

**Règlement :** Nous rappelons que lors de la soumission de votre projet sur Moodle vous devez présenter un **rapport écrit** uniquement en format **.pdf** et les **programmes Python** stockés dans un dossier nommé **PyCode**. Le rapport doit décrire les développements analytiques faits et illustrer les résultats obtenus avec des figures générées par Python. Il n'est pas nécessaire d'inclure les captures d'images et les listings des programmes Python dans le rapport. Bon courage !!!

## 1 Motivation et modélisation mathématique

Depuis longtemps, la pollution de l'eau dans les écoulements à surface libre est un sujet important qui intéresse plusieurs chercheurs scientifiques et l'humanité en général. Par conséquent, les recherches menées sur la qualité de l'eau et ses ressources sont de plus en plus nombreuses. Elles répondent à une demande exprimée par les spécialistes de la protection de l'environnement et de l'humanité contre des maladies. Ces chercheurs sont intéressés à la qualité de l'eau qu'à sa quantité. En fait la qualité de l'eau influe sur l'usage que l'être humain, mais l'inverse est également vrai. Lorsqu'on utilise de l'eau, on altère sa qualité au lieu de sa quantité. Ce cercle vicieux indique que l'habitude qu'on a depuis toujours de rejeter les eaux d'égout non traitées et les déchets chimiques directement dans les fleuves, les rivières, et les mers en vue de leur éventuelle assimilation dans l'environnement n'est plus acceptable afin d'éviter la dégradation de l'environnement. Les processus naturels de décomposition dans les masses d'eau ne suffisent plus pour venir à bout de ces apports de polluants. La technologie peut servir dans bien des cas à réduire ou à éliminer les substances qui peuvent nuire à l'environnement. Mais qu'arrive-t-il lorsque les contaminants ne sont pas éliminés, même aux moyens des méthodes de traitement de l'eau les plus modernes ? Ils peuvent être présents en quantité minime seulement, toutefois, comme ils sont persistants ils peuvent s'accumuler pour donner lieu à des concentrations très nuisibles. Dans ce cas, il n'existe qu'une seule façon de protéger les générations futures et tout l'écosystème, empêcher les produits chimiques dans le réseau hydrographique.

Dans cette perspective, les modèles numériques de qualité des eaux reconstituent différents mécanismes présents dans le milieu et fournissent l'ensemble des informations nécessaires. L'importance du champ de vitesse dans le transport de la pollution rend nécessaire sa représentation par un modèle mathématique très précis qui prend en compte les phénomènes physiques tels que la diffusion, l'advection, la dispersion, l'adsorption, la désorption, la précipitation, la sédimentation, l'évaporation, etc. qui dépendent à la fois de la nature de la matière rejetée et des caractéristiques hydrodynamiques intrinsèques au cours d'eau. En ce qui concerne, les substances polluantes gouvernées presque entièrement par le brassage du fluide, la prise en considération de la turbulence est essentielle.

Malgré les nombreuses recherches qui ont été menées sur la modélisation numérique des dispersions de polluants en cours d'eau, certains phénomènes demeurent pris en compte de manière très simplifiée.

Dans ce projet, il s'agit 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 on cherche 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

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} + V \cdot \nabla u - \nu \Delta u &= f \\ u(0, x) &= u_0(x) \end{cases} \quad (1)$$

où  $V$  est la vitesse de convection du polluant, représentant la vitesse du courant et qui peut donc dépendre de la position et du temps,  $\nu$  est son coefficient de diffusion,  $f$  est la source et  $u_0$  est la concentration initiale.

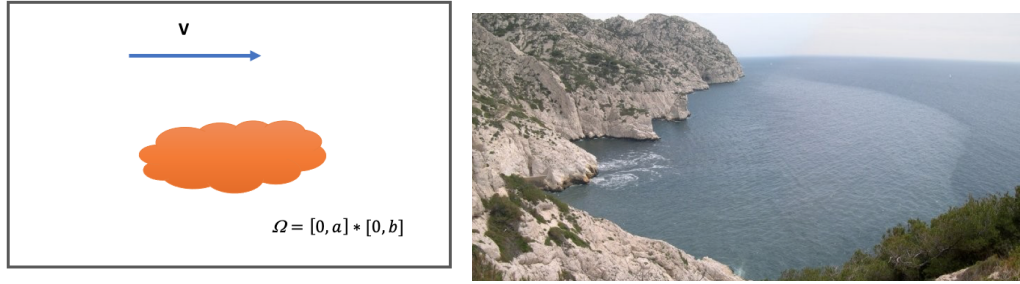


FIGURE 1 – Exemples représentant le fleuve en présence du produit polluant.

Ce projet est divisé en deux parties : la première partie traite le cas unidimensionnel ( $d = 1$ ) du problème d'écoulement lorsque le polluant s'écoule dans un fleuve modélisé en  $1D$ . La deuxième partie est dédiée au cas bidimensionnel ( $d = 2$ ), lorsque le polluant est rejeté à l'embouchure du fleuve dans un océan modélisé comme un milieu  $2D$ . Afin d'implémenter correctement la résolution numérique du problème continu (1), on procède en plusieurs étapes. Dans un premier temps, nous nous concentrons sur la discrétisation de l'opérateur Laplacien, pour lequel nous considérons des conditions mixtes Dirichlet/Neumann (non) homogènes. Après cela, on étudie une discrétisation par différence finie du terme convectif-advectif, et enfin on termine par regarder les aspects de discrétisation en temps.

## 2 Variation de la concentration de polluant dans le fleuve

Il s'agit ici de 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.

### 2.1 Phénomène de convection en 1D

Pour mieux comprendre ce phénomène, on simplifie le problème en négligeant les termes de diffusion et de source ( $\nu = 0$  et  $f = 0$ ), ainsi qu'en considérant la vitesse constante et positive,  $V > 0$ . Le problème modèle de convection s'écrit ainsi

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

Supposons maintenant que la condition initiale  $u_0$  est de classe  $C^1$  sur  $\mathbb{R}$ . Donc, on peut résoudre explicitement l'équation (2) via la méthode des caractéristiques. En effet, 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  $\Phi(t) = u(t, X(t))$ .

1. Calculer la dérivée de  $\Phi$  et déduire la forme des courbes caractéristiques. Que peut-on en déduire sur l'existence et l'unicité de solutions du problème modèle ?

Dans la suite, on va donc pouvoir comparer les solutions exactes avec des résolutions numériques obtenues par la méthode différences finies. Pour résoudre numériquement ce problème continu, on restreint un intervalle d'espace  $[0, a]$  ( $a > 0$ ) et de temps  $[0, T]$  ( $T > 0$ ), avec une condition initiale à support dans  $[0, a]$  et on note

- $N$ , le nombre des points intérieurs de l'espace ;
- $\tau$ , le pas de discrétisation en temps ;
- $h := \frac{a}{N+1}$ , le pas de discrétisation en espace ;
- $t_n = n\tau$  et  $x_i = ih$  les coordonnées des points de la discrétisation ;
- $u_i^n$  l'approximation de la fonction  $u(t_n, x_i)$  ;
- $U_n = (u_i^n)_{1 \leq i \leq n}$  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 suivantes, on pourra accomplir les applications numériques avec  $a = 50, T = 5, V = 1, \nu = 1, h = 0.1, \tau = 0.0025$  et la condition initiale

$$u_0(x) = f_{x_e; \sigma}(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(x - x_e)^2}{2\sigma^2}\right)$$

avec  $x_e = \frac{a}{2}$  et  $\sigma = 1$ .

1. Écrire le schéma explicite centré pour le problème continu (2) et vérifier que  $U_{n+1}$  est donné par la relation de récurrence

$$U^{n+1} = (I_N - \tau M)U^n, \quad \forall n \in \mathbb{N}.$$

Tester ce schéma numérique avec les données numériques et tracer une animation de  $U$  en fonction du temps  $t$ . Commenter le phénomène observé.

2. Écrire le schéma de Crank-Nicolson et vérifier que  $U^{n+1}$  est donné par

$$\left(I_N + \frac{\tau}{2}M\right)U^{n+1} = \left(I_N - \frac{\tau}{2}M\right)U^n, \quad \forall n \in \mathbb{N}.$$

Montrer que ce schéma est inconditionnellement stable en norme  $L^2$  et préciser son ordre. Tester numériquement ce schéma en utilisant les données numériques ci-dessus.

3. Implémenter une fonction Python qui donne l'ordre de convergence du schéma de Crank-Nicolson. Observer numériquement cet ordre de convergence en imposant  $\frac{V\tau}{h} = 0.25$ .

## 2.2 Phénomène de convection-diffusion en 1D

On s'intéresse à l'approximation par différences finies de l'équation de convection-diffusion en 1D :

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

En utilisant les mêmes conditions que la section précédente, le schéma de Crank-Nicolson s'écrit ainsi

$$\begin{aligned} & \frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\tau} + \frac{V}{2} \left( \frac{u_{j+1}^n - u_{j-1}^n}{2h} + \frac{u_{j+1}^{n+1} - u_{j-1}^{n+1}}{2h} \right) \\ & - \frac{\nu}{2} \left( \frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{h^2} + \frac{u_{j+1}^{n+1} - 2u_j^{n+1} + u_{j-1}^{n+1}}{h^2} \right) = 0. \end{aligned}$$

1. Écrire la matrice  $A$  pour laquelle  $U^{n+1}$  peut être obtenu par la relation de récurrence

$$\left(I_N + \frac{\tau}{2}M - \frac{\nu\tau}{2}A\right)U^{n+1} = \left(I_N - \frac{\tau}{2}M + \frac{\nu\tau}{2}A\right)U^n$$

pour tout  $n \in \mathbb{N}$ .

2. Tester numériquement le schéma pour  $\nu = 1$ . Qu'observe-t-on si on reprend cette simulation avec  $T = 10$ .
3. Dans certaines situations, le comportement observé à la sortie ( $x = a$ ) n'est pas le comportement attendu pour une solution définie sur  $\mathbb{R}$ . On choisit donc d'utiliser en  $x = a$  des conditions de type Neumann homogène qui reviennent à imposer

$$\frac{u_{N+1} - u_N}{h} = 0$$

Modifier les matrices  $M$  et  $A$  pour tenir compte de ces nouvelles conditions et réaliser les simulations numériques une fois ces modifications apportées.

4. 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  $f(t, x)$ .

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t}(t, x) + V \frac{\partial u}{\partial x}(t, x) - \nu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(t, x) = f(t, x), & \forall x \in \mathbb{R}, \forall t > 0, \\ u(t = 0, x) = 0 & \forall x \in \mathbb{R}. \end{cases}$$

En utilisant la discrétisation  $f_j^n = f(t_n, x_j)$  de  $f$ , réécrire le schéma de Crank-Nicolson de la question pour tenir compte du terme et effectuer les tests numériques pour le terme source défini par :

$$f(t, x) = f_{x_e, \sigma}(x)$$

avec  $x_e = \frac{a}{2}$  et  $\sigma = 1$ .

5. Pour simuler l'action d'une usine déversant le produit chimique (orange, voir figure 1) et ne fonctionnant qu'en journée, tester numériquement le schéma précédant avec

$$f(t, x) = \begin{cases} f_{x_e, \sigma}(x) & \text{si } \lfloor t \rfloor \text{ est pair,} \\ 0 & \text{si } \lfloor t \rfloor \text{ est impair.} \end{cases}$$

Proposer ainsi une durée de fonctionnement et celle de pause de façon à assurer que la concentration en  $x = a$  ne dépasse pas  $\frac{4}{10}$  une fois le régime stationnaire atteint.

### 3 Variation de la concentration de polluant dans l'océan

Dès que l'eau polluée du fleuve atteint l'océan, la modélisation mathématique en  $1D$  ne convient plus pour décrire le milieu, mais on peut encore négliger la profondeur de l'océan et étudier le phénomène de convection diffusion en  $2D$  pour comprendre l'évolution de la concentration de polluant. On cherche toujours à employer des schémas de type Crank-Nicolson pour leur bonnes propriétés mais leur caractère implicite nous impose un travail préliminaire. Afin de comprendre et d'implémenter correctement la résolution du problème en  $2D$ , on procède en plusieurs étapes. D'abord, on se concentre sur l'approximation de l'opérateur Laplacien en utilisant des conditions mixtes Dirichlet/Neumann (non) homogènes. Ensuite, on discrétise l'équation de convection-diffusion bidimensionnelle par les différences finies en regardant les aspects de discrétisation en temps. Enfin, on s'intéresse à l'objectif du projet qui consiste à observer les effets du courant océanique sur la dispersion, en particulier lorsque celui-ci dépend de la position comme à proximité de l'embouchure d'un fleuve.

### 3.1 Approximation de l'équation de Laplace

Il s'agit ici d'étudier l'approximation spatiale via les différences finies de l'équation de Laplace en 2D sur le domaine  $\Omega = ]0, a[ \times ]0, b[$  avec  $a = b$  et des conditions à la limite de type Dirichlet homogènes :

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

Pour résoudre numériquement cette équation, nous utilisons alors

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

1. A  $y_j$  fixé, montrer que

$$-\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_i, y_j) = \frac{2u(x_i, y_j) - u(x_{i-1}, y_j) - u(x_{i+1}, y_j)}{h^2} + \mathcal{O}(h^2).$$

En déduire une approximation à l'ordre 2 de  $-\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_i, y_j)$  et de  $-\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}(x_i, y_j)$ .

2. Écrire le schéma aux différences finies consistant à l'ordre 2 en un point  $(x_i, y_j)$  n'appartenant pas au bord.
3. Écrire les conditions de Dirichlet homogènes discrètes sur le bord  $\partial\Omega$  et mettre ce schéma sous la forme  $MU = F$  avec  $U$  le vecteur de taille  $N^2$  qui est donné par la concaténation des lignes de la matrice  $(u_{i,j})_{1 \leq i, j \leq N}$  :

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

4. Utiliser ce système pour résoudre numériquement l'équation de Laplace avec un terme source  $f$  bien choisi permettant de comparer la résolution numérique et la solution exacte pour différentes valeurs de  $(n, k) \in \mathbb{N}^*$ , la fonction  $u_{n,k}(x, y) = \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{k\pi y}{b}\right)$ . Montrer en particulier que l'erreur d'approximation converge bien lorsque vous raffinez votre discrétisation.
5. En introduisant sur  $\Gamma_1 = \{(a, y) \mid y \in [0, b]\}$  du domaine  $\Omega$  la condition de Neumann

$$\begin{cases} -\Delta u &= f \text{ dans } \Omega, \\ u &= 0 \text{ sur } \Gamma_0, \\ \frac{\partial u}{\partial n} &= 0 \text{ sur } \Gamma_1. \end{cases}$$

Montrer que l'on a

$$\frac{\partial u}{\partial x}(a, y) = \frac{4u(a-h, y) - u(a-2h, y) - 3u(a, y)}{2h} + \mathcal{O}(h^2).$$

6. En déduire la modification à apporter sur  $M$  pour prendre en compte cette condition de Neumann sur  $\Gamma_1$  et réaliser des simulations numériques pour vérifier vos résultats en utilisant la solution  $u(x, y) = \sin\left(\frac{\pi y}{b}\right) \left(\cos\left(\frac{\pi x}{a}\right) - 1\right)$ .

### 3.2 Phénomène de convection-diffusion en 2D

Jusqu'à présent, nous pouvons simuler le comportement de la concentration de polluant lorsqu'il est déversé dans l'océan par le fleuve en modélisant son évolution par l'équation de réaction diffusion sur un domaine borné  $\Omega = ]0, a[ \times ]0, b[$  avec  $a = b$  et des conditions de Dirichlet au bord :

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} + V^x \frac{\partial u}{\partial x} + V^y \frac{\partial u}{\partial y} - \nu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \nu \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0, & \forall (x, y) \in \Omega, \forall t > 0, \\ u(t = 0, x, y) = u_0(x, y), & \forall (x, y) \in \Omega, \\ u(t, x, y) = 0, & \forall (x, y) \in \partial\Omega, \forall t > 0. \end{cases} \quad (3)$$

Pour écrire la méthode des différences finies, on introduit les notations ci-dessous :

- $\tau$ , le pas de discrétisation en temps ;
- $t^n = n\tau$ , les coordonnées de discrétisation temporelle ;
- $u_{i,j}^n$ , 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  $V = (V^x, V^y) \in \mathbb{R}^2$  ;
- $U^n$ , un vecteur de de taille  $N^2$  donné par la concaténation des lignes de la matrice  $(u_{i,j}^n)_{1 \leq i,j \leq N}$ , pour chaque  $n \in \mathbb{N}$ .

Le schéma de Crank-Nicolson correspondant à ce problème continu s'écrit ainsi

$$\begin{aligned} \frac{u_{i,j}^{n+1} - u_{i,j}^n}{\tau} + \frac{V_{i,j}^x}{2} \left( \frac{u_{i+1,j}^n - u_{i-1,j}^n}{2h} + \frac{u_{i+1,j}^{n+1} - u_{i-1,j}^{n+1}}{2h} \right) + \frac{V_{i,j}^y}{2} \left( \frac{u_{i,j+1}^n - u_{i,j-1}^n}{2h} + \frac{u_{i,j+1}^{n+1} - u_{i,j-1}^{n+1}}{2h} \right) \\ - \frac{\nu}{2} \left( \frac{u_{i+1,j}^n - 2u_{i,j}^n + u_{i-1,j}^n}{h^2} + \frac{u_{i+1,j}^{n+1} - 2u_{i,j}^{n+1} + u_{i-1,j}^{n+1}}{h^2} \right) \\ - \frac{\nu}{2} \left( \frac{u_{i,j+1}^n - 2u_{i,j}^n + u_{i,j-1}^n}{h^2} + \frac{u_{i,j+1}^{n+1} - 2u_{i,j}^{n+1} + u_{i,j-1}^{n+1}}{h^2} \right) = 0. \end{aligned}$$

1. Supposons dans un premier temps que la vitesse de convection du polluant est constante telle que  $V = (1, 1)$ . Calculer les matrices pour lesquelles on a la relation de récurrence

$$\left( I_{N^2} - \frac{\nu\tau}{2} A + \frac{\tau}{2} (M^x + M^y) \right) U^{n+1} = \left( I_{N^2} + \frac{\nu\tau}{2} A - \frac{\tau}{2} (M^x + M^y) \right) U^n, \quad \forall n \in \mathbb{N}.$$

2. Tester numériquement le schéma pour calculer une approximation de la solution du problème continu (3) sur  $[T_{\min}, T_{\max}]$ . On effectuera les simulations avec  $\nu = 1, a = b = 50, T_{\min} = 0, T_{\max} = 5, h = 0.5, \tau = 0.1$  dont la condition initiale est donnée par

$$u(t = 0, x, y) = u_0 = f_{x_e, y_e, \sigma}(x, y) := \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(x - x_e)^2 + (y - y_e)^2}{2\sigma^2}\right)$$

où  $x_e = y_e = \frac{a}{2}$  et  $\sigma = 1$ .

3. Pour modéliser la dispersion et le déversement du polluant (objet en orange, voir la figure 1) dans l'océan, modifier le schéma pour prendre en compte la participation du terme source  $f$ . Pour tenir compte du changement d'échelle du problème, tester numériquement les schémas avec les données suivantes :  $\nu = 0.1, a = b = 50, T_{\max} = 5, h = 0.5, \tau = 0.1$  et le terme source  $f$  est une fonction à deux variables définie par  $f := f_{x_e, y_e, \sigma}$  où  $x_e = 25, y_e = 0$  et  $\sigma = 1$  dont  $(x_e, y_e)$  sont les coordonnées de l'embouchure du fleuve dans  $\Omega$ .

4. Pour établir l'objectif final de ce projet consistant à prédire les effets du courant océanique sur la dispersion lorsque celui-ci dépend de la position comme à proximité de l'embouchure d'un fleuve, écrire les matrices  $M^x$  et  $M^y$  pour prendre en compte la dépendance de la vitesse du polluant  $V$  vis-à-vis de la position.
5. Effectuer des tests numériques du nouveau schéma avec les données de la question précédente, pour la vitesse de convection  $V(x, y) = (V^x, V^y)$  où

$$V^x = \cos\left(\frac{i\pi y}{b}\right) \sin\left(\frac{j\pi x}{a}\right), \quad V^y = \cos\left(\frac{j\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{i\pi y}{b}\right), \quad (x, y) \in \Omega, (i, j) \in \mathbb{N}.$$

qui sont toujours parallèles au bord du domaine  $\partial\Omega$ , et visualiser l'évolution de la concentration sur des intervalles de temps plus grands avec  $T_{\max} = 50, 100, 200, 500$ .