

résolution numérique des équations aux dérivées partielles

Albert GIRAUD ¹

¹GeoRessources Laboratory, Nancy, France

ENSG 2025

- 1 organisation du module EDP et évaluation
- 2 introduction
 - exemples EDP rencontrées en physique mathématique
 - définitions
 - méthodes de résolution exacte
 - méthodes de résolution approchée
- 3 méthode des différences finies
 - diffusion en régime stationnaire
 - advection diffusion en régime stationnaire
 - diffusion en régime transitoire
- 4 méthode des volumes finis
 - diffusion en régime stationnaire
 - diffusion en régime transitoire

organisation du module

- intervenants ENSG : Long Cheng, Albert Giraud (Bât. E - RDC)

- intervenants ENSG : Long Cheng, Albert Giraud (Bât. E - RDC)
- 4×1 h de **CM**:
 - **CM1** : Méthode des Différences Finies (**MDF**) appliquée à la diffusion en régime stationnaire
 - **CM2** : Méthode des Différences Finies appliquée à la diffusion en régime transitoire
 - **CM3** : Méthode des Volumes Finis (**MVF**)
 - **CM4** : Méthode des Volumes Finis appliquée à la diffusion non linéaire
- 10×2 h de **TD**:

- intervenants ENSG : Long Cheng, Albert Giraud (Bât. E - RDC)
- 4×1 h de **CM**:
 - **CM1** : Méthode des Différences Finies (**MDF**) appliquée à la diffusion en régime stationnaire
 - **CM2** : Méthode des Différences Finies appliquée à la diffusion en régime transitoire
 - **CM3** : Méthode des Volumes Finis (**MVF**)
 - **CM4** : Méthode des Volumes Finis appliquée à la diffusion non linéaire
- 10×2 h de **TD**:
 - séances 1 – 2 : méthodes de résolution exacte
 - séances 3 – 7 : méthodes de résolution numérique (3 MDF, 2 MVF)

- intervenants ENSG : Long Cheng, Albert Giraud (Bât. E - RDC)
- 4×1 h de **CM**:
 - **CM1** : Méthode des Différences Finies (**MDF**) appliquée à la diffusion en régime stationnaire
 - **CM2** : Méthode des Différences Finies appliquée à la diffusion en régime transitoire
 - **CM3** : Méthode des Volumes Finis (**MVF**)
 - **CM4** : Méthode des Volumes Finis appliquée à la diffusion non linéaire
- 10×2 h de **TD**:
 - séances 1 – 2 : méthodes de résolution exacte
 - séances 3 – 7 : méthodes de résolution numérique (3 MDF, 2 MVF)
 - séances 8 – 10 : projet = résolutions analytique et/ou numérique d'un problème aux dérivées partielles incluant analyses linéaires et non linéaires

- intervenants ENSG : Long Cheng, Albert Giraud (Bât. E - RDC)
- 4×1 h de **CM**:
 - **CM1** : Méthode des Différences Finies (**MDF**) appliquée à la diffusion en régime stationnaire
 - **CM2** : Méthode des Différences Finies appliquée à la diffusion en régime transitoire
 - **CM3** : Méthode des Volumes Finis (**MVF**)
 - **CM4** : Méthode des Volumes Finis appliquée à la diffusion non linéaire
- 10×2 h de **TD**:
 - séances 1 – 2 : méthodes de résolution exacte
 - **séances 3 – 7 : méthodes de résolution numérique** (3 MDF, 2 MVF)
 - **séances 8 – 10 : projet** = résolutions analytique et/ou numérique d'un problème aux dérivées partielles incluant analyses linéaires et non linéaires
- **évaluation** : rapport, compte rendu des TD 3 – 7 (50 %) et projet (50 %)
- **rapport**: travail en binôme

- intervenants ENSG : Long Cheng, Albert Giraud (Bât. E - RDC)
- les 2 Acquis d'apprentissage fondamentaux **AF** sont évalués via le rapport (compte rendu de TD et projet)
 - **AF1** : savoir résoudre analytiquement un problème aux dérivées partielles linéaire
 - **AF2** : savoir résoudre numériquement des problèmes aux dérivées partielles linéaires et non linéaires

- 1 organisation du module EDP et évaluation
- 2 introduction
 - exemples EDP rencontrées en physique mathématique
 - définitions
 - méthodes de résolution exacte
 - méthodes de résolution approchée
- 3 méthode des différences finies
 - diffusion en régime stationnaire
 - advection diffusion en régime stationnaire
 - diffusion en régime transitoire
- 4 méthode des volumes finis
 - diffusion en régime stationnaire
 - diffusion en régime transitoire

- équation des ondes (équation hyperbolique)

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \quad (1)$$

c : célérité ou vitesse de propagation de l'onde dans un milieu donné

- équation de la chaleur en régime transitoire (équation parabolique)

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} = \frac{1}{D} \frac{\partial u}{\partial t} \quad (2)$$

D : diffusivité. exemples : diffusion de chaleur (Fourier), de masse fluide (Darcy) d'une espèce chimique (Fick) en régime transitoire

- équation de la chaleur en régime transitoire (équation parabolique)

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} = \frac{1}{D} \frac{\partial u}{\partial t} \quad (3)$$

- équation de la chaleur en régime stationnaire (équation elliptique), équation de Laplace ou équation harmonique

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} = 0 \quad (4)$$

exemples : diffusion de chaleur (Fourier), de masse fluide (Darcy) d'une espèce chimique (Fick) en régime stationnaire, hydrodynamique, électrostatique, magnétisme.

- équation harmonique plane

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0 \quad (5)$$

abondamment étudiée en hydrodynamique (potentiels complexes)

- équation de Poisson.

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} = -f(x, y, z) \quad (6)$$

- 1 organisation du module EDP et évaluation
- 2 introduction
 - exemples EDP rencontrées en physique mathématique
 - **définitions**
 - méthodes de résolution exacte
 - méthodes de résolution approchée
- 3 méthode des différences finies
 - diffusion en régime stationnaire
 - advection diffusion en régime stationnaire
 - diffusion en régime transitoire
- 4 méthode des volumes finis
 - diffusion en régime stationnaire
 - diffusion en régime transitoire

équation aux dérivées partielles du second ordre

- fonction réelle , $u = f(x_1, x_2, \dots, x_n)$ solution (ou intégrale) de l'EDP du second ordre :

$$F\left(x_1, \dots, x_n, u, \frac{\partial u}{\partial x_1}, \dots, \frac{\partial u}{\partial x_n}, \frac{\partial^2 u}{\partial x_1^2}, \frac{\partial^2 u}{\partial x_2^2}, \frac{\partial^2 u}{\partial x_1 \partial x_2}, \dots, \frac{\partial^2 u}{\partial x_n^2}\right) = 0 \quad (7)$$

si u possède des dérivées partielles jusqu'à l'ordre 2 sur un ouvert $\Omega \in \mathbb{R}^n$ vérifiant 7.

- si, F fonction linéaire de u et de ses dérivées partielles, l'équation est dite linéaire :

$$\sum_{i=1}^{i=n} \sum_{j=1}^{j=n} A_{ij}(\underline{x}) \frac{\partial^2 u}{\partial x_i \partial x_j} + \sum_{k=1}^{k=n} A_k(\underline{x}) \frac{\partial u}{\partial x_k} + A_0(\underline{x})u = B(\underline{x}) \quad (8)$$

$$\underline{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n) \quad (9)$$

$A_{ij} = A_{ji}$, A_k , A_0 , B fonctions réelles données des n variables $x_1, x_2, \dots, x_n$

- si $\forall \underline{x}$ fixé $\in \Omega$, $\mathbf{A}$ possède une **valeur propre nulle**, l'équation est **parabolique** sur Ω .
- exemple : équation de la diffusion

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial x_2^2} + \dots + \frac{\partial^2 u}{\partial x_{n-1}^2} - \frac{1}{D(\underline{x})} \frac{\partial u}{\partial x_n} = 0 \quad (10)$$

cas particulier l'équation de la chaleur :

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} - \frac{1}{D(\underline{x})} \frac{\partial u}{\partial t} = 0 \quad (11)$$

où:

$$\begin{aligned} x_1 = x \quad , \quad x_2 = y \quad , \quad x_3 = z \quad , \quad x_4 = t \\ A_{11} = A_{22} = A_{33} = 1 \quad , \quad A_{44} = 0 \end{aligned} \quad (12)$$

- si $\forall \underline{x}$ fixé $\in \Omega$, $\mathbf{A}$ possède des **valeurs propres toutes strictement positives**, l'équation est **elliptique** sur Ω .
- exemples : équation de Laplace

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial x_2^2} + \dots + \frac{\partial^2 u}{\partial x_n^2} = 0 \quad (13)$$

et l'équation de Poisson

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial x_2^2} + \dots + \frac{\partial^2 u}{\partial x_n^2} = -f(x_1, x_2, \dots, x_n) \quad (14)$$

et donc :

$$A_{11} = A_{22} = \dots = A_{nn} = 1 \quad (15)$$

classification des EDP du second ordre

- si $\forall \underline{x}$ fixé $\in \Omega$, $\mathbf{A}$ possède des **valeurs propres toutes non nulles mais de signes quelconques**, l'équation est **hyperbolique** sur Ω .
- exemples

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial x_2^2} + \dots + \frac{\partial^2 u}{\partial x_{n-1}^2} - \frac{1}{c^2(\underline{x})} \frac{\partial^2 u}{\partial x_n^2} = 0 \quad (16)$$

cas particulier l'équation des ondes :

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} - \frac{1}{c^2(\underline{x})} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = 0 \quad (17)$$

$$A_{11} = A_{22} = \dots = A_{n-1\ n-1} = 1, \quad A_{nn} = -\frac{1}{c^2(\underline{x})} \quad (18)$$

en pratique $x_1, x_2, \dots, x_{n-1}$: variables d'espace, x_n temps t

$$x_1 = x, \quad x_2 = y, \quad x_3 = z, \quad x_4 = t \quad (19)$$

$$A_{11} = A_{22} = A_{33} = 1, \quad A_{44} = -\frac{1}{c^2(\underline{x})} \quad (20)$$

problèmes rencontrés : équations elliptiques

- problème de Dirichlet : on donne $\varphi(\underline{x})$ sur $\partial\Omega$. Trouver une solution u de l'équation telle que :

$$u(\underline{x}) = \varphi(\underline{x}) \quad , \quad \forall \underline{x} \in \partial\Omega \quad (21)$$

- problème de Neumann : on donne $\psi(\underline{x})$ sur $\partial\Omega$. Trouver une solution u de l'équation telle que :

$$\frac{\partial u}{\partial n}(\underline{x}) = \psi(\underline{x}) \quad , \quad \forall \underline{x} \in \partial\Omega \quad (22)$$

avec

$$\frac{\partial u}{\partial n} = \underline{\text{grad}} u \cdot \underline{n} = \underline{\nabla} u \cdot \underline{n} \quad (23)$$

$\underline{n}$ normale unitaire sortante de $\partial\Omega$.

$$\frac{\partial u}{\partial n} = \frac{\partial u}{\partial x} n_x + \frac{\partial u}{\partial y} n_y + \frac{\partial u}{\partial z} n_z \quad , \quad n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 = 1 \quad (24)$$

- cas fréquent de problèmes mixtes : on donne $\varphi(\underline{x})$ sur $\partial\Omega_u$ et $\psi(\underline{x})$ sur $\partial\Omega_{\nabla u_n}$. Trouver une solution u de l'équation telle que :

$$u(\underline{x}) = \varphi(\underline{x}), \quad \forall \underline{x} \in \partial\Omega_u \quad (25)$$

$$\frac{\partial u}{\partial n}(\underline{x}) = \psi(\underline{x}), \quad \forall \underline{x} \in \partial\Omega_{\nabla u_n} \quad (26)$$

$$\partial\Omega = \partial\Omega_u \cup \partial\Omega_{\nabla u_n} \quad (27)$$

$$\partial\Omega_u \cap \partial\Omega_{\nabla u_n} = \emptyset \quad (28)$$

problèmes rencontrés : équations paraboliques et hyperboliques

- équations de la diffusion ou des ondes, $n - 1 = m$ et $x_n = t$.
espace physique $\mathbb{R}^m$, t : temps.
- **problème de Hadamard** avec :
 - des **conditions aux limites** : on se donne $\varphi(\underline{x})$ sur $\partial\Omega$,
 - des **conditions initiales** : on se donne une fonction u_0 (cas de la diffusion) ou deux fonctions u_0 et v_0 (cas des ondes) et on cherche u telle que :

$$\left\{ \begin{array}{l} u|_{\partial\Omega} = \varphi \\ u|_{t=0} = u_0 \\ \frac{\partial u}{\partial t}|_{t=0} = v_0 \end{array} \right. \quad (29)$$

- 1 organisation du module EDP et évaluation
- 2 introduction
 - exemples EDP rencontrées en physique mathématique
 - définitions
 - **méthodes de résolution exacte**
 - méthodes de résolution approchée
- 3 méthode des différences finies
 - diffusion en régime stationnaire
 - advection diffusion en régime stationnaire
 - diffusion en régime transitoire
- 4 méthode des volumes finis
 - diffusion en régime stationnaire
 - diffusion en régime transitoire

principe de superposition et méthode de séparation des variables

- principe de superposition : *l'ensemble des solutions d'une équation aux dérivées partielles linéaire sans second membre forme un espace vectoriel de dimension finie ou infinie.*
- recherche des solutions comme combinaison linéaire des solutions élémentaires, combinaison finie ou infinie, continue ou discrète.
- pas de méthode générale de recherche d'une solution élémentaire.
- une d'entre elles : méthode de séparation des variables
 - solution à variables séparées : solution qui est le produit d'une fonction de certaines variables
 - exemple dans $\mathbb{R}^4$:

$$u(x) = f(x_1, x_2)g(x_3)h(x_4) \quad (30)$$

- lorsque l'une de ces variables est le temps et qu'elle est le seul argument d'une fonction du produit on parlera de *solution stationnaire*

- elle consiste à :
 - chercher des solutions à variables séparées,
 - superposer ces solutions pour obtenir d'autres solutions notamment celle qui sera solution de l'équation avec second membre et qui vérifiera les conditions imposées à la solution.
- **attention :**
 - la méthode de Fourier n'est pas toujours applicable,
 - elle n'est pas non plus la seule méthode existante (méthode de Galerkin ...)

méthode de fourier: équation harmonique plane

- coordonnées polaires (géométrie cylindrique)

$$\Delta u = \frac{\partial^2 u}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial u}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2 u}{\partial \theta^2} = 0 \quad (31)$$

- recherche de solutions à variables séparées

$$u(\rho, \theta) = f(\rho) g(\theta), \quad (32)$$

$$\left(f'' + \frac{f'}{\rho} \right) g + \frac{1}{\rho^2} f g'' = 0 \quad (33)$$

- système d'équations différentielles (λ : constante)

$$\frac{\rho^2 f'' + \rho f'}{f} = -\frac{g''}{g} = \lambda \quad (34)$$

$$g'' + \lambda g = 0, \quad \rho^2 f'' + \rho f' - \lambda f = 0 \quad (35)$$

méthode de fourier: équation harmonique plane

- u est une fonction périodique de période 2π de θ ¹

$$\frac{g''(\theta)}{g(\theta)} = -n^2, \quad n \text{ entier} \quad (36)$$

on obtient un spectre dénombrable

$$g_n(\theta) = A_n \cos(n\theta) + B_n \sin(n\theta) \quad (37)$$

- la seconde équation $\rho^2 f'' + \rho f' - n^2 f = 0$ est une équation d'Euler, on pose

$$f(\rho) = \rho^\alpha, \quad \text{d'où} \quad f'(\rho) = \alpha \rho^{\alpha-1}, \quad f''(\rho) = \alpha(\alpha-1) \rho^{\alpha-2} \quad (38)$$

- finalement (après calculs)

$$f_n(\rho) = C_n \rho^n + D_n \rho^{-n} \quad \text{si} \quad n \neq 0 \quad (39)$$

$$f_0(\rho) = C_0 + D_0 \ln(\rho) \quad \text{si} \quad n = 0 \quad (40)$$

- superposition des solutions

$$u(\rho, \theta) = \sum_{n=-\infty}^{n=\infty} f_n(\rho) g_n(\theta) \quad (41)$$

¹[Bass, 1968] p. 1054

- équation harmonique cylindrique

$$\Delta u = \frac{\partial^2 u}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial u}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2 u}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \quad (42)$$

- recherche de solutions à variables séparées

$$u(\rho, \theta, z) = f(z) g(\theta) h(\rho) \quad (43)$$

$$f(z) g(\theta) \left(h''(\rho) + \frac{h'(\rho)}{\rho} \right) + f(z) h(\rho) \frac{g''(\theta)}{\rho^2} + g(\theta) h(\rho) f''(z) = 0 \quad (44)$$

On multiplie la relation (44) par $\rho^2 / f g h$:

$$\frac{\rho^2 h''(\rho) + \rho h'(\rho)}{h(\rho)} + \frac{g''(\theta)}{g(\theta)} + \rho^2 \frac{f''(z)}{f(z)} = 0 \quad (45)$$

- on en déduit :

$$\frac{g''(\theta)}{g(\theta)} = \text{constante} \quad , \quad \frac{f''(z)}{f(z)} = \text{constante} \quad (46)$$

méthode de fourier: équation harmonique cylindrique

- u est une fonction périodique de période 2π de θ

$$\frac{g''(\theta)}{g(\theta)} = -n^2, \quad n \text{ entier} \quad (47)$$

- on suppose² que $\frac{f''}{f}$ est égale à une constante positive k^2

$$f'' - k^2 f = 0 \quad (48)$$

- on obtient une *équation différentielle de Bessel* à paramètre entier par rapport à la variable $k\rho$

$$\rho^2 h''(\rho) + \rho h'(\rho) + (k^2 \rho^2 - n^2) h(\rho) = 0 \quad (49)$$

- et donc une solution de la forme³

$$u(\rho, \theta, z) = J_n(k\rho) \exp(-kz) (A \cos n\theta + B \sin n\theta) \quad (50)$$

où A, B, k sont trois constantes dépendant éventuellement de l'entier n . On déduit $u(x, y, z)$, avec $x = \rho \cos \theta$, $y = \rho \sin \theta$

²voir [Bass, 1968] p. 1054

³[Weisstein, 2008] (*Bessel function of the first kind*) pour des graphiques des fonctions de Bessel J_k

- équation de la chaleur 1D

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0 \quad (51)$$

- solutions à variables séparées

$$u(x, t) = f(x)g(t), \quad \frac{\partial u}{\partial t} = f(x)g'(t), \quad \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = f''(x)g(t) \quad (52)$$

- système d'équations différentielles ($\lambda = -\omega^2$: constante)

$$f(x)g'(t) = f''(x)g(t) \Rightarrow \frac{g'(t)}{g(t)} = \frac{f''(x)}{f(x)} = -\omega^2 \quad (53)$$

$$f''(x) - \omega^2 f(x) = 0, \quad g'(t) - \omega^2 g(t) = 0 \quad (54)$$

- solutions élémentaires de la forme

$$f(x) = A \sin(\omega x) + B \cos(\omega x), \quad g(t) = C \exp(-\omega^2 t) \quad (55)$$

- et donc ⁴

$$u(x, t) = (A \sin(\omega x) + B \cos(\omega x)) \exp(-\omega^2 t) \quad (56)$$

⁴après simplification des produits AC et BC compactés en A et B 

transformations intégrales : Laplace, Fourier etc.

- transformations de Laplace, Fourier et variantes (Hankel, Laplace-Carson etc.), combinées avec séparation de variables
- exemple : G fonction de Green 3D pour l'équation de Poisson en milieu infini [Bonnet, 1994]

$$\begin{aligned}\Delta G(\underline{z}, \underline{z}') + \delta(\underline{z} - \underline{z}') &= 0 \quad , \quad \underline{z} \in \Omega_z - \{\underline{z}'\} = \mathbb{R}^3 - \{\underline{z}'\} \\ G(\underline{z}, \underline{z}') &= 0 \quad , \quad \underline{z} \in \partial\Omega_z\end{aligned}\tag{57}$$

avec $\delta(\underline{z})$ *distribution* de Dirac 3D

$$\delta(\underline{z} - \underline{z}') = \delta(z_1 - z'_1) \delta(z_2 - z'_2) \delta(z_3 - z'_3)\tag{58}$$

$$\int_{\mathbb{R}^3} f(\underline{z}) \delta(\underline{z} - \underline{z}') d\Omega_z = f(\underline{z}')\tag{59}$$

- avec $G(\underline{z}, \underline{z}')$ fonction harmonique dans $\Omega_z = \mathbb{R}^3$, non bornée au voisinage de $\underline{z}'$.
- problème de diffusion de chaleur stationnaire en milieu isotrope infini, $G(\underline{z}, \underline{z}')$: température en $\underline{z}$ due à une source de chaleur ponctuelle d'intensité unité imposée en $\underline{z}'$

transformation de Fourier et fonction de Green

- transformation de Fourier 3D

$$\bar{f}(\underline{\xi}, \underline{z}') = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{z_1=-\infty}^{z_1=\infty} \int_{z_2=-\infty}^{z_2=\infty} \int_{z_3=-\infty}^{z_3=\infty} f(\underline{z}', \underline{z}) \times \exp(-i(z_1\xi_1 + z_2\xi_2 + z_3\xi_3)) dz_1 dz_2 dz_3 \quad (60)$$

$$\bar{f}(\underline{z}', \underline{\xi}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{\mathbb{R}^3} f(\underline{z}', \underline{z}) \exp[-i\underline{z} \cdot \underline{\xi}] d\Omega_z \quad (61)$$

- transformation de Fourier inverse

$$f(\underline{z}', \underline{z}) = \int_{\mathbb{R}^3} \bar{f}(\underline{z}', \underline{\xi}) \exp[i\underline{z} \cdot \underline{\xi}] d\Omega_{\xi} \quad (62)$$

- solution exacte: fonction de Green 3D pour l'équation de Poisson en milieu infini

$$G(\underline{z}, \underline{z}') = \frac{1}{4\pi r} = \frac{1}{4\pi \|\underline{z} - \underline{z}'\|} \quad (63)$$

- fonction harmonique $1/r$, fondamentale en théorie du potentiel (potentiels newtoniens pour sphères, ellipsoïdes obtenus par intégration [Bass, 1968, Kellogg, 1929])

- transformation de Laplace $\mathcal{L}$, s paramètre de Laplace

$$\mathcal{L}[u(x, t)] = \bar{u}(x, s) = \int_0^{\infty} u(x, t) \exp(-st) dt \quad (64)$$

- application à l'ensemble des équations

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} &= \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \\ u(x, t=0) &= 0, \quad 0 \leq x \leq 1 \end{aligned} \quad (65)$$

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

- la condition initiale $u(x, t=0) = 0$ est prise en compte

$$\mathcal{L}\left[\frac{\partial u}{\partial t}\right] = s\bar{u}(x, s) - u(x, t=0) = s\bar{u}(x, s) \quad (66)$$

transformation de Laplace : exemple

- équations dans l'espace transformé de Laplace

$$\frac{d^2}{dx^2} \bar{u}(x, s) - s \bar{u}(x, s) = 0 \quad (67)$$

$$\bar{u}(0, s) = \frac{1}{s}, \quad \bar{u}(1, s) = 0 \quad (68)$$

- la variable t est supprimée, remplacée par le paramètre de Laplace s , l'EDP est donc remplacée par une équation différentielle de solution

$$\bar{u}(x, s) = A(s) \exp(qx) + B(s) \exp(-qx) \quad , \quad q = \sqrt{s} \quad (69)$$

- les constantes $A(s)$ et $B(s)$ sont déterminées par les conditions aux limites (68)

$$\bar{u}(x, s) = \frac{\exp(-qx) - \exp(-q(2-x))}{s(1 - \exp(-2q))} \quad (70)$$

- on obtient aisément la solution exacte dans l'espace transformé, difficulté : retour à l'espace physique et donc le calcul de la transformée inverse $u(x, t) = \mathcal{L}^{-1}(\bar{u}(x, s))$

transformation de Laplace : exemple

- $u(x, t) = \mathcal{L}^{-1}(\bar{u}(x, s))$ calculée par intégration dans le plan complexe, des tables d'inversion existent

$$\mathcal{L}^{-1} \left[\frac{\exp(-qx)}{s} \right] = \operatorname{erfc} \left(\frac{x}{2\sqrt{t}} \right) \quad (71)$$

$$\operatorname{erfc}(x) = 1 - \operatorname{erf}(x) \quad , \quad \operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x \exp(-\xi^2) d\xi \quad (72)$$

- méthode développement en série entière

$$\frac{1}{1-x} = 1 + x + x^2 + x^3 + \dots + x^n = \sum_{n=0}^{\infty} x^n \quad , \quad |x| < 1 \quad (73)$$

$$\frac{1}{1 - \exp(-2q)} = \sum_{n=0}^{\infty} \exp(-2nq) \quad (74)$$

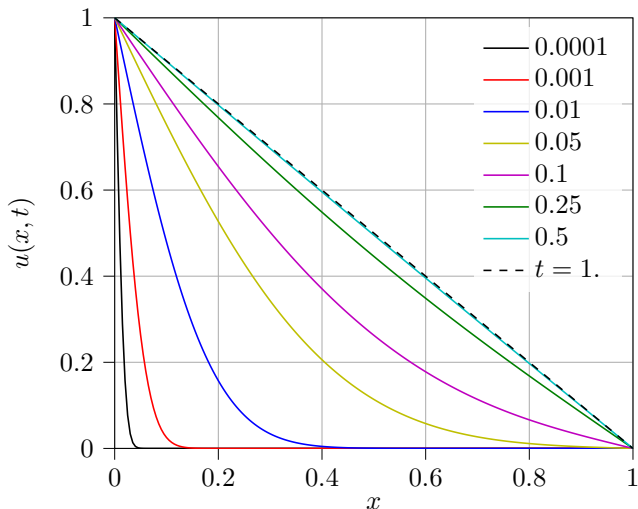
- $\rightarrow$ solution exacte ([Carslaw and Jaeger, 1959] p 309)

$$u(x, t) = \sum_{n=0}^{\infty} \left(\operatorname{erfc} \left(\frac{2n+x}{2\sqrt{t}} \right) - \operatorname{erfc} \left(\frac{2(n+1)-x}{2\sqrt{t}} \right) \right) \quad (75)$$

transformation de Laplace : exemple

- solution exacte

expérience Fourier-Darcy en regime transitoire



- avantage : expression de la solution (sous forme intégrale),
- permettent de diminuer le nombre de variables du problème, le plus souvent :
 - tf Laplace appliquée à des problèmes de diffusion ou de propagation permet d'éliminer la variable temps,
 - tf Fourier simple/multiple permet d'éliminer une/plusieurs variable(s) d'espace
- variables *éliminées* transformées en paramètres, dans de nombreux cas on est amené à résoudre des équations différentielles dans les espaces transformés
- résolution exacte relativement simple dans les espaces transformés : difficulté reportée aux transformations inverses (intégrales calculables analytiquement ou non)
- méthodes d'intégration numérique permettent d'obtenir des solutions approchées *semi-explicites* (très utile) ⁵

⁵[Sneddon, 1951, Colombo, 1959, Carslaw and Jaeger, 1959, Bass, 1968]

- le milieu continu est représenté approximativement par un milieu discret : un *maillage* ou une *grille*
- la solution est calculée en un nombre fini de points, noeuds ou points de discrétisation
- les méthodes de résolution numérique conduisent à des systèmes linéaires à inverser de nombreuses fois (problèmes transitoires et/ou non linéaires)
- les méthodes et techniques numériques sont nombreuses et spécifiques à des classes de problèmes ou d'équations
- les principales méthodes
 - **différences finies** (MDF)
 - **volumes finis** (MVF)
 - éléments finis (MEF) : présenté en module optionnel, S8
 - transformations intégrales (avec calcul numérique des intégrales inverses de Laplace ou Fourier)

- 1 organisation du module EDP et évaluation
- 2 introduction
 - exemples EDP rencontrées en physique mathématique
 - définitions
 - méthodes de résolution exacte
 - méthodes de résolution approchée
- 3 méthode des différences finies
 - diffusion en régime stationnaire
 - advection diffusion en régime stationnaire
 - diffusion en régime transitoire
- 4 méthode des volumes finis
 - diffusion en régime stationnaire
 - diffusion en régime transitoire

- 1 organisation du module EDP et évaluation
- 2 introduction
 - exemples EDP rencontrées en physique mathématique
 - définitions
 - méthodes de résolution exacte
 - méthodes de résolution approchée
- 3 **méthode des différences finies**
 - **diffusion en régime stationnaire**
 - advection diffusion en régime stationnaire
 - diffusion en régime transitoire
- 4 **méthode des volumes finis**
 - diffusion en régime stationnaire
 - diffusion en régime transitoire

- historiquement développée la première $\approx 1940...$
- la plus simple et intuitive, légère à mettre en oeuvre
- approche mathématique : discrétisation spatiale des opérateurs de dérivation
- basée sur développement en série de Taylor de l'inconnue aux points de discrétisation
- ensemble des points de discrétisation définit un maillage ou une grille
- développée initialement pour des grilles régulières mais généralisée aux grilles irrégulières
- on limitera la présentation aux problèmes $1D$ et aux grilles régulières

- équation de diffusion 1D linéaire stationnaire

$$\operatorname{div}(-\lambda \underline{\operatorname{grad}}(\zeta)) = 0 \quad (76)$$

- matériau homogène : λ uniforme et constant
- $\Rightarrow$ équation de Laplace

$$\Delta(\zeta) = \frac{\partial^2 \zeta}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \zeta}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \zeta}{\partial z^2} \quad (77)$$

- cas 1D

$$\frac{d^2 \zeta}{dx^2} = 0 \quad (78)$$

- *MDF* : approximation de la dérivée seconde par combinaison linéaire de ζ calculée en des points fixés : noeuds d'un maillage ou points de discrétisation

- $x_k = k \Delta x = k h$, d'inconnue ζ_k

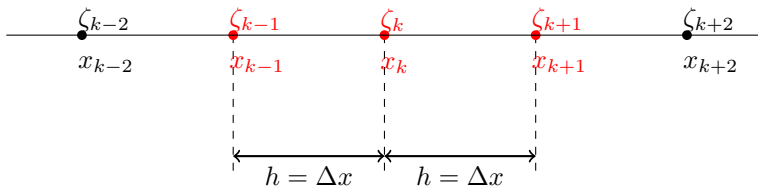
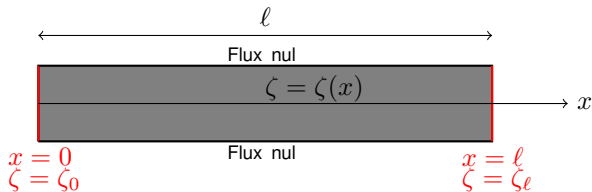
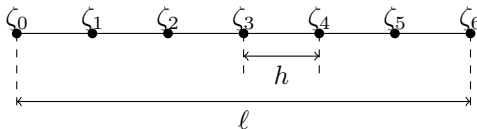


Figure: maillage régulier : point de discrétisation k

- le milieu continu



- le milieu discrétisé



- $N = 5$ points intérieurs, $N + 1 = 6$ intervalles, $N + 2 = 7$ points

- on développe la fonction $\zeta(x)$ en série de Taylor autour du point x_k du maillage

$$\begin{aligned}\zeta(x) = & \zeta(x_k) + (x - x_k) \zeta'(x_k) + \frac{(x - x_k)^2}{2} \zeta^{(2)}(x_k) + \\ & + \frac{(x - x_k)^3}{6} \zeta^{(3)}(x_k) + O\left((x - x_k)^4\right)\end{aligned}\quad (79)$$

- notations

$$\zeta_{k-1} = \zeta(x_{k-1}), \quad \zeta_k = \zeta(x_k), \quad \zeta_{k+1} = \zeta(x_{k+1}) \quad (80)$$

$$\zeta'_k = \zeta'(x_k) = \left[\frac{d\zeta}{dx} \right]_k, \quad \zeta_k^{(2)} = \zeta^{(2)}(x_k) = \left[\frac{d^2\zeta}{dx^2} \right]_k \quad (81)$$

- appliquer le développement en série de Taylor aux points $k \pm 1$

- appliquer le développement en série de Taylor aux points $k \pm 1$
- développement en série de Taylor aux points $k \pm 1$

$$\zeta_{k-1} = \zeta_k - h \zeta'_k + \frac{h^2}{2} \zeta_k^{(2)} - \frac{h^3}{6} \zeta_k^{(3)} + o(h^4) \quad (82)$$

$$\zeta_{k+1} = \zeta_k + h \zeta'_k + \frac{h^2}{2} \zeta_k^{(2)} + \frac{h^3}{6} \zeta_k^{(3)} + o(h^4) \quad (83)$$

- développement en série de Taylor aux points $k \pm 1$

$$\zeta_{k-1} = \zeta_k - h \zeta'_k + \frac{h^2}{2} \zeta_k^{(2)} - \frac{h^3}{6} \zeta_k^{(3)} + O(h^4) \quad (84)$$

$$\zeta_{k+1} = \zeta_k + h \zeta'_k + \frac{h^2}{2} \zeta_k^{(2)} + \frac{h^3}{6} \zeta_k^{(3)} + O(h^4) \quad (85)$$

- par combinaisons linéaires de ζ_{k-1} , ζ_k , ζ_{k+1} proposer 3 approximations de ζ'_k

- dérivée première à droite (ou aval)

$$\zeta'_{k+} = \frac{\zeta_{k+1} - \zeta_k}{h} + 0(h) \quad (86)$$

- dérivée première à gauche (ou amont)

$$\zeta'_{k-} = \frac{\zeta_k - \zeta_{k-1}}{h} + 0(h) \quad (87)$$

- la dérivée première centrée

$$\zeta'_k = \frac{\zeta_{k+1} - \zeta_{k-1}}{2h} + 0(h^2) \quad (88)$$

- Les dérivées premières à droite et à gauche sont du **premier ordre en h** alors que la dérivée première centrée est du **deuxième ordre en h** : les **erreurs de troncatures** sont respectivement proportionnelles à h et h^2 .

- développement en série de Taylor aux points $k \pm 1$

$$\zeta_{k-1} = \zeta_k - h \zeta'_k + \frac{h^2}{2} \zeta_k^{(2)} - \frac{h^3}{6} \zeta_k^{(3)} + O(h^4) \quad (89)$$

$$\zeta_{k+1} = \zeta_k + h \zeta'_k + \frac{h^2}{2} \zeta_k^{(2)} + \frac{h^3}{6} \zeta_k^{(3)} + O(h^4) \quad (90)$$

- par combinaison linéaire de ζ_{k-1} , ζ_k , ζ_{k+1} proposer une approximation de $\zeta_k^{(2)}$

- développement en série de Taylor aux points $k \pm 1$

$$\zeta_{k-1} = \zeta_k - h \zeta'_k + \frac{h^2}{2} \zeta_k^{(2)} - \frac{h^3}{6} \zeta_k^{(3)} + O(h^4) \quad (91)$$

$$\zeta_{k+1} = \zeta_k + h \zeta'_k + \frac{h^2}{2} \zeta_k^{(2)} + \frac{h^3}{6} \zeta_k^{(3)} + O(h^4) \quad (92)$$

- développement en série de Taylor aux points $k \pm 1$

$$\zeta_{k-1} = \zeta_k - h \zeta'_k + \frac{h^2}{2} \zeta_k^{(2)} - \frac{h^3}{6} \zeta_k^{(3)} + O(h^4) \quad (91)$$

$$\zeta_{k+1} = \zeta_k + h \zeta'_k + \frac{h^2}{2} \zeta_k^{(2)} + \frac{h^3}{6} \zeta_k^{(3)} + O(h^4) \quad (92)$$

- somme des équations (91-92)

- développement en série de Taylor aux points $k \pm 1$

$$\zeta_{k-1} = \zeta_k - h \zeta'_k + \frac{h^2}{2} \zeta_k^{(2)} - \frac{h^3}{6} \zeta_k^{(3)} + O(h^4) \quad (91)$$

$$\zeta_{k+1} = \zeta_k + h \zeta'_k + \frac{h^2}{2} \zeta_k^{(2)} + \frac{h^3}{6} \zeta_k^{(3)} + O(h^4) \quad (92)$$

- somme des équations (91-92)

$$\zeta_{k-1} + \zeta_{k+1} = 2 \zeta_k + h^2 \zeta_k^{(2)} + O(h^4) \quad (93)$$

- développement en série de Taylor aux points $k \pm 1$

$$\zeta_{k-1} = \zeta_k - h \zeta'_k + \frac{h^2}{2} \zeta_k^{(2)} - \frac{h^3}{6} \zeta_k^{(3)} + 0(h^4) \quad (91)$$

$$\zeta_{k+1} = \zeta_k + h \zeta'_k + \frac{h^2}{2} \zeta_k^{(2)} + \frac{h^3}{6} \zeta_k^{(3)} + 0(h^4) \quad (92)$$

- somme des équations (91-92)

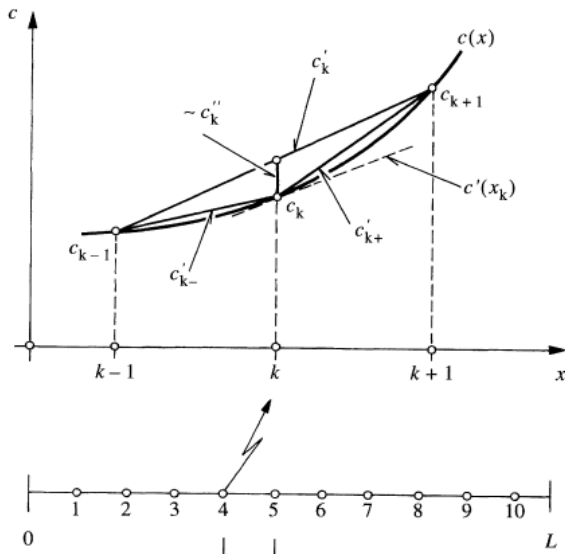
$$\zeta_{k-1} + \zeta_{k+1} = 2\zeta_k + h^2 \zeta_k^{(2)} + 0(h^4) \quad (93)$$

- on en déduit

$$\zeta_k^{(2)} = \frac{\zeta_{k-1} - 2\zeta_k + \zeta_{k+1}}{h^2} + 0(h^2) \quad (94)$$

représentation graphique

- approximations par différences finies des dérivées premières et seconde, [Rappaz et al., 2003]



précision d'une approximation

- erreur de troncature d'une approximation : différence entre la dérivée et son équation discrétisée.
- exemple : dérivée première à droite ζ'_{k+}

$$R'_{k+} = \zeta'_{k+} - \zeta'_k, \quad \zeta'_{k+} = \frac{\zeta_{k+1} - \zeta_k}{h} \quad (95)$$

$$R'_{k+} = \frac{\zeta_{k+1} - \zeta_k}{h} - \zeta'_k \quad (96)$$

- on remplace ζ_{k+1} par son développement en série de Taylor autour du point k

$$R'_{k+} = \frac{1}{h} \left(\cancel{\zeta_k} + h \cancel{\zeta'_k} + \frac{h^2}{2} \zeta_k^{(2)} + \frac{h^3}{6} \zeta_k^{(3)} + 0(h^4) - \cancel{\zeta_k} \right) - \cancel{\zeta'_k} \quad (97)$$

- erreur de troncature

$$R'_{k+} = \frac{h}{2} \zeta_k^{(2)} + \frac{h^2}{6} \zeta_k^{(3)} + 0(h^3) \quad (98)$$

- précision d'une approximation donnée par le 1^{er} terme négligé dans l'erreur de troncature
- dérivée première à droite, 1^{er} terme proportionnel à $h = h^1$
- approximation de la dérivée première par la dérivée première à droite d'ordre 1 en h

- erreur de troncature

$$R'_{k-} = \zeta'_{k-} - \zeta'_k, \quad \zeta'_{k-} = \frac{\zeta_k - \zeta_{k-1}}{h} \quad (99)$$

$$R'_{k+} = \frac{\zeta_k - \zeta_{k-1}}{h} - \zeta'_k \quad (100)$$

- on remplace ζ_{k-1} par son développement en série de Taylor autour du point k

$$R'_{k-} = \frac{1}{h} \left(\cancel{\zeta_k} - \left(\cancel{\zeta_k} - h \cancel{\zeta'_k} + \frac{h^2}{2} \zeta_k^{(2)} - \frac{h^3}{6} \zeta_k^{(3)} + 0(h^4) \right) \right) - \cancel{\zeta'_k} \quad (101)$$

$$R'_{k-} = \frac{h}{2} \zeta_k^{(2)} - \frac{h^2}{6} \zeta_k^{(3)} + 0(h^3) \quad (102)$$

- approximation d'ordre 1 en h

- erreur de troncature

$$R'_k = \frac{\zeta_{k+1} - \zeta_{k-1}}{2h} - \zeta'_k \quad (103)$$

- on remplace ζ_{k-1} et ζ_{k+1} par leurs développements en série de Taylor autour du point k (relations 89-90)

$$R'_k = \frac{1}{2h} \left(2h \zeta'_k + \frac{h^3}{3} \zeta_k^{(3)} + 0(h^4) \right) - \zeta'_k \quad (104)$$

$$R'_k = \zeta'_k + \frac{h^2}{6} \zeta_k^{(3)} + 0(h^3) - \zeta'_k \quad (105)$$

$$R'_k = \frac{h^2}{6} \zeta_k^{(3)} + 0(h^3) \quad (106)$$

- l'approximation est d'ordre 2 en h

approximation de la dérivée troisième

- appliquer le développement en série de Taylor aux points $k \pm 1$ et aux points $k \pm 2$

approximation de la dérivée troisième

- appliquer le développement en série de Taylor aux points $k \pm 1$ et aux points $k \pm 2$
- développement en série de Taylor aux points $k \pm 1, k \pm 2$

$$\zeta_{k-2} = \zeta_k - 2h \zeta'_k + 2h^2 \zeta_k^{(2)} - \frac{4h^3}{3} \zeta_k^{(3)} + \frac{2h^4}{3} \zeta_k^{(4)} + 0(h^5) \quad (107)$$

$$\zeta_{k-1} = \zeta_k - h \zeta'_k + \frac{h^2}{2} \zeta_k^{(2)} - \frac{h^3}{6} \zeta_k^{(3)} + \frac{h^4}{24} \zeta_k^{(4)} + 0(h^5) \quad (108)$$

$$\zeta_{k+1} = \zeta_k + h \zeta'_k + \frac{h^2}{2} \zeta_k^{(2)} + \frac{h^3}{6} \zeta_k^{(3)} + \frac{h^4}{24} \zeta_k^{(4)} + 0(h^5) \quad (109)$$

$$\zeta_{k+2} = \zeta_k + 2h \zeta'_k + 2h^2 \zeta_k^{(2)} + \frac{4h^3}{3} \zeta_k^{(3)} + \frac{2h^4}{3} \zeta_k^{(4)} + 0(h^5) \quad (110)$$

- exercice : par combinaison linéaire de $\zeta_{k-2}, \zeta_{k-1}, \zeta_k, \zeta_{k+1}, \zeta_{k+2}$ proposer une approximation de $\zeta_k^{(3)}$

- solution:

$$\zeta_{k+2} - \zeta_{k-2} = 4h \zeta'_k + \frac{8h^3}{3} \zeta_k^{(3)} + 0(h^5) \quad (111)$$

$$\zeta_{k+1} - \zeta_{k-1} = 2h \zeta'_k + \frac{h^3}{3} \zeta_k^{(3)} + 0(h^5) \quad (112)$$

- la combinaison linéaire (111) - 2 (112) permet d'éliminer la dérivée première

$$\zeta_{k+2} - \zeta_{k-2} - 2(\zeta_{k+1} - \zeta_{k-1}) = 2h^3 \zeta_k^{(3)} + 0(h^5) \quad (113)$$

et on obtient l'approximation de la dérivée troisième

$$\zeta_k^{(3)} = \frac{\zeta_{k+2} - 2\zeta_{k+1} + 2\zeta_{k-1} - \zeta_{k-2}}{2h^3} + 0(h^2) \quad (114)$$

- cette discrétisation qui utilise 5 points conduit à une matrice pentadiagonale

approximation de la dérivée quatrième

- appliquer le développement en série de Taylor aux points $k \pm 1$ et aux points $k \pm 2$

approximation de la dérivée quatrième

- appliquer le développement en série de Taylor aux points $k \pm 1$ et aux points $k \pm 2$
- développement en série de Taylor aux points $k \pm 1, k \pm 2$

$$\zeta_{k-2} = \zeta_k - 2h \zeta'_k + 2h^2 \zeta_k^{(2)} - \frac{4h^3}{3} \zeta_k^{(3)} + \frac{2h^4}{3} \zeta_k^{(4)} + 0(h^5) \quad (115)$$

$$\zeta_{k-1} = \zeta_k - h \zeta'_k + \frac{h^2}{2} \zeta_k^{(2)} - \frac{h^3}{6} \zeta_k^{(3)} + \frac{h^4}{24} \zeta_k^{(4)} + 0(h^5) \quad (116)$$

$$\zeta_{k+1} = \zeta_k + h \zeta'_k + \frac{h^2}{2} \zeta_k^{(2)} + \frac{h^3}{6} \zeta_k^{(3)} + \frac{h^4}{24} \zeta_k^{(4)} + 0(h^5) \quad (117)$$

$$\zeta_{k+2} = \zeta_k + 2h \zeta'_k + 2h^2 \zeta_k^{(2)} + \frac{4h^3}{3} \zeta_k^{(3)} + \frac{2h^4}{3} \zeta_k^{(4)} + 0(h^5) \quad (118)$$

- exercice : par combinaison linéaire de $\zeta_{k-2}, \zeta_{k-1}, \zeta_k, \zeta_{k+1}, \zeta_{k+2}$ proposer une approximation de $\zeta_k^{(4)}$

- solution:

$$\zeta_{k+2} + \zeta_{k-2} = 2\zeta_k + 4h^2 \zeta_k^{(2)} + \frac{4h^4}{3} \zeta_k^{(4)} + 0(h^6) \quad (119)$$

$$\zeta_{k+1} + \zeta_{k-1} = 2\zeta_k + h^2 \zeta_k^{(2)} + \frac{h^4}{12} \zeta_k^{(4)} + 0(h^6) \quad (120)$$

- la combinaison linéaire (119) - 4 (120) permet d'éliminer la dérivée seconde

$$\zeta_{k+2} + \zeta_{k-2} - 4(\zeta_{k+1} + \zeta_{k-1}) = -6\zeta_k + h^4 \zeta_k^{(4)} + 0(h^6) \quad (121)$$

et on obtient l'approximation de la dérivée quatrième

$$\zeta_k^{(4)} = \frac{\zeta_{k+2} - 4\zeta_{k+1} + 6\zeta_k - 4\zeta_{k-1} + \zeta_{k-2}}{h^4} + 0(h^2) \quad (122)$$

- cette discrétisation qui utilise 5 points conduit à une matrice pentadiagonale

nouvelle approximation de la dérivée seconde

- appliquer le développement en série de Taylor aux points $k \pm 1$ et aux points $k \pm 2$

nouvelle approximation de la dérivée seconde

- appliquer le développement en série de Taylor aux points $k \pm 1$ et aux points $k \pm 2$
- développement en série de Taylor aux points $k \pm 1, k \pm 2$

$$\zeta_{k-2} = \zeta_k - 2h \zeta'_k + 2h^2 \zeta_k^{(2)} - \frac{4h^3}{3} \zeta_k^{(3)} + \frac{2h^4}{3} \zeta_k^{(4)} + 0(h^5) \quad (123)$$

$$\zeta_{k-1} = \zeta_k - h \zeta'_k + \frac{h^2}{2} \zeta_k^{(2)} - \frac{h^3}{6} \zeta_k^{(3)} + \frac{h^4}{24} \zeta_k^{(4)} + 0(h^5) \quad (124)$$

$$\zeta_{k+1} = \zeta_k + h \zeta'_k + \frac{h^2}{2} \zeta_k^{(2)} + \frac{h^3}{6} \zeta_k^{(3)} + \frac{h^4}{24} \zeta_k^{(4)} + 0(h^5) \quad (125)$$

$$\zeta_{k+2} = \zeta_k + 2h \zeta'_k + 2h^2 \zeta_k^{(2)} + \frac{4h^3}{3} \zeta_k^{(3)} + \frac{2h^4}{3} \zeta_k^{(4)} + 0(h^5) \quad (126)$$

- exercice : par combinaison linéaire de $\zeta_{k-2}, \zeta_{k-1}, \zeta_k, \zeta_{k+1}, \zeta_{k+2}$ proposer une approximation d'ordre 4 (erreur de troncature $0(h^4)$) de $\zeta_k^{(2)}$

nouvelle approximation de la dérivée seconde

- solution:

$$\zeta_{k+2} + \zeta_{k-2} = 2\zeta_k + 4h^2 \zeta_k^{(2)} + \frac{4h^4}{3} \zeta_k^{(4)} + O(h^6) \quad (127)$$

$$\zeta_{k+1} + \zeta_{k-1} = 2\zeta_k + h^2 \zeta_k^{(2)} + \frac{h^4}{12} \zeta_k^{(4)} + O(h^6) \quad (128)$$

nouvelle approximation de la dérivée seconde

- solution:

$$\zeta_{k+2} + \zeta_{k-2} = 2\zeta_k + 4h^2 \zeta_k^{(2)} + \frac{4h^4}{3} \zeta_k^{(4)} + 0(h^6) \quad (127)$$

$$\zeta_{k+1} + \zeta_{k-1} = 2\zeta_k + h^2 \zeta_k^{(2)} + \frac{h^4}{12} \zeta_k^{(4)} + 0(h^6) \quad (128)$$

- la combinaison linéaire (127) - 16 (128) permet d'éliminer la dérivée quatrième (d'ordre 4, c.a.d proportionnel à h^4)

$$\zeta_{k+2} + \zeta_{k-2} - 16(\zeta_{k+1} + \zeta_{k-1}) = -30\zeta_k - 12h^2 \zeta_k^{(2)} + 0(h^4) \quad (129)$$

et on obtient une nouvelle approximation, plus précise, de la dérivée seconde

$$\zeta_k^{(2)} = \frac{-\zeta_{k+2} + 16\zeta_{k+1} - 30\zeta_k + 16\zeta_{k-1} - \zeta_{k-2}}{12h^2} + 0(h^4) \quad (130)$$

- cette discrétisation qui utilise 5 points conduit à une matrice pentadiagonale, plus coûteuse elle est peu utilisée

diffusion 1D stationnaire

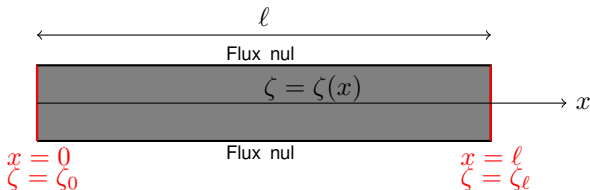
- on doit vérifier, en tout point de discrétisation intérieur

$$\zeta_k^{(2)} = \frac{\zeta_{k-1} - 2\zeta_k + \zeta_{k+1}}{h^2} = 0 \quad (131)$$

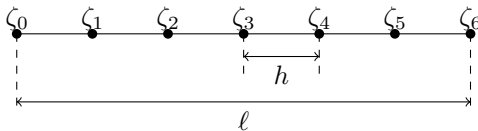
- ou encore ($\times(-h^2)$)

$$-\zeta_{k-1} + 2\zeta_k - \zeta_{k+1} = 0 \quad (132)$$

- application au problème 1D de type Dirichlet



- maillage $N = 5$ points intérieurs, $N + 1 = 6$ intervalles, $N + 2 = 7$



- conditions aux limites de type Dirichlet (sur les 2 bords)

$$\zeta_{k=0} = \zeta_0 \quad (133)$$

$$\zeta_6 = \zeta_\ell \quad (134)$$

- les $N = 5$ points intérieurs doivent vérifier les équations

$$-\zeta_0 + 2\zeta_1 - \zeta_2 = 0 \quad (135)$$

$$-\zeta_1 + 2\zeta_2 - \zeta_3 = 0 \quad (136)$$

$$-\zeta_2 + 2\zeta_3 - \zeta_4 = 0 \quad (137)$$

$$-\zeta_3 + 2\zeta_4 - \zeta_5 = 0 \quad (138)$$

$$-\zeta_4 + 2\zeta_5 - \zeta_\ell = 0 \quad (139)$$

- système linéaire

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{X} = \mathbf{B} \quad (140)$$

$$\underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 2 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}}_{\mathbf{A}} \cdot \underbrace{\begin{pmatrix} \zeta_0 \\ \zeta_1 \\ \zeta_2 \\ \zeta_3 \\ \zeta_4 \\ \zeta_5 \\ \zeta_6 \end{pmatrix}}_{\mathbf{X}} = \underbrace{\begin{pmatrix} \zeta_0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \zeta_\ell \end{pmatrix}}_{\mathbf{B}} \quad (141)$$

- solution numérique *MDF*

$$\mathbf{X} = \mathbf{A}^{-1} \cdot \mathbf{B} \quad (142)$$

- solution numérique

$$\begin{pmatrix} \zeta_0 \\ \zeta_1 \\ \zeta_2 \\ \zeta_3 \\ \zeta_4 \\ \zeta_5 \\ \zeta_6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \zeta_0 \\ \frac{5\zeta_0 + \zeta_\ell}{6} \\ \frac{4\zeta_0 + 2\zeta_\ell}{6} \\ \frac{3\zeta_0 + 3\zeta_\ell}{6} \\ \frac{2\zeta_0 + 4\zeta_\ell}{6} \\ \frac{\zeta_0 + 5\zeta_\ell}{6} \\ \zeta_\ell \end{pmatrix} \quad (143)$$

- ce résultat est une interpolation linéaire entre ζ_0 , et ζ_ℓ
- la solution numérique *MDF* coïncide avec la solution exacte d'un profil linéaire de température.

- 1 organisation du module EDP et évaluation
- 2 introduction
 - exemples EDP rencontrées en physique mathématique
 - définitions
 - méthodes de résolution exacte
 - méthodes de résolution approchée
- 3 méthode des différences finies
 - diffusion en régime stationnaire
 - **advection diffusion en régime stationnaire**
 - diffusion en régime transitoire
- 4 méthode des volumes finis
 - diffusion en régime stationnaire
 - diffusion en régime transitoire

- régime transitoire

$$\frac{\partial \zeta}{\partial t} + \text{div}(\zeta \underline{v}) - \text{div}(D \underline{\text{grad}}(\zeta)) = Q \quad (144)$$

ζ : concentration d'une espèce chimique, D coefficient de diffusion de Fick et $\underline{v}$ le vecteur vitesse advectif

- régime stationnaire

$$\underline{\text{grad}}(\zeta) \cdot \underline{v} - \text{div}(D \underline{\text{grad}}(\zeta)) = 0 \quad (145)$$

- cas $1D$, $\zeta = \zeta(x)$ et $\underline{v} = v \underline{e}_x$

$$D \frac{d^2 \zeta}{dx^2} - v \frac{d\zeta}{dx} = 0, \quad 0 \leq x \leq \ell \quad (146)$$

$$\zeta(x=0) = \zeta_0, \quad \zeta(x=\ell) = \zeta_\ell \quad (147)$$

- nombre de Péclet associé à la couche P_ℓ

$$P_\ell = \frac{v \ell}{D} \quad (148)$$

- solution exacte

$$\zeta(x) = \zeta_0 + (\zeta_\ell - \zeta_0) \left(\frac{1 - \exp(P_\ell \frac{x}{\ell})}{1 - \exp(P_\ell)} \right), \quad 0 < x < \ell \quad (149)$$

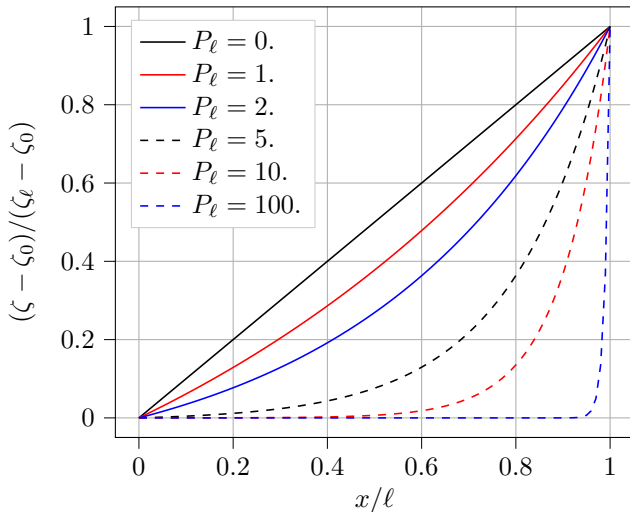
$$\zeta(x) = \zeta_0 + (\zeta_\ell - \zeta_0) f\left(\frac{x}{\ell}\right), \quad 0 < x < \ell \quad (150)$$

- solution adimensionnelle f

$$f(x) = \frac{1 - \exp(P_\ell x)}{1 - \exp(P_\ell)}, \quad 0 < x < 1 \quad (151)$$

- solution exacte

exact solution



- problème posé

$$D \frac{d^2 \zeta}{dx^2} - v \frac{d\zeta}{dx} = 0 \quad (152)$$
$$\zeta(x=0) = \zeta_0, \quad \zeta(x=\ell) = \zeta_\ell$$

- on résout par différences finies à l'aide de la discrétisation de la dérivée seconde

$$\zeta_k^{(2)} = \frac{\zeta_{k-1} - 2\zeta_k + \zeta_{k+1}}{h^2} \quad (153)$$

et de la dérivée première centrée

$$\zeta'_k = \frac{\zeta_{k+1} - \zeta_{k-1}}{2h} \quad (154)$$

- équation discrétisée

$$\left(-\frac{v h}{2 D}-1\right) \zeta_{k-1}+2 \zeta_k+\left(\frac{v h}{2 D}-1\right) \zeta_{k+1}=0 \quad (155)$$

- on introduit P_h le nombre de Péclet associé au pas de discrétisation

$$P_h=\frac{v h}{D} \quad (156)$$

- équation discrétisée

$$\left(-\frac{v h}{2 D}-1\right) \zeta_{k-1}+2 \zeta_k+\left(\frac{v h}{2 D}-1\right) \zeta_{k+1}=0 \quad (155)$$

- on introduit P_h le nombre de Péclet associé au pas de discrétisation

$$P_h=\frac{v h}{D} \quad (156)$$

$$-\left(\frac{P_h+2}{2}\right) \zeta_{k-1}+2 \zeta_k-\left(\frac{-P_h+2}{2}\right) \zeta_{k+1}=0 \quad (157)$$

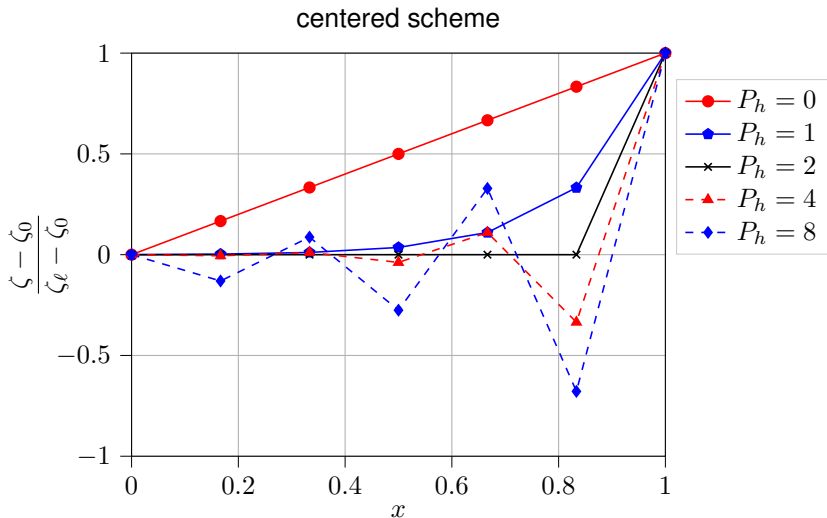
- application au problème 1D, $N = 5$ points intérieurs, $N + 1 = 6$
- système linéaire

$$\underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\left(\frac{P_h+2}{2}\right) & 2 & -\left(\frac{-P_h+2}{2}\right) & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\left(\frac{P_h+2}{2}\right) & 2 & -\left(\frac{-P_h+2}{2}\right) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\left(\frac{P_h+2}{2}\right) & 2 & -\left(\frac{-P_h+2}{2}\right) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\left(\frac{P_h+2}{2}\right) & 2 & -\left(\frac{-P_h+2}{2}\right) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\left(\frac{P_h+2}{2}\right) & 2 & -\left(\frac{-P_h+2}{2}\right) \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}}_{\mathbf{A}} \cdot \underbrace{\begin{pmatrix} \zeta_0 \\ \zeta_1 \\ \zeta_2 \\ \zeta_3 \\ \zeta_4 \\ \zeta_5 \\ \zeta_6 \end{pmatrix}}_{\mathbf{X}} = \underbrace{\begin{pmatrix} \zeta_0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \zeta_\ell \end{pmatrix}}_{\mathbf{B}}$$

- solution numérique *MDF*

$$\mathbf{X} = \mathbf{A}^{-1} \cdot \mathbf{B} \quad (158)$$

- erreurs numériques si $2 < P_h$



- erreurs numériques si $2 < P_h$: valeurs négatives de concentration proportionnelles à P_h .

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} \zeta_0 \\ \zeta_1 \\ \zeta_2 \\ \zeta_3 \\ \zeta_4 \\ \zeta_5 \\ \zeta_6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \zeta_0 \\ \frac{\zeta_0(P_h+2)(P_h^4+40P_h^2+80)-\zeta_\ell(P_h-2)^5}{4(P_h^2+12)(3P_h^2+4)} \\ \frac{2\zeta_0(P_h+2)^2(P_h^2+4)+\zeta_\ell(P_h-2)^4}{3P_h^4+40P_h^2+48} \\ \frac{\zeta_0(P_h+2)^3-\zeta_\ell(P_h-2)^3}{4(3P_h^2+4)} \\ \frac{2\zeta_\ell(P_h-2)^2(P_h^2+4)+\zeta_0(P_h+2)^4}{3P_h^4+40P_h^2+48} \\ \frac{\zeta_0(P_h+2)^5-\zeta_\ell(P_h-2)(P_h^4+40P_h^2+80)}{4(P_h^2+12)(3P_h^2+4)} \\ \zeta_\ell \end{pmatrix} \quad (159)$$

- erreurs numériques si $2 < P_h$
- meilleure solution : diminuer P_h en diminuant le pas $h = \ell/(N + 1)$ c.a.d. en augmentant N
- pas toujours possible suivant v/D en $3D$ (raffinement excessif ...)
- autre solution : décentrement de la dérivée première
- dérivée première à **gauche** (décentrement **amont**) au lieu de la dérivée première centrée

- erreurs numériques si $2 < P_h$
- meilleure solution : diminuer P_h en diminuant le pas $h = \ell/(N + 1)$ c.a.d. en augmentant N
- pas toujours possible suivant v/D en $3D$ (raffinement excessif ...)
- autre solution : décentrement de la dérivée première
- dérivée première à **gauche** (décentrement **amont**) au lieu de la dérivée première centrée

$$D \left(\frac{\zeta_{k-1} - 2\zeta_k + \zeta_{k+1}}{h^2} \right) - v \left(\frac{\zeta_k - \zeta_{k-1}}{h} \right) = 0 \quad (160)$$

- erreurs numériques si $2 < P_h$
- meilleure solution : diminuer P_h en diminuant le pas $h = \ell/(N + 1)$ c.a.d. en augmentant N
- pas toujours possible suivant v/D en $3D$ (raffinement excessif ...)
- autre solution : décentrement de la dérivée première
- dérivée première à **gauche** (décentrement **amont**) au lieu de la dérivée première centrée

$$D \left(\frac{\zeta_{k-1} - 2\zeta_k + \zeta_{k+1}}{h^2} \right) - v \left(\frac{\zeta_k - \zeta_{k-1}}{h} \right) = 0 \quad (160)$$

- équation discrétisée décentrée amont

$$- (P_h + 1) \zeta_{k-1} + (P_h + 2) \zeta_k - \zeta_{k+1} = 0 \quad (161)$$

- application au problème 1D, $N = 5$ points intérieurs, $N + 1 = 6$
- système linéaire

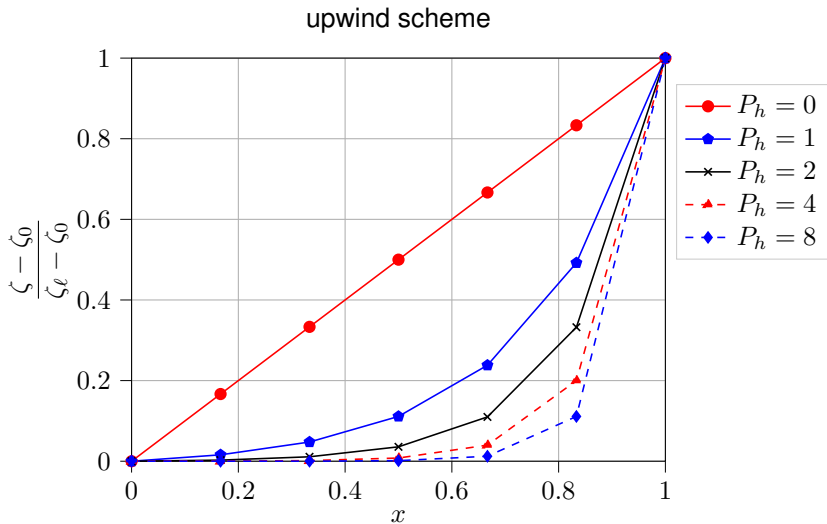
$$\underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -(P_h + 1) & P_h + 2 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -(P_h + 1) & P_h + 2 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -(P_h + 1) & P_h + 2 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -(P_h + 1) & P_h + 2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -(P_h + 1) & P_h + 2 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}}_{\mathbf{A}} \cdot \underbrace{\begin{pmatrix} \zeta_0 \\ \zeta_1 \\ \zeta_2 \\ \zeta_3 \\ \zeta_4 \\ \zeta_5 \\ \zeta_6 \end{pmatrix}}_{\mathbf{X}} = \underbrace{\begin{pmatrix} \zeta_0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \zeta_\ell \end{pmatrix}}_{\mathbf{B}}$$

- solution numérique *MDF*

$$\mathbf{X} = \mathbf{A}^{-1} \cdot \mathbf{B} \quad (162)$$

solution numérique décentrée amont

- valeurs négatives de concentration supprimées



- valeurs négatives de concentration supprimées

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} \zeta_0 \\ \zeta_1 \\ \zeta_2 \\ \zeta_3 \\ \zeta_4 \\ \zeta_5 \\ \zeta_6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \zeta_0 \\ \frac{\zeta_\ell + \zeta_0 (P_h + 1) (P_h (P_h (P_h (P_h + 5) + 10) + 10) + 5)}{(P_h + 2) (P_h^2 + P_h + 1) (P_h (P_h + 3) + 3)} \\ \frac{\zeta_\ell + \zeta_0 (P_h (P_h + 2) + 2) (P_h + 1)^2}{(P_h^2 + P_h + 1) (P_h (P_h + 3) + 3)} \\ \frac{\zeta_\ell + \zeta_0 (P_h + 1)^3}{(P_h + 2) (P_h^2 + P_h + 1)} \\ \frac{\zeta_0 (P_h + 1)^4 + \zeta_\ell (P_h (P_h + 2) + 2)}{(P_h^2 + P_h + 1) (P_h (P_h + 3) + 3)} \\ \frac{\zeta_0 (P_h + 1)^5 + \zeta_\ell (P_h (P_h (P_h (P_h + 5) + 10) + 10) + 5)}{(P_h + 2) (P_h^2 + P_h + 1) (P_h (P_h + 3) + 3)} \\ \zeta_\ell \end{pmatrix} \quad (163)$$

- la dérivée à gauche ou amont, permet de s'affranchir des oscillations observées vers la frontière en aval
- au prix de l'introduction d'une diffusion numérique.
- le même résultat aurait été obtenu en gardant un schéma centré mais en remplaçant le coefficient de diffusion du matériau D par une valeur fictive D^*

$$D^* = D + \frac{h v}{2} \quad (164)$$

- étudié en détail en TD : mise en évidence de problèmes numériques dus à mauvaise discrétisation spatiale

MDF pour la diffusion 2D linéaire stationnaire

- équation de Laplace 2D

$$\Delta\zeta = \frac{\partial^2\zeta}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\zeta}{\partial y^2} = 0 \quad (165)$$

- maillage régulier N_x points suivant x N_y points suivant y et pas de discrétisation Δx et Δy
- approximation MDF de (165) autour du point $(x_i = i \Delta x, y_j = j \Delta y)$, d'inconnue $\zeta_{i,j}$

MDF pour la diffusion 2D linéaire stationnaire

- équation de Laplace 2D

$$\Delta \zeta = \frac{\partial^2 \zeta}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \zeta}{\partial y^2} = 0 \quad (165)$$

- maillage régulier N_x points suivant x N_y points suivant y et pas de discrétisation Δx et Δy
- approximation MDF de (165) autour du point $(x_i = i \Delta x, y_j = j \Delta y)$, d'inconnue $\zeta_{i,j}$

$$\frac{\zeta_{i-1,j} - 2\zeta_{i,j} + \zeta_{i+1,j}}{\Delta x^2} + \frac{\zeta_{i,j-1} - 2\zeta_{i,j} + \zeta_{i,j+1}}{\Delta y^2} = 0 \quad (166)$$

MDF pour la diffusion 2D linéaire stationnaire

- équation de Laplace 2D

$$\Delta\zeta = \frac{\partial^2\zeta}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\zeta}{\partial y^2} = 0 \quad (165)$$

- maillage régulier N_x points suivant x N_y points suivant y et pas de discrétisation Δx et Δy
- approximation MDF de (165) autour du point $(x_i = i \Delta x, y_j = j \Delta y)$, d'inconnue $\zeta_{i,j}$

$$\frac{\zeta_{i-1,j} - 2\zeta_{i,j} + \zeta_{i+1,j}}{\Delta x^2} + \frac{\zeta_{i,j-1} - 2\zeta_{i,j} + \zeta_{i,j+1}}{\Delta y^2} = 0 \quad (166)$$

- MDF 1D utilise 3 points, le point et ses 2 voisins, le long d'une ligne, matrice tridiagonale
- 2D on rajoute 2 points le long d'une ligne perpendiculaire, on utilise donc 5 points : matrice penta-diagonale (la diagonale et 4 lignes l'entourant)

MDF pour la diffusion 2D linéaire stationnaire

- équation de Laplace 2D

$$\Delta \zeta = \frac{\partial^2 \zeta}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \zeta}{\partial y^2} = 0 \quad (165)$$

- maillage régulier N_x points suivant x N_y points suivant y et pas de discrétisation Δx et Δy
- approximation MDF de (165) autour du point $(x_i = i \Delta x, y_j = j \Delta y)$, d'inconnue $\zeta_{i,j}$

$$\frac{\zeta_{i-1,j} - 2\zeta_{i,j} + \zeta_{i+1,j}}{\Delta x^2} + \frac{\zeta_{i,j-1} - 2\zeta_{i,j} + \zeta_{i,j+1}}{\Delta y^2} = 0 \quad (166)$$

- MDF 1D utilise 3 points, le point et ses 2 voisins, le long d'une ligne, matrice tridiagonale
- 2D on rajoute 2 points le long d'une ligne perpendiculaire, on utilise donc 5 points : matrice penta-diagonale (la diagonale et 4 lignes l'entourant)
- erreur de troncature $O(\Delta x^2, \Delta y^2)$

- 1 organisation du module EDP et évaluation
- 2 introduction
 - exemples EDP rencontrées en physique mathématique
 - définitions
 - méthodes de résolution exacte
 - méthodes de résolution approchée
- 3 méthode des différences finies
 - diffusion en régime stationnaire
 - advection diffusion en régime stationnaire
 - diffusion en régime transitoire
- 4 méthode des volumes finis
 - diffusion en régime stationnaire
 - diffusion en régime transitoire

- pas d'espace Δx , pas de temps Δt , et
- grille constituée des points M_j^n de coordonnées $(j\Delta x, n\Delta t)$ dans le plan (x, t) .

$$\zeta_j^n = \zeta(x_j, t_n) = \zeta(j\Delta x, n\Delta t) \quad (167)$$

- on suppose ζ_j^n connues pour tous les j , et pour les instants 0 (donnée initiale), $1, 2, \dots, n-1, n$
- on cherche ζ_j^{n+1} solutions de l'équation de la chaleur 1D :

$$\frac{\partial \zeta}{\partial t} - \frac{\partial^2 \zeta}{\partial x^2} = 0 \quad (168)$$

et vérifiant les conditions aux limites.

- développements en série de Taylor $\zeta(x, t)$ au voisinage de $x_j = j\Delta x$, et $t_n = n\Delta t$

$$\zeta_{j+1}^n = \zeta_j^n + \Delta x \left(\frac{\partial \zeta}{\partial x} \right)_j^n + \frac{1}{2} \Delta x^2 \left(\frac{\partial^2 \zeta}{\partial x^2} \right)_j^n + \frac{1}{6} \Delta x^3 \left(\frac{\partial^3 \zeta}{\partial x^3} \right)_j^n + 0(\Delta x^4)$$

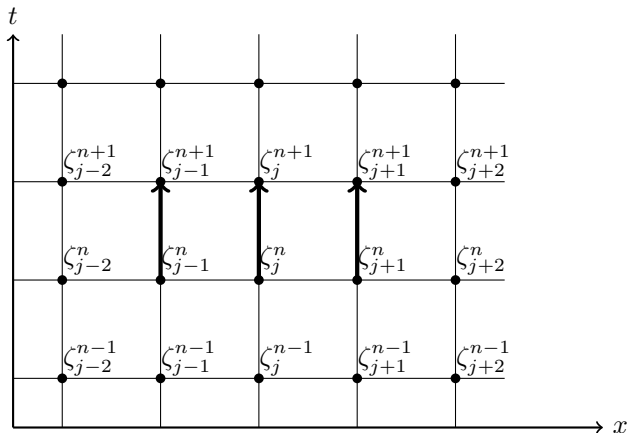
$$\zeta_{j-1}^n = \zeta_j^n - \Delta x \left(\frac{\partial \zeta}{\partial x} \right)_j^n + \frac{1}{2} \Delta x^2 \left(\frac{\partial^2 \zeta}{\partial x^2} \right)_j^n - \frac{1}{6} \Delta x^3 \left(\frac{\partial^3 \zeta}{\partial x^3} \right)_j^n + 0(\Delta x^4)$$

$$\zeta_j^{n+1} = \zeta_j^n + \Delta t \left(\frac{\partial \zeta}{\partial t} \right)_j^n + \frac{1}{2} \Delta t^2 \left(\frac{\partial^2 \zeta}{\partial t^2} \right)_j^n + \frac{1}{6} \Delta t^3 \left(\frac{\partial^3 \zeta}{\partial t^3} \right)_j^n + 0(\Delta t^4)$$

$$\zeta_j^{n-1} = \zeta_j^n - \Delta t \left(\frac{\partial \zeta}{\partial t} \right)_j^n + \frac{1}{2} \Delta t^2 \left(\frac{\partial^2 \zeta}{\partial t^2} \right)_j^n - \frac{1}{6} \Delta t^3 \left(\frac{\partial^3 \zeta}{\partial t^3} \right)_j^n + 0(\Delta t^4)$$

discrétisation du problème transitoire

- abscisse : $x_j = j\Delta x$ ($j = 0 \dots N + 1$), ordonnée $t_m = m\Delta t$
- hypothèse ζ_j^m connu $\forall j, 0 \leq j \leq N + 1, \forall m, 0 \leq m \leq n$
- **schémas à 2 instants** : t_n (connu), t_{n+1} (inconnu)



- **référence** : instant **connu** t_n
- la **dérivée seconde en espace** est calculée à l'instant t_n
- dérivée temporelle : dérivée première à **droite**

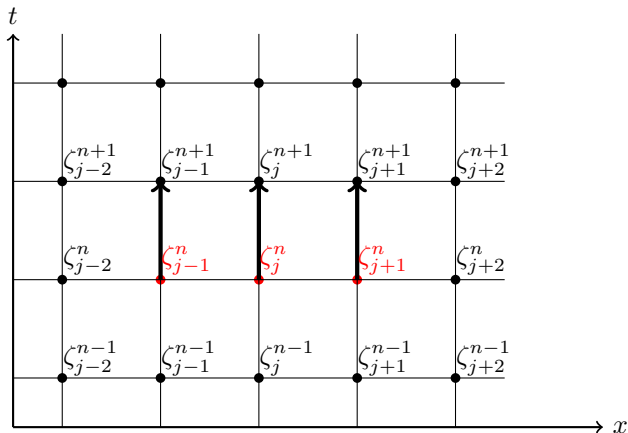
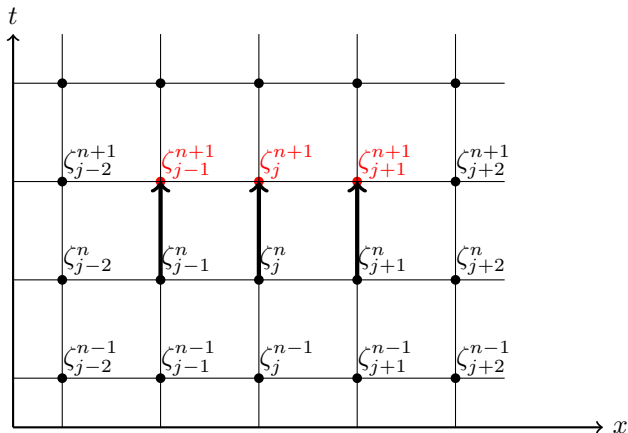


schéma implicite

- **référence** : instant **inconnu** t_{n+1}
- la **dérivée seconde en espace** est calculée à l'instant t_{n+1}
- dérivée temporelle : dérivée première à **gauche**



- **référence** : instant **connu** t_n
- la **dérivée seconde en espace** à l'instant t_n

- **référence** : instant **connu** t_n
- la **dérivée seconde en espace** à l'instant t_n

$$\left(\frac{\partial^2 \zeta}{\partial x^2}\right)_j^n = \frac{\zeta_{j-1}^n - 2\zeta_j^n + \zeta_{j+1}^n}{\Delta x^2} + 0 [\Delta x^2] \quad (169)$$

- **référence** : instant **connu** t_n
- la **dérivée seconde en espace** à l'instant t_n

$$\left(\frac{\partial^2 \zeta}{\partial x^2}\right)_j^n = \frac{\zeta_{j-1}^n - 2\zeta_j^n + \zeta_{j+1}^n}{\Delta x^2} + 0 [\Delta x^2] \quad (169)$$

- dérivée temporelle : dérivée première **à droite**

- **référence** : instant **connu** t_n
- la **dérivée seconde en espace** à l'instant t_n

$$\left(\frac{\partial^2 \zeta}{\partial x^2}\right)_j^n = \frac{\zeta_{j-1}^n - 2\zeta_j^n + \zeta_{j+1}^n}{\Delta x^2} + 0[\Delta x^2] \quad (169)$$

- dérivée temporelle : dérivée première **à droite**

$$\left(\frac{\partial \zeta}{\partial t}\right)_j^n = \frac{\zeta_j^{n+1} - \zeta_j^n}{\Delta t} + 0[\Delta t] \quad (170)$$

- équation discrétisée

- **référence** : instant **connu** t_n
- la **dérivée seconde en espace** à l'instant t_n

$$\left(\frac{\partial^2 \zeta}{\partial x^2}\right)_j^n = \frac{\zeta_{j-1}^n - 2\zeta_j^n + \zeta_{j+1}^n}{\Delta x^2} + 0[\Delta x^2] \quad (169)$$

- dérivée temporelle : dérivée première **à droite**

$$\left(\frac{\partial \zeta}{\partial t}\right)_j^n = \frac{\zeta_j^{n+1} - \zeta_j^n}{\Delta t} + 0[\Delta t] \quad (170)$$

- équation discrétisée

$$\left(\frac{\partial \zeta}{\partial t}\right)_j^n - \left(\frac{\partial^2 \zeta}{\partial x^2}\right)_j^n = \frac{\zeta_j^{n+1} - \zeta_j^n}{\Delta t} - \frac{\zeta_{j-1}^n + \zeta_{j+1}^n - 2\zeta_j^n}{\Delta x^2} = 0 \quad (171)$$

- équation discrétisée

- équation discrétisée

$$\frac{\zeta_j^{n+1} - \zeta_j^n}{\Delta t} - \frac{\zeta_{j-1}^n + \zeta_{j+1}^n - 2\zeta_j^n}{\Delta x^2} = 0 \quad (172)$$

- on isole les inconnues $n + 1$

- équation discrétisée

$$\frac{\zeta_j^{n+1} - \zeta_j^n}{\Delta t} - \frac{\zeta_{j-1}^n + \zeta_{j+1}^n - 2\zeta_j^n}{\Delta x^2} = 0 \quad (172)$$

- on isole les inconnues $n+1$

$$\zeta_j^{n+1} = \zeta_j^n + \frac{\Delta t}{\Delta x^2} (\zeta_{j-1}^n + \zeta_{j+1}^n - 2\zeta_j^n) \quad (173)$$

- équation discrétisée

$$\frac{\zeta_j^{n+1} - \zeta_j^n}{\Delta t} - \frac{\zeta_{j-1}^n + \zeta_{j+1}^n - 2\zeta_j^n}{\Delta x^2} = 0 \quad (172)$$

- on isole les inconnues $n + 1$

$$\zeta_j^{n+1} = \zeta_j^n + \frac{\Delta t}{\Delta x^2} (\zeta_{j-1}^n + \zeta_{j+1}^n - 2\zeta_j^n) \quad (173)$$

- c'est le schéma explicite
- exprimer le système linéaire correspondant

- équation discrétisée

$$\frac{\zeta_j^{n+1} - \zeta_j^n}{\Delta t} - \frac{\zeta_{j-1}^n + \zeta_{j+1}^n - 2\zeta_j^n}{\Delta x^2} = 0 \quad (172)$$

- on isole les inconnues $n + 1$

$$\zeta_j^{n+1} = \zeta_j^n + \frac{\Delta t}{\Delta x^2} (\zeta_{j-1}^n + \zeta_{j+1}^n - 2\zeta_j^n) \quad (173)$$

- c'est le schéma explicite
- exprimer le système linéaire correspondant

- **référence** : instant **inconnu** t_{n+1}
- la **dérivée seconde en espace** à l'instant t_{n+1}

- **référence** : instant **inconnu** t_{n+1}
- la **dérivée seconde en espace** à l'instant t_{n+1}

$$\left(\frac{\partial^2 \zeta}{\partial x^2}\right)_j^{n+1} = \frac{\zeta_{j-1}^{n+1} - 2\zeta_j^{n+1} + \zeta_{j+1}^{n+1}}{\Delta x^2} + O[\Delta x^2] \quad (174)$$

- **référence** : instant **inconnu** t_{n+1}
- la **dérivée seconde en espace** à l'instant t_{n+1}

$$\left(\frac{\partial^2 \zeta}{\partial x^2}\right)_j^{n+1} = \frac{\zeta_{j-1}^{n+1} - 2\zeta_j^{n+1} + \zeta_{j+1}^{n+1}}{\Delta x^2} + O[\Delta x^2] \quad (174)$$

- dérivée temporelle : dérivée première à **gauche**

- **référence** : instant **inconnu** t_{n+1}
- la **dérivée seconde en espace** à l'instant t_{n+1}

$$\left(\frac{\partial^2 \zeta}{\partial x^2}\right)_j^{n+1} = \frac{\zeta_{j-1}^{n+1} - 2\zeta_j^{n+1} + \zeta_{j+1}^{n+1}}{\Delta x^2} + 0 [\Delta x^2] \quad (174)$$

- dérivée temporelle : dérivée première à **gauche**

$$\left(\frac{\partial \zeta}{\partial t}\right)_j^{n+1} = \frac{\zeta_j^{n+1} - \zeta_j^n}{\Delta t} + 0[\Delta t] \quad (175)$$

- équation discrétisée

- **référence** : instant **inconnu** t_{n+1}
- la **dérivée seconde en espace** à l'instant t_{n+1}

$$\left(\frac{\partial^2 \zeta}{\partial x^2}\right)_j^{n+1} = \frac{\zeta_{j-1}^{n+1} - 2\zeta_j^{n+1} + \zeta_{j+1}^{n+1}}{\Delta x^2} + 0 [\Delta x^2] \quad (174)$$

- dérivée temporelle : dérivée première à **gauche**

$$\left(\frac{\partial \zeta}{\partial t}\right)_j^{n+1} = \frac{\zeta_j^{n+1} - \zeta_j^n}{\Delta t} + 0[\Delta t] \quad (175)$$

- équation discrétisée

$$\left(\frac{\partial \zeta}{\partial t}\right)_j^{n+1} - \left(\frac{\partial^2 \zeta}{\partial x^2}\right)_j^{n+1} = \frac{\zeta_j^{n+1} - \zeta_j^n}{\Delta t} - \frac{\zeta_{j-1}^{n+1} - 2\zeta_j^{n+1} + \zeta_{j+1}^{n+1}}{\Delta x^2} = 0 \quad (176)$$

- équation discrétisée

- équation discrétisée

$$\frac{\zeta_j^{n+1} - \zeta_j^n}{\Delta t} - \frac{\zeta_{j-1}^{n+1} - 2\zeta_j^{n+1} + \zeta_{j+1}^{n+1}}{\Delta x^2} = 0 \quad (177)$$

- on isole les inconnues $n+1$

- équation discrétisée

$$\frac{\zeta_j^{n+1} - \zeta_j^n}{\Delta t} - \frac{\zeta_{j-1}^{n+1} - 2\zeta_j^{n+1} + \zeta_{j+1}^{n+1}}{\Delta x^2} = 0 \quad (177)$$

- on isole les inconnues $n+1$

$$\zeta_j^{n+1} \left(1 + \frac{2\Delta t}{\Delta x^2} \right) - \frac{\Delta t}{\Delta x^2} (\zeta_{j-1}^{n+1} + \zeta_{j+1}^{n+1}) = \zeta_j^n \quad (178)$$

- équation discrétisée

$$\frac{\zeta_j^{n+1} - \zeta_j^n}{\Delta t} - \frac{\zeta_{j-1}^{n+1} - 2\zeta_j^{n+1} + \zeta_{j+1}^{n+1}}{\Delta x^2} = 0 \quad (177)$$

- on isole les inconnues $n+1$

$$\zeta_j^{n+1} \left(1 + \frac{2\Delta t}{\Delta x^2} \right) - \frac{\Delta t}{\Delta x^2} (\zeta_{j-1}^{n+1} + \zeta_{j+1}^{n+1}) = \zeta_j^n \quad (178)$$

- c'est le schéma implicite
- exprimer le système linéaire correspondant

- équation discrétisée

$$\frac{\zeta_j^{n+1} - \zeta_j^n}{\Delta t} - \frac{\zeta_{j-1}^{n+1} - 2\zeta_j^{n+1} + \zeta_{j+1}^{n+1}}{\Delta x^2} = 0 \quad (177)$$

- on isole les inconnues $n+1$

$$\zeta_j^{n+1} \left(1 + \frac{2\Delta t}{\Delta x^2} \right) - \frac{\Delta t}{\Delta x^2} (\zeta_{j-1}^{n+1} + \zeta_{j+1}^{n+1}) = \zeta_j^n \quad (178)$$

- c'est le schéma implicite
- exprimer le système linéaire correspondant

- nombre de Fourier F_o associé aux pas d'espace Δx et de temps Δt

$$F_o = \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \quad (179)$$

- nombre de Fourier F_o associé aux pas d'espace Δx et de temps Δt

$$F_o = \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \quad (179)$$

- schéma explicite

- nombre de Fourier F_o associé aux pas d'espace Δx et de temps Δt

$$F_o = \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \quad (179)$$

- schéma explicite

$$\zeta_j^{n+1} = F_o \zeta_{j-1}^n + (1 - 2F_o) \zeta_j^n + F_o \zeta_{j+1}^n \quad (180)$$

- nombre de Fourier F_o associé aux pas d'espace Δx et de temps Δt

$$F_o = \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \quad (179)$$

- schéma explicite

$$\zeta_j^{n+1} = F_o \zeta_{j-1}^n + (1 - 2F_o) \zeta_j^n + F_o \zeta_{j+1}^n \quad (180)$$

- schéma implicite

- nombre de Fourier F_o associé aux pas d'espace Δx et de temps Δt

$$F_o = \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \quad (179)$$

- schéma explicite

$$\zeta_j^{n+1} = F_o \zeta_{j-1}^n + (1 - 2F_o) \zeta_j^n + F_o \zeta_{j+1}^n \quad (180)$$

- schéma implicite

$$-F_o \zeta_{j-1}^{n+1} + (1 + 2F_o) \zeta_j^{n+1} - F_o \zeta_{j+1}^{n+1} = \zeta_j^n \quad (181)$$

- nombre de Fourier F_o associé aux pas d'espace Δx et de temps Δt

$$F_o = \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \quad (179)$$

- schéma explicite

$$\zeta_j^{n+1} = F_o \zeta_{j-1}^n + (1 - 2F_o) \zeta_j^n + F_o \zeta_{j+1}^n \quad (180)$$

- schéma implicite

$$-F_o \zeta_{j-1}^{n+1} + (1 + 2F_o) \zeta_j^{n+1} - F_o \zeta_{j+1}^{n+1} = \zeta_j^n \quad (181)$$

- précision identique : ordre 2 en Δx , ordre 1 en Δt

- schéma explicite, pour calculer ζ^{n+1} en un point j il suffit de remplacer *explicitement* les quantités figurant au second membre de (173) par leurs valeurs (connues et stockées en mémoire).

$$\mathbf{Y} = \mathbf{A}^{\text{exp}} \cdot \mathbf{X} \quad (182)$$

- à l'inverse, avec le schéma implicite, il n'est pas possible de calculer ζ^{n+1} pour une seule valeur de j : les inconnues ζ_j^{n+1} sont liées entre elles par autant d'équations du type ((178)) en un système linéaire qu'il s'agit de résoudre. Et cela coûte cher

$$\mathbf{Y} = (\mathbf{A}^{\text{imp}})^{-1} \cdot \mathbf{X} \quad (183)$$

- pourquoi remplacer le schéma explicite par un schéma implicite qui n'est pas plus précis mais dont l'emploi est plus onéreux ?

- schéma explicite, pour calculer ζ^{n+1} en un point j il suffit de remplacer *explicitement* les quantités figurant au second membre de (173) par leurs valeurs (connues et stockées en mémoire).

$$\mathbf{Y} = \mathbf{A}^{\text{exp}} \cdot \mathbf{X} \quad (182)$$

- à l'inverse, avec le schéma implicite, il n'est pas possible de calculer ζ^{n+1} pour une seule valeur de j : les inconnues ζ_j^{n+1} sont liées entre elles par autant d'équations du type ((178)) en un système linéaire qu'il s'agit de résoudre. Et cela coûte cher

$$\mathbf{Y} = (\mathbf{A}^{\text{imp}})^{-1} \cdot \mathbf{X} \quad (183)$$

- pourquoi remplacer le schéma explicite par un schéma implicite qui n'est pas plus précis mais dont l'emploi est plus onéreux ?
- pour une raison de **stabilité**

- [Pourhiet, 1988] p. 54 : **un processus de calcul séquentiel ou itératif est stable si les erreurs d'arrondis ne s'amplifient pas au fur et à mesure que les calculs progressent**
- cette définition s'étend aux schémas de discrétisation qui engendrent ces calculs.

analyse de Fourier et étude de stabilité

- on suppose que $\zeta(x, t)$ définie sur l'espace $(0, 1)$ est une fonction périodique, de période spatiale $T = 1$
- on applique le développement en série de Fourier complexe

$$\zeta(x, t) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \alpha_m(t) \exp(i\omega_m x) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \alpha_m(t) \exp(i 2 \pi m x)$$

$$\omega_m = 2 \pi m$$

- développement en série de Fourier complexe de la solution discrétisée
 - aux points M_j^n et M_j^{n+1}

analyse de Fourier et étude de stabilité

- on suppose que $\zeta(x, t)$ définie sur l'espace $(0, 1)$ est une fonction périodique, de période spatiale $T = 1$
- on applique le développement en série de Fourier complexe

$$\zeta(x, t) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \alpha_m(t) \exp(i\omega_m x) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \alpha_m(t) \exp(i 2 \pi m x)$$

$$\omega_m = 2 \pi m$$

- développement en série de Fourier complexe de la solution discrétisée
 - aux points M_j^n et M_j^{n+1}

$$\zeta(x_j = j\Delta x, t_n = n\Delta t) = \zeta_j^n = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \alpha_m(t_n) \exp(i 2 \pi m j \Delta x)$$

$$\zeta_j^n = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \alpha_m^n \exp(i 2 \pi m j \Delta x)$$

$$\zeta_j^{n+1} = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \alpha_m^{n+1} \exp(i 2 \pi m j \Delta x)$$

- développement en série de Fourier complexe de la solution discrétisée
 - aux points M_{j-1}^n et M_{j-1}^{n+1}

- développement en série de Fourier complexe de la solution discrétisée
 - aux points M_{j-1}^n et M_{j-1}^{n+1}

$$\zeta_{j-1}^n = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \alpha_m^n \exp(i 2 \pi m (j-1) \Delta x)$$

$$\zeta_{j-1}^{n+1} = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \alpha_m^{n+1} \exp(i 2 \pi m (j-1) \Delta x)$$

- aux points M_{j+1}^n et M_{j+1}^{n+1}

- développement en série de Fourier complexe de la solution discrétisée

- aux points M_{j-1}^n et M_{j-1}^{n+1}

$$\zeta_{j-1}^n = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \alpha_m^n \exp(i 2 \pi m (j-1) \Delta x)$$

$$\zeta_{j-1}^{n+1} = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \alpha_m^{n+1} \exp(i 2 \pi m (j-1) \Delta x)$$

- aux points M_{j+1}^n et M_{j+1}^{n+1}

$$\zeta_{j+1}^n = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \alpha_m^n \exp(i 2 \pi m (j+1) \Delta x)$$

$$\zeta_{j+1}^{n+1} = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \alpha_m^{n+1} \exp(i 2 \pi m (j+1) \Delta x)$$

- développement en série de Fourier complexe du schéma explicite

- développement en série de Fourier complexe du schéma explicite

$$\zeta_j^{n+1} = F_o \zeta_{j-1}^n + (1 - 2F_o) \zeta_j^n + F_o \zeta_{j+1}^n \quad (184)$$

- développement en série de Fourier complexe du schéma explicite

$$\zeta_j^{n+1} = F_o \zeta_{j-1}^n + (1 - 2F_o) \zeta_j^n + F_o \zeta_{j+1}^n \quad (184)$$

$$\frac{\alpha_m^{n+1}}{\alpha_m^n} = 1 - 2F_o (1 - \cos(2\pi m \Delta x)) \quad (185)$$

- développement en série de Fourier complexe du schéma implicite

- développement en série de Fourier complexe du schéma explicite

$$\zeta_j^{n+1} = F_o \zeta_{j-1}^n + (1 - 2F_o) \zeta_j^n + F_o \zeta_{j+1}^n \quad (184)$$

$$\frac{\alpha_m^{n+1}}{\alpha_m^n} = 1 - 2F_o (1 - \cos(2\pi m \Delta x)) \quad (185)$$

- développement en série de Fourier complexe du schéma implicite

$$-F_o \zeta_{j-1}^{n+1} + (1 + 2F_o) \zeta_j^{n+1} - F_o \zeta_{j+1}^{n+1} = \zeta_j^n \quad (186)$$

- développement en série de Fourier complexe du schéma explicite

$$\zeta_j^{n+1} = F_o \zeta_{j-1}^n + (1 - 2F_o) \zeta_j^n + F_o \zeta_{j+1}^n \quad (184)$$

$$\frac{\alpha_m^{n+1}}{\alpha_m^n} = 1 - 2F_o (1 - \cos(2\pi m \Delta x)) \quad (185)$$

- développement en série de Fourier complexe du schéma implicite

$$-F_o \zeta_{j-1}^{n+1} + (1 + 2F_o) \zeta_j^{n+1} - F_o \zeta_{j+1}^{n+1} = \zeta_j^n \quad (186)$$

$$\frac{\alpha_m^{n+1}}{\alpha_m^n} = \frac{1}{1 + 2F_o (1 - \cos(2\pi m \Delta x))} \quad (187)$$

- [Pourhiet, 1988] p. 55, **coefficient d'amplification** de l'harmonique α_m entre les instants consécutifs $t_n = n \Delta t$ et $t_{n+1} = (n + 1) \Delta t$:

$$\xi_m = \frac{\alpha_m^{n+1}}{\alpha_m^n} \quad (188)$$

généralisé à deux instants non consécutifs

$$\xi_m^k = \frac{\alpha_m^{n+k}}{\alpha_m^n} \quad (189)$$

- **condition de stabilité : aucun des coefficients d'amplification ξ_m ne doit être de module supérieur à 1**

$$\max (|\xi_m|) \leq 1 \quad (190)$$

- condition de stabilité du schéma explicite

$$-1 \leq \xi_m = 1 - 2F_o (1 - \cos(2\pi m \Delta x)) \leq 1 \quad (191)$$

- condition de stabilité du schéma explicite

$$-1 \leq \xi_m = 1 - 2F_o (1 - \cos(2\pi m \Delta x)) \leq 1 \quad (191)$$

- vérifiée $\forall m$ si

$$F_o \leq \frac{1}{2} \quad (192)$$

- condition de stabilité du schéma implicite

$$-1 \leq \xi_m = \frac{1}{1 + 2F_o (1 - \cos(2\pi m \Delta x))} \leq 1 \quad (193)$$

- condition de stabilité du schéma explicite

$$-1 \leq \xi_m = 1 - 2F_o (1 - \cos(2\pi m \Delta x)) \leq 1 \quad (191)$$

- vérifiée $\forall m$ si

$$F_o \leq \frac{1}{2} \quad (192)$$

- condition de stabilité du schéma implicite

$$-1 \leq \xi_m = \frac{1}{1 + 2F_o (1 - \cos(2\pi m \Delta x))} \leq 1 \quad (193)$$

- elle est vérifiée $\forall m, \forall F_o$
- schéma **explicite conditionnellement stable**
- schéma **implicite inconditionnellement stable**

- analyse de Fourier ($\rightarrow$ polycopié) montre que
- le schéma implicite est inconditionnellement stable (stable $\forall F_o$)
- le schéma explicite est conditionnellement stable
 - stable si $F_o \leq \frac{1}{2}$
 - instable si $\frac{1}{2} < F_o$
- étude détaillée en TD
- pratique courante Δx fixe, Δt ajusté en calcul transitoire (critère erreur) et augmenté progressivement $t \nearrow$ (en particulier $t \rightarrow \infty$)
- F_o est donc variable
- on suivra pour conclure [Euvrard, 1994] p. 65 : *Un schéma instable, même précis, est à jeter au panier !*
- des schémas intermédiaires, stables, sont souvent utilisés

- 1 organisation du module EDP et évaluation
- 2 introduction
 - exemples EDP rencontrées en physique mathématique
 - définitions
 - méthodes de résolution exacte
 - méthodes de résolution approchée
- 3 méthode des différences finies
 - diffusion en régime stationnaire
 - advection diffusion en régime stationnaire
 - diffusion en régime transitoire
- 4 méthode des volumes finis
 - diffusion en régime stationnaire
 - diffusion en régime transitoire

méthode des volumes finis beaucoup utilisée en *CFD* (*Computational Fluid Dynamics*) qui inclut la modélisation des phénomènes de transfert (fluides, masse, chaleur ...)

- la modélisation des transferts multiphasiques :
 - écoulement d'eau liquide, eau vapeur, air sec dans un milieu poreux partiellement saturé (sols, bétons, matériaux de construction, milieux poreux en général),
 - écoulement d'eau liquide, huile, gaz dans un réservoir pétrolier
- code commercial *Eclipse* appliqué à l'ingénierie de réservoir (Schlumberger),
- open source *openfoam*, <https://openfoam.com/> ,
<https://openfoam.com/training/>
- matlab : <https://www.featoool.com/>
- *Code_Saturne* [Archambeau et al., 2004] : logiciel appliqué à la modélisation d'écoulements turbulents, développé par EDF.
- quelques références : [Patankar, 1980, Roux, 1994, Mainguy, 1999, Eymard et al., 2000, Lomax et al., 2001, Ferziger and Perić, 2002, Rappaz et al., 2003, Versteeg and Malalasekera, 2007]

- la *MVF* introduit donc un concept de volume de contrôle alors que la *MDF* n'est limitée qu'à la notion d'opérateur discrétisé sur chaque noeud.
- ce qui permet d'étendre la *MVF* à des problèmes hétérogènes et non linéaires
- cette adaptation a consisté à établir une **formulation intégrale** de l'équation aux dérivées partielles, à introduire la notion de **volume de contrôle** (volume fini), qui est une sorte de boîte noire, aux frontières duquel une **conservation** d'une grandeur physique est imposée.
- l'outil mathématique utilisé est le théorème de la divergence
- **la conservation est donc imposée au niveau discret**
(extrait et adapté de [Roux, 1994])
- *MVF* = extension de *MDF* dont elle utilise les techniques de discrétisation et d'approximation de dérivées (calculs de gradients etc.)

- 1 organisation du module EDP et évaluation
- 2 introduction
 - exemples EDP rencontrées en physique mathématique
 - définitions
 - méthodes de résolution exacte
 - méthodes de résolution approchée
- 3 méthode des différences finies
 - diffusion en régime stationnaire
 - advection diffusion en régime stationnaire
 - diffusion en régime transitoire
- 4 méthode des volumes finis
 - diffusion en régime stationnaire
 - diffusion en régime transitoire

- équation de diffusion linéaire stationnaire

$$\operatorname{div}(\underline{j}) = \operatorname{div}(-\lambda \underline{\operatorname{grad}}(\zeta)) = 0 \quad (194)$$

- pour un volume Ω

$$\frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} \operatorname{div}(\lambda \underline{\operatorname{grad}}(\zeta)) d\Omega = 0 \quad (195)$$

- discontinuité physique sur une interface $\lambda_1 \neq \lambda_2$
 - discontinuité du gradient sur l'interface

$$\underline{\operatorname{grad}}(\zeta_1) \neq \underline{\operatorname{grad}}(\zeta_2) \quad (196)$$

- continuité du flux sur l'interface

$$\lambda_1 \underline{\operatorname{grad}}(\zeta_1) \cdot \underline{n} = \lambda_2 \underline{\operatorname{grad}}(\zeta_2) \cdot \underline{n} \quad (197)$$

théorème de la divergence

- transformation de l'intégrale de volume Ω en intégrale de surface $\partial\Omega$

$$\frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} \operatorname{div}(\lambda \underline{\operatorname{grad}}(\zeta)) d\Omega = \frac{1}{\Omega} \int_{\partial\Omega} \lambda \underline{\operatorname{grad}}(\zeta) \cdot \underline{n} da = 0 \quad (198)$$

- volume de contrôle Ω : boîte noire à l'intérieur de laquelle le flux peut varier d'une manière quelconque
- flux sur l'interface α

$$\varphi_{\alpha} = \lambda_{\alpha} \underline{\operatorname{grad}}(\zeta_{\alpha}) \cdot \underline{n} \quad (199)$$

- formulation conservative en flux : équation de bilan

$$\frac{1}{\Omega} \int_{\partial\Omega} \lambda \underline{\operatorname{grad}}(\zeta) \cdot \underline{n} da = \frac{1}{\Omega} \int_{\partial\Omega_s} \varphi_s da + \frac{1}{\Omega} \int_{\partial\Omega_e} \varphi_e da = 0 \quad (200)$$

φ_s, φ_e flux sortant en entrant, sur $\partial\Omega_s$ et $\partial\Omega_e$

- problème 1D en coordonnées cartésiennes orthonormées

$$\zeta = \zeta(x), \quad \underline{\text{grad}}(\zeta) = \frac{d\zeta(x)}{dx} \underline{e}_x \quad (201)$$

- milieu isotrope

$$\underline{j} = \lambda \underline{\text{grad}}(\zeta) = \lambda \frac{d\zeta(x)}{dx} \underline{e}_x \quad (202)$$

- flux

$$\varphi(\underline{n}) = \lambda \underline{\text{grad}}(\zeta) \cdot \underline{n} = \lambda \frac{d\zeta(x)}{dx} \underline{e}_x \cdot \underline{n} \quad (203)$$

$$\varphi(\underline{n} = \underline{e}_y) = \lambda \frac{d\zeta(x)}{dx} \underline{e}_x \cdot \underline{e}_y = 0, \quad \varphi(\underline{n} = \underline{e}_z) = \lambda \frac{d\zeta(x)}{dx} \underline{e}_x \cdot \underline{e}_z = 0$$

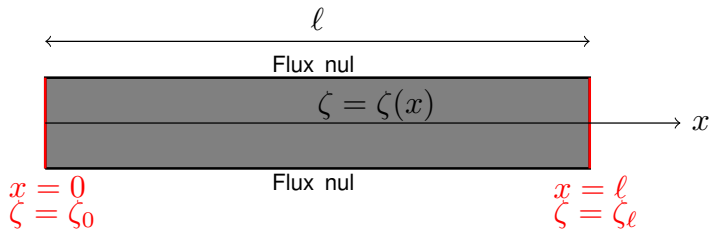
$$\varphi(\underline{n} = -\underline{e}_x) = -\lambda \frac{d\zeta(x)}{dx}, \quad \varphi(\underline{n} = \underline{e}_x) = \lambda \frac{d\zeta(x)}{dx} \quad (204)$$

- on distingue
 - les points de discrétisation où l'inconnue ζ est calculée
 - les volumes élémentaires ou volumes de contrôle Ω sur lesquels sont établies les équations de bilan
- les points de discrétisation sont les centres des volumes de contrôle.
- on définit deux maillages
 - le maillage des centres
 - le maillage des volumes de contrôle (ou des interfaces)
- on se limite aux grilles régulières

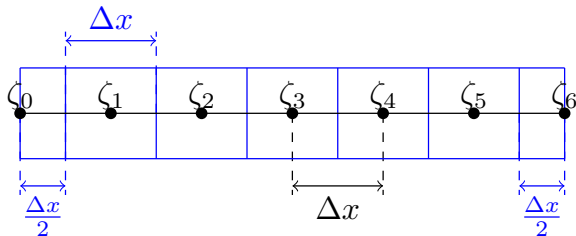
- on définit les points de discrétisation : régulièrement répartis, avec un pas noté Δx ,
- deux points de discrétisation sont placés sur les bords $x = 0$ et $x = \ell$
- puis les volumes de contrôle sont centrés sur les points de discrétisation,
- conséquences
 - interfaces entre les volumes placées à mi-distance entre les centres
 - épaisseur de ces volumes de contrôle est égale à Δx , la distance entre points de discrétisation
 - sur les frontières deux *demi volumes* : *des volumes coupés en leur milieu* (épaisseur $\frac{\Delta x}{2}$)

exemple 1D problème de Dirichlet

- le milieu continu : une couche d'épaisseur ℓ soumise à des conditions de type Dirichlet sur les bords $x = 0$ et $x = \ell$

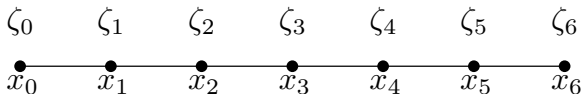


- maillages des volumes de contrôle et des centres

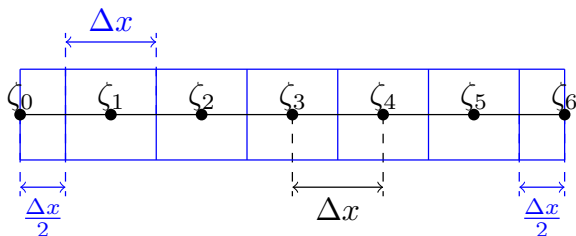
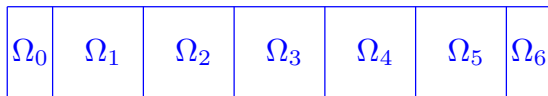


- maillages des centres et des volumes et des volumes de contrôle

Maillage des centres

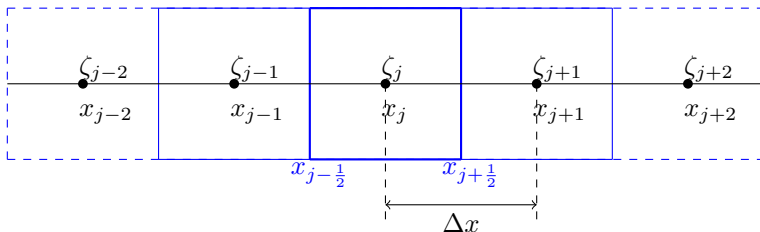


Maillage des volumes de contrôle



$$\frac{1}{\Omega_j} \int_{\partial\Omega_j} \lambda \underline{\text{grad}} \zeta \cdot \underline{n} \, da = 0 \quad (205)$$

- volume de contrôle intérieur Ω_j (centre $x_j = j \Delta x$, inconnue ζ_j),
 S : aire de la section transversale, $\Omega_j = S \Delta x$



- équation de bilan d'un volume de contrôle intérieur Ω_j

$$\frac{1}{\Omega_j} \int_{\partial\Omega_j} \lambda \underline{\text{grad}} \zeta \cdot \underline{n} \, da = 0 \quad (206)$$

$$\frac{1}{S\Delta x} (S (\varphi_{j+1/2} + \varphi_{j-1/2})) = \frac{1}{\Delta x} (\varphi_{j+1/2} + \varphi_{j-1/2}) = 0 \quad (207)$$

- $\varphi_{j+1/2}$ et $\varphi_{j-1/2}$: flux aux interfaces $j \pm 1/2$

$$\varphi_{j+1/2} = \lambda_{j+1/2} \left[\frac{d\zeta}{dx} \right]_{j+1/2}, \quad \varphi_{j-1/2} = -\lambda_{j-1/2} \left[\frac{d\zeta}{dx} \right]_{j-1/2} \quad (208)$$

- approximations par différences finies** des gradients
- gradients** approchés par **dérivées premières centrées** sur les **interfaces** $j \pm \frac{1}{2}$.

- **gradients** approchés par **dérivées premières centrées**

$$\left[\frac{d\zeta}{dx} \right]_{j+1/2} = \frac{\zeta_{j+1} - \zeta_j}{\Delta x} \quad (209)$$

$$\left[\frac{d\zeta}{dx} \right]_{j-1/2} = \frac{\zeta_j - \zeta_{j-1}}{\Delta x} \quad (210)$$

- équation discrétisée

$$\frac{1}{\Delta x} \left(\lambda_{j+1/2} \left(\frac{\zeta_{j+1} - \zeta_j}{\Delta x} \right) - \lambda_{j-1/2} \left(\frac{\zeta_j - \zeta_{j-1}}{\Delta x} \right) \right) = 0 \quad (211)$$

- factorisation et $\times - \Delta x^2$

$$- \lambda_{j-1/2} \zeta_{j-1} + (\lambda_{j-1/2} + \lambda_{j+1/2}) \zeta_j - \lambda_{j+1/2} \zeta_{j+1} = 0 \quad (212)$$

- matériau homogène de conductivité λ constante

$$\lambda_{j-1/2} = \lambda_{j+1/2} = \lambda \quad (213)$$

- l'équation

$$-\lambda_{j-1/2} \zeta_{j-1} + (\lambda_{j-1/2} + \lambda_{j+1/2}) \zeta_j - \lambda_{j+1/2} \zeta_{j+1} = 0 \quad (214)$$

devient

$$-\frac{\lambda}{(\Delta x)^2} (-\zeta_{j-1} + 2\zeta_j - \zeta_{j+1}) = 0 \quad (215)$$

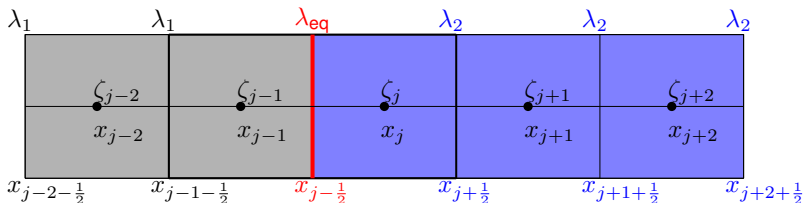
soit

$$-\zeta_{j-1} + 2\zeta_j - \zeta_{j+1} = 0 \quad (216)$$

- *MVF* et *MDF* coïncident dans le cas d'un problème linéaire et d'un matériau homogène

discontinuités de propriétés physiques

- exemple d'une interface en $x_{j-\frac{1}{2}}$ entre matériaux 1 de conductivité λ_1 et 2 de conductivité λ_2



- sur l'interface, la conductivité n'est ni λ_1 ni λ_2 mais une fonction de celles-ci, notée λ_{eq} , *conductivité équivalente* à l'interface, déterminée en assurant la continuité du flux

continuité du flux à l'interface

- continuité du flux à travers la discontinuité physique

$$\lambda_1 \left[\frac{d\zeta_1}{dx} \right]_{x_{j-\frac{1}{2}}} = \lambda_2 \left[\frac{d\zeta_2}{dx} \right]_{x_{j-\frac{1}{2}}} \quad (217)$$

- ζ_α : inconnue à l'interface, on approxime le gradient à l'interface par différences finies ($x_\alpha = x_{j-\frac{1}{2}}$)

$$\left[\frac{d\zeta_1}{dx} \right]_{x_\alpha} = \frac{\zeta_\alpha - \zeta_{j-1}}{x_\alpha - x_{j-1}}, \quad \left[\frac{d\zeta_2}{dx} \right]_{x_\alpha} = \frac{\zeta_j - \zeta_\alpha}{x_j - x_\alpha} \quad (218)$$

- avec

$$x_j - x_{j-\frac{1}{2}} = x_{j-\frac{1}{2}} - x_{j-1} = \frac{\Delta x}{2} \quad (219)$$

$$\left[\frac{d\zeta_1}{dx} \right]_{x_{j-\frac{1}{2}}} = \frac{2(\zeta_\alpha - \zeta_{j-1})}{\Delta x}, \quad \left[\frac{d\zeta_2}{dx} \right]_{x_{j-\frac{1}{2}}} = \frac{2(\zeta_j - \zeta_\alpha)}{\Delta x} \quad (220)$$

- équation de continuité du flux à l'interface

$$\lambda_1 \left(\frac{2(\zeta_\alpha - \zeta_{j-1})}{\Delta x} \right) = \lambda_2 \left(\frac{2(\zeta_j - \zeta_\alpha)}{\Delta x} \right) \quad (221)$$

$$\lambda_1 (\zeta_\alpha - \zeta_{j-1}) = \lambda_2 (\zeta_j - \zeta_\alpha) \quad (222)$$

- on exprime l'inconnue à l'interface ζ_α en fonction des inconnues aux centres des volumes de contrôle de part et d'autre de l'interface, ζ_{j-1} et ζ_j

$$\zeta_\alpha = \frac{\lambda_1 \zeta_{j-1} + \lambda_2 \zeta_j}{\lambda_1 + \lambda_2} \quad (223)$$

- que l'on remplace dans (221)

$$\varphi_{j-\frac{1}{2}} = \lambda_1 \left(\frac{2(\zeta_\alpha - \zeta_{j-1})}{\Delta x} \right) = \lambda_2 \left(\frac{2(\zeta_j - \zeta_\alpha)}{\Delta x} \right) = \lambda_{eq} \frac{\zeta_j - \zeta_{j-1}}{\Delta x} \quad (224)$$

- on trouve finalement

$$\lambda_{\text{eq}} = \lambda_{\text{eq}}(\lambda_1, \lambda_2) = \frac{2\lambda_1\lambda_2}{\lambda_1 + \lambda_2} \quad (225)$$

- dans le cas particulier du matériau homogène $\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda$ on a bien $\lambda_{\text{eq}} = \lambda$
- une interface entre deux matériaux induit une modification de conductivité sur l'interface, cela impacte l'équation de bilan des deux volumes situés de part et d'autre de l'interface

exemple : interface entre les volumes $j-1$ et j

- équations de bilan sans discontinuité physique

$$-\lambda_{j-3/2} \zeta_{j-2} + (\lambda_{j-3/2} + \lambda_{j-1/2}) \zeta_{j-1} - \lambda_{j-1/2} \zeta_j = 0 \quad (226)$$

$$-\lambda_{j-1/2} \zeta_{j-1} + (\lambda_{j-1/2} + \lambda_{j+1/2}) \zeta_j - \lambda_{j+1/2} \zeta_{j+1} = 0 \quad (227)$$

- $\lambda_{j-3/2} = \lambda_1$, $\lambda_{j+1/2} = \lambda_2$, correction à l'interface $\lambda_{j-1/2} = \lambda_{eq}$
- équations de bilan corrigées

$$-\lambda_1 \zeta_{j-2} + (\lambda_1 + \lambda_{eq}) \zeta_{j-1} - \lambda_{eq} \zeta_j = 0 \quad (228)$$

$$-\lambda_{eq} \zeta_{j-1} + (\lambda_{eq} + \lambda_2) \zeta_j - \lambda_2 \zeta_{j+1} = 0 \quad (229)$$

$$\lambda_{eq} = \lambda_{eq}(\lambda_1, \lambda_2) = \frac{2\lambda_1\lambda_2}{\lambda_1 + \lambda_2} \quad (230)$$

interface entre les volumes $j-1$ et j

- équations de bilan corrigées

$$-\lambda_1 \zeta_{j-2} + (\lambda_1 + \lambda_{\text{eq}}) \zeta_{j-1} - \lambda_{\text{eq}} \zeta_j = 0 \quad (231)$$

$$-\lambda_{\text{eq}} \zeta_{j-1} + (\lambda_{\text{eq}} + \lambda_2) \zeta_j - \lambda_2 \zeta_{j+1} = 0 \quad (232)$$

$$\lambda_{\text{eq}} = \lambda_{\text{eq}}(\lambda_1, \lambda_2) = \frac{2\lambda_1\lambda_2}{\lambda_1 + \lambda_2} \quad (233)$$

- système linéaire *MVF*

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{X} = \mathbf{B} \quad (234)$$

- coefficients de la matrice tridiagonale $\mathbf{A}$

$$A_{j-1,j-2} = -\lambda_1, \quad A_{j-1,j-1} = \lambda_1 + \lambda_{\text{eq}}, \quad A_{j-1,j} = -\lambda_{\text{eq}} \quad (235)$$

$$A_{j,j-1} = -\lambda_{\text{eq}}, \quad A_{j,j} = \lambda_{\text{eq}} + \lambda_2, \quad A_{j,j+1} = -\lambda_2 \quad (236)$$

exemple d'un bicouche

- exemple d'un bicouche, problème de Dirichlet

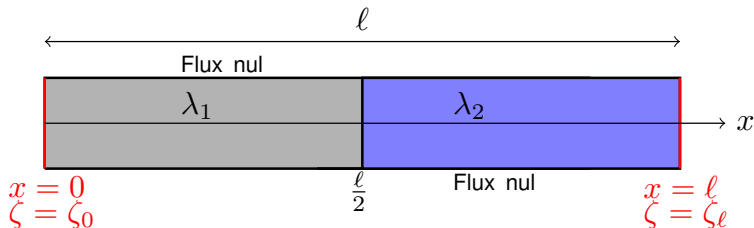


Figure: problème 1D d'un bicouche : $\lambda(0 < x < \frac{\ell}{2}) = \lambda_1$,
 $\lambda(\frac{\ell}{2} < x < \ell) = \lambda_2$

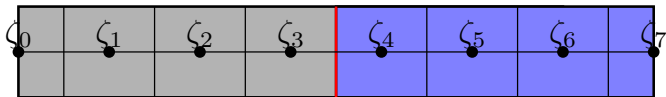


Figure: maillages des volumes de contrôle et des centres dans le cas d'un bicouche, avec $N + 2 = 8$, $\Delta x = \frac{\ell}{N+1} = \frac{\ell}{7}$

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{X} = \mathbf{B}$$

$$\underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\lambda & 2\lambda & -\lambda & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\lambda & 2\lambda & -\lambda & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\lambda & 2\lambda & -\lambda & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\lambda & 2\lambda & -\lambda & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\lambda & 2\lambda & -\lambda & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\lambda & 2\lambda & -\lambda \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}}_{\mathbf{A}} \cdot \underbrace{\begin{pmatrix} \zeta_0 \\ \zeta_1 \\ \zeta_2 \\ \zeta_3 \\ \zeta_4 \\ \zeta_5 \\ \zeta_6 \\ \zeta_7 \end{pmatrix}}_{\mathbf{X}} = \underbrace{\begin{pmatrix} \zeta_0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \zeta_\ell \end{pmatrix}}_{\mathbf{B}}$$

exemple d'un bicouche : système linéaire *MVF*

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{X} = \mathbf{B}$$

$$\underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\lambda_1 & 2\lambda_1 & -\lambda_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\lambda_1 & 2\lambda_1 & -\lambda_1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\lambda_1 & \lambda_1 + \lambda_{\text{eq}} & -\lambda_{\text{eq}} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\lambda_{\text{eq}} & \lambda_{\text{eq}} + \lambda_2 & -\lambda_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\lambda_2 & 2\lambda_2 & -\lambda_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\lambda_2 & 2\lambda_2 & -\lambda_2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}}_{\mathbf{A}} \cdot \underbrace{\begin{pmatrix} \zeta_0 \\ \zeta_1 \\ \zeta_2 \\ \zeta_3 \\ \zeta_4 \\ \zeta_5 \\ \zeta_6 \\ \zeta_7 \end{pmatrix}}_{\mathbf{X}} = \underbrace{\begin{pmatrix} \zeta_0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \zeta_\ell \end{pmatrix}}_{\mathbf{B}}$$

$$\lambda_{\text{eq}} = \lambda_{\text{eq}}(\lambda_1, \lambda_2) = \frac{2\lambda_1\lambda_2}{\lambda_1 + \lambda_2}$$

exemple d'un bicouche : résultats *MVF*

diffusion pure dans un bicouche

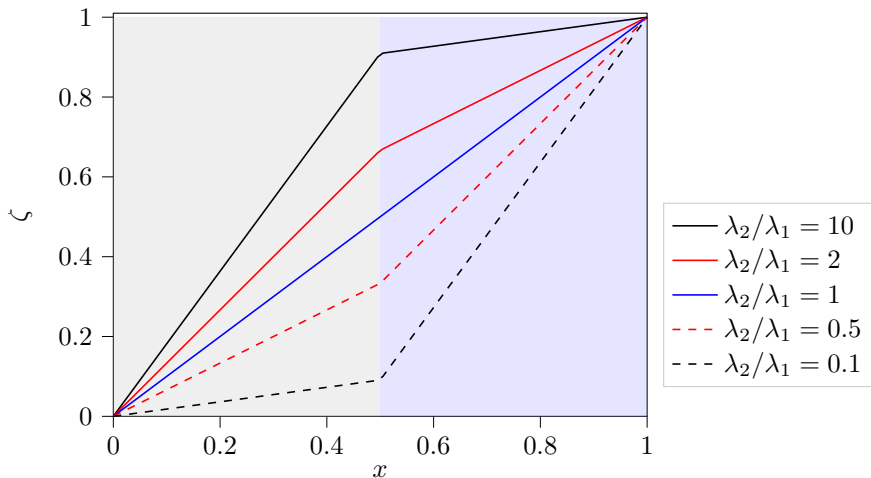


Figure: Discrétisation par volumes finis de la diffusion pure stationnaire dans un bicouche.

introduction aux problèmes non linéaires

- problème de diffusion 1D non linéaire, $\lambda = \lambda(\zeta)$

$$\operatorname{div} \left(\lambda(\zeta) \underline{\operatorname{grad}} \zeta \right) = 0 \quad (237)$$

- on intègre l'équation de bilan sur un volume de contrôle Ω_j

$$\frac{1}{\Omega_j} \int_{\Omega_j} \operatorname{div} \left(\lambda(\zeta) \underline{\operatorname{grad}} \zeta \right) d\Omega_j = 0 \quad (238)$$

- théorème de la divergence

$$\frac{1}{\Omega_j} \int_{\partial\Omega_j} \lambda(\zeta) \underline{\operatorname{grad}} \zeta \cdot \underline{n} da = 0 \quad (239)$$

- équation de bilan

$$\varphi_{j+1/2} = \lambda_{j+1/2} \left[\frac{\partial \zeta}{\partial x} \right]_{j+1/2} \quad (240)$$

$$\varphi_{j-1/2} = -\lambda_{j-1/2} \left[\frac{\partial \zeta}{\partial x} \right]_{j-1/2} \quad (241)$$

- *moyenne des fonctions* pour la conductivité et dérivée première centrée pour le gradient aux interfaces

$$\varphi_{j+1/2} \approx \left(\frac{\lambda(\zeta_j) + \lambda(\zeta_{j+1})}{2} \right) \left(\frac{\zeta_{j+1} - \zeta_j}{\Delta x} \right) \quad (242)$$

$$\varphi_{j-1/2} \approx - \left(\frac{\lambda(\zeta_j) + \lambda(\zeta_{j-1})}{2} \right) \left(\frac{\zeta_j - \zeta_{j-1}}{\Delta x} \right) \quad (243)$$

- *fonction de la moyenne* pour la conductivité et dérivée première centrée pour le gradient aux interfaces

$$\varphi_{j+1/2} \approx \lambda \left(\frac{\zeta_j + \zeta_{j+1}}{2} \right) \left(\frac{\zeta_{j+1} - \zeta_j}{\Delta x} \right) \quad (244)$$

$$\varphi_{j-1/2} \approx -\lambda \left(\frac{\zeta_j + \zeta_{j-1}}{2} \right) \left(\frac{\zeta_j - \zeta_{j-1}}{\Delta x} \right) \quad (245)$$

- équations discrétisées pour le problème non linéaire différentes

- *moyenne des fonctions* ($\times (-(\Delta x)^2)$)

$$\begin{aligned} & - \left(\frac{\lambda(\zeta_j) + \lambda(\zeta_{j-1})}{2} \right) \zeta_{j-1} \\ & + \left(\frac{\lambda(\zeta_{j-1}) + 2\lambda(\zeta_j) + \lambda(\zeta_{j+1})}{2} \right) \zeta_j \\ & - \left(\frac{\lambda(\zeta_j) + \lambda(\zeta_{j+1})}{2} \right) \zeta_{j+1} = 0 \end{aligned}$$

- cas d'un problème linéaire homogène

$$\lambda(-\zeta_{j-1} + 2\zeta_j - \zeta_{j+1}) = 0 \quad (246)$$

- problème posé

$$\operatorname{div} \left(\lambda(\zeta) \underline{\operatorname{grad}} \zeta \right) = 0 \quad (247)$$

$$0 \leq x \leq \ell, \quad \zeta(x=0) = \zeta_0, \quad \zeta(x=\ell) = \zeta_\ell \quad (248)$$

- $\lambda(\zeta)$ et $\lambda'(\zeta)$ connues : données matériau ($\lambda'(\zeta)$ notée $d\lambda\zeta(\zeta)$)
- résolution du problème non linéaire par un algorithme itératif
 - point fixe
 - Newton-Raphson
- approximation des flux par *moyenne des fonctions*

- rappel : on recherche la solution d'une équation de la forme

$$x = f(x) \quad (249)$$

- processus itératif

$$x_{k+1} = f(x_k) \quad (250)$$

- mise en oeuvre dans le cadre de la *MVF*

- rappel : on recherche la solution d'une équation de la forme

$$x = f(x) \quad (249)$$

- processus itératif

$$x_{k+1} = f(x_k) \quad (250)$$

- mise en oeuvre dans le cadre de la *MVF*

- inconnue scalaire x remplacée par $\mathbf{X}$ vecteur contenant les inconnues ζ_j aux points de discrétisation pris aux centres des volumes de contrôle ($n + 2$ composantes, n points intérieurs et les 2 points situés sur les frontières)
- $n + 2$ équations de bilan non linéaires à résoudre simultanément : système matriciel

$$\mathbf{X}^{k+1} = \left[\mathbf{A} \left[\mathbf{X}^k \right] \right]^{-1} \cdot \mathbf{B} \left[\mathbf{X}^k \right] \quad (251)$$

- rappel : on recherche la solution d'une équation de la forme

$$x = f(x) \quad (252)$$

- processus itératif

$$x_{k+1} = f(x_k) \quad (253)$$

- mise en oeuvre dans le cadre de la *MVF* : inversion itérative d'un système linéaire

$$\mathbf{A} [\mathbf{X}^k] \cdot \mathbf{X}^{k+1} = \mathbf{B} [\mathbf{X}^k] \quad (254)$$

soit

$$\mathbf{X}^{k+1} = [\mathbf{A} [\mathbf{X}^k]]^{-1} \cdot \mathbf{B} [\mathbf{X}^k] \quad (255)$$

- équation de bilan du volume j **intérieur**

$$\begin{aligned} & - \left(\frac{\lambda(\zeta_j) + \lambda(\zeta_{j-1})}{2} \right) \zeta_{j-1} \\ & + \left(\frac{\lambda(\zeta_{j-1}) + 2\lambda(\zeta_j) + \lambda(\zeta_{j+1})}{2} \right) \zeta_j \\ & - \left(\frac{\lambda(\zeta_j) + \lambda(\zeta_{j+1})}{2} \right) \zeta_{j+1} = 0 \end{aligned}$$

- fournit la ligne j ligne j , colonnes $j - 1$, j et $j + 1$ de la matrice $\mathbf{A}$, et la ligne j du vecteur second membre $\mathbf{B}$

$$A_{(j,j-1)} = -\frac{\lambda(\zeta_j) + \lambda(\zeta_{j-1})}{2} \quad (256)$$

$$A_{(j,j)} = \left(\frac{\lambda(\zeta_{j-1}) + 2\lambda(\zeta_j) + \lambda(\zeta_{j+1})}{2} \right) \quad (257)$$

$$A_{(j,j+1)} = -\frac{\lambda(\zeta_j) + \lambda(\zeta_{j+1})}{2} \quad (258)$$

$$B_{(j)} = 0 \quad (259)$$

- rappel : on recherche la solution d'une équation de la forme

$$f(x) = 0 \quad (260)$$

- processus itératif

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)} \quad (261)$$

- mise en oeuvre dans le cadre de la *MVF*

- rappel : on recherche la solution d'une équation de la forme

$$f(x) = 0 \quad (260)$$

- processus itératif

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)} \quad (261)$$

- mise en oeuvre dans le cadre de la *MVF*

- $n + 2$ équations de bilan non linéaires à résoudre simultanément : système matriciel

$$\mathbf{X}^{k+1} = \mathbf{X}^k - \left[\mathbf{DF} [\mathbf{X}^k] \right]^{-1} \cdot \mathbf{F} [\mathbf{X}^k] \quad (262)$$

- $\mathbf{DF} [\mathbf{X}^k]$: *matrice dérivée* $[n + 2, n + 2]$, vecteur second membre $\mathbf{F} [\mathbf{X}^k]$, $[n + 2]$ construits à partir de l'équation de bilan discrétisée

- équation de bilan du volume j intérieur

$$f_j (\zeta_{j-1}, \zeta_j, \zeta_{j+1}) = 0 \quad (263)$$

$$\begin{aligned} f_j (\zeta_{j-1}, \zeta_j, \zeta_{j+1}) = & - \left(\frac{\lambda (\zeta_j) + \lambda (\zeta_{j-1})}{2} \right) \zeta_{j-1} \\ & + \left(\frac{\lambda (\zeta_{j-1}) + 2\lambda (\zeta_j) + \lambda (\zeta_{j+1})}{2} \right) \zeta_j \\ & - \left(\frac{\lambda (\zeta_j) + \lambda (\zeta_{j+1})}{2} \right) \zeta_{j+1} \end{aligned}$$

- fournit la ligne j ligne j , colonnes $j - 1$, j et $j + 1$ de la matrice dérivée $\mathbf{DF}$, et la ligne j du vecteur second membre $\mathbf{F}$

$$DF_{(j,j+k)} = \frac{\partial f_j}{\partial \zeta_{j+k}}, \quad k = -1, \quad 0, \quad 1 \quad (264)$$

$$F_{(j)} = f_j (\zeta_{j-1}, \zeta_j, \zeta_{j+1}) \quad (265)$$

- composantes de la matrice dérivée (ligne j)

$$DF_{(j,j-1)} = d\lambda\zeta(\zeta_{j-1}) \left(\frac{\zeta_j - \zeta_{j-1}}{2} \right) - \frac{\lambda(\zeta_{j-1}) + \lambda(\zeta_j)}{2}$$

$$DF_{(j,j)} = d\lambda\zeta(\zeta_j) \left(\frac{-\zeta_{j-1} + 2\zeta_j - \zeta_{j+1}}{2} \right) + \frac{\lambda(\zeta_{j-1}) + 2\lambda(\zeta_j) + \lambda(\zeta_{j+1})}{2}$$

$$DF_{(j,j+1)} = d\lambda\zeta(\zeta_{j+1}) \left(\frac{\zeta_j - \zeta_{j+1}}{2} \right) - \frac{\lambda(\zeta_j) + \lambda(\zeta_{j+1})}{2}$$

- vecteur second membre (ligne j)

$$\begin{aligned} F_{(j)} = & - \left(\frac{\lambda(\zeta_j) + \lambda(\zeta_{j-1})}{2} \right) \zeta_{j-1} \\ & + \left(\frac{\lambda(\zeta_{j-1}) + 2\lambda(\zeta_j) + \lambda(\zeta_{j+1})}{2} \right) \zeta_j \\ & - \left(\frac{\lambda(\zeta_j) + \lambda(\zeta_{j+1})}{2} \right) \zeta_{j+1} \end{aligned}$$

- composantes de la matrice dérivée (ligne j) $\times 2$

$$DF_{(j,j-1)} = d\lambda\zeta(\zeta_{j-1})(\zeta_j - \zeta_{j-1}) - (\lambda(\zeta_{j-1}) + \lambda(\zeta_j))$$

$$DF_{(j,j)} = d\lambda\zeta(\zeta_j)(-\zeta_{j-1} + 2\zeta_j - \zeta_{j+1}) + \lambda(\zeta_{j-1}) + 2\lambda(\zeta_j) + \lambda(\zeta_{j+1})$$

$$DF_{(j,j+1)} = d\lambda\zeta(\zeta_{j+1})(\zeta_j - \zeta_{j+1}) - (\lambda(\zeta_j) + \lambda(\zeta_{j+1}))$$

- vecteur second membre (ligne j) $\times 2$

$$\begin{aligned} F_{(j)} = & -(\lambda(\zeta_j) + \lambda(\zeta_{j-1}))\zeta_{j-1} \\ & + (\lambda(\zeta_{j-1}) + 2\lambda(\zeta_j) + \lambda(\zeta_{j+1}))\zeta_j \\ & - (\lambda(\zeta_j) + \lambda(\zeta_{j+1}))\zeta_{j+1} \end{aligned}$$

algorithme du point fixe dans le cadre de la *MVF*

1. initialisation

$$\mathbf{X}^k = \mathbf{X}^0 \quad (266)$$

2. **construction des matrices A et B** on récupère, pour chaque volume fini j , les valeurs numériques du vecteur $\mathbf{X}^k$

$$\zeta_{j-1} = X_{(j-1)}^k, \quad \zeta_j = X_{(j)}^k, \quad \zeta_{j+1} = X_{(j+1)}^k \quad (267)$$

on construit la matrice carrée A et le vecteur second membre B, fonctions de $\mathbf{X}^k$

3. inversion du système linéaire

$$\mathbf{X}^{k+1} = [\mathbf{A} [\mathbf{X}^k]]^{-1} \cdot \mathbf{B} [\mathbf{X}^k] \quad (268)$$

4. test de convergence

$$\varepsilon = \frac{\|\mathbf{X}^{k+1} - \mathbf{X}^k\|}{\|\mathbf{X}^k\|} \quad (269)$$

si $\varepsilon \leq \text{Tol}$ arrêt, sinon

5. réactualisation

$$\mathbf{X}^k = \mathbf{X}^{k+1} \quad (270)$$

et aller à 2

algorithme de Newton Raphson - *MVF*

1. initialisation

$$\mathbf{X}^k = \mathbf{X}^0 \quad (271)$$

2. **construction des matrices DF et F** on récupère, pour chaque volume fini j , les valeurs numériques du vecteur $\mathbf{X}^k$

$$\zeta_{j-1} = X_{(j-1)}^k, \quad \zeta_j = X_{(j)}^k, \quad \zeta_{j+1} = X_{(j+1)}^k \quad (272)$$

on construit la matrice carrée **DF** et le vecteur second membre **F**, fonctions de $\mathbf{X}^k$

3. inversion du système linéaire

$$\mathbf{X}^{k+1} = \mathbf{X}^k - [\mathbf{DF} [\mathbf{X}^k]]^{-1} \cdot \mathbf{F} [\mathbf{X}^k] \quad (273)$$

4. test de convergence

$$\varepsilon = \frac{\|\mathbf{X}^{k+1} - \mathbf{X}^k\|}{\|\mathbf{X}^k\|} \quad (274)$$

si $\varepsilon \leq \text{Tol}$ arrêt, sinon

5. réactualisation

$$\mathbf{X}^k = \mathbf{X}^{k+1} \quad (275)$$

et aller à 2

- problème posé : couche d'épaisseur $\ell = 1$ et CL de Dirichlet

$$0 \leq x \leq 1, \quad \zeta(x=0) = \zeta_0 = 0, \quad \zeta(x=1) = \zeta_\ell = 1 \quad (276)$$

- inconnue recherchée ζ comprise entre 0 et 1
- conductivité fonction de l'inconnue

$$\lambda(\zeta) = \alpha^\zeta, \quad 0 \leq \zeta \leq 1 \quad (277)$$

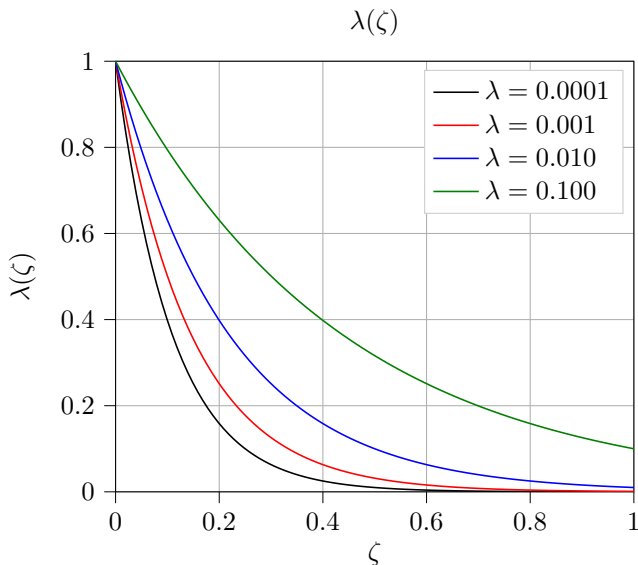
- α mesure la non linéarité ($\alpha = 1$: cas linéaire $\lambda(\zeta) = 1, \forall \zeta$)

$$\lambda(\zeta=0) = 1, \quad \lambda(\zeta=1) = \alpha \quad (278)$$

- algorithme de Newton Raphson utilise la fonction dérivée

$$d\lambda\zeta(\zeta) = \alpha^\zeta \ln(\alpha), \quad 0 \leq \zeta \leq 1 \quad (279)$$

● conductivité

Figure: fonction conductivité $\lambda(\zeta)$ avec $\alpha = 10^{-1}$ 10^{-2} 10^{-3} 10^{-4}

- dérivée première conductivité par rapport à l'inconnue ζ

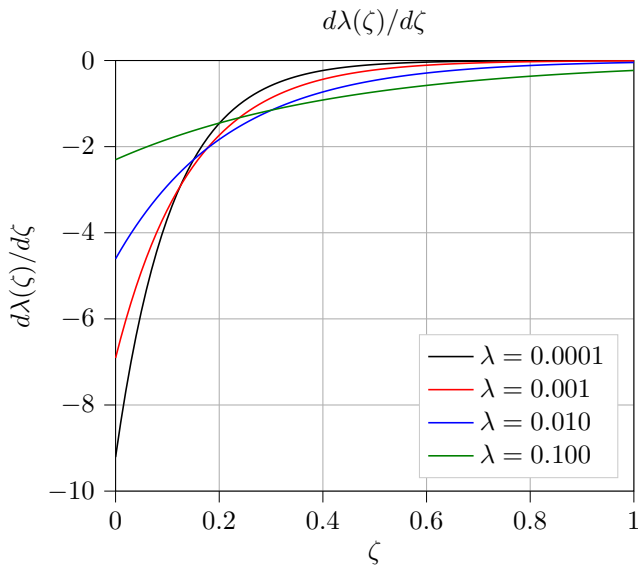


Figure: fonction dérivée de la conductivité $d\lambda(\zeta)/d\zeta$ avec

Point Fixe et Newton Raphson

- forte non linéarité $\alpha = 10^{-4}$

$$\alpha = 0.0001 - \text{niter} = 200$$

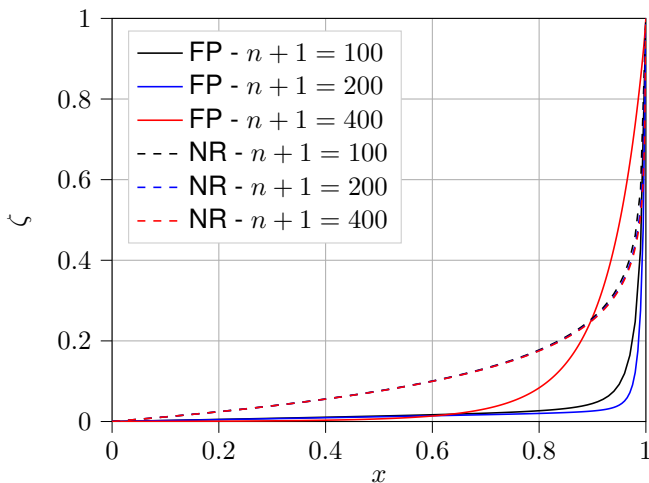


Figure: Comparaison algorithme Newton Raphson et Point Fixe avec $\alpha = 10^{-4}$

- résultats algorithme Point Fixe avec $\alpha = 10^{-2}$

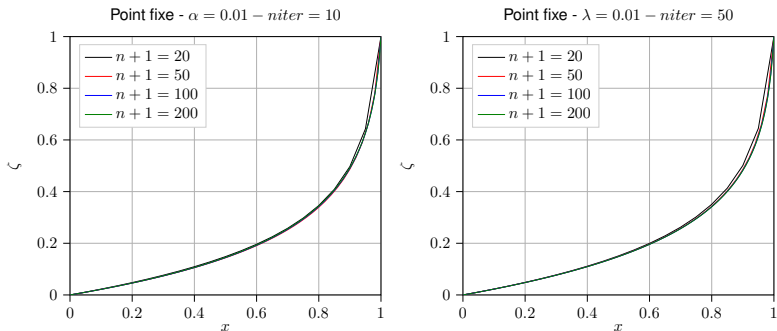
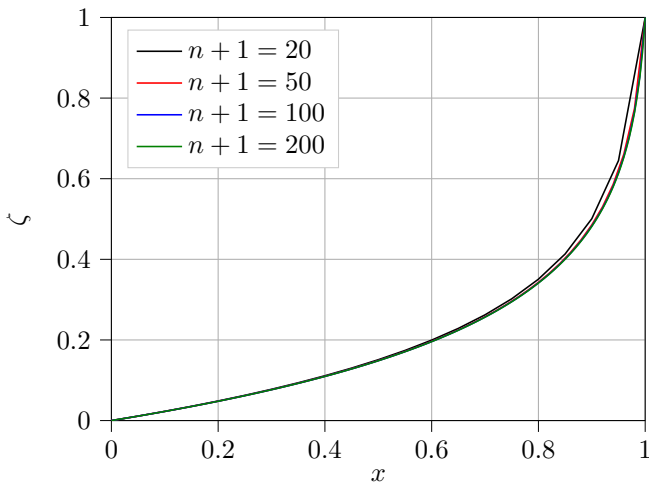


Figure: résultats algorithme Point Fixe avec $\alpha = 10^{-2}$, sensibilité au maillage, $niter = 10$ itérations (gauche), $niter = 50$ itérations (droite)

résultats Newton Raphson

- résultats algorithme Newton Raphson avec $\alpha = 10^{-2}$

Newton Raphson - $\alpha = 0.01$ - $niter = 10$



- 1 organisation du module EDP et évaluation
- 2 introduction
 - exemples EDP rencontrées en physique mathématique
 - définitions
 - méthodes de résolution exacte
 - méthodes de résolution approchée
- 3 méthode des différences finies
 - diffusion en régime stationnaire
 - advection diffusion en régime stationnaire
 - diffusion en régime transitoire
- 4 méthode des volumes finis
 - diffusion en régime stationnaire
 - diffusion en régime transitoire

- problème de diffusion 1D non linéaire en régime transitoire

$$C(\zeta) \frac{\partial \zeta}{\partial t} - \operatorname{div} \left(\lambda(\zeta) \underline{\operatorname{grad}} \zeta \right) = 0 \quad (280)$$

- on intègre l'équation de bilan sur un volume de contrôle Ω_j

$$\frac{1}{\Omega_j} \int_{\Omega_j} C(\zeta) \frac{\partial \zeta}{\partial t} d\Omega_j - \frac{1}{\Omega_j} \int_{\Omega_j} \operatorname{div} \left(\lambda(\zeta) \underline{\operatorname{grad}} \zeta \right) d\Omega_j = 0 \quad (281)$$

- équation discrétisée

- algorithme **implicite** : la **capacité** et les **flux** aux interfaces sont **calculés à l'instant $n + 1$**
- approximation de type *moyenne des fonctions* pour les flux aux interfaces
- approximation de type différences finies (dérivée première à gauche) pour la dérivée première en temps calculée au centre du volume (point de discrétisation)

- équation discrétisée

$$\begin{aligned} & C(\zeta_j^{n+1}) \left(\frac{\zeta_j^{n+1} - \zeta_j^n}{\Delta t} \right) \\ & - \frac{1}{\Delta x} \left(\left(\frac{\lambda(\zeta_j^{n+1}) + \lambda(\zeta_{j+1}^{n+1})}{2} \right) \left(\frac{\zeta_{j+1}^{n+1} - \zeta_j^{n+1}}{\Delta x} \right) \right. \\ & \left. - \left(\frac{\lambda(\zeta_j^{n+1}) + \lambda(\zeta_{j-1}^{n+1})}{2} \right) \left(\frac{\zeta_j^{n+1} - \zeta_{j-1}^{n+1}}{\Delta x} \right) \right) = 0 \end{aligned} \quad (282)$$

- on multiplie par Δt et on factorise

- équation discrétisée

$$\begin{aligned}
 & C(\zeta_j^{n+1}) \left(\frac{\zeta_j^{n+1} - \zeta_j^n}{\Delta t} \right) \\
 & - \frac{1}{\Delta x} \left(\left(\frac{\lambda(\zeta_j^{n+1}) + \lambda(\zeta_{j+1}^{n+1})}{2} \right) \left(\frac{\zeta_{j+1}^{n+1} - \zeta_j^{n+1}}{\Delta x} \right) \right. \\
 & \left. - \left(\frac{\lambda(\zeta_j^{n+1}) + \lambda(\zeta_{j-1}^{n+1})}{2} \right) \left(\frac{\zeta_j^{n+1} - \zeta_{j-1}^{n+1}}{\Delta x} \right) \right) = 0
 \end{aligned} \tag{282}$$

- on multiplie par Δt et on factorise

$$\begin{aligned}
 & - \frac{\Delta t}{2(\Delta x)^2} (\lambda(\zeta_{j-1}^{n+1}) + \lambda(\zeta_j^{n+1})) \zeta_{j-1}^{n+1} \\
 & + \left[C(\zeta_j^{n+1}) + \frac{\Delta t}{2(\Delta x)^2} (\lambda(\zeta_{j-1}^{n+1}) + 2\lambda(\zeta_j^{n+1}) + \lambda(\zeta_{j+1}^{n+1})) \right] \zeta_j^{n+1} \\
 & - \frac{\Delta t}{2(\Delta x)^2} (\lambda(\zeta_j^{n+1}) + \lambda(\zeta_{j+1}^{n+1})) \zeta_{j+1}^{n+1} \\
 & - C(\zeta_j^{n+1}) \zeta_j^n = 0
 \end{aligned} \tag{283}$$

- matériau homogène et comportement linéaire

$$C(\zeta) = C_0, \quad \lambda(\zeta) = \lambda_0 \quad (284)$$

- équation discrétisée

- matériau homogène et comportement linéaire

$$C(\zeta) = C_0, \quad \lambda(\zeta) = \lambda_0 \quad (284)$$

- équation discrétisée

$$-\frac{\lambda_0 \Delta t}{(\Delta x)^2} \zeta_{j-1}^{n+1} + \left[C_0 + \frac{2\lambda_0 \Delta t}{(\Delta x)^2} \right] \zeta_j^{n+1} - \frac{\lambda_0 \Delta t}{(\Delta x)^2} \zeta_{j+1}^{n+1} = C_0 \zeta_j^n$$

- exercice d'application : écrire l'équation discrétisée correspondant à une approximation **explicite**
 - algorithme **explicite** : la **capacité** et les **flux** aux interfaces sont **calculés à l'instant n**
 - approximation de type *moyenne des fonctions* pour les flux aux interfaces
 - approximation de type différences finies (dérivée première à droite) pour la dérivée première en temps calculée au centre du volume (point de discrétisation)

- exercice d'application : écrire l'équation discrétisée correspondant à une approximation **explicite**
 - algorithme **explicite** : la **capacité** et les **flux** aux interfaces sont **calculés à l'instant n**
 - approximation de type *moyenne des fonctions* pour les flux aux interfaces
 - approximation de type différences finies (dérivée première à droite) pour la dérivée première en temps calculée au centre du volume (point de discrétisation)

$$\begin{aligned} & C(\zeta_j^n) \zeta_j^{n+1} \\ & - \frac{\Delta t}{2(\Delta x)^2} (\lambda(\zeta_{j-1}^n) + \lambda(\zeta_j^n)) \zeta_{j-1}^n \\ & - \left[C(\zeta_j^n) - \frac{\Delta t}{2(\Delta x)^2} (\lambda(\zeta_{j-1}^n) + 2\lambda(\zeta_j^n) + \lambda(\zeta_{j+1}^n)) \right] \zeta_j^n \\ & - \frac{\Delta t}{2(\Delta x)^2} (\lambda(\zeta_j^n) + \lambda(\zeta_{j+1}^n)) \zeta_{j+1}^n = 0 \end{aligned} \quad (285)$$

- matériau homogène et comportement linéaire

$$C(\zeta) = C_0, \quad \lambda(\zeta) = \lambda_0 \quad (286)$$

- équation discrétisée

- matériau homogène et comportement linéaire

$$C(\zeta) = C_0, \quad \lambda(\zeta) = \lambda_0 \quad (286)$$

- équation discrétisée

$$C_0 \zeta_j^{n+1} = \frac{\lambda_0 \Delta t}{(\Delta x)^2} \zeta_{j-1}^n + \left(C_0 - \frac{2\lambda_0 \Delta t}{(\Delta x)^2} \right) \zeta_j^n + \frac{\lambda_0 \Delta t}{(\Delta x)^2} \zeta_{j+1}^n$$

- on évitera l'algorithme explicite pour des raisons de stabilité
- en pratique des schémas intermédiaires, semi-implicites, sont souvent utilisés [Mainguy, 1999, Eymard et al., 2000]

algorithmes implicite et explicite - MVF

- on distingue données ζ_j^n et inconnues ζ_j^{n+1}
- équation discrétisée implicite

$$\begin{aligned} & -\frac{\Delta t}{2(\Delta x)^2} (\lambda(\zeta_{j-1}^{n+1}) + \lambda(\zeta_j^{n+1})) \zeta_{j-1}^{n+1} \\ & + \left[C(\zeta_j^{n+1}) + \frac{\Delta t}{2(\Delta x)^2} (\lambda(\zeta_{j-1}^{n+1}) + 2\lambda(\zeta_j^{n+1}) + \lambda(\zeta_{j+1}^{n+1})) \right] \zeta_j^{n+1} \\ & - \frac{\Delta t}{2(\Delta x)^2} (\lambda(\zeta_j^{n+1}) + \lambda(\zeta_{j+1}^{n+1})) \zeta_{j+1}^{n+1} \\ & - C(\zeta_j^{n+1}) \zeta_j^n = 0 \end{aligned} \quad (287)$$

- équation discrétisée explicite

$$\begin{aligned} & C(\zeta_j^n) \zeta_j^{n+1} \\ & - \frac{\Delta t}{2(\Delta x)^2} (\lambda(\zeta_{j-1}^n) + \lambda(\zeta_j^n)) \zeta_{j-1}^n \\ & - \left[C(\zeta_j^n) - \frac{\Delta t}{2(\Delta x)^2} (\lambda(\zeta_{j-1}^n) + 2\lambda(\zeta_j^n) + \lambda(\zeta_{j+1}^n)) \right] \zeta_j^n \\ & - \frac{\Delta t}{2(\Delta x)^2} (\lambda(\zeta_j^n) + \lambda(\zeta_{j+1}^n)) \zeta_{j+1}^n = 0 \end{aligned} \quad (288)$$

- on distingue données ζ_j^n et inconnues ζ_j^{n+1}
- équation discrétisée implicite

$$\begin{aligned} & -\frac{\Delta t}{2(\Delta x)^2} (\lambda(\zeta_{j-1}^{n+1}) + \lambda(\zeta_j^{n+1})) \zeta_{j-1}^{n+1} \\ & + \left[C(\zeta_j^{n+1}) + \frac{\Delta t}{2(\Delta x)^2} (\lambda(\zeta_{j-1}^{n+1}) + 2\lambda(\zeta_j^{n+1}) + \lambda(\zeta_{j+1}^{n+1})) \right] \zeta_j^{n+1} \\ & -\frac{\Delta t}{2(\Delta x)^2} (\lambda(\zeta_j^{n+1}) + \lambda(\zeta_{j+1}^{n+1})) \zeta_{j+1}^{n+1} \\ & -C(\zeta_j^{n+1}) \zeta_j^n = 0 \end{aligned} \quad (289)$$

- le vecteur des inconnues $\mathbf{X}^k$ de l'algorithme non linéaire est composé des ζ_j^{n+1}
- insérer un algorithme non linéaire itératif dans la boucle transitoire : celui ci est résolu à chaque pas de temps

- ligne j de la matrice $\mathbf{A} = \mathbf{A}(\mathbf{X}^k)$ et du second membre $\mathbf{B} = \mathbf{B}(\mathbf{X}^k)$

$$\begin{aligned}A_{(j,j-1)} &= -\frac{\Delta t}{2(\Delta x)^2} (\lambda(\zeta_{j-1}^{n+1}) + \lambda(\zeta_j^{n+1})) \\A_{(j,j)} &= C(\zeta_j^{n+1}) + \frac{\Delta t}{2(\Delta x)^2} (\lambda(\zeta_{j-1}^{n+1}) + 2\lambda(\zeta_j^{n+1}) + \lambda(\zeta_{j+1}^{n+1})) \\A_{(j,j+1)} &= -\frac{\Delta t}{2(\Delta x)^2} (\lambda(\zeta_j^{n+1}) + \lambda(\zeta_{j+1}^{n+1})) \\B_{(j)} &= C(\zeta_j^{n+1}) \zeta_j^n\end{aligned} \tag{290}$$

- à chaque pas de temps on résout itérativement

$$\mathbf{X}^{k+1} = [\mathbf{A}[\mathbf{X}^k]]^{-1} \cdot \mathbf{B}[\mathbf{X}^k] \tag{291}$$

- initialisation : $\mathbf{X}^{k=0}$ composé des ζ_j^n , résultat de l'algorithme au pas de temps précédent

- 1 organisation du module EDP et évaluation
- 2 introduction
 - exemples EDP rencontrées en physique mathématique
 - définitions
 - méthodes de résolution exacte
 - méthodes de résolution approchée
- 3 méthode des différences finies
 - diffusion en régime stationnaire
 - advection diffusion en régime stationnaire
 - diffusion en régime transitoire
- 4 méthode des volumes finis
 - diffusion en régime stationnaire
 - diffusion en régime transitoire



Archambeau, F., Méchitoua, N., and Sakiz, M. (2004).

Code Saturne : A Finite Volume Code for the computation of turbulent incompressible flows - Industrial Applications.

International Journal on Finite Volumes, 1(1):1–62.



Bass, J. (1968).

Cours de Mathématiques.

Masson, Paris.



Bonnet, M. (1994).

Equations intégrales et élément de frontière en mécanique des solides.

Ecole Polytechnique.



Carslaw, J. and Jaeger, H. (1959).

Conduction of Heat in Solids.

Oxford University Press, England.



Colombo, S. (1959).

Les transformations de Mellin et de Hankel.

CNRS.



Euvrard, D. (1994).

Résolution numérique des Equations aux Dérivées Partielles de la physique, de la mécanique et des sciences de l'ingénieur: différences finies, éléments finis, problèmes en domaine non borné.

Masson, Paris, third edition.



Eymard, R., Gallouet, T., and Herbin, R. (2000).

The Finite Volume Methods.

In Ciarlet, P. and Lions, J., editors, *Handbook of Numerical analysis*, pages 715–1022. North Holland.



Ferziger, J. H. and Perić, M. (2002).

Finite Volume Methods, pages 71–89.

Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg.



Kellogg, O. D. (1929).

Foundations of Potential Theory.

Springer Verlag, Berlin, Heidelberg, New York.



Lomax, H., Pulliam, T. H., and Zingg, D. W. (2001).

Finite-Volume Methods, pages 67–79.

Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg.



Mainguy, M. (1999).

Modèles de diffusion non linéaires en milieux poreux. Application à la dissolution et au séchage des matériaux cimentaires.
PhD thesis, ENPC, Paris.



Patankar, S. V. (1980).
Numerical Heat Transfer and Heat Flow.
Hemisphere Publishing Corporation.



Pourhiet, A. L. (1988).
Résolution numérique des Equations aux Dérivées Partielles. Une première approche.
Editions Cepadues, Toulouse.



Rappaz, M., Bellet, M., and Deville, M. (2003).
Numerical Modeling in Materials Science and Engineering.
Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg.



Roux, P. (1994).
Méthode des volumes finis en thermoélasticité. Application à l'homogénéisation des milieux continus.
PhD thesis, Université de Bordeaux I, Bordeaux.



Sneddon, I. N. (1951).
Fourier Transforms.

Mac Graw Hill.



Versteeg, H. and Malalasekera, W. (2007).

An introduction to computational fluid dynamics. The finite volume method.

Pearson Education Limited, England, second edition.



Weisstein, E. (2008).

<http://mathworld.wolfram.com>.
wolfram.