

Université du Burundi

Dépôt institutionnel officiel

<https://repository.ub.edu.bi>

Grenier du Savoir du Burundi

Mémoires et Thèses

2023-02

Contamination de l'eau par diffusion et advection.

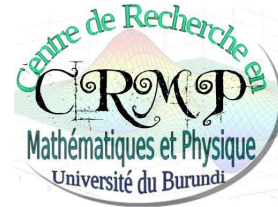
Muneza, Régis

UB, IPA

<https://repository.ub.edu.bi/handle/123456789/485>

Téléchargé depuis le dépôt institutionnel officiel de l'Université du Burundi

UNIVERSITE DU BURUNDI
FACULTE DES SCIENCES
DEPARTMENT DE MATHEMATIQUES
CENTRE DE RECHERCHE EN MATHEMATIQUES ET PHYSIQUE



Contamination de l'eau par diffusion et advection.

Par :

Régis MUNEZA

Mémoire présenté et défendu publiquement en vue de l'obtention du
Diplôme de Master en Mathématiques Fondamentales et Appliquées.

Sous la Direction de :

Dr Denis NKURUNZIZA

Bujumbura, Février 2023

Composition du jury

Président : Dr Rénovat NKUNZIMANA

Secrétaire : Dr Janvier Pesser NTAHOMVUKIYE

Directeur : Dr Denis NKURUNZIZA

Membre : Prof Servat NYANDWI

Dédicace

A mon regretté père ;

A ma mère ;

A mon frère et à ma soeur ;

A la famille Evariste KANANI ;

A tous ceux qui me sont chers ;

Je dédie ce mémoire.

Remerciements

Ce travail n'est pas seulement le fruit de mes seuls efforts raison pour laquelle je prends ce temps pour remercier toutes les personnes qui ont contribué à sa réalisation.

Mes sincères remerciements sont adressés à Dr Denis NKURUNZIZA, Professeur à la Faculté des Sciences et Chef du Département de Mathématiques à l'Université du Burundi, qui, malgré ses multiples obligations a accepté de diriger ce mémoire. Ses précieux conseils, sa disponibilité, sa rigueur scientifique, ses encouragements, ses suggestions et son accompagnement tout au long de ce travail m'ont été d'une grande utilité. Qu'il reçoive ici l'expression de ma profonde gratitude.

Je remercie également tous les membres du jury pour le temps qu'ils ont bien voulu consacrer à lire ce travail. Leurs précieux commentaires pour l'amélioration de ce travail me seront d'une importance capitale.

Mes sentiments de reconnaissance vont également à l'endroit de tous ceux qui ont contribué à ma formation depuis l'école primaire jusqu'à l'Université du Burundi et plus particulièrement aux Professeurs de la Faculté des Sciences surtout ceux du Département de Mathématiques. Qu'ils reçoivent ici ma profonde gratitude pour m'avoir doté d'une formation tant humaine que scientifique.

J' exprime vivement ma reconnaissance envers ma famille et plus particulièrement à ma mère, à mon frère, à ma soeur, à mes oncles et à mes tantes, à mes cousins et à mes cousines pour leur amour, leur patience, leur confiance, leur encouragement, leurs conseils ainsi que pour leur soutien inconditionnel depuis l'école primaire à nos jours. Voyez à travers ce travail le fruit de vos efforts.

Résumé

L'objectif de ce mémoire de Master est d'étudier la contamination de l'eau par un polluant suivant les phénomènes de transport d'advection et de diffusion. L'équation d'advection-diffusion que nous avons utilisée a été discrétisée avec la méthode des différences finies au moyen du développement en séries de Taylor afin de la résoudre numériquement. Les simulations numériques sont réalisées avec MATLAB.

Les résultats obtenus sont conformes et vérifient les informations de la bibliographie. Cependant, ce travail peut être encore amélioré en variant les paramètres et en tenant compte du terme source de l'équation.

Mots clés : Advection, Diffusion, Équation d'advection-diffusion, Différences finies.

Abstract

The aim of this Master thesis is to study the contamination of water by a pollutant following the phenomena of advection and diffusion transport. The advection-diffusion equation that we have used has been discretized with the finite difference method by means of Taylor series development in order to solve it numerically. The numerical simulations are realized with MATLAB.

The obtained results are in accordance and verify the information of the bibliography. However, this work can be improved further by varying the parameters and taking into account the source term of the equation.

Key words : Advection, Diffusion, Advection-diffusion equation, Finite Differences.

Table de matières

Composition du jury	i
Dédicace	ii
Remerciements	iii
Résumé	iv
Abstract	v
Tables de matières	vi
Liste des tableaux	ix
Liste des figures	x
Avant-propos	xii
Introduction générale	1
1 Introduction	2
1.1 Introduction	2
1.2 Enoncé du problème	2
1.3 Objectif général	3
1.4 Objectifs spécifiques	3
1.5 Importance du travail	3
1.6 L'impact de la non information sur la contamination des eaux	4
1.7 Quelques explications utiles	4
1.7.1 Installations classées	4
1.7.2 Les eaux usées	4
1.7.3 Un polluant	5
1.7.4 Un contaminant	5

1.7.5	Différence entre polluant et contaminant	5
1.8	Pollution de l'air	6
2	Revue de la littérature	7
2.1	Introduction	7
2.2	Notion de modèle	8
2.3	Analyse du modèle mathématique	8
2.4	Transport par diffusion et par advection	8
2.4.1	La diffusion :	9
2.4.2	L'advection :	10
2.4.3	Différence entre la diffusion et l'advection	10
2.5	Equation d'advection-diffusion	10
2.5.1	Concentration C d'une substance dans un fluide :	11
2.5.2	Flux	11
2.5.3	Flux d'advection	12
2.5.4	Equation d'advection pure	12
2.6	La diffusion (loi de Fick)	13
2.7	Equation de diffusion pure :	14
2.8	Equation d'advection- diffusion	16
3	Méthodologie	17
3.1	Résolution numérique des équations aux dérivées partielles	17
3.2	La méthode des différences finies	18
3.2.1	Définition d'un maillage	18
3.2.2	Schéma de discrétisation	19
3.2.3	Développement en série de Taylor	21
3.2.4	Discrétisation de l'équation d'advection-diffusion	24
3.2.5	Discrétisation des conditions aux limites	28
3.2.6	Formulation vectorielle	29
3.2.7	La méthode du point fantôme ou virtuel	32
3.2.8	Notion de consistance d'un schéma numérique	33
3.2.9	Théorème d'équivalence de Lax :	34
3.2.10	Stabilité	34
3.2.11	Convergence	35
4	Résultats numériques et discussions	36
4.1	Tableaux montrant les données utilisées dans les simulations :	37
4.2	Simulations numériques	38

Conclusion générale et Perspectives	42
Bibliographie	43

Liste des tableaux

4.1	Tableau 1	37
4.2	Tableau 2	37
4.3	Tableau 3	37
4.4	Tableau 4	37

Liste des figures

1.1	Pollution de l'eau[21]	3
2.1	Exemple de transport advectif et de transport diffusif[13]	9
2.2	Schéma d'un flux [21]	11
2.3	Schéma expliquant le flux de diffusion	14
3.1	Schéma du maillage régulier	19
3.2	Schéma du maillage irrégulier	19
3.3	Schéma du maillage	20
3.4	Schéma du maillage et pas de discrétisation	20
3.5	Convergence, stabilité et consistance[11]	34
3.6	Comparaison stabilité et instabilité	34
4.1	Courbes montrant l'évolution de la concentration C au temps de 320, 400, 800 et 1600 jours sur une distance égale à 100, le coefficient de diffusion $D = 10^{-6}m^2/s$ et le coefficient d'advection $v = 10^{-7}m/s$	38
4.2	Courbes montrant l'évolution de la concentration C au temps de 800, 1000, 2000 et 4000 jours sur une distance égale à 100, le coefficient de diffusion $D = 10^{-6}m^2/s$ et le coefficient d'advection $v = 10^{-7}m/s$	38
4.3	Courbes montrant l'évolution de la concentration C au temps de 320, 400, 800 et 1600 jours sur une distance égale à 300, le coefficient de diffusion $D = 10^{-6}m^2/s$ et le coefficient d'advection $v = 10^{-7}m/s$	39
4.4	Courbes montrant l'évolution de la concentration C au temps de 2800, 3500, 7000, 14000 jours sur une distance égale à 300, le coefficient de diffusion $D = 10^{-6}m^2/s$ et le coefficient d'advection $v = 10^{-7}m/s$	39
4.5	Courbes montrant l'évolution de la concentration C au temps de 0.2, 0.25, 0.5 et 1 jours sur une distance égale à 100, le coefficient de diffusion $D = 10^{-4}m^2/s$ et le coefficient d'advection $v = 10^{-7}m/s$	40
4.6	Courbes montrant l'évolution de la concentration C au temps de 2, 2.5, 5 et 10 jours sur une distance égale à 100, le coefficient de diffusion $D = 10^{-4}m^2/s$ et le coefficient d'advection $v = 10^{-7}m/s$	40
4.7	Courbes montrant l'évolution de la concentration C au temps de 28, 35, 70 et 140 jours sur une distance égale à 100, le coefficient de diffusion $D = 10^{-6}m^2/s$ et le coefficient d'advection $v = 10^{-6}m/s$	41

4.8	Courbes montrant l'évolution de la concentration C au temps de 144, 180, 360 et 720 jours sur une distance égale à 100, le coefficient de diffusion $D = 10^{-6}m^2/s$ et le coefficient d'advection $v = 10^{-6}m/s$	41
-----	---	----

Avant-propos

A la fin du deuxième cycle des études universitaires, l'Université du Burundi organise des travaux de recherche pour les étudiants dudit cycle. Le présent mémoire autorise les étudiants de Master en Mathématiques fondamentales et appliquées d'obtenir un diplôme de master en ce domaine. Ce travail de fin de cycle détermine la concentration d'un contaminant à un point et à un moment donnés. Ce phénomène est régi par l'équation d'advection-diffusion qui est l'une des équations aux dérivées partielles dont il est difficile à résoudre analytiquement d'où le recours aux méthodes numériques. Les résultats de cette recherche vont servir d'outil pour les chercheurs et les utilisateurs des eaux des rivières et des lacs. Ils pourront aussi aider les décideurs dans la prise des décisions sur la réglementation des installations classées et dans la prise des sanctions en cas de non respect des exigences prévues par les textes applicables en la matière et dans la remise en état des sites après cessation des activités. Ils pourront aider les gens qui exploitent les eaux du lac tel que la Regideso, les industriels qui jettent les déchets et les restes dans les lacs et dans les rivières, aider dans la protection de la biodiversité des cours d'eau.

Introduction générale

L'objet de ce travail est de traiter le problème de la contamination de l'eau par les processus d'advection et de diffusion. L'équation d'advection-diffusion est l'une des équations différentielles qui décrit les phénomènes régis par ces deux processus de transport dont il est question dans notre travail, elle a déjà été utilisée par plusieurs chercheurs[31], [18], [26], [29], [37], [15], [32],... Les deux termes, advection et diffusion étant différents, chacun a une influence sur la contamination du polluant comme nous le montrons dans ce travail. Ces phénomènes sont souvent régis par un grand nombre de paramètres non linéaires qui interagissent entre eux[21]. La plupart des fois, les équations décrivant ces phénomènes n'ont pas de solutions analytiques et on fait recours à la recherche de leurs solutions numériques[11]. Pour ce faire, il existe trois principales méthodes de résolutions numériques de ces équations[28] : la méthode des volumes finis, la méthode des éléments finis et la méthode des différences finies dont nous avons utilisé dans ce travail.

Dans le premier chapitre, nous définissons les différents concepts et donnons les objectifs et les différentes orientations de notre travail.

Dans le deuxième chapitre, nous revenons sur les théories existantes et montrons comment est générée l'équation de diffusion, l'équation d'advection et l'équation d'advection-diffusion obtenue à partir de ces deux dernières.

Le troisième chapitre parle des différentes méthodes utilisées dans la résolution numérique et développe beaucoup plus la méthode des différences finies en utilisant le développement en séries de Taylor. Nous faisons la discrétisation de cette équation d'advection-diffusion dans ce même chapitre. La simulation numérique et la discussion des résultats font l'objet du quatrième chapitre. Nous utilisons le langage de programmation MATLAB dans la simulation numérique.

Nous terminons notre travail par une conclusion et quelques perspectives.

Chapitre 1

Introduction

Dans ce chapitre, nous donnons les orientations de ce travail. Une brève introduction à la notion d'advection-diffusion qui est le principal point abordé dans ce travail sera donnée. Le problème traité dans ce travail est aussi dans ce chapitre. La pertinence de la réalisation de ce travail sera aussi donnée.

1.1 Introduction

Les phénomènes de transport de masse sont faciles à observer dans notre quotidien : le mouvement du vent, la propagation d'un polluant dans l'océan, dans l'air et la lente dispersion d'une odeur d'un parfum sont des exemples de déplacement de masse d'un endroit à un autre que nous pouvons citer à titre d'exemples[21]. Ces phénomènes de transport de masse provoquent souvent une contamination du milieu environnant et ont un effet nocif[21]. Ils sont souvent complexes et nécessitent des modèles mathématiques pour qu'on puisse les décrire et sont souvent régis par des équations différentielles qui sont indispensables dans la compréhension des phénomènes de contamination[28]. L'équation d'advection-diffusion est l'une des équations aux dérivées partielles importantes observées dans beaucoup d'applications d'ingénierie et industrielles[31].

1.2 Enoncé du problème

Tout apport de substances indésirables dans l'eau souterraine, causé par les activités humaines et d'autres phénomènes est considéré comme une contamination des eaux[33].

La contamination des eaux souterraines survient lorsque des substances anthropiques, à savoir fabriquées par l'être humain, se dissolvent dans l'eau qui alimente les aquifères ou se mélangent à celle-ci[11]. Les activités industrielles et agricoles sont les principales sources de contamination. Une fois mêlés aux eaux souterraines, ces contaminants aboutissent dans les cours d'eau et dans les lacs.

La contamination de l'eau de surface et de l'eau souterraine est due à la présence des substances nocifs dans l'eau qui proviennent des activités humaines en grande partie comme on l'observe sur la figure 1.1. Quoique moins nombreux, il y a des phénomènes naturelles qui peuvent aussi polluer l'eau. Ces polluants sont considérés comme des contaminants

quand ils ont un effet nocif[4]. Une contamination microbiologique correspond à la présence de bactéries, de parasites ou de virus pathogènes dans l'eau, c'est à dire capable de provoquer des maladies. Ces contaminants sont essentiellement d'origine fécale et leur présence dans l'eau est principalement liée au rejet d'eaux usées insuffisamment épurées dans le milieu.



FIGURE 1.1 – Pollution de l'eau[21]

Ces eaux font que beaucoup d'espèces qui vivent dans l'eau et qui ont besoin d'eau potable meurent ou disparaissent.

1.3 Objectif général

L'objectif général de ce travail est de formuler un modèle mathématique qui détermine la concentration d'un polluant au point et au moment donnés.

1.4 Objectifs spécifiques

Les objectifs spécifiques de ce travail sont :

- montrer comment est générée l'équation d'advection-diffusion ;
- résoudre numériquement l'équation d'advection-diffusion ;
- valider les résultats de la bibliographie par comparaison à ceux des simulations numériques.

1.5 Importance du travail

Ce travail servira d'outil pour les chercheurs et les utilisateurs des eaux des rivières et des lacs. Il pourra aussi aider les décideurs dans la prise des décisions sur la réglementation des installations classées et dans la prise des sanctions en cas de non respect des exigences prévues par les textes applicables en la matière et dans la remise en état des sites après cessation des activités. Il pourra aider les gens qui exploitent les eaux du lac tel que

la REGIDESO, les industriels qui jettent les déchets et les restes dans les lacs et dans les rivières, aider dans la protection de la biodiversité des cours d'eau. La prédiction du transport de ces polluants est cruciale pour la gestion efficace de ces polluants. La population saura l'importance de ne pas jeter dans n'importe quel endroit, les déchets, les eaux usées, etc.

1.6 L'impact de la non information sur la contamination des eaux

Si la population n'est pas informée afin de prendre des mesures adéquates sur le transfert des polluants, il y aura beaucoup de conséquences dans différents domaines[33] :

- le social : Quand la population consomme une eau polluée, cela a des conséquences sur leur santé. Dans les pays pauvres, l'accès à une eau de bonne qualité est très difficile car les installations pour assainir l'eau coûtent chères.
- l'environnement : cela touche la biodiversité et fait disparaître des espèces.
- l'économie : L'eau potable disparaît, le prix de l'eau va augmenter.

La contamination du milieu va s'accroître et il y aura la présence des poissons morts, la présence des boutons sur le corps après une baignade, les maladies après avoir consommé de l'eau. Il y aura l'altération de la santé humaine, des conséquences sur la faune et la flore vont se manifester, il y aura la disparition de certaines espèces, la limitation des usagers (consommation, baignade, navigation, pêche,...[24]. Les conséquences sur les milieux aquatiques sont multiples. Elle conduit à des mortalités massives d'espèces, mais elle a aussi des effets moins visibles : une eutrophication des milieux ; des effets moins toxiques à plus ou moins long terme, des maladies ou des perturbations endocriniennes[21].

1.7 Quelques explications utiles

1.7.1 Installations classées

Par installations classées, il faut entendre les usines ou manufactures, ateliers, dépôts, chantiers et d'une manière générale, les installations de toute nature, exploitées ou détenues par toute personne physique ou morale, publique ou privée qui présentent ou peuvent présenter des dangers ou des désagréments importants pour la santé, la sécurité, la salubrité publique, l'agriculture, la pêche et la préservation de l'environnement[24][4].

1.7.2 Les eaux usées

Les eaux usées sont toutes les eaux à évacuer des zones bâties. Il s'agit des eaux provenant des ménages, de l'artisanat et de l'industrie. Dans un sens plus restreint, les eaux usées sont celles qui en raison de leur nature, de leur qualité ou de leur provenance, doivent être déversées ou rejetées dans un cours d'eau, dans le lac ou dans la mer[24]. En d'autres termes, il s'agit des eaux qui, compte tenu du danger de la pollution qu'elles représentent, ne peuvent être directement rejetées dans la nature sans conséquences nocives. La grande quantité des eaux sont collectées et rejetées directement dans les rivières sans moindre traitement et aboutissent ainsi au lac avec toute leur charge toxique et polluante[11].

1.7.3 Un polluant

Le polluant est une substance qui pollue ; il provoque des effets néfastes sur l'environnement. Les polluants font référence aux substances qui polluent l'environnement. Lorsqu'une certaine substance est considérée comme nocive dans un aspect donné, elle est considérée comme un polluant. Même s'il s'agit d'une substance qui y est normalement présente, le terme de pollution est utilisé lorsqu'il dépasse des limites inoffensives[3]. Les polluants peuvent être classés en fonction des sources dont ils sont dérivés[4]. Les polluants du sol, les polluants de l'eau et les polluants atmosphériques font partie de ces catégories.

1.7.4 Un contaminant

Le contaminant est une substance qui existe dans un endroit où il ne devrait pas être. Un contaminant n'est pas nécessairement nocif ou nuisible. La contamination est la présence d'un matériau étranger ; c'est la présence d'une substance qui n'est normalement pas présente. Par exemple, ajouter de l'eau au lait peut être considéré comme une forme de contamination. Toutefois, lorsque les termes "contaminant" et "contamination" sont utilisés pour désigner des sujets tels que l'environnement, les aliments et les médicaments ; ils peuvent désigner l'addition de substances nocives[23].

1.7.5 Différence entre polluant et contaminant

Le polluant et le contaminant se réfèrent à des matériaux indésirables. Un polluant est une substance qui pollue l'environnement alors qu'un contaminant est une substance qui contamine une autre substance ou un environnement[23]. Il est important de comprendre la différence entre pollution et contamination afin de comprendre la différence entre polluant et contaminant. La pollution est l'introduction de substances nocives dans l'environnement et la contamination est la présence d'un constituant indésirable ou d'une impureté dans un matériau, sur un corps physique ou dans un environnement naturel. En fait, la pollution est une contamination qui entraîne ou peut avoir des effets néfastes[24]. Il ressort clairement de ces deux définitions que le polluant fait référence à une substance nocive, mais que le terme contaminant n'est pas nécessairement nocif, car la contamination fait simplement référence à la présence d'une substance là où elle ne devrait pas l'être. Cela signifie que tous les polluants sont des contaminants, mais tous les contaminants ne sont pas des polluants.

- Eau polluée : Eau ayant subi, du fait des activités humaines directes ou indirectes, ou sous l'action d'un processus, soit biologique, soit géologique, une dégradation de son état, qui a pour conséquence de le rendre impropre à l'utilisation à laquelle elle est destinée[4] ;
- Eaux usées : Les eaux dont les caractéristiques naturelles ont été modifiées par un usage domestique, artisanal, industriel, agricole, ou toutes les eaux, qui peuvent engendrer la pollution, si elles sont rejetées dans un milieu aquatique sans avoir été traitées au préalable[23] ;
- Pollution des eaux : Tous les déversements, écoulements, rejets, dépôts directs ou indirects de toute nature, et plus généralement de tout fait susceptible de provoquer ou d'accroître la dégradation des eaux, en modifiant leurs caractéristiques

physiques, chimiques, biologiques ; qu'ils s'agissent des eaux de surface ou des eaux souterraines[24].

- La diffusion de la matière ou la diffusion des produits chimiques désigne la tendance naturelle d'un système à rendre uniforme le potentiel chimique de chacune des espèces chimiques qu'il comporte.

Ex : Mélange de deux produits par diffusion[21].

La diffusion chimique est un phénomène de transport irréversible qui tend à homogénéiser la composition du milieu. La diffusion se fait souvent des régions de plus forte concentration vers les régions de concentration moindre [32].

- L'advection est le transport d'une quantité d'un élément donné par le mouvement(et donc la vitesse)du milieu environnant[21]. C'est le transport de la chaleur, de la matière, etc et à la vitesse du milieu environnant. Dans le domaine de la physique, de l'ingénierie et des sciences de la terre, l'advection est le transport d'une substance ou d'une quantité par mouvement de masse. Les propriétés de cette substance sont transportées avec elle. Généralement, la majorité des substances advectées sont des fluides. La vitesse de l'advection est donc la vitesse locale de la matière.
- La convection désigne l'ensemble des mouvements internes qui animent un fluide et qui impliquent alors le transport des propriétés de ce fluide au cours de son déplacement. Ce transport implique l'échange de chaleur entre une surface et un fluide mobile à son contact ou le déplacement de chaleur au sein d'un fluide par le mouvement d'ensemble de ses molécules d'un point à un autre[21].

1.8 Pollution de l'air

Bien qu'on ne veut pas entrer en détail dans ce travail, il existe aussi la pollution de l'air. Celle-ci est due à l'air dont les niveaux de concentration varient en fonction des émissions et des conditions météorologiques, et qui sont nuisibles à la santé et à l'environnement[3]. La contamination de l'air correspond à la modification de la composition de l'atmosphère par diverses substances en provenance de sources naturelles ou de sources anthropologiques, c'est à dire provenant de l'activité humaine. La qualité de l'air peut être modifiée par des polluants qui peuvent être d'origine naturelle ou d'origine anthropique. La pollution de l'air a des effets significatifs, sur la santé et l'environnement, qui engendrent des coûts importants pour la société[21]. La pollution de l'air a un impact sur la sécurité alimentaire en perturbant le métabolisme des plantes et donc en réduisant les rendements des récoltes et en rendant les cultures dangereuses pour la consommation. Les polluants vont également nuire aux organismes qui vivent dans le sol et les rendent plus fertiles. Les phénomènes naturels(éruptions volcaniques, incendies de forêts,...) mais surtout les activités humaines(industrie, transport, agriculture,...) sont à l'origine d'émissions, de polluants, sous forme de gaz ou de particules dans l'atmosphère[3]. Une fois émises dans l'air, ces substances sont transportées sous l'effet du vent, de la pluie, des gradients de température dans l'atmosphère[21]. Elles pourront également subir des transformations par réactions chimiques, qui dépendent des conditions météorologiques(chaleur, lumière, humidité,etc).

Chapitre 2

Revue de la littérature

2.1 Introduction

Dans la nature, les systèmes et les phénomènes physiques les plus intéressants sont aussi les plus complexes à étudier[21]. Ils sont souvent régis par un grand nombre de paramètres non linéaires interagissant entre eux. Ces modèles utilisent souvent des systèmes d'équations aux dérivées partielles (EDP) non linéaires dont on ne connaît pas de solutions analytiques en général[28]. La complexité des solutions de certaines équations différentielles fait qu'une alternative au calcul de la solution exacte est sans doute souhaitable[28][11]. Mais le véritable essor de cette alternative, les méthodes numériques, a lieu au *XIX^{ème}* siècle quand Liouville (1841) démontre que certaines équations ne peuvent pas être résolues analytiquement c'est à dire que leurs solutions exactes ne peuvent pas être exprimées comme une combinaison des fonctions élémentaires. Ce résultat important a également motivé des travaux théoriques sur l'existence et l'unicité des solutions des équations différentielles. On se rend compte en fait que pour la plupart, il est possible d'obtenir des formules donnant leurs solutions. Les équations différentielles résolubles analytiquement sont l'exception plutôt que la règle. Et la seule façon d'obtenir des informations quantitatives sur ces solutions en l'absence des formules explicites est donc de les approcher numériquement[28]. Il s'agit donc d'accepter que l'on ne peut en connaître quantitativement que des approximations et de se donner les moyens de calculer effectivement de telles approximations en maîtrisant l'erreur commise autant que possible[11]. Depuis la méthode d'erreur(1768), beaucoup de méthodes numériques ont été mises au point pour faire face à des équations parfois complexes. En effet, parallèlement aux progrès mathématiques dans ce domaine, l'utilisation croissante des équations différentielles pour décrire des phénomènes physiques s'est développée également dans toutes les disciplines, de l'astronomie à la chimie en passant par la médecine où la modélisation des épidémies avait déjà intéressé Daniel Bernoulli, le fils de Jean, en 1760. L'avènement des ordinateurs après la seconde guerre mondiale a ensuite totalement bouleversé le paysage, de par la puissance du calcul mise à notre disposition, sans commune mesure avec celle, de grands calculateurs humains du passé, et qui permet de simuler numériquement avec précision des phénomènes régis par des équations différentielles d'une grande complexité.

Pour résoudre numériquement l'équation d'advection- diffusion, divers travaux ont apparu en utilisant les méthodes des différences finies. Romao et al.(2005) ont présenté les méthodes de différences finies de l'équation de diffusion par convection en 3D pour étudier l'erreur dans la solution numérique de cette équation[1].

Chaque méthode de résolution numérique d'un problème continu comporte une phase de maillage et une phase de discrétisation[11] :

- La phase de maillage consiste à diviser le domaine d'étude en de petits volumes appelés volume de contrôle ;
- La phase de discrétisation transforme le problème continu en un problème discret.

Les équations ainsi que les conditions aux limites sont approchées par des équations et conditions discrètes. Il existe trois grandes classes de méthodes pour la résolution numérique des équations aux dérivées partielles[11][28] :

- Méthode des différences finies ;
- Méthode des volumes finis ;
- Méthode des éléments finis.

2.2 Notion de modèle

Comme nous l'avons signalé en haut, beaucoup de phénomènes physiques sont complexes à étudier et sont souvent régis par beaucoup de paramètres[21]. Il faut alors résoudre le problème numériquement en transformant les équations continues de la physique en un problème discret sur un certain domaine de calcul[11]. Dans certains cas, il s'agit de la seule alternative. Dans d'autres cas, les simulations numériques sont menées en parallèle avec des expérimentations. Le principe d'un modèle est de remplacer un système complexe en un objet simple reproduisant les aspects ou comportements principaux de l'original(ex : modèle réduit, maquette, modèle mathématique ou numérique, modèle de pensée ou raisonnement)[11].

2.3 Analyse du modèle mathématique

Même si l'on ne sait pas trouver une solution explicite du modèle, il est important d'en étudier les propriétés mathématiques, dans la mesure du possible. Il est bon de se poser les questions suivantes[28] :

- Le problème est-t-il bien posé? C'est à dire : y a-t-il existence et unicité de la solution ?
- Les propriétés physiques auxquelles on s'attend sont-elles satisfaites par la solution du modèle mathématique ? Si l'inconnue est une concentration, par exemple, peut-on prouver que la solution du modèle sensée la représenter est toujours positive ?
- La solution reste toujours vraie lorsque le pas de discrétisation tend vers zéro ?

2.4 Transport par diffusion et par advection

Le mouvement général de l'eau assure le transport advectif des poissons. Le mouvement des poissons par rapport à l'eau est le transport diffusif.[13]

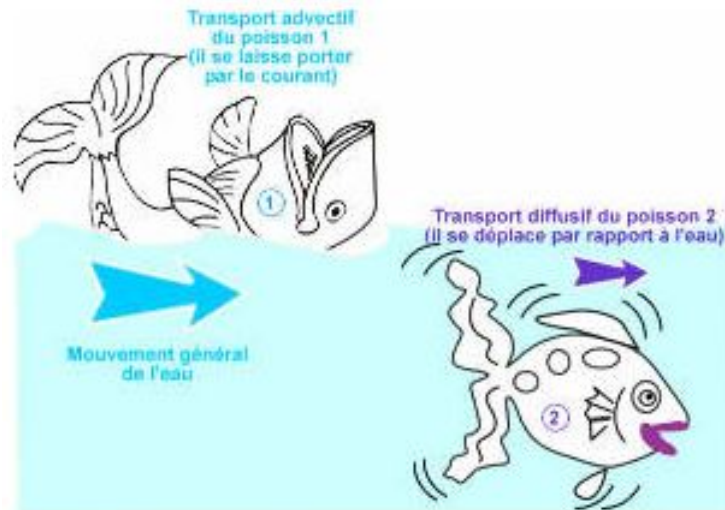


FIGURE 2.1 – Exemple de transport advectif et de transport diffusif[13]

Les phénomènes de transport et de diffusion des polluants ainsi que les transports de la chaleur, sont d'une grande observation dans la vie de tous les jours et jouent un rôle important dans la vie humaine. Ils sont nombreux et d'une complexité telle qu'ils nécessitent des modèles mathématiques pour qu'on puisse les décrire. Ces modèles sont indispensables dans la compréhension des phénomènes de contamination.

Les gaz et les liquides qui nous entourent et les flux à l'intérieur de notre corps ont une grande influence sur l'environnement dans lequel nous vivons. Les fluides s'écoulent ; ils produisent des vents, des pluies, des inondations,...et sont responsables des variations de température et du transport des polluants dans l'air, dans l'eau et dans le sol, etc [3], [21]. L'un des phénomènes physiques est le transport des polluants. Le transport des polluants se produit dans une grande variété de processus environnementaux, agricoles et industriels. La prédiction du transport de ces polluants est cruciale pour la gestion efficace de ces polluants. L'équation d'advection-diffusion est l'une des équations aux dérivées partielles importantes observées dans beaucoup d'applications d'ingénierie et industrielles [31]. Elle a été utilisée pour décrire l'équation de la chaleur dans un film drainant [18], transfert d'eau dans le sol [26], dispersion des traceurs dans les médias[32], dispersion des contaminants dans les lacs peu profonds[29], propagation des solutés dans un liquide circulant dans un tube, longue portée du transport des polluants dans l'atmosphère[37] et dispersion des sels dissouts dans les eaux souterraines[15], etc.

Le transport de ces polluants peut être adéquatement décrit par l'équation d'advection-diffusion[17].

2.4.1 La diffusion :

La diffusion est un processus de transport fondamental dans la mécanique des fluides environnementales. C'est un phénomène microscopique qui désigne la tendance naturelle d'un système à rendre homogène les concentrations des espèces chimiques en son sein. Elle diffère de l'advection parce que la diffusion est un phénomène aléatoire dans la nature . Nous pouvons citer à titre d'exemple la diffusion d'un parfum dans une chambre vide. Si

une bouteille de parfum est ouverte et laissée évaporer dans l'air, on va rapidement sentir ce parfum dans la chambre entière. Ainsi, la diffusion a deux principales propriétés : elle est aléatoire et le transport va des régions de forte concentration vers les régions de faible concentration. Nous savons aussi que l'odeur sera plus forte près de la source et de moins en moins forte en s'éloignant de la source[21][35].

2.4.2 L'advection :

L'advection correspond au transport d'une propriété telle que l'humidité, la température ; par un fluide, tel que l'air ou l'eau, généralement selon un mouvement à dominante horizontal. Un exemple étant le transport des fumées dégagées d'une usine à l'aide de l'air. L'advection est due au mouvement de l'air qui disperse ce polluant, ce phénomène étant macroscopique[34].

2.4.3 Différence entre la diffusion et l'advection

Les deux processus déplacent le polluant d'un endroit à un autre, mais chacun accomplit les choses de sa manière, la différence essentielle étant la suivante[21] :

- L'advection va dans un seul sens ;
- La diffusion va dans les deux sens(indépendamment du sens du courant).

Cela se voit dans les expressions mathématiques suivantes :

- L'advection $\mathbf{u} \frac{\partial C}{\partial x}$ est une dérivée du premier ordre, ce qui signifie que si x est remplacé par $-x$ le terme change de signe (antisymétrique) ;
- La diffusion $\mathbf{D} \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}$ est une dérivée du deuxième ordre, ce qui signifie que si x est remplacé par $-x$ le terme ne change pas de signe (symétrie).

2.5 Equation d'advection-diffusion

L'équation d'advection-diffusion est une combinaison des équations d'advection et de diffusion. Elle décrit des phénomènes physiques, où les particules, l'énergie, ou d'autres grandeurs physiques sont transférées dans un système physique en raison de deux processus : advection et diffusion. De cette définition, il suit que l'équation d'advection-diffusion combine à la fois les équations aux dérivées partielles : diffusion et advection. En cas de coefficient de diffusion constant et de vitesse d'écoulement constante, on peut écrire sous la forme suivante, l'équation en deux dimensions :

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \left(\mathbf{u} \frac{\partial C}{\partial x} + \mathbf{v} \frac{\partial C}{\partial y} \right) - \mathbf{D} \left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} \right) = r. \quad (2.1)$$

Les deux termes sur le côté gauche représentent les différents processus physiques, respectivement l'advection et la diffusion ;

- C : C'est la variation d'intérêt (la concentration de l'espèce de transfert de masse) ;
- D : Constante de diffusivité pour la masse ;
- u, v : les composantes du vecteur vitesse porteur selon les axes X et Y ;

- r : la source.

L'advection et la diffusion sont différentes :

La notion d'advection pure signifie que le transport d'une propriété se fait par un seul processus qui est l'advection et sans l'intervention d'aucun autre processus comme la diffusion.

Elle s'écrit comme suit :

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \left(\mathbf{u} \frac{\partial C}{\partial x} + \mathbf{v} \frac{\partial C}{\partial y} \right) = r. \quad (2.2)$$

La notion de diffusion pure signifie que le transport d'une propriété se fait par un seul processus qui est la diffusion et sans l'intervention d'aucun autre processus comme l'advection. Elle s'écrit comme suit :

$$\frac{\partial C}{\partial t} - D \left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} \right) = r. \quad (2.3)$$

2.5.1 Concentration C d'une substance dans un fluide :

La quantité d'intérêt fondamentale en matière d'environnement mécanique des fluides est la concentration. Dans l'usage commun, le terme "concentration" exprime une mesure de la quantité d'une substance dans un fluide. Mathématiquement, la concentration C est le rapport de la masse M d'une substance au volume du fluide :

$$C = \frac{\text{Masse de la substance}}{\text{Volume du fluide}} = \frac{M \left[\text{Kg} \right]}{V \left[\text{m}^3 \right]}. \quad (2.4)$$

2.5.2 Flux

Ayant la concentration dans un endroit, on a aussi besoin de définir combien de substances se sont-elles déplacées d'un endroit à un autre. On définit alors le flux :

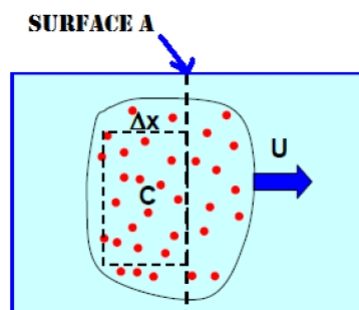


FIGURE 2.2 – Schéma d'un flux [21]

En physique, le flux d'une substance dans une direction donnée est défini comme la quantité passant à travers une section perpendiculaire à cette direction par unité de surface et par unité de temps [21][5].

$$\text{Flux} = q = \frac{\text{substance qui passe à travers la section}}{\text{section} \times \text{durée de temps } \Delta t} = \frac{M}{A \cdot \Delta t}. \quad (2.5)$$

2.5.3 Flux d'advection

L'advection = flux du mouvement porteur. D'où :

$$q = \frac{\text{substance}}{\text{volume du fluide}} \times \frac{\text{volume du fluide}}{\text{surface} \times \text{temps}} = \frac{M}{V} \cdot \frac{V}{A \cdot \Delta t} = \frac{C \cdot V}{V} \cdot \frac{V}{A \cdot \Delta T} = C \cdot \frac{V}{A \cdot \Delta t} = C \cdot \frac{A \cdot l}{A \cdot \Delta T}.$$

$q = C \cdot U$ avec U : la vitesse d'entraînement du fluide porteur.

Ce terme s'appelle l'advection, un terme qui signifie le transport passif de la substance d'un endroit à un autre par le fluide porteur en mouvement.

2.5.4 Equation d'advection pure

Dans l'advection pure, on s'intéresse seulement aux flux d'advection et on néglige les autres flux comme par exemple le flux diffusif. Nous savons que le flux d'advection est :

$$q = C \cdot U$$

Soit à écrire le flux d'advection à travers la section A durant le temps (dt) dans le volume ($V = \Delta x \cdot A$).

La variation de la masse durant un temps (dt) correspond à la variation du flux (entrée et sortie) [21][16]. On a donc :

La variation de la concentration :

$$dC = \frac{dm}{V} \left(\text{car } C = \frac{m}{V} \right) \rightarrow dm = V \cdot dC$$

$$\left[\begin{array}{c} \text{la variation de la masse} \\ \text{dans } V \end{array} \right] + \left[\begin{array}{c} \text{flux entrant et} \\ \text{flux sortant} \end{array} \right] = \left[\begin{array}{c} \text{Source} \\ \text{dans } V \end{array} \right]$$

$$\left[\begin{array}{c} \text{la variation de la masse} \\ \text{dans } V \end{array} \right] = \left[\begin{array}{c} \text{flux entrant et} \\ - \\ \text{flux sortant} \end{array} \right] + \left[\begin{array}{c} \text{Source} \\ \text{dans } V \end{array} \right]$$

$$\left[\frac{dm}{dt} \right] = \left[\begin{array}{c} \text{flux entrant et} \\ - \\ \text{flux sortant} \end{array} \right] + \left[\begin{array}{c} \text{Source} \\ \text{dans } V \end{array} \right]$$

- Flux entrant par $A = q(x, t) \cdot A$
- Flux sortant par $A = q(x + dx, t) \cdot A$

- La variation de la masse (dm) dans un volume (V) durant (dt) est comme suit :

$$\frac{dm}{dt} = \frac{V.dC}{dt}$$

On a donc le bilan :

$$\frac{V.dC}{dt} = [q(x, t).A] - [q(x + \Delta x, t).A] + r$$

où r est la source et $V = A.\Delta x$.

Donc,

$$\frac{A.\Delta x.dC}{dt} = [q(x, t).A] - [q(x + \Delta x, t).A] + r$$

$$\frac{dC}{dt} = -\frac{q(x + \Delta x, t) - q(x, t)}{\Delta x} + r = -\frac{\partial q}{\partial x} + r$$

Or, on sait que :

$$q = CU$$

L'équation bilan est :

$$\frac{dC}{dt} = -\frac{\partial q}{\partial x} + r = -\frac{\partial UC}{\partial x} + r. \quad (2.6)$$

C'est la vitesse d'advection et aussi si la vitesse U est constante :

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -U\frac{\partial C}{\partial x} + r. \quad (2.7)$$

En deux dimensions :

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \left(u\frac{\partial C}{\partial x} + v\frac{\partial C}{\partial y} \right) + r. \quad (2.8)$$

Un autre processus important est la diffusion ou agitation des petits mouvements turbulents agissant pour faire déplacer la substance au hasard par rapport au mouvement moyen du fluide.

2.6 La diffusion (loi de Fick)

La diffusion est le mécanisme de transport sous l'effet d'un gradient de concentration, depuis les zones concentrées en matière vers les moins concentrées . La diffusion est aussi le processus pour lequel une substance est déplacée d'un endroit à un autre sous l'action des fluctuations aléatoires. Au niveau de la turbulence, il est l'advection par les tourbillons du fluide porteur[21].

Considérons le système à deux box (figure suivante) et le flux fluctuant compensé par un anti flux de même grandeur dans la direction opposée.

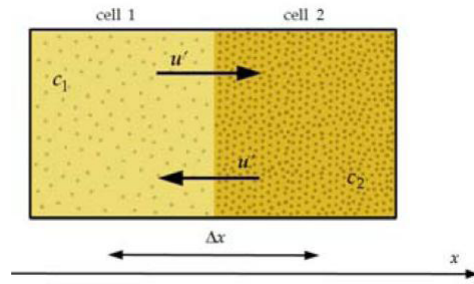


FIGURE 2.3 – Schéma expliquant le flux de diffusion

La loi de Fick décrit ce phénomène en énonçant que le flux de matière j , est proportionnel au gradient de concentration par l'intermédiaire du coefficient de diffusivité D .

Flux diffusif = Flux issu du mouvement désordonné des molécules (agitation moléculaire).

Un simple bilan donne :

Flux net de 1 à 2 = flux de 1 à 2 - flux de 2 à 1

$$j = C_1 u' - C_2 u = -u'(C_1 - C_2) = -u' \Delta C = -(u' \Delta C).$$

$$\frac{\Delta C}{\Delta x} = -D \frac{dC}{dx}$$

$$j = -D \left(\frac{dC}{dx} + \frac{dC}{dy} \right). \quad (2.9)$$

où :

$D =$ Coefficient de diffusivité en (m^2/s)

Dans cette équation le signe (-) traduit le fait que le transfert s'effectue des zones concentrées vers aux zones diluées (dans le sens opposé aux concentrations croissantes).

2.7 Equation de diffusion pure :

Dans l'advection pure, on s'intéresse seulement au flux diffusif et on néglige le flux d'advection.

On sait que le flux diffusif est :

$$j = -D \frac{dC}{dx} \quad (\text{loi de Fick}) \quad (2.10)$$

où :

- $D =$ Coefficient de diffusion (m^2/s);
- $\frac{dC}{dx}$ = le gradient de concentration le long du domaine.

Soit à écrire le bilan de flux à travers la section A durant le temps dt dans le volume

$$V = \Delta x.A. \quad (2.11)$$

La variation de la masse durant (dt) correspond à la variation du flux (entrée et sortie).
On a :

La variation de la concentration :

$$dC = \frac{dm}{dV} \quad (\text{car } C = \frac{m}{V}) \Rightarrow dm = V.dC. \quad (2.12)$$

$$\left[\begin{array}{l} \text{la variation de la masse} \\ \text{dans } V \text{ durant } dt \end{array} \right] + \left[\begin{array}{l} \text{flux entrant et} \\ \text{flux sortant} \end{array} \right] = \left[\begin{array}{l} \text{Source} \\ \text{dans } V \end{array} \right]. \quad (2.13)$$

$$\left[\begin{array}{l} \text{la variation de la masse} \\ \text{dans } V \end{array} \right] = \left[\begin{array}{l} \text{flux entrant et} \\ - \\ \text{flux sortant} \end{array} \right] + \left[\begin{array}{l} \text{Source} \\ \text{dans } V \end{array} \right]. \quad (2.14)$$

$$\left[\frac{dm}{dt} \right] = \left[\begin{array}{l} \text{flux entrant et} \\ - \\ \text{flux sortant} \end{array} \right] + \left[\begin{array}{l} \text{Source} \\ \text{dans } V \end{array} \right]. \quad (2.15)$$

- Flux entrant par $A = j(x, t).A$
- Flux sortant par $A = j(x + dx, t).A$
- La variation de la masse (dm) dans un volume (V) durant (dt) :

$$\frac{dm}{dt} = \frac{V.dC}{dt} \quad (V = \text{volume}). \quad (2.16)$$

D'où le bilan :

$$\frac{V.dC}{dt} = [j(x, t).A] - [j(x + \Delta x, t).A] + r. \quad (2.17)$$

Mais, $V = A.\Delta x$, donc :

$$\frac{A.\Delta x.dC}{dt} = [j(x, t).A] - [j(x + \Delta x, t).A] + r. \quad (2.18)$$

$$\frac{dC}{dt} = -\frac{j(x + \Delta x, t) - j(x, t)}{\Delta x} + r. \quad (2.19)$$

$$\frac{dC}{dt} = -\frac{\partial j}{\partial x} + r. \quad (2.20)$$

L'équation bilan est :

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\frac{\partial j}{\partial x} + r = -\frac{\partial}{\partial x} \left(-D \frac{\partial C}{\partial x} \right) + r. \quad (2.21)$$

C'est l'équation de diffusion en une dimension et aussi la deuxième loi de Fick. Si le coefficient de diffusion D est constant, en deux dimensions, on a :

$$\frac{\partial C}{\partial t} - D \left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} \right) = r. \quad (2.22)$$

2.8 Equation d'advection- diffusion

On additionne à présent le flux advectif et le flux diffusif pour obtenir le flux total Q

$$Q = \text{advection} + \text{diffusion} = C\vec{u} - D\text{grad}C = Cu + Cv - D\left(\frac{\partial C}{\partial x} + \frac{\partial C}{\partial y}\right). \quad (2.23)$$

En suivant les mêmes étapes que précédemment, on obtient l'équation d'advection - diffusion :

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\left(\frac{\partial Q}{\partial x} + \frac{\partial Q}{\partial y}\right) + r = -\frac{\partial(Cu)}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x}\left(D\frac{\partial C}{\partial x}\right) - \frac{\partial(Cv)}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial y}\left(D\frac{\partial C}{\partial y}\right) + r. \quad (2.24)$$

Si u , v et D sont constants,

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u\frac{\partial C}{\partial x} + v\frac{\partial C}{\partial y} - D\left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2}\right) = r. \quad (2.25)$$

où :

- C : Concentration d'intérêt ;
- u, v : les composantes du vecteur vitesse U suivant les axes X, Y ;
- D : Coefficient de diffusion ;
- r : terme source.

Et

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \text{Accumulation}. \quad (2.26)$$

$$u\frac{\partial C}{\partial x} + v\frac{\partial C}{\partial y} = \text{Advection}. \quad (2.27)$$

$$D\left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2}\right) = \text{Diffusion}. \quad (2.28)$$

Chapitre 3

Méthodologie

Dans ce chapitre nous parlons et montrons les méthodes numériques que nous avons utilisé.

3.1 Résolution numérique des équations aux dérivées partielles

Introduction

Un problème aux dérivées partielles nécessite la donnée de :

- Un domaine \mathbb{D} ;
- Une équation aux dérivées partielles(EDP) ;
- Des conditions aux limites ;
- Une condition initiale.

Pour obtenir une approximation numérique de la solution du problème, nous devons approcher les dérivées partielles de l'EDP en chacun des nœuds du domaine discrétisé en utilisant les valeurs de la variable dépendante en ces nœuds et aux nœuds avoisinants.

Il existe trois grandes familles couramment utilisées de méthodes qui nous aident à passer d'un problème exact continu régi par une EDP au problème approché discret :

- Les différences finies :

La méthode consiste à remplacer les dérivées partielles par des différences divisées ou combinaisons des valeurs ponctuelles de la fonction en un nombre fini de points discrets ou nœuds du maillage[11].

- Les volumes finis :

La méthode intègre, sur des volumes élémentaires de forme simple, les équations écrites sous forme de loi de conservation. Elle fournit ainsi de manière naturelle des approximations discrètes conservatives et est particulièrement bien adaptée aux équations de la mécanique des fluides. Sa mise en œuvre est simple avec des volumes élémentaires rectangles.

- Les éléments finis :

La méthode consiste à approcher, dans un sous-espace de dimension finie, un problème écrit sous forme variationnelle dans un espace de dimension infinie. La fonction approchée est dans ce cas une fonction déterminée par un nombre fini de paramètres comme, par exemple, ses valeurs en certains points ou nœuds du maillage.

Toutes ces méthodes sont basées sur le même principe :

On discrétise la courbe, le domaine, la surface ou le volume supposé continu sur lequel on veut intégrer l'EDP, c'est à dire qu'on le découpe en éléments, segments surfaces ou volumes, petits mais pas infiniment petits. C'est l'étape de discrétisation.

Cela signifie qu'au lieu d'intégrer l'EDP comme une fonction continue, on l'intègre comme une fonction discrète. Bien sûr, pour ce faire, il va falloir trouver les méthodes qui permettent de mener une telle intégration. C'est l'objet des schémas aux différences, aux éléments et volumes finis.

3.2 La méthode des différences finies

En analyse numérique, la méthode des différences finies est une technique de recherche des solutions approchées d'équations aux dérivées partielles qui consiste à résoudre un système liant les valeurs des fonctions continues en certains points suffisamment proches les uns des autres[28]. Elle apparaît comme la plus simple à mettre en œuvre car elle procède en deux étapes : d'une part la discrétisation par des différences finies des opérateurs de dérivation, d'autre part la convergence du schéma numérique ainsi obtenu lorsque la distance entre les points diminue. La méthode des différences finies consiste à approximer les dérivées des équations de la physique aux dérivées partielles au moyen des développements de Taylor et se déduit directement de la définition de la dérivée[11]. Elle est due aux travaux de plusieurs mathématiciens : Euler, Taylor, Leibniz,...

3.2.1 Définition d'un maillage

Un problème posé sur un domaine continu n'est pas résoluble tel qu'il est par un ordinateur, qui ne peut traiter qu'un nombre fini d'inconnues[28].

En mathématiques, la discrétisation est la transposition d'un état continu (fonction, modèle, variable, équation, ...) en un équivalent discret.

Un maillage est la discrétisation spatiale d'un milieu continu, ou aussi, une modélisation géométrique d'un domaine par des éléments proportionnés finis et bien définis.

Il est un ensemble de points dits sommets du maillage. Dans la pratique, il s'agit d'un tableau de coordonnées.

L'objet d'un maillage est de procéder à une simplification d'un système par un modèle représentant ce système et éventuellement dans l'optique de simulations de calculs ou de représentations graphique[28].

3.2.2 Schéma de discrétisation

3.2.2.1 Maille

Une maille est un ensemble d'arêtes qui délimitent un élément.

Noeud : c'est un point de calcul sur l'élément (extrémité ou milieu de la maille).

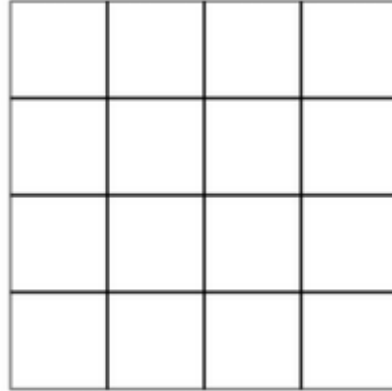


FIGURE 3.1 – Schéma du maillage régulier

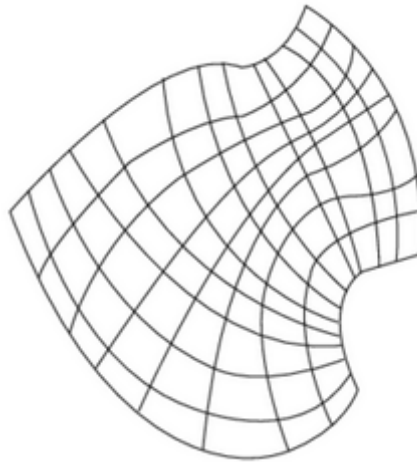


FIGURE 3.2 – Schéma du maillage irrégulier

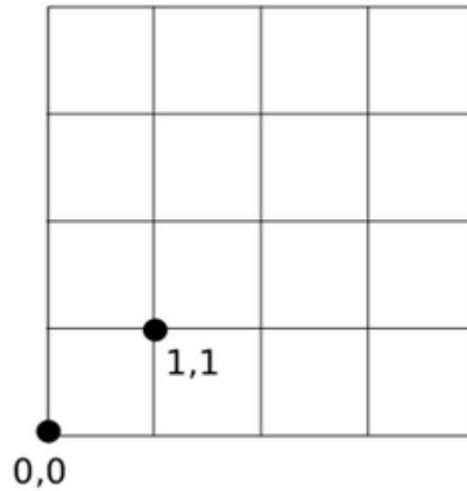


FIGURE 3.3 – Schéma du maillage

3.2.2.2 Pas de discrétisation

Le pas de discrétisation est la distance entre deux points successifs, donc la distance entre deux points de calcul.

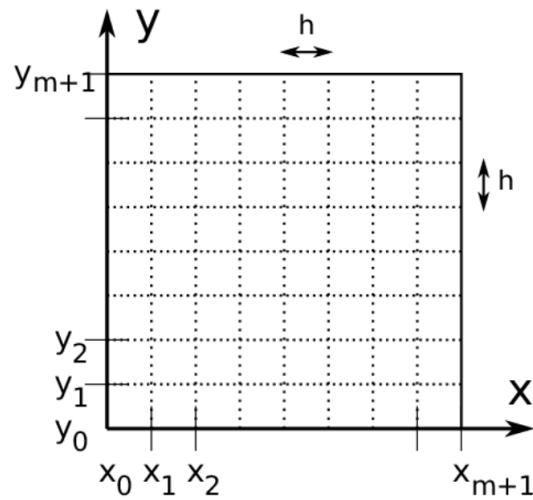


FIGURE 3.4 – Schéma du maillage et pas de discrétisation

Ici , le pas de discrétisation est h .

$$h = \Delta x = \Delta y$$

3.2.3 Développement en série de Taylor

Nous allons utiliser le développement en série de Taylor pour approximer les dérivées partielles.

Soit une fonction f qui dépend de plusieurs variables, elle peut être développée en série de Taylor autour de x comme suit :

$$f(x + \Delta x) = f(x) + \Delta x \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{(\Delta x)^2}{2!} \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \frac{(\Delta x)^3}{3!} \frac{\partial^3 f}{\partial x^3} + \dots \quad (3.1)$$

$$= f(x) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(\Delta x)^n}{n!} \frac{\partial^n f}{\partial x^n}. \quad (3.2)$$

Le calcul de $\frac{\partial f}{\partial x}$ nous donne :

$$\frac{\partial f}{\partial x} = \frac{f(x + \Delta x) - f(x)}{\Delta x} - \frac{(\Delta x)}{2!} \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} - \frac{(\Delta x)^2}{3!} \frac{\partial^3 f}{\partial x^3} - \dots \quad (3.3)$$

En sommant tous les termes en Δx de degré supérieur à un et en les représentant par $O(\Delta x)$, on a :

$$\frac{\partial f}{\partial x} = \frac{f(x + \Delta x) - f(x)}{\Delta x} + O(\Delta x). \quad (3.4)$$

qui est une approximation de la dérivée première de f par rapport à x .

Si les indices " i " sont utilisées pour représenter les points, l'équation devient :

$$\left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_i = \frac{f_{i+1} - f_i}{\Delta x} + O(\Delta x). \quad (3.5)$$

En considérant maintenant le développement en série de Taylor de $f(x - \Delta x)$ autour de x , on a :

$$f(x - \Delta x) = f(x) - \Delta x \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{(\Delta x)^2}{2!} \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} - \frac{(\Delta x)^3}{3!} \frac{\partial^3 f}{\partial x^3} + \dots \quad (3.6)$$

$$= f(x) + (-1)^n \frac{(\Delta x)^n}{n!} \frac{\partial^n f}{\partial x^n}. \quad (3.7)$$

Le calcul de $\frac{\partial f}{\partial x}$ nous donne :

$$\frac{\partial f}{\partial x} = \frac{f(x) - f(x - \Delta x)}{\Delta x} + O(\Delta x). \quad (3.8)$$

ou

$$\left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_i = \frac{f_i - f_{i-1}}{\Delta x} + O(\Delta x). \quad (3.9)$$

qui est connue comme la première différence arrière de $\frac{\partial f}{\partial x}$ d'ordre Δx .

Considérant maintenant les développements en série de Taylor (3.1) et (3.6) et en soustrayant (3.6) de (3.1), nous obtenons :

$$f(x + \Delta x) - f(x - \Delta x) = 2\Delta x \frac{\partial f}{\partial x} + 2 \frac{(\Delta x)^3}{3!} \frac{\partial^3 f}{\partial x^3} + \dots \quad (3.10)$$

Le calcul de $\frac{\partial f}{\partial x}$ nous donne :

$$\frac{\partial f}{\partial x} = \frac{f(x + \Delta x) - f(x - \Delta x)}{2\Delta x} + O(\Delta x)^2. \quad (3.11)$$

ou

$$\left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_i = \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2\Delta x} + O(\Delta x)^2. \quad (3.12)$$

Cette représentation de $\frac{\partial f}{\partial x}$ est la différence centrée approximatif de la dérivée première d'ordre $(\Delta x)^2$.

Le développement en série de Taylor de $f(x + 2\Delta x)$ autour de x donne :

$$f(x + 2\Delta x) = f(x) + (2\Delta x) \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{(2\Delta x)^2}{2!} \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \frac{(2\Delta x)^3}{3!} \frac{\partial^3 f}{\partial x^3} + \dots \quad (3.13)$$

Et le développement en série de Taylor de $f(x - 2\Delta x)$ autour de x donne :

$$f(x - 2\Delta x) = f(x) - (2\Delta x) \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{(2\Delta x)^2}{2!} \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} - \frac{(2\Delta x)^3}{3!} \frac{\partial^3 f}{\partial x^3} + \dots \quad (3.14)$$

En multipliant (3.1) par 2 et en soustrayant le produit dans (3.13), nous obtenons :

$$-2f(x + \Delta x) + f(x + 2\Delta x) = -f(x) + (\Delta x)^2 \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + (\Delta x)^3 \frac{\partial^3 f}{\partial x^3}. \quad (3.15)$$

Le calcul de $\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}$ nous donne :

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} = \frac{f(x + 2\Delta x) - 2f(x + \Delta x) + f(x)}{(\Delta x)^2} + O(\Delta x).$$

ou

$$\left. \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right|_i = \frac{f_{i+2} - 2f_{i+1} + f_i}{(\Delta x)^2} + O(\Delta x). \quad (3.16)$$

L'équation (3.16) représente la différence avant approximatif de la dérivée seconde de f par rapport à x et est d'ordre de (Δx) .

La multiplication de (3.6) par 2 nous donne :

$$2f(x - \Delta x) = 2f(x) - 2\Delta x \frac{\partial f}{\partial x} + 2 \frac{(\Delta x)^2}{2!} \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} - 2 \frac{(\Delta x)^3}{3!} \frac{\partial^3 f}{\partial x^3} + \dots \quad (3.17)$$

En soustrayant (3.17) dans (3.14), nous avons :

$$2f(x - \Delta x) - f(x - 2\Delta x) = f(x) - (\Delta x)^2 \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + O(\Delta x)^3. \quad (3.18)$$

Le calcul de $\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}$ nous donne :

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} = \frac{f(x - 2\Delta x) - 2f(x - \Delta x) + f(x)}{(\Delta x)^2} + O(\Delta x).$$

ou

$$\left. \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right|_i = \frac{f_i - 2f_{i-1} + f_{i-2}}{(\Delta x)^2} + O(\Delta x). \quad (3.19)$$

L'équation (3.19) est la différence arrière approximatif de $\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}$.

Pour obtenir la différence centrée approximatif de la dérivée seconde, il faut additionner les équations (3.1) et (3.6).

En effet, la somme donne :

$$f(x + \Delta x) + f(x - \Delta x) = 2f(x) + 2(\Delta x)^2 \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + O(\Delta x)^4. \quad (3.20)$$

Donc,

$$2(\Delta x)^2 \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} = f(x + \Delta x) - 2f(x) + f(x - \Delta x) + O(\Delta x)^4. \quad (3.21)$$

Ainsi, on a enfin :

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} = \frac{f(x + \Delta x) - 2f(x) + f(x - \Delta x)}{(\Delta x)^2} + O(\Delta x)^2.$$

ou

$$\left. \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right|_i = \frac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{(\Delta x)^2} + O(\Delta x)^2. \quad (3.22)$$

Les approximations des dérivées d'ordre supérieur à deux par rapport à x peuvent être calculées de la même manière.

Pour des raisons de commodité, définissons la première différence avant $f_{i+1} - f_i$ par $\Delta_x f_i$ et la première différence arrière $f_i - f_{i-1}$ par $\nabla_x f_i$.

Généralement, la différence avant et la différence arrière du premier ordre peuvent être exprimées par :

$$\Delta_x^n f_i = \Delta_x^{n-1} (\Delta_x f_i).$$

et

$$\nabla_x^n f_i = \nabla_x^{n-1} (\nabla_x f_i).$$

Des opérateurs variés de différence centrée peuvent être définies de façon similaire.

En utilisant les opérateurs que nous venons de définir, les approximations des dérivées d'ordre supérieur à deux par les différences avant et arrières peuvent être exprimées respectivement par :

$$\left. \frac{\partial^n}{\partial x^n} \right|_i = \frac{\Delta_x^n f_i}{(\Delta x)^n} + O(\Delta x). \quad (3.23)$$

$$\left. \frac{\partial^n}{\partial x^n} \right|_i = \frac{\nabla_x^n f_i}{(\Delta x)^n} + O(\Delta x). \quad (3.24)$$

et celles qui sont centrées peuvent être exprimées par :

$$\left. \frac{\partial^n}{\partial x^n} \right|_i = \frac{\Delta_x^n f_{i-\frac{n}{2}} + \nabla_x^n f_{i+\frac{n}{2}}}{2(\Delta x)^n} + O(\Delta x)^2 \quad \text{pour } n \text{ pair.} \quad (3.25)$$

et

$$\left. \frac{\partial^n}{\partial x^n} \right|_i = \frac{\Delta_x^n f_{i-\frac{n-1}{2}} + \nabla_x^n f_{i+\frac{n-1}{2}}}{2(\Delta x)^n} + O(\Delta x)^2 \quad \text{pour } n \text{ impair.} \quad (3.26)$$

3.2.4 Discrétisation de l'équation d'advection-diffusion

Comme nous l'avons vu, l'équation d'advection diffusion en deux dimensions est :

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} + v \frac{\partial C}{\partial y} - D \left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} \right) = r. \quad (3.27)$$

Nous allons la discrétiser en utilisant les approximations décrites ci-haut.

L'approximation est une représentation imprécise ayant toutefois un lien étroit avec la quantité ou l'objet qu'elle reflète comme par exemple l'approximation d'un nombre d'une fonction mathématique, d'une solution, d'un problème d'optimisation, d'une forme géométrique,...[28]

L'idée étant de remplacer les dérivées partielles qui interviennent dans l'équation aux points du maillage par des développements en série de Taylor[25].

Au lieu de chercher $f(x)$, on cherche les valeurs de f aux nœuds du maillage, donc $f_i = f(x_i)$

L'équation d'advection diffusion en une dimension :

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} ; \quad t > 0 ; \quad -\infty < x < \infty. \quad (3.28)$$

avec les conditions aux limites $C_0(t_0, x) = C_0(x); a \leq x \leq b$

La discrétisation de la solution en différents points est donnée par :

$$C(t^n, x_i) \simeq C_i^n. \quad (3.29)$$

$$\frac{\partial C}{\partial t}(x_i^n) \simeq \frac{C_i^{n+1} - C_i^n}{\Delta t}. \quad (3.30)$$

$$\frac{\partial C}{\partial x}(x_i^n) \simeq \frac{C_i^n - C_{i-1}^n}{\Delta x}. \quad (3.31)$$

$$\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}(x_i^n) \simeq \frac{C_{i-1}^n - 2C_i^n + C_{i+1}^n}{\Delta x^2}. \quad (3.32)$$

$$\frac{\partial C}{\partial x}(x_i^n) \simeq \frac{C_{i+1}^n - C_{i-1}^n}{2\Delta x}. \quad (3.33)$$

En substituant les équations (3.30), (3.31) et (3.32) dans (3.28) on obtient :

$$\frac{C_i^{n+1} - C_i^n}{\Delta t} + u \left(\frac{C_i^n - C_{i-1}^n}{\Delta x} \right) = D \left(\frac{C_{i-1}^n - 2C_i^n + C_{i+1}^n}{\Delta x^2} \right) \quad (3.34)$$

$$\frac{C_i^{n+1}}{\Delta t} - \frac{C_i^n}{\Delta t} + u \frac{C_i^n}{\Delta x} - u \frac{C_{i-1}^n}{\Delta x} = D \frac{C_{i-1}^n}{\Delta x^2} - 2D \frac{C_i^n}{\Delta x^2} + D \frac{C_{i+1}^n}{\Delta x^2} \quad (3.35)$$

Et en continuant les calculs, on trouve :

$$\begin{aligned} C_i^{n+1} &= C_i^n - u \frac{\Delta t}{\Delta x} C_i^n + u \frac{\Delta t}{\Delta x} C_{i-1}^n + D \frac{\Delta t}{\Delta x^2} C_{i-1}^n - 2D \frac{\Delta t}{\Delta x^2} C_i^n + D \frac{\Delta t}{\Delta x^2} C_{i+1}^n \\ &= \left(1 - u \frac{\Delta t}{\Delta x} - 2D \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \right) C_i^n + \left(u \frac{\Delta t}{\Delta x} + D \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \right) C_{i-1}^n \\ &\quad + D \frac{\Delta t}{\Delta x^2} C_{i+1}^n \end{aligned} \quad (3.36)$$

En posant $\alpha = u \frac{\Delta t}{\Delta x}$; $D \frac{\Delta t}{\Delta x^2} = \beta$, on a :

$$C_i^{n+1} = (1 - \alpha - 2\beta)C_i^n + (\alpha + \beta)C_{i-1}^n + \beta C_{i+1}^n. \quad (3.37)$$

En substituant (3.30), (3.31) et (3.33) dans (3.28) nous obtenons :

$$\frac{C_i^{n+1} - C_i^n}{\Delta t} + u \left(\frac{C_{i+1}^n - C_{i-1}^n}{2\Delta x} \right) = D \left(\frac{C_{i-1}^n - 2C_i^n + C_{i+1}^n}{\Delta x^2} \right) \quad (3.38)$$

$$\iff \frac{C_i^{n+1} - C_i^n}{\Delta t} + u \frac{C_{i+1}^n}{2\Delta x} - u \frac{C_{i-1}^n}{2\Delta x} = D \frac{C_{i-1}^n}{\Delta x^2} - 2D \frac{C_i^n}{\Delta x^2} + D \frac{C_{i+1}^n}{\Delta x^2} \quad (3.39)$$

$$\iff \frac{C_i^{n+1}}{\Delta t} = \frac{C_i^n}{\Delta t} - u \frac{C_{i+1}^n}{2\Delta x} + u \frac{C_{i-1}^n}{2\Delta x} + D \frac{C_{i-1}^n}{\Delta x^2} - 2D \frac{C_i^n}{\Delta x^2} + D \frac{C_{i+1}^n}{\Delta x^2} \quad (3.40)$$

$$\iff C_i^{n+1} = C_i^n - u \frac{\Delta t}{2\Delta x} C_{i+1}^n + u \frac{\Delta t}{2\Delta x} C_{i-1}^n + D \frac{\Delta t}{\Delta x^2} C_{i-1}^n - 2D \frac{\Delta t}{\Delta x^2} C_i^n + D \frac{\Delta t}{\Delta x^2} C_{i+1}^n. \quad (3.41)$$

En posant $\alpha = u \frac{\Delta t}{\Delta x}$; $\beta = D \frac{\Delta t}{\Delta x^2}$, on obtient :

$$C_i^{n+1} = \left(1 - 2D \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \right) C_i^n + \left(u \frac{\Delta t}{2\Delta x} + D \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \right) C_{i-1}^n + \left(D \frac{\Delta t}{\Delta x^2} - u \frac{\Delta t}{2\Delta x} \right) C_{i+1}^n. \quad (3.42)$$

On a donc :

$$C_i^{n+1} = (1 - 2\beta) C_i^n + \left(\frac{\alpha}{2} + \beta\right) C_{i-1}^n + \left(\beta - \frac{\alpha}{2}\right) C_{i+1}^n. \quad (3.43)$$

En deux dimensions, l'équation d'advection diffusion étant la suivante :

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} + v \frac{\partial C}{\partial y} = D \left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} \right) + r. \quad (3.44)$$

Sa discrétisation est donnée par les approximations suivantes :

$$\frac{\partial C}{\partial t}(x_{i,j}^n) \simeq \frac{C_{i,j}^{n+1} - C_{i,j}^n}{\Delta t}. \quad (3.45)$$

$$\frac{\partial C}{\partial x}(x_{i,j}^n) \simeq \frac{C_{i,j}^n - C_{i-1,j}^n}{\Delta x}. \quad (3.46)$$

$$\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}(x_{i,j}^n) \simeq \frac{C_{i-1,j}^n - 2C_{i,j}^n + C_{i+1,j}^n}{\Delta x^2}. \quad (3.47)$$

$$\frac{\partial C}{\partial x}(x_{i,j}^n) \simeq \frac{C_{i+1,j}^n - C_{i-1,j}^n}{2\Delta x}. \quad (3.48)$$

$$\frac{\partial C}{\partial y}(x_{i,j}^n) \simeq \frac{C_{i,j}^n - C_{i,j-1}^n}{\Delta y}. \quad (3.49)$$

$$\frac{\partial^2 C}{\partial y^2}(x_{i,j}^n) \simeq \frac{C_{i,j-1}^n - 2C_{i,j}^n + C_{i,j+1}^n}{\Delta y^2}. \quad (3.50)$$

$$\frac{\partial C}{\partial y}(x_{i,j}^n) \simeq \frac{C_{i,j+1}^n - C_{i,j-1}^n}{2\Delta y}. \quad (3.51)$$

En substituant les équations (3.45), (3.46), (3.47), (3.49) et (3.50) dans (3.44), on obtient :

$$\begin{aligned} & \frac{C_{i,j}^{n+1} - C_{i,j}^n}{\Delta t} + u \left(\frac{C_{i,j}^n - C_{i-1,j}^n}{\Delta x} \right) + v \left(\frac{C_{i,j}^n - C_{i,j-1}^n}{\Delta y} \right) \\ & = D \left(\frac{C_{i-1,j}^n - 2C_{i,j}^n + C_{i+1,j}^n}{\Delta x^2} + \frac{C_{i,j-1}^n - 2C_{i,j}^n + C_{i,j+1}^n}{\Delta y^2} \right) \end{aligned} \quad (3.52)$$

$$\begin{aligned} & \iff \frac{C_{i,j}^{n+1}}{\Delta t} - \frac{C_{i,j}^n}{\Delta t} + u \frac{C_{i,j}^n}{\Delta x} - u \frac{C_{i-1,j}^n}{\Delta x} + v \frac{C_{i,j}^n}{\Delta y} - v \frac{C_{i,j-1}^n}{\Delta y} \\ & = D \frac{C_{i-1,j}^n}{\Delta x^2} - 2D \frac{C_{i,j}^n}{\Delta x^2} + D \frac{C_{i+1,j}^n}{\Delta x^2} + D \frac{C_{i,j-1}^n}{\Delta y^2} - 2D \frac{C_{i,j}^n}{\Delta y^2} + D \frac{C_{i,j+1}^n}{\Delta y^2} \end{aligned} \quad (3.53)$$

$$\begin{aligned}
\Rightarrow C_{i,j}^{m+1} &= C_{i,j}^m - u \frac{\Delta t}{\Delta x} C_{i,j}^m + u \frac{\Delta t}{\Delta x} C_{i-1,j}^m - v \frac{\Delta t}{\Delta y} C_{i,j}^m + v \frac{\Delta t}{\Delta y} C_{i,j-1}^m + D \frac{\Delta t}{\Delta x^2} C_{i-1,j}^m \\
&\quad - 2D \frac{\Delta t}{\Delta x^2} C_{i,j}^m + D \frac{\Delta t}{\Delta x^2} C_{i+1,j}^m + D \frac{\Delta t}{\Delta y^2} C_{i,j-1}^m - 2D \frac{\Delta t}{\Delta y^2} C_{i,j}^m + D \frac{\Delta t}{\Delta y^2} C_{i,j+1}^m \\
&= \left(1 - u \frac{\Delta t}{\Delta x} - v \frac{\Delta t}{\Delta y} - 2D \frac{\Delta t}{\Delta x^2} - 2D \frac{\Delta t}{\Delta y^2} \right) C_{i,j}^m \\
&\quad + \left(u \frac{\Delta t}{\Delta x} + D \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \right) C_{i-1,j}^m + \left(v \frac{\Delta t}{\Delta y} + D \frac{\Delta t}{\Delta y^2} \right) C_{i,j-1}^m + D \frac{\Delta t}{\Delta x^2} C_{i+1,j}^m + D \frac{\Delta t}{\Delta y^2} C_{i,j+1}^m
\end{aligned}$$

En posant $\alpha = u \frac{\Delta t}{\Delta x} = v \frac{\Delta t}{\Delta y}$; $\beta = D \frac{\Delta t}{\Delta x^2} = D \frac{\Delta t}{\Delta y^2}$; $\Delta x = \Delta y$,

On a :

$$C_{i,j}^{m+1} = (1 - 2\alpha - 4\beta)C_{i,j}^m + (\alpha + \beta)C_{i-1,j}^m + (\alpha + \beta)C_{i,j-1}^m + \beta C_{i+1,j}^m + \beta C_{i,j+1}^m. \quad (3.54)$$

En posant $\alpha = u \frac{\Delta t}{\Delta x}$, $\beta = v \frac{\Delta t}{\Delta y}$, $\gamma = D \frac{\Delta t}{\Delta x^2} = D \frac{\Delta t}{\Delta y^2}$, on a :

$$C_{i,j}^{m+1} = (1 - \alpha - \beta - 4\gamma)C_{i,j}^m + (\alpha + \gamma)C_{i-1,j}^m + (\beta + \gamma)C_{i,j-1}^m + \gamma C_{i+1,j}^m + \gamma C_{i,j+1}^m. \quad (3.55)$$

Et en posant que :

$\alpha = u \frac{\Delta t}{\Delta x}$, $\beta = v \frac{\Delta t}{\Delta y}$, $\gamma = D \frac{\Delta t}{\Delta x^2}$, $\omega = D \frac{\Delta t}{\Delta y^2}$, on a :

$$C_{i,j}^{m+1} = (1 - \alpha - \beta - 2\gamma - 2\omega)C_{i,j}^m + (\alpha + \gamma)C_{i-1,j}^m + (\beta + \omega)C_{i,j-1}^m + \gamma C_{i+1,j}^m + \omega C_{i,j+1}^m. \quad (3.56)$$

En substituant les équations (3.45), (3.47), (3.48), (3.50) et (3.51) dans (3.44), on obtient :

$$\begin{aligned}
\frac{C_{i,j}^{m+1} - C_{i,j}^m}{\Delta t} + u \left(\frac{C_{i+1,j}^m - C_{i-1,j}^m}{2\Delta x} \right) + v \left(\frac{C_{i,j+1}^m - C_{i,j-1}^m}{2\Delta y} \right) \\
= D \left(\frac{C_{i-1,j}^m - 2C_{i,j}^m + C_{i+1,j}^m}{\Delta x^2} + \frac{C_{i,j-1}^m - 2C_{i,j}^m + C_{i,j+1}^m}{\Delta y^2} \right)
\end{aligned} \quad (3.57)$$

$$\begin{aligned}
\Rightarrow \frac{C_{i,j}^{m+1}}{\Delta t} - \frac{C_{i,j}^m}{\Delta t} + u \frac{C_{i+1,j}^m}{2\Delta x} - u \frac{C_{i-1,j}^m}{2\Delta x} + v \frac{C_{i,j+1}^m}{2\Delta y} - v \frac{C_{i,j-1}^m}{2\Delta y} \\
= D \frac{C_{i-1,j}^m}{\Delta x^2} - 2D \frac{C_{i,j}^m}{\Delta x^2} + D \frac{C_{i+1,j}^m}{\Delta x^2} + D \frac{C_{i,j-1}^m}{\Delta y^2} - 2D \frac{C_{i,j}^m}{\Delta y^2} + D \frac{C_{i,j+1}^m}{\Delta y^2}
\end{aligned} \quad (3.58)$$

$$\begin{aligned}
C_{i,j}^{m+1} &= C_{i,j}^m - u \frac{\Delta t}{2\Delta x} C_{i+1,j}^m + u \frac{\Delta t}{2\Delta x} C_{i-1,j}^m - v \frac{\Delta t}{2\Delta y} C_{i,j+1}^m + v \frac{\Delta t}{2\Delta y} C_{i,j-1}^m + D \frac{\Delta t}{\Delta x^2} C_{i-1,j}^m \\
&\quad - 2D \frac{\Delta t}{\Delta x^2} C_{i,j}^m + D \frac{\Delta t}{\Delta x^2} C_{i+1,j}^m + D \frac{\Delta t}{\Delta y^2} C_{i,j-1}^m - 2D \frac{\Delta t}{\Delta y^2} C_{i,j}^m + D \frac{\Delta t}{\Delta y^2} C_{i,j+1}^m \\
&= \left(1 - 2D \frac{\Delta t}{\Delta x^2} - 2D \frac{\Delta t}{\Delta y^2} \right) C_{i,j}^m - \left(u \frac{\Delta t}{2\Delta x} - D \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \right) C_{i+1,j}^m + \left(u \frac{\Delta t}{2\Delta x} + D \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \right) C_{i-1,j}^m \\
&\quad - \left(v \frac{\Delta t}{2\Delta y} - D \frac{\Delta t}{\Delta y^2} \right) C_{i,j+1}^m + \left(v \frac{\Delta t}{2\Delta y} + D \frac{\Delta t}{\Delta y^2} \right) C_{i,j-1}^m.
\end{aligned} \quad (3.59)$$

En posant $\alpha = u \frac{\Delta t}{\Delta x} = v \frac{\Delta t}{\Delta y}$ et $\beta = D \frac{\Delta t}{\Delta x^2} = D \frac{\Delta t}{\Delta y^2}$, On a :

$$C_{i,j}^{m+1} = (1 - 4\beta)C_{i,j}^m - (2\alpha - \beta)C_{i+1,j}^m + (2\alpha + \beta)C_{i-1,j}^m - (2\alpha - \beta)C_{i,j+1}^m + (2\alpha + \beta)C_{i,j-1}^m. \quad (3.60)$$

En posant $\alpha = u \frac{\Delta t}{2\Delta x}$, $\beta = v \frac{\Delta t}{2\Delta y}$ et $\gamma = D \frac{\Delta t}{\Delta x^2} = D \frac{\Delta t}{\Delta y^2}$, on a :

$$C_{i,j}^{m+1} = (1 - 4\gamma)C_{i,j}^m - (2\alpha - \gamma)C_{i+1,j}^m + (2\alpha + \gamma)C_{i-1,j}^m - (2\beta - \gamma)C_{i,j+1}^m + (2\beta + \gamma)C_{i,j-1}^m. \quad (3.61)$$

En posant $\alpha = u \frac{\Delta t}{2\Delta x}$, $\beta = v \frac{\Delta t}{2\Delta y}$, $\gamma = D \frac{\Delta t}{\Delta x^2}$ et $\omega = D \frac{\Delta t}{\Delta y^2}$, on a :

$$C_{i,j}^{m+1} = (1 - 2\gamma - 2\omega)C_{i,j}^m - (2\alpha - \gamma)C_{i+1,j}^m + (2\alpha + \gamma)C_{i-1,j}^m - (2\beta - \omega)C_{i,j+1}^m + (2\beta + \omega)C_{i,j-1}^m. \quad (3.62)$$

3.2.5 Discrétisation des conditions aux limites

Une condition aux limites est une contrainte sur les valeurs que prennent les solutions des équations aux dérivées partielles sur une frontière. Les conditions initiales et les conditions aux limites aident à comprendre la concentration des polluants et le comportement de la distribution du polluant à travers un milieu (domaine) ouvert comme l'air, les rivières, les lacs et le milieu poreux [1]. La connaissance des conditions aux limites est nécessaire à la résolution du système puisqu'elles apparaissent dans le schéma.

Il existe différents types de conditions aux limites : Dirichlet et Neumann à titre d'exemples[28][21].

On se place sur le segment $[0, L]$ que l'on discrétise à l'aide d'une grille définie par ses sommets.

$$x_n = n\Delta x \text{ avec } n \in [0, L] \text{ et } N\Delta x = L \quad (3.63)$$

On dit que Δx est le pas de la grille. L'écart entre x_n et x_{n+1} est constant. On parle de grille uniforme. On considère une fonction régulière $u : [0, L] \rightarrow \mathbb{R}$ et on note u_n la valeur de u en x_n

$$u_n = u(x_n) \quad (3.64)$$

On se place en $n = 0$ c'est à dire $x_n = 0$. Nous remarquons que la grille ne contient pas de points à gauche de x_n . Il n'est pas donc possible de considérer une différence centrée pour approcher $u'(0)$. Nous devons donc utiliser une différence décentrée à droite

$$u'(0) \simeq \frac{u_1 - u_0}{\Delta x}. \quad (3.65)$$

Nous avons donc trois types possible de conditions aux limites[28] :

- Condition de Dirichlet : $u(0) = \alpha$. C'est la plus facile à discrétiser. Elle s'écrit tout simplement

$$u_0 = \alpha \quad (3.66)$$

- Condition de Neumann : $u'(0) = \alpha$

$$\frac{u_1 - u_0}{\Delta x} = \alpha \text{ c'est à dire } -\frac{1}{\Delta x}u_0 + \frac{1}{\Delta x}u_1 = \alpha. \quad (3.67)$$

- Condition de Fourier : $u'(0) + \gamma u(0) = \alpha$

$$\frac{u_1 - u_0}{\Delta x} + \gamma u_0 = \alpha \text{ c'est à dire } (\gamma - \frac{1}{\Delta x})u_0 + \frac{1}{\Delta x}u_1 = \alpha. \quad (3.68)$$

On se place en $n = N$ c'est à dire $x_n = L$. Nous ne disposons pas cette fois-ci de points de grille à droite de x_n . Il nous faut une différence finie décentrée à gauche pour approcher $u'(L)$

$$u'(L) \simeq \frac{u_N - u_{N-1}}{\Delta x} \quad (3.69)$$

Il nous faut encore discrétiser les trois types de conditions à la limite :

- Condition de Dirichlet : $u(L) = \beta$.

$$u_n = \beta. \quad (3.70)$$

- Condition de Neumann : $u'(L) = \beta$

$$\frac{u_N - u_{N-1}}{\Delta x} = \beta \text{ c'est à dire } -\frac{1}{\Delta x}u_{N-1} + \frac{1}{\Delta x}u_N = \beta. \quad (3.71)$$

- Condition de Fourier : $u'(L) + \delta u(N) = \alpha$

$$\frac{u_N - u_{N-1}}{\Delta x} + \delta u_{N-1} = \beta \text{ c'est à dire } (\delta - \frac{1}{\Delta x})u_{N-1} + \frac{1}{\Delta x}u_N = \beta. \quad (3.72)$$

3.2.6 Formulation vectorielle

3.2.6.1 Forme non éliminée

Les $N + 1$ valeurs $u(x_n)$ de la solution ont été approchées par u_n . Nous avons discrétisé l'équation principale et les conditions aux limites et avons obtenu un système de $N + 1$ équations affines reliant ces u_n [17]. Nous mettons maintenant ces équations sous la forme :

$$AU = l \quad (3.73)$$

avec $A \in \mathbb{R}^{(N+1) \times (N+1)}$, $U = \mathbb{R}^{N+1}$ et $l = \mathbb{R}^{N+1}$.

La première ligne ($n = 0$) de (3.73) contient, suivant la condition à la limite en $x = 0$, soit (3.66), soit (3.67) soit (3.68).

La dernière ligne ($n = N$) de (3.73) contient suivant la condition à la limite soit (3.70), soit (3.71), soit (3.72).

Exemple 3.2.1. Nous allons montrer la matrice A et le terme source l du problème suivant :

$$\begin{cases} -u''(x) + u(x) = 1, & x \in [0, L], \\ u(0) = 2, \\ u'(L) = 3. \end{cases} \quad (3.74)$$

La discrétisation sur une grille uniforme prend la forme suivante :

$$\begin{cases} u(0) = 2, \\ -\frac{u_{n-1} - 2u_n + u_{n+1}}{\Delta x^2} + u_n = 1, \text{ pour } n = 1 \text{ à } N-1 \\ \frac{u_N - u_{N-1}}{\Delta x} = 3. \end{cases} \quad (3.75)$$

ou sous forme ordonnée :

$$\begin{cases} u(0) = 2, \\ -\frac{1}{\Delta x^2}u_{n-1} + \left(\frac{2}{\Delta x^2} + 1\right)u_n - \frac{1}{\Delta x^2}u_{n+1} = 1, \text{ pour } n = 1 \text{ à } N-1 \\ -\frac{1}{\Delta x}u_{N-1} + \frac{1}{\Delta x}u_N = 3. \end{cases} \quad (3.76)$$

Nous identifions maintenant avec (3.73) qui s'écrit sous sa forme développée :

$$\sum_{i=0}^N A_{n,i} u_i = l_n, \quad \text{pour } n=0 \text{ à } N. \quad (3.77)$$

On obtient donc :

$$U = \begin{bmatrix} u_0 \\ u_1 \\ \vdots \\ u_{N-1} \\ u_N \end{bmatrix}, l = \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \\ 3 \end{bmatrix} \quad (3.78)$$

et

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \\ -\frac{1}{\Delta x^2} & \frac{2}{\Delta x^2} + 1 & -\frac{1}{\Delta x^2} & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & -\frac{1}{\Delta x^2} & \frac{2}{\Delta x^2} + 1 & -\frac{1}{\Delta x^2} & 0 & \cdots & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 & -\frac{1}{\Delta x^2} & \frac{2}{\Delta x^2} + 1 & -\frac{1}{\Delta x^2} \\ 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 & -\frac{1}{\Delta x} & \frac{1}{\Delta x} \end{bmatrix}. \quad (3.79)$$

3.2.6.2 Forme éliminée

Nous remarquons que la première et la dernière ligne de A n'ont pas la même structure que les lignes centrales de cette matrice. Afin de corriger cette propriété, qui peut être gênante lors de l'inversion numérique nous éliminons les inconnues u_0 et u_N par simple opérations algébriques. Reprenons les deux premières lignes de (3.76)

$$\begin{cases} u(0) = 2, \\ -\frac{1}{\Delta x^2}u_0 + \left(\frac{2}{\Delta x^2} + 1\right)u_1 - \frac{1}{\Delta x^2}u_2 = 1. \end{cases} \quad (3.80)$$

En éliminant u_0 , on a :

$$\left(\frac{2}{\Delta x^2} + 1\right)u_1 - \frac{1}{\Delta x^2}u_2 = 1 + \frac{2}{\Delta x^2}. \quad (3.81)$$

De même, en partant des deux dernières lignes de (3.76)

$$\begin{cases} -\frac{1}{\Delta x^2}u_{N-2} + \left(\frac{2}{\Delta x^2} + 1\right)u_{N-1} - \frac{1}{\Delta x^2}u_N = 1, \\ -\frac{1}{\Delta x}u_{N-1} + \frac{1}{\Delta x}u_N = 3. \end{cases} \quad (3.82)$$

En éliminant u_N , on a :

$$-\frac{1}{\Delta x^2}u_{N-2} + \left(\frac{1}{\Delta x^2} + 1\right)u_{N-1} = 1 + \frac{3}{\Delta x}. \quad (3.83)$$

On obtient donc la formulation éliminée : $A'U' = l'$ avec

$$U' = \begin{bmatrix} u_1 \\ \vdots \\ u_{N-1} \end{bmatrix}, l' = \begin{bmatrix} 1 + \frac{2}{\Delta x^2} \\ \vdots \\ 1 + \frac{3}{\Delta x} \end{bmatrix} \text{ et}$$

$$A' = \begin{bmatrix} \frac{2}{\Delta x^2} + 1 & -\frac{1}{\Delta x^2} & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ -\frac{1}{\Delta x^2} & \frac{2}{\Delta x^2} + 1 & -\frac{1}{\Delta x^2} & 0 & \cdots & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ o & \cdots & 0 & -\frac{1}{\Delta x^2} & \frac{2}{\Delta x^2} + 1 & -\frac{1}{\Delta x^2} \\ 0 & \cdots & 0 & 0 & -\frac{1}{\Delta x^2} & \frac{1}{\Delta x^2} + 1 \end{bmatrix}. \quad (3.84)$$

Après élimination, la matrice A est symétrique.

3.2.7 La méthode du point fantôme ou virtuel

Les différences finies dans la section précédente ont approché à l'ordre 2 l'équation principale et seulement à l'ordre 1 la condition à la limite. La méthode du point fantôme ou virtuel consiste à prolonger à tout \mathbb{R} la solution du problème pour la discrétiser en utilisant une différence finie centrée lorsque la condition à la limite contient une dérivée[30]. Dans ce cas, on doit ajouter un point de la grille. Pour concrétiser, reprenons notre exemple :

A gauche nous devons approcher une condition de Dirichlet. La discrétisation de $u(0) = 2$ s'écrit :

$$u_0 = 2. \quad (3.85)$$

Cette discrétisation est exacte. Nous n'avons pas besoin de rajouter un point de grille. Afin de pouvoir discrétiser la condition à la limite $u'(L) = 3$ à l'aide d'une différence finie centrée autour de 0, nous introduisons le point de grille :

$$x_{N+1} = L + \Delta x. \quad (3.86)$$

Nous approchons $u(x_{N+1})$ par u_{N+1} . La condition $u'(L) = 3$ s'écrit :

$$\frac{u_{N+1} - u_{N-1}}{2\Delta x}. \quad (3.87)$$

Pour pouvoir fermer le système, nous devons discrétiser l'équation principale en x_n pour $n = 1$ à N .

$$-\frac{u_{n-1} - 2u_n + u_{n+1}}{\Delta x^2} + u_n = 1, \quad (3.88)$$

pour $n = 1$ à N . Pour le cas d'une formulation non éliminée avec point virtuel, on a :

$$U = \begin{bmatrix} u_0 \\ u_1 \\ \vdots \\ u_{N-1} \\ u_N \\ u_{N+1} \end{bmatrix}, \quad l = \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \\ 3 \end{bmatrix}$$

et

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \\ -\frac{1}{\Delta x^2} & \frac{2}{\Delta x^2} + 1 & -\frac{1}{\Delta x^2} & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & -\frac{1}{\Delta x^2} & \frac{2}{\Delta x^2} + 1 & -\frac{1}{\Delta x^2} & 0 & \cdots & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 & -\frac{1}{\Delta x^2} & \frac{2}{\Delta x^2} + 1 & -\frac{1}{\Delta x^2} \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 & -\frac{1}{2\Delta x} & 0 & \frac{1}{2\Delta x} \end{bmatrix}. \quad (3.89)$$

Pour une formulation éliminée avec point virtuel, il nous faut éliminer u_0 et u_{N+1} . Pour u_0 , le calcul a été déjà fait auparavant. Pour u_{N+1} , on a

$$\begin{cases} -\frac{u_{N-1}-2u_N+u_{N+1}}{\Delta x} + u_N = 1, \\ \frac{u_{N+1}-u_{N-1}}{\Delta x^2} = 3 \end{cases}. \quad (3.90)$$

Après élimination, il suit :

$$-\frac{1}{\Delta x}u_{N-1} + \left(\frac{1}{\Delta x^2} + \frac{1}{2}\right)u_N = \frac{1}{2} + \frac{3}{\Delta x}. \quad (3.91)$$

On identifie alors les matrices et les vecteurs :

$$U' = \begin{bmatrix} u_1 \\ \vdots \\ u_{N-1} \\ u_N \end{bmatrix}, l' = \begin{bmatrix} 1 + \frac{2}{\Delta x^2} \\ \vdots \\ \frac{1}{2} + \frac{3}{\Delta x} \end{bmatrix}$$

et

$$A = \begin{bmatrix} \frac{2}{\Delta x^2} + 1 & -\frac{1}{\Delta x^2} & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \\ -\frac{1}{\Delta x^2} & \frac{2}{\Delta x^2} + 1 & -\frac{1}{\Delta x^2} & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 & -\frac{1}{\Delta x^2} & \frac{2}{\Delta x^2} + 1 & -\frac{1}{\Delta x^2} \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 & 0 & -\frac{1}{\Delta x^2} & \frac{1}{\Delta x^2} + \frac{1}{2} \end{bmatrix}. \quad (3.92)$$

3.2.8 Notion de consistance d'un schéma numérique

On appelle erreur de consistance $e_{i,j}$ la quantité obtenue en remplaçant l'inconnue par la solution exacte dans le schéma de discrétisation, en chaque point du maillage (x_i, t_j) [28].

Le schéma est d'ordre p en temps et q en espace si l'erreur de consistance vérifie :

$$e_{i,j} = O(\Delta t^p) + O(\Delta x^q). \quad (3.93)$$

Le schéma est consistant si l'erreur de consistance tend vers zéro lorsque les pas de discrétisation tendent vers zéro. L'erreur de consistance est obtenue en remplaçant $u_{i+k,j+n}$ par $u(x_i + k\Delta x, t_j + n\Delta t)$ dans le schéma de discrétisation. Elle estime l'erreur commise par le schéma au temps t_n .

3.2.9 Théorème d'équivalence de Lax :

Pour un problème linéaire et bien posé, on a l'équivalence suivante :

Convergence \Leftrightarrow **Consistance** + **Stabilité**.

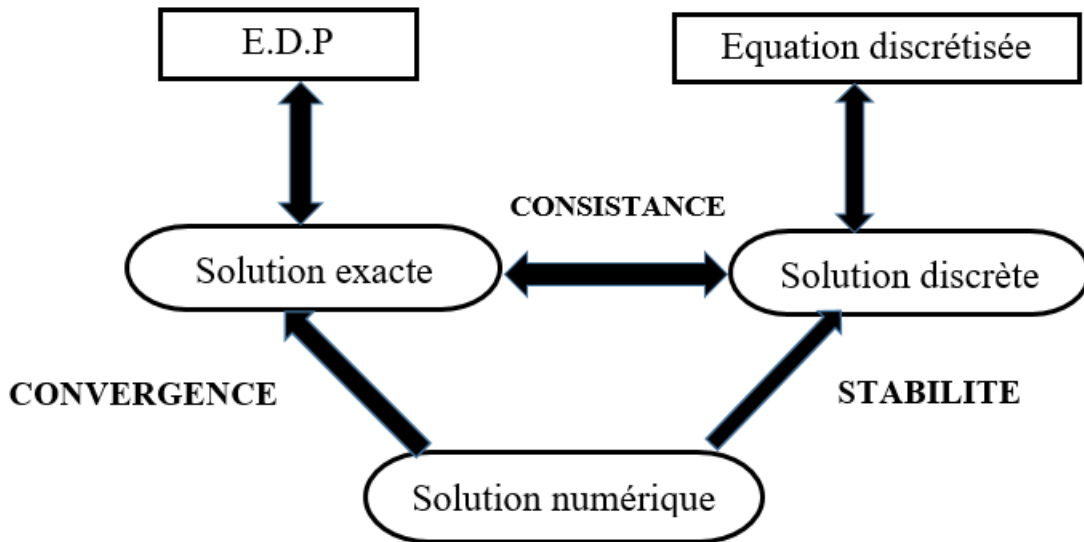


FIGURE 3.5 – Convergence, stabilité et consistance[11]

3.2.10 Stabilité

La stabilité est la propriété de contrôler toute perturbation. Elle traduit sa faculté à adopter un comportement régulier lors de l'introduction de toute perturbation due par exemple au mauvais calcul d'une condition à la limite ou d'une condition initiale. Un schéma est dit stable si toute perturbation d'origine numérique est amortie ou au mieux non amplifiée. Il sera dit instable si au contraire toute perturbation, aussi minime soit elle, est amplifiée au cours du temps ou dans l'espace.

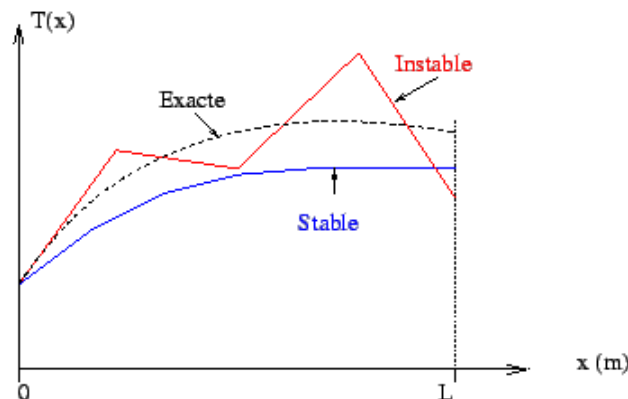


FIGURE 3.6 – Comparaison stabilité et instabilité

3.2.11 Convergence

La notion de convergence d'un schéma exprime sa propriété à tendre vers la solution exacte du problème traité pour des paramètres de maillage, tels que le nombre de noeuds tendant vers l'infini[30]. Il est possible de montrer que celle-ci est assurée sous deux conditions d'après la définition suivante :

Un schéma est dit convergent s'il est à la fois stable et consistant. Il est convergent si l'erreur globale tend vers zéro quand les pas de discrétisation tendent vers zéro.

La notion de consistance est directement reliée à l'erreur de troncature d'un schéma, à savoir l'erreur commise lors de la discrétisation des termes de dérivées[28]. Cette erreur est générée lors du choix de l'ordre de précision de la discrétisation, c'est à dire du terme à partir duquel nous négligeons le reste du développement limité :

$$T_{i+1} = T_i + \left. \frac{dT}{dx} \right|_i \Delta x + \left. \frac{d^2T}{dx^2} \right|_i \frac{\Delta x^2}{2} + \underbrace{(\dots)\Delta x^3}_{\text{Termes négligés}} . \quad (3.94)$$

L'erreur commise suite à la troncature des termes à partir d'un certain rang (2, 3, ...) est appelé erreur de troncature. Un schéma sera dit consistant si cette erreur diminue avec le pas d'approximation(x ou t)[30].

Chapitre 4

Résultats numériques et discussions

Dans ce chapitre, nous résolvons numériquement l'équation d'advection diffusion en une dimension en utilisant le langage de programmation MATLAB et nous faisons la discussion des résultats. Au début nous avons utilisé les données suivantes :

- La longueur du domaine $L = 100$;
- La concentration $C = 100$;
- Le coefficient de diffusion $D = 10^{-6}m^2/s$;
- Le coefficient d'advection $v = 10^{-7}m/s$;
- Le temps variant de 36 à 180 jours.

Par la suite nous avons varié les données et avons remarqué que les résultats changent avec les données comme le montrent les figures trouvées. En utilisant MATLAB , nous avons obtenu différents résultats des simulations pour des données aussi différents. Plusieurs cas ont été présentés. Pour question de visibilité et comme la concentration est en fonction du temps et de la distance nous présentons les résultats en deux dimensions : sur les figures, l'axe vertical représente la concentration du polluant et l'axe horizontal représente la distance et le temps apparait sur les légendes.

La concentration diminue et avec la distance et avec le temps. Plus on s'éloigne du point de départ, plus le temps augmente et plus la concentration diminue et tend vers zéro . Plus la distance est grande, plus le polluant prendra beaucoup de temps pour se répandre sur tout ce domaine d'étude.

4.1 Tableaux montrant les données utilisées dans les simulations :

TABLE 4.1 – Tableau 1

Figure numéro	Distance L	Coefficient de diffusion D en m^2/s	Coefficient d'advection v en m/s	Intervalle de temps t en jours
Figure 4.1	100	10^{-6}	10^{-7}	320 – 1600
Figure 4.2	100	10^{-6}	10^{-7}	800 – 4000

TABLE 4.2 – Tableau 2

Figure numéro	Distance L	Coefficient de diffusion D en m^2/s	Coefficient d'advection v en m/s	Intervalle de temps t en jours
Figure 4.3	300	10^{-6}	10^{-7}	320 – 1600
Figure 4.4	300	10^{-6}	10^{-7}	2800 – 14000

TABLE 4.3 – Tableau 3

Figure numéro	Distance L	Coefficient de diffusion D en m^2/s	Coefficient d'advection v en m/s	Intervalle de temps t en jours
Figure 4.5	100	10^{-4}	10^{-7}	0.2 – 1
Figure 4.6	100	10^{-4}	10^{-7}	2 – 10

TABLE 4.4 – Tableau 4

Figure numéro	Distance L	Coefficient de diffusion D en m^2/s	Coefficient d'advection v en m/s	Intervalle de temps t en jours
Figure 4.7	100	10^{-6}	10^{-6}	28 – 140
Figure 4.8	100	10^{-6}	10^{-6}	144 – 720

4.2 Simulations numériques

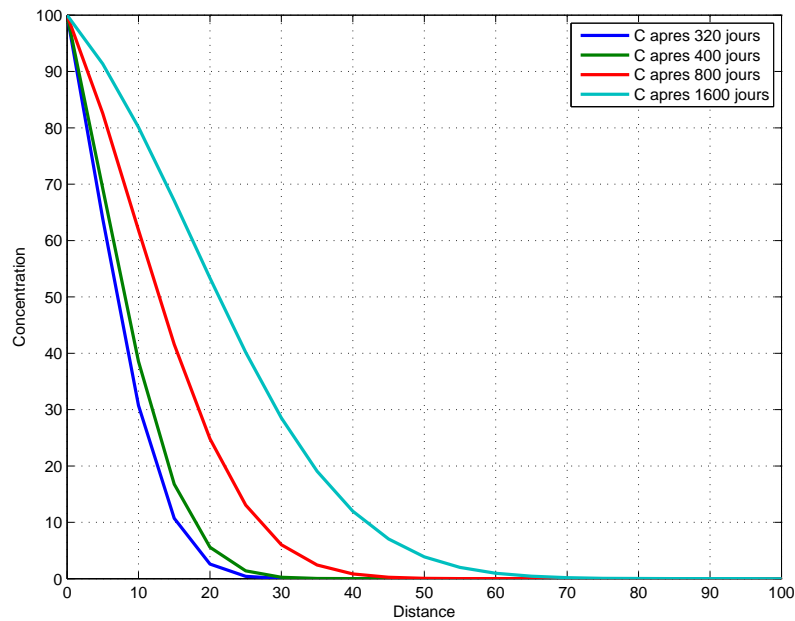


FIGURE 4.1 – Courbes montrant l'évolution de la concentration C au temps de 320, 400, 800 et 1600 jours sur une distance égale à 100, le coefficient de diffusion $D = 10^{-6}m^2/s$ et le coefficient d'advection $v = 10^{-7}m/s$.

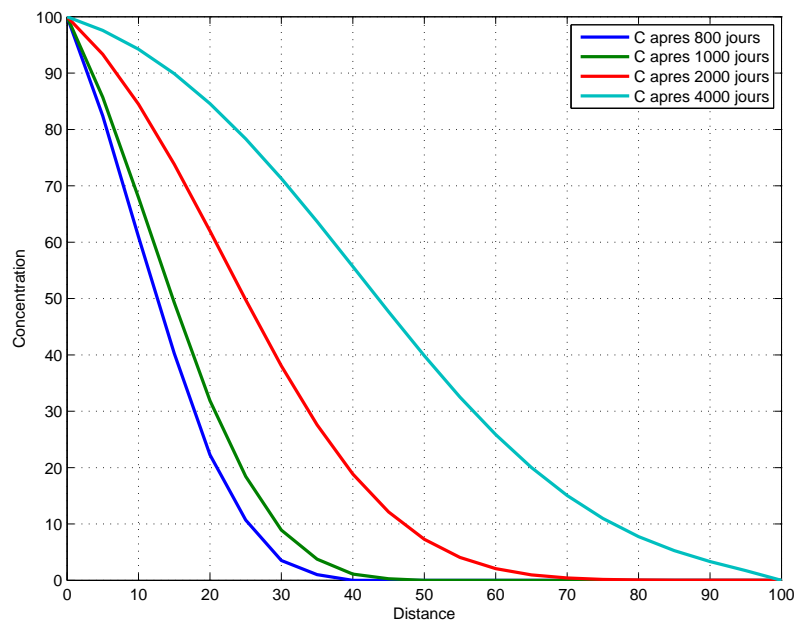


FIGURE 4.2 – Courbes montrant l'évolution de la concentration C au temps de 800, 1000, 2000 et 4000 jours sur une distance égale à 100, le coefficient de diffusion $D = 10^{-6}m^2/s$ et le coefficient d'advection $v = 10^{-7}m/s$.

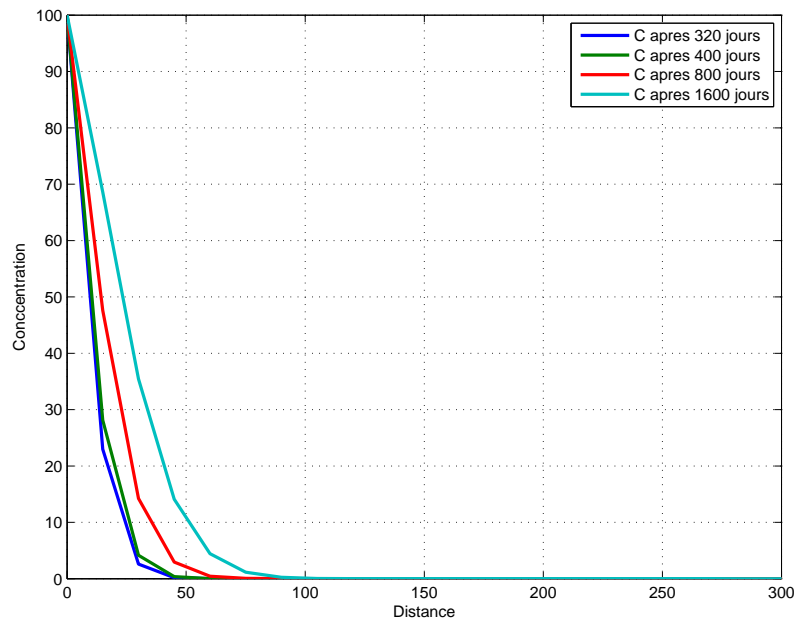


FIGURE 4.3 – Courbes montrant l'évolution de la concentration C au temps de 320, 400, 800 et 1600 jours sur une distance égale à 300, le coefficient de diffusion $D = 10^{-6}m^2/s$ et le coefficient d'advection $v = 10^{-7}m/s$.

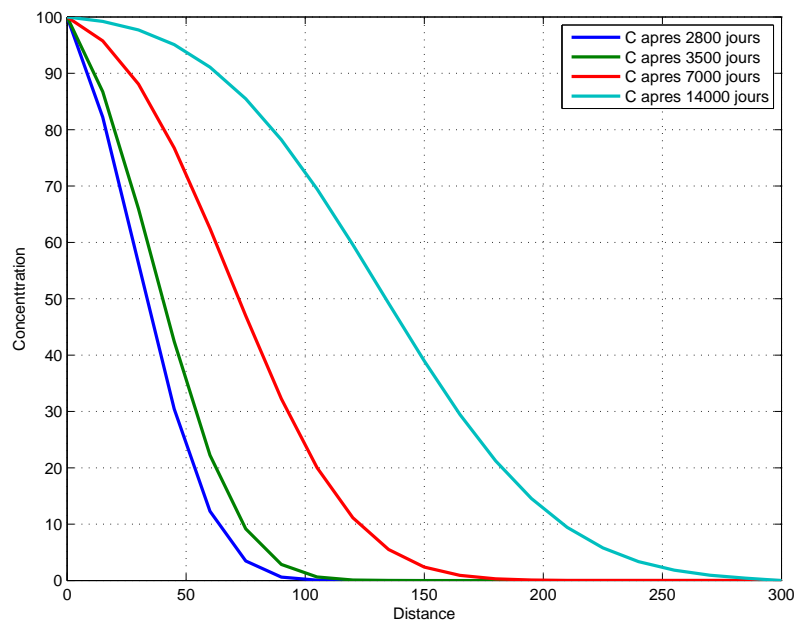


FIGURE 4.4 – Courbes montrant l'évolution de la concentration C au temps de 2800, 3500, 7000, 14000 jours sur une distance égale à 300, le coefficient de diffusion $D = 10^{-6}m^2/s$ et le coefficient d'advection $v = 10^{-7}m/s$.

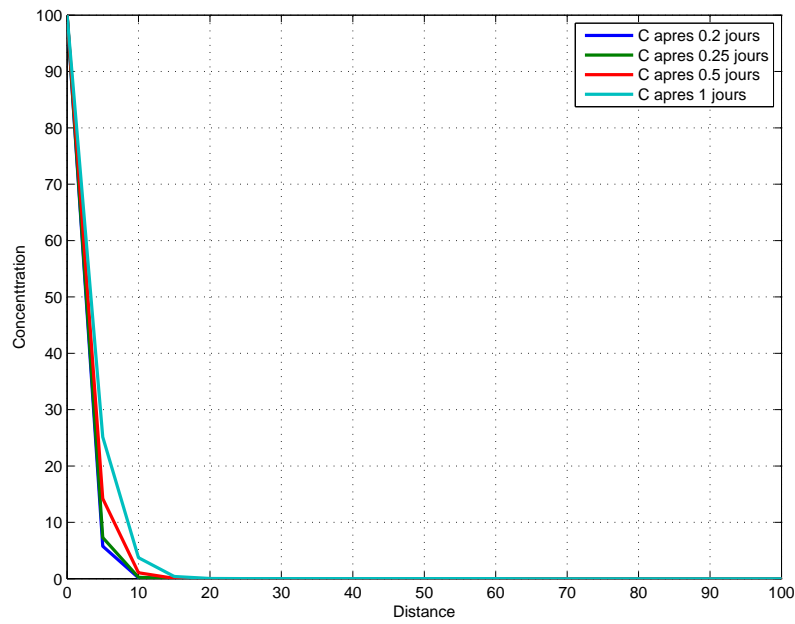


FIGURE 4.5 – Courbes montrant l'évolution de la concentration C au temps de 0.2, 0.25, 0.5 et 1 jours sur une distance égale à 100, le coefficient de diffusion $D = 10^{-4}m^2/s$ et le coefficient d'advection $v = 10^{-7}m/s$.

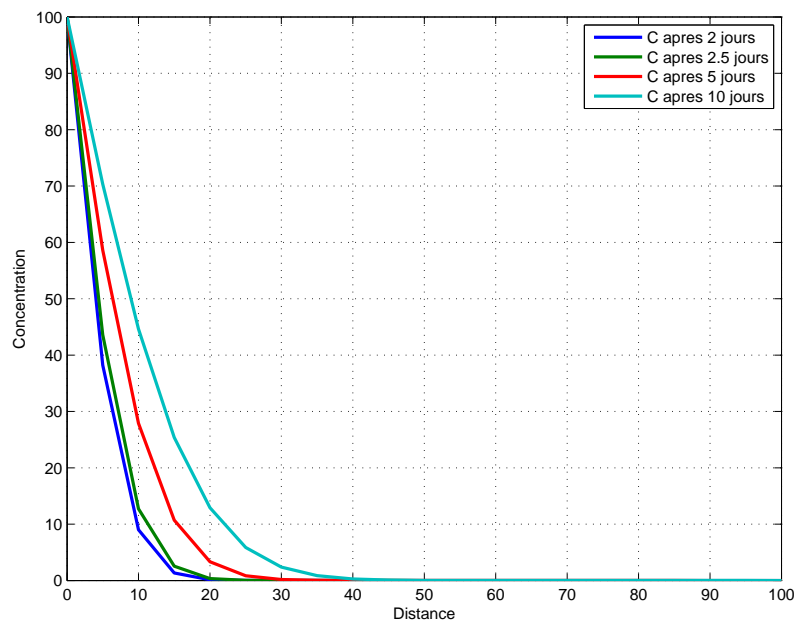


FIGURE 4.6 – Courbes montrant l'évolution de la concentration C au temps de 2, 2.5, 5 et 10 jours sur une distance égale à 100, le coefficient de diffusion $D = 10^{-4}m^2/s$ et le coefficient d'advection $v = 10^{-7}m/s$.

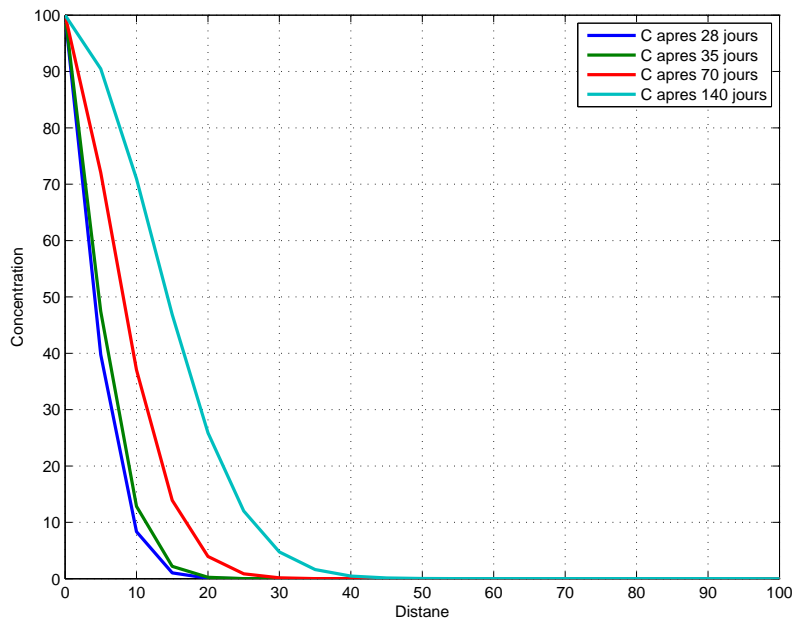


FIGURE 4.7 – Courbes montrant l'évolution de la concentration C au temps de 28, 35, 70 et 140 jours sur une distance égale à 100, le coefficient de diffusion $D = 10^{-6}m^2/s$ et le coefficient d'advection $v = 10^{-6}m/s$.

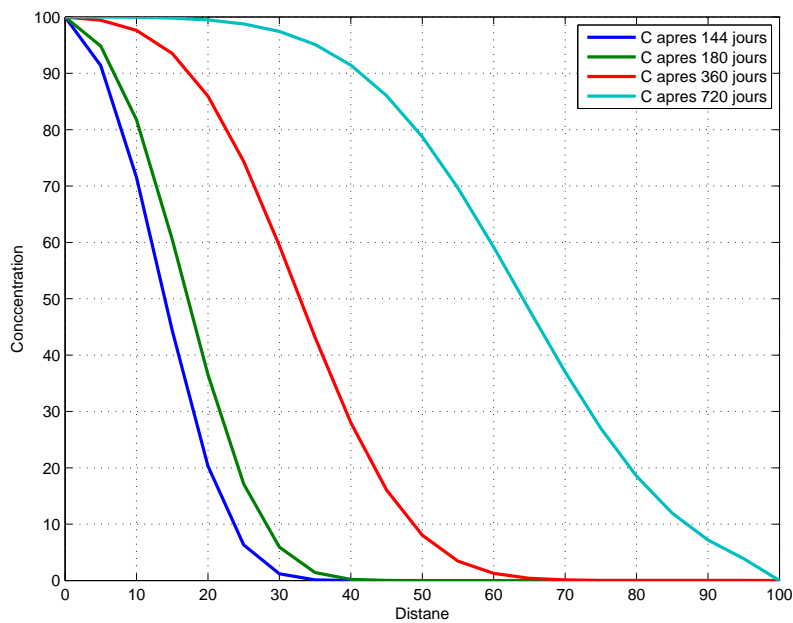


FIGURE 4.8 – Courbes montrant l'évolution de la concentration C au temps de 144, 180, 360 et 720 jours sur une distance égale à 100, le coefficient de diffusion $D = 10^{-6}m^2/s$ et le coefficient d'advection $v = 10^{-6}m/s$.

Conclusion générale et Perspectives

Notre travail a porté sur la contamination de l'eau par diffusion et advection. Nous avons tout d'abord défini quelques termes que nous avons pu utiliser dans ce travail. Nous avons montré comment est générée l'équation d'advection diffusion laquelle équation qui a été discrétisée par après en utilisant la méthode des différences finies qui repose sur la discrétisation du domaine d'étude. Nous avons par la suite fait la résolution numérique de cette équation en une dimension et en ne tenant pas compte du terme source du contaminant. Enfin, nous avons fait les simulations numériques de la concentration du polluant en utilisant la méthode des différences finies que nous avons présenté au troisième chapitre de ce travail. Les résultats trouvés sont conformes avec ceux de la littérature.

Nous avons remarqué que la concentration du polluant varie suivant le temps en un point donné. De l'autre côté, la variation de la vitesse donc du coefficient d'advection, la variation du coefficient de diffusion ainsi que le changement du domaine d'étude permettent d'obtenir différents résultats.

Cependant, notre travail n'est pas exhaustif. Les méthodes numériques que nous avons utilisées ont été considérées en une dimension et nous n'avons pas tenu compte du terme source de l'équation. Dans nos recherches futures, nous pourrions travailler sur ce sujet en utilisant cette même équation en tenant compte de son terme source. L'application d'autres méthodes de résolution numérique comme celles de volumes finis et des éléments finis nous pousserait d'aller plus loin. Les expérimentations et les résultats du laboratoire nous permettraient d'obtenir des informations complémentaires.

Bibliographie

- [1] Andallah, L.S.and Khatun, M.R, 2020. Numerical solution of advection-diffusion equation using finite difference schemes. Bangladesh Journal of Scientific and Industrial Research, vol. 55, no 1, p. 15-22.
- [2] Batoul Benkaddour, 2018. Contribution à l'étude de la contamination des eaux et des sédiments de l'Oued Chélif (Algérie). Université de Perpignan ; Université Abdelhamid Ibn Badis Mostaganem.
- [3] Benjamin Loubet,2020. Concepts pour la dispersion de polluants et particules.
- [4] Bernard Festy et al.,2003. Qualité de l'eau.
- [5] Daniela, B., Marco Túllio, V., Tiziano, T., & Bardo, B., 2012. Air pollution steady-state advection-diffusion equation : the general three-dimensional solution. Journal of Environmental Protection.
- [6] Dehghan M, 2004. Weigthed finite difference techniques for the one dimensional advection-diffusion equation. Appl Math Comput 147 : 307-19.
- [7] Dehghan M, 2004. Numerical solution of three-dimensional advection diffusion equation. Appl Math Comput 150 : 5-19.
- [8] Dehghan M, 2005. On the numerical solution of the one-dimensional convection-diffusion equation. Mathl Probl Eng 61-74.
- [9] Dehghan M, 2005. Quasi-implicit and two-level explicit finite-difference procedures for solving the one-dimensional advection equation. Appl Math Comput 167 : 46-67.
- [10] Dehghan M, 2007. Time-splitting procedures for the solution of the two dimensional transport equation. Kybernetes 36 : 791-805.
- [11] Eric Goncalvès da Silva, 2007. Méthodes et Analyse Numériques. Engineering school. Institut Polytechnique de Grenoble, pp.99.
- [12] Fattah QN, Hoopes JA, 1985. Dispersion in anistropic homogenoeous porous media. J Hydraul Eng 111 : 810-27.
- [13] Francis Albarède,2005. Advection et convection.
- [14] G Ahmed, S, 2012. "A numerical algorithm for solving advection-diffusion equation with constant and variable coefficients." The Open Numerical Methods Journal 4.1.
- [15] Guvanasen V, Volker RE, 1983. Numerical solution for solute transport in unconfined aquifers. Int J Numer Meth Fluids 3 : 103-23.
- [16] H. K Versteeg and W. Malalasekera, 1995. An introduction to computational fluid dynamics the finite volumes method.

-
- [17] Hutomo, G. D., et al, 2019. "Numerical solution of 2-d advection-diffusion equation with variable coefficient using du-fort frankel method." *Journal of Physics : Conference Series*. Vol. 1180. No. 1. IOP Publishing.
- [18] Isenberg J, Gutfinger C, 1972. Heat transfer to a draining film. *Int J Heat Transfer* 16 : 505-12.
- [19] Kansa EJ, 1990. Multiquadrics :a scattered data approximation scheme with application to computational fluid-dynamics. *Comput Math Appl* 19 : 147.
- [20] Kusuma J, Ribal A, Mahie A G, and Aris N , 2017. On pollution distribution on unhas lake using two-dimension advection-diffusion equation *Far East J. Math. Sci. (FJMS)*. 101(8) 1721-1729
- [21] Medaouar Walid, 2012. Simulation numérique du phénomène d'advection et de diffusion de la concentration d'un polluant dans un écoulement permanent bidimensionnel par la méthode des volumes finis. Université Hassiba Benbouali de Chlef.
- [22] Morton KW, 1996. Numerical solution of convection-diffusion equation. London : Chapman & Hall.
- [23] Nicolle-Mir L, 2013. Mot à mot – Polluant et contaminant. *Environ Risque Sante*
- [24] NSABIMANA Jean Baptiste ,2016. Développement durable comme fondement des générations futures : cas de la préservation du lac Tanganyika.
- [25] Park NS, Liggett JA, 1990. Taylor-least-squares finite element for two dimensional advection-dominated unsteady advection-diffusion problems. *Int J Numer Meth In Fluids* 11 : 21-38.
- [26] Parlange JY, 1980. Water transport in soils. *Ann Rev Fluids Mech* ; 2 : 77-102.
- [27] Prieto F U, Muñoz J J and Corvinos L G, 2011. Application of the generalized finite difference method to solve the advection-diffusion equation *J. Comput. Appl. Math.* 235 1849-1855
- [28] Raphaële Herbin, 2011. Analyse numérique des équations aux dérivées partielles. Engineering school. Cours de Master, Université de Marseille.
- [29] Salmon JR, Liggett JA, Gallager RH, 1980. Dispersion analysis in homogeneous lakes. *Int J Numer Meth Eng* 15 : 1627-42.
- [30] Sébastien Tordeux et Victor Péron, 2020. La méthode des différences finies-Analyse numérique. Cours Maser 1 MMS, Université de PAU.
- [31] Singh KM, Tanaka M, 2000. On exponential variable transformation based boundary element formulation for advection-diffusion problems. *Eng Anal Bound Elem* 24 : 225-35.
- [32] Skoog, D. A., West, D. M., Holler, F. J., & Crouch, S. R., 2013. *Fundamentals of analytical chemistry*. Cengage learning.
- [33] Stanislaw Manikowski, Lothar Gundling, 2000. Lutte contre la pollution et autres mesures pour protéger la biodiversité du lac Tanganyika. *Projet RAF/92/G32*.
- [34] Suthan S. Suthersan, 1996. "Remediation engineering : design concepts", CRC Press.
- [35] Thomas JW, 1995. Numerical partial differential equations : finite difference methods. Berlin, New York : Springer-Verlag .

- [36] Westerink JJ, Shea D, 1989. Consistent higher higher degree Petrov- Galerkin methods for solution of the transient convection-diffusion equation. *Int J Numer Meth Eng* 29 : 1077-101.
- [37] Zlatev Z, Berkowicz R, Prahm LP, 1984. Implementation of a variable stepsize variable formula in the time-integration part of a code for treatment of long-range transport of air pollutants. *J Comp Phys* 55 : 278-301.