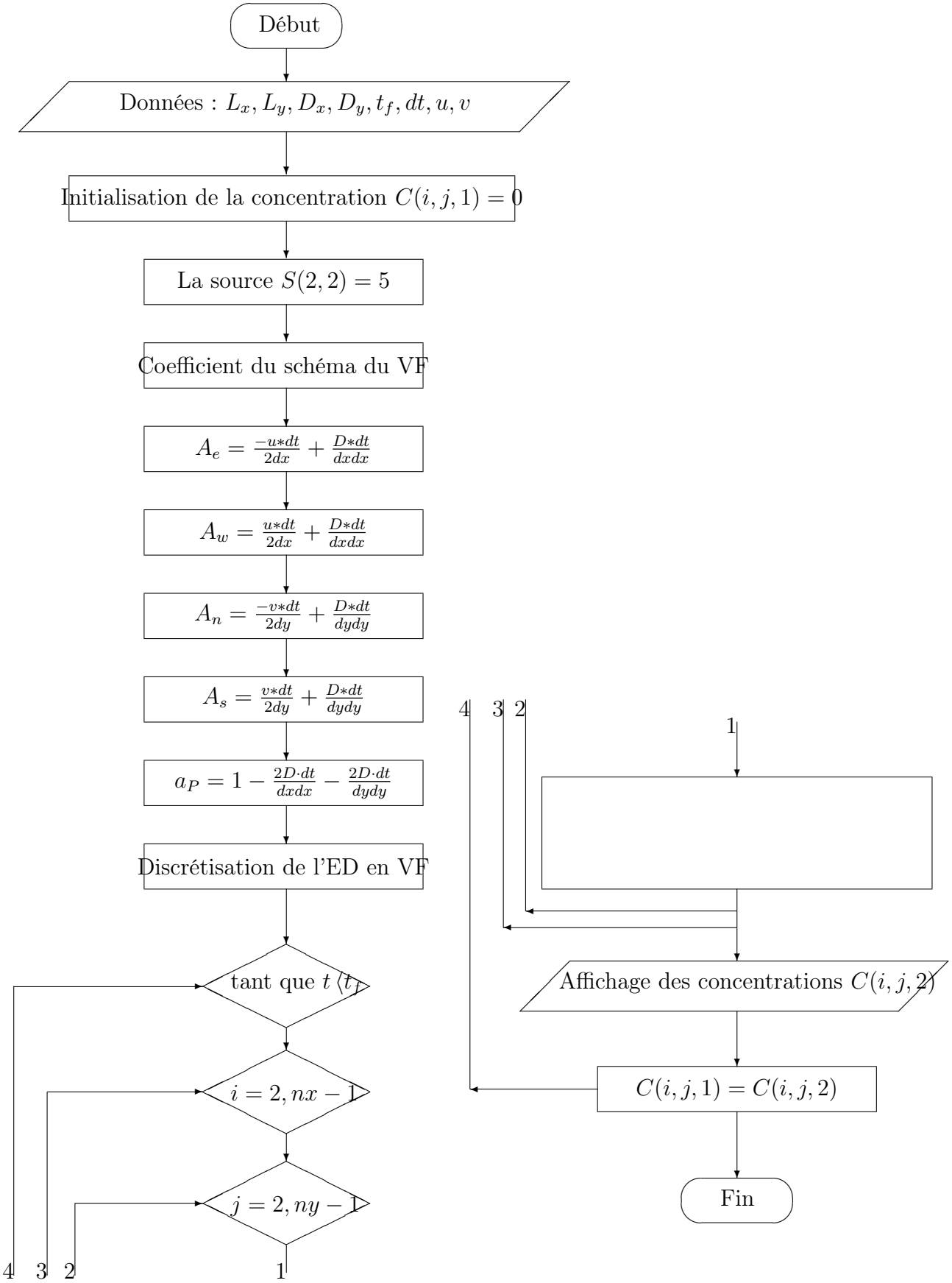
La formule ci-dessous est le contenu des trois cases vides des trois organigrammes qui suivent. Nous l'avons mis, isolée ici car elle est un peu longue et nécessite assez de place.

$$\begin{gathered}\text{C(i,j,2)=a}_e * C(i+1,j,1) + a_p * C(i,j,1) \\ +\text{a}_w * C(i-1,j,1) + a_n * C(i,j+1,1) \\ +\text{a}_s * C(i,j-1,1) + dt * S(i,j)\end{gathered}$$

Organigramme pour la diffusion pure



Organigramme pour l'advection pure



Organigramme pour l'advection-diffusion