

Travaux Dirigés

Résolution numérique des équations aux dérivées partielles

Albert Giraud

Georesources UMR CNRS 7359, Vandoeuvre -lès-Nancy Cedex, F-54518 France

Abstract

Introduction aux méthodes de résolution numérique des équations aux dérivées partielles. Méthodes des différences finies et volumes finis appliquées à des problèmes de diffusion en régimes stationnaire et transitoire, linéaires et non linéaires. Notions de convergence, précision, stabilité des schémas numériques. Algorithmes du point fixe et de Newton Raphson pour le problème non linéaire.

Keywords: méthode des différences finies, méthode des volumes finis, algorithme implicite, algorithme explicite, méthode des différences finies, méthode des volumes finis, algorithme implicite, algorithme explicite, schéma centré, schéma amont, problème non linéaire, algorithme du point fixe, algorithme de Newton Raphson

Table des matières

1	Planning	2
2	Résolution exacte des problèmes aux dérivées partielles	3
2.1	Exercices d'échauffement	3
2.2	Méthode de la décomposition en série	4
2.3	Méthode de la transformation de Laplace	6
2.4	Equations de diffusion couplées : exemple 1	9
3	TD3 Introduction à la méthode des différences finies : diffusion en régime stationnaire	11
3.1	Diffusion pure unidimensionnelle en régime stationnaire	11
3.2	Solution analytique	11
3.3	Résolution numérique par la méthode des différences finies	11
4	TD4 Méthode des différences finies : advection - diffusion en régime stationnaire	11
4.1	Advection - diffusion en régime stationnaire : méthode des différences finies	11
4.2	Solution analytique	12
4.3	Résolution numérique par la méthode des différences finies	12
5	TD5 Diffusion en régime transitoire : méthode des différences finies	12
5.1	Mise sous forme adimensionnelle	13
5.2	Solution analytique	13
5.3	Résolution numérique du problème adimensionnel par la méthode des différences finies	14
6	TD6 Diffusion en régime stationnaire avec discontinuité de conductivité : méthode des volumes finis	15
6.1	Solution analytique	15
6.2	Résolution numérique par la méthode des volumes finis	15
7	TD7 Diffusion non linéaire en régime stationnaire : méthode des volumes finis	16
7.1	Etude de la non linéarité du problème	16
7.2	Résolution numérique par la méthode des volumes finis	16

1. Planning

Le planning des 10 séances de Travaux Dirigés est le suivant

- **séances TD 1 et 2** : méthodes de résolution exacte. Exercices analytiques résolus à la main en salle TD classique, énoncés **section (2)**.
- séances TD 3 à 10 : méthodes de résolution numérique. Exercices analytiques et numériques en salle informatique et programmation en python
 - **séances TD 3 et 4** : méthode des différences finies appliquée à la diffusion en régime stationnaire et à l'équation de diffusion convection, **énoncés section (3)**.
 - **séance TD 5** : méthode des différences finies appliquée à la diffusion en transitoire, **énoncés section (5)**.
 - **séance TD 6** : méthode des volumes finis appliquée à la diffusion en régime stationnaire avec discontinuité de conductivité, **énoncés section (6)**.
 - **séance TD 7** : méthode des volumes finis appliquée à la diffusion non linéaire en régime stationnaire, **énoncés section (7)**.
 - **séances TD 8 – 9 – 10 : projet**

2. Résolution exacte des problèmes aux dérivées partielles

2.1. Exercices d'échauffement

2.1.1. Séparation de variables 1

Résoudre le problème suivant à l'aide de la méthode de séparation des variables.

$$u = u(x, y) = f(x)g(y) \quad (1)$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} = 4 \frac{\partial u}{\partial y}, \quad u(x = 0, y) = 8 \exp(-3y) \quad (2)$$

2.1.2. Séparation de variables 2 et superposition des solutions

Résoudre le problème suivant à l'aide de la méthode de séparation des variables et par application du principe de superposition des solutions.

$$u = u(x, y) = f(x)g(y) \quad (3)$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} = 4 \frac{\partial u}{\partial y}, \quad u(x = 0, y) = 8 \exp(-3y) + 4 \exp(-5y) \quad (4)$$

2.1.3. Equation hyperbolique : séparation de variables et superposition des solutions

Résoudre le problème suivant à l'aide de la méthode de séparation des variables et de la méthode de superposition des solutions.

$$y = y(x, t) = f(x)g(t) \quad (5)$$

$$\frac{\partial^2 y}{\partial t^2} = 16 \frac{\partial^2 y}{\partial x^2}, \quad 0 < x < 2, \quad t > 0 \quad (6)$$

— conditions aux limites

$$y(x = 0, t > 0) = y(x = 2, t > 0) = 0 \quad (7)$$

— conditions initiales

$$\left[\frac{\partial y}{\partial t} \right] (x, t = 0^+) = 0 \quad (8)$$

$$y(x, t = 0^+) = 6 \sin(\pi x) - 3 \sin(4\pi x) \quad (9)$$

2.1.4. Mise sous forme adimensionnelle d'un problème de diffusion transitoire

Soit le problème de diffusion transitoire unidimensionnelle

$$\frac{\partial \zeta}{\partial t} = D \frac{\partial^2 \zeta}{\partial x^2}, \quad 0 < x < \ell, \quad t > 0 \quad (10)$$

avec les conditions aux limites

$$\zeta(x = 0, t > 0) = \zeta_u > \zeta_0, \quad \zeta(x = \ell, t > 0) = \zeta_0 \quad (11)$$

et la condition initiale

$$\zeta(x, t = 0) = \zeta_0 \quad (12)$$

Proposer une mise sous forme adimensionnelle.

— suggestion : on commencera par introduire une variable d'espace réduite, comprise entre 0 et 1

$$x' = \frac{x}{\ell} \quad (13)$$

— et on utilisera la règle de dérivation de fonctions composées

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x'} \frac{\partial x'}{\partial x}, \quad \frac{\partial^2}{\partial x^2} = \frac{\partial^2}{\partial x'^2} \left(\frac{\partial x'}{\partial x} \right)^2 \quad (14)$$

2.2. Méthode de la décomposition en série

2.2.1. Problème de la consolidation : décomposition en série

Résoudre le problème suivant à l'aide de la méthode de séparation des variables et de la méthode de superposition des solutions.

$$p = p(x, t), \quad 0 < x < 1, \quad t > 0 \quad (15)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} \quad (16)$$

— conditions aux limites

$$p(x = 1, t > 0) = 0 \quad (17)$$

$$\left[\frac{\partial p}{\partial x} \right] (x = 0, t > 0) = 0 \quad (18)$$

— condition initiale

$$p(x, t = 0^+) = 1 \quad (19)$$

Plan de travail

— rechercher la solution de l'équation (16) sous une forme à variables séparées

$$p(x, t) = f(x) g(t) \quad (20)$$

— en déduire la solution élémentaire vérifiant les équations 16-17-18

— rechercher ensuite la solution du problème complet, incluant la condition initiale (19), sous forme d'une série

— établir la propriété d'orthogonalité de la base des fonctions $\cos\left((1 + 2n)\frac{\pi}{2}x\right)$ vis à vis du produit scalaire sur l'intervalle $[0, 1]$

$$\int_0^1 \cos\left((1 + 2n)\frac{\pi}{2}x\right) \cos\left((1 + 2n')\frac{\pi}{2}x\right) dx = 0 \quad \text{si } n \neq n' \quad (21)$$

$$\int_0^1 \cos\left((1 + 2n)\frac{\pi}{2}x\right) \cos\left((1 + 2n')\frac{\pi}{2}x\right) dx \neq 0 \quad \text{si } n = n' \quad (22)$$

On utilisera

$$\cos a \cos b = \frac{1}{2} (\cos(a - b) + \cos(a + b)) \quad (23)$$

— appliquer la propriété d'orthogonalité au problème posé en transformant l'équation (19) : on multipliera les deux membres de l'égalité par le coefficient $\cos\left((1 + 2n')\frac{\pi}{2}x\right)$ et on intégrera sur l'intervalle $[0, 1]$

— en déduire la solution du problème posé

2.2.2. Couche refroidie aux deux extrémités : décomposition en série

Résoudre le problème adimensionnel d'une couche soumise initialement à une température uniforme et refroidie sur les deux bords

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (24)$$

condition initiale

$$u(x, t = 0) = 1, \quad 0 \leq x \leq 1 \quad (25)$$

conditions aux limites

$$u(x = 0, t > 0) = u(x = 1, t > 0) = 0 \quad (26)$$

On démontrera la propriété d'orthogonalité de la base des fonctions

$$\sin(n\pi x) \quad (27)$$

sur l'intervalle $[0, 1]$. On utilisera

$$\sin a \sin b = \frac{1}{2} (\cos(a - b) - \cos(a + b)) \quad (28)$$

2.2.3. Condition initiale linéaire : décomposition en série

Résoudre le problème de diffusion suivant

$$\frac{\partial w}{\partial t} = \frac{\partial^2 w}{\partial x^2}, \quad 0 < x < 1, \quad t > 0 \quad (29)$$

condition initiale

$$w(x, t = 0) = x - 1 \quad (30)$$

conditions aux limites

$$w(x = 0, t > 0) = w(x = 1, t > 0) = 0 \quad (31)$$

2.2.4. Analyse transitoire de l'expérience de conduction de Fourier : décomposition en série

Résoudre le problème de diffusion suivant

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \quad 0 < x < 1, \quad t > 0 \quad (32)$$

condition initiale

$$u(x, t = 0) = 0 \quad (33)$$

conditions aux limites

$$u(x = 0, t > 0) = 1, \quad u(x = 1, t > 0) = 0 \quad (34)$$

qui correspond à l'expérience de Darcy ou Fourier en régime transitoire exprimée sous forme adimensionnelle. On recherchera dans un premier temps la solution stationnaire $v(x)$ du problème

$$\frac{d^2 v}{dx^2} = 0, \quad 0 < x < 1, \quad t > 0 \quad (35)$$

avec les conditions aux limites

$$v(x = 0) = 1, \quad v(x = 1) = 0 \quad (36)$$

Montrer ensuite que la solution $u(x, t)$ recherchée s'exprime en fonction de la solution $w(x, t)$ de l'exercice précédent sous la forme

$$u(x, t) = w(x, t) + v(x) \quad (37)$$

2.2.5. Vibration d'une corde tendue pincée en son milieu et lâchée à vitesse nulle

Soit le problème adimensionnel de vibration d'une corde de longueur unité

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \quad 0 < x < 1, \quad t > 0 \quad (38)$$

— **Conditions initiales.** A $t = 0$ la corde est abandonnée à vitesse nulle et sa position est celle d'une corde tendue pincée en son milieu

$$u(x, t = 0) = \varphi(x), \quad \frac{\partial u}{\partial t}(x, t = 0) = 0 \quad (39)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x, t = 0) = 0 \quad (40)$$

avec

$$\varphi(x) = 2\delta x, \quad 0 \leq x \leq \frac{1}{2} \quad ; \quad \varphi(x) = 2\delta(1-x), \quad \frac{1}{2} \leq x \leq 1 \quad (41)$$

δ est la hauteur réduite initiale ($t = 0$) du milieu de la corde (hauteur initiale h du milieu de la corde divisée par sa longueur ℓ , $\delta = h/\ell$)

— **Conditions aux limites.** La corde est fixée aux deux extrémités

$$u(x = 0, t) = 0 \quad , \quad u(x = 1, t) = 0 \quad , \quad \forall t \geq 0 \quad (42)$$

On suggère le plan de travail suivant :

— adopter la méthode de séparation des variables

$$u(x, t) = f(x)g(t) \quad (43)$$

que l'on remplace dans l'équation hyperbolique (38) pour en déduire la forme de la solution élémentaire. Il reste ensuite à vérifier les conditions supplémentaires (conditions initiales et aux limites).

— montrer que la solution des équations (38-42-40) est de la forme

$$u_n(x, t) = A_n \sin(n\pi x) \cos(n\pi t) \quad (44)$$

— rechercher ensuite la solution de la condition initiale (39-41) sous la forme d'une série

$$u(x, t) = \sum_{n=1}^{n=\infty} A_n \sin(n\pi x) \cos(n\pi t) \quad (45)$$

— utiliser la propriété d'orthogonalité de la base des fonctions $\sin(n\pi x)$ sur $[0, 1]$ et montrer que la solution est de la forme

$$u(x, t) = \frac{8\delta}{\pi^2} \sum_{n=0}^{n=\infty} \frac{(-1)^n}{(2n+1)^2} \sin((2n+1)\pi x) \cos((2n+1)\pi t) \quad (46)$$

2.3. Méthode de la transformation de Laplace

2.3.1. Analyse transitoire de l'expérience de conduction de Fourier : transformation de Laplace

Appliquer la transformation de Laplace à l'ensemble des équations

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (47)$$

$$u(x, t = 0) = 0 \quad , \quad 0 \leq x \leq 1 \quad (48)$$

$$u(x = 0, t > 0) = 1, \quad u(x = 1, t > 0) = 0 \quad (49)$$

On note $\bar{u}$ la transformée de Laplace de u et s le paramètre de Laplace :

$$\mathcal{L}[u(x, t)] = \bar{u}(x, s) = \int_0^\infty u(x, t) \exp(-st) dt \quad (50)$$

on rappelle

$$\mathcal{L}\left[\frac{\partial u}{\partial t}\right] = s\bar{u}(x, s) - u(x, t = 0) \quad (51)$$

Pour l'inversion de la transformée de Laplace, on fournit

$$\mathcal{L}^{-1}\left[\frac{\exp(-qx)}{s}\right] = \operatorname{erfc}\left(\frac{x}{2\sqrt{t}}\right) \quad (52)$$

avec

$$\operatorname{erfc}(x) = 1 - \operatorname{erf}(x) \quad , \quad \operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x \exp(-\xi^2) d\xi \quad (53)$$

et le développement en série entière de

$$\frac{1}{1-x} = 1 + x + x^2 + x^3 + \dots + x^n = \sum_{n=0}^{\infty} x^n \quad , \quad |x| < 1 \quad (54)$$

2.3.2. Température imposée en paroi d'un massif semi infini : transformation de Laplace

Soit le problème caractérisé par les équations

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad , \quad 0 \leq x \leq \infty \quad (55)$$

condition initiale

$$u(x, t = 0) = 0 \quad , \quad 0 \leq x \leq \infty \quad (56)$$

conditions aux limites

$$u(x = 0, t > 0) = \varphi(t) \quad (57)$$

$$u(x \rightarrow \infty, t > 0) = 0 \quad (58)$$

— Poser le problème dans l'espace des transformées de Laplace. Soit

$$\bar{\varphi}(s) = \mathcal{L}[\varphi(t)] = \int_0^\infty \varphi(t) \exp(-st) dt \quad (59)$$

Montrer que la solution dans l'espace transformé de Laplace s'exprime sous la forme

$$\bar{u}(x, s) = \bar{\varphi}(s) \exp(-\sqrt{s}x) \quad (60)$$

— Résoudre dans le cas d'une température imposée constante : exprimer la solution $u(x, t)$ dans le cas

$$\varphi(t) = 1 \quad , \quad 0 < t \leq \infty \quad (61)$$

On utilisera la table d'inversion

$$\mathcal{L}^{-1} \left[\frac{\exp(-\sqrt{s}x)}{s} \right] = \operatorname{erfc} \left(\frac{x}{2\sqrt{t}} \right) \quad (62)$$

— Résoudre dans le cas d'une température imposée exponentiellement décroissante : exprimer la solution $u(x, t)$ dans le cas

$$\varphi(t) = \exp(-\alpha t) \quad , \quad 0 < t \leq \infty \quad (63)$$

On utilisera la table d'inversion

$$\begin{aligned} \mathcal{L}^{-1} \left[\frac{\exp(-\sqrt{s}x)}{s - \alpha} \right] &= \\ &= \frac{1}{2} \exp(\alpha t) \left(\exp(-\sqrt{\alpha}x) \operatorname{erfc} \left(\frac{x}{2\sqrt{t}} - \sqrt{\alpha t} \right) + \exp(\sqrt{\alpha}x) \operatorname{erfc} \left(\frac{x}{2\sqrt{t}} + \sqrt{\alpha t} \right) \right) \end{aligned} \quad (64)$$

avec les correspondances

$$\alpha \rightarrow -\alpha, \quad \sqrt{\alpha} \rightarrow i\sqrt{\alpha} \quad (65)$$

On introduit la fonction erreur complémentaire de la variable complexe :

$$\operatorname{erfc}(z) = 1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^z \exp(-\xi^2) d\xi \quad (66)$$

dont on rappelle les propriétés (la barre de surlignement désigne le complexe conjugué dans la relation 68)

$$\operatorname{erfc}(z) + \operatorname{erfc}(-z) = 2 \quad (67)$$

$$\operatorname{erfc}(\bar{z}) = \overline{\operatorname{erfc}(z)}, \quad z = a + ib, \quad \bar{z} = a - ib \quad (68)$$

2.3.3. Diffusion stationnaire avec transport convectif

Soit le problème de diffusion stationnaire avec transport convectif

$$\frac{d^2v}{dx^2} - \lambda \frac{dv}{dx} = 0 \quad (69)$$

$$v(x=0) = 1, \quad v(x=1) = 0 \quad (70)$$

λ est un nombre adimensionnel, le nombre de Péclet. Exprimer la solution stationnaire $v(x)$. On pourra résoudre l'équation différentielle à l'aide de la méthode de la variation de la constante.

2.3.4. Diffusion transitoire avec transport convectif : résolution par transformation de Laplace

Appliquer la transformation de Laplace à l'ensemble des équations

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} &= \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \lambda \frac{\partial u}{\partial x} \\ u(x, t=0) &= 0, \quad 0 \leq x \leq 1 \\ u(x=0, t>0) &= 1 - \exp(-\beta t) \\ u(x=1, t>0) &= 0 \end{aligned} \quad (71)$$

2.3.5. Température dans une sphère creuse : résolution par transformation de Laplace

Problème posé : on considère une sphère creuse, de rayon intérieur a et de rayon extérieur b , à température initiale uniforme ($t=0$). A l'instant $t=0^+$ une température constante u_a est imposée à la paroi intérieure $r=a$, la paroi extérieure $r=b$ étant maintenue à température constante égale à la température initiale. Le problème à résoudre est à symétrie radiale.

$$\frac{\partial^2 u}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial u}{\partial r} = \frac{1}{D} \frac{\partial u}{\partial t} \quad (72)$$

Mettre sous forme adimensionnelle avec

$$r' = \frac{r}{a}, \quad \rho = \frac{b}{a}, \quad u' = \frac{u}{u_a} \quad (73)$$

$$\tau = \frac{a^2}{4D}, \quad t' = \frac{t}{\tau} \quad (74)$$

et résoudre par transformation de Laplace/

2.3.6. Température dans une sphère pleine : résolution par transformation de Laplace

Résoudre à l'aide de la méthode de la transformation de Laplace le problème de diffusion adimensionnel ($0 \leq r \leq 1$)

$$\frac{\partial^2 u}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial u}{\partial r} - 4 \frac{\partial u}{\partial t} = 0, \quad 0 \leq r \leq 1 \quad (75)$$

$$u(r, t=0) = 0, \quad 0 \leq r \leq 1 \quad (76)$$

$$\frac{\partial u}{\partial r}(r=0, t>0) = 0, \quad u(r=1, t>0) = 1 \quad (77)$$

1. Poser le problème dans l'espace transformé de Laplace.

2. Montrer, en posant

$$\bar{u} = \frac{\bar{v}}{r} \quad (78)$$

que l'équation différentielle à résoudre, dans l'espace transformé de Laplace, s'écrit

$$\frac{d^2 \bar{v}}{dr^2} - 4s \bar{v} = 0 \quad (79)$$

En posant $q = \sqrt{s}$

$$\bar{u} = A \frac{\exp(2qr)}{r} + B \frac{\exp(-2qr)}{r} \quad (80)$$

3. Sur la base du développement en série entière, valable pour toute valeur de x

$$\exp(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{x^k}{k!} = 1 + x + \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{6} + \frac{x^4}{24} + \dots + \frac{x^n}{n!} + \dots \quad (81)$$

montrer que la condition en $r = 0$ est vérifiée avec $B = -A$ et que la solution est de la forme

$$\bar{u} = A \frac{\sinh(2qr)}{r} \quad (82)$$

4. Exprimer la condition aux limites en $r = 1$ et montrer précisément que la solution, dans l'espace transformé de Laplace, est de la forme

$$\bar{u}(r, s) = \frac{1}{r} \frac{\sinh(2qr)}{s \sinh(2q)} \quad (83)$$

5. Utiliser le développement en série entière (valable pour $|x| < 1$)

$$\frac{1}{1-x} = 1 + x + x^2 + x^3 + \dots + x^n + \dots \quad (84)$$

ainsi que la table d'inversion

$$\bar{f}(s) = \frac{\exp(-qr)}{s}, \quad f(t) = \mathcal{L}^{-1}[\bar{f}(s)] = \operatorname{erfc}\left[\frac{r}{2\sqrt{t}}\right] \quad (85)$$

pour exprimer la solution $u(r, t)$ sous la forme d'une série.

2.4. Equations de diffusion couplées : exemple 1

2.4.1. Problème posé

Soit le problème aux dérivées partielles

$$\begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} \\ c_{21} & c_{22} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \frac{\partial u_1}{\partial t} \\ \frac{\partial u_2}{\partial t} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda_{11} & 0 \\ 0 & \lambda_{22} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 u_1}{\partial x^2} \\ \frac{\partial^2 u_2}{\partial x^2} \end{pmatrix} \quad (86)$$

Conditions initiales

$$u_1(x, t = 0) = 0, \quad u_2(x, t = 0) = 0, \quad 0 \leq x \leq a \quad (87)$$

Conditions aux limites

$$\frac{\partial u_1}{\partial x}(x = 0, t > 0) = 0, \quad u_1(x = a, t > 0) = u_1^a \quad (88)$$

$$\frac{\partial u_2}{\partial x}(x = 0, t > 0) = 0, \quad u_2(x = a, t > 0) = u_2^a \quad (89)$$

1. Exprimer la matrice de couplage A telle que

$$A = C^{-1} \cdot \lambda \quad (90)$$

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix}, \quad C = \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} \\ c_{21} & c_{22} \end{pmatrix}, \quad \lambda = \begin{pmatrix} \lambda_{11} & 0 \\ 0 & \lambda_{22} \end{pmatrix} \quad (91)$$

2. Soit le système d'équations aux dérivées partielles couplées

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial u_1}{\partial t} \\ \frac{\partial u_2}{\partial t} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 u_1}{\partial x^2} \\ \frac{\partial^2 u_2}{\partial x^2} \end{pmatrix} \quad (92)$$

Diagonaliser la matrice A . En notant a_1 et a_2 ses valeurs propres

$$\begin{pmatrix} a_1 & 0 \\ 0 & a_2 \end{pmatrix} = \mathbf{P}^{-1} \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{P}, \quad \mathbf{A} = \mathbf{P} \cdot \begin{pmatrix} a_1 & 0 \\ 0 & a_2 \end{pmatrix} \cdot \mathbf{P}^{-1} \quad (93)$$

En posant

$$\begin{pmatrix} \psi_1(x, t) \\ \psi_2(x, t) \end{pmatrix} = \mathbf{P}^{-1} \cdot \begin{pmatrix} u_1(x, t) \\ u_2(x, t) \end{pmatrix} \quad (94)$$

Exprimer le système aux dérivées partielles à résoudre sous une forme découplée. En déduire la solution recherchée.

3. TD3 Introduction à la méthode des différences finies : diffusion en régime stationnaire

3.1. Diffusion pure unidimensionnelle en régime stationnaire

Soit l'équation de diffusion **linéaire** en régime stationnaire, en l'absence de terme source

$$\text{div}(-\lambda \text{grad}(\zeta)) = 0 \quad (95)$$

où λ représente la conductivité, supposée uniforme, que l'on peut extraire de l'opérateur divergence. L'équation de champ à résoudre dans le cas du matériau homogène est l'équation de Laplace

$$\Delta(\zeta) = 0 \quad (96)$$

qui se réduit dans le cas unidimensionnel $\zeta = \zeta(x)$ à la dérivée seconde

$$\frac{d^2\zeta}{dx^2} = 0 \quad (97)$$

On cherche ici à résoudre un problème de **diffusion stationnaire** unidimensionnel ($\zeta = \zeta(x)$), de type Dirichlet, défini par :

$$\begin{aligned} \frac{d^2\zeta}{dx^2} &= 0 \\ \zeta(x=0) &= \zeta_0, \quad \zeta(x=\ell) = \zeta_\ell \end{aligned} \quad (98)$$

avec $\zeta = \zeta(x)$ la température dans le domaine (e.g., un mur ou une couche de roche) d'épaisseur $\ell = 10$ m, avec $\zeta_0 = 0^\circ\text{C}$ et $\zeta_\ell = 25^\circ\text{C}$ les températures maintenues constantes sur les bords.

3.2. Solution analytique

- Exprimer la solution exacte du problème 98
- Représenter graphiquement la distribution de température $\zeta(x)$

3.3. Résolution numérique par la méthode des différences finies

- 1 - Définir un maillage régulier contenant $n = 5$ points intérieurs ($n + 2$ points au total, bords inclus) et discrétiser par différences finies l'équation (98). On utilisera le schéma centré pour approximer la dérivée seconde.
- 2 - Construire le système linéaire $\mathbf{A} \cdot \mathbf{X} = \mathbf{B}$ dont l'inversion permet d'obtenir numériquement la solution du problème (98).
- 3 - Résoudre le système linéaire et comparer le résultat obtenu avec la solution analytique déterminée précédemment. On utilisera les commandes d'algèbre linéaire disponibles (numpy)

4. TD4 Méthode des différences finies : advection - diffusion en régime stationnaire

4.1. Advection - diffusion en régime stationnaire : méthode des différences finies

Dans le cas d'un problème d'advection - diffusion, l'équation dite de diffusion avec transport convectif (ou d'advection - diffusion) s'écrit sous la forme suivante :

$$\frac{\partial \zeta}{\partial t} + \text{div}(\zeta \underline{v}) - \text{div}(D \text{grad}(\zeta)) = Q \quad (99)$$

où ζ représente la concentration d'une espèce chimique, D le coefficient de diffusion de Fick et $\underline{v}$ le vecteur vitesse. En régime stationnaire, en l'absence de terme source et dans le cas d'un vecteur vitesse uniforme l'équation (99) devient

$$\text{grad}(\zeta) \cdot \underline{v} - \text{div}(D \text{grad}(\zeta)) = 0 \quad (100)$$

On se place dans le cas unidimensionnel ($\zeta = (\zeta(x))$ et $\underline{v} = v e_x$). L'équation différentielle à résoudre s'écrit

$$D \frac{d^2\zeta}{dx^2} - v \frac{d\zeta}{dx} = 0 \quad (101)$$

Le problème à résoudre s'écrit

$$\begin{aligned} D \frac{d^2\zeta}{dx^2} - v \frac{d\zeta}{dx} &= 0 \\ \zeta(x=0) &= \zeta_0, \quad \zeta(x=\ell) = \zeta_\ell \end{aligned} \quad (102)$$

avec $\zeta = \zeta(x)$ la concentration dans la couche d'épaisseur $\ell = 10$ m, avec $\zeta_0 = 0$ et $\zeta_\ell = 50$ les concentrations maintenues constantes sur les bords (on ne précise pas les unités).

4.2. Solution analytique

- Mettre le problème (102) sous forme adimensionnelle. On introduira le nombre de Péclet P_ℓ associé à la couche d'épaisseur ℓ

$$P_\ell = \frac{v\ell}{D} \quad (103)$$

- Exprimer la solution exacte $\zeta(x)$ du problème
- La représenter graphiquement pour $P_\ell = 0., 0.1, 1, 5, 10, 100$ et interpréter le résultat.

4.3. Résolution numérique par la méthode des différences finies

- Définir un maillage contenant $n = 5$ points intérieurs ($n + 2$ points au total) et discrétiser l'équation régissant le problème sur ce maillage en utilisant le schéma centré pour approximer la dérivée première. On exprimera ce schéma en fonction du nombre de Péclet P_h associé au pas de discrétisation

$$h = x_{i+1} - x_i = \Delta x = \frac{\ell}{n + 1} \quad (104)$$

$$P_h = \frac{vh}{D} \quad (105)$$

P_h est relié au nombre de Péclet P_ℓ de la couche par la relation

$$P_h = \frac{vh}{D} = \frac{h}{\ell} \frac{v\ell}{D} \quad (106)$$

soit

$$P_h = \frac{h}{\ell} P_\ell \quad (107)$$

- Construire le système linéaire $\mathbf{A} \cdot \mathbf{X} = \mathbf{B}$ résultant de la discrétisation par différences finies (102).
- Effectuer une étude de sensibilité en fonction de P_h , $P_h = 0, 1, 2, 4, 8$ et commenter.
- Comparer avec la solution analytique dans le cas $P_\ell = 1, 10$.
- Correction des oscillations pour $P_h > 2$
 - Une première solution consiste à adapter le maillage (en modifiant le nombre de noeuds n) de sorte que $P_h < 2$ quelque soit la valeur de P_ℓ . Déterminer la condition sur la valeur de n qui permet d'assurer $P_h < 2$ et vérifier qu'elle fonctionne pour $P_\ell = 12$ et $P_\ell = 24$. Cette condition donne-t-elle des résultats acceptables ?
 - Une deuxième solution consiste à approximer la dérivée première de l'équation de transport (celle associée au terme d'advection) en utilisant un schéma amont utilisant une dérivée première à gauche ou arrière. Vérifier que cela fonctionne dans le cas où $n = 5$ (discrétiser l'équation en utilisant le schéma amont pour la dérivée première, construire le système associé et le résoudre en fixant $P_h = 4$). Que remarquez-vous ?
 - Interprétation du schéma amont : calculer la différence entre les équations discrétisées centrée et amont, cela revient donc à exprimer la différence entre les dérivées premières centrée ζ'_k et amont ζ'_{k-} (calculer donc $\zeta'_k - \zeta'_{k-}$), et interpréter le résultat. Valider votre interprétation en comparant avec la solution analytique.

5. TD5 Diffusion en régime transitoire : méthode des différences finies

En régime transitoire et en l'absence de terme source, l'équation de diffusion s'écrit :

$$\frac{\partial \zeta}{\partial t} = \text{div}(D \text{grad}(\zeta)) \quad (108)$$

avec ζ l'inconnue (température, pression de fluide, concentration d'une espèce chimique etc.) et D le coefficient de diffusion.

On cherche ici à résoudre un problème de **diffusion transitoire** unidimensionnel ($\zeta = \zeta(x, t)$) prenant place dans une couche homogène d'épaisseur ℓ

$$\begin{cases} \frac{\partial \zeta}{\partial t} = D \frac{\partial^2 \zeta}{\partial x^2}, & 0 < x < \ell, \quad 0 < t \\ \zeta(x, t = 0^+) = \zeta_0 \\ \zeta(x = 0, t > 0) = \zeta(x = \ell, t > 0) = \zeta_\ell \end{cases} \quad (109)$$

avec ζ_0 la valeur initiale (à $t = 0$), et ζ_ℓ la valeur imposée aux bords du système à $t > 0$, telles que $\zeta_0 > \zeta_\ell$. Cela correspond par exemple aux conditions de trempe d'une plaque de faible épaisseur dans un bain froid (ζ représente dans ce cas la température).

5.1. Mise sous forme adimensionnelle

Se reporter aux corrigés des séances de TD analytiques pour plus de détail (fait en exercice 2.1.4).

1 - Exprimer le problème (109) sous forme adimensionnelle :

— on introduira la variable d'espace adimensionnelle

$$x' = \frac{x}{\ell}, \quad 0 < x' < 1 \quad (110)$$

— on en déduira le temps caractéristique de diffusion τ_ℓ de la couche

$$t' = \frac{t}{\tau_\ell} \quad (111)$$

tel que l'équation de diffusion 1D s'exprime sous la forme

$$\frac{\partial \zeta}{\partial t'} = \frac{\partial^2 \zeta}{\partial x'^2}, \quad 0 < x' < 1, \quad 0 < t' \quad (112)$$

— on introduira l'inconnue réduite

$$\theta = \frac{\zeta - \zeta_\ell}{\zeta_0 - \zeta_\ell} \quad (113)$$

5.2. Solution analytique

Pour alléger les notations, les variables réduites x' et t' sont notées x et t dans cette section. Exprimer la solution analytique du problème adimensionnel (114)

$$\begin{cases} \frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2}, & 0 < x < 1, \quad 0 < t \\ \theta(x, t = 0^+) = 1 \\ \theta(x = 0, t > 0) = \theta(x = 1, t > 0) = 0 \end{cases} \quad (114)$$

On utilisera la méthode de Fourier (se reporter à l'exercice 2.2.1), en recherchant les solutions à variables séparées

$$\theta(x, t) = f(x) g(t) \quad (115)$$

On note que le problème adimensionnel (114) correspond exactement à l'exercice (2.2.2). Représenter graphiquement la distribution de température adimensionnée θ aux instants réduits

$$t = \{0.00001, 0.001, 0.01, 0.5, 0.1, 0.25, 1\} \quad (116)$$

En revenant aux variables et problème dimensionnés, la solution dimensionnée ζ du problème (109) qui s'en déduit est

$$\zeta(x, t) = \zeta_\ell + (\zeta_0 - \zeta_\ell) \theta\left(\frac{x}{\ell}, \frac{t}{\tau_\ell}\right) \quad (117)$$

5.3. Résolution numérique du problème adimensionnel par la méthode des différences finies

Se reporter au cours, chapitre 3. On cherche à résoudre par différences finies le **problème adimensionnel** (114).

- Discrétiser l'équation de diffusion adimensionnelle (114) à l'aide des schémas
 - i) explicite : l'instant de référence est **l'instant connu** $t_n = n \Delta t$, la dérivée seconde en espace est exprimée à l'instant t_n et la dérivée première en temps est la dérivée première à droite.
 - ii) implicite : l'instant de référence est **l'instant inconnu** $t_{n+1} = (n + 1) \Delta t$, la dérivée seconde en espace est exprimée à l'instant t_{n+1} et la dérivée première en temps est la dérivée première à gauche.
- On introduira le nombre de Fourier $F_o = \frac{\Delta t}{\Delta x^2}$ associé aux pas de discrétisation de temps Δt et d'espace Δx

? systèmes linéaires correspondant

$$\mathbf{X}^{n+1} = \mathbf{A}^{\text{expl}} \cdot \mathbf{X}^n, \quad \mathbf{A}^{\text{impl}} \cdot \mathbf{X}^{n+1} = \mathbf{X}^n \quad (118)$$

- Application numérique : on considèrera un maillage contenant $N = 10 - 1 = 9$ points intérieurs ($N + 2 = 11$ points au total et $N + 1 = 10$ intervalles).
 - Tracer graphiquement les solutions obtenues par différences finies, au premier pas (soit à l'instant $t = \Delta t$ pour $F_o = 1$)
 - Faire une étude de sensibilité sur le nombre de Fourier F_o

$$F_o = \{0.4, 0.5, 0.6, 1\} \quad (119)$$

et tracer les solutions aux instants $t_n = n \Delta t$, $n = 1, 11, 21, 31$

- Se reporter au cours chapitre 3, vérifier numériquement que le schéma explicite est conditionnellement stable alors que le schéma implicite est inconditionnellement stable

6. TD6 Diffusion en régime stationnaire avec discontinuité de conductivité : méthode des volumes finis

En régime stationnaire (permanent) et en l'absence de terme source, l'équation de diffusion stationnaire s'écrit :

$$\text{div}(\lambda(x)\underline{\text{grad}}(\zeta)) = 0 \quad (120)$$

La conductivité $\lambda(x)$ dépend du vecteur position ce qui traduit une hétérogénéité du matériau. On considèrera le problème unidimensionnel d'un bicouche, c'est à dire d'un matériau homogène par morceau avec discontinuité de conductivité à l'interface. On se reportera au cours chapitre 4 et en particulier la section 4.3.

6.1. Solution analytique

Soit le problème de diffusion 1D stationnaire avec conditions aux limites de type Dirichlet

$$\begin{cases} \text{div}(\lambda(x)\underline{\text{grad}}(\zeta)) = 0 \\ \zeta(x=0) = \zeta_0 \\ \zeta(x=\ell) = \zeta_\ell \end{cases} \quad (121)$$

avec

$$\lambda(x) = \lambda_1 \quad (0 < x < \alpha\ell) \quad , \quad \lambda(x) = \lambda_2 \quad (\alpha\ell < x < \ell) \quad (122)$$

et

$$\zeta = \zeta(x), \quad \underline{\text{grad}}(\zeta) = \frac{d\zeta(x)}{dx} \underline{e}_x, \quad \text{div}(v(x)\underline{e}_x) = \frac{dv(x)}{dx} \quad (123)$$

On note que la fonction $\lambda(x)$ est continue par morceaux (et donc discontinue à l'interface $x = \alpha\ell$). On rappelle qu'à l'interface $0 < x = \alpha\ell < \ell$ l'inconnue ζ et le flux $\lambda \frac{d\zeta}{dx}$ sont continus

$$[\zeta(x = \alpha\ell)]^- = [\zeta(x = \alpha\ell)]^+ \quad (124)$$

$$\left[\lambda \frac{d\zeta}{dx}(x = \alpha\ell) \right]^- = \left[\lambda \frac{d\zeta}{dx}(x = \alpha\ell) \right]^+ \quad (125)$$

soit

$$\lambda_1 \left[\frac{d\zeta}{dx}(x = \alpha\ell) \right]^- = \lambda_2 \left[\frac{d\zeta}{dx}(x = \alpha\ell) \right]^+ \quad (126)$$

Exprimer la solution exacte du problème et représenter graphiquement pour $\ell = 1$, $\lambda_1 = 1$, $\lambda_2 = 0.1$, 10 , $\zeta_0 = 0$, $\zeta_\ell = 1$, $\alpha = 2/3$ et $\alpha = 1/2$. On posera

$$\gamma = \frac{\lambda_2}{\lambda_1} \quad (127)$$

6.2. Résolution numérique par la méthode des volumes finis

Se reporter au cours, chapitre 4. On utilisera la méthode de la conductivité équivalente présentée en section 4.3.

- En considérant un maillage contenant n volumes finis intérieurs ($n + 2$ volumes finis au total, correspondant aux $n + 2$ points de discrétisation, bords compris), discrétiser l'équation régissant le problème sur ce maillage avec une interface située en $\alpha\ell$, $\alpha = \frac{1}{2}$
- Inverser le système linéaire dans le cas $\lambda_1 = 1$, $\lambda_2 = 0.1$, $\alpha = \frac{1}{2}$, $\ell = 1$, $\zeta_0 = 0$, $\zeta_\ell = 1$ et comparer avec la solution analytique
- Même question dans les cas $\alpha = \frac{1}{4}$ puis $\alpha = \frac{7}{8}$, avec $\lambda_1 = 1$, $\lambda_2 = 10$, $\ell = 1$, $\zeta_0 = 0$, $\zeta_\ell = 1$
- Facultatif : résoudre dans le cas $n + 1 = 200$, $\alpha = \frac{2}{3}$ avec $\lambda_1 = 1$, $\lambda_2 = 0.01$, $\ell = 1$, $\zeta_0 = 0$, $\zeta_\ell = 1$. On placera l'interface entre les matériaux au plus près de α . Indiquer l'erreur géométrique due à la discrétisation. La méthode des volumes finis se généralise aux grilles non uniformes, ce qui permet notamment de placer exactement les interfaces (voir par exemple [1], practice b, p. 244). On se limite dans ce cours, par souci de simplicité, aux grilles régulières. Cela peut conduire à de petites erreurs de positionnement des interfaces.

7. TD7 Diffusion non linéaire en régime stationnaire : méthode des volumes finis

On cherche ici à résoudre un problème de **diffusion stationnaire** unidimensionnel non linéaire défini par :

$$\begin{cases} \operatorname{div}(\lambda(\zeta)\underline{\operatorname{grad}}(\zeta)) = 0 \\ \zeta(x=0) = \zeta_0 \\ \zeta(x=\ell) = \zeta_\ell \end{cases} \quad (128)$$

avec

$$\zeta = \zeta(x) \quad (129)$$

$$\underline{\operatorname{grad}}(\zeta) = \frac{d\zeta(x)}{dx} \underline{e}_x \quad (130)$$

La conductivité est fonction de l'inconnue ζ

$$\lambda(\zeta) = a \left(\frac{a}{b} \right)^{(-\zeta)} \quad (131)$$

Pour la suite de l'exercice, pour simplifier, on considèrera les valeurs de référence

$$\ell = 1, \quad \zeta_0 = 0, \quad \zeta_\ell = 1 \quad (132)$$

7.1. Etude de la non linéarité du problème

1 - En fixant $a = 1$, tracer la fonction $\lambda(\zeta)$ pour $b = \{0.5, 0.1, 0.01, 0.001\}$.

Dans la suite de l'étude, on considèrera dans un premier temps $b = 0.01$ pour mettre en place le schéma de résolution. Une fois celui-ci au point, on étudiera l'effet de b sur la résolution.

7.2. Résolution numérique par la méthode des volumes finis

1 - En considérant un maillage contenant n volumes finis intérieurs $\Omega_j = S \Delta x$ ($n + 2$ volumes finis au total), discrétiser l'équation régissant le problème

$$\frac{1}{S \Delta x} (S (\varphi_{j+1/2} + \varphi_{j-1/2})) = \frac{1}{\Delta x} (\varphi_{j+1/2} + \varphi_{j-1/2}) = 0 \quad (133)$$

sur ce maillage en utilisant les méthodes d'approximation des flux aux interfaces

i) par *moyenne de la fonction* :

$$\varphi_{j+1/2} = \left(\frac{\lambda[\zeta_j] + \lambda[\zeta_{j+1}]}{2} \right) \left(\frac{\zeta_{j+1} - \zeta_j}{\Delta x} \right) \quad (134)$$

$$\varphi_{j-1/2} = - \left(\frac{\lambda[\zeta_j] + \lambda[\zeta_{j-1}]}{2} \right) \left(\frac{\zeta_j - \zeta_{j-1}}{\Delta x} \right) \quad (135)$$

d'où l'équation discrétisée

$$\frac{1}{\Delta x} \left(\left(\frac{\lambda[\zeta_j] + \lambda[\zeta_{j+1}]}{2} \right) \left(\frac{\zeta_{j+1} - \zeta_j}{\Delta x} \right) - \left(\frac{\lambda[\zeta_j] + \lambda[\zeta_{j-1}]}{2} \right) \left(\frac{\zeta_j - \zeta_{j-1}}{\Delta x} \right) \right) = 0 \quad (136)$$

ii) par *fonction de la moyenne* :

$$\varphi_{j+1/2} = \lambda \left[\frac{\zeta_j + \zeta_{j+1}}{2} \right] \left(\frac{\zeta_{j+1} - \zeta_j}{\Delta x} \right) \quad (137)$$

$$\varphi_{j-1/2} = -\lambda \left[\frac{\zeta_j + \zeta_{j-1}}{2} \right] \left(\frac{\zeta_j - \zeta_{j-1}}{\Delta x} \right) \quad (138)$$

avec l'équation discrétisée

$$\frac{1}{\Delta x} \left(\lambda \left[\frac{\zeta_j + \zeta_{j+1}}{2} \right] \left(\frac{\zeta_{j+1} - \zeta_j}{\Delta x} \right) - \lambda \left[\frac{\zeta_j + \zeta_{j-1}}{2} \right] \left(\frac{\zeta_j - \zeta_{j-1}}{\Delta x} \right) \right) = 0 \quad (139)$$

- 2 - Se reporter au chapitre 5 du polycopié de cours pour le détail de la mise en oeuvre des algorithmes non linéaires du point fixe

$$\mathbf{A} [\mathbf{X}^k] \cdot \mathbf{X}^{k+1} = \mathbf{B} [\mathbf{X}^k] \quad (140)$$

qui conduit à inverser

$$\mathbf{X}^{k+1} = [\mathbf{A} [\mathbf{X}^k]]^{-1} \cdot \mathbf{B} [\mathbf{X}^k] \quad (141)$$

et de Newton Raphson

$$\mathbf{X}^{k+1} = \mathbf{X}^k - [\mathbf{DF} [\mathbf{X}^k]]^{-1} \cdot \mathbf{F} [\mathbf{X}^k] \quad (142)$$

On se limitera dans un premier temps à l'algorithme du point fixe. Afin de prendre en main le problème à résoudre, mettez en place la méthode du point fixe sur 3 itérations, en considérant $n + 1 = 10$.

- 3 - Ecrire une fonction qui permette de généraliser la résolution en y ajoutant un critère d'arrêt ou de convergence. Ce critère d'arrêt peut, par exemple, consister à stopper le processus itératif dès que la différence relative des vecteurs solutions à deux itérations consécutives $\mathbf{X}^k$ et $\mathbf{X}^{k+1}$ est inférieure à un seuil ϵ :

— **si**

$$\frac{\|\mathbf{X}^{k+1} - \mathbf{X}^k\|}{\|\mathbf{X}^k\|} \geq \epsilon \quad (143)$$

et

$$k < k_{\max} \quad (144)$$

poursuivre les itérations, $k = k + 1$

— **si**

$$\frac{\|\mathbf{X}^{k+1} - \mathbf{X}^k\|}{\|\mathbf{X}^k\|} < \epsilon \quad (145)$$

ou

$$k = k_{\max} \quad (146)$$

stop

avec ϵ une tolérance à définir (exemple $\epsilon = 10^{-4}$). Un nombre d'itération maximal $k_{\max}$ permet d'éviter les boucles infinies dans le cas de non convergence, il est en particulier utile dans le cas transitoire (non traité ici). $k_{\max}$ doit être ajusté avec précaution (on prendra par exemple $k_{\max} = 50$). Un test sur l'erreur relative n'est pas toujours possible, par exemple quand $\|\mathbf{X}\| \rightarrow 0$. Dans ce cas le test porterait directement sur $\|\mathbf{X}^{k+1} - \mathbf{X}^k\|$. On pourra utiliser la norme euclidienne

$$\|\mathbf{X}\| = (\mathbf{X} \cdot \mathbf{X})^{1/2} \quad (147)$$

- 4 - Etudier l'influence de b sur la résolution. Que remarquez-vous ?
- 5 - Comparer les résultats donnés respectivement par la moyenne de la fonction et la fonction de la moyenne. Que remarquez-vous ?

Références

- [1] H. Versteeg, W. Malalasekera, An introduction to computational fluid dynamics. The finite volume method, ISBN 0-582-21884-5, Addison Wesley Longman Limited, England, 1998.