Mini-Projet d'analyse numérique
Effets du courant sur la dispersion d'un polluant

Proposé par Ludovic Sacchelli
ludovic.sacchelli@polytechnique.edu

L'objectif de ce projet est d'étudier l'évolution d'un polluant d'abord déversé dans un fleuve, puis dans l'océan lorsque le fleuve s'y jette. Le fleuve et l'océan sont deux milieux soumis à des courants et nous cherchons à en observer les effets sur la dispersion du polluant. On se propose donc de modéliser l'évolution de la concentration du polluant $u = u(t, x)$ au temps t et à la position $x \in \mathbb{R}^d$, $d = 1, 2$, par une équation de convection-diffusion

$$\begin{cases} \dfrac{\partial u}{\partial t} + V \cdot \nabla u - \nu \Delta u = f, \\ u\big|_{t=0} = u_0. \end{cases} \tag{1}$$

Ici V est la vitesse de convection du polluant, représentant la vitesse du courant et qui peut donc dépendre de la position et du temps, ν est son coefficient de diffusion, f en est la source et u_0 en est la concentration initiale.

La partie 1 du problème est consacrée à l'étude du cas $d = 1$, lorsque le polluant s'écoule dans un fleuve modélisé comme uni-dimensionnel. La partie 2 est quant à elle consacrée à $d = 2$, lorsque le polluant est rejeté à l'embouchure du fleuve dans un océan modélisé comme un milieu de dimension 2.

1 Évolution de la concentration de polluant dans le fleuve

On cherche à simuler l'évolution d'un polluant déversé dans un cours d'eau via des schémas aux différences finies. Afin d'observer le comportement de différents schémas on étudie dans un premier temps l'équation de convection dont on peut aisément calculer des solutions explicites.

1.1 Équation de convection uni-dimensionnelle

Nous simplifions le problème en négligeant les termes de diffusion et de source ($\nu = 0$ et $f = 0$), ainsi qu'en supposant la vitesse constante et positive, $V > 0$. On obtient alors l'équation de convection

$$\begin{cases} \dfrac{\partial u}{\partial t}(t, x) + V \dfrac{\partial u}{\partial x}(t, x) = 0, & \forall x \in \mathbb{R}, \forall t > 0, \\ u(t = 0, x) = u_0(x) & \forall x \in \mathbb{R}. \end{cases} \tag{2}$$

On suppose que u_0 est de classe C^1 sur $\mathbb{R}$. Dans ce cas on peut résoudre explicitement l'équation (2) via la méthode des caractéristiques. On cherche une fonction $X(t)$ telle que u soit constante le long des courbes caractéristiques $t \mapsto (t, X(t))$. Pour u solution de (2) on pose alors $\Phi(t) = u(t, X(t))$.

Q1 Calculer la dérivée de Φ. En déduire la forme des courbes caractéristiques. Que peut-on en déduire sur l'existence de solutions ? Que peut-on dire en ce qui concerne l'unicité ?

Nous allons donc pouvoir comparer les solutions explicites avec des résolutions numériques obtenues par différences finies. Pour résoudre numériquement cette équation, nous allons nous borner à un intervalle d'espace $[0, L]$ et de temps $[0, T]$, avec une condition initiale à support dans $[0, L]$. On note alors

— Δt le pas de discrétisation en temps ;

— Δx le pas de discrétisation en espace ;
— $N = \frac{L}{\Delta x} - 1$ la taille de la maille ;
— $t^n = n\Delta t$ et $x_j = j\Delta x$ les coordonnées des points de la maille ;
— u_j^n l'approximation de $u(t^n, x_j)$;
— $U^n = (u_j^n)_{1\leq j\leq N}$ le vecteur approchant $u(t^n, \cdot)$.

On impose dans un premier temps les conditions au bord de Dirichlet $u_0^n = u_{N+1}^n = 0$ pour tout $n \in \mathbb{N}$.

Dans les questions **Q2** à **Q4**, on pourra accomplir les applications numériques avec $L = 50$, $T = 5$, $V = 1$, $\nu = 1$, $\Delta x = 0.1$, $\Delta t = 0.025$ et la condition initiale $u_0 = f_{x_0,\sigma}$ pour

$$f_{x_0,\sigma}(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}\right) \tag{3}$$

avec $x_0 = 20$ et $\sigma = 1$.

Q2 On rappelle l'expression du schéma explicite centré :

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + V\frac{u_{j+1}^n - u_{j-1}^n}{2\Delta x} = 0.$$

Donner la matrice K_c pour laquelle U^{n+1} peut être obtenu par la relation de récurrence

$$U^{n+1} = (I_N - V\Delta t K_c)U^n$$

pour tout $n \in \mathbb{N}$. Se servir de cette relation pour tester le schéma numérique avec les paramètres numériques données et tracer une animation de U en fonction du temps. Justifier du phénomène observé.

Q3 On rappelle l'expression du schéma explicite décentré amont :

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + V\frac{u_j^n - u_{j-1}^n}{\Delta x} = 0.$$

Rappeler les conditions de convergence du schéma, ainsi que son ordre et son équation équivalente. Donner la matrice K_d pour laquelle U^{n+1} peut être obtenu par la relation de récurrence

$$U^{n+1} = (I_N - V\Delta t K_d)U^n$$

pour tout $n \in \mathbb{N}$. Se servir de cette relation pour tester le schéma numérique avec les paramètres numériques données et tracer une animation de U en fonction du temps. Illustrer la condition de stabilité du schéma.

Q4 On introduit le schéma de Crank-Nicholson

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + \frac{V}{2}\left(\frac{u_{j+1}^n - u_{j-1}^n}{2\Delta x} + \frac{u_{j+1}^{n+1} - u_{j-1}^{n+1}}{2\Delta x}\right) = 0.$$

Vérifier que U^{n+1} est donné par la relation de récurrence

$$\left((I_N + \tfrac{V\Delta t}{2}K_c\right) U^{n+1} = \left(I_N - \tfrac{V\Delta t}{2}K_c\right) U^n.$$

pour tout $n \in \mathbb{N}$. Montrer que le schéma est inconditionnellement stable en norme L^2. Calculer son ordre et son équation équivalente. Tester le schéma à l'aide de la relation de récurrence.

Q5 En imposant $\frac{V\Delta t}{\Delta x} = 0.25$, observer numériquement les ordres de convergence des schémas décentré amont et Crank-Nicholson.

1.2 Équation de convection-diffusion uni-dimensionnelle

On s'intéresse à présent à l'équation de convection-diffusion en une dimension d'espace :

$$\left\{\begin{array}{ll}\dfrac{\partial u}{\partial t}(t,x) + V\dfrac{\partial u}{\partial x}(t,x) - \nu\dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2}(t,x) = 0, & \forall x \in \mathbb{R}, \forall t > 0,\\ u(t=0,x) = u_0(x) & \forall x \in \mathbb{R}.\end{array}\right. \tag{4}$$

Dans les mêmes conditions que la section précédente, on utilise le schéma de Crank-Nicholson

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + \frac{V}{2}\left(\frac{u_{j+1}^n - u_{j-1}^n}{2\Delta x} + \frac{u_{j+1}^{n+1} - u_{j-1}^{n+1}}{2\Delta x}\right) - \frac{\nu}{2}\left(\frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{2\Delta x} + \frac{u_{j+1}^{n+1} - 2u_j^{n+1} + u_{j-1}^{n+1}}{2\Delta x}\right) = 0.$$

Q6 Calculer la matrice A pour laquelle U^{n+1} peut être obtenu par la relation de récurrence

$$\left(I_N + \tfrac{V\Delta t}{2}K_c - \tfrac{\nu\Delta t}{2}A\right)U^{n+1} = \left(I_N - \tfrac{V\Delta t}{2}K_c + \tfrac{\nu\Delta t}{2}A\right)U^n.$$

pour tout $n \in \mathbb{N}$. Tester le schéma pour $\nu = 1$. Qu'observe-t-on si on reprend cette simulation avec $T = 10$.

Le comportement observé à la sortie ($x = L$) n'est pas le comportement attendu pour une solution définie sur $\mathbb{R}$. On choisit donc d'utiliser en $x = L$ des conditions de type Neumann homogène qui reviennent à imposer

$$\frac{u_{N+1} - u_N}{\Delta x} = 0.$$

Q7 Modifier les matrices K_c et A pour tenir compte de ces nouvelles conditions et reprendre la simulation une fois ces modifications apportées.

Afin de simuler l'action d'une usine déversant un polluant on suppose que la concentration de polluant à $t = 0$ est nulle et on introduit un terme de source $f(t,x)$.

$$\left\{\begin{array}{ll}\dfrac{\partial u}{\partial t}(t,x) + V\dfrac{\partial u}{\partial x}(t,x) - \nu\dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2}(t,x) = f(t,x), & \forall x \in \mathbb{R}, \forall t > 0,\\ u(t=0,x) = 0 & \forall x \in \mathbb{R}.\end{array}\right. \tag{5}$$

Q8 A l'aide d'une discrétisation $f_j^n = f(t_n, x_j)$ de f, modifier le schéma de Crank-Nicholson pour tenir compte du terme source. Modifier l'équation de récurrence obtenue en question **Q6** en conséquence et tester numériquement le schéma avec pour terme source $f(t,x) = f_{x_0,\sigma}(x)$. Pour simuler l'action d'une usine ne fonctionnant qu'en journée, tester le schéma avec

$$f(t,x) = \left\{\begin{array}{ll} f_{x_0,\sigma}(x) & \text{si } \lfloor t \rfloor \text{ est pair},\\ 0 & \text{si } \lfloor t \rfloor \text{ est impair}.\end{array}\right.$$

2 Évolution de la concentration de polluant dans l'océan

Une fois que l'eau polluée du fleuve atteint l'océan, l'équation uni-dimensionnelle ne convient plus pour modéliser le milieu, mais on peut encore négliger la profondeur de l'océan et étudier l'équation de convection diffusion en dimension 2. On cherche toujours à employer des schémas de type Crank-Nicholson pour leur bonnes propriétés mais leur caractère implicite nous impose un travail préliminaire.

2.1 Discrétisation du Laplacien en dimension 2

On cherche à simuler via différences finies une fonction $u(x, y)$ solution de l'équation de Laplace

$$\begin{cases} -\Delta u(x,y) = f(x,y), & \forall (x,y) \in \Omega =]0, L[\times]0, L[, \\ u(x,y) = 0 & \forall (x,y) \in \partial\Omega. \end{cases} \tag{6}$$

Pour résoudre numériquement cette équation, nous utilisons alors

- h le pas de discrétisation en espace commun aux deux directions ;
- $N = \frac{L}{h} - 1$ la taille de la maille ;
- $x_i = ih$ et $y_j = jh$ les coordonnées des points de la maille, $0 \leq i, j \leq N+1$;
- $u_{i,j}$ l'approximation de $u(x_i, y_j)$;
- $f_{i,j} = f(x_i, y_j)$ la discrétisation de f aux points de la maille

On utilise pour calculer les $(u_{i,j})_{1\leq i,j\leq N}$ le schéma aux différence finies

$$-\frac{u_{i-1,j} - 2u_{i,j} + u_{i+1,j}}{h^2} - \frac{u_{i,j-1} - 2u_{i,j} + u_{i,j+1}}{h^2} = f_{i,j}, \qquad 1 \leq i, j \leq N.$$

On introduit le vecteur U de taille N^2 qui est donné par la concaténation des lignes de la matrice $(u_{i,j})_{1\leq i,j\leq N}$:

$$U_{(i-1)N+j} = u_{i,j} \text{ pour } 1 \leq i, j \leq N.$$

Q9 Calculer la matrice A et le vecteur b pour lesquels U est solution du système linéaire

$$-AU = b.$$

Utiliser ce système pour résoudre numériquement l'équation de Laplace avec un terme source bien choisi permettant de comparer la résolution numérique et la solution exacte. Rappeler l'ordre de convergence du schéma et l'observer numériquement.

2.2 Équation de convection diffusion bi-dimensionnelle

Nous pouvons à présent simuler le comportement de la concentration de polluant lorsqu'il est déversé dans l'océan par le fleuve. On modélise son évolution par l'équation de réaction diffusion sur un domaine $\Omega =]0, L[\times]0, L[$ avec conditions de Dirichlet au bord :

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} + V^x \frac{\partial u}{\partial x} + V^y \frac{\partial u}{\partial y} - \nu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \nu \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0, & \forall (x,y) \in \Omega,\ \forall t > 0, \\ u(t=0, x, y) = u_0(x,y), & \forall (x,y) \in \Omega, \\ u(t,x,y) = 0, & \forall (x,y) \in \partial\Omega,\ \forall t > 0. \end{cases} \tag{7}$$

Pour résoudre numériquement cette équation nous utilisons de plus

- Δt le pas de discrétisation en temps ;
- $t^n = n\Delta t$ les coordonnées du maillage temporel ;
- $u_{i,j}^n$ l'approximation de $u(t^n, x_i, y_j)$;
- $V_{i,j}^x = V^x(x_i, y_j)$ et $V_{i,j}^y = V^y(x_i, y_j)$ la discrétisation de $V = (V^x, V^y)$;
- U^n de taille N^2 donné par la concaténation des lignes de la matrice $\left(u_{i,j}^n\right)_{1\leq i,j\leq N}$, pour chaque $n \in \mathbb{N}$.

Le schéma de Crank-Nicholson correspondant s'écrit dans ce cas

$$\frac{u_{i,j}^{n+1}-u_{i,j}^{n}}{\Delta t}+\frac{V_{i,j}^{x}}{2}\left(\frac{u_{i+1,j}^{n}-u_{i-1,j}^{n}}{2\Delta x}+\frac{u_{i+1,j}^{n+1}-u_{i-1,j}^{n+1}}{2\Delta x}\right)+\frac{V_{i,j}^{y}}{2}\left(\frac{u_{i,j+1}^{n}-u_{i,j-1}^{n}}{2\Delta x}+\frac{u_{i,j+1}^{n+1}-u_{i,j-1}^{n+1}}{2\Delta x}\right)$$
$$-\frac{\nu}{2}\left(\frac{u_{i+1,j}^{n}-2u_{i,j}^{n}+u_{i-1,j}^{n}}{2\Delta x}+\frac{u_{i+1,j}^{n+1}-2u_{i,j}^{n+1}+u_{i-1,j}^{n+1}}{2\Delta x}\right)$$
$$-\frac{\nu}{2}\left(\frac{u_{i,j+1}^{n}-2u_{i,j}^{n}+u_{i,j-1}^{n}}{2\Delta x}+\frac{u_{i,j+1}^{n+1}-2u_{i,j}^{n+1}+u_{i,j-1}^{n+1}}{2\Delta x}\right)=0.$$

Q10 On suppose dans un premier temps que $V=(1,1)$. Calculer les matrices K_c^x et K_c^y pour lesquelles on a la relation de récurrence

$$\left(I_N+\tfrac{\Delta t}{2}(K_c^x+K_c^y)-\tfrac{\nu\Delta t}{2}A\right)U^{n+1}=\left(I_N-\tfrac{\Delta t}{2}(K_c^x+K_c^y)+\tfrac{\nu\Delta t}{2}A\right)U^{n}.$$

Q11 Tester le schéma pour calculer une approximation de la solution de (7) sur $[0,T]$. On effectuera les simulations avec $\nu=1$, $L=50$, $T=5$, $h=0.5$, $\Delta t=0.1$ et la condition initiale $u_0=f_{x_0,y_0,\sigma}$ pour

$$f_{x_0,y_0,\sigma}(x)=\frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}}\exp\left(-\frac{(x-x_0)^2+(y-y_0)^2}{2\sigma^2}\right)\tag{8}$$

avec $x_0=y_0=25$ et $\sigma=1$.

Q12 Afin modéliser la dispersion du polluant dans l'océan, modifier le schéma afin de prendre en compte la participation du terme source f. Pour tenir compte du changement d'échelle du problème, tester les schémas avec $\nu=0.1$, ainsi que $L=50$, $T=5$, $h=0.5$, $\Delta t=0.1$. Le terme source est donné par $f=f_{x_0,y_0,\sigma}$ avec $x_0=25$ et $y_0=0$ et $\sigma=1$, (x_0,y_0) représentant les coordonnées de l'embouchure du fleuve dans Ω.

Q13 L'objectif final du projet est d'observer les effets du courant océaniques sur la dispersion, en particulier lorsque celui-ci dépend de la position comme à proximité de l'embouchure d'un fleuve. Modifier à présent les matrices K_c^x et K_c^y pour prendre en compte la dépendance de V vis-à-vis de la position. Tester le nouveau schéma avec les données de la question précédente, pour le un coefficient de convection V donné par

$$V(x,y)=\left(\cos\left(\frac{k\pi y}{L}\right)\sin\left(\frac{l\pi x}{L}\right),\cos\left(\frac{l\pi x}{L}\right)\sin\left(\frac{k\pi y}{L}\right)\right)\qquad\forall(x,y)\in\Omega,\ (k,l)\in\mathbb{N}^2$$

qui sont toujours parallèles à $\partial\Omega$ le long de celui-ci, et observer l'évolution de la concentration sur des intervalles de temps plus grands, avec $T=50,100,500$.