1 Programmes et librairies

Les programmes principaux sont: `thermique.f` (Crank-Nicholson), `thermiqueer2.f` (Euler retardé d'ordre 2), `thermiqueer3.f` (Euler retardé d'ordre 3) et `thermiqueer4.f` (Euler retardé d'ordre 4).
Les diverses subroutines dont ces programmes ont besoin sont dans les répertoires `LIB`, `LIB_ER2`, `LIB_ER3` et `LIB_ER4`.

- `LIB` contient le gros des subroutines nécéssaires à la résolution.
- `LIB_ER2`, `LIB_ER3` et `LIB_ER4` contiennent respectivement les subroutines supplémentaires spécifiques aux codes `thermiqueer2.f`, `thermiqueer3.f` et `thermiqueer4.f`.

D'après les tests, le meilleur compromis précision/temps de calcul est obtenus en utilisant l'ordre 3 (thermiqueer3.f).

2 Paramètres (fichiers data)

Une fois les librairies de subroutines constituées (et le programme compilé avec ces dernières), il n'y a plus qu'à executer le programme.

Le fichier `data` contient les paramètres du problème; il n'est pas lu directement par le programme, il est à rediriger dans celui-ci (c.à.d: comme si un utilisateur entrait, au clavier, les valeurs).
Les fichiers `data2D.er2, data3D.er2, ...` sont donnés en exemple; `data2D` et `data3D` pour des géométries bi- ou tri-dimensionnelles, les suffixes `.cn`, `.er2`, `.er3` ...font référence aux programmes auquels ils sont destinés.

Exemple (fichier `data2D.er3`)

```
13                  /* IDSKR FICHIER DE LECTURE (0=rien,13=fort.13)
23                  /* IDSKW FICHIER D'ECRITURE (0 OU 23=oui:22/24)
2.d-5               /* DT     PAS DE TEMPS
500000              /* NDT  NOMBRE TOTAL D'ITERATIONS
10                  /* IFPRT FREQ. ECRITURE SORTIE STANDARD
10                  /* IFDSK   FREQ. ECRITURE DES HISTORIQUES (FORT.98)
2                   /* NDIM NB DE DIMENSIONS DE L'ESPACE PHYSIQUE
0                   /* NPER  NB DE DIMENSIONS PERIODIQUES
1                   /* NNONV   NB VARIABLES NON VITESSE
80                  /* N(1)   FREQ. DE COUPURE   DIRECTION X
0.5d0               /* AL(1)  DEMI-EXTENSION ESPACE PHYSIQUE
80                  /* N(2)   FREQ. DE COUPURE   DIRECTION Z
0.5d0               /* AL(2)  DEMI-EXTENSION ESPACE PHYSIQUE
1.d0 1.d0 0.d0 0.d0 0.d0 0.d0    /* EIR 1 : VAR U
1.d0 1.d0 0.d0 0.d0 0.d0 0.d0    /* EIR 2 : VAR U
1.d0 1.d0 0.d0 0.d0 0.d0 0.d0    /* EIR 1 : VAR W
1.d0 1.d0 0.d0 0.d0 0.d0 0.d0    /* EIR 2 : VAR W  ------>ABC
1.d0 1.d0 0.d0 0.d0 1.d0 0.d0    /* EIR 1 : VAR T
```

```
0.d0 0.d0 1.d0 1.d0 0.d0 0.d0      /* EIR 2 : VAR T
0.d0                               /* RE (REYNOLeS)
0.02d0                             /* PR (PRANeTL)
3.25d+5                            /* RA (RAYLEIGH)
0.e0                               /* PE (PECLET)
0.e0                               /* GR (GRASHOF)
0.e0                               /* SC (SCHMIT)
0.e0                               /* RM
1.d-8                              /* EPS critere temporel
1.d-4                              /* TCVM critere spatial
'champs.tec'                       /* nom du fichier de sortie TECPLOT
```

Description des variables et des valeurs associées:

- `IDSKR`: Numéro du fichier (binaire) de reprise (ici `fort.13`). Si `IDSKR` $= 0$, pas de fichier de reprise; le calcul est initialisé par un champ conductif: Vitesses nulles et gradiant linéaire de température).
  NB: Le numéro 13 associé ici à `IDSKR` permet au programme de savoir que le fichier de reprise contient les champs aux temps $n-1$, $n-2$ et $n-3$ (cad: le résultat d'un calcul à l'ordre 3); Si `IDSKR` $= 12$, c'est que le fichier d'initialisation est `fort.12` et ne contient que les champs aux temps $n-1$ et $n-2$ (issus d'un calcul ER2 où CN). De même, si `IDSKR` $= 14$, c'est qu'il s'agit d'un fichier `fort.14` contenant les champs aux temps $n-1$, $n-2$, $n-3$ et $n-4$ d'un calcul ER4.

- `IDSKW`: Numéro du fichier (binaire) de sauvegarde des champs. Le principe est le même que pour `IDSKR`: `IDSKW` $= 22$, 23 où 24 pour que la sauvegarde contienne les champs aux temps n, $n-1$, ...
  En fait, les sauvegardes se font de manière alternée (toutes les 500 itérations temporelles) dans des fichiers `fort.IDSKW-1` et `fort.IDSKW+1`. Dans l'exemple ci-dessus, `IDSKW` $= 23$; les fichiers de sauvegarde sont donc `fort.22` et `fort.24`. Si l'exécution du programme se termine sans problème (soit parceque le nombre d'itérations demandées `NDT` a été éffectué, soit parceque le critère de convergence temporelle `EPS` est satisfait), les fichiers de sauvegarde `fort.22` et `fort.24` seront identique. Il suffit de conserver l'un des deux (et éventuelement de le renommer `fort.13` s'il doit servir de fichier de reprise pour poursuivre les calculs).

- `DT`: Pas de temps à utiliser pour l'intégration temporelle

- `NDT`: Nombre (maximum, voir `EPS`) de pas de temps `DT` à effectuer.

- `IFPRT`: Afficher un bilan (voir sec. 3) tout les `IFPRT` pas de temps.

- `IFDSK`: Ecrire les valeurs des champs en certains points (voir sec. 3) tout les IFDSK pas de temps.

- `NDIM`: Nombre de dimensions (2 où 3) du problème.

- `NPER`: Non implémenté.
  METTRE IMPERATIVEMENT `NPER` $= 0$ **!!!**

- `NNONV`: Nombre de variables scalaires (Température, ...). Non implémenté.
  METTRE IMPERATIVEMENT `NNONV` $= 1$ **!!!**

- `N(1)`, `N(2)` (et `N(3)` si `NDIM`$=3$) : Nombre de modes suivant les directions x et z en 2D; Nombre de modes suivant les directions x, y et z en 3D. Dans les deux cas, z est la direction verticale.

- `AL(1)`, `AL(2)` (et `AL(3)` si `NDIM`$=3$) : Demi-extension dans chacune des directions (les calculs s'effectuent sur des grilles 'normalisées' sur des intervalles $[-1,1]$).

- `EIR(i)`: Conditions aux limites pour chaque variable, suivant chaque direction. les six coefficients sont, dans l'ordre: α_-, α_+, β_-, β_+, γ_- et γ_+. Les indices $-$ et $+$ font référence aux frontières en -1 et $+1$. A une frontière, on impose $\alpha C + \beta \partial_n C = \gamma$ à la variable C. Dans l'exemple ci-dessus, les valeurs des coefficient indiquent:

  - $1^{\text{ère}}$ ligne: composante U (c.à.d. suivant x) de la vitesse, aux frontières $x = \pm 1$. $\alpha_- = 1$ et $\beta_- = \gamma_- = 0 \Rightarrow U(x=-1) = 0$, $\alpha_+ = 1$ et $\beta_+ = \gamma_+ = 0 \Rightarrow U(x=+1) = 0$.
  - $2^{\text{ème}}$ ligne: composante U de la vitesse, mais aux frontières $z = \pm 1$. A nouveau, $\alpha_- = \alpha_+ = 1$ et $\beta_- = \gamma_- = \beta_+ = \gamma_+ = 0$, donc $U(x = \pm 1) = 0$.
  - $3^{\text{ème}}$ et $4^{\text{ème}}$ lignes: Idem, mais pour la composante W (c.à.d. suivant z) de la vitesse.
  - $5^{\text{ème}}$ ligne: Conditions aux frontières $x = \pm 1$ pour la température T. Ici, $\alpha_- = 1$, $\beta_- = 0$, $\gamma_- = 1 \Rightarrow T(x=-1) = 1$. De plus, $\alpha_+ = 1$, $\beta_+ = 0$, $\gamma_+ = 0 \Rightarrow T(x = -1) = 0$; la cavité est différentiellement chauffée.
  - $6^{\text{ème}}$ ligne: Conditions aux frontières $z = \pm 1$ pour la température T. $\alpha_- = \alpha_+ = 0$, $\beta_- = \beta_+ = 1$, $\gamma_- = \gamma_+ = 0 \Rightarrow \partial_n T(z = \pm 1) = 0$, les parois horizontales sont adiabatiques.

- `RE`: Non implémenté.

- `PR`: Nombre de Prandtl du fluide considéré.

- `RA`: Nombre de Rayleigh imposé.

- `PE`, `GR`, `SC`, `RM`: Non implémentés.

- `EPS`: Critère de convergence temporelle. Le calcul s'arrête si le max de la variation relative de chaque champs, en chaque point de grille, est inférieure à `EPS`$\times$`DT` (voir sec. 3).

- `TCVM`: Crière de 'convergence' spatiale. Semi implémenté. Ce n'est pas un critère d'arret du calcul, mais une évaluation des variations des champ entre l'itération intiale et le résultats final.

- `'fichier'`: nom du fichier (dans l'exemple, un fichier nommé `champs.tec`) qui, une fois la résolution terminée, contient les valeurs des variables aux points de grille pour une visualisation sous TECPLOT.

3 Sorties (champs, historiques,...)

Au cours de son exécution, le programme écrit dans des fichiers ainsi quà la sortie standard (à priori, lécran).
Les sorties dans des fichiers sont:

1. Les fichiers de sorties (alternés) binaires (voir la description de `IDSKW`, sec. 2).
2. Le(s) fichier(s) de sortie TECPLOT (voir la description de `'fichier'`, sec 2.). En 2D, il n'y en a qu'un qui contient non seulement les valeurs de U, W et T, mais aussi celles de la fonction de courant Ψ et du rotationel ω dans tout le domaine. En 3D, il y a quatre fichiers de sortie TECPLOT; le premier contient les valeurs de U, W et T dans la cavité et les trois suivant sont des 'coupes' suivant les plans médians ($x = 0$, $y = 0$ et $z = 0$)[1].
3. Le fichier d'historiques, `fort.98` en 2D ou `fort.99` en 3D. Au cours des itérations temporelles, les valeurs des champs, en un certain nombre de points de grille, sont écrites dans ce fichier. L'écriture dans ce fichier (écriture formattée, ce fichier est destiné à être lu par GNUPLOT) se fait toutes les `IFDSK` itérations. Les coordonnées des points concernés sont définis dans les subroutines `thndins.f` pour le programme `thermique.f` (CN), `thndinser2.f` pour le programme `thermiqueer2.f` (ER2), `thndinser3.f` pour le programme `thermiqueer3.f` (ER3),
`thndinser4.f` pour le programme `thermiqueer4.f` (ER4).
A titre d'exemple, la subroutine `thndinser3.f`, sous sa forme actuelle, considère (dans le cas 2D) 3 points (points 2,3 et 4) dont les positions sur la grille (i,k), où $i \in [1, N(1)+1]$ est suivant la direction x et $k \in [1, N(2)+1]$ suivant la direction z, sont: (5,5), (5,$N(2)+1-5$) et ($N(1)+1-5$,$N(2)+1-5$). Le point 2 est "près du coin en bas à gauche", le point 3 est son symétrique (par rapport au plan médian $z = 0$). Le point 4 est le symétrique du point 3 par rapport au plan $x = 0$ et donc aussi le centro-symétrique du point 2.
Le fichier d'historiques contiendra, toujour suivant cet exemple, 10 colonnes; la première contiendra le temps, les trois suivantes les valeurs de U, W et T (dans cet ordre) au point 2; suivies des valeurs de U, W et T au point 3, puis de celles au point 4.

Au cours des différentes phases de l'execution du programme, un certain nombre d'informations sont envoyés à la sortie standard (l'écran, par défaut):

- A l'initialisation du calcul:
Les valeurs des différents paramètres lus dans un fichier de reprise, les positions des points de grille d'où seront extraits les historiques, ainsi qu'un bilan sur les positions et valeurs des maximums de chacun des champs dans le domaine (dans le cas d'un calcul à partir d'un fichier de départ évidement).
- En cours d'exécution:
Lors de l'execution, un bilan semi-continu (voir `IFPRT`, sec. 2) affiche (sur deux lignes légèrement redondantes): Ce qui donne, par exemple:

450	9.000E-03	4.34689E+01	1.91105E+01	4.48298E+01	1.67176E+01	1.00000E+00	2.49811E+00
450	9.000E-03	4.34689E+01	2.59612E+04	4.48298E+01	9.90939E+04	1.00000E+00	8.50355E+00
460	9.200E-03	4.36092E+01	1.90311E+01	4.47712E+01	1.69768E+01	1.00000E+00	2.49908E+00
460	9.200E-03	4.36092E+01	9.30773E+04	4.47712E+01	1.34749E+07	1.00000E+00	8.40861E+00
470	9.400E-03	4.37458E+01	1.89087E+01	4.47124E+01	1.71712E+01	1.00000E+00	2.49779E+00
470	9.400E-03	4.37458E+01	8.71151E+04	4.47124E+01	1.36399E+05	1.00000E+00	8.31376E+00

[1] En fait, ce sont les plans passant par les points milieux des grilles suivant chaque direction; Ces derniers ne sont positionnés en $x = 0$, $y = 0$ et $z = 0$ que si les grilles sont constituées d'un nombre impair de points (c.à.d si `N(1)`, `N(2)` et `N(3)` sont pairs).

Dans l'ordre, les colonnes indiquent:
Le nombre d'itérations effectuées (ici 450,460,470, ...), le temps équivalent, et des couples de valeurs {maximum du champ, variation du champ} pour chacune des trois variables U, W et T.
La différence entre deux lignes relatives au même nombre d'itérations est dans le calcul de la variation du champs:

- Sur la première ligne, il s'agit de la variation absolue $\delta_a C$ du champ:

$$\delta_a C = \frac{Max\{|C(n) - C(n-1)|\}}{Max\{|C(n)|\} \times \delta t}$$

- Sur la deuxième ligne, il s'agit de la variation relative $\delta_r C$ du champ:

$$\delta_r C = Max\left\{\left|\frac{C(n) - C(n-1)}{C(n) \times \delta t}\right|\right\}$$

NB: Ce sont les δ_r qui sont considérés pour le test de convergence temporelle (voir la description de `EPS`, sec. 2).

- En fin d'exécution:
  Sont précisés, dans cet ordre:
  - Si le critère de convergence a été satisfait,
  - Les valeurs des divergence, norme de la vitesse et divergence relative (ratio des précédents),
  - Les positions et valeurs des maxima de chaque variable,
  - En cas de calcul initialisé par un fichier de reprise, les variations entre champs initiaux et finaux (voir la description de `TCVM`, sec. 2),
  - En cas de calcul 2D, les valeurs maximales de la fonction de courant et du rotationel,
  - le(s) nom(s) de(s) fichier(s) de sortie TECPLOT (voir la description de `'fichier'`, sec. 2).