

# Etude de la Dispersion d'un Polluant

Cédric Boulbe, Vincent Vadez

15/03/2024

## 1 Introduction

On considère le problème de la dispersion d'un polluant à la surface d'un liquide en mouvement, par exemple lors d'une marée noire cf le naufrage du pétrolier Erika ayant entraîné une marée noire sur les côtes bretonnes en 1999 ou plus récemment le pétrolier Mare Doricum au large du Pérou en 2022. Des modèles mathématiques furent utilisés afin d'anticiper la dispersion des polluants et ainsi limiter du mieux possible les dégâts engendrés.



Figure 1: Conséquences d'une marée noire

Le polluant est miscible dans le liquide, mais plus léger. On suppose que la vitesse du fluide est horizontale. On peut alors considérer que le polluant diffuse essentiellement à la surface, et négliger les variations suivant la verticale  $z$ . On propose ici d'étudier la dispersion d'un polluant dans un domaine 2D à l'aide de méthodes d'analyses numériques. Dans un premier temps il faudra résoudre

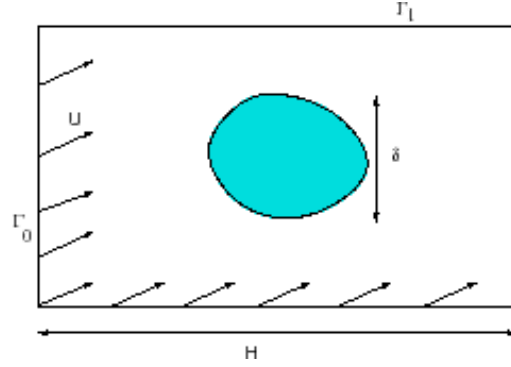


Figure 2: Diffusion d'une tâche d'un polluant

une équation aux différences finies 2D puis résoudre les systèmes linéaires associés avec différentes méthodes vues en cours.

## 2 Modèle Mathématique et Méthode Numérique

Considérons l'équation de dispersion suivante pour la concentration  $C(x, y, t)$  du polluant :

$$\frac{\partial C}{\partial t} + V_1 \frac{\partial C}{\partial x} + V_2 \frac{\partial C}{\partial y} - \kappa \left( \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} \right) = 0 \quad (1)$$

où  $V_1 > 0$ ,  $V_2 > 0$  sont les composantes de la vitesse du fluide et  $\kappa$  est le coefficient de diffusion supposé constant. La méthode des différences finies est une technique numérique couramment utilisée pour résoudre des équations différentielles partielles. Elle consiste à discrétiser l'espace et le temps, ce qui permet de remplacer les dérivées par des différences finies du premier et second ordre dans le cas considéré ici.

Si on note  $[0, a] \times [0, b]$  le domaine de résolution de notre modèle, on cherche à résoudre le modèle sur un maillage 2D. Pour cela, on subdivise l'intervalle  $[0, a]$  et  $[0, b]$  avec un pas de discrétisation  $h > 0$  pour définir un maillage. Les noeuds du maillage sont définis par  $(x_i, y_i)$  sont définis par

$$x_i = i * h, 0 \leq i \leq n, \quad y_j = j * h, 0 \leq j \leq m$$

où  $n$  et  $m$  représentent le nombre de subdivisions dans la direction des abscisses et des ordonnées.

De la même façon, on subdivise l'intervalle de temps  $[0, T]$  sur lequel on veut résoudre notre équation en se donnant un pas de temps  $dt$ .

Dans la méthode des différences finies, on cherche à déterminer la solution à chaque instant  $t_n = n dt$  à chaque point de coordonnées  $(x_i, y_j)$ .

Afin de discrétiser les dérivées partielles qui apparaissent dans le modèle, on

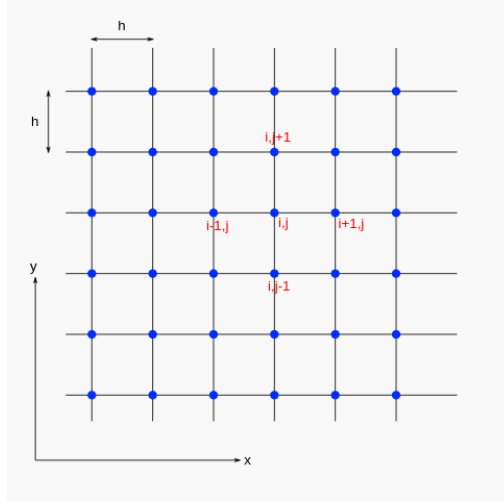


Figure 3: Maillage

utilise la même approche que celle introduite en dimension 1. Ainsi, si on considère une fonction  $U(t, x, y)$  et si on note  $U_{i,j}^n$  une approximation de  $U(t_n, x_i, y_j)$ , on pourra par exemple écrire la dérivée en temps de la façon suivante:

$$\frac{\partial U(t_{n+1}, x_i, y_j)}{\partial t} = \frac{U_{i,j}^{n+1} - U_{i,j}^n}{dt}.$$

Pour les dérivées d'ordre 1 en espace, on peut considérer des dérivées décentrées:

$$\begin{aligned} \frac{\partial U(t_n, x_i, y_j)}{\partial x} &= \frac{U_{i+1,j}^n - U_{i,j}^n}{dx}, \\ \frac{\partial U(t_n, x_i, y_j)}{\partial y} &= \frac{U_{i,j+1}^n - U_{i,j}^n}{dy}, \end{aligned}$$

ou des dérivées centrées:

$$\begin{aligned} \frac{\partial U(t_n, x_i, y_j)}{\partial x} &= \frac{U_{i+1,j}^n - U_{i-1,j}^n}{2dx}, \\ \frac{\partial U(t_n, x_i, y_j)}{\partial y} &= \frac{U_{i,j+1}^n - U_{i,j-1}^n}{2dy}. \end{aligned}$$

Pour les dérivées d'ordre 2, on peut écrire:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 U(t_n, x_i, y_j)}{\partial^2 x} &= \frac{U_{i+1,j}^n - 2U_{i,j}^n + U_{i-1,j}^n}{dx^2}, \\ \frac{\partial^2 U(t_n, x_i, y_j)}{\partial^2 y} &= \frac{U_{i,j+1}^n - 2U_{i,j}^n + U_{i,j-1}^n}{dy^2}, \end{aligned}$$

$$\Delta U(t_n, x_i, y_j) = \frac{\partial^2 U(t_n, x_i, y_j)}{\partial^2 x} + \frac{\partial^2 U(t_n, x_i, y_j)}{\partial^2 y} = \frac{U_{i+1,j}^n - 2U_{i,j}^n + U_{i-1,j}^n}{dx^2} + \frac{U_{i+1,j}^n - 2U_{i,j}^n + U_{i,j-1}^n}{dy^2},$$

Il existe plusieurs schémas numériques possibles. Le plus simple est un schéma explicite en temps et en espace. Si on applique les formules précédentes pour discrétiser l'équation considérée à la fonction inconnue  $C$ , on obtient:

$$\begin{aligned} & \frac{C_{i,j}^{n+1} - C_{i,j}^n}{\Delta t} + V_1 \frac{C_{i,j}^n - C_{i-1,j}^n}{\Delta x} + V_2 \frac{C_{i,j}^n - C_{i,j-1}^n}{\Delta y} \\ & - \kappa \left( \frac{C_{i+1,j}^n - 2C_{i,j}^n + C_{i-1,j}^n}{\Delta x^2} + \frac{C_{i,j+1}^n - 2C_{i,j}^n + C_{i,j-1}^n}{\Delta y^2} \right) = 0 \end{aligned} \quad (2)$$

Ce schéma est très simple à implémenter mais il nécessite d'utiliser de très petit pas de temps pour être stable (cf MAM4). On peut également écrire les dérivées partielles en espace au temps  $t^n + 1$

$$\begin{aligned} & \frac{C_{i,j}^{n+1} - C_{i,j}^n}{\Delta t} + V_1 \frac{C_{i,j}^{n+1} - C_{i-1,j}^{n+1}}{\Delta x} + V_2 \frac{C_{i,j}^{n+1} - C_{i,j-1}^{n+1}}{\Delta y} \\ & - \kappa \left( \frac{C_{i+1,j}^{n+1} - 2C_{i,j}^{n+1} + C_{i-1,j}^{n+1}}{\Delta x^2} + \frac{C_{i,j+1}^{n+1} - 2C_{i,j}^{n+1} + C_{i,j-1}^{n+1}}{\Delta y^2} \right) = 0 \end{aligned} \quad (3)$$

On obtient un schéma implicite en temps. A chaque pas de temps, on devra résoudre un système linéaire.

Dans la suite, nous allons utiliser un schéma de Crank Nicolson dans lequel on écrit chaque dérivée spatiale comme la somme d'une dérivée spatiale au temps  $t^n$  et une autre moitié au temps  $t^{n+1}$ . On obtient le schéma suivant:

$$\begin{aligned} & \frac{C_{i,j}^{n+1} - C_{i,j}^n}{\Delta t} = +V_1 \frac{C_{i,j}^{n+1} - C_{i-1,j}^{n+1}}{\Delta x} + V_2 \frac{C_{i,j}^{n+1} - C_{i,j-1}^{n+1}}{\Delta y} \\ & - \kappa \left( \frac{C_{i+1,j}^{n+1} - 2C_{i,j}^{n+1} + C_{i-1,j}^{n+1}}{\Delta x^2} + \frac{C_{i,j+1}^{n+1} - 2C_{i,j}^{n+1} + C_{i,j-1}^{n+1}}{\Delta y^2} \right) = 0 \end{aligned} \quad (4)$$

Soit  $C_{i,j}^n$  la valeur de  $C$  au point  $(x_i, y_j, t_n)$ . L'équation (1) en utilisant la méthode des différences finies se discrétise de la façon suivante :

$$\begin{aligned} \frac{C_{i,j}^{n+1} - C_{i,j}^n}{dt} = & -\frac{V_1}{2} \left[ \frac{C_{i+1,j}^n - C_{i-1,j}^n}{2dx} + \frac{C_{i+1,j}^{n+1} - C_{i-1,j}^{n+1}}{2dx} \right] \\ & - \frac{V_2}{2} \left[ \frac{C_{i,j+1}^n - C_{i,j-1}^n}{2dy} + \frac{C_{i,j+1}^{n+1} - C_{i,j-1}^{n+1}}{2dy} \right] \\ & + \frac{\kappa}{2} \left[ \left( \frac{C_{i+1,j}^n - 2C_{i,j}^n + C_{i-1,j}^n}{dx^2} + \frac{C_{i,j+1}^n - 2C_{i,j}^n + C_{i,j-1}^n}{dy^2} \right) \right. \\ & \left. + \frac{\kappa}{2} \left[ \left( \frac{C_{i+1,j}^{n+1} - 2C_{i,j}^{n+1} + C_{i-1,j}^{n+1}}{dx^2} + \frac{C_{i,j+1}^{n+1} - 2C_{i,j}^{n+1} + C_{i,j-1}^{n+1}}{dy^2} \right) \right] \right] \end{aligned} \quad (5)$$

Si on regroupe maintenant les termes, on obtient

$$\begin{aligned}
& C_{i,j}^{n+1} \left[ \frac{1}{dt} + \frac{\kappa}{dx^2} + \frac{\kappa}{dy^2} \right] \\
& + C_{i+1,j}^{n+1} \left[ \frac{V_1}{4dx} - \frac{\kappa}{2dx^2} \right] + C_{i-1,j}^{n+1} \left[ -\frac{V_1}{4dx} - \frac{\kappa}{2dx^2} \right] \\
& + C_{i,j+1}^{n+1} \left[ \frac{V_2}{4dy} - \frac{\kappa}{2dy^2} \right] + C_{i,j-1}^{n+1} \left[ -\frac{V_2}{4dy} - \frac{\kappa}{2dy^2} \right] \\
& = C_{i,j}^n \left[ \frac{1}{dt} - \frac{\kappa}{dx^2} - \frac{\kappa}{dy^2} \right] \\
& + C_{i+1,j}^n \left[ -\frac{V_1}{4dx} + \frac{\kappa}{2dx^2} \right] + C_{i-1,j}^n \left[ \frac{V_1}{4dx} + \frac{\kappa}{2dx^2} \right] \\
& + C_{i,j+1}^n \left[ -\frac{V_2}{4dy} + \frac{\kappa}{2dy^2} \right] + C_{i,j-1}^n \left[ \frac{V_2}{4dx} + \frac{\kappa}{2dy^2} \right]
\end{aligned} \tag{6}$$

Pour déterminer les inconnues  $C_{i,j}^n$ , nous devons résoudre un système linéaire à chaque pas de temps. On note  $n_x$  et  $n_y$  le nombre de points de discrétisation dans la direction  $x$  et  $y$ . Le système linéaire aura la même taille que le nombre de noeuds du maillage c'est à dire  $n_x n_y \times n_x n_y$ . Pour cela on numérote les noeuds du maillage de  $k = 1$  à  $N = n_x * n_y$  avec  $k = i + (j-1)n_x$ ,  $1 \leq i \leq n_x$ ,  $1 \leq j \leq n_y$ .

Avec ces notation, le système linéaire à résoudre s'écrit,

$$\forall i, j, 2 \leq i \leq n_x - 1, 2 \leq j \leq n_y - 1, k = i + (j-1)n_x :$$

$$\begin{aligned}
& C_k^{n+1} \left[ \frac{1}{dt} + \frac{\kappa}{dx^2} + \frac{\kappa}{dy^2} \right] \\
& + C_{k+1}^{n+1} \left[ \frac{V_1}{4dx} - \frac{\kappa}{2dx^2} \right] + C_{k-1}^{n+1} \left[ -\frac{V_1}{4dx} - \frac{\kappa}{2dx^2} \right] \\
& + C_{k+n_x}^{n+1} \left[ \frac{V_2}{4dy} - \frac{\kappa}{2dy^2} \right] + C_{k-n_x}^{n+1} \left[ -\frac{V_2}{4dy} - \frac{\kappa}{2dy^2} \right] \\
& = C_k^n \left[ \frac{1}{dt} - \frac{\kappa}{dx^2} - \frac{\kappa}{dy^2} \right] \\
& + C_{k+1}^n \left[ -\frac{V_1}{4dx} + \frac{\kappa}{2dx^2} \right] + C_{k-1}^n \left[ \frac{V_1}{4dx} + \frac{\kappa}{2dx^2} \right] \\
& + C_{k+n_x}^n \left[ -\frac{V_2}{4dy} + \frac{\kappa}{2dy^2} \right] + C_{k-n_x}^n \left[ \frac{V_2}{4dx} + \frac{\kappa}{2dy^2} \right]
\end{aligned} \tag{7}$$

On ne traite dans cette partie que les noeuds interne du maillage, c'est à dire n'étant pas sur le bord du domaine.

**Condition aux limites** La résolution du problème considéré doit être complété par des conditions au limites qui vont décrire les interactions entre ce qui se passe à l'intérieur du domaine de calcul et l'extérieur. Ici on considère que sur l'axe  $x = 0$  et  $y = 0$ , on  $C = 0$  car la tache de pollution trouve à l'intérieur du domaine et va se diriger vers les autres bord du domaines. Il s'agit d'une **condition de Dirichlet**.

Sur les autres bords, on considère une condition du type  $\nabla C.n = \frac{\partial C}{\partial n} = 0$  qui permet à la tache de pollution de sortir du domaine. Il s'agit d'une **condition de Neumann**.

Pour prendre en compte les conditions de Dirichlet sur le bord du domaine, on détermine la liste des nœuds qui appartiennent aux de droites d'équation  $x = 0$  et  $y = 0$ . Si un nœud  $k$  est sur ce bord, on pose  $A_{k,j} = 0$  si  $k \neq j$  et  $A_{k,k} = 1$ . Dans le terme de droite, on pose  $b_k = 0$ .

Pour les conditions aux limites de Neumann, si on se place sur la droite d'équation  $x = a$ , la normale externe a pour direction  $n = (1, 0)$  et la dérivée normale  $\frac{\partial C}{\partial n} = 0$  s'écrit  $\frac{\partial C}{\partial x} = 0$ . Si on considère un point de ce bord de coordonnée  $(x_{n_x}, y_j)$ , on a

$$\frac{\partial C_{n_x}^{n+1}}{\partial x} = \frac{C_{i+1,j}^{n+1} - C_{i,j}^{n+1}}{2dx} = 0.$$

Pour faire ce calcul, on doit ajouter une rangée de points virtuels à l'extérieur du domaine et grâce à la relation précédent, on en déduit que

$$C_{i+1,j}^{n+1} = C_{i-1,j}^{n+1}.$$

De la même façon, on a

$$C_{i+1,j}^n = C_{i-1,j}^n.$$

Pour tous les points du bord d'équation  $x = nx$ , on a

$$\begin{aligned} & C_{i,j}^{n+1} \left[ \frac{1}{dt} + \frac{\kappa}{dx^2} + \frac{\kappa}{dy^2} \right] \\ & + C_{i-1,j}^{n+1} \left[ -\frac{\kappa}{dx^2} \right] \\ & + C_{i,j+1}^{n+1} \left[ \frac{V_2}{4dy} - \frac{\kappa}{2dy^2} \right] + C_{i,j-1}^{n+1} \left[ -\frac{V_2}{4dy} - \frac{\kappa}{2dy^2} \right] \\ & = C_{i,j}^n \left[ \frac{1}{dt} - \frac{\kappa}{dx^2} - \frac{\kappa}{dy^2} \right] \\ & + C_{i-1,j}^n \left[ \frac{\kappa}{dx^2} \right] \\ & + C_{i,j-1}^n \left[ \frac{\kappa}{dy^2} \right] \end{aligned} \tag{8}$$

De la même façon, pour traiter les conditions aux limite du bord  $y = b$ , on obtient

$$\begin{aligned}
& C_{i,j}^{n+1} \left[ \frac{1}{dt} + \frac{\kappa}{dx^2} + \frac{\kappa}{dy^2} \right] \\
& + C_{i+1,j}^{n+1} \left[ \frac{V_1}{4dx} - \frac{\kappa}{2dx^2} \right] + C_{i-1,j}^{n+1} \left[ -\frac{V_1}{4dx} - \frac{\kappa}{2dx^2} \right] \\
& + C_{i,j-1}^{n+1} \left[ -\frac{\kappa}{dy^2} \right] \\
& = C_{i,j}^n \left[ \frac{1}{dt} - \frac{\kappa}{dx^2} - \frac{\kappa}{dy^2} \right] \\
& + C_{i+1,j}^n \left[ -\frac{V_1}{4dx} + \frac{\kappa}{2dx^2} \right] + C_{i-1,j}^n \left[ \frac{V_1}{4dx} + \frac{\kappa}{2dx^2} \right] \\
& + C_{i,j+1}^n \left[ -\frac{V_2}{4dy} + \frac{\kappa}{2dy^2} \right] + C_{i,j-1}^n \left[ \frac{V_2}{4dy} + \frac{\kappa}{2dy^2} \right]
\end{aligned} \tag{9}$$

Pour simplifier la chose, on considérera que le point en haut à droite du domaine vérifie  $C_{nx,ny}^{n+1} = 0$ .

### 3 Implémentation

1. Ecrire une fonction qui effectue la décomposition  $LU$ .
2. Implémenter l'algorithme de remontée et de redescente.
3. Tester ces algorithmes sur l'exemple de votre choix. Tester l'algorithme lu implémenté dans Matlab/Python.
4. Implémenter l'algorithme de Jacobi.
5. Implémenter l'algorithme de Gauss Seidel.
6. Tester sur l'exemple du TD.
7. Implémenter le schéma numérique décrit ci-dessus:

- Pour créer le maillage, on pourra utiliser `meshgrid`
- Pour les test, on pourra prendre:

$$a = b = 10, \quad nx = ny = 50 \quad v = [1.5, 1.5], \quad d = 0.01$$

et comme condition initiale

$$C^0(x, y) = \exp(-((x - x_0)/\sigma)^2) * \exp(-((y - y_0)/\sigma)^2)$$

avec  $(x_0, y_0) = (1.5, 1.5)$  et  $\sigma = 0.5$ .

- Pour visualiser la solution à chaque pas de temps, on pourra faire un `reshape(C, nx, ny)` puis `surface(X, Y, Z)`.
8. Comparer lorsque cela est possible les temps de calcul pour effectuer 200 pas de temps avec différentes méthode: LU, Jacobi, Gauss Seidel, LU built in de Matlab/Python, BiCGSTAB, GMRES...