

TD n°6

Créer un sous-dossier *TD_06* dans le dossier *TD_PROG_IMP*. La compilation des programmes sera faite en utilisant un fichier *Makefile* (fourni avec le sujet) et trois fichiers « *m_type.f90* », « *main.f90* » et « *sousprog.f90* » contenant respectivement un module avec des structures, le programme principal et les sousroutines/fonctions qui seront développées pendant le TD.

Partie 1 : Lecture d'un fichier de données de configuration

Dans le cadre du développement d'un programme de résolution de problèmes d'advection-diffusion, une étape est la lecture des données de configuration du problème dans un fichier. On dispose initialement d'un fichier formaté appelé « *data_2D.dat* » (fourni avec le sujet) contenant une liste d'informations sur les paramètres physiques et numériques du problème.

1°) Dans le fichier « *m_type.f90* », créer un module appelé *m_type*. Dans ce module, définir deux structures de données (au sens du Fortran 90) appelées respectivement *phys* et *num* ayant pour champs les variables nécessaires au stockage des valeurs des paramètres physiques et numériques du fichier « *data_2D.dat* ».

2°) Dans le fichier « *sousprog.f90* », créer la subroutine, notée *read_data*, qui ouvre le fichier « *data_2D.dat* » et affecte les valeurs des paramètres physiques et numériques du fichier dans les champs des structures *phys* et *num*.

3°) Dans le fichier « *prog.f90* », créer un programme principal qui appelle la subroutine *read_data*.

Partie 2 : Affichage d'un champ de concentration 2D

L'utilisateur souhaite à présent modéliser le problème de la dispersion d'un polluant de concentration C_I initialement injecté au centre du domaine physique, dans un cercle de rayon R_I . L'objectif du programme est de calculer cette concentration dans le domaine (dans le cas présent au moment de l'arrivée du polluant, c'est-à-dire initialement) et d'afficher le résultat à l'écran.

Le domaine physique de longueur L suivant x et H suivant y est discrétisé en N_x points de calcul x_i suivant x qui sont régulièrement espacés et numérotés de $i=1$ à $i=N_x$, tels que $x_1 = 0$ et $x_{N_x} = L$. De même, dans la direction y , il est discrétisé en N_y points de calcul y_j qui sont régulièrement espacés et numérotés de $j=1$ à $j=N_y$, tels que $y_1 = 0$ et $y_{N_y} = H$.

On définit deux vecteurs de réels, notés respectivement x_{reg} et y_{reg} (correspondant respectivement à la position x et y de chaque point du domaine discrétisé). De plus, on définit un tableau de rang 2 de réels, noté C , ayant N_x éléments selon la première dimension et N_y

éléments selon la deuxième dimension. L'élément $C(i,j)$ du tableau C correspond à la concentration du polluant au point de coordonnées $[x_{reg}(i), y_{reg}(j)]$ du domaine.

4°) Modifier le programme principal pour créer de façon dynamique les vecteurs x_{reg} et y_{reg} et le tableau C tels que leurs éléments soient tous égaux à zéro.

5°) Dans le fichier « sousprog.f90 », créer la subroutine *mesh* qui modifie les vecteurs x_{reg} et y_{reg} tel que leurs éléments suivent la progression linéaire suivante :

$$x_i^{reg} = \frac{L}{N_x - 1}(i - 1) \quad \text{pour } i \in [1, N_x], \quad (1)$$

$$y_j^{reg} = \frac{H}{N_y - 1}(j - 1) \quad \text{pour } j \in [1, N_y]. \quad (2)$$

6°) Dans le fichier « sousprog.f90 », créer la fonction (au sens du Fortran) appelée *dist*, qui calcule la valeur de la distance entre un point de coordonnées x et y et le centre du domaine tel que $dist = \sqrt{(x - L/2)^2 + (y - H/2)^2}$.

7°) Dans le fichier « sousprog.f90 », créer la subroutine *C_init* qui modifie le tableau C tel que chaque élément du tableau suit la distribution spatiale suivante :

$$C(x, y) = C_1 + (C_0 - C_1) \times \left(\frac{1 + \operatorname{erf}((d_1 - R_1)/\Delta)}{2} \right), \quad (3)$$

$$\text{avec } \Delta = \frac{2}{3} \min \left(\frac{L}{N_x - 1}, \frac{H}{N_y - 1} \right), \quad (4)$$

où C_1 est la concentration initiale du polluant, C_0 celle en l'absence de polluant, d_1 est la distance entre un point de coordonnées $[x,y]$ et le centre du domaine, et R_1 est le rayon initial de la tâche de pollution. Nota : (i) la fonction « *erf* » existe en Fortran 90 et n'a pas besoin d'être programmée ; (ii) utiliser la fonction *dist* pour calculer d_1 .

8°) Dans le fichier « prog.f90 », appeler les subroutine *mesh* puis *C_init*, et faire afficher le tableau C à l'écran de telle sorte que les colonnes correspondent à $x=cte$ et les lignes à $y=cte$.

9°) Modifier le format d'affichage de telle sorte que les valeurs de C soient affichées au format de type 'float' (écriture décimale) avec deux chiffres après la virgule.