

# Projet de Modélisation et Calcul Scientifique

Rémi Colin, Mickaël Song

ENSEEIH & INSA Toulouse - 4ModIA  
2022-2023

## Table des matières

<b>1</b>	<b>Introduction</b>	<b>3</b>
1.1	Question 1 . . . . .	3
<b>2</b>	<b>Approximation spatiale du Laplacien</b>	<b>4</b>
2.1	Question 2 . . . . .	4
2.2	Question 3 . . . . .	4
2.3	Question 4 . . . . .	4
2.4	Question 5 . . . . .	5
2.5	Question 6 . . . . .	6
2.6	Question 7 . . . . .	6
<b>3</b>	<b>Approximation des termes advectifs</b>	<b>6</b>
3.1	Question 8 . . . . .	6
3.2	Question 9 . . . . .	7
<b>4</b>	<b>Marches en temps</b>	<b>8</b>
4.1	Question 10 . . . . .	8
4.1.1	Question 10.a . . . . .	8
4.1.2	Question 10.b . . . . .	8
4.1.3	Question 10.c . . . . .	8
4.2	Question 11 . . . . .	8
4.3	Question 12 . . . . .	9
4.4	Question 13 . . . . .	9

## Table des figures

1	Erreur en fonction du nombre de points du maillage . . . . .	6
2	Concentration en fonction du temps . . . . .	9
3	Concentration en fonction du temps pour une condition initiale moins régulière . .	9

# 1 Introduction

Avec l'augmentation de l'industrialisation et de l'urbanisation, les risques de déversements de produits dans les cours d'eau sont de plus en plus fréquents. Ce projet vise à mieux comprendre comment ces produits se comportent dans les rivières pour pouvoir par exemple les gérer plus efficacement en cas de déversement.

Pour cela, nous allons modéliser le comportement en espace et en temps d'un produit déversé dans une rivière de largeur constante  $b$  et d'une vitesse  $V$ . Ce produit flotte à la surface de l'eau car il est supposé moins dense et peu miscible à l'eau (comme de l'huile). On note  $C(x, y, t)$  la concentration et  $\rho(x, y, t)$  la masse volumique du liquide à la position  $(x, y)$  et à l'instant  $t$ . Les équations de conservation de la masse et de la concentration sont  $\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div}(\rho V) = 0$  et  $\frac{\partial \rho C}{\partial t} + \text{div}(\phi) = 0$ .  $\phi$  correspond aux flux dispersifs qui peuvent être diffusifs,  $\phi_d = -\lambda \nabla C$  avec  $\lambda$  un coefficient de diffusion constant, ou advectifs,  $\phi_c = \rho CV$ . Le flux total  $\phi$  est la somme de ces deux flux.

## 1.1 Question 1

On part de l'équation de conservation de la concentration :

$$\frac{\partial(\rho C)}{\partial t} + \text{div}(\phi) = 0 \quad (1)$$

Or,

$$\phi = \phi_d + \phi_c = -\lambda \nabla C + \rho CV$$

On injecte dans (1) la nouvelle expression de  $\phi$ , ce qui nous donne :

$$\frac{\partial(\rho C)}{\partial t} + \text{div}(-\lambda \nabla C + \rho CV) = 0 \quad (2)$$

Transformons (2) pour qu'elle ne dépend que de  $C$ .

On a :

$$\frac{\partial(\rho C)}{\partial t} = \rho \frac{\partial C}{\partial t} + C \frac{\partial \rho}{\partial t} = \rho \frac{\partial C}{\partial t} - C \text{div}(\rho V)$$

et

$$\text{div}(-\lambda \nabla C + \rho CV) = \text{div}(-\lambda \nabla C) + \text{div}(\rho CV) = -\lambda \Delta C + \text{div}(\rho CV)$$

car  $\lambda$  est constant.

Donc en injectant ces expressions dans (2), on trouve :

$$\rho \frac{\partial C}{\partial t} - C \text{div}(\rho V) - \lambda \Delta C + \text{div}(\rho CV) = 0$$

On a :

$$-C \text{div}(\rho V) + \text{div}(\rho CV) = \rho V \cdot \nabla C$$

Donc :

$$\rho \left( \frac{\partial C}{\partial t} - (\lambda/\rho) \Delta C + V \cdot \nabla C \right) = 0$$

On pose  $\mu = (\lambda/\rho)$

Ainsi,

$$\frac{\partial C}{\partial t} - \mu \Delta C + V \cdot \nabla C = 0$$

Notre projet vise à résoudre un problème concernant une portion de la rivière d'une longueur  $a$ , où le coefficient  $\mu$  est considéré constant et la vitesse d'écoulement de la rivière est donnée par  $V = (1, 0)$ . Le domaine sur lequel nous travaillons est noté  $\Omega = ]0, a[ \times ]0, b[$  et suppose que le produit se trouve à l'intérieur. La frontière amont de la rivière est notée  $\Gamma_0$  et impose une condition de Dirichlet homogène, tandis que la condition de Neumann homogène est imposée sur la frontière  $\Gamma_1$  qui permet au fluide de sortir du domaine  $\Omega$ . Le but est de résoudre l'équation différentielle  $\text{div}(\rho V) - \mu \Delta C + V \cdot \nabla C = 0$  dans  $\Omega$  (2a), avec la condition  $C = 0$  sur  $\Gamma_0$  (2b),  $\frac{\partial C}{\partial n} = 0$  sur  $\Gamma_1$  (2c) et  $C(t = 0) = C_0$  dans  $\Omega$  (2d).

Afin d'approcher la solution de ce problème, nous allons utiliser la méthode des différences finies.

## 2 Approximation spatiale du Laplacien

Commençons par approximer l'opérateur Laplacien en 2D sur l'ouvert  $\Omega = ]0, a[ \times ]0, b[$  avec des conditions à la limite de type Dirichlet homogène sur  $\partial\Omega$  défini par :  
 $-\mu \Delta u = f$  (équation \*) dans  $\Omega$  et  $u = 0$  dans  $\partial\Omega$  (équation \*\*)

### 2.1 Question 2

En 2 dimensions,

$$\Delta u = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x, y) + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}(x, y)$$

Approximons la première dérivée par les différences finies. On fixe  $y_j$ .

$$u(x_{i+1}, y_j) = u(x_i, y_j) + h_x * \frac{\partial u}{\partial x}(x_i, y_j) + h_x^2 * \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_i, y_j) + \frac{h_x^3}{6} * \frac{\partial^3 u}{\partial x^3}(x_i, y_j) + O(h_x^4)$$

et

$$u(x_{i-1}, y_j) = u(x_i, y_j) - h_x * \frac{\partial u}{\partial x}(x_i, y_j) + h_x^2 * \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_i, y_j) - \frac{h_x^3}{6} * \frac{\partial^3 u}{\partial x^3}(x_i, y_j) + O(h_x^4)$$

On somme les deux égalités et on isole  $-\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_i, y_j)$  :

$$-\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_i, y_j) = \frac{2u(x_i, y_j) - u(x_{i-1}, y_j) - u(x_{i+1}, y_j)}{h_x^2} + O(h_x^2) \approx \frac{2u_{i,j} - u_{i-1,j} - u_{i+1,j}}{h_x^2}$$

De même, en fixant  $x_i$ , on trouve pour  $-\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}(x_i, y_j)$  :

$$-\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}(x_i, y_j) = \frac{2u(x_i, y_j) - u(x_i, y_{j-1}) - u(x_i, y_{j+1})}{h_y^2} + O(h_y^2) \approx \frac{2u_{i,j} - u_{i,j-1} - u_{i,j+1}}{h_y^2}$$

### 2.2 Question 3

On en déduit donc de l'équation (\*) et de la question précédente, le schéma aux différences finies consistant à l'ordre 2 au point  $(x_i, y_j)$  appartenant à  $\Omega$  :

$$\mu \left( \frac{2u_{i,j} - u_{i-1,j} - u_{i+1,j}}{h_x^2} \right) + \mu \left( \frac{2u_{i,j} - u_{i,j-1} - u_{i,j+1}}{h_y^2} \right) = f(x_i, y_j)$$

### 2.3 Question 4

Les conditions de l'équation (\*\*) sur  $\partial\Omega$  (conditions à la limite de type Dirichlet homogène) se traduisent par  $u(x=0, y) = u(x=a, y) = u(x, y=0) = u(x, y=b) = 0$  soit en discrétisant :

$$u_{0,j} = u_{N_x+1,j} = 0 \quad \forall j \in [0, N_y + 1]$$

et

$$u_{i,0} = u_{i,N_y+1} = 0 \quad \forall i \in [0, N_x + 1]$$

Ainsi, en posant,

$$U = \begin{pmatrix} U_0 \\ U_1 \\ \vdots \\ U_j \\ \vdots \\ U_{N_y+1} \end{pmatrix}, \quad U_j = \begin{pmatrix} u_{0,j} \\ u_{1,j} \\ \vdots \\ u_{N_x+1,j} \end{pmatrix} \quad \forall j \in [0, N_y + 1]$$

on peut écrire le schéma sous la forme  $AU = F$  avec :

$$A = \begin{bmatrix} I & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \\ C & B & C & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & C & B & C & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & C & B & C \\ 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 & I \end{bmatrix} \in \mathcal{M}_{(N_x+2)(N_y+2)}(\mathbb{R})$$

$$B = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \\ -\frac{\mu}{h_x^2} & \mu(\frac{2}{h_x^2} + \frac{2}{h_y^2}) & -\frac{\mu}{h_x^2} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & -\frac{\mu}{h_x^2} & \mu(\frac{2}{h_x^2} + \frac{2}{h_y^2}) & -\frac{\mu}{h_x^2} \\ 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 & 1 \end{bmatrix} \in \mathcal{M}_{N_x+2}(\mathbb{R})$$

$$C = \begin{bmatrix} 0 & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & -\frac{\mu}{h_y^2} & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 & -\frac{\mu}{h_y^2} & 0 \\ 0 & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \end{bmatrix} \in \mathcal{M}_{N_x+2}(\mathbb{R})$$

$$F = \begin{pmatrix} F_0 \\ F_1 \\ \vdots \\ F_j \\ \vdots \\ F_{N_y+1} \end{pmatrix}, \quad F_j = \begin{pmatrix} f_{0,j} \\ f_{1,j} \\ \vdots \\ f_{N_x+1,j} \end{pmatrix} \quad \forall j \in [0, N_y + 1]$$

## 2.4 Question 5

Le code relatif à cette question a été implémenté dans le fichier Poisson-Modia.py. On trouve une erreur d'approximation de 0.027. On peut donc considérer que notre approximation est correcte.

La figure 1 montre que l'erreur d'approximation converge bien lorsque nous raffinons le maillage.

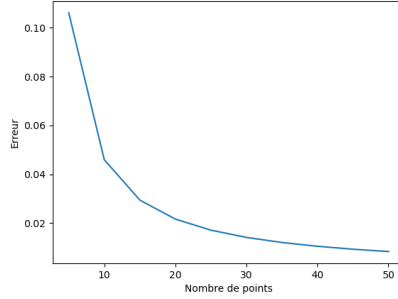


FIGURE 1 – Erreur en fonction du nombre de points du maillage

## 2.5 Question 6

Ajoutons maintenant les conditions de Neumann sur le bord  $\Gamma_1 = \{(a, y) | y \in [0, b]\}$ , on retrouve alors le problème que nous souhaitons résoudre initialement :  $\text{div}(\rho V) - \mu \Delta C + V \cdot \nabla C = 0$  dans  $\Omega$  (2a), avec la condition  $C = 0$  sur  $\Gamma_0$  (2b),  $\frac{\partial u}{\partial n} = 0$  sur  $\Gamma_1$  (2c) et  $C(t = 0) = C_0$  sur  $\partial\Omega$  (2d)

La condition (2b) vient d'être traitée. Intéressons nous à la condition (2c) :

$$u(a - h_x, y) = u(a, y) - h_x * \frac{\partial u}{\partial x}(a, y) + O(h_x^2) \quad (a)$$

et

$$u(a - 2h_x, y) = u(a, y) - 2h_x * \frac{\partial u}{\partial x}(a, y) + O(h_x^2) \quad (b)$$

On effectue l'opération 4\*(a) - 1\*(b) et on isole  $\frac{\partial u}{\partial x}(a, y)$  :

$$\frac{\partial u}{\partial x}(a, y) = \frac{4u(a - h_x, y) - u(a - 2h_x, y) - 3u(a, y)}{2h_x} + \mathcal{O}(h_x^2) \approx \frac{4u_{Nx,j} - u_{Nx-1,j} - 3u_{Nx+1,j}}{2h_x^2}$$

## 2.6 Question 7

Il suffit alors de modifier la dernière ligne de la matrice B, en modifiant les 3 derniers termes de la dernière ligne respectivement par  $\frac{-1}{2h_x}$ ,  $\frac{2}{h_x}$ ,  $\frac{-3}{2h_x}$

Le code relatif à cette question a été implémenté dans le fichier Poisson-Modia.py.

# 3 Approximation des termes advectifs

Le mouvement du produit est influencé par l'écoulement de la rivière, qui tend à le déplacer dans la direction de V. Le terme de dérivée directionnelle  $V \cdot \nabla u$  représente ces effets advectifs. Nous considérons maintenant le problème de diffusion-advection stationnaire suivant :  $-\mu \Delta u + V \cdot \nabla u = f$  dans  $\Gamma$ , avec des conditions de Dirichlet homogènes sur  $\Gamma_0$  et des conditions de Neumann homogènes sur  $\Gamma_1$ . V appartient à  $\mathcal{R}^2$

## 3.1 Question 8

Dans ce problème, la diffusion et l'advection sont modélisées par les termes respectifs  $-\mu \Delta u$  et  $V \cdot \nabla u$ , où  $\mu$  représente la diffusion et V est la vitesse de l'advection. On peut quantifier l'importance de chaque phénomène en introduisant le nombre de Péclet, défini comme suit :

$$P_{el} = \frac{\text{taux de transport advectif}}{\text{taux de transport diffusif}} = \frac{l_v}{\mu}$$

Lorsque  $Pe_l \gg 1$ , l'advection est prédominante et lorsque  $Pe_l \ll 1$ , la diffusion est prédominante. Pour déterminer le régime dominant, on effectue une analyse dimensionnelle.

- Pour le régime advectif, on a :

$$[\partial_t C] = [V][\nabla C] \Leftrightarrow [C]T^1 = [V][C]L^1 \Leftrightarrow \tau_a = t = l/v$$

- De plus, pour le régime diffusif, on a :

$$[\partial_t C] = [\mu][\Delta C] \Leftrightarrow [C]T^{-1} = [\mu][C]l^{-2} \Leftrightarrow \tau_d = L^2/\mu$$

Ainsi, on peut obtenir :

$$Pe_l = \tau_d/\tau_a = lv/\mu$$

### 3.2 Question 9

Si on a :

$$V = \begin{pmatrix} v_x & 0 \end{pmatrix}$$

Alors :

$$\langle V, \nabla u(x_i, y_j) \rangle = v_x \frac{\partial u}{\partial x}(x_i, y_j)$$

Ainsi, avec un schéma centré sur  $\frac{\partial u}{\partial x}(x_i, y_j)$ , on trouve :

$$\frac{\partial u}{\partial x}(x_i, y_j) \approx \frac{u(x_{i+1}, y_j) - u(x_{i-1}, y_j)}{2h_x}$$

Donc :

$$\langle V, \nabla u(x_i, y_j) \rangle = v_x \frac{\partial u}{\partial x}(x_i, y_j) \approx \frac{v_x}{2h_x} (u_{i+1,j} - u_{i-1,j})$$

Ainsi, on peut modéliser la convection par l'ajout d'une nouvelle matrice  $Conv$  comme suit :

$$Conv = \begin{bmatrix} 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ 0 & D & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & D & 0 \\ 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \end{bmatrix}$$

Où :

$$D = v_x \begin{bmatrix} 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ \frac{-1}{h_x^2} & 0 & \frac{1}{h_x^2} & & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & & \frac{-1}{h_x^2} & \ddots & \frac{1}{h_x^2} \\ 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \end{bmatrix}$$

Enfin, on peut remplacer la matrice  $A$  par :  $A + Conv$ .

## 4 Marches en temps

### 4.1 Question 10

#### 4.1.1 Question 10.a

Pour  $v_x = 0$ , on avait :

$$-\Delta u(t) = \mu \left( \frac{2u_{i,j} - u_{i-1,j} - u_{i+1,j}}{h_x^2} \right) + \mu \left( \frac{2u_{i,j} - u_{i,j-1} - u_{i,j+1}}{h_y^2} \right) = f(x_i, y_j)$$

De plus, l'intégration temporelle d'Euler Explicite donne :  $u_{n+1} = u_n + \delta t * \mu * \Delta u(t)$ .  
En couplant l'intégration temporelle et la discrétisation spatiale, on trouve :

$$u_{i,j}^{n+1} = u_{i,j}^n + \delta t \cdot \mu \left( \frac{-2u_{i,j}^n + u_{i-1,j}^n + u_{i+1,j}^n}{h_x^2} + \frac{-2u_{i,j}^n + u_{i,j-1}^n + u_{i,j+1}^n}{h_y^2} \right)$$

Ainsi,

$$u_{i,j}^{n+1} = \left( 1 - \frac{2\delta t \cdot \mu}{h_x^2} - \frac{2\delta t \cdot \mu}{h_y^2} \right) * u_{i,j}^n + \delta t \cdot \mu \left( \frac{u_{i-1,j}^n + u_{i+1,j}^n}{h_x^2} + \frac{u_{i,j-1}^n + u_{i,j+1}^n}{h_y^2} \right)$$

Pour que  $u_{i,j}^{n+1}$  soit une combinaison convexe des  $u_{i-1,j}^n, u_{i+1,j}^n, u_{i,j-1}^n, u_{i,j+1}^n$ , il suffit que tous les coefficients soient  $\geq 0$ , càd  $1 - \frac{2\delta t \cdot \mu}{h_x^2} - \frac{2\delta t \cdot \mu}{h_y^2} \geq 0$ .

D'où,  $\text{CFL} = \frac{\delta t \cdot \mu}{h_x^2} + \frac{\delta t \cdot \mu}{h_y^2} \leq \frac{1}{2}$ .

#### 4.1.2 Question 10.b

Cette condition limite notre choix des paramètres  $\mu, h_x, h_y$  et  $\delta t$ . En effet, si nous fixons  $h_x, h_y$  et  $\mu$ , alors le pas de temps devra être inférieur à  $2 * \mu h_x^2 + 2 * \mu h_y^2$ . Il faudrait donc tenir compte du rapport entre la discrétisation en espace et le pas de temps.

#### 4.1.3 Question 10.c

Dans le cas de l'équation de la chaleur en appliquant une discrétisation spatiale aux différences finies pour le membre de droite, la discrétisation de Crank-Nicolson est :

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\delta t} = \frac{\mu}{2h_x^2} (u_{i+1}^{n+1} - 2u_i^{n+1} + u_{i-1}^{n+1} + u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n)$$

soit

$$u_i^{n+1} = u_i^n + \frac{C}{2} (u_{i+1}^{n+1} - 2u_i^{n+1} + u_{i-1}^{n+1} + u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n) \quad C = \frac{\mu \delta t}{h_x^2}$$

Analysons de stabilité par la méthode de Fourier (stabilité de Von Neumann). On pose :  $u_i^n = A^n e^{ji\varphi}$ . On introduit le facteur d'amplification :  $G = \frac{A^{n+1}}{A^n} = \frac{1+C(\cos(\varphi)-1)}{1+C(1-\cos(\varphi))}$ .  
Le schéma est stable si  $|G| \leq 1$ . C'est le cas ici,  $\forall C$  donc le schéma de Crank-Nicholson dans le cas de l'équation de la chaleur est stable.

### 4.2 Question 11

On se place dans le cas où le régime dominant est le régime advectif ( $Pe_t \gg 1$ ). Dans ce cas, on peut considérer que  $-\mu \Delta u = 0$ . Ainsi,

$$\frac{\partial C}{\partial t} + V \cdot \nabla C = 0$$



En utilisant la discrétisation spatiale du terme advectif et le schéma d'Euler explicite, une même étude que précédemment nous donne :

$$\frac{A^{n+1}}{A^n} = 1 - jC \sin(\varphi)$$

dont le module vaut  $|G| = \sqrt{1 + C^2 \sin^2(\varphi)} > 1$ . Le schéma est donc instable. Il n'est donc pas raisonnable de considérer le schéma d'Euler explicite.

### 4.3 Question 12

Avec les conditions données dans l'énoncé de la question 12, la concentration est diminuée de 80% après environ  $t = 1.0$  sec comme nous pouvons le voir dans la figure 2.

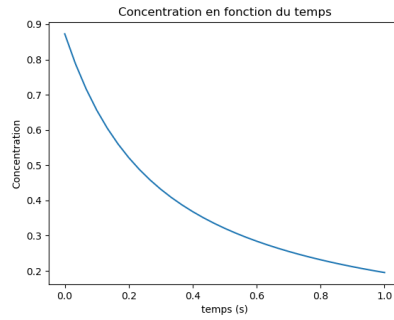


FIGURE 2 – Concentration en fonction du temps

### 4.4 Question 13

Pour une condition initiale moins régulière, on trouve, d'après la figure 3, une concentration diminuée de 80% au bout d'environ 0.5 sec.

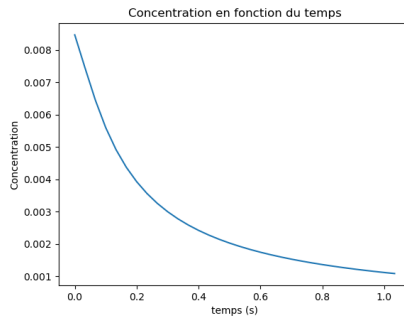


FIGURE 3 – Concentration en fonction du temps pour une condition initiale moins régulière