

## Modélisation de la diffusion d'un polluant en 1D

Une collectivité locale héberge une industrie polluante qui, dans le cas d'un accident, est susceptible de larguer dans un lac un agent polluant de concentration  $C_0$ . La collectivité vous mandate pour développer un outil numérique modélisant la diffusion de ce polluant et ce, afin de l'aider dans ses prises de décisions.



Figure 1 : Exemple de pollution : Shuyak Strait, 49 miles north of Kodiak, Alaska. 27 février 2018  
(Crédits : US Coast Guard photo)

### Enoncé du problème :

Pour déterminer le champ de concentration  $C$  à un instant  $t_f$  dans un milieu diffusif le long d'un domaine de longueur  $L$  (par défaut  $L=1\text{km}$ ) suivant la direction  $x$ , on est amené à résoudre l'équation différentielle suivante (terme d'advection négligé) :

$$\frac{\partial C(x,t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C(x,t)}{\partial x^2}, \quad (1)$$

où  $D$  est le coefficient de diffusivité massique de l'agent polluant (par défaut  $D=1 \text{ m}^2/\text{s}$ ), supposé uniforme, positif et constant et  $t \geq 0$  le temps.

La condition initiale à  $t = 0$  est  $C(x,0) = C_{init}(x)$  telle que :

$$C_{init}(x) = C_0 \times (H(x - x_d) - H(x - x_f)), \quad (2)$$

où  $C_0$  est la concentration du polluant lors de l'injection dans le domaine,  $x_d$  et  $x_f$  sont les positions de début et de fin de la zone de pollution ( $0 \leq x_d < x_f \leq L$ ) et  $H(x)$  est la fonction d'Heaviside telle que  $H(x \geq 0) = 1$  et  $H(x < 0) = 0$ . Par défaut  $x_d = 400 \text{ m}$ ,  $x_f = 600 \text{ m}$  et  $C_0=1$ .

Les conditions limites en  $x = 0$  et  $x = L$  sont des conditions de Dirichlet, à savoir  $C(0,t) = f(t)$  et  $C(L,t) = 0$  avec  $t \geq 0$  où  $f$  est une fonction du temps qui sera précisée par la suite. Par défaut,  $f(t)=0$ .

La solution numérique de ce problème est obtenue en utilisant la méthode des différences finies. Pour cela, le domaine physique de longueur  $L$  et de direction  $x$  est discrétisé en  $N-1$  segments de longueur  $\Delta x$ , ce dernier étant appelé le pas d'espace. Ici, les  $N$  points  $x_k$  de calcul seront numérotés de  $k=1$  à  $k=N$  depuis  $x_1=0$  jusqu'à  $x_N=L$ . Les solutions en temps sont calculées tous les  $\Delta t$  depuis  $t=0$  jusqu'à  $t_f=N_t\Delta t$  avec  $\Delta t$  appelé le pas de temps et  $N_t$  est le nombre total de pas de temps.

On souhaite tester le schéma numérique dit « explicite centré » pour résoudre cette équation.

### Application de la méthode des différences finies :

La méthode consiste à remplacer les dérivées temporelle et spatiale de (1) par les approximations suivantes :

$$\text{- schéma explicite d'Euler : } \frac{\partial C(x,t)}{\partial t} = \frac{C(x_k, t + \Delta t) - C(x_k, t)}{\Delta t}, \quad (3)$$

$$\text{- schéma centré : } \frac{\partial^2 C(x,t)}{\partial x^2} = \frac{C(x_k - \Delta x, t) - 2C(x_k, t) + C(x_k + \Delta x, t)}{\Delta x^2}. \quad (4)$$

En injectant (3) et (4) dans (1), on obtient :

$$\frac{C(x_k, t + \Delta t) - C(x_k, t)}{\Delta t} = D \frac{C(x_k - \Delta x, t) - 2C(x_k, t) + C(x_k + \Delta x, t)}{\Delta x^2}. \quad (5)$$

L'équation (5) est résolue pas à pas ce qui veut dire qu'au moment de sa résolution le champ de concentration à l'instant  $t$  est connu et l'on cherche le champ de concentration à l'instant  $t+\Delta t$ . En isolant les termes inconnus des termes connus, on obtient la solution en  $t+\Delta t$  en fonction de celle en  $t$  via :

$$C(x_k, t + \Delta t) = R C(x_k - \Delta x, t) + (1 - 2R) C(x_k, t) + R C(x_k + \Delta x, t) \quad \text{pour } k \in ]1, N[ , \quad (6)$$

$$C(x_1, t + \Delta t) = f(t + \Delta t) \quad \text{pour } k = 1 , \quad (7)$$

$$C(x_N, t + \Delta t) = 0 \quad \text{pour } k = N , \quad (8)$$

avec  $R = D\Delta t / \Delta x^2$ , un nombre sans dimension appelé par la suite « nombre de Fourier ».

### Objectif :

On souhaite obtenir l'évolution de la concentration dans le domaine en fonction du temps.

### Travail demandé :

#### 1- Etape de développement du programme

Les spécifications du programme sont telles que le logiciel doit remplir les tâches suivantes :

- récupérer les données d'entrée du problème dans un fichier de données d'entrée,
- créer un maillage régulier,
- initialiser la concentration dans le milieu à  $t=0$ ,
- calculer la concentration à  $t+\Delta t$  à partir de la solution à  $t$ . Pour cela, utiliser deux vecteurs qui stockent les  $N$  concentrations à l'instant  $t$  et  $t+\Delta t$ ,

- écrire dans un fichier, à des temps réguliers, la distribution spatiale de la concentration dans le domaine.

La structuration de l'environnement et des traitements du programme devra respecter le cahier des charges suivant :

- utiliser une structure qui rassemble les paramètres physiques et numériques du problème (données) et qui est définie dans un fichier spécifique contenant un module,
- utiliser l'allocation dynamique,
- utiliser à bon escient des sous-routines et des fonctions,
- écrire le programme principal, le module et les sous-routines/fonctions dans des fichiers séparés,
- compiler avec un fichier Makefile.

À la fin de cette étape de développement, le code devrait être opérationnel.

## 2- Etape de vérification du programme

« Vérifier un programme » consiste à faire tourner le code sur une configuration dont la solution est triviale et s'assurer que le résultat est celui attendu. Dans le problème présent, on peut envisager (entre autres) trois tests :

- $C_0=0$  et  $D \neq 0$  : le programme doit 'trouver' une absence de pollution partout et tout le temps.
- $C_0 \neq 0$  et  $D=0$  : le programme doit 'trouver' une absence de diffusion de la pollution.
- $C(0,t) = f(t) = C_0 \neq 0$ ,  $C(x,0) = C_{init}(x) = 0$  et  $D \neq 0$ , le programme doit 'trouver' aux « temps longs » une évolution linéairement décroissante de la concentration  $C(x,t \rightarrow \infty) = C_0 \times (1 - x/L)$  pour  $0 \leq x \leq L$ .

## 3- Etape de validation du programme

« Valider un programme » consiste à comparer la solution obtenue par le code avec une solution de référence, dans une configuration la plus proche possible du problème concret envisagé. Ici une solution exacte du problème existe dans le cas d'un milieu semi-infini ( $0 \leq x < \infty$ ), avec par exemple comme condition initiale à  $t = 0$  :  $C(x,0) = C_{init}(x) = 0$  pour tout  $0 < x < \infty$  et comme condition limite en  $x=0$  :  $C(0,t) = f(t) = C_0 \neq 0$  pour  $t > 0$ . La solution est donnée par l'équation (9) :

$$\frac{C(x,t)}{C_0} = 1 - \operatorname{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}}\right) \quad \text{avec} \quad \operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x \exp(-t^2) dt \quad , \quad (9)$$

où  $C_0$  est la concentration initiale du polluant et  $D$  est un coefficient de diffusion (en  $\text{m}^2/\text{s}$ ). Nota : la fonction « erf » existe en Fortran 90 et n'a pas besoin d'être programmée. Un exemple d'évolution de la concentration du polluant dans ce cas est donné sur la figure 2. Pour un choix particulier des paramètres physiques ( $L$ ,  $t_f$  et  $D$ ) et des paramètres numériques ( $N$  et  $Nt$  ou, de façon équivalente,  $\Delta x$  et  $\Delta t$ ), on comparera la solution numérique avec la solution théorique à plusieurs temps donnés.

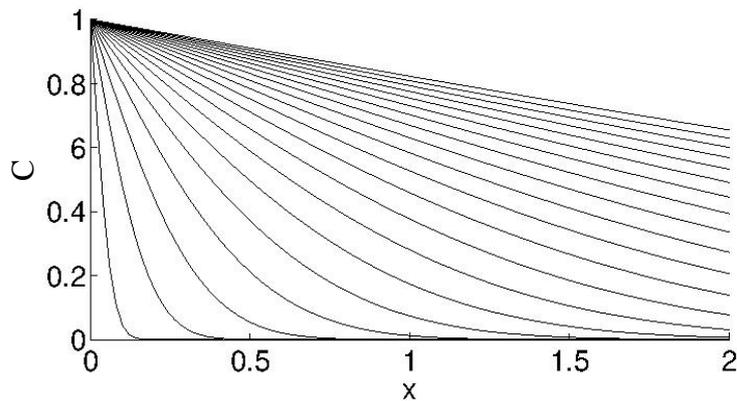


Figure 2 : Exemple de solution à différents temps ( $C_0=1$ ). A  $t=0$ ,  $C(x)=0$  partout sauf en  $x=0$  où  $C(x=0)=1$ .

#### 4- Etape de mise en évidence du critère de stabilité numérique du schéma

La résolution numérique d'une équation aux dérivées partielles par un schéma numérique peut parfois conduire à des résultats non-physiques (valeurs anormalement trop grandes de la solution numérique par rapport à ce qui est attendu physiquement) en fonction de la « stabilité » du schéma. Dans le cas présent, le schéma est stable sous certaines conditions que nous cherchons à déterminer (vous verrez au second semestre comment déterminer a priori ce critère). En partant de la configuration par défaut, notamment  $f(t)=0$ ,  $x_d = 400$  m,  $x_f = 600$  m et  $C_0=1$  :

- Fixer la valeur de  $L$ ,  $t_f$  et  $D$  ainsi que celle de  $\Delta x$  et déterminer la valeur critique  $\Delta t_c$  au-delà de laquelle le calcul est numériquement « instable ». Que vaut  $D\Delta t_c/\Delta x^2$  ?
- Fixer la valeur de  $L$ ,  $t_f$  et  $D$  ainsi que celle de  $\Delta t$  et déterminer la valeur critique  $\Delta x_c$  au-dessous duquel le calcul est numériquement « instable ». Que vaut  $D\Delta t/\Delta x_c^2$  ?
- Fixer la valeur de  $L$ ,  $t_f$  ainsi que celle de  $\Delta t$  et  $\Delta x$  et déterminer la valeur critique  $D_c$  au-delà de laquelle le calcul est numériquement « instable ». Que vaut  $D_c\Delta t/\Delta x^2$  ?
- Proposer un critère de stabilité numérique pour ce schéma.

#### 5- (optionnel) : analyse de sensibilité des résultats vis-à-vis de la résolution spatiale et temporelle

Se placer dans la même configuration que la partie 3 (validation du programme).

- Pour une valeur de  $\Delta x$  donnée et une valeur constante et petite de  $\Delta t$ , comparer la solution numérique et théorique en calculant une 'différence' entre celles-ci (par exemple, calculer la valeur locale *maximum* de la différence entre les solutions, ou la valeur *moyenne* de la différence des solutions).
- Répéter l'opération pour plusieurs valeurs de  $\Delta x$  dans la gamme  $L/1000 \leq \Delta x \leq L/10$  et une même valeur constante et petite de  $\Delta t$ .
- Tracer sur un graphique en représentation log-log l'évolution de « l'erreur » relative entre solution numérique et solution exacte en fonction de  $\Delta x/L$ .

- Si la courbe obtenue est proche d'une droite, calculer sa pente. La pente de cette droite représente l'ordre de précision spatiale pour ce schéma et cette équation aux dérivées partielles.
- Répéter l'analyse en faisant varier  $\Delta t$  et en fixant  $\Delta x$  à une valeur petite. La pente de la droite obtenue représente l'ordre de précision temporelle pour ce schéma et cette équation aux dérivées partielles.

### 6- (optionnel) : condition limite dépendant du temps

Dans cette partie, on suppose que le polluant est injecté de façon instationnaire, c'est-à-dire que sa concentration dans la zone d'injection (ici  $x=0$ ) oscille dans le temps en suivant la loi suivante :  $C(0,t) = f(t) = C_0 \times (A + B \sin(\omega t))$  avec  $A, B \geq 0$  et  $\omega \geq 0$  pour  $t > 0$ . Le problème fait donc intervenir maintenant deux échelles de temps, à savoir le temps caractéristique des oscillations temporelles  $\tau = 2\pi/\omega$  et le temps caractéristique de la diffusion à l'échelle du lac  $T = L^2/D$  (ou à l'échelle du pas d'espace  $T_\Delta = \Delta x^2/D$ ).

- Se placer dans la configuration suivante : condition initiale uniformément nulle ( $C(x,0) = C_{ini}(x) = 0$ ) ; condition limite en  $x=0$  :  $C(0,t) = f(t) = C_0 \times (A + B \sin(\omega t))$  avec  $A=B=1$  et  $\omega \geq 0$  pour  $t > 0$ . Observer l'évolution de la concentration du polluant pour un temps physique  $t_f = 5\tau$ .
- Comparer le comportement du polluant en fonction de la valeur relative de  $\tau$  et  $T$  (ex. :  $\tau \gg T$ ,  $\tau \approx T$ ,  $\tau \ll T$ ).