

# Projet MM031-2009: Pollution fluviale

Ionut Danaila, Frédéric Hecht, Olivier Pironneau

25 mars 2009

## Table des matières

<b>1 Généralités</b>	<b>1</b>
<b>2 Projet 1</b>	<b>4</b>
<b>3 Projet 2</b>	<b>6</b>
3.1 Calcul de l'écoulement fluide . . . . .	6
3.2 Évolution du polluant . . . . .	9
3.3 Interface Java . . . . .	10
3.4 OpenGL/GLUT . . . . .	10

## 1 Généralités

**Géométries** On s'intéresse à la modélisation et la simulation de l'effet d'une rivière polluante sur un lac. Dans un premier temps nous allons considérer une rivière seule, c'est à dire un segment de droite  $(0, L)$  et dans un deuxième temps le lac seul. Dans le cas du lac seul, les rivières ne sont pas dans le domaine de calcul, seules leurs embouchures dans le lac le sont ; la géométrie du problème est alors constituée d'un lac connecté à 3 rivières  $\{\Gamma_i\}_{1,2,3}$  ; on suppose par exemple que l'eau entre dans le lac par  $\Gamma_1$  et  $\Gamma_2$  et sort par  $\Gamma_3$ . Comme nous faisons une approximation bidimensionnelle du problème le lac est modélisé par un domaine plan  $\Omega$  de frontière  $\Gamma = \Gamma_0 \cup \Gamma_1 \cup \Gamma_2 \cup \Gamma_3$  où  $\Gamma_0$  désigne les rives du lac (voir figure 1).

**L'eau** L'écoulement dans le lac est supposé incompressible, non-visqueux et sans tourbillon (irrotationnel), ce qui permet l'existence d'une fonction

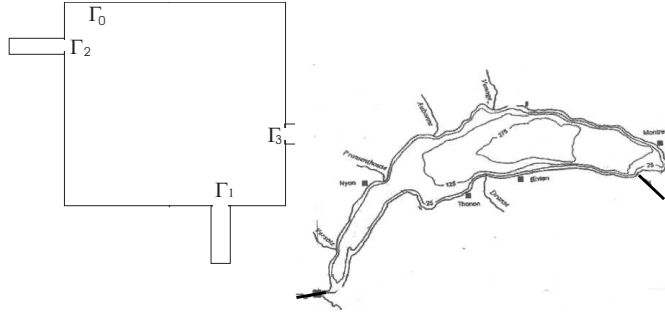


FIG. 1 – Géométries pour les calculs.

potentiel d'écoulement  $\phi$  telle que

$$u = \nabla\phi, \quad p = p_\infty - \frac{1}{2}u^2, \quad -\Delta\phi = 0, \quad \phi|_{\Gamma_i} = a_i, \quad i > 0, \quad \frac{\partial\phi}{\partial n}|_{\Gamma_0} = 0 \quad (1)$$

où  $u$  est la vitesse et  $p$  la pression dans l'eau. Les constantes  $a_i$  sont des données déterminant la quantité d'eau qui entre/sort du lac par ces frontières.

**Les pollutions solides** Les pollutions solides (papiers, sacs plastiques, feuilles mortes...) sont modélisées par des particules ponctuelles de type "scalaires passifs", c'est à dire un ensemble de  $M$  points de  $R^2$  convectés par l'eau. La position  $X_j(t)$  au temps  $t$  d'une particule  $j$  qui était en  $X_j^0$  à l'instant initial est donc donnée par

$$\dot{X}_j(t) = u(X_j(t)) \quad X_j(0) = X_j^0, \quad j = 1..M \quad (2)$$

On peut approcher ces équations par

$$X_j^{n+1} = X_j^n + u(X_j^n)\delta t, \quad X_j^0 \text{ donné.} \quad (3)$$

Si toutes les particules n'ont pas le même effet polluant (taille du sac plastique par exemple) il convient d'associer un poids  $w_j$  à la  $j$ -ème particule ; celui-ci reste constant dans le temps sauf si la pollution est bio-dégradable.

**Densité de pollution** Soit  $\{X_j(t), w_j\}_1^M$  un ensemble de  $M$  particules ponctuelles de poids  $\{w_j(t)\}_0^M$  convectées par l'eau mais aussi agitées par un mouvement brownien (prise en compte de la turbulence dans l'eau du lac), alors

$$X_j^{n+1} = X_j^n + u(X_j^n)\delta t + \sqrt{2\sigma\delta t}\mathcal{N}_j^n, \quad X_j^0 \text{ donné.} \quad (4)$$

où  $\mathcal{N}_j^n$  est une réalisation de  $\mathcal{N}$  qui est une variable aléatoire gaussienne centrée en 0, de variance unité et à valeurs dans  $R^2$ . On suppose donnée la loi de variation des poids  $w$  :

$$\dot{w}_j = a(X_j(t))w_j(t) + b(X_j(t))$$

On pose

$$\rho(x, t) = \lim_{M \rightarrow \infty, \epsilon \rightarrow 0} \sum_{\{j : X_j(t) \in B(x)\}} w_j(t) \quad (5)$$

où  $B(x)$  est un disque de centre  $x$  et de rayon  $\epsilon$  petit. Dans la limite  $M = O(\epsilon^{-2})$ ,  $\epsilon \rightarrow 0$  et avec quelques hypothèses supplémentaires on peut montrer que

$$\partial_t \rho + u \cdot \nabla \rho - \sigma \Delta \rho = a\rho + b, \quad \rho(x, 0) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \sum_{j: X_j^0 \in B(x)} w_j(0)$$

Pour que le problème soit bien posé il faut se donner  $\rho$  ou  $\partial_n \rho$  sur les bords. Si on suppose que les polluants rentrent par  $\Gamma_1 \cup \Gamma_2$ , sortent par  $\Gamma_3$  et glissent sur les bords du lac alors on prendra

$$\rho = \rho_\Gamma \text{ sur } \Gamma_i, i = 0, 1, 2 \quad \partial_n \rho = 0 \text{ sur } \Gamma_3$$

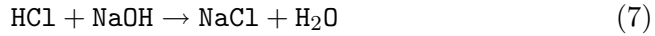
avec  $\rho_\Gamma$  donné mais nul sur  $\Gamma_0$ .

**Polluants liquides** La pollution liquide consiste en général soit de produits chimiques dissous dans de l'eau (ex : sels), soit de polluants liquides non miscibles à l'eau (ex : mazout). Chacun est modélisé par une concentration  $\{\rho_i\}_1^I$  dans l'eau du lac et en l'absence de réaction chimique on peut calculer les  $\rho_i$  par

$$\partial_t \rho_i + u \cdot \nabla \rho_i - \sigma_i \Delta \rho_i = 0, \quad \rho(x, 0) = \rho_i^0|_\Gamma, \quad \rho_i|_\Gamma \text{ ou } \partial_n \rho_i \text{ donnés} \quad (6)$$

où  $\sigma_i$  est le coefficient de diffusion de l'espèce  $i$ .

**La chimie** Prenons le cas de la décomposition d'un détergent chloré, le chlorure d'hydrogène qui se combine avec un hydrochlorure de sodium pour donner du sel et de l'eau.



Nous avons à gérer 3 espèces dissoutes dans l'eau, chacune ayant sa concentration,  $\rho_H, \rho_N, \rho_S$  pour  $\text{HCl}, \text{NaOH}, \text{NaCl}$ . On suppose que le taux de réaction est proportionnel aux densités des composants ; par ailleurs la concentration en sel ne nous intéresse pas. On aura donc pour les deux autres espèces

$$\begin{aligned} \partial_t \rho_H + u \cdot \nabla \rho_H - \sigma_H \Delta \rho_H &= -\alpha \rho_H \rho_N \\ \partial_t \rho_N + u \cdot \nabla \rho_N - \sigma_N \Delta \rho_N &= -\alpha \rho_N \rho_H \end{aligned} \quad (8)$$

En effet la réaction (7) nous dit qu'il faut une quantité égale des deux espèces pour les faire disparaître. S'il n'y avait pas de courant ni de diffusion on aurait simplement

$$\dot{\rho}_H(t) = -\alpha \rho_H(t) \rho_N(t), \quad \dot{\rho}_N(t) = -\alpha \rho_N(t) \rho_H(t)$$

## 2 Projet 1

On s'intéresse à l'évolution d'un polluant de densité  $\rho(x, t)$  dans une rivière assimilée à un segment de droite  $\Omega = (0, L)$ . La vitesse de l'écoulement est constante en  $x$  et donnée  $u(t)$  en fonction du temps, la diffusion du polluant  $\sigma$  est une constante donnée ;  $\rho(\cdot, 0)$  est donné sur  $(0, L)$  ainsi que  $\rho(0, t)$  et  $\rho(L, t)$  pour tout temps  $t \in (0, T)$ .

**Q1** Calculer par différences finies en temps et en espace et avec un schéma d'Euler implicite la solution de

$$\partial_t \rho - \sigma \partial_{xx} \rho = 0 \text{ dans } (0, L) \times (0, T), \quad \rho(0, t) = \rho(L, t) = 0, \quad \forall t \in (0, T)$$

lorsque  $\rho(x, 0) = \sin(\pi \frac{x}{L}), L = 1, \sigma = 0.1, T = 1$ . On calculera l'erreur  $e$  avec la solution analytique et  $\rho_e$  et on fera avec `gnuplot` un graphique de  $\log(e)$  versus  $\log N$  où  $N$  est le nombre de points de discrétisation de  $(0, L)$ . La programmation doit être faite en C++.

**Q2** Rajouter dans l'EDP le terme  $u \partial_x \rho$ , discrétisé par un schéma aux différences finies décentré selon le signe de  $u$ . Faire les simulations avec les mêmes paramètres sauf  $\rho(x, 0) = \exp(100(x - 0.5)^2)$ , et  $u = \sin(10t)$ .

**Q3** Un polluant solide, simulé par une seule particule en position  $X^0 = L/2$  à l'instant  $t = 0$ , attaqué par le polluant liquide de concentration  $\rho$  a pour équations discrètes :

$$\begin{aligned} X^{n+1} &= X^n + u(t^n)\delta t + \sqrt{2\sigma\delta t}\mathcal{N}^n, \\ w^{n+1} &= w^n - w^n\rho(X^n, n\delta t)\delta t, \quad w^0 = 1. \end{aligned} \quad (9)$$

où  $\mathcal{N}^n$  est une réalisation de  $\mathcal{N}$  générée par la formule de Cox-Muller :

$$\mathcal{N}^n = \sqrt{-2 \log Z_1^n} \cos(2\pi Z_2^n)$$

avec  $Z_1, Z_2$  2 nombres aléatoires générés par la  $(1. + \text{rand}()) / (1. + \text{RAND\_MAX})$ .  
Tracer  $t \rightarrow w(t)$ .

### 3 Projet 2

On s'intéresse maintenant à l'évolution d'un polluant de densité  $\rho(x, t)$  dans le lac Léman représenté par le domaine  $\Omega$ .

#### 3.1 Calcul de l'écoulement fluide

Nous rappelons que l'écoulement dans le lac est supposé incompressible, non-visqueux et sans tourbillon (irrotationnel). Il existe donc une fonction potentiel d'écoulement  $\phi$  telle que

$$\mathbf{u} = \nabla\phi, \quad p = p_\infty - \frac{1}{2}\mathbf{u}^2, \quad (10)$$

où  $\mathbf{u} = (u_x, u_y)$  est la vitesse et  $p$  la pression dans l'eau. La conservation de la masse s'écrivant pour le fluide incompressible

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (11)$$

nous obtenons de (10) l'EDP suivante pour le potentiel  $\phi$  :

$$-\Delta\phi = 0 \quad \text{dans } \Omega, \quad (12)$$

avec des conditions aux limites qui seront précisées plus bas.

L'écoulement fluide peut-être décrit également en introduisant la fonction de courant  $\psi$  par

$$u_x = \frac{\partial\psi}{\partial y}, \quad u_y = -\frac{\partial\psi}{\partial x}. \quad (13)$$

La conservation de la masse (11) est ainsi satisfaite. L'écoulement étant considéré sans rotationnel (sans tourbillon), on peut écrire :

$$0 = \nabla \times \mathbf{u} = \frac{\partial u_y}{\partial x} - \frac{\partial u_x}{\partial y}, \quad (14)$$

et finalement, en utilisant (13), l'équation pour  $\psi$  :

$$-\Delta\psi = 0 \quad \text{dans } \Omega. \quad (15)$$

Considérons pour commencer le domaine de calcul  $\Omega$  représenté sur la figure 2. La frontière du domaine est

$$\Gamma = \Gamma_1 \cup \Gamma_2 \cup \Gamma_3 \cup \Gamma_{10} \cup \Gamma_{11} \cup \Gamma_{12}, \quad (16)$$

où  $\Gamma_1$  et  $\Gamma_2$  modélisent la section transversale de deux rivières se jetant dans le lac (fluide entrant) et  $\Gamma_3$  est la frontière par laquelle le fluide sort du domaine (fluide sortant). Les autres frontières représentent les berges.

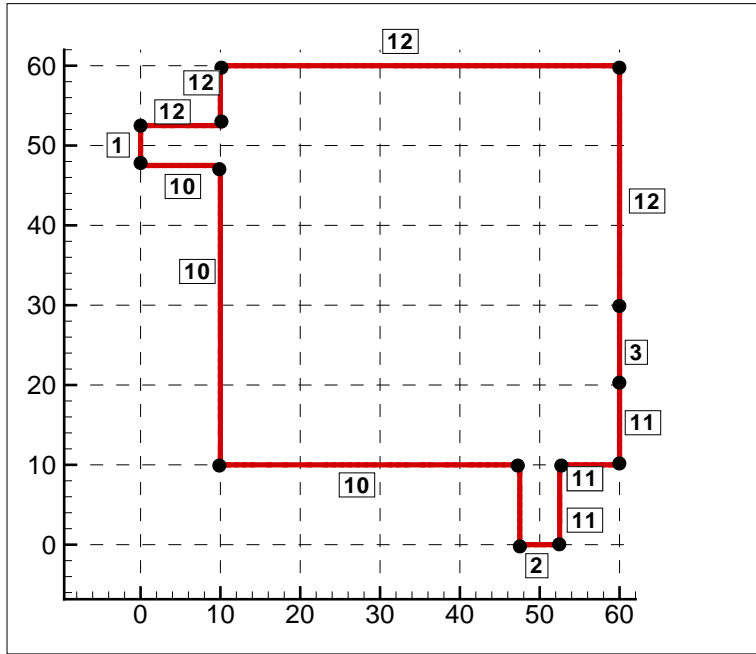


FIG. 2 – Domaine de calcul  $\Omega$ .

- Q1** Construire avec FreeFem++ le maillage représenté sur la figure 2. On gardera comme paramètres les longueurs des segments définissant les frontières  $\Gamma_1, \Gamma_2, \Gamma_3$  qu'on va noter par  $\ell_1, \ell_2$  (largeurs des rivières) et  $\ell_3$  (largeur du canal de sortie). Prendre comme valeurs par défaut :

$$\ell_1 = \ell_2 = 5, \quad \ell_3 = 10$$

- Q2** Les conditions aux limites du problème seront imposées par rapport au champ de vitesses : la composante normale est nulle sur les berges

$$\mathbf{u} \cdot \mathbf{n} = 0 \text{ sur } \Gamma_{10} \cup \Gamma_{11} \cup \Gamma_{12}, \quad (17)$$

et le fluide entrant est modélisé par une vitesse normale constante sur chaque section

$$\mathbf{u} \cdot \mathbf{n} = -U_1 \text{ sur } \Gamma_1, \quad \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} = -U_2 \text{ sur } \Gamma_2, \quad (18)$$

où  $\mathbf{n}$  est la normale vers l'extérieur du domaine.

1. À partir de la conservation de la masse (11) déduire la relation de compatibilité qui permet de calculer la vitesse normale à travers la section de sortie  $\Gamma_3$ .

2. D eduire les conditions aux limites pour l' equation (12) du potentiel  $\phi$ .
3. En utilisant ces conditions aux limites,  crire la formulation variationnelle de (12).

**Q3**  crire un programme FreeFem++ pour r esoudre l' equation (12) pour  $\phi$  en utilisant la m ethode des  l ements finis  $P^1$ . Utiliser comme valeurs :

$$U_1 = 2, \quad U_2 = 1.$$

Visualiser les lignes de niveau de  $\phi$ .

Calculer les deux composantes de la vitesse et visualiser le champ de vecteurs (utiliser la commande `plot(phi, [ux,uy], wait=1)`).

Commenter les r esultats obtenus pour

$$U_1 = 1, \quad U_2 = 10.$$

**Q4**  crire un programme C++ pour r epondre   la question **Q3**.

Faire les m emes visualisations avec Gnuplot.

Comparer avec les r esultats obtenus avec FreeFem++.

**Q5**  crire les conditions aux limites et la formulation variationnelle pour la fonction de courant  $\psi$ . (Indication : utiliser la d efinition (13) et les conditions sur les vitesses – en d eduire que  $\psi = const$  sur les fronti eres mod elisant les berges.)

**Q6**  crire un programme FreeFem++ pour r esoudre l' equation (15) pour  $\psi$ . Pour simplifier le probl eme, on consid ere :

$$\left. \frac{\partial \psi}{\partial n} \right|_{\Gamma_1 \cup \Gamma_2 \cup \Gamma_3} = 0. \quad (19)$$

Visualiser les lignes de niveau de  $\psi$ . Commenter.

**Q7**  crire un programme C++ pour r epondre   la question **Q6**.

**Q8** R esoudre les m eme probl emes (calcul de  $\phi$  et de  $\psi$ ) sur le maillage du lac L eman (voir figure 3.1). Ce maillage est stock e dans le fichier `lac-leman-v4.msh` qui sera lu par les programmes C++ ou FreeFem++.

Le fronti ere  $\Gamma_1$  repr esente le Rh one amont,  $\Gamma_2$  le Rh one aval, puis les 5 autres rivi eres seront num erot ees de 4   9 partant de Gen eve et dans le sens trigonom etrique. Le d ebit du Rh one le 23/02/2009 est   Gen eve de  $188,56 m^3/s$  et on supposera que la profondeur du Rh one en sortie du lac est constante et  gale    $10m$ . Dans un premier tant on n egligera l'apport en eau des autres rivi eres.



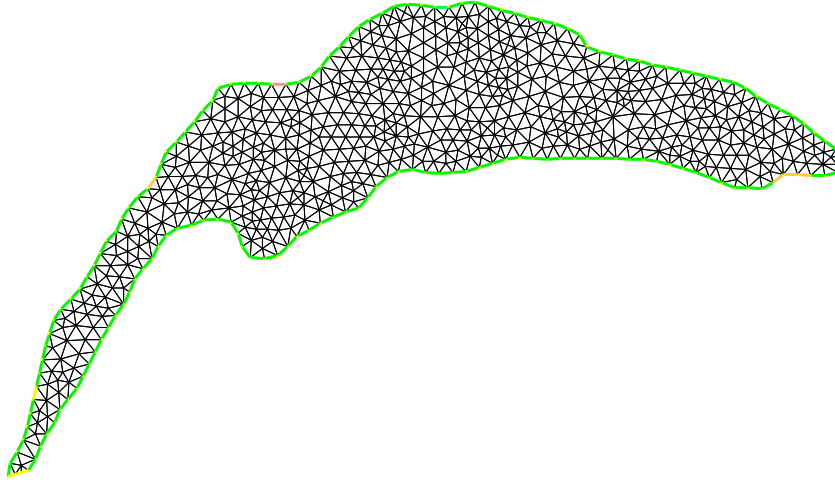


FIG. 3 – Maillage du lac Léman.

### 3.2 Évolution du polluant

Nous allons supposer que le polluant  $\{\rho_1\}$  est de type liquide et miscible et que son évolution est décrite par l'équation (6).

Le but de cette partie est d'étudier l'influence d'une pollution dans la Venoge à Genève et de tracer cette courbe de pollution dans l'année suivant le début de celle ci.

On négligera les apports en eau des affluents du Rhône et on suppose que le lac à une profondeur constante moyenne de 100 m.

Donc, les conditions aux limites du polluant  $\rho_1$  sont sur  $\Gamma$  sauf  $\Gamma_5$   $\frac{\partial \rho_1}{\partial \mathbf{n}} = 0$  et sur  $\Gamma_5$   $\frac{\partial \rho_1}{\partial \mathbf{n}} = g_5(t)$  où la fonction  $g_5$  va modéliser le flux de polluant entrant.

**Q9** Ecrire le schéma aux différences finies implicite en temps pour la résolution de l'équation 6, puis écrire la formulation variationnelle en espace. Ecrire le schéma final correspondant la discrétisation en espace-temps (différences finies en temps et éléments finis en espace).

**Q10** Calculer les valeurs des constantes pour imposer les conditions aux limites pour le potentiel de vitesses ( $\phi$ ) et pour le polluant ( $\rho$ ). On supposera que l'épisode de pollution dure 3 jours et a un débit de 500 tonnes/jour.

- Q11** Pour un coefficient de diffusion bidimensionnel  $\sigma_1 = 0.1 \text{ km}^2/\text{jours}$ , calculer avec Freefem++, la courbe du polluant sortant à Genève et sur la Venoge, c'est-à-dire tracé les deux courbes

$$\int_{\Gamma_2} \rho_1, \quad \text{et} \quad \int_{\Gamma_5} \rho_1$$

en fonction du temps sur l'année suivante, et visualiser l'évolution de la nappe de pollution au temps  $1\text{jour}$ ,  $10j$ ,  $100j$ ,  $200j$ .

- Q12** Quel est la condition de stabilité numérique de votre schéma en temps ?
- Q13** Ecrire une programme C++ pour répondre à la question Q11.
- Q14** Comme la nature du polluant n'est pas bien définie, la valeur de  $\sigma_1$  pas bien connue, nous voulons calculer la sensibilité (la dérivée) de  $\int_{\Gamma_2} \rho_1$  au temps  $200j$  par rapport à  $\sigma_1$ , pour  $\sigma_1 = 0.1$ . Pour cela vous utiliserez deux méthodes : par différences finies et par différenciation automatique.

### 3.3 Interface Java

- Q15** Dans le but d'avoir une interface utilisateur conviviale, écrire un programme en Java qui permette de définir dans un tableau éditable la fonction flux de polluant venant de Lausanne en fonction du temps, le flux du Rhone entrant dans le lac, et les constantes suivantes : Nombre de pas de temps et  $\sigma_1$  ; ainsi que 3 boutons en bascule pour spécifier si on fait seulement un calcul direct ou avec de la sensibilité par différences finies ou par différenciation automatique. Le Java devra générer un fichier contenant toutes les informations écrites dans le tableau au moment de l'arrêt du programme.
- Q16** Ecrire un interpréteur de formules pour générer les valeurs du flux de polluant et du flux d'eau entrante en tout point de la grille en temps.
- Q17** Intégrer dans une même chaîne de calcul, les programmes de Q7 et Q8 et votre programme solveur éléments finis.

### 3.4 OpenGL/GLUT

- Q18** (Question Bonus). Utiliser OpenGL/GLUT pour faire une représentation dynamique (évolution en temps) de vos résultats numériques.