# Modélisation et simulation des écoulements de fluides dans la géosphère

M. Kern, E. Mouche

9 janvier 2023

Le but du TP est d'étudier diverses méthodes numériques pour des équations de diffusion, d'advection et d'advection – diffusion. 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 $L = 1$), et 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 $K_i = [x_{i-1/2}, x_{i+1/2}]$ 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 $h = x_{i+1/2} - x_{i-1/2}$.

Des scripts en Matlab à compléter sont disponibles sur la page `https://who.rocq.inria.fr/Michel.Kern/Pages/Enseignements.html`

## Exercice 1 : Équation de diffusion stationnaire

On considère l'équation de diffusion stationnaire

$$-\frac{d}{dx}\left(D\frac{du}{dx}\right) = q(x) \quad x \in [0, L], \tag{1}$$

avec les conditions aux limites qui peuvent être

— soit de type Dirichlet $u(0) = u_G$, ou $u(L) = u_D$ ;

— soit de type Neumann $-D\dfrac{\partial u}{\partial x}(0) = g_G$, ou $D\dfrac{\partial u}{\partial x}(L) = g_D$.

**1** Programmer le schéma volume finis pour résoudre cette équation. Faire l'hypothèse que $D$ est constant sur chaque volume de contrôle, et prendre en compte les conditions aux limites (sur chaque bord, on pourra avoir soit Dirichlet, soit Neumann).

Compléter les scripts `getmat1d.m` et `getrhs1d.m`.

Le script `Darcy1D_homogene1.m` compare la solution calculée avec une solution donnée $u(x) = \exp(x)x(1-x) + x + 1$. Calculer le second membre correspondant, et les conditions aux limites. Vérifier le taux de convergence obtenu numériquement.

Le script `Darcy1D_homogene2.m` permet de valider les différentes conditions aux limites possibles. Que se passe-t-il dans le cas où on a deux conditions de Neumann ?

Mêmes questions avec le script `Darcy1D_heterogene1.m`, On comparera les solutions obtenues, et le taux de convergence selon que le calcul de transmissivité utilise une moyenne arithmétique ou une moyenne harmonique.

**2** Dans le cas où la conductivité est variable, il est intéressant de calculer la conductivité équivalent (où apparente) telle que

$$J_0 = -K_{\text{app}} \frac{u_L - u_0}{L},$$

où $J_0 = -Du'(x)$ désigne le flux (constant dans le cas 1D, sans source).

Le script `Darcy_heterogene2` permet de comparer la perméabilité apparent obtenue numériquement (pour les 2 choix de moyennes) avec celle que l'on peut calculer analytiquement, sur quelques cas simples.

- Dans le cas où la conductivité $D$ vaut $D_1$ sur l'intervalle $[0, L_1]$, et $D_2$ sur l'intervalle $[L_1, L]$, la solution exacte est donnée, et c'est une fonction régulière par morceaux ;
- On considère également le cas de trois couches ;
- Et enfin le cas d'une conductivité exponentielle

  $$D(x) = d \exp(-x/\lambda).$$

  Calculer la conductivité apparente pour ce cas.

  On pourra faire varier les différents paramètres (maillage, conductivité, ...)

## Exercice 2 : Équation de diffusion transitoire

On considère maintenant l'équation de diffusion transitoire

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x}\left(K \frac{\partial u}{\partial x}\right) = q(x,t) \quad x \in [0, L],\ t \in [0, T_f]. \tag{1}$$

avec les conditions aux limites qui peuvent être

- soit de type Dirichlet $u(0,t) = u_G(t)$, ou $u(L,t) = u_D(t)$ ;
- soit de type Neumann $-K\dfrac{\partial u}{\partial x}(0,t) = g_G(t)$, ou $K\dfrac{\partial u}{\partial x}(L,t) = g_D(t)$,

et la condition initiale $u(x,0) = u_0(x)$.

En utilisant les résultats de l'exercice précédent (la fonction `getmatrhs1D` du fichier `darcy_1D.py`, écrire le schéma de volumes finis dans le cas où $K$ est variable, constant sur chaque volume de contrôle. Pour la discrétisation en temps, on utilisera le $\theta$-schéma.

en traitant séparément le cas $\theta = 0$ (explicite) et le cas général (implicite).

**Mise en oeuvre et validation** Compléter les fonctions `time_loop` et `do_step` dans le fichier `heat_1D.py`.

Valider avec le premier exemple du notebook. La solution exacte $u(x,t) = \exp(-\pi^2 t/4)\sin(\pi/2x) + \frac{1}{2}\exp(-4\pi^2 t)\sin(2\pi x)$. Faire varier les paramètres de discrétisation : $n$, le nombres de cellules en espace, $F$ le nombre de Fourier et $\theta$.

Constater ensuite que le schéma explicite est instable si $F > 1/2$.

**Convergence des schémas** On va ensuite vérifier la convergence des schémas, en comparant Euler implicite et explivite, puis Euler implicite et Crank-Nicolson. La solution exacte est $u_{\text{ex}}(x,t) = \exp(-\pi^2 t)\sin(\pi x)$.

On compare d'abord les deux premiers schémas pour un nombre de Fourier de 0.5, puis de 5, pour différentes résolutions spatiales. Dans un deuxième temps, on compare Euler implicite et Crank-Nicolson, pour un nombre de Fourier égal à 5, puis en prenant $\Delta t = \Delta x$ (avec $D = 1$).

Commenter les résultats obtenus

L'exemple suivant *Les surprises de Crank-Nicolson* illustre des difficultés que l'on peut rencontrer avec Crank-Nicolson pour des conditions initiales discontinues. Comparer le comportement avec $\theta = 0.5$ et $\theta = 0.54$ (par exemple).

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 livre[1] pour plus de détails).

**Applications physiques**

**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

$$u_{\text{ex}} = 2F0\left[\sqrt{t/(D\pi)}\exp(-x^2/(4Dt)) - x/(2D)\text{erfc}\left(x/(2\sqrt{Dt})\right)\right].$$

Compléter la cellule correspondante en définissant les conditions aux linites . Expliquer vos observation

**Forçage périodique** Cet exemple simuler 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 $u(x,0) = T_0$.

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

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

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

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.
Compléter la cellule *Forçage périodique*. 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 la diffusivité capillaire

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 :

$$C(h)\frac{\partial h}{\partial t} - \overrightarrow{\nabla}.\left(K(h)\overrightarrow{\nabla}(h+z)\right) = 0 \tag{1}$$

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 $\theta$ comme variable du problème.

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} - \overrightarrow{\nabla}.\left(D(\theta)\overrightarrow{\nabla}\theta\right) = 0 \tag{2}$$

où $D(\theta)$ est la diffusivité capillaire. On rappelle $0 \leq \theta \leq \omega$ où $\omega$ est la porosité. On considère donc une colonne de longueur $L = 1$ et de teneur en eau initiale $\theta_i$. On applique une teneur en eau en $x = 0$ égale à la porosité $\omega$ (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 intiale, $\theta = \theta_i$.
3. Même conditions que en 2) (cas $\theta_i = 0.2$) mais flux nul en $x = L$, $D(\theta)\partial\theta/\partial x = 0$.

Pour décrite l'algorithme de résolution, on notera $u$ l'inconnue. On utilsera une méthode de Picard (point fixe), qui revient à résoudre à chaque pas de temps la suite de problèmes linéaires suivants, où on prendra $u^{n+1,0} = u^n$ :

$$\frac{u^{n+1,k+1} - u^n}{\Delta t} + A^k\left(\theta u^{n+1,k+1} + (1-\theta)u^n\right) = f^n$$

où $A^k$ est la matrice obtenue en discrétisant le problème correspondant à $D = D(u^{n+1,k})$, et (si l'ítération converge après $K$ itérations), on prend $u^{n+1} = u^{n+1,K+1}$

# Exercice 4 : Équation d'advection

On étudie ici l'équation d'advection ($a > 0$)

$$\frac{\partial u}{\partial t} + a\frac{\partial u}{\partial x} = 0, \quad 0 < x < L, \quad 0 < t < T,$$

avec la condition initiale $u(x,0) = u_0(x)$.

Programmer les schémas centré (instable !), décentré amont, le schéma de Lax–Wendroff, et le schéma de Lax–Friedrichs.

Comparer les schémas avec la condition initiale

$$u_0(x) = \exp(-\beta(x-0.3)^2) + \mathbf{1}_{[0.6,0.8]}(x)$$

($\mathbf{1}$ désigne la fonction caractéristique de l'intervalle en question). On prendra $a = 1, \beta \in \{1, 10, 100\}$, et la CFL égale à 0.8.

# Exercice 5 : Équation d'advection–diffusion

On considère l'équation d'advection–diffusion (posée sur une demi-droite)

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} - D\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + a\frac{\partial u}{\partial x} = 0, \quad 0 < x, \quad 0 < t < T, \\ u(x,0) = u_0(x) \\ u(0,t) = u_g(t), \end{aligned} \tag{1}$$

dont la solution avec $u_0(x) = 0$, et $u_g(t) = 1$ est

$$u(x,t) = \frac{1}{2}\left[\operatorname{erfc}\left(\frac{x-at}{2\sqrt{Dt}}\right) + \exp\left(\frac{ax}{D}\right)\operatorname{erfc}\left(\frac{x+at}{2\sqrt{Dt}}\right)\right] \tag{2}$$

En utilisant les codes développés dans les exercices précédents, écrire un programme pour résoudre cette équation. Naturellement, on devra se ramener à un domaine borné $]0, L[$. Les variantes à envisager sont

— schéma explicite vs schéma tout implicite, ou implicite en diffusion, explicite en advection ;

— schéma centré ou décentré pour l'advection.

Comparer ces schémas du point de vue de la stabilité et de la précision.

Étudier la différence entre les conditions aux limites en $x = L$ de Dirichlet ($u(L,t) = 0$, et de flux (diffusif) nul ($\frac{\partial u}{\partial x}(L,t) = 0$).

# Exercice 6 : Lois de conservations scalaires

On considère un problème hyperbolique

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(f(u)) = 0, \quad 0 < x < L, \quad 0 < t < T.$$

**1** Dans le cas de l'équation de Burgers, $f(u) = 1/2u^2$, programmer le schéma non-conservatif :

$$u_j^{n+1} = u_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} u_j^n \left(u_j^n - u_{j-1}^n\right),$$

pour résoudre le problème de Riemann en $x = 0$ avec $u_l = 1.2$, $u_r = 0.4$. Commenter la solution obtenue.

Pour la suite, on considère des schémas conservatifs, c'est-à-dire de la forme

$$u_j^{n+1} = u_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(F_{j+12}^n - F_{j-1/2}^n\right),$$

avec $F_{j+1/2} = F(u_j^n, u_{j+1}^n)$. $F$ est le flux numérique.

**2** Toujours pour l'équation de Burgers, on résout le problème de Riemann en $x = 0$ avec $u_l = -1$, $u_r = 2$.

Programmer les schéma suivants :

**Décentré**

$$F_{j+1/2}^n = \begin{cases} f(u_j^n) & \text{si } (f(u_j^n) - f(u_{j+1}^n))/(u_j^n - u_{j+1}^n) \geq 0 \\ f(u_{j+1}^n) & \text{si } (f(u_j^n) - f(u_{j+1}^n))/(u_j^n - u_{j+1}^n) < 0 \end{cases}$$

**Lax-Friedrichs**

$$F_{j+1/2}^n = \frac{1}{2}\left(f(u_j^n) + f(u_{j+1}^n) + \frac{\Delta t}{\Delta x}(u_j^n - u_{j+1}^n)\right);$$

**Godunov**

$$F_{j+1/2}^n = \begin{cases} \min_{u_j^n \leq u \leq u_{j+1}^n} f(u) & \text{si } u_j^n \leq u_{j+1}^n \\ \max_{u_{j+1}^n \leq u \leq u_j^n} f(u) & \text{si } u_{j+1}^n < u_j^n \end{cases}$$

Comparer les solutions obtenues. Pour les 2 derniers schémas, faire varier $\Delta x$ et la CFL.

**3** On considère maintenant l'équation de Buckley–Leverett, pour laquelle laquelle $u$ représente la saturation en eau (et doit être compris entre 0 et 1), et la fonction de flux est

$$f(u) = \frac{u^2}{u^2 + a(1-u)^2} \tag{1}$$

(on pourra prendre $a = 1/2$).

On résout le problème de Riemann en 0 avec $u_l = 1$, $u_r = 0$. Programmer le schéma de Godunov dans ce cas.

Comparer avec la solution exacte (méthode des caractéristiques, et calculer la position du choc en utilisant la condition de Rankine–Hugoniot).

Comparere les conditions CFL $\Delta t = 0.15\Delta x$ et $\Delta t = 0.8\Delta x$. Expliquer