

Modélisation du transport d'un polluant

Projet d'initiation à la recherche

Léo Baty, Chiheb Eddine Najjar, Nathan Godey, Régis Santet, Song Phuc Duong,
Clément Lasuen
sous la direction de
Damiano Lombardi et Sébastien Boyaval
Laboratoire INRIA

7 juin 2018

Sommaire

1 Introduction

2 Méthodes

- Champs de vitesse étudiés
- Approche eulerienne
- Approche lagrangienne
- Proper Orthogonal Decomposition

3 Résultats et interprétations

- Approche eulerienne
 - Champ de vitesse uniforme
 - Écoulements cellulaires
- Approche lagrangienne
 - Champ de vitesse uniforme
 - Écoulements cellulaires
 - Champ de vitesse de Lamb-Oseen

4 Conclusion

Introduction



FIGURE 1 – Explosion de *Deepwater Horizon*, 20/04/2010

Introduction

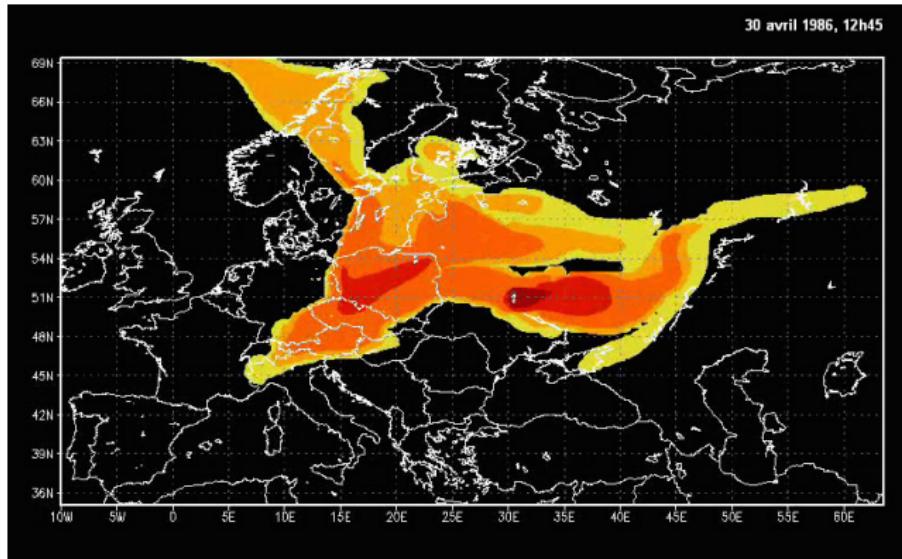


FIGURE 2 – Nuage radioactif issu de l'explosion de Tchernobyl, 30/04/1986

Introduction

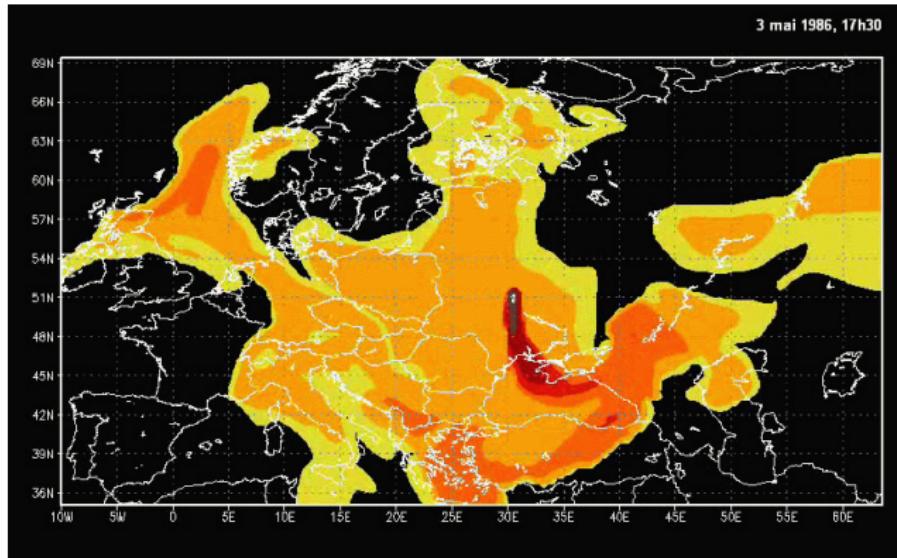


FIGURE 3 – Nuage radioactif issu de l'explosion de Tchernobyl, 03/05/1986

Réduction de modèles

27.4GB → **600MB**



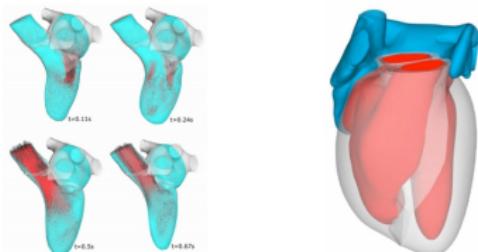
Réduction de modèles



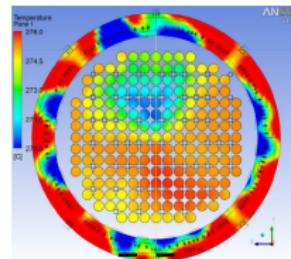
Mécanique des fluides



Thermique des bâtiments



Biomédical



Neutronique

Équation de transport

$$\partial_t c + u \cdot \nabla c = 0$$

$c(x,t)$: concentration en polluant à la position $x \in (0,1)^2 = \Omega$ à l'instant $t \in [0, T]$

u : champ de vitesse, dépend *a priori* de x et de t

Champs de vitesse étudiés

Champ de vitesse uniforme

$$\begin{cases} u_x = \|u\| \cos(\theta) \\ u_y = \|u\| \sin(\theta) \end{cases}$$

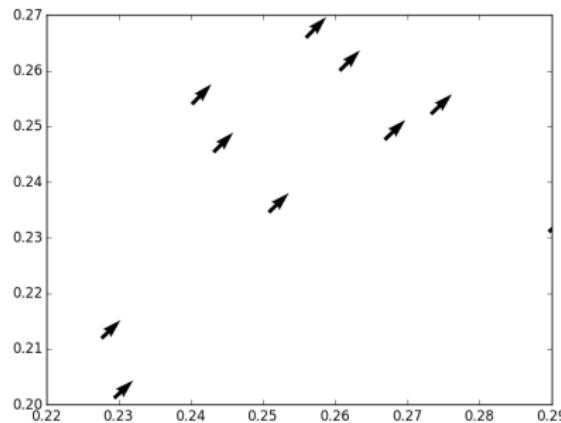


FIGURE 4 – Écoulement constant avec un angle θ

Champs de vitesse étudiés

Écoulements cellulaires

$$\psi(x, y) = \sin(2\pi x) \sin(2\pi y) + \theta_0 \cos(2\pi\theta_1 x) \cos(2\pi\theta_2 y)$$
$$\theta_0 \in [0, 2.5] \text{ et } (\theta_1, \theta_2) \in [0.5, 4]^2$$

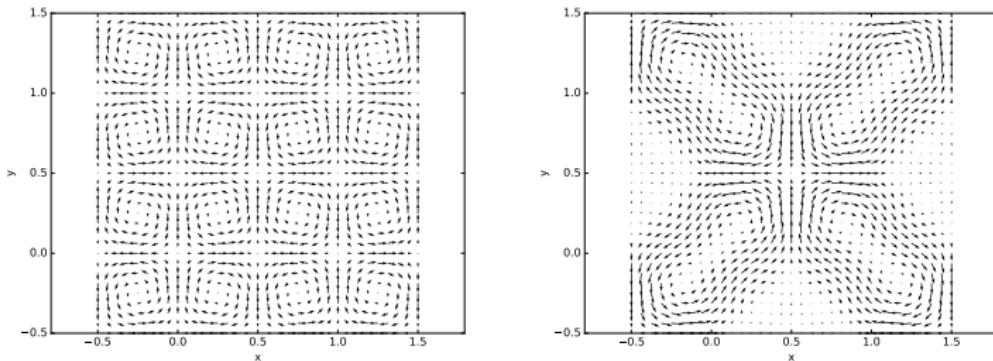


FIGURE 5 – Champs de vitesse pour deux jeux de paramètres

Champs de vitesse étudiés

Champ de vitesse de Lamb-Oseen

$$\mathbf{v}(r, \theta, t) = \frac{\Gamma}{2\pi r} \left(1 - \exp \left(\frac{-r^2}{4\nu t + r_c^2} \right) \right) \mathbf{u}_\theta$$

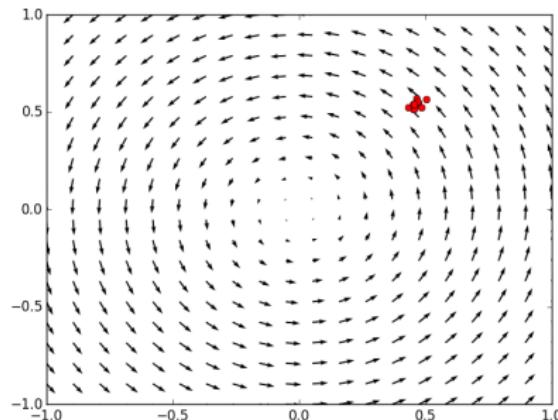


FIGURE 6 – Écoulement Lamb-Oseen

Approche eulerienne

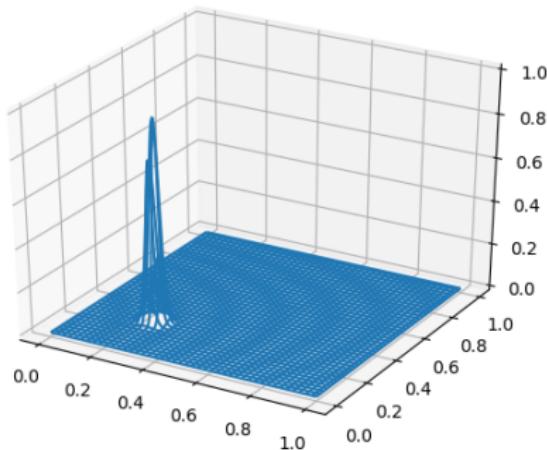


FIGURE 7 – Condition initiale...

Approche eulerienne

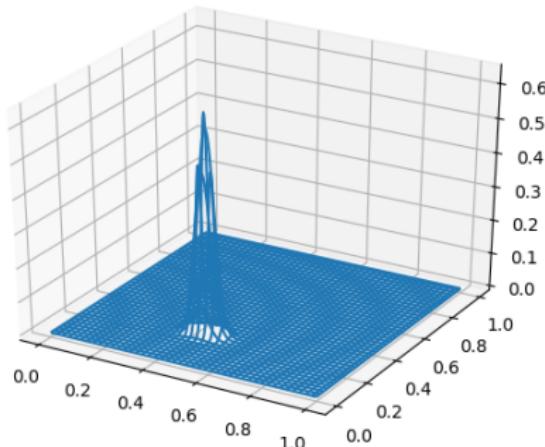


FIGURE 8 – ... et après un certain temps

Approche lagrangienne

$X(\xi, t) \in \mathbb{R}^{n \times 2}$ désigne les positions, à l'instant $t \in [0, T]$, des particules qui étaient initialement aux positions $\xi \in \mathbb{R}^{n \times 2}$

$$\begin{cases} \partial_t X = v(X(\xi, t), t) \\ X(\xi, 0) = \xi \end{cases}$$

Hypothèses

$v \in C^0(\mathbb{R}^{n \times 2} \times \mathbb{R}) \cap W^{1,\infty}(\mathbb{R}^{n \times 2} \times \mathbb{R})$

Théorème de Cauchy-Lipschitz

Existence et unicité d'une solution locale pour des temps arbitraires

Conséquence

Le transport est à vitesse finie

Approche lagrangienne

Résolution numérique

Schéma de Crank-Nicholson :

$$X^{(k+1)} = X^{(k)} + \frac{\Delta t}{2} (v(X^{(k)}, t^k) + v(X^{(k+1)}, t^{k+1}))$$

Algorithme du point fixe :

$$\left\{ \begin{array}{l} X_0^{(k+1)} = X^{(k)} \\ X_1^{(k+1)} = X^{(k)} + \Delta t v(X^{(k)}, t^k) \\ X_{r+1}^{(k+1)} = X^{(k)} + \frac{\Delta t}{2} (v(X^{(k)}, t^k) + v(X_r^{(k+1)}, t^{k+1})) \end{array} \right.$$

Approche eulerienne

Méthode des volumes finis

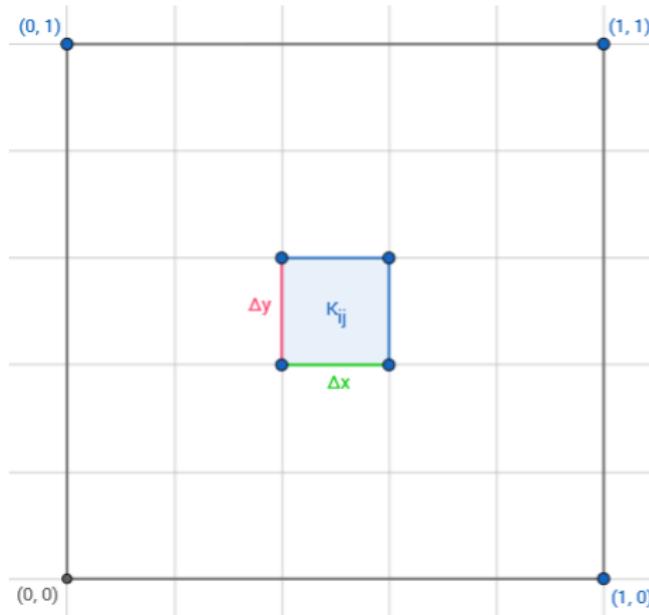


FIGURE 9 – Maillage en espace

Approche eulerienne

Méthode des volumes finis

la valeur moyenne de c sur la cellule $K_{i,j}$.

$$c_{i,j}(t) = \frac{1}{|K_{i,j}|} \int_{K_{i,j}} c(t, X) dX$$

vérifie :

$$\frac{\partial c_{i,j}}{\partial t} + \frac{1}{|K_{i,j}|} \int_{\partial K_{i,j}} c \ u \cdot n \ dL = 0$$

- Comment discréteriser la dérivation temporelle ?
- Comment discréteriser l'intégrale de bords (le flux) ?

Approche eulerienne

Méthode des volumes finis

La dérivée temporelle : Euler explicite

$$\frac{\partial c_{i,j}}{\partial t} \simeq \frac{c_{i,j}(t_n) - c_{i,j}(t_{n-1})}{t_n - t_{n-1}}$$

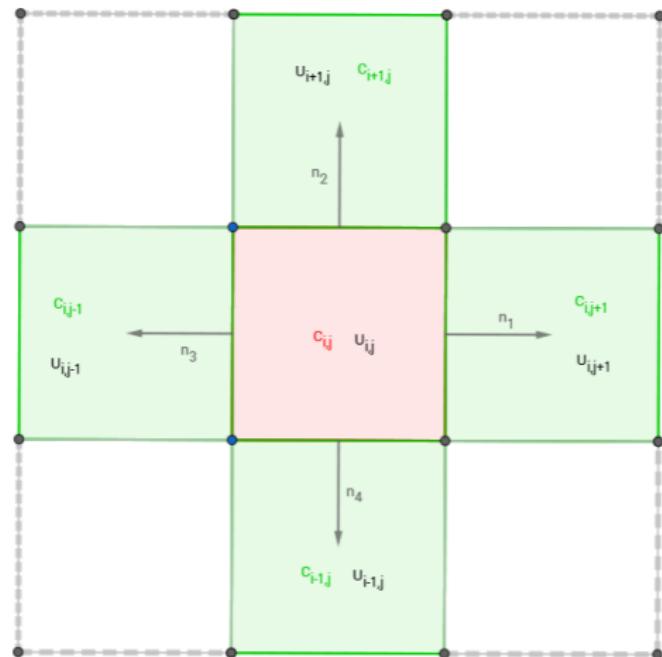
Maillage en temps : $(t_n)_{n=0}^{n_t}$ croissante, vérifiant la condition CFL :

$$t_n - t_{n-1} < \frac{h}{2\lambda(t_n)} \quad (1)$$

où $\lambda(t_n) = \max_X \{|u(t_n)|\}$, et $h = \min\{\Delta x, \Delta y\}$

Approche eulerienne

Méthode des volumes finis



Approche eulerienne

Méthode des volumes finis

Finalement on combine les 2 schémas :

$$c_{i,j}(t_n) = c_{i,j}(t_{n-1}) - \frac{\Delta t_n}{|K_{i,j}|} \sum_{\text{cotés}} |\Gamma| F_i \quad \forall n \quad (2)$$

Proper Orthogonal Decomposition

La POD

On stocke les résultats obtenus (i.e. les vecteurs $C(t_n) = (c_{ij}(t_n))$) par la méthode des volumes finis pour un champs de vitesse v_1 dans une matrice

$$M_{v_1} = (C(t_0)_{v1} | \dots | C(t_f)_{v1})$$

On répète ça pour plusieurs champs de vitesse v_i et on met tout dans une grosse matrice

$$M = (M_{v_1} | M_{v_2} | \dots | M_{v_f})$$

Décomposition en valeurs singulières : $M = UDV^T$

- Unicité de la décomposition si on impose des valeurs singulières décroissantes à D
- U, V matrices unitaires $UU^T = I$ et $VV^T = I$

Proper Orthogonal Decomposition

Modèle réduit

la base orthonormée, obtenue par la POD : $(P_i)_{i=1}^r$,

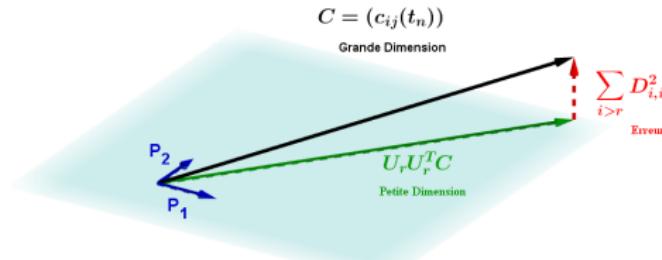
$$U_r = (P_1 | P_2 | \dots | P_r)$$

- projection d'un vecteur $C = (c_{ij})$ de la base de données sur cette base :

$$C_p = U_r U_r^T C$$

Théoriquement l'erreur est de l'ordre de

$$\sum_{i>r} D_{i,i}^2$$



Proper Orthogonal Decomposition

Modèle réduit

- Construire des nouvelles solutions pour un autre choix de paramètres notamment le champs de vitesse

$$C(t) = U_r \cdot A(t)$$

$A(t)$ vérifie :

$$\partial_t A(t) + D_{v,r} \cdot A(t) = 0$$

qu'on peut discréteriser avec un schéma d'Euler Implicite

$$\frac{A(t_n) - A(t_{n-1})}{t_n - t_{n-1}} + D_{v,r} \cdot A(t_n) = 0$$

Approche eulerienne

Champ de vitesse uniforme

16 simulations, $\theta \in [0, \frac{\pi}{2}]$

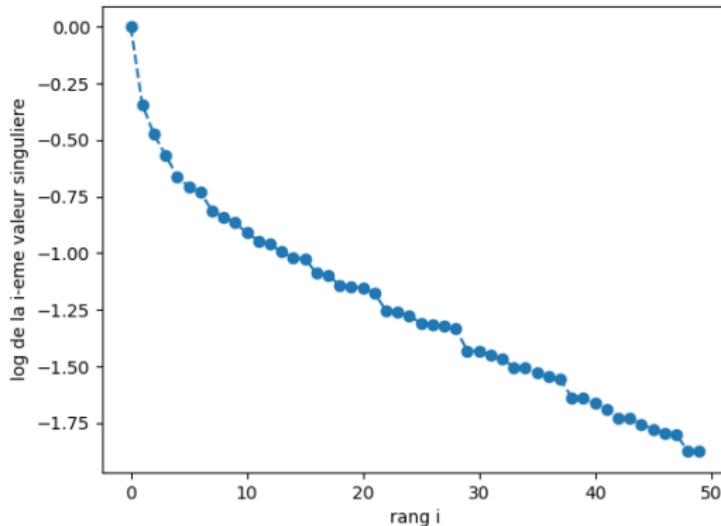
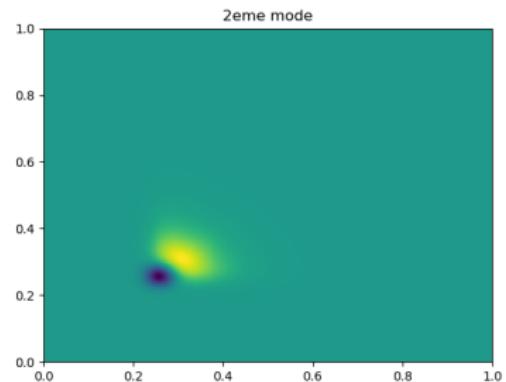
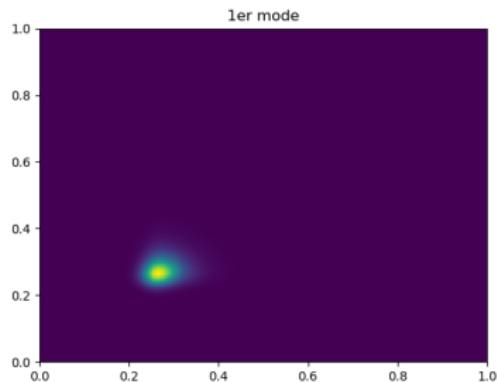


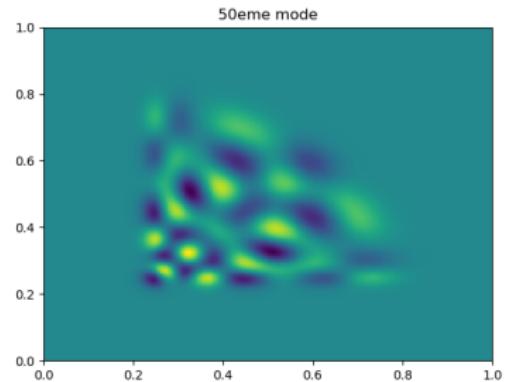
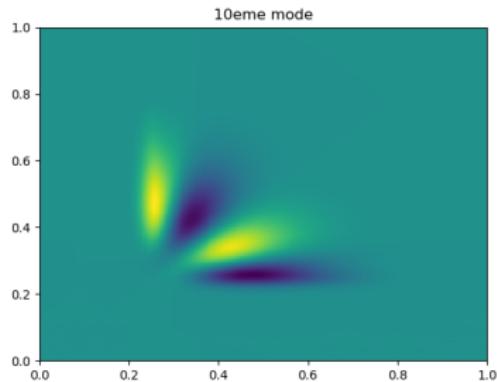
FIGURE 10 – Tracé du log des valeurs singulières en fonction du rang

Approche eulerienne

Champ de vitesse uniforme

Rôle des modes propres :

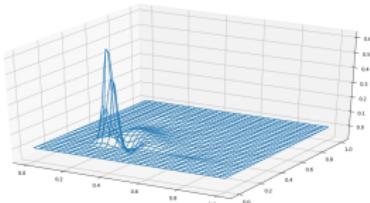




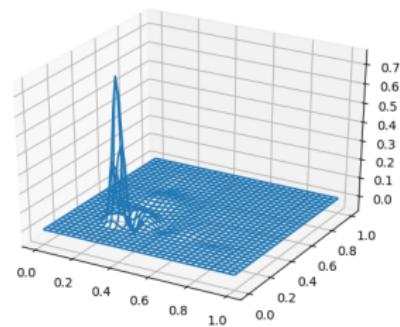
Approche eulerienne

Champ de vitesse uniforme

Reconstruction d'une solution fine



Condition initiale, 10 modes

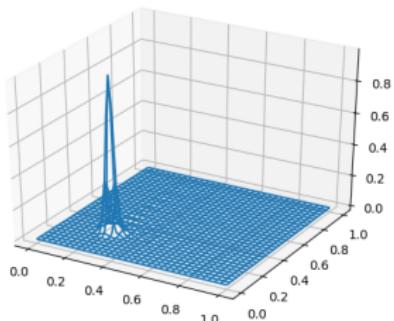


Condition initiale, 20 modes

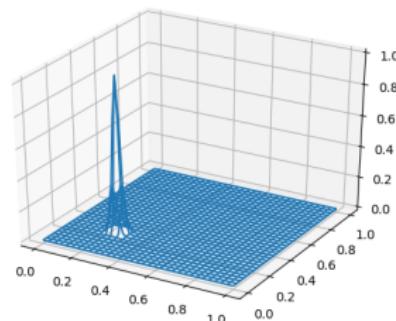
Approche eulerienne

Champ de vitesse uniforme

Reconstruction d'une solution fine



Condition initiale, 200 modes

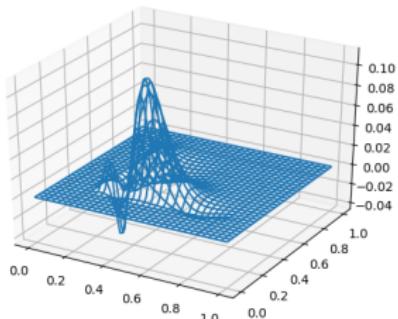


Condition initiale, 500 modes

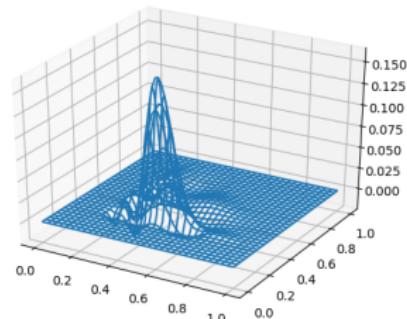
Approche eulerienne

Champ de vitesse uniforme

Reconstruction d'une solution fine



A mi-parcours, 10 modes

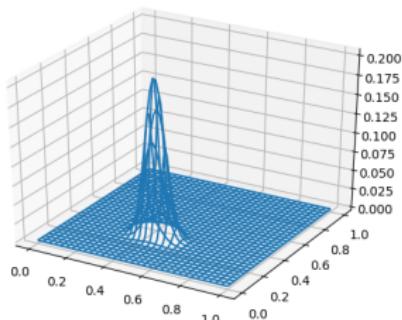


A mi-parcours, 20 modes

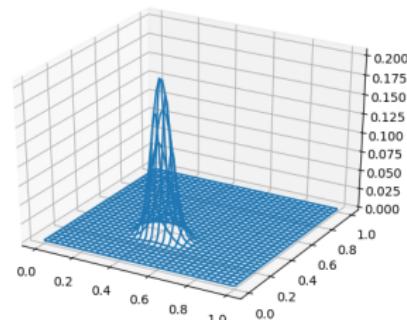
Approche eulerienne

Champ de vitesse uniforme

Reconstruction d'une solution fine



A mi-parcours, 200 modes



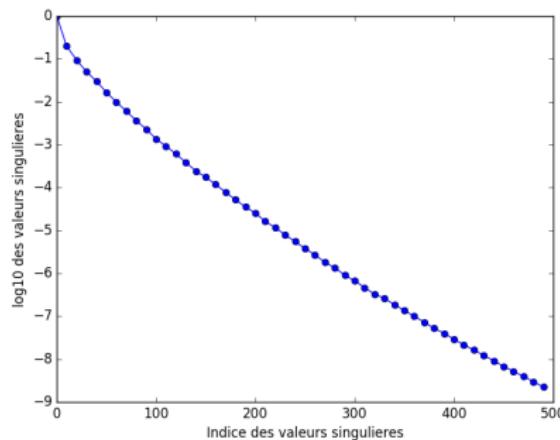
A mi-parcours, 500 modes

Approche eulerienne

Ecoulements cellulaires

64 simulations en volumes finis

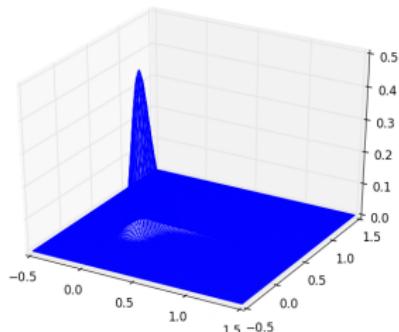
- On se place sur $[-0.5, 1.5] \times [-0.5, 1.5]$
- Maillage de 2^7 mailles de côté
- $(x_0, y_0, \theta_0) \in [0.25, 0.75] \times [0.25, 0.75] \times [0, 2.5]$ tirés uniformément



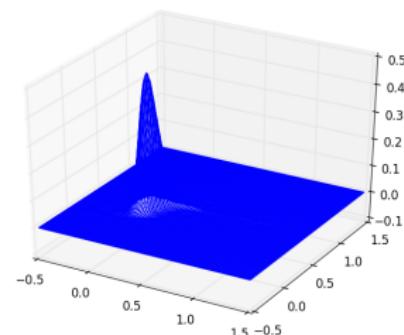
Approche eulerienne

Ecoulements cellulaires

Reconstruction "in-range" :



Snapshot à mi-parcours

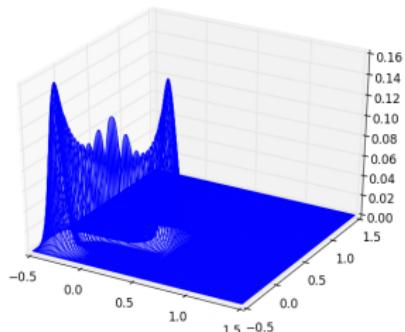


A mi-parcours, 200 modes

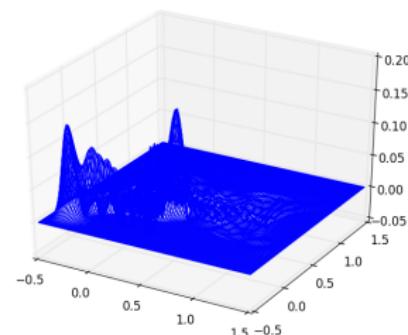
Approche eulerienne

Ecoulements cellulaires

Reconstruction "out of range" :



Snapshot à mi-parcours



A mi-parcours, 500 modes

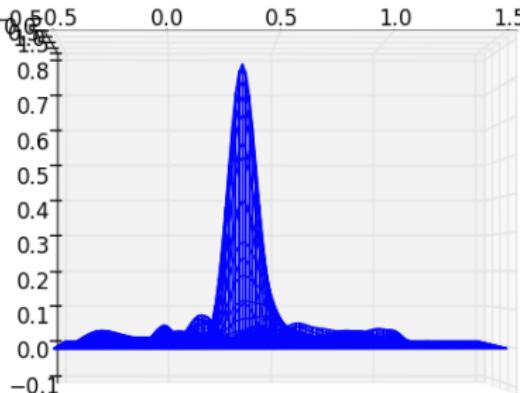
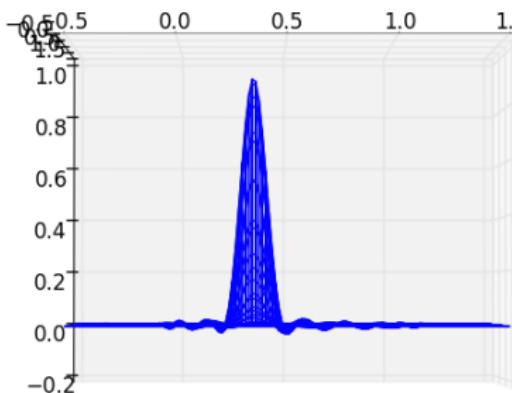
Approche eulerienne

Ecoulements cellulaires

Prise en compte de la positivité de la concentration

Recherche des coefficients $(a_j)_j$ tels que :

$$(a_j)_j = \operatorname{argmin} \|c_* - \sum_j a_j \varphi_j\|_{L^2} \text{ s.c. } \sum_j a_j \varphi_j \geq 0$$



Approche lagrangienne

Champ de vitesse uniforme

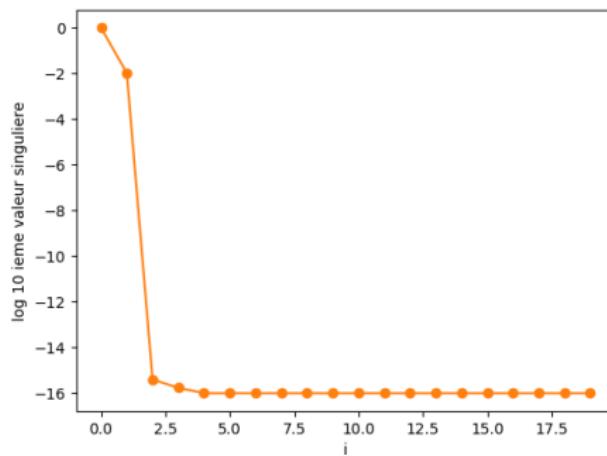


FIGURE 11 – log des valeurs singulières pour 8000 particules

Approche lagrangienne

Écoulements cellulaires

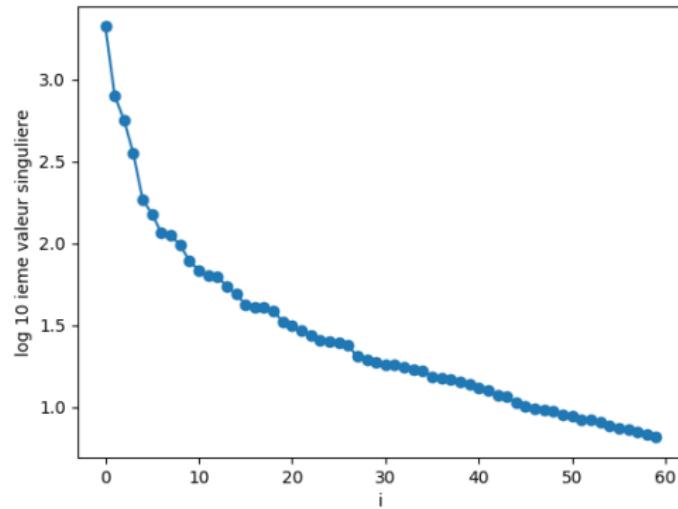


FIGURE 12 – log des valeurs singulières pour 500 particules

Approche lagrangienne

Écoulements cellulaires

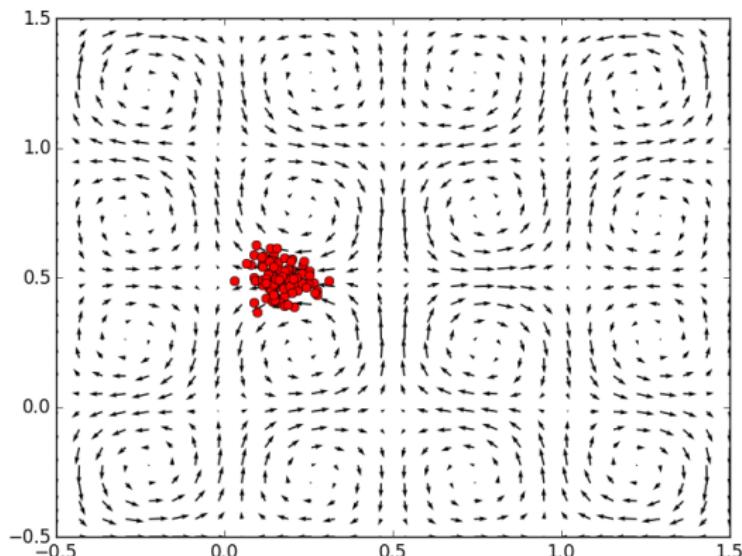


FIGURE 13 – simulation pour 100 particules, $\theta_0 = \theta_1 = \theta_2 = 0.5$

Approche lagrangienne

Écoulements cellulaires

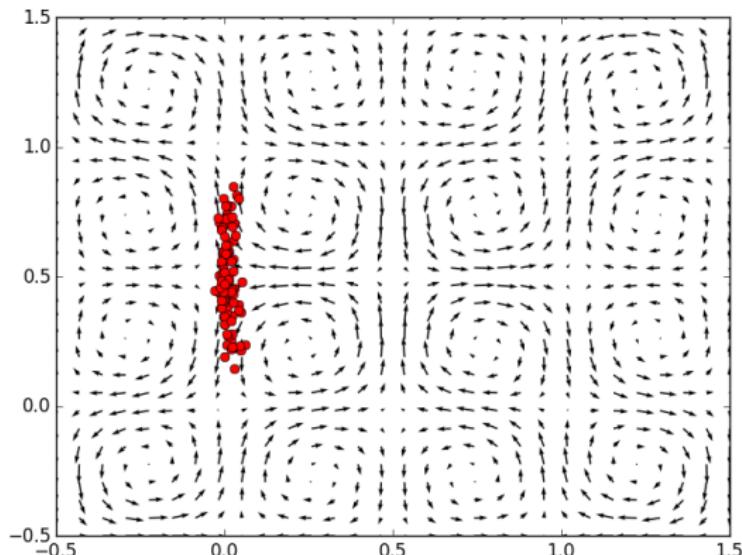


FIGURE 14 – simulation pour 100 particules, $\theta_0 = \theta_1 = \theta_2 = 0.5$

Approche lagrangienne

Écoulements cellulaires

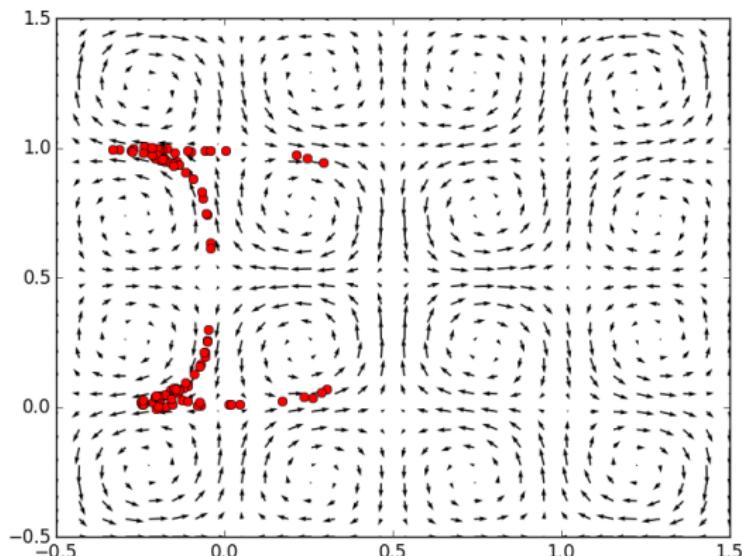


FIGURE 15 – simulation pour 100 particules, $\theta_0 = \theta_1 = \theta_2 = 0.5$

Approche lagrangienne

Écoulements cellulaires

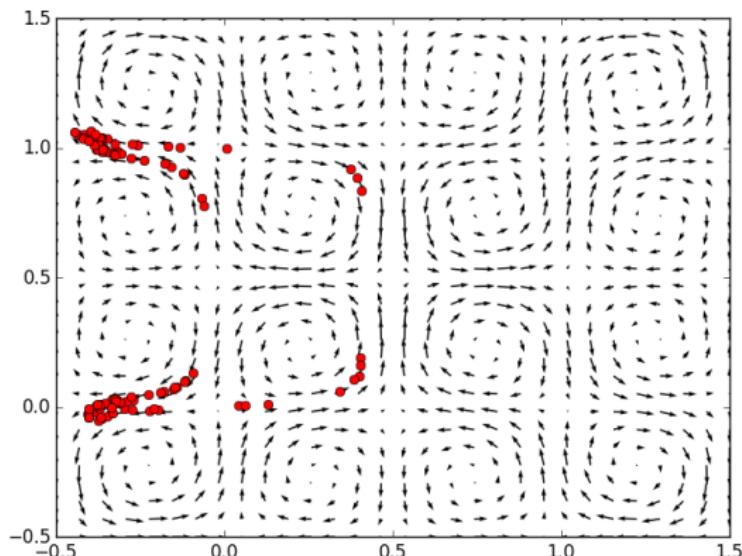


FIGURE 16 – simulation pour 100 particules, $\theta_0 = \theta_1 = \theta_2 = 0.5$

Approche lagrangienne

Écoulements cellulaires

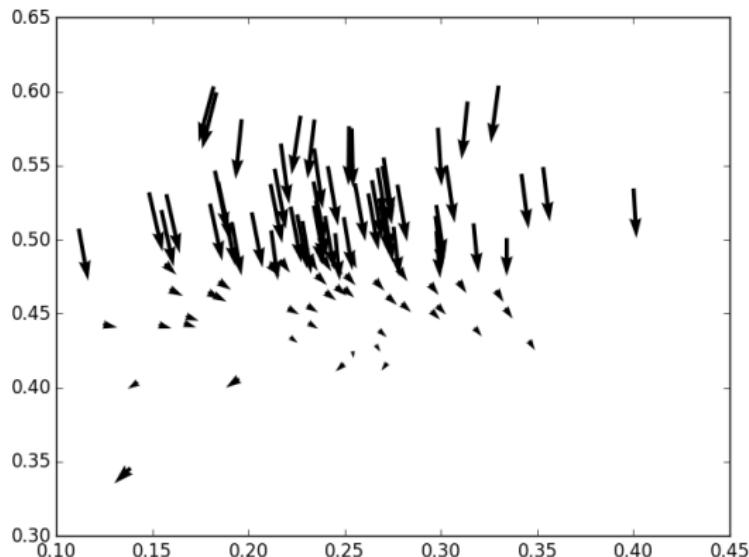


FIGURE 17 – Projection selon le premier mode propre

Approche lagrangienne

Champ de vitesse de Lamb-Oseen

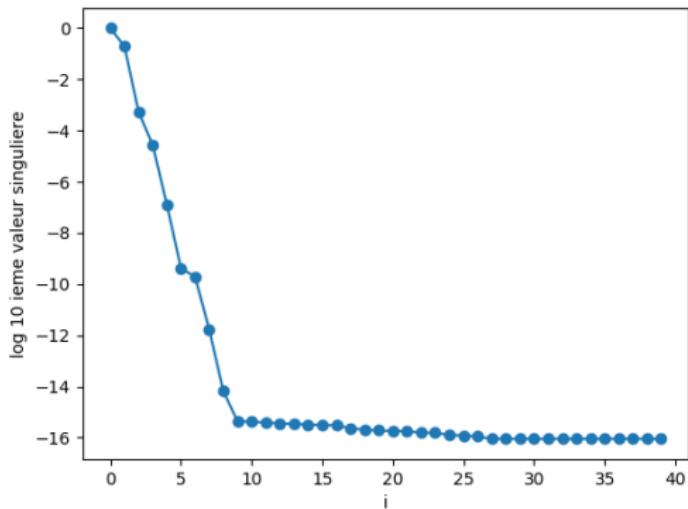


FIGURE 18 – log des valeurs singulières pour 100 particules

Conclusion

Résultats

Approche eulerienne

- Modèle réduit efficace pour des paramètres "in-range"
- Limites pour des paramètres "out of range"
- Problèmes de positivité de la solution

⇒ besoin d'un grand nombre de modes et de bien choisir le domaine de paramètres pour être précis

Approche lagrangienne

- Approche plus efficace pour un champ de vitesse constant et Lamboseen
- Approche très limitée pour un écoulement cellulaire, du aux multiples trajectoires radicalement différentes

⇒ besoin de trajectoires pas trop changeantes pour être efficace

Conclusion

Perspectives

Approche eulerienne et lagrangienne

- Utilisation de schéma non-linéaires et plus précis pour résoudre le problème fin
- Dynamique réduite par méthode de Galerkine, afin de vérifier l'efficacité de la POD
- Problème de la positivité de la solution

Références I

- ▶ **V. Ehrlacher, S.Boyaval**
Méthodes numériques pour les problèmes en grande dimension.
Cours de l'École nationale des ponts et chaussées, 2018.
- ▶ **S.Boyaval**
Numerical Hydrodynamics for the environment Illustrated by river flows
Cours de l'École nationale des ponts et chaussées, 2018.
-  **E.Brunan**
Consistent SUPG-method for transient transport problems : Stability and convergence
Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.