

Résolution numérique des équations aux dérivées partielles

Albert Giraud

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

Abstract

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

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

Table des matières

1	Introduction	3
2	Méthode des différences finies appliquée à la diffusion en régime stationnaire	4
2.1	Introduction	4
2.2	Principe de la méthode des différences finies	4
2.3	Application à la diffusion 1D linéaire stationnaire	7
2.4	Application à l'équation d'advection diffusion 1D linéaire stationnaire	9
2.5	Application à la diffusion 2D linéaire stationnaire	13
3	Méthode des différences finies appliquée à la diffusion en régime transitoire	14
3.1	Problème posé	14
3.2	Développements en série de Taylor	14
3.3	Schémas explicite et implicite	15
3.4	Schéma de Crank-Nicolson et θ -méthode	16
3.5	Analyse de la stabilité des schémas explicite et implicite pour l'équation de la chaleur	16
3.6	Analyse de Fourier et étude de stabilité	22
4	Méthode des volumes finis appliquée à la diffusion en régime stationnaire	26
4.1	Introduction	26
4.2	Mise en oeuvre de la méthode des volumes finis sur un problème de diffusion pure en régime stationnaire	26
4.3	Extension aux discontinuités de propriétés physiques	31
4.4	Méthode des volumes finis en géométries 1D : cartésienne, cylindrique, sphérique	34
5	Equation discrétisée par volumes finis dans le cas 1D non linéaire stationnaire	36
5.1	Géométrie cartésienne	36
5.2	Problème posé	37
5.3	Equation discrétisée du volume fini j	38
5.4	Mise en oeuvre de l'algorithme du point fixe	38
5.5	Mise en oeuvre de l'algorithme de Newton Raphson	40
5.6	Application	41
5.7	Géométrie cylindrique	45

5.8	Géométrie sphérique	46
5.9	Condition aux limites de Neumann en régime stationnaire	46
5.10	Approximation des flux aux interfaces : exemples de la moyenne de la fonction et de la fonction de la moyenne	47
6	Equation discrétisée par volumes finis dans le cas 1D non linéaire en régime transitoire	48
6.1	Géométrie cartésienne	48
6.2	Géométrie cylindrique	50
6.3	Géométrie sphérique	51
6.4	Condition aux limites de Neumann en régime transitoire	51
7	Références	52

1. Introduction

Quelques références consultées

- différences finies : [1, 2, 3, 4, 5]
- volumes finis : [6, 4, 7, 8, 9, 10, 11, 12]
- éléments finis : [2, 1, 13]

2. Méthode des différences finies appliquée à la diffusion en régime stationnaire

2.1. Introduction

La méthode numérique des différences finies, la plus légère à mettre en oeuvre, est introduite sur deux problèmes unidimensionnels

- diffusion 1D linéaire stationnaire
- advection-diffusion 1D linéaire stationnaire

2.2. Principe de la méthode des différences finies

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

$$\text{div}(-\lambda \underline{\text{grad}}(\zeta)) = 0 \quad (1)$$

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

$$\Delta(\zeta) = \text{div}(\underline{\text{grad}}(\zeta)) = 0 \quad (2)$$

qui s'écrit en géométrie cartésienne $\zeta = \zeta(x, y, z)$

$$\Delta(\zeta) = \frac{\partial^2 \zeta}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \zeta}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \zeta}{\partial z^2} = 0 \quad (3)$$

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

$$\frac{d^2 \zeta}{dx^2} = 0 \quad (4)$$

Supposons que l'on ne connaisse pas la solution analytique de l'équation (??) et que l'on désire la résoudre par une méthode numérique de différences finies (*MDF*). Comme son nom l'indique, la *MDF* consiste à approcher les dérivées apparaissant dans une équation par des différences entre les valeurs de la fonction prises en des **points fixés**, appelés également **noeuds**, d'un **maillage**.

2.2.1. Maillage et développements en séries de Taylor

On considère un ensemble de points d'un **maillage régulier** dont le pas d'espace est donné par $\Delta x = h = \frac{\ell}{N+1}$, où

- $N + 1$ est le nombre d'intervalles divisant la longueur ℓ de la structure (un mur ou une couche).
- N désigne le nombre de points intérieurs
- $N + 2$ désigne le nombre total de points, bords inclus ($x = 0$ et $x = \ell$)

Soit ζ_k l'inconnue au point de discrétisation $x_k = k h$, $k = 1, \dots, N$ pour les points intérieurs

$$\zeta_k = \zeta(x_k) \quad (5)$$

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

$$\zeta(x) = \zeta(x_k) + (x - x_k) \zeta'(x_k) + \frac{(x - x_k)^2}{2} \zeta^{(2)}(x_k) + \frac{(x - x_k)^3}{6} \zeta^{(3)}(x_k) + 0((x - x_k)^4) \quad (6)$$

On adopte les notations

- valeurs aux noeuds k et $k \pm 1$

$$\zeta_{k-1} = \zeta(x_{k-1}), \quad \zeta_k = \zeta(x_k), \quad \zeta_{k+1} = \zeta(x_{k+1}) \quad (7)$$

- dérivée première en x_k

$$\zeta'_k = \zeta'(x_k) = \left[\frac{d\zeta}{dx} \right]_k \quad (8)$$

- dérivée seconde en x_k

$$\zeta_k^{(2)} = \zeta^{(2)}(x_k) = \left[\frac{d^2 \zeta}{dx^2} \right]_k \quad (9)$$

On applique le développement limité (6) aux points $k \pm 1$

$$\zeta_{k-1} = \zeta_k - h \zeta'_k + \frac{h^2}{2} \zeta_k^{(2)} - \frac{h^3}{6} \zeta_k^{(3)} + 0(h^4) \quad (10)$$

$$\zeta_{k+1} = \zeta_k + h \zeta'_k + \frac{h^2}{2} \zeta_k^{(2)} + \frac{h^3}{6} \zeta_k^{(3)} + 0(h^4) \quad (11)$$

Par combinaisons linéaires des équations (10-11), on peut obtenir facilement des expressions approchées pour les dérivées premières et secondes en tout point k du maillage. On définit ainsi :

— la dérivée première à droite (ou dérivée première aval)

$$\zeta'_{k+} = \frac{\zeta_{k+1} - \zeta_k}{h} + 0(h) \quad (12)$$

— la dérivée première à gauche (ou dérivée première amont)

$$\zeta'_{k-} = \frac{\zeta_k - \zeta_{k-1}}{h} + 0(h) \quad (13)$$

— la dérivée première centrée

$$\zeta'_k = \frac{\zeta_{k+1} - \zeta_{k-1}}{2h} + 0(h^2) \quad (14)$$

— 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 .

L'estimation de la dérivée seconde est effectuée en remarquant que la somme des équations (10-11) fournit

$$\zeta_{k-1} + \zeta_{k+1} = 2\zeta_k + h^2 \zeta_k^{(2)} + 0(h^4) \quad (15)$$

et donc

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

L'estimation de la dérivée seconde (16) est d'ordre 2 en h .

2.2.2. Erreur de troncature et précision d'une approximation

L'erreur de troncature d'une approximation s'obtient par différence entre la dérivée et son équation discrétisée.

— Erreur de troncature de la dérivée première à droite

$$R'_{k+} = \zeta'_{k+} - \zeta'_k \quad (17)$$

On prend en compte la relation (13)

$$R'_{k+} = \frac{\zeta_{k+1} - \zeta_k}{h} - \zeta'_k \quad (18)$$

et on remplace ζ_{k+1} par son développement en série de Taylor autour du point k (relation 11)

$$R'_{k+} = \frac{1}{h} \left(\zeta_k + h \zeta'_k + \frac{h^2}{2} \zeta_k^{(2)} + \frac{h^3}{6} \zeta_k^{(3)} + 0(h^4) - \zeta_k \right) - \zeta'_k \quad (19)$$

On obtient

$$R'_{k+} = \frac{h}{2} \zeta_k^{(2)} + \frac{h^2}{6} \zeta_k^{(3)} + 0(h^3) \quad (20)$$

La précision de l'approximation est donnée par le premier terme négligé dans l'erreur de troncature (20). Dans le cas de la dérivée première à droite, ce terme est proportionnel à h . L'approximation de la dérivée première par la dérivée première à droite est d'ordre 1 en h .

— le calcul analogue pour la dérivée première à gauche fournit

$$R'_{k-} = -\frac{h}{2} \zeta_k^{(2)} + \frac{h^2}{6} \zeta_k^{(3)} + 0(h^3) \quad (21)$$

Cette approximation est également d'ordre 1.

— la dérivée première centrée conduit à l'erreur de troncature

$$R'_k = \frac{\zeta_{k+1} - \zeta_{k-1}}{2h} - \zeta'_k \quad (22)$$

et on remplace ζ_{k-1} et ζ_{k+1} par leurs développements en série de Taylor autour du point k (relations 10-11)

$$R'_k = \frac{1}{2h} \left(2h\zeta'_k + \frac{h^3}{3}\zeta_k^{(3)} + 0(h^4) \right) - \zeta'_k \quad (23)$$

et

$$R'_k = \zeta'_k + \frac{h^2}{6}\zeta_k^{(3)} + 0(h^3) - \zeta'_k \quad (24)$$

soit

$$R'_k = \frac{h^2}{6}\zeta_k^{(3)} + 0(h^3) \quad (25)$$

L'approximation est d'ordre 2 en h , le premier terme négligé, dans l'erreur de troncature, est proportionnel à h^2 .

— Erreur de troncature de la dérivée seconde

$$R_k^{(2)} = \frac{\zeta_{k-1} - 2\zeta_k + \zeta_{k+1}}{h^2} - \zeta_k^{(2)} \quad (26)$$

Le raisonnement est le même, on remplace ζ_{k-1} et ζ_{k+1} par leurs expressions (10-11)

$$R_k^{(2)} = \frac{1}{h^2} \left(2\zeta_k + h^2\zeta_k^{(2)} + \frac{h^4}{12}\zeta_k^{(4)} + 0(h^6) - 2\zeta_k \right) - \zeta_k^{(2)} \quad (27)$$

soit

$$R_k^{(2)} = \zeta_k^{(2)} + \frac{h^2}{12}\zeta_k^{(4)} + 0(h^4) - \zeta_k^{(2)} \quad (28)$$

et finalement

$$R_k^{(2)} = \frac{h^2}{12}\zeta_k^{(4)} + 0(h^4) \quad (29)$$

L'approximation est d'ordre 2 en h .

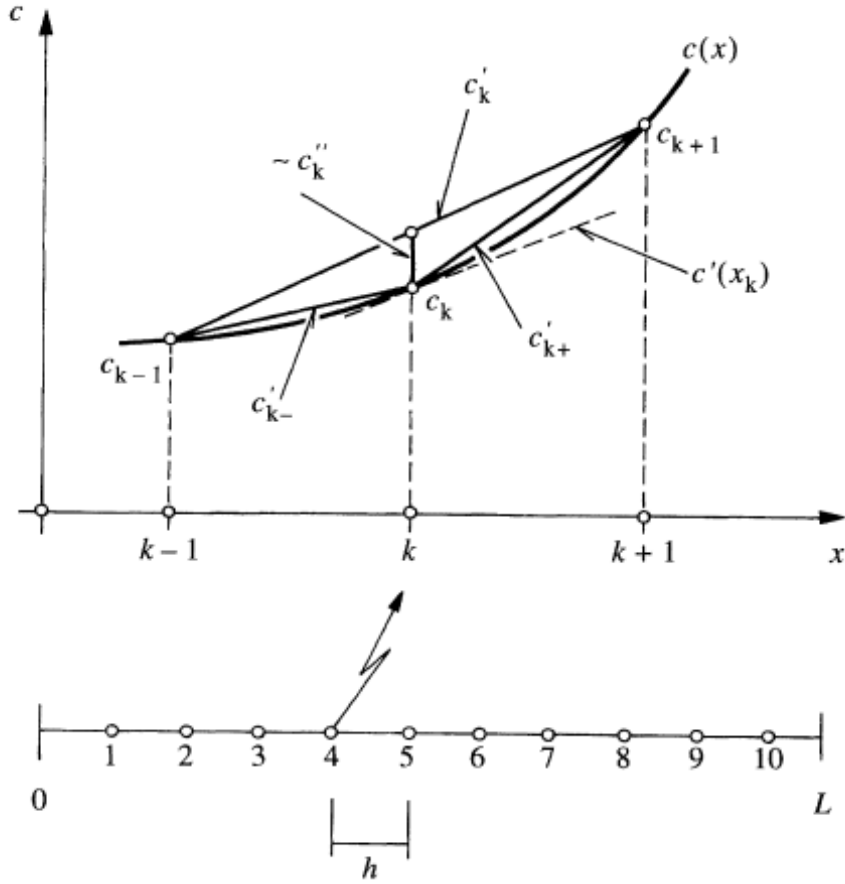


FIGURE 1: Représentation graphique des approximations par différences finies des dérivées premières et seconde, extrait de [14]

2.3. Application à la diffusion 1D linéaire stationnaire

On retiendra, pour le problème de diffusion 1D stationnaire l'équation discrétisée à vérifier en tout point intérieur du maillage

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

En multipliant les deux membres par le facteur $-h^2$ on obtient l'équation

$$-\zeta_{k-1} + 2\zeta_k - \zeta_{k+1} = 0 \quad (31)$$

qui conduit à construire un système linéaire dont la matrice est tridiagonale : la diagonale est composée de 2 et les deux lignes l'entourant composées de -1 . A titre d'exemple, soit à résoudre un problème de type Dirichlet

$$\frac{d^2\zeta(x)}{dx^2} = 0, \quad \zeta(x=0) = \zeta_0, \quad \zeta(x=\ell) = \zeta_\ell \quad (32)$$

dont la solution exacte est une fonction linéaire de x

$$\zeta(x) = \zeta_0 + (\zeta_\ell - \zeta_0) \frac{x}{\ell} \quad (33)$$

On considère $N = 5$ points intérieurs. Le pas de discrétisation h vaut

$$h = \frac{\ell}{N+1} = \frac{\ell}{6} \quad (34)$$

et les points du maillages situés en $\{0, \frac{\ell}{6}, \frac{\ell}{3}, \frac{\ell}{2}, \frac{2\ell}{3}, \frac{5\ell}{6}, \ell\}$. Soit le vecteur des inconnues $\mathbf{X}$ contenant les températures ζ_k aux $N+2$ points du maillage. Les conditions aux limites de Dirichlet sont prises en compte par les équations

$$\zeta_{k=0} - \zeta_0 = 0 \quad (35)$$

$$\zeta_{k=N+1} - \zeta_\ell = 0 \quad (36)$$

soit

$$\zeta_{k=0} = \zeta_0 \quad (37)$$

$$\zeta_6 = \zeta_\ell \quad (38)$$

et les 5 points intérieurs doivent vérifier les équations

$$-\zeta_0 + 2\zeta_1 - \zeta_2 = 0 \quad (39)$$

$$-\zeta_1 + 2\zeta_2 - \zeta_3 = 0 \quad (40)$$

$$-\zeta_2 + 2\zeta_3 - \zeta_4 = 0 \quad (41)$$

$$-\zeta_3 + 2\zeta_4 - \zeta_5 = 0 \quad (42)$$

$$-\zeta_4 + 2\zeta_5 - \zeta_\ell = 0 \quad (43)$$

L'ensemble s'exprime sous la forme d'un système linéaire

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{X} = \mathbf{B} \quad (44)$$

$$\underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 2 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}}_{\mathbf{A}} \cdot \underbrace{\begin{pmatrix} \zeta_0 \\ \zeta_1 \\ \zeta_2 \\ \zeta_3 \\ \zeta_4 \\ \zeta_5 \\ \zeta_6 \end{pmatrix}}_{\mathbf{X}} = \underbrace{\begin{pmatrix} \zeta_0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \zeta_\ell \end{pmatrix}}_{\mathbf{B}} \quad (45)$$

dont l'inversion

$$\mathbf{X} = \mathbf{A}^{-1} \cdot \mathbf{B} \quad (46)$$

fournit la solution numérique

$$\begin{pmatrix} \zeta_0 \\ \zeta_1 \\ \zeta_2 \\ \zeta_3 \\ \zeta_4 \\ \zeta_5 \\ \zeta_6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \zeta_0 \\ \frac{5\zeta_0 + \zeta_\ell}{6} \\ \frac{4\zeta_0 + 2\zeta_\ell}{6} \\ \frac{3\zeta_0 + 3\zeta_\ell}{6} \\ \frac{2\zeta_0 + 4\zeta_\ell}{6} \\ \frac{\zeta_0 + 5\zeta_\ell}{6} \\ \zeta_\ell \end{pmatrix} \quad (47)$$

Ce résultat n'est rien d'autre qu'une interpolation linéaire entre les valeurs imposées ζ_0 , et ζ_ℓ . La solution numérique par différences finies coïncide avec la solution exacte d'un profil linéaire de température.

2.4. Application à l'équation d'advection diffusion 1D linéaire stationnaire

L'équation de diffusion avec transport advectif (ou d'advection - diffusion) s'écrit sous la forme :

$$\frac{\partial \zeta}{\partial t} + \text{div}(\zeta \underline{v}) - \text{div}(D \underline{\text{grad}}(\zeta)) = Q \quad (48)$$

où ζ représente à titre d'exemple la concentration d'une espèce chimique, D le coefficient de diffusion de Fick et $\underline{v}$ le vecteur vitesse. En régime stationnaire, en l'absence de terme source et dans le cas d'un vecteur vitesse uniforme l'équation (48) devient

$$\underline{\text{grad}}(\zeta) \cdot \underline{v} - \text{div}(D \underline{\text{grad}}(\zeta)) = 0 \quad (49)$$

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

$$D \frac{d^2 \zeta}{dx^2} - v \frac{d\zeta}{dx} = 0 \quad (50)$$

Le problème à résoudre s'écrit

$$\begin{aligned} D \frac{d^2 \zeta}{dx^2} - v \frac{d\zeta}{dx} &= 0 \\ \zeta(x=0) &= \zeta_0, \quad \zeta(x=\ell) = \zeta_\ell \end{aligned} \quad (51)$$

avec $\zeta = \zeta(x)$ la concentration dans la couche d'épaisseur ℓ . La discrétisation par différences finies, à l'aide de l'approximation de la dérivée seconde (16) et de la dérivée première centrée (14) de l'équation (50) conduit à l'équation

$$D \left(\frac{\zeta_{k-1} - 2\zeta_k + \zeta_{k+1}}{h^2} \right) - v \left(\frac{\zeta_{k+1} - \zeta_{k-1}}{2h} \right) = 0 \quad (52)$$

On multiplie par $\frac{h^2}{D}$ et factorise par rapport à ζ_{k-1} , ζ_k , ζ_{k+1}

$$\left(-\frac{vh}{2D} - 1 \right) \zeta_{k-1} + 2\zeta_k + \left(\frac{vh}{2D} - 1 \right) \zeta_{k+1} = 0 \quad (53)$$

On introduit P_h le nombre de Péclet associé au pas de discrétisation

$$P_h = \frac{vh}{D} \quad (54)$$

L'équation discrétisée (53) devient

$$-\left(\frac{P_h + 2}{2} \right) \zeta_{k-1} + 2\zeta_k - \left(\frac{-P_h + 2}{2} \right) \zeta_{k+1} = 0 \quad (55)$$

On considère à titre d'exemple $N = 5$ points intérieurs. Le système linéaire correspondant s'écrit

$$\underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\left(\frac{P_h+2}{2}\right) & 2 & -\left(\frac{-P_h+2}{2}\right) & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\left(\frac{P_h+2}{2}\right) & 2 & -\left(\frac{-P_h+2}{2}\right) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\left(\frac{P_h+2}{2}\right) & 2 & -\left(\frac{-P_h+2}{2}\right) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\left(\frac{P_h+2}{2}\right) & 2 & -\left(\frac{-P_h+2}{2}\right) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\left(\frac{P_h+2}{2}\right) & 2 & -\left(\frac{-P_h+2}{2}\right) \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}}_{\mathbf{A}} \cdot \underbrace{\begin{pmatrix} \zeta_0 \\ \zeta_1 \\ \zeta_2 \\ \zeta_3 \\ \zeta_4 \\ \zeta_5 \\ \zeta_6 \end{pmatrix}}_{\mathbf{X}} = \underbrace{\begin{pmatrix} \zeta_0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \zeta_\ell \end{pmatrix}}_{\mathbf{B}} \quad (56)$$

L'inversion de ce système linéaire conduit à des erreurs numériques si $2 < P_h$: des valeurs négatives de concentration sont en effet obtenues et proportionnelles à P_h .

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} \zeta_0 \\ \zeta_1 \\ \zeta_2 \\ \zeta_3 \\ \zeta_4 \\ \zeta_5 \\ \zeta_6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \zeta_0 \\ \frac{\zeta_0(P_h+2)(P_h^4+40P_h^2+80)-\zeta_\ell(P_h-2)^5}{4(P_h^2+12)(3P_h^2+4)} \\ \frac{2\zeta_0(P_h+2)^2(P_h^2+4)+\zeta_\ell(P_h-2)^4}{3P_h^4+40P_h^2+48} \\ \frac{\zeta_0(P_h+2)^3-\zeta_\ell(P_h-2)^3}{4(3P_h^2+4)} \\ \frac{2\zeta_\ell(P_h-2)^2(P_h^2+4)+\zeta_0(P_h+2)^4}{3P_h^4+40P_h^2+48} \\ \frac{\zeta_0(P_h+2)^5-\zeta_\ell(P_h-2)(P_h^4+40P_h^2+80)}{4(P_h^2+12)(3P_h^2+4)} \\ \zeta_\ell \end{pmatrix} \quad (57)$$

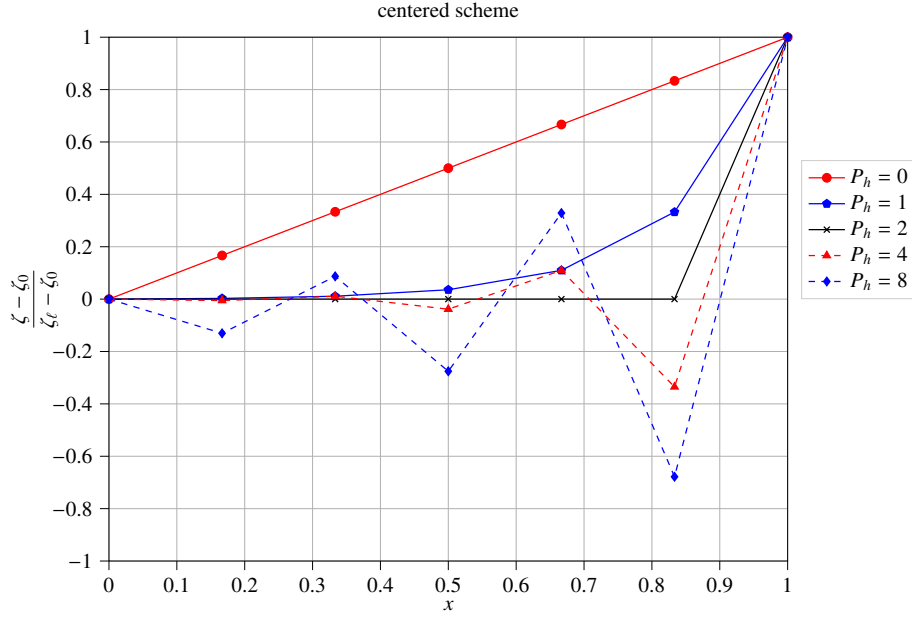


FIGURE 2: Discrétisation par différences finies de l'équation d'advection-diffusion, dérivée première centrée

Ce problème numérique est dû au maillage choisi : il est en effet trop grossier pour représenter correctement la fine couche limite δ en aval de l'écoulement. En d'autres termes, h est trop grand par rapport à δ . Ce dépassement se répercute sous forme d'oscillations dont l'intensité décroît lorsque l'on s'éloigne de la frontière en aval de l'écoulement. Deux possibilités s'offrent alors pour éliminer ce problème. Le remède le plus immédiat consiste à raffiner le maillage, en tout cas près de la frontière concernée, de telle sorte qu'il y ait plusieurs points x_k dans cette couche limite, c'est-à-dire avoir $P_h < 2$. Bien que ce remède soit le seul permettant de représenter correctement la variation de concentration dans la couche limite, on lui préfère souvent une procédure de décentrement en amont de la dérivée première (en anglais upwind scheme) qui permet l'utilisation d'un maillage grossier. Le principe de cette méthode de décentrement consiste à remplacer la dérivée première centrée par la dérivée première à gauche (ou *amont*, dans la direction amont de l'écoulement).

$$D \left(\frac{\zeta_{k-1} - 2\zeta_k + \zeta_{k+1}}{h^2} \right) - v \left(\frac{\zeta_k - \zeta_{k-1}}{h} \right) = 0 \quad (58)$$

soit encore

$$-(P_h + 1)\zeta_{k-1} + (P_h + 2)\zeta_k - \zeta_{k+1} = 0 \quad (59)$$

et le système linéaire

$$\underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -(P_h+1) & P_h+2 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -(P_h+1) & P_h+2 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -(P_h+1) & P_h+2 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -(P_h+1) & P_h+2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -(P_h+1) & P_h+2 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}}_{\mathbf{A}} \cdot \underbrace{\begin{pmatrix} \zeta_0 \\ \zeta_1 \\ \zeta_2 \\ \zeta_3 \\ \zeta_4 \\ \zeta_5 \\ \zeta_6 \end{pmatrix}}_{\mathbf{X}} = \underbrace{\begin{pmatrix} \zeta_0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \zeta_\ell \end{pmatrix}}_{\mathbf{B}} \quad (60)$$

On constate alors que le nombre de Péclet ne multiplie plus la concentration ζ_ℓ imposée en aval du domaine. Les coefficients de ζ_ℓ ne sont plus négatifs pour de fortes valeurs de nombre de Péclet P_h , et ils n'augmentent plus (en module) proportionnellement à P_h .

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} \zeta_0 \\ \zeta_1 \\ \zeta_2 \\ \zeta_3 \\ \zeta_4 \\ \zeta_5 \\ \zeta_6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \zeta_0 \\ \frac{\zeta_\ell + \zeta_0(P_h+1)(P_h(P_h(P_h+5)+10)+10)+5}{(P_h+2)(P_h^2+P_h+1)(P_h(P_h+3)+3)} \\ \frac{\zeta_\ell + \zeta_0(P_h(P_h+2)+2)(P_h+1)^2}{(P_h^2+P_h+1)(P_h(P_h+3)+3)} \\ \frac{\zeta_\ell + \zeta_0(P_h+1)^3}{(P_h+2)(P_h^2+P_h+1)} \\ \frac{\zeta_0(P_h+1)^4 + \zeta_\ell(P_h(P_h+2)+2)}{(P_h^2+P_h+1)(P_h(P_h+3)+3)} \\ \frac{\zeta_0(P_h+1)^5 + \zeta_\ell(P_h(P_h(P_h+5)+10)+10)+5}{(P_h+2)(P_h^2+P_h+1)(P_h(P_h+3)+3)} \\ \zeta_\ell \end{pmatrix} \quad (61)$$

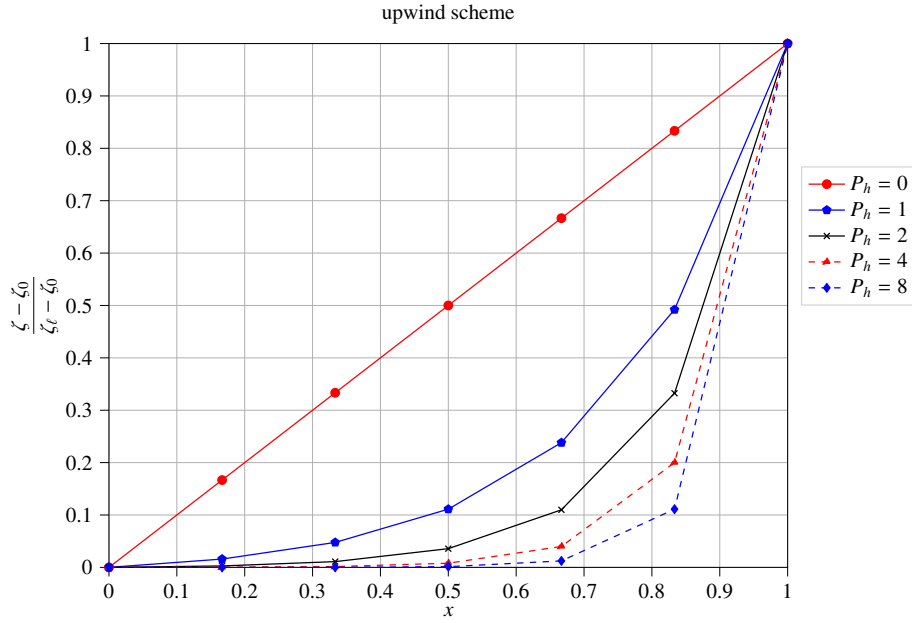


FIGURE 3: Discrétisation par différences finies de l'équation d'advection-diffusion, dérivée première amont

Ce problème sera étudié en détail en travaux dirigés. On montre que l'emploi d'une dérivée à gauche, ou en amont, dans l'équation d'advection-diffusion permet effectivement de s'affranchir des oscillations observées vers la frontière en aval mais au prix de l'introduction d'une diffusion numérique. En d'autres termes, 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^* donnée par :

$$D^* = D + \frac{h v}{2} \quad (62)$$

ou encore

$$D^* = D \left(1 + \frac{P_h}{2} \right) \quad (63)$$

On note en effet que la différence entre les dérivées premières amont et centrée est proportionnelle à la dérivée seconde

$$\zeta'_{k-} - \zeta'_k = \frac{\zeta_k - \zeta_{k-1}}{h} - \frac{\zeta_{k+1} - \zeta_{k-1}}{2h} = \frac{-\zeta_{k-1} + 2\zeta_k - \zeta_{k+1}}{2h} \quad (64)$$

soit encore

$$\zeta'_{k-} - \zeta'_k = -\frac{h}{2} \left(\frac{\zeta_{k-1} - 2\zeta_k + \zeta_{k+1}}{h^2} \right) \quad (65)$$

et

$$\zeta'_{k-} - \zeta'_k = -\frac{h}{2} \zeta_k^{(2)} \quad (66)$$

Remplacer la dérivée première centrée par la dérivée première amont revient en fait à modifier le coefficient de diffusion, celui ci est augmenté *artificiellement*.

2.5. Application à la diffusion 2D linéaire stationnaire

On se place en coordonnées cartésiennes et on cherche à résoudre l'équation de Laplace pour un problème plan

$$\Delta \zeta = \frac{\partial^2 \zeta}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \zeta}{\partial y^2} = 0 \quad (67)$$

Soit un maillage régulier de N_x points suivant x et N_y points suivant y et les pas de discrétisation respectifs Δx et Δy . L'approximation par différences finies de l'équation (67) autour du point $(x_i = i \Delta x, y_j = j \Delta y)$, d'inconnue $\zeta_{i,j}$ s'écrit

$$\frac{\zeta_{i-1,j} - 2\zeta_{i,j} + \zeta_{i+1,j}}{\Delta x^2} + \frac{\zeta_{i,j-1} - 2\zeta_{i,j} + \zeta_{i,j+1}}{\Delta y^2} = 0 \quad (68)$$

La discrétisation par différences finies en $1D$ utilise 3 points, le point et ses deux voisins, le long d'une ligne, et conduit à construire une matrice tridiagonale. En $2D$ on rajoute 2 points le long d'une ligne perpendiculaire, on utilise donc 5 points. Cela qui conduit à construire une matrice penta-diagonale (la diagonale et quatre lignes l'entourant) L'erreur de troncature, ou d'approximation, données par les premiers termes négligés dans le développement, est d'ordre $O(\Delta x^2, \Delta y^2)$

$$\text{Erreur Troncature} = \frac{1}{12} \left(\frac{\partial^2 \zeta}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \zeta}{\partial y^2} \right) + O(\Delta x^4, \Delta y^4) \quad (69)$$

3. Méthode des différences finies appliquée à la diffusion en régime transitoire

3.1. Problème posé

Considérons un pas d'espace Δx , un pas de temps Δt , et une grille constituée des points M_j^n de coordonnées $(j\Delta x, n\Delta t)$ dans le plan (x, t) . Δx et Δt sont destinés à tendre vers zéro en restant du même ordre. $\Delta t = 0(\Delta x)$. On note

$$\zeta_j^n = \zeta(x_j, t_n) = \zeta(j\Delta x, n\Delta t) \quad (70)$$

Supposons donc que les valeurs discrètes de la température ζ_j^n soient connues pour tous les indices d'espace j , et pour les instants 0 (donnée initiale), $1, 2, \dots, n-1, n$: nous cherchons maintenant les ζ_j^{n+1} solutions de l'équation de la chaleur $1D$:

$$\frac{\partial \zeta}{\partial t} - \frac{\partial^2 \zeta}{\partial x^2} = 0 \quad (71)$$

et vérifiant les conditions aux limites.

3.2. Développements en série de Taylor

Les développements en série de Taylor de la fonction $\zeta(x, t)$ au voisinage de $x_j = j\Delta x$, et $t_n = n\Delta t$ s'écrivent :

$$\zeta_{j+1}^n = \zeta_j^n + \Delta x \left(\frac{\partial \zeta}{\partial x} \right)_j^n + \frac{1}{2} \Delta x^2 \left(\frac{\partial^2 \zeta}{\partial x^2} \right)_j^n + \frac{1}{6} \Delta x^3 \left(\frac{\partial^3 \zeta}{\partial x^3} \right)_j^n + 0(\Delta x^4) \quad (72)$$

$$\zeta_{j-1}^n = \zeta_j^n - \Delta x \left(\frac{\partial \zeta}{\partial x} \right)_j^n + \frac{1}{2} \Delta x^2 \left(\frac{\partial^2 \zeta}{\partial x^2} \right)_j^n - \frac{1}{6} \Delta x^3 \left(\frac{\partial^3 \zeta}{\partial x^3} \right)_j^n + 0(\Delta x^4) \quad (73)$$

$$\zeta_j^{n+1} = \zeta_j^n + \Delta t \left(\frac{\partial \zeta}{\partial t} \right)_j^n + \frac{1}{2} \Delta t^2 \left(\frac{\partial^2 \zeta}{\partial t^2} \right)_j^n + \frac{1}{6} \Delta t^3 \left(\frac{\partial^3 \zeta}{\partial t^3} \right)_j^n + 0(\Delta t^4) \quad (74)$$

$$\zeta_j^{n-1} = \zeta_j^n - \Delta t \left(\frac{\partial \zeta}{\partial t} \right)_j^n + \frac{1}{2} \Delta t^2 \left(\frac{\partial^2 \zeta}{\partial t^2} \right)_j^n - \frac{1}{6} \Delta t^3 \left(\frac{\partial^3 \zeta}{\partial t^3} \right)_j^n + 0(\Delta t^4) \quad (75)$$

3.3. Schémas explicite et implicite

Cette présentation suit en détail celle de la référence [2]. Le schéma explicite est obtenu

- en prenant comme **référence le point connu** M_j^n
- en utilisant la dérivée différence finie centrée en espace pour l'approximation de la dérivée seconde en espace à l'instant n

$$\left(\frac{\partial^2 \zeta}{\partial x^2}\right)_j^n = \frac{\zeta_{j-1}^n - 2\zeta_j^n + \zeta_{j+1}^n}{\Delta x^2} + 0[\Delta x^2] \quad (76)$$

- et la différence finie décentrée à droite (soit la dérivée première à droite) pour l'approximation de la dérivée première en temps

$$\left(\frac{\partial \zeta}{\partial t}\right)_j^n = \frac{\zeta_j^{n+1} - \zeta_j^n}{\Delta t} + 0[\Delta t] \quad (77)$$

Cette approximation est seulement du premier ordre en Δt , alors que l'approximation de la dérivée seconde en espace est du deuxième ordre en Δx . L'équation aux dérivées partielles initiale s'exprime alors sous la forme discrétisée :

$$\left(\frac{\partial \zeta}{\partial t}\right)_j^n - \left(\frac{\partial^2 \zeta}{\partial x^2}\right)_j^n = \frac{\zeta_j^{n+1} - \zeta_j^n}{\Delta t} - \frac{\zeta_{j-1}^n + \zeta_{j+1}^n - 2\zeta_j^n}{\Delta x^2} = 0 \quad (78)$$

qui peut encore s'écrire, en isolant l'inconnue ζ_j^{n+1} :

$$\zeta_j^{n+1} = \zeta_j^n + \frac{\Delta t}{\Delta x^2} (\zeta_{j-1}^n + \zeta_{j+1}^n - 2\zeta_j^n) \quad (79)$$

C'est le **schéma explicite**.

Le schéma implicite est obtenu

- en prenant comme **référence le point inconnu** M_j^{n+1}
- en utilisant la dérivée différence finie centrée en espace pour l'approximation de la dérivée seconde en espace à l'instant $n + 1$

$$\left(\frac{\partial^2 \zeta}{\partial x^2}\right)_j^{n+1} = \frac{\zeta_{j-1}^{n+1} - 2\zeta_j^{n+1} + \zeta_{j+1}^{n+1}}{\Delta x^2} + 0[\Delta x^2] \quad (80)$$

- et la différence finie décentrée à gauche (soit la dérivée première à gauche) pour l'approximation de la dérivée première en temps

$$\left(\frac{\partial \zeta}{\partial t}\right)_j^{n+1} = \frac{\zeta_j^{n+1} - \zeta_j^n}{\Delta t} + 0[\Delta t] \quad (81)$$

L'équation aux dérivées partielles initiale s'exprime alors sous la forme discrétisée :

$$\left(\frac{\partial \zeta}{\partial t}\right)_j^{n+1} - \left(\frac{\partial^2 \zeta}{\partial x^2}\right)_j^{n+1} = \frac{\zeta_j^{n+1} - \zeta_j^n}{\Delta t} - \frac{\zeta_{j-1}^{n+1} + \zeta_{j+1}^{n+1} - 2\zeta_j^{n+1}}{\Delta x^2} = 0 \quad (82)$$

En séparant les inconnues ζ_{j-1}^{n+1} , ζ_j^{n+1} , ζ_{j+1}^{n+1} des données ζ_j^n

$$\zeta_j^{n+1} \left(1 + \frac{2\Delta t}{\Delta x^2}\right) - \frac{\Delta t}{\Delta x^2} (\zeta_{j-1}^{n+1} + \zeta_{j+1}^{n+1}) = \zeta_j^n \quad (83)$$

C'est le **schéma implicite**. Il est plus complexe et plus coûteux à mettre en oeuvre que le schéma explicite. Ce schéma est, lui aussi, précis au premier ordre, car il approche au premier ordre près en $(\Delta x, \Delta t)$ (au second ordre en Δx , au premier ordre en Δt), l'équation de la chaleur au point M_j^{n+1} . On conclut ci dessous en reprenant les commentaires de [2]

- Le schéma (79) est explicite en ce sens que, pour calculer ζ^{n+1} en un point j il suffit de remplacer *explicitement* les quantités figurant au second membre de (79) par leurs valeurs (connues et stockées en mémoire).
- A l'inverse, avec le schéma (83), 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 (83) en un système linéaire qu'il s'agit de résoudre. Et cela coûte cher
- Alors, pourquoi donc remplacer le schéma (79) par un schéma (83) qui n'est pas plus précis mais dont l'emploi est plus onéreux ? Pour une raison de **stabilité** qui apparaîtra dans la section (3.5).

3.4. Schéma de Crank-Nicolson et θ -méthode

On peut encore faire une moyenne entre les schémas explicite et implicite, ce qui donne le *schéma de Crank-Nicolson* :

$$\left(\frac{\partial \zeta}{\partial t}\right)_j^n - \left(\frac{\partial^2 \zeta}{\partial x^2}\right)_j^n = \frac{\zeta_j^{n+1} - \zeta_j^n}{\Delta t} - \frac{\zeta_{j-1}^{n+1} + \zeta_{j+1}^{n+1} - 2\zeta_j^{n+1}}{2\Delta x^2} - \frac{\zeta_{j-1}^n + \zeta_{j+1}^n - 2\zeta_j^n}{2\Delta x^2} = 0 \quad (84)$$

Lui aussi est implicite, et donc aussi coûteux que le schéma (83) mais il est *précis au second ordre* : on vérifiera en effet aisément qu'il approche à 0 ($\Delta x^2, \Delta t^2$) près l'équation de la chaleur au point $(j\Delta x, (n + \frac{1}{2})\Delta t)$ (point milieu entre M_j^n et M_j^{n+1} qui ne fait pas partie de la grille considérée). En effet, la dérivée en temps est dans ce cas la dérivée centrée du point milieu, et donc d'ordre 2 en Δt

Une autre méthode, dite θ -méthode consiste à faire la pondération :

$$\left(\frac{\partial \zeta}{\partial t}\right)_j^n - \left(\frac{\partial^2 \zeta}{\partial x^2}\right)_j^n = \frac{\zeta_j^{n+1} - \zeta_j^n}{\Delta t} - \theta \left(\frac{\zeta_{j-1}^{n+1} + \zeta_{j+1}^{n+1} - 2\zeta_j^{n+1}}{\Delta x^2} \right) - (1 - \theta) \left(\frac{\zeta_{j-1}^n + \zeta_{j+1}^n - 2\zeta_j^n}{\Delta x^2} \right) = 0 \quad (85)$$

C'est le schéma dit également explicite-implicite. En multipliant par le pas de temps Δt , le schéma implicite-explicite peut également s'écrire :

$$\zeta_j^{n+1} \left(1 + 2\theta \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \right) - \theta \frac{\Delta t}{\Delta x^2} (\zeta_{j-1}^{n+1} + \zeta_{j+1}^{n+1}) = \zeta_j^n \left(1 + 2(1 - \theta) \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \right) + (1 - \theta) \frac{\Delta t}{\Delta x^2} (\zeta_{j-1}^n + \zeta_{j+1}^n) \quad (86)$$

3.5. Analyse de la stabilité des schémas explicite et implicite pour l'équation de la chaleur

[2] p. 61, [3] p. 54

3.5.1. Notions de convergence et consistance

Le schéma est convergent si la solution du problème discrétisé tend, en un certain sens, vers la solution du problème aux dérivées partielles, lorsque Δx et Δt tendent simultanément vers zéro. En pratique, pour Δx et Δt assez petits, on estime que l'on est *quasiment à la limite*, et qu'on a *résolu numériquement le problème*. Nous n'aurons de chance d'obtenir la convergence du schéma que si nous approchons correctement le problème continu, i.e. si nous remplaçons les dérivées partielles par des différences finies effectivement voisines. La qualité de cette consistance s'appelle la précision du schéma. Nous supposons Δx et Δt du même ordre. Examinons les erreurs de troncature de différents schémas ([3] p. 52).

$$L(\zeta) = \frac{\partial \zeta}{\partial t} - \frac{\partial^2 \zeta}{\partial x^2} \quad (87)$$

Dans le cas du schéma explicite :

$$L_{\Delta}(\zeta)^{\text{expl}} = \frac{\zeta_j^{n+1} - \zeta_j^n}{\Delta t} - \frac{\zeta_{j-1}^n + \zeta_{j+1}^n - 2\zeta_j^n}{\Delta x^2} \quad (88)$$

L'erreur de troncature s'obtient par différence entre l'équation initiale et l'équation discrétisée :

$$R_{\Delta}(\zeta)^{\text{expl}} = L_{\Delta}(\zeta)^{\text{expl}} - L(\zeta) \quad (89)$$

soit :

$$R_{\Delta}(\zeta)^{\text{expl}} = \left(\frac{\zeta_j^{n+1} - \zeta_j^n}{\Delta t} - \frac{\partial \zeta}{\partial t} \right) - \left(\frac{\zeta_{j-1}^n + \zeta_{j+1}^n - 2\zeta_j^n}{\Delta x^2} - \frac{\partial^2 \zeta}{\partial x^2} \right) \quad (90)$$

Le développement en série de Taylor (74) fournit

$$\zeta_j^{n+1} - \zeta_j^n = \Delta t \left(\frac{\partial \zeta}{\partial t} \right)_j^n + \frac{1}{2} \Delta t^2 \left(\frac{\partial^2 \zeta}{\partial t^2} \right)_j^n + \frac{1}{6} \Delta t^3 \left(\frac{\partial^3 \zeta}{\partial t^3} \right)_j^n + O(\Delta t^4) \quad (91)$$

puis

$$\frac{\zeta_j^{n+1} - \zeta_j^n}{\Delta t} = \left(\frac{\partial \zeta}{\partial t} \right)_j^n + \frac{1}{2} \Delta t \left(\frac{\partial^2 \zeta}{\partial t^2} \right)_j^n + \frac{1}{6} \Delta t^2 \left(\frac{\partial^3 \zeta}{\partial t^3} \right)_j^n + O(\Delta t^3) \quad (92)$$

et

$$\frac{\zeta_j^{n+1} - \zeta_j^n}{\Delta t} - \left(\frac{\partial \zeta}{\partial t} \right)_j^n = \frac{1}{2} \Delta t \left(\frac{\partial^2 \zeta}{\partial t^2} \right)_j^n + \frac{1}{6} \Delta t^2 \left(\frac{\partial^3 \zeta}{\partial t^3} \right)_j^n + O(\Delta t^3) \quad (93)$$

Le premier terme négligé est proportionnel à Δt . L'approximation de la dérivée première en temps par la dérivée à droite est bien du premier ordre : il reste un terme proportionnel à Δt dans l'erreur de troncature. De même, pour la dérivée seconde en espace

$$\zeta_{j-1}^n + \zeta_{j+1}^n - 2\zeta_j^n = \Delta x^2 \left(\frac{\partial^2 \zeta}{\partial x^2} \right)_j^n + \frac{2}{24} \Delta x^4 \left(\frac{\partial^4 \zeta}{\partial x^4} \right)_j^n + O(\Delta x^6) \quad (94)$$

puis :

$$\frac{\zeta_{j-1}^n + \zeta_{j+1}^n - 2\zeta_j^n}{\Delta x^2} - \left(\frac{\partial^2 \zeta}{\partial x^2} \right)_j^n = \frac{1}{12} \Delta x^2 \left(\frac{\partial^4 \zeta}{\partial x^4} \right)_j^n + O(\Delta x^4) \quad (95)$$

L'approximation de la dérivée seconde en espace est bien du second ordre : il reste un terme proportionnel à Δx^2 dans l'erreur de troncature. Finalement l'erreur de troncature du schéma explicite s'écrit :

$$R_{\Delta}(\zeta)^{\text{expl}} = \frac{1}{2} \Delta t \left(\frac{\partial^2 \zeta}{\partial t^2} \right)_j^n - \frac{1}{12} \Delta x^2 \left(\frac{\partial^4 \zeta}{\partial x^4} \right)_j^n + O(\Delta t^2) + O(\Delta x^4) \quad (96)$$

Lorsque Δt et Δx tendent vers zéro, il en est de même pour l'erreur de troncature : le schéma explicite est donc consistant avec l'équation aux dérivées partielles initiale.

3.5.2. Notion de stabilité

[3] p. 54

Par définition, on dit qu'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.

3.5.3. Stabilité des schémas explicite et implicite

Référence : [4] p. 68.

On rappelle le schéma explicite

$$\zeta_j^{n+1} = \zeta_j^n + \frac{\Delta t}{\Delta x^2} (\zeta_{j-1}^n - 2\zeta_j^n + \zeta_{j+1}^n) \quad (97)$$

On introduit le nombre de Fourier F_o associé aux pas de temps Δt et d'espace Δx

$$F_o = \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \quad (98)$$

qui permet de réécrire (97) sous la forme

$$\zeta_j^{n+1} = \zeta_j^n + F_o (\zeta_{j-1}^n - 2\zeta_j^n + \zeta_{j+1}^n) \quad (99)$$

ou encore

$$\zeta_j^{n+1} = F_o \zeta_{j-1}^n + (1 - 2F_o) \zeta_j^n + F_o \zeta_{j+1}^n \quad (100)$$

Ce système peut s'exprimer sous forme matricielle :

$$\zeta^{n+1} = \mathbf{A} \cdot \zeta^n \quad (101)$$

où la matrice $\mathbf{A}$ est tridiagonale, avec les termes diagonaux

$$A_{i,i} = 1 - 2F_o \quad (102)$$

et les termes non diagonaux (ligne $i + 1$, colonne i ou ligne i colonne $i + 1$) égaux à F_o

$$A_{i,i+1} = A_{i+1,i} = F_o \quad (103)$$

Les vecteurs ζ^n , ζ^{n+1} contiennent les inconnues aux points de discrétisation, aux instants n (supposé connu) et $n + 1$.

Conformément à la pratique courante, on considère un schéma à deux instants, n et $n + 1$ et l'algorithme explicite doit contenir les étapes suivantes :

- définition des données du problème
 - discrétisation spatiale : nombre de points de discrétisation ($N_x + 2$ points, bords compris), le pas d'espace $\Delta x = \frac{1}{N_x + 1}$, le nombre de pas d'espace est $N_x + 1$ (on rappelle que le problème traité est adimensionnel, la longueur réduite de la structure est égale à 1)
 - définition de l'instant final t de l'arrêt du calcul transitoire
 - discrétisation temporelle : N_t nombre de pas de temps $\Delta t = \frac{t}{N_t}$
 - on en déduit le nombre de Fourier $F_o = \frac{\Delta t}{\Delta x^2}$
- initialisation du vecteur des inconnues : à l'instant $t = 0$, le vecteur ζ^0 est connu et doit être défini,
- construction de la matrice tridiagonale $\mathbf{A}$ (la prise en compte des conditions aux limites n'est pas détaillée)

$$A_{i,i} = 1 - 2F_o, \quad A_{i,i+1} = A_{i+1,i} = F_o \quad (104)$$

- algorithme transitoire
 - initialisation à $t = 0$, $\mathbf{X} = \zeta^0$
 - les vecteurs $\mathbf{X}$ et $\mathbf{Y}$ représentent respectivement ζ^n et ζ^{n+1} , **faire N_t fois les opérations successives (105) et (106)**

$$\mathbf{Y} = \mathbf{A} \cdot \mathbf{X} \quad (105)$$

- réactualisation

$$\mathbf{X} = \mathbf{Y} \quad (106)$$

Dans le cas de l'algorithme implicite, l'équation discrétisée s'écrit

$$\zeta_j^{n+1} = \zeta_j^n + \frac{\Delta t}{\Delta x^2} (\zeta_{j-1}^{n+1} - 2\zeta_j^{n+1} + \zeta_{j+1}^{n+1}) \quad (107)$$

ou encore

$$-F_o \zeta_{j-1}^{n+1} + (1 + 2F_o) \zeta_j^{n+1} - F_o \zeta_{j+1}^{n+1} = \zeta_j^n \quad (108)$$

Ce système peut s'exprimer sous la forme matricielle :

$$\mathbf{A} \cdot \zeta^{n+1} = \zeta^n \quad (109)$$

où les termes diagonaux de la matrice $\mathbf{A}$ sont égaux à

$$A_{i,i} = 1 + 2F_o \quad (110)$$

et les termes non diagonaux (ligne $i + 1$, colonne i ou ligne i colonne $i + 1$) égaux à $-F_o$

$$A_{i,i+1} = A_{i+1,i} = -F_o \quad (111)$$

L'algorithme implicite doit contenir les étapes suivantes :

- définition des données du problème
 - discrétisation spatiale : nombre de points de discrétisation ($N_x + 2$ points, bords compris), le pas d'espace $\Delta x = \frac{1}{N_x + 1}$, le nombre de pas d'espace est $N_x + 1$ (on rappelle que le problème traité est adimensionnel, la longueur réduite de la structure est égale à 1)
 - définition de l'instant final t de l'arrêt du calcul transitoire
 - discrétisation temporelle : N_t nombre de pas de temps $\Delta t = \frac{t}{N_t}$
 - on en déduit le nombre de Fourier $F_o = \frac{\Delta t}{\Delta x^2}$
- initialisation du vecteur des inconnues : à l'instant $t = 0$, le vecteur ζ^0 est connu et doit être défini,
- construction de la matrice tridiagonale $\mathbf{A}$ (la prise en compte des conditions aux limites n'est pas détaillée)

$$A_{i,i} = 1 + 2F_o, \quad A_{i,i+1} = A_{i+1,i} = -F_o \quad (112)$$

- algorithme transitoire
 - initialisation à $t = 0$, $\mathbf{X} = \zeta^0$
 - les vecteurs $\mathbf{X}$ et $\mathbf{Y}$ représentent respectivement ζ^n et ζ^{n+1} , **faire N_t fois les opérations successives (113) et (114)**

$$\mathbf{Y} = \mathbf{A}^{-1} \cdot \mathbf{X} \quad (113)$$

- réactualisation

$$\mathbf{X} = \mathbf{Y} \quad (114)$$

On va étudier la stabilité des schémas explicite et implicite sur le problème adimensionnel suivant, $0 \leq x' \leq 1$, $0 < t'$

$$\frac{\partial \omega}{\partial t'} = \frac{\partial^2 \omega}{\partial x'^2} \quad (115)$$

$$\omega(x', t' = 0) = 1, \quad \omega(0, t' > 0) = \omega(1, t' > 0) = 0 \quad (116)$$

dont la solution exacte s'exprime sous la forme d'une série

$$\omega(x', t') = \frac{4}{\pi} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{2k+1} \sin((2k+1)\pi x') \exp(-(2k+1)^2 \pi^2 t') \quad (117)$$

avec

$$\omega = \frac{\zeta - \zeta_0}{\zeta_\ell - \zeta_0} \quad (118)$$

$$x' = \frac{x}{\ell}, \quad t' = \frac{t}{\tau_\ell} \quad (119)$$

où τ_ℓ est le temps caractéristique de diffusion, et D la diffusivité

$$\tau_\ell = \frac{\ell^2}{D}, \quad D = \frac{\lambda}{\rho C} \quad (120)$$

La solution adimensionnelle (117) est représentée sur la figure (5) à différents instants réduits

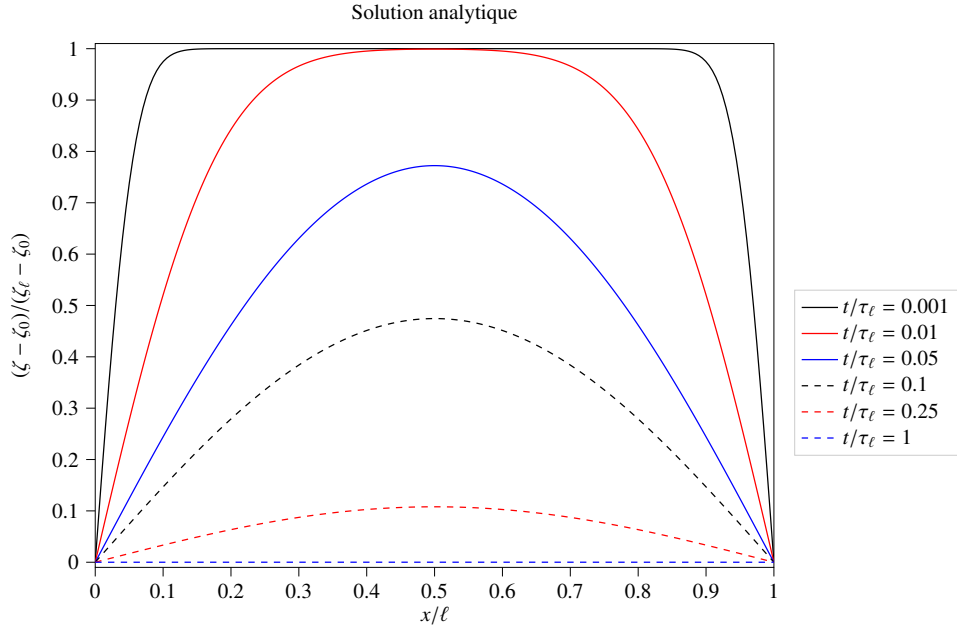


FIGURE 4: Solution analytique pour le problème de diffusion transitoire linéaire.

Dans ce qui suit, on notera plus simplement x , t et ζ respectivement les variables réduites et la fonction réduite. On oublie cette solution exacte et on va essayer de calculer cette solution par différences finies. On observe numériquement que

- le schéma explicite est instable pour $\frac{1}{2} < F_o$
- le schéma implicite est stable quelque soit le nombre de Fourier F_o

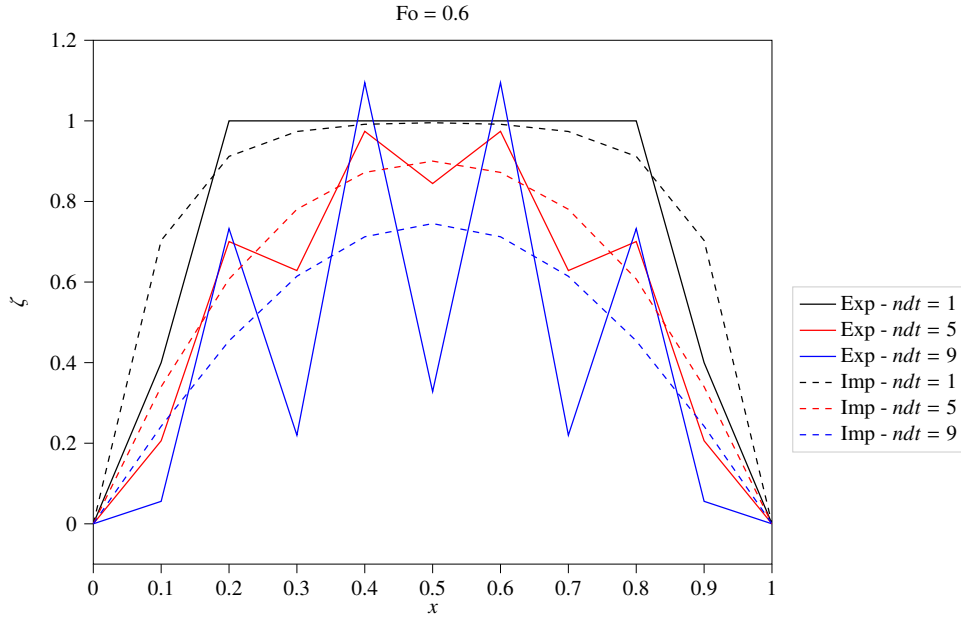


FIGURE 5: Solution *MDF*, algorithmes explicite et implicite, pour le problème de diffusion transitoire linéaire, $\Delta x = 0.1$, $F_o = 0.6$, aux instants $t = \Delta t$, $t = 5 \Delta t$, $t = 9 \Delta t$

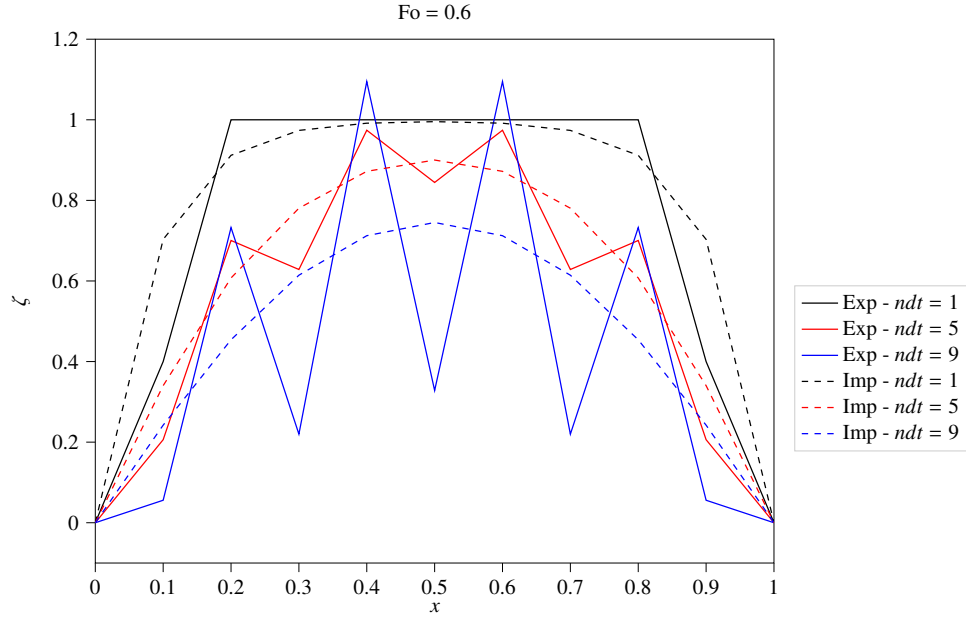


FIGURE 6: Solution *MDF*, algorithmes explicite et implicite, pour le problème de diffusion transitoire linéaire, $N + 1 = 10$, $\Delta x = 0.1$, $F_o = 0.6$, aux instants $t = \Delta t$, $t = 5 \Delta t$, $t = 9 \Delta t$. Contrairement au schéma implicite, le schéma explicite est instable, les erreurs d'arrondi s'amplifient.

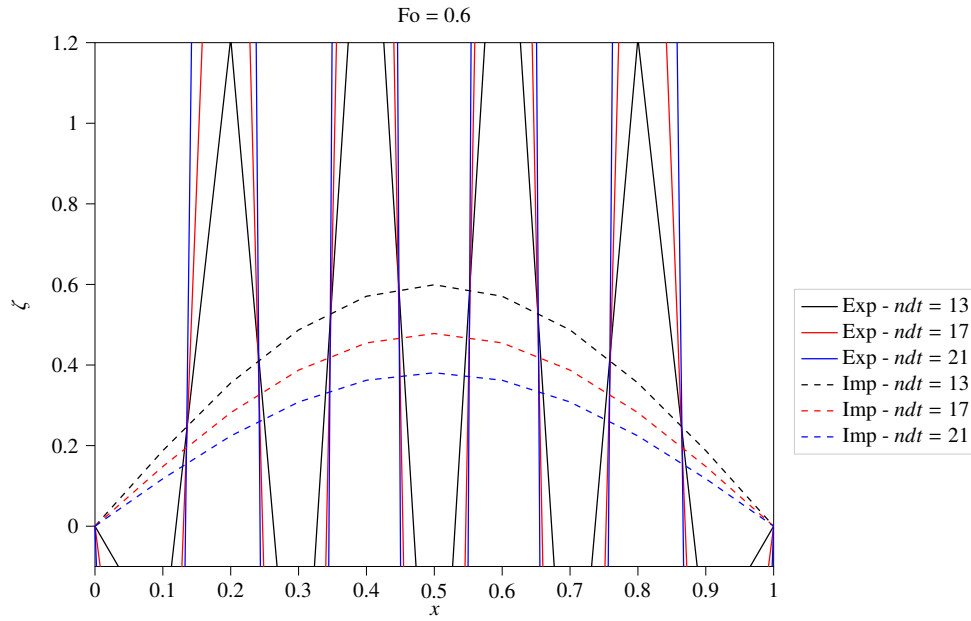


FIGURE 7: Solution *MDF*, algorithmes explicite et implicite, pour le problème de diffusion transitoire linéaire, $N + 1 = 10$, $\Delta x = 0.1$, $F_o = 0.6$, aux instants $t = 13 \Delta t$, $t = 17 \Delta t$, $t = 21 \Delta t$. Contrairement au schéma implicite, le schéma explicite est instable, les erreurs d'arrondi s'amplifient.

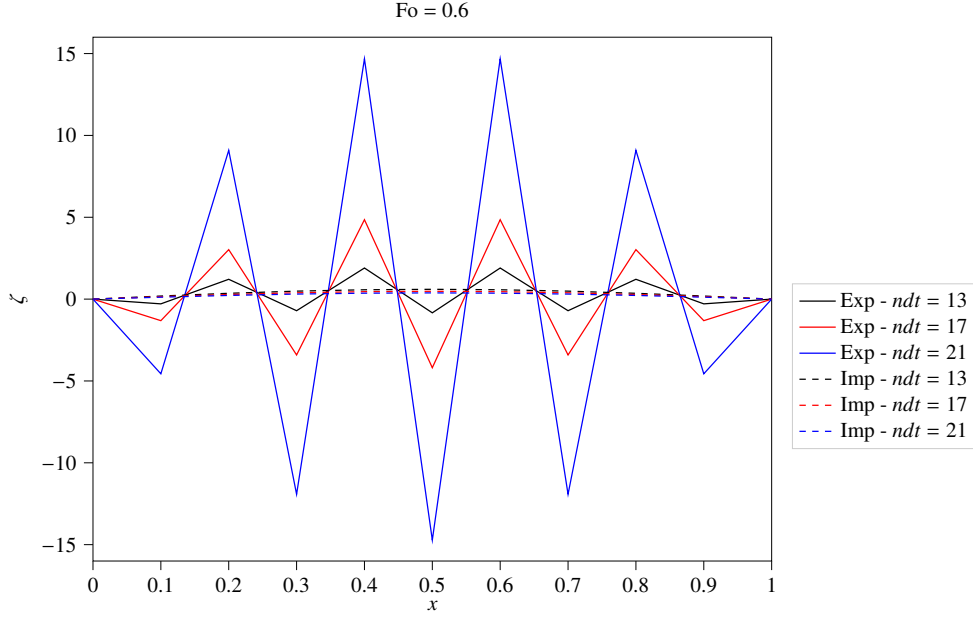


FIGURE 8: Solution *MDF*, algorithmes explicite et implicite, pour le problème de diffusion transitoire linéaire, $N + 1 = 10$, $\Delta x = 0.1$, $F_o = 0.6$, aux instants $t = 13 \Delta t$, $t = 17 \Delta t$, $t = 21 \Delta t$. Contrairement au schéma implicite, le schéma explicite est instable, les erreurs d'arrondi s'amplifient.

Une séance de travaux dirigés est consacrée à l'étude détaillée de ce problème. On rappelle que ces schémas ont la même précision, ils ne diffèrent que par leur stabilité. De manière plus générale on montre que

- le **schéma explicite est conditionnellement stable**, c.a.d. que la stabilité dépend du nombre de Fourier (stabilité pour $F_o \leq \frac{1}{2}$)
- le **schéma implicite inconditionnellement stable**

Ce résultat peut être démontré théoriquement par analyse de Fourier.

3.6. Analyse de Fourier et étude de stabilité

Cette méthode consiste tout d'abord à écrire les températures ζ_j^n au temps n et noeuds j , en termes de composantes de Fourier, C_α^n . Considérons artificiellement que l'espace $(0, 1)$ et la courbe $\zeta(x, t)$ qui s'y inscrit se succèdent à eux-mêmes un nombre infini de fois et sans discontinuité. On est alors en présence d'une courbe périodique (de période spatiale $T = 1$) et pour laquelle on peut écrire, à chaque instant t , le développement en série de Fourier complexe :

$$\zeta(x, t) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \alpha_m(t) \exp(i\omega_m x) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \alpha_m(t) \exp(i 2 \pi m x) \quad (121)$$

avec

$$\omega_m = 2 \pi m \quad (122)$$

Exprimons le développement en série de Fourier de la solution du problème discrétisé

- au point M_j^n

$$\zeta(x_j = j\Delta x, t_n = n\Delta t) = \zeta_j^n = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \alpha_m(t_n) \exp(i 2 \pi m j \Delta x) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \alpha_m^n \exp(i 2 \pi m j \Delta x) \quad (123)$$

- aux points M_j^n et M_j^{n+1}

$$\zeta_j^n = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \alpha_m^n \exp(i 2 \pi m j \Delta x), \quad \zeta_j^{n+1} = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \alpha_m^{n+1} \exp(i 2 \pi m j \Delta x) \quad (124)$$

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

$$\zeta_{j-1}^n = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \alpha_m^n \exp(i 2 \pi m (j-1) \Delta x), \quad \zeta_{j-1}^{n+1} = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \alpha_m^{n+1} \exp(i 2 \pi m (j-1) \Delta x) \quad (125)$$

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

$$\zeta_{j+1}^n = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \alpha_m^n \exp(i 2 \pi m (j+1) \Delta x), \quad \zeta_{j+1}^{n+1} = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \alpha_m^{n+1} \exp(i 2 \pi m (j+1) \Delta x) \quad (126)$$

Le schéma explicite (100) s'écrit en fonction du développement en série de Fourier complexe de la fonction ζ sous la forme :

$$\begin{aligned} & \sum_{m=-\infty}^{\infty} \alpha_m^{n+1} \exp(i 2 \pi m j \Delta x) - F_o \sum_{m=-\infty}^{\infty} \alpha_m^n \exp(i 2 \pi m (j-1) \Delta x) \\ & - (1 - 2F_o) \sum_{m=-\infty}^{\infty} \alpha_m^n \exp(i 2 \pi m j \Delta x) - F_o \sum_{m=-\infty}^{\infty} \alpha_m^n \exp(i 2 \pi m (j+1) \Delta x) = 0 \end{aligned} \quad (127)$$

Soit encore, en factorisant

$$\sum_{m=-\infty}^{\infty} \exp(i 2 \pi m j \Delta x) \left(\alpha_m^{n+1} - \alpha_m^n (1 - 2F_o + F_o (\exp(-i 2 \pi m \Delta x) + \exp(i 2 \pi m \Delta x))) \right) = 0 \quad (128)$$

et en remplaçant la somme d'exponentielles complexes par la fonction cosinus :

$$\exp(-i 2 \pi m \Delta x) + \exp(i 2 \pi m \Delta x) = 2 \cos(2 \pi m \Delta x) \quad (129)$$

On aboutit à :

$$\sum_{m=-\infty}^{\infty} \exp(i 2 \pi m j \Delta x) \left(\alpha_m^{n+1} - \alpha_m^n (1 - 2F_o (1 - \cos(2 \pi m \Delta x))) \right) = 0 \quad (130)$$

L'équation à vérifier pour chaque harmonique entre les instants n et $n+1$ est donc :

$$\alpha_m^{n+1} = \alpha_m^n (1 - 2F_o (1 - \cos(2 \pi m \Delta x))) \quad (131)$$

soit

$$\frac{\alpha_m^{n+1}}{\alpha_m^n} = 1 - 2F_o (1 - \cos(2 \pi m \Delta x)) \quad (132)$$

On introduit alors, d'après [3] p. 55 le **coefficient d'amplification** de l'harmonique α_m entre les instants consécutifs $t_n = n \Delta t$ et $t_{n+1} = (n+1) \Delta t$:

$$\xi_m = \frac{\alpha_m^{n+1}}{\alpha_m^n} \quad (133)$$

et généralisé à deux instants non consécutifs

$$\xi_m^k = \frac{\alpha_m^{n+k}}{\alpha_m^n} \quad (134)$$

Dans le cas du schéma explicite :

$$\xi_m = 1 - 2F_o (1 - \cos(2 \pi m \Delta x)) \quad (135)$$

Cette équation est l'équation d'amplification relative à l'harmonique m . Si une solution ξ_m de cette équation a un module plus grand que 1, les erreurs sur cet harmonique vont s'amplifier et le calcul va être instable. **La**

condition de stabilité est donc qu'aucun de ces coefficients d'amplification ξ_m ne soit plus grand que 1 en module :

$$\max(|\xi_m|) \leq 1 \quad (136)$$

Dans le cas du schéma explicite, l'inégalité (136) s'écrit :

$$-1 \leq \xi_m = 1 - 2F_o(1 - \cos(2\pi m \Delta x)) \leq 1 \quad (137)$$

L'inégalité de droite :

$$\xi_m = 1 - 2F_o(1 - \cos(2\pi m \Delta x)) \leq 1 \quad (138)$$

est toujours vérifiée car

$$0 < F_o, \quad 0 \leq 1 - \cos(2\pi m \Delta x) \quad (139)$$

donc

$$0 \leq F_o(1 - \cos(2\pi m \Delta x)) \quad (140)$$

et

$$1 - 2F_o(1 - \cos(2\pi m \Delta x)) \leq 1 \quad (141)$$

Il reste l'inégalité de gauche :

$$-1 \leq \xi_m = 1 - 2F_o(1 - \cos(2\pi m \Delta x)) \quad (142)$$

soit encore :

$$-2 \leq -2F_o(1 - \cos(2\pi m \Delta x)) \quad (143)$$

A son tour, cette inégalité est vérifiée quel que soit m si elle l'est pour la valeur de m qui minimise ξ_m , c'est à dire pour

$$\cos(2\pi m \Delta x) = -1 \quad (144)$$

On a alors

$$-2 \leq -4F_o \quad (145)$$

soit finalement :

$$F_o \leq \frac{1}{2} \quad (146)$$

C'est bien la condition de stabilité de Fourier énoncée précédemment.

Le schéma considéré est à stabilité conditionnelle. Si le pas Δx est fixé, il faut que le pas Δt soit suffisamment petit pour que la stabilité soit assurée. Si la relation (146) n'est pas vérifiée, il est vain de vouloir résoudre l'équation aux dérivées partielles à l'aide du schéma explicite : l'algorithme numérique ne peut qu'être instable.

Le même type d'analyse peut être appliqué aux schémas implicite et explicite-implicite. Le schéma implicite (??) conduit au coefficient d'amplification

$$\xi_m = \frac{1}{1 + 2F_o(1 - \cos(2\pi m \Delta x))} \quad (147)$$

Immédiatement :

$$0 \leq 2F_o(1 - \cos(2\pi m \Delta x)) \quad (148)$$

et donc :

$$1 \leq 1 + 2F_o(1 - \cos(2\pi m \Delta x)) \quad (149)$$

puis finalement l'inégalité

$$0 < \xi_m \leq 1 \quad (150)$$

Le schéma implicite est inconditionnellement stable.

3.6.1. Stabilité de la θ Méthode

Références : [3] p. 79, [2] p. 65

$$\frac{\zeta_j^{n+1} - \zeta_j^n}{\Delta t} - \theta \left(\frac{\zeta_{j-1}^{n+1} + \zeta_{j+1}^{n+1} - 2\zeta_j^{n+1}}{\Delta x^2} \right) - (1 - \theta) \left(\frac{\zeta_{j-1}^n + \zeta_{j+1}^n - 2\zeta_j^n}{\Delta x^2} \right) = 0 \quad (151)$$

Le coefficient d'amplification ζ_m s'exprime donc sous la forme :

$$\xi_m^\theta = 1 - \frac{4\nu_m}{4\theta\nu_m + 1} \quad (152)$$

$$\nu_m = \frac{1}{2} F_o (1 - \cos(2m\pi\Delta x)) = F_o \sin^2(m\pi\Delta x) \geq 0 \quad (153)$$

Les coefficients ν_m , et ξ_m^θ sont positifs, l'inégalité :

$$\xi_m^\theta = 1 - \frac{4\nu_m}{4\theta\nu_m + 1} \leq 1 \quad (154)$$

est donc toujours vérifiée. Il reste à vérifier l'inégalité :

$$-1 \leq \xi_m^\theta = 1 - \frac{4\nu_m}{4\theta\nu_m + 1} \quad (155)$$

d'où :

$$-2 \leq -\frac{4\nu_m}{4\theta\nu_m + 1} \quad (156)$$

en inversant les signes :

$$\frac{1}{2\nu_m} \geq \frac{1}{4\theta\nu_m + 1} \quad (157)$$

puis :

$$2\nu_m \leq 4\theta\nu_m + 1 \quad (158)$$

enfin :

$$2\nu_m(1 - 2\theta) \leq 1 \quad (159)$$

Si $\theta \geq \frac{1}{2}$, l'inégalité est toujours vérifiée (le membre de gauche) est négatif et le schéma est donc toujours stable. Si $0 < \theta < 1/2$, l'inégalité est toujours vérifiée à condition qu'elle le soit pour le majorant de ν_n ; ce majorant est $F_o(141)$ et la condition de stabilité est donc :

$$2F_o(1 - 2\theta) \leq 1 \quad (160)$$

soit alors :

$$F_o \leq \frac{1}{2(1 - 2\theta)} \quad (161)$$

3.6.2. Conclusion sur la stabilité des schémas

Se reporter à [3] p. 79, on suivra pour conclure [2] p. 65 : *Un schéma instable, même précis, est à jeter au panier!*

4. Méthode des volumes finis appliquée à la diffusion en régime stationnaire

4.1. Introduction

[8]

'La méthode des différences finies repose sur un concept mathématique très simple, c'est pourquoi elle a été utilisée depuis des décennies. L'approximation d'une dérivée partielle à un ordre de précision donné se fait d'une manière intuitive en utilisant un développement en série de Taylor (1685-1731) de la fonction recherchée.

... Ce sont en fait les problèmes de transfert de chaleur et de mécanique des fluides qui sont à l'origine de la méthode des volumes finis. En effet, ces équations traduisent la conservation des flux ou des contraintes à travers un V. E. R. (Volume Élémentaire Représentatif) infiniment petit. La méthode des volumes finis ne fait que reprendre cette définition de base sur un volume élémentaire discret.

Elle introduit donc un concept de volume de contrôle alors que la méthode des différences finies n'est limitée qu'à la notion d'opérateur discrétisé sur chaque noeud. Ce qui permet d'étendre la méthode des différences finies à des problèmes hétérogènes et non linéaires prenant en compte par exemple des interfaces entre deux domaines de conductivité différentes, ou une avancée d'un front de fusion.'

L'hétérogénéité peut aussi être induite par une non linéarité de comportement. La conductivité hydraulique dans une zone partiellement saturée en est un exemple.

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 :

- un flux pour un problème de diffusion,
- une contrainte pour un problème d'équilibre mécanique.

est imposée. L'outil mathématique utilisé est le théorème de la divergence. **La conservation est donc imposée au niveau discret**, contrairement au cas de la méthode des éléments finis classiques.

[15] : *'Similar to other numerical methods developed for the simulation of fluid flow, the finite volume method transforms the set of partial differential equations into a system of linear algebraic equations. Nevertheless, the discretization procedure used in the finite volume method is distinctive and involves two basic steps. In the first step, the partial differential equations are integrated and transformed into balance equations over an element. This involves changing the surface and volume integrals into discrete algebraic relations over elements and their surfaces using an integration quadrature of a specified order of accuracy. The result is a set of semi-discretized equations. In the second step, interpolation profiles are chosen to approximate the variation of the variables within the element and relate the surface values of the variables to their cell values and thus transform the algebraic relations into algebraic equations.'*

4.1.1. Quelques références

[6, 4, 7, 8, 9, 16, 10, 11, 14, 12].

La méthode des volumes finis est 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), exemple de méthode avancée de couplage volumes finis (modélisation écoulements multiphasiques) et éléments finis (modélisation comportement mécanique du squelette solide) dans le logiciel libre *Code - Aster* développé par EDF
<https://code-aster.org/UPLOAD/DOC/Presentation/AE-aster-geo-2009.pdf>
 - écoulement d'eau liquide, huile, gaz dans un réservoir pétrolier
- code commercial *Eclipse* appliqué à l'ingénierie de réservoir (Schlumberger),
<https://www.software.slb.com/products/eclipse>, exemples d'application [17]
- open source *openfoam*, <https://openfoam.com/>, <https://openfoam.com/training/>
- matlab : <https://www.featoool.com/>
- documentation et codes volumes finis : <https://feaweb.aub.edu.lb/research/cfd/index.htm>
- *Code_Saturne* [18] (disponible sur *HAL* <https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01115371>) : logiciel appliqué à la modélisation d'écoulements turbulents, développé par EDF.

4.2. Mise en oeuvre de la méthode des volumes finis sur un problème de diffusion pure en régime stationnaire

4.2.1. Equation de conservation locale

On rappelle que l'équation de diffusion linéaire stationnaire, sans terme source est obtenue par combinaison de l'équation de bilan de masse ou de chaleur :

$$\text{div}(\underline{j}) = 0 \quad (162)$$

et d'une équation de conduction (on se limite au cas d'un milieu isotrope)

$$\underline{j} = -\lambda \underline{\text{grad}}(\zeta) \quad (163)$$

soit :

$$\text{div}(\underline{j}) = \text{div}(-\lambda \underline{\text{grad}}(\zeta)) = 0 \quad (164)$$

La démarche de type volumes finis consiste à écrire l'équation aux dérivées partielle précédente sous forme intégrale conservative en flux. Pour un volume Ω :

$$\int_{\Omega} \text{div}(\lambda \underline{\text{grad}}(\zeta)) d\Omega = 0 \quad (165)$$

ou encore :

$$\frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} \text{div}(\lambda \underline{\text{grad}}(\zeta)) d\Omega = 0 \quad (166)$$

Lorsqu'il existe une discontinuité physique sur le coefficient de conductivité, le gradient de température (ou de pression) n'est pas dérivable sur l'interface, mais le flux de chaleur est continu sur cette interface :

$$\lambda_1 \underline{\text{grad}}(\zeta_1) \cdot \underline{n} = \lambda_2 \underline{\text{grad}}(\zeta_2) \cdot \underline{n} \quad (167)$$

$$\lambda_1 \neq \lambda_2 \quad (168)$$

$$\underline{\text{grad}}(\zeta_1) \neq \underline{\text{grad}}(\zeta_2) \quad (169)$$

Le terme conductif dans l'intégrale est donc une fonction continue quel que soit la propriété de conductivité du milieu. Par conséquent, il est possible d'appliquer le théorème de la divergence à l'intégrale du terme conductif :

$$\frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} \text{div}(\lambda \underline{\text{grad}}(\zeta)) d\Omega = \frac{1}{\Omega} \int_{\partial\Omega} \lambda \underline{\text{grad}}(\zeta) \cdot \underline{n} da = 0 \quad (170)$$

Cette procédure permet de s'affranchir d'un ordre de dérivation en intégrant le terme conductif sur les surfaces extérieures du volume élémentaire. Ce volume de contrôle peut être assimilé à une boîte noire à l'intérieure de laquelle le flux peut varier d'une manière quelconque. L'équilibre thermique est réalisé lorsque les flux entrants à travers les surfaces extérieures de cet élément infiniment petit s'équilibrent avec les flux sortant (et les termes de production de chaleur éventuellement) en posant :

$$\varphi_{\alpha} = \lambda_{\alpha} \underline{\text{grad}}(\zeta_{\alpha}) \cdot \underline{n} \quad (171)$$

Le bilan d'énergie sur cet élément de volume infinitésimal s'écrit :

$$\frac{1}{\Omega} \int_{\partial\Omega} \lambda \underline{\text{grad}}(\zeta) \cdot \underline{n} da = \frac{1}{\Omega} \int_{\partial\Omega_s} \varphi_s da + \frac{1}{\Omega} \int_{\partial\Omega_e} \varphi_e da = 0 \quad (172)$$

où φ_s , φ_e désignent les flux sortant en entrant, $\partial\Omega_s$ et $\partial\Omega_e$ les surfaces respectives. Les termes conservatifs à écrire sous forme intégrale (flux de chaleur, contraintes...) doivent vérifier la continuité sur une interface, sans quoi le théorème de la divergence n'est plus applicable. Ce point est essentiel pour résoudre un problème aux limites par la méthode des volumes finis.

4.2.2. Problème unidimensionnel

On se place en coordonnées cartésiennes orthonormées est on considère un problème unidimensionnel, tel que

$$\zeta = \zeta(x) \quad (173)$$

En conséquence le vecteur gradient est de la forme

$$\underline{\text{grad}}(\zeta) = \frac{d\zeta(x)}{dx} \underline{e}_x \quad (174)$$

Dans le cas d'un milieu isotrope, le vecteur courant de chaleur (ou de masse fluide pour un problème d'écoulement) $\underline{j}$

$$\underline{j} = -\lambda \underline{\text{grad}}(\zeta) \quad (175)$$

On adoptera la convention de signe opposée (on inverse dans les bilans d'énergie ou de masse, ce qui est gagné ou perdu)

$$\underline{j} = \lambda \underline{\text{grad}}(\zeta) \quad (176)$$

On a alors

$$\underline{j} = \lambda \frac{d\zeta(x)}{dx} \underline{e}_x \quad (177)$$

On ne précise pas à ce stade la conductivité λ qui peut être une fonction du vecteur position $\lambda = \lambda(\underline{x})$ si le milieu est hétérogène, ou fonction de l'inconnue $\lambda = \lambda(\zeta)$ pour un problème non linéaire. Ces deux cas seront étudiés par la suite, à ce stade aucune hypothèse n'est faite. La densité surfacique de flux à travers une surface de normale unitaire $\underline{n}$ s'écrit

$$\varphi(\underline{n}) = \lambda \underline{\text{grad}}(\zeta) \cdot \underline{n} \quad (178)$$

soit

$$\varphi(\underline{n}) = \lambda \frac{d\zeta(x)}{dx} \underline{e}_x \cdot \underline{n} \quad (179)$$

En conséquence, les flux sont nuls sur les surfaces de normale $\underline{n} = \underline{e}_y$ et $\underline{n} = \underline{e}_z$

$$\varphi(\underline{n} = \underline{e}_y) = \lambda \frac{d\zeta(x)}{dx} \underline{e}_x \cdot \underline{e}_y = 0, \quad \varphi(\underline{n} = \underline{e}_z) = \lambda \frac{d\zeta(x)}{dx} \underline{e}_x \cdot \underline{e}_z = 0 \quad (180)$$

Sur les surfaces de normale $\pm \underline{e}_x$ on a

$$\varphi(\underline{n} = \pm \underline{e}_x) = \lambda \frac{d\zeta(x)}{dx} \underline{e}_x \cdot \pm \underline{e}_x = \pm \lambda \frac{d\zeta(x)}{dx} \quad (181)$$

On retiendra

$$\varphi(\underline{n} = -\underline{e}_x) = -\lambda \frac{d\zeta(x)}{dx}, \quad \varphi(\underline{n} = \underline{e}_x) = \lambda \frac{d\zeta(x)}{dx} \quad (182)$$

4.2.3. Discrétisation du milieu continu par volumes finis

On limite cette présentation au cas unidimensionnel en espace, se reporter à [12] pour le cas général. Soit une structure unidimensionnelle d'épaisseur ℓ (un mur, une couche, une plaque etc.). La discrétisation du milieu continu, ici unidimensionnel, se traduit par un maillage. On distingue

- les points de discrétisation où l'inconnue ζ est calculée
- les volumes élémentaires ou volumes de contrôle 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 limitera aux grilles régulières, soit des points de discrétisations et volumes finis régulièrement répartis mais la méthode se généralise aux grilles irrégulières [12] (un exemple d'application est donné dans [19]). Parmi les différentes méthodes possibles, on utilisera celle du maillage des centres [9, 12] qui consiste

- à définir en premier les points de discrétisation : ils sont régulièrement répartis, avec un pas noté Δx , et 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, en conséquence les interfaces entre les volumes sont placées à mi-distance entre les centres et l'épaisseur de ces volumes de contrôle est égale à la distance entre point de discrétisation, soit Δx
- les frontières de la structure contiennent aussi bien un point de discrétisation que la frontière des volumes, il faut voir ceux ci comme des *demi volumes* : *des volumes coupés en leur milieu*, si l'on compare avec les volumes intérieurs (leur épaisseur est $\frac{\Delta x}{2}$)

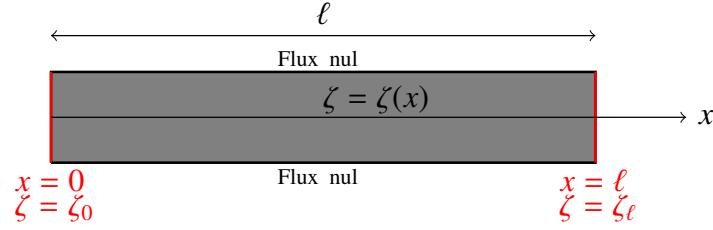


FIGURE 9: Le milieu continu : une couche d'épaisseur ℓ soumise à des conditions de type Dirichlet sur les bords $x = 0$ et $x = \ell$. Le problème est unidimensionnel, le flux est nul sur les surfaces de normales respectives $\underline{e}_y$ et $\underline{e}_z$.

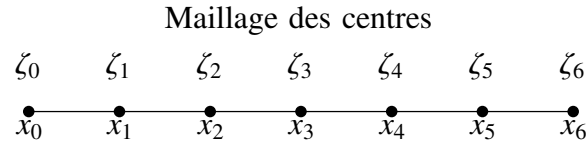


FIGURE 10: Discrétisation par volumes finis : maillage des centres

Maillage des volumes de contrôle



FIGURE 11: Maillage des volumes de contrôle

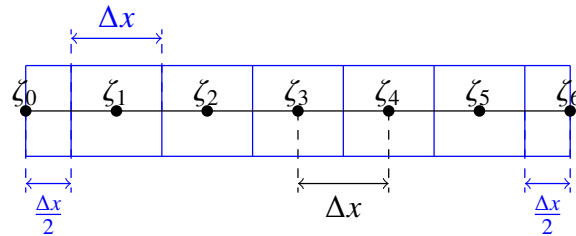


FIGURE 12: Maillages des volumes de contrôle et des centres

4.2.4. Equation de bilan d'un volume de contrôle intérieur

Soit un volume de contrôle intérieur

$$\Omega_j = S \Delta x \quad (183)$$

de centre de coordonnée $x_j = j\Delta x$ et d'inconnue ζ_j (se reporter à la figure 13). S désigne l'aire de la section transversale.

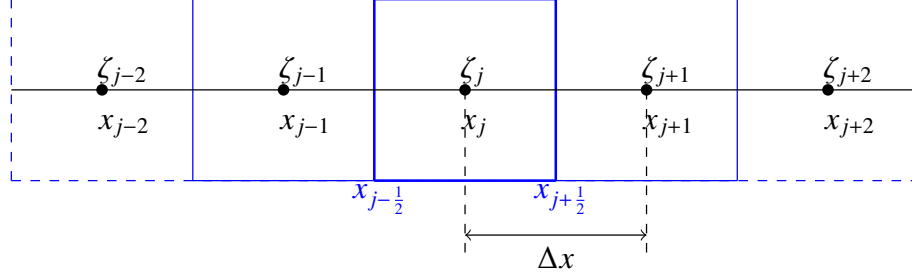


FIGURE 13: Equation de bilan du volume intérieur Ω_j

On intègre l'équation de bilan sur le volume de contrôle

$$\frac{1}{\Omega_j} \int_{\partial\Omega_j} \lambda \underline{\text{grad}} \zeta \cdot \underline{n} \, da = 0 \quad (184)$$

Comme rappelé dans la section (4.2.2), dans le cas de problèmes 1D seules les interfaces de normales $\pm \underline{e}_x$ ont une contribution non nulle (les flux sur les interfaces de normales $\pm \underline{e}_y$ et $\pm \underline{e}_z$ sont nuls). L'équation (184) se réduit à

$$\frac{1}{S\Delta x} (S(\varphi_{j+1/2} + \varphi_{j-1/2})) = \frac{1}{\Delta x} (\varphi_{j+1/2} + \varphi_{j-1/2}) = 0 \quad (185)$$

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

$$\varphi_{j+1/2} = \lambda_{j+1/2} \left[\frac{d\zeta}{dx} \right]_{j+1/2}, \quad \varphi_{j-1/2} = -\lambda_{j-1/2} \left[\frac{d\zeta}{dx} \right]_{j-1/2} \quad (186)$$

Il faut donc approximer les flux aux interfaces et en particulier les gradients. La méthode des volumes finis utilise les **approximations par différences finies**. Les **gradients** sont approchés à l'aide des **dérivées premières centrées**, prises **sur les interfaces** $j \pm \frac{1}{2}$. Se reporter à la section (2.2.1)

$$\left[\frac{d\zeta}{dx} \right]_{j+1/2} = \frac{\zeta_{j+1} - \zeta_j}{\Delta x} \quad (187)$$

$$\left[\frac{d\zeta}{dx} \right]_{j-1/2} = \frac{\zeta_j - \zeta_{j-1}}{\Delta x} \quad (188)$$

L'équation discrétisée (185) devient alors

$$\frac{1}{\Delta x} \left(\lambda_{j+1/2} \left(\frac{\zeta_{j+1} - \zeta_j}{\Delta x} \right) - \lambda_{j-1/2} \left(\frac{\zeta_j - \zeta_{j-1}}{\Delta x} \right) \right) = 0 \quad (189)$$

On factorise

$$\frac{1}{(\Delta x)^2} (\lambda_{j-1/2} \zeta_{j-1} - (\lambda_{j-1/2} + \lambda_{j+1/2}) \zeta_j + \lambda_{j+1/2} \zeta_{j+1}) = 0 \quad (190)$$

Le pas Δx étant uniforme, on peut simplifier l'équation précédente en la multipliant par $-\Delta x^2$

$$-\lambda_{j-1/2} \zeta_{j-1} + (\lambda_{j-1/2} + \lambda_{j+1/2}) \zeta_j - \lambda_{j+1/2} \zeta_{j+1} = 0 \quad (191)$$

On insistera sur le fait que la variation spatiale de conductivité, entre les deux interfaces $j \pm \frac{1}{2}$, est prise en compte dans la relation (190), ce que ne permet pas la méthode des différences finies présentée précédemment. Cela marque la différence essentielle entre les méthodes des volumes finis et des différences finies. La méthode des volumes finis est une extension de la *MDF* qui utilise les approximations de type différences finies pour les gradients ainsi qu'un maillage régulier. Dans le cas d'un problème linéaire et homogène

$$\lambda_{j-1/2} = \lambda_{j+1/2} = \lambda \quad (192)$$

et l'équation (190) devient

$$\frac{1}{(\Delta x)^2} (\lambda \zeta_{j-1} - 2 \lambda \zeta_j + \lambda \zeta_{j+1}) = \frac{\lambda}{(\Delta x)^2} (\zeta_{j-1} - 2 \zeta_j + \zeta_{j+1}) = 0 \quad (193)$$

d'où l'équation discrétisée

$$\zeta_{j-1} - 2 \zeta_j + \zeta_{j+1} = 0 \quad (194)$$

Les méthodes des volumes finis et des différences finies coïncident dans le cas d'un problème linéaire et d'un matériau homogène.

4.3. Extension aux discontinuités de propriétés physiques

La méthode des volumes finis permet, via la méthode dite de la *conductivité équivalente*, de prendre en compte des discontinuités de conductivité. On présente le cas d'un matériau bicouche contenant une interface entre deux matériaux de conductivités respectives λ_1 et λ_2 .

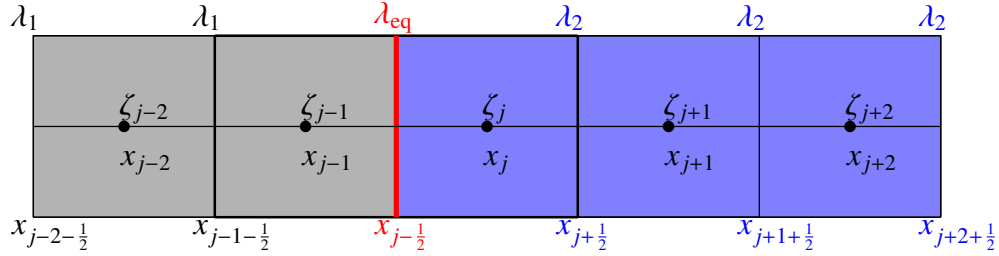


FIGURE 14: Interface en $x_{j-\frac{1}{2}}$ entre les matériaux 1 de conductivité λ_1 et 2 de conductivité λ_2 . Sur l'interface, la conductivité n'est ni λ_1 ni λ_2 mais une fonction de celles-ci, notée λ_{eq} , *conductivité équivalente* à l'interface déterminée en assurant la continuité du flux à l'interface.

La continuité du flux à travers la discontinuité physique s'écrit :

$$\lambda_1 \left[\frac{d\zeta_1}{dx} \right]_{x_{j-\frac{1}{2}}} = \lambda_2 \left[\frac{d\zeta_2}{dx} \right]_{x_{j-\frac{1}{2}}} \quad (195)$$

On note ζ_α l'inconnue à l'interface, on approxime le gradient à l'interface par différences finies

$$\left[\frac{d\zeta_1}{dx} \right]_{x_\alpha} = \frac{\zeta_\alpha - \zeta_{j-1}}{x_\alpha - x_{j-1}} \quad (196)$$

$$\left[\frac{d\zeta_2}{dx} \right]_{x_\alpha} = \frac{\zeta_j - \zeta_\alpha}{x_j - x_\alpha} \quad (197)$$

Avec $x_\alpha = x_{j-\frac{1}{2}}$ on a

$$x_j - x_{j-\frac{1}{2}} = x_{j-\frac{1}{2}} - x_{j-1} = \frac{\Delta x}{2} \quad (198)$$

d'où

$$\left[\frac{d\zeta_1}{dx} \right]_{x_{j-\frac{1}{2}}} = \frac{2(\zeta_\alpha - \zeta_{j-1})}{\Delta x} \quad (199)$$

$$\left[\frac{d\zeta_2}{dx} \right]_{x_{j-\frac{1}{2}}} = \frac{2(\zeta_j - \zeta_\alpha)}{\Delta x} \quad (200)$$

L'équation de continuité du flux à l'interface devient

$$\lambda_1 \left(\frac{2(\zeta_\alpha - \zeta_{j-1})}{\Delta x} \right) = \lambda_2 \left(\frac{2(\zeta_j - \zeta_\alpha)}{\Delta x} \right) \quad (201)$$

dont on déduit l'équation

$$\lambda_1 (\zeta_\alpha - \zeta_{j-1}) = \lambda_2 (\zeta_j - \zeta_\alpha) \quad (202)$$

qui permet d'exprimer 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

$$\zeta_\alpha = \frac{\lambda_1 \zeta_{j-1} + \lambda_2 \zeta_j}{\lambda_1 + \lambda_2} \quad (203)$$

que l'on remplace dans les relations (201) pour exprimer le flux à l'interface sous la forme

$$\varphi_{j-\frac{1}{2}} = \lambda_1 \left(\frac{2(\zeta_\alpha - \zeta_{j-1})}{\Delta x} \right) = \lambda_2 \left(\frac{2(\zeta_j - \zeta_\alpha)}{\Delta x} \right) = \lambda_{eq} \frac{\zeta_j - \zeta_{j-1}}{\Delta x} \quad (204)$$

On trouve finalement

$$\lambda_{eq} = \lambda_{eq}(\lambda_1, \lambda_2) = \frac{2\lambda_1 \lambda_2}{\lambda_1 + \lambda_2} \quad (205)$$

Dans le cas particulier du matériau homogène $\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda$ on a bien $\lambda_{eq} = \lambda$.

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. Dans le cas de l'exemple traité (figure 14) l'équation (191) devient, pour les deux volumes considérés (volumes $j-1$ et j)

$$-\lambda_{j-1-1/2} \zeta_{j-2} + (\lambda_{j-1-1/2} + \lambda_{j-1/2}) \zeta_{j-1} - \lambda_{j-1/2} \zeta_j = 0 \quad (206)$$

$$-\lambda_{j-1/2} \zeta_{j-1} + (\lambda_{j-1/2} + \lambda_{j+1/2}) \zeta_j - \lambda_{j+1/2} \zeta_{j+1} = 0 \quad (207)$$

avec $\lambda_{j-1-1/2} = \lambda_1$, $\lambda_{j+1/2} = \lambda_2$, $\lambda_{j-1/2} = \lambda_{eq}$, soit

$$-\lambda_1 \zeta_{j-2} + (\lambda_1 + \lambda_{eq}) \zeta_{j-1} - \lambda_{eq} \zeta_j = 0 \quad (208)$$

$$-\lambda_{eq} \zeta_{j-1} + (\lambda_{eq} + \lambda_2) \zeta_j - \lambda_2 \zeta_{j+1} = 0 \quad (209)$$

On en déduit les coefficients de la matrice tridiagonale $\mathbf{A}$

$$A_{j-1,j-2} = -\lambda_1, \quad A_{j-1,j-1} = \lambda_1 + \lambda_{eq}, \quad A_{j-1,j} = -\lambda_{eq} \quad (210)$$

$$A_{j,j-1} = -\lambda_{eq}, \quad A_{j,j} = \lambda_{eq} + \lambda_2, \quad A_{j,j+1} = -\lambda_2 \quad (211)$$

4.3.1. Exemple dans le cas d'un bicouche

On considère le problème 1D du bicouche représenté dans la figure (15), soumis à des conditions aux limites de type Dirichlet.

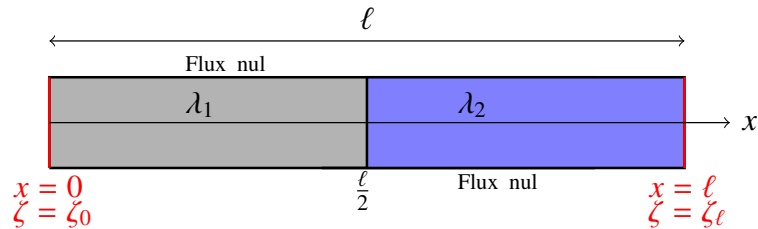


FIGURE 15: Exemple du problème 1D d'un bicouche : $\lambda(0 < x < \frac{\ell}{2}) = \lambda_1$, $\lambda(\frac{\ell}{2} < x < \ell) = \lambda_2$

On discrétise ce problème par volumes finis en considérant $N = 6$ points intérieurs et donc $N + 2 = 8$ points de discrétisation, bords inclus. Ces points de discrétisation sont les centres des volumes de contrôle. Le pas de discrétisation Δx vaut

$$\Delta x = \frac{\ell}{N+1} = \frac{\ell}{7} \quad (212)$$

et centres situés en $\{0, \frac{\ell}{7}, \frac{2\ell}{7}, \frac{3\ell}{7}, \frac{4\ell}{7}, \frac{5\ell}{7}, \frac{6\ell}{7}, \ell\}$.

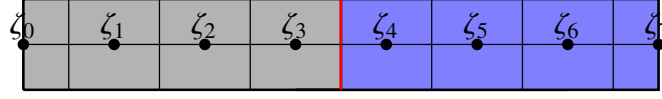


FIGURE 16: Maillages des volumes de contrôle et des centres dans le cas d'un bicouche, avec $N + 2 = 8$

La discrétisation par volumes finis conduit au système linéaire (214) dans lequel la conductivité équivalente λ_{eq} est donnée par la relation (205). L'inversion de ce système fournit la solution numérique $\zeta = \mathbf{X}$.

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{X} = \mathbf{B} \quad (213)$$

$$\underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\lambda_1 & 2\lambda_1 & -\lambda_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\lambda_1 & 2\lambda_1 & -\lambda_1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\lambda_1 & \lambda_1 + \lambda_{eq} & -\lambda_{eq} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\lambda_{eq} & \lambda_{eq} + \lambda_2 & -\lambda_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\lambda_2 & 2\lambda_2 & -\lambda_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\lambda_2 & 2\lambda_2 & -\lambda_2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}}_{\mathbf{A}} \cdot \underbrace{\begin{pmatrix} \zeta_0 \\ \zeta_1 \\ \zeta_2 \\ \zeta_3 \\ \zeta_4 \\ \zeta_5 \\ \zeta_6 \\ \zeta_7 \end{pmatrix}}_{\mathbf{X}} = \underbrace{\begin{pmatrix} \zeta_0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \zeta_\ell \end{pmatrix}}_{\mathbf{B}} \quad (214)$$

On peut vérifier que la solution numérique obtenue par volumes finis coïncide avec la solution exacte qui vérifie dans chaque couche

$$\frac{d^2 \zeta_i}{dx^2} = 0 \quad (215)$$

On en déduit ($i = 1, 2$)

$$\zeta_i(x) = a_i x + b_i \quad (216)$$

Les quatre constantes a_i , b_i $i = 1, 2$ sont déterminées par quatre équations, les conditions aux limites en $x = 0$ et $x = \ell$ et les équations de continuité, de l'inconnue ζ , et du flux φ à l'interface $\frac{\ell}{2}$

$$\begin{aligned} \zeta_1(x=0) &= \zeta_0, & \zeta_2(x=\ell) &= \zeta_\ell \\ \zeta_1(x=\frac{\ell}{2}) &= \zeta_2(x=\frac{\ell}{2}), & \lambda_1 \left[\frac{d\zeta_1(x)}{dx} \right]_{x=\frac{\ell}{2}} &= \lambda_2 \left[\frac{d\zeta_2(x)}{dx} \right]_{x=\frac{\ell}{2}} \end{aligned} \quad (217)$$

soit le système linéaire

$$b_1 = \zeta_0, \quad a_2 \ell + b_2 = \zeta_\ell, \quad a_1 \frac{\ell}{2} + b_1 = a_2 \frac{\ell}{2} + b_2, \quad \lambda_1 a_1 = \lambda_2 a_2 \quad (218)$$

dont l'inversion fournit

$$\zeta_1(x) = \zeta_0 + \lambda_{eq} \left(\frac{\zeta_\ell - \zeta_0}{\lambda_1} \right) \frac{x}{\ell}, \quad \zeta_2(x) = \zeta_\ell - \lambda_{eq} \left(\frac{\zeta_\ell - \zeta_0}{\lambda_2} \right) \left(1 - \frac{x}{\ell} \right) \quad (219)$$

avec

$$\zeta_1\left(\frac{\ell}{2}\right) = \zeta_2\left(\frac{\ell}{2}\right) = \frac{\lambda_1 \zeta_0 + \lambda_2 \zeta_\ell}{\lambda_1 + \lambda_2} \quad (220)$$

qui correspond à la relation (203).

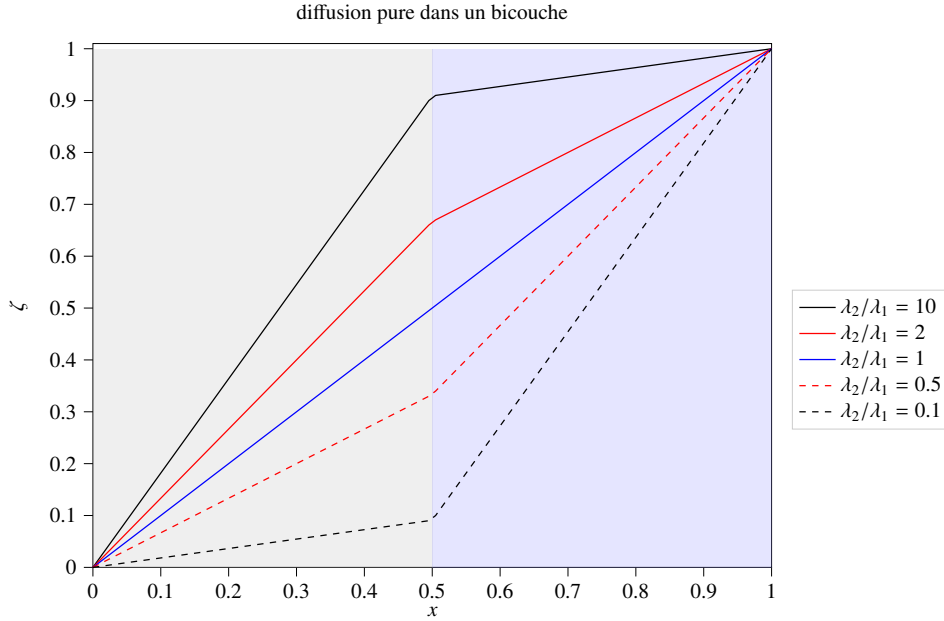


FIGURE 17: Discretisation par volumes finis de la diffusion pure stationnaire dans un bicouche.

4.4. Méthode des volumes finis en géométries 1D : cartésienne, cylindrique, sphérique

4.4.1. Vecteurs gradients 1D

Vecteur gradient 1D en géométrie cartésienne.

Soit $\zeta = \zeta(x)$, une fonction scalaire de la seule variable x

$$\underline{\text{grad}}\zeta = \frac{\partial\zeta}{\partial x}e_x \quad (221)$$

Vecteurs gradients 1D en géométries cylindrique et sphérique (problèmes à symétrie radiale).

Soit $\zeta = \zeta(r)$, une fonction scalaire du rayon r

$$\underline{\text{grad}}\zeta = \frac{\partial\zeta}{\partial r}e_r \quad (222)$$

4.4.2. Volumes intérieurs en géométries 1D

Volume Ω_j en géométrie cartésienne, x_j désigne le centre du volume, $x_{j-1/2}$ et $x_{j+1/2}$ les positions des interfaces gauche et droite. Dans le cas d'un maillage régulier, pour les volumes intérieurs les positions des centres ainsi que les positions des interfaces sont espacées de Δx (se reporter au cours)

$$\Omega_j = S (x_{j+1/2} - x_{j-1/2}) = S \Delta x \quad (223)$$

S est l'aire de la section orthogonale à l'axe x , on considèrera $S = 1$ (calculs par aire unité).

Volume Ω_j en géométrie cylindrique

$$\Omega_j = \pi (r_{j+1/2}^2 - r_{j-1/2}^2) L = \pi \left(\left(r_j + \frac{\Delta r}{2} \right)^2 - \left(r_j - \frac{\Delta r}{2} \right)^2 \right) L \quad (224)$$

L est la longueur de la structure dans la direction orthogonale au plan $Or\theta$, on considèrera $L = 1$ (calculs par longueur unité).

Volume Ω_j en géométrie sphérique

$$\Omega_j = \frac{4\pi}{3} (r_{j+1/2}^3 - r_{j-1/2}^3) = \frac{4\pi}{3} \left(\left(r_j + \frac{\Delta r}{2} \right)^3 - \left(r_j - \frac{\Delta r}{2} \right)^3 \right) \quad (225)$$

4.4.3. Intégration des flux aux interfaces gauche et droite en géométries 1D

En géométrie cartésienne les flux aux interfaces $j \pm 1/2$ sont définis par

$$\varphi_{j+1/2} = \lambda_{j+1/2} [\underline{\text{grad}} \zeta \cdot \underline{n}]_{j+1/2} = \lambda_{j+1/2} \left[\frac{\partial \zeta}{\partial x} \underline{e}_x \cdot \underline{e}_x \right]_{j+1/2} = \lambda_{j+1/2} \left[\frac{\partial \zeta}{\partial x} \right]_{j+1/2} \quad (226)$$

$$\varphi_{j-1/2} = \lambda_{j-1/2} [\underline{\text{grad}} \zeta \cdot \underline{n}]_{j-1/2} = \lambda_{j-1/2} \left[\frac{\partial \zeta}{\partial x} \underline{e}_x \cdot (-\underline{e}_x) \right]_{j-1/2} = -\lambda_{j-1/2} \left[\frac{\partial \zeta}{\partial x} \right]_{j-1/2} \quad (227)$$

et de même en géométries cylindrique et sphérique

$$\varphi_{j+1/2} = \lambda_{j+1/2} [\underline{\text{grad}} \zeta \cdot \underline{n}]_{j+1/2} = \lambda_{j+1/2} \left[\frac{\partial \zeta}{\partial r} \underline{e}_r \cdot \underline{e}_r \right]_{j+1/2} = \lambda_{j+1/2} \left[\frac{\partial \zeta}{\partial r} \right]_{j+1/2} \quad (228)$$

$$\varphi_{j-1/2} = \lambda_{j-1/2} [\underline{\text{grad}} \zeta \cdot \underline{n}]_{j-1/2} = \lambda_{j-1/2} \left[\frac{\partial \zeta}{\partial r} \underline{e}_r \cdot (-\underline{e}_r) \right]_{j-1/2} = -\lambda_{j-1/2} \left[\frac{\partial \zeta}{\partial r} \right]_{j-1/2} \quad (229)$$

On s'intéresse ici à l'intégration des flux sur le contour $\partial\Omega_j$ d'un volume intérieur

$$\int_{\partial\Omega_j} \lambda(\zeta) \underline{\text{grad}} \zeta \cdot \underline{n} \, da \quad (230)$$

Dans le cas de problèmes 1D, les seules contributions non nulles correspondent aux interfaces *gauche* et *droite*.
En géométrie cartésienne

$$\int_{\partial\Omega_j} \lambda(\zeta) \underline{\text{grad}} \zeta \cdot \underline{n} \, da = S (\varphi_{j+1/2} + \varphi_{j-1/2}) \quad (231)$$

soit, en prenant en compte les relations (226-227)

$$\int_{\partial\Omega_j} \lambda(\zeta) \underline{\text{grad}} \zeta \cdot \underline{n} \, da = S \left(\lambda_{j+1/2} \left[\frac{\partial \zeta}{\partial x} \right]_{j+1/2} - \lambda_{j-1/2} \left[\frac{\partial \zeta}{\partial x} \right]_{j-1/2} \right) \quad (232)$$

En géométrie cylindrique

$$\int_{\partial\Omega_j} \lambda(\zeta) \underline{\text{grad}} \zeta \cdot \underline{n} \, da = 2\pi L (r_{j+1/2} \varphi_{j+1/2} + r_{j-1/2} \varphi_{j-1/2}) \quad (233)$$

soit, en prenant en compte les relations (228-229)

$$\int_{\partial\Omega_j} \lambda(\zeta) \underline{\text{grad}} \zeta \cdot \underline{n} \, da = 2\pi L \left(\left(r_j + \frac{\Delta r}{2} \right) \lambda_{j+1/2} \left[\frac{\partial \zeta}{\partial x} \right]_{j+1/2} - \left(r_j - \frac{\Delta r}{2} \right) \lambda_{j-1/2} \left[\frac{\partial \zeta}{\partial x} \right]_{j-1/2} \right) \quad (234)$$

En géométrie sphérique

$$\int_{\partial\Omega_j} \lambda(\zeta) \underline{\text{grad}} \zeta \cdot \underline{n} \, da = 4\pi (r_{j+1/2}^2 \varphi_{j+1/2} + r_{j-1/2}^2 \varphi_{j-1/2}) \quad (235)$$

soit, en prenant en compte les relations (228-229)

$$\int_{\partial\Omega_j} \lambda(\zeta) \underline{\text{grad}} \zeta \cdot \underline{n} \, da = 4\pi \left(\left(r_j + \frac{\Delta r}{2} \right)^2 \lambda_{j+1/2} \left[\frac{\partial \zeta}{\partial x} \right]_{j+1/2} - \left(r_j - \frac{\Delta r}{2} \right)^2 \lambda_{j-1/2} \left[\frac{\partial \zeta}{\partial x} \right]_{j-1/2} \right) \quad (236)$$

5. Equation discrétisée par volumes finis dans le cas 1D non linéaire stationnaire

5.1. Géométrie cartésienne

On considère un problème de diffusion 1D non linéaire. On suppose la conductivité isotrope, fonction de l'inconnue ζ

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

On intègre l'équation de bilan sur un volume de contrôle Ω_j

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

Le théorème de la divergence permet de transformer l'intégrale de volume en intégrale sur le contour $\partial\Omega_j$

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

Dans le cas d'une grille régulière, pour un volume de contrôle Ω_j **intérieur**

$$\Omega_j = S \Delta x \quad (240)$$

et l'équation 239 devient

$$\frac{1}{S \Delta x} (S (\varphi_{j+1/2} + \varphi_{j-1/2})) = \frac{1}{\Delta x} (\varphi_{j+1/2} + \varphi_{j-1/2}) = 0 \quad (241)$$

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

$$\varphi_{j+1/2} = \lambda_{j+1/2} \left[\frac{\partial \zeta}{\partial x} \right]_{j+1/2} \quad (242)$$

$$\varphi_{j-1/2} = -\lambda_{j-1/2} \left[\frac{\partial \zeta}{\partial x} \right]_{j-1/2} \quad (243)$$

L'approximation de type *moyenne des fonctions* pour la conductivité et de type dérivée première centrée pour le gradient aux interfaces donne

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

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

L'équation discrétisée 241 devient alors

$$\frac{1}{\Delta x} \left(\left(\frac{\lambda(\zeta_j) + \lambda(\zeta_{j+1})}{2} \right) \left(\frac{\zeta_{j+1} - \zeta_j}{\Delta x} \right) - \left(\frac{\lambda(\zeta_j) + \lambda(\zeta_{j-1})}{2} \right) \left(\frac{\zeta_j - \zeta_{j-1}}{\Delta x} \right) \right) = 0 \quad (246)$$

On simplifie

$$\begin{aligned} & \frac{1}{(\Delta x)^2} \times \\ & \left(\left(\frac{\lambda(\zeta_j) + \lambda(\zeta_{j+1})}{2} \right) \zeta_{j+1} - \left(\frac{\lambda(\zeta_{j-1}) + 2\lambda(\zeta_j) + \lambda(\zeta_{j+1})}{2} \right) \zeta_j + \left(\frac{\lambda(\zeta_j) + \lambda(\zeta_{j-1})}{2} \right) \zeta_{j-1} \right) \\ & = 0 \end{aligned} \quad (247)$$

Dans le cas d'un problème linéaire homogène on obtient

$$\frac{\lambda}{(\Delta x)^2} (\zeta_{j-1} - 2\zeta_j + \zeta_{j+1}) = 0 \quad (248)$$

5.2. Problème posé

Soit le problème de diffusion 1D non linéaire stationnaire en géométrie cartésienne

$$\text{div} (\lambda(\zeta) \underline{\text{grad}} \zeta) = 0 \quad (249)$$

$$0 \leq x \leq \ell, \quad \zeta(x=0) = \zeta_0, \quad \zeta(x=\ell) = \zeta_\ell \quad (250)$$

où la fonction $\lambda(\zeta)$ est une donnée matériau supposée connue. Sa dérivée première $\lambda'(\zeta)$ est également connue et notée $d\lambda\zeta(\zeta)$ dans ce document. Le problème est non linéaire car la conductivité λ dépend de l'inconnue ζ recherchée. Deux algorithmes de résolution itératifs sont détaillés, l'algorithme du point fixe et l'algorithme de Newton-Raphson.

5.2.1. Rappel de l'algorithme du point fixe

Dans le cas d'un problème non linéaire à une variable (notée x), on recherche la solution d'une équation de la forme

$$x = f(x) \quad (251)$$

Processus itératif

$$x_{k+1} = f(x_k) \quad (252)$$

Dans le cadre de la méthode des volumes finis, l'inconnue scalaire x est remplacée par le vecteur $\mathbf{X}$ contenant les inconnues ζ_j aux points de discrétisations pris aux centres des volumes de contrôle (vecteur à $n+2$ composantes, dans le cas de n points intérieurs auxquels on rajoute les 2 points situés sur les frontières). L'équation 252 est remplacée par le système matriciel

$$\mathbf{X}^{k+1} = [\mathbf{A} [\mathbf{X}^k]]^{-1} \cdot \mathbf{B} [\mathbf{X}^k] \quad (253)$$

ce qui correspond à l'inversion, à chaque itération, du système linéaire

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

où le vecteur $\mathbf{X}^k$ (itération k) est connu. La matrice carrée $\mathbf{A} [\mathbf{X}^k]$ (format matriciel $[n+2, n+2]$) et le vecteur second membre $\mathbf{B} [\mathbf{X}^k]$ (format matriciel $[n+2]$) sont construits à partir de l'équation de bilan discrétisée sur chaque volume fini : l'équation du volume j fournit la ligne j , colonnes $j-1$, j et $j+1$ de la matrice $\mathbf{A}$, et la composante j du vecteur second membre $\mathbf{B}$.

5.2.2. Rappel de l'algorithme de Newton Raphson

Dans le cas d'un problème non linéaire à une variable (notée x), on recherche la solution d'une équation de la forme

$$f(x) = 0 \quad (255)$$

Processus itératif

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)} \quad (256)$$

Dans le cadre de la méthode des volumes finis, l'équation 256 est remplacée par le système matriciel

$$\mathbf{X}^{k+1} = \mathbf{X}^k - [\mathbf{DF} [\mathbf{X}^k]]^{-1} \cdot \mathbf{F} [\mathbf{X}^k] \quad (257)$$

La matrice carrée $\mathbf{DF} [\mathbf{X}^k]$ (dite *matrice dérivée*, format $[n+2, n+2]$) et le vecteur second membre $\mathbf{F} [\mathbf{X}^k]$ (format $[n+2]$) sont construits à partir de l'équation de bilan discrétisée sur chaque volume fini : l'équation du volume j fournit la ligne j , colonnes $j-1$, j et $j+1$ de la matrice $\mathbf{DF}$, et la composante j du vecteur $\mathbf{F}$.

5.3. Equation discrétisée du volume fini j

Soit le volume fini Ω_j en géométrie cartésienne 1D. x_j désigne le centre du volume, $x_{j-1/2}$ et $x_{j+1/2}$ les positions des interfaces gauche et droite. Dans le cas d'un maillage régulier, pour les volumes intérieurs les positions des centres ainsi que les positions des interfaces sont espacées de Δx (S est l'aire de la section orthogonale à l'axe x)

$$\Omega_j = S (x_{j+1/2} - x_{j-1/2}) = S \Delta x \quad (258)$$

Soit un maillage régulier composé de $n + 2$ points de discrétisation, dont n points intérieurs. Il y a n volumes finis intérieurs, d'épaisseur Δx et deux demi volumes d'épaisseur $\Delta x/2$ au contact des frontières du maillage, soit ℓ l'épaisseur de la structure

$$\Delta x = \frac{\ell}{n + 1} \quad (259)$$

et la coordonnée du centre x_j est donnée par

$$x_j = (j - 1)\Delta x \quad (260)$$

Après calculs et simplification (on multiplie l'équation par le facteur $(\Delta x)^2$), dans le cas de l'approximation de type *moyenne des fonctions* pour la conductivité et de type *dérivée première centrée* pour le gradient aux interfaces, on aboutit à l'équation discrétisée

$$\left(\frac{\lambda(\zeta_j) + \lambda(\zeta_{j-1})}{2} \right) \zeta_{j-1} - \left(\frac{\lambda(\zeta_{j-1}) + 2\lambda(\zeta_j) + \lambda(\zeta_{j+1})}{2} \right) \zeta_j + \left(\frac{\lambda(\zeta_j) + \lambda(\zeta_{j+1})}{2} \right) \zeta_{j+1} = 0 \quad (261)$$

On peut exprimer l'équation discrétisée (261) sous la forme

$$\varphi_j [\zeta_{j-1}, \zeta_j, \zeta_{j+1}] = 0 \quad (262)$$

avec

$$\begin{aligned} \varphi_j [\zeta_{j-1}, \zeta_j, \zeta_{j+1}] &= \\ &= \left(\frac{\lambda(\zeta_j) + \lambda(\zeta_{j-1})}{2} \right) \zeta_{j-1} - \left(\frac{\lambda(\zeta_{j-1}) + 2\lambda(\zeta_j) + \lambda(\zeta_{j+1})}{2} \right) \zeta_j + \left(\frac{\lambda(\zeta_j) + \lambda(\zeta_{j+1})}{2} \right) \zeta_{j+1} \end{aligned} \quad (263)$$

5.4. Mise en oeuvre de l'algorithme du point fixe

5.4.1. Matrice tridiagonale $\mathbf{A}$ à inverser et vecteur second membre $\mathbf{B}$

A partir de l'équation 261 on déduit, que pour tout volume intérieur ($1 < j < n + 2$), les composantes ligne j , colonnes $j - 1$, j , $j + 1$ de la matrice $\mathbf{A}$ s'obtiennent en factorisant l'équation par rapport aux inconnues ζ_{j-1} , ζ_j , ζ_{j+1} . La commande `Coefficient[]` de Mathematica le permet simplement on a ainsi :

$$A_{(j,j-1)} = \frac{\lambda(\zeta_j) + \lambda(\zeta_{j-1})}{2} \quad (264)$$

$$A_{(j,j)} = - \left(\frac{\lambda(\zeta_{j-1}) + 2\lambda(\zeta_j) + \lambda(\zeta_{j+1})}{2} \right) \quad (265)$$

$$A_{(j,j+1)} = \frac{\lambda(\zeta_j) + \lambda(\zeta_{j+1})}{2} \quad (266)$$

Pour tout volume intérieur j , la composante correspondante du vecteur second membre $\mathbf{B}$ est nulle

$$B_{(j)} = 0 \quad (267)$$

Les composantes non nulles du vecteur second membre $\mathbf{B}$ sont obtenues à partir des conditions aux limites (demi volumes 1 et $n + 2$, soit les points de discrétisation 1 et $n + 2$). A l'itération k , les variables ζ_{j-1} , ζ_j , ζ_{j+1} correspondent aux composantes X_{j-1}^k , X_j^k , X_{j+1}^k du vecteur $\mathbf{X}^k$

5.4.2. Conditions aux limites

On a considéré des conditions aux limites de type Dirichlet (relation 250). Après discrétisation par volume finis, ces conditions se reportent sur les points de discrétisation 1 ($x = 0$) et $n + 2$ ($x = \ell$), on a ainsi

$$\zeta_1 = \zeta_0 \quad (268)$$

$$\zeta_{n+2} = \zeta_\ell \quad (269)$$

On en déduit les composantes des lignes 1 et $n + 2$ de la matrice **A** et du second membre **B**

$$A_{(1,1)} = A_{(n+2,n+2)} = 1 \quad (270)$$

et les composantes non diagonales des lignes 1 et $n + 2$ sont nulles.

$$B_{(1)} = \zeta_0 \quad (271)$$

$$B_{(n+2)} = \zeta_\ell \quad (272)$$

5.4.3. Initialisation et réactualisation

La première étape consiste à initialiser le vecteur **X**. On note **X**⁰ le vecteur initial. Son choix n'est pas unique, les seules conditions à respecter : vérification des conditions aux limites en $x = 0$ et $x = \ell$ et valeurs initiales dans le domaine de définition de la fonction $\lambda(\zeta)$. A titre d'exemple :

$$X_{(1)}^0 = \zeta_0, \quad X_{(j)}^0 = \zeta_\ell, \quad j = 2, n + 2 \quad (273)$$

$$X_{(j)}^0 = \zeta_0, \quad X_{(n+2)}^0 = \zeta_\ell, \quad j = 1, n + 1 \quad (274)$$

ou (solution du problème linéaire avec $\lambda(\zeta)$ constante)

$$X_{(j)}^0 = \zeta_0 + (j - 1)\Delta x(\zeta_\ell - \zeta_0), \quad j = 1, n + 2 \quad (275)$$

pourraient convenir. La convergence de l'algorithme dépend des propriétés de la fonction $\lambda(\zeta)$ (amplitude de la non linéarité) et des valeurs ζ_0 et ζ_ℓ imposées sur les bords.

1. Initialisation

$$\mathbf{X}^k = \mathbf{X}^0 \quad (276)$$

2. Construction des matrices **A** et **B**

On récupère, pour chaque volume fini j , les valeurs numériques du vecteur **X**^{*k*}

$$\zeta_{j-1} = X_{(j-1)}^k, \quad \zeta_j = X_{(j)}^k, \quad \zeta_{j+1} = X_{(j+1)}^k \quad (277)$$

et on construit la matrice carrée **A** et le vecteur second membre **B**, fonctions de **X**^{*k*} comme indiqué précédemment.

3. Inversion du système linéaire

On rappelle l'équation (253)

$$\mathbf{X}^{k+1} = [\mathbf{A} [\mathbf{X}^k]]^{-1} \cdot \mathbf{B} [\mathbf{X}^k] \quad (278)$$

qui fournit le vecteur des inconnues **X**^{*k+1*} à l'itération $k + 1$

4. Test de convergence

Quand par exemple un calcul d'erreur relative est possible

$$\varepsilon = \frac{\|\mathbf{X}^{k+1} - \mathbf{X}^k\|}{\|\mathbf{X}^k\|} \quad (279)$$

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

5. Réactualisation

$$\mathbf{X}^k = \mathbf{X}^{k+1} \quad (280)$$

et aller à 2

5.5. Mise en oeuvre de l'algorithme de Newton Raphson

5.5.1. Matrice tridiagonale DF à inverser et vecteur second membre F

Les dérivées partielles

$$\frac{\partial \varphi_j}{\partial \zeta_{j-1}}, \quad \frac{\partial \varphi_j}{\partial \zeta_j}, \quad \frac{\partial \varphi_j}{\partial \zeta_{j+1}} \quad (281)$$

fournissent respectivement les composantes de la ligne j , colonnes $(j-1)$, (j) , $(j+1)$ de la matrice dérivée DF (matrice tridiagonale). φ_j est la composante j du vecteur second membre de l'algorithme de Newton Raphson.

$$\frac{\partial \varphi_j}{\partial \zeta_{j-1}} = -d\lambda \zeta(\zeta_{j-1}) \left(\frac{\zeta_j - \zeta_{j-1}}{2} \right) + \frac{\lambda(\zeta_{j-1}) + \lambda(\zeta_j)}{2} \quad (282)$$

$$\frac{\partial \varphi_j}{\partial \zeta_j} = -d\lambda \zeta(\zeta_j) \left(\frac{-\zeta_{j-1} + 2\zeta_j - \zeta_{j+1}}{2} \right) - \frac{\lambda(\zeta_{j-1}) + 2\lambda(\zeta_j) + \lambda(\zeta_{j+1})}{2} \quad (283)$$

$$\frac{\partial \varphi_j}{\partial \zeta_{j+1}} = -d\lambda \zeta(\zeta_{j+1}) \left(\frac{\zeta_j - \zeta_{j+1}}{2} \right) + \frac{\lambda(\zeta_j) + \lambda(\zeta_{j+1})}{2} \quad (284)$$

On a donc

$$DF_{(j,j-1)} = \frac{\partial \varphi_j}{\partial \zeta_{j-1}} = -d\lambda \zeta(\zeta_{j-1}) \left(\frac{\zeta_j - \zeta_{j-1}}{2} \right) + \frac{\lambda(\zeta_{j-1}) + \lambda(\zeta_j)}{2} \quad (285)$$

$$DF_{(j,j)} = \frac{\partial \varphi_j}{\partial \zeta_j} = -d\lambda \zeta(\zeta_j) \left(\frac{-\zeta_{j-1} + 2\zeta_j - \zeta_{j+1}}{2} \right) - \frac{\lambda(\zeta_{j-1}) + 2\lambda(\zeta_j) + \lambda(\zeta_{j+1})}{2} \quad (286)$$

$$DF_{(j,j+1)} = \frac{\partial \varphi_j}{\partial \zeta_{j+1}} = -d\lambda \zeta(\zeta_{j+1}) \left(\frac{\zeta_j - \zeta_{j+1}}{2} \right) + \frac{\lambda(\zeta_j) + \lambda(\zeta_{j+1})}{2} \quad (287)$$

Pour tout volume intérieur, la composante j du vecteur second membre F est égale à $\varphi_j[\zeta_{j-1}, \zeta_j, \zeta_{j+1}]$

$$F_{(j)} = \varphi_j[\zeta_{j-1}, \zeta_j, \zeta_{j+1}] \quad (288)$$

soit

$$F_{(j)} = \left(\frac{\lambda(\zeta_j) + \lambda(\zeta_{j-1})}{2} \right) \zeta_{j-1} - \left(\frac{\lambda(\zeta_{j-1}) + 2\lambda(\zeta_j) + \lambda(\zeta_{j+1})}{2} \right) \zeta_j + \left(\frac{\lambda(\zeta_j) + \lambda(\zeta_{j+1})}{2} \right) \zeta_{j+1} \quad (289)$$

5.5.2. Conditions aux limites

Dans le cas de conditions aux limites de type Dirichlet (relation 250) les relations discrétisées s'écrivent

$$\zeta_1 - \zeta_0 = 0 \quad (290)$$

$$\zeta_{n+2} - \zeta_\ell = 0 \quad (291)$$

On en déduit les composantes des lignes 1 et $n+2$ de la matrice dérivée DF et du second membre F

$$DF_{(1,1)} = DF_{(n+2,n+2)} = 1 \quad (292)$$

et les composantes non diagonales des lignes 1 et $n+2$ sont nulles.

$$F_{(1)} = \zeta_1 - \zeta_0 \quad (293)$$

$$F_{(n+2)} = \zeta_{n+2} - \zeta_\ell \quad (294)$$

5.5.3. Initialisation et réactualisation

Par rapport à l'algorithme du point fixe, on note une condition supplémentaire à vérifier pour la valeur initiale, la dérivée première de la fonction $\lambda(\zeta)$, soit la fonction noté $d\lambda\zeta(\zeta)$ doit être définie. La convergence de l'algorithme dépend des propriétés de la fonction $\lambda(\zeta)$, de sa dérivée $d\lambda\zeta(\zeta)$, et des valeurs ζ_0 et ζ_ℓ imposées sur les bords.

1. Initialisation

$$\mathbf{X}^k = \mathbf{X}^0 \quad (295)$$

2. Construction des matrices **DF** et **F**

On récupère, pour chaque volume fini j , les valeurs numériques du vecteur $\mathbf{X}^k$

$$\zeta_{j-1} = X_{(j-1)}^k, \quad \zeta_j = X_{(j)}^k, \quad \zeta_{j+1} = X_{(j+1)}^k \quad (296)$$

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

3. Inversion du système linéaire

On rappelle l'équation (257)

$$\mathbf{X}^{k+1} = \mathbf{X}^k - [\mathbf{DF} [\mathbf{X}^k]]^{-1} \cdot \mathbf{F} [\mathbf{X}^k] \quad (297)$$

qui fournit le vecteur des inconnues $\mathbf{X}^{k+1}$ à l'itération $k + 1$

4. Test de convergence

De même, quand un calcul d'erreur relative est possible

$$\varepsilon = \frac{\|\mathbf{X}^{k+1} - \mathbf{X}^k\|}{\|\mathbf{X}^k\|} \quad (298)$$

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

5. Réactualisation

$$\mathbf{X}^k = \mathbf{X}^{k+1} \quad (299)$$

et aller à 2

Remarque : parfois, quand les domaines de définition de la fonction λ et de sa dérivée $d\lambda\zeta$ sont restreints, il peut être utile de les prolonger par continuité. Une des sources possibles de divergence de l'algorithme de Newton-Raphson est que l'inconnue ζ sorte du domaine de définition lors des itérations de l'algorithme non linéaire. Cela se produit parfois dans le cas de problèmes fortement non linéaires.

5.6. Application

5.6.1. Données

On s'intéresse à un problème adimensionnel. On considère une couche d'épaisseur $\ell = 1$ et les conditions aux limites

$$0 \leq x \leq 1, \quad \zeta(x=0) = \zeta_0 = 0, \quad \zeta(x=1) = \zeta_\ell = 1 \quad (300)$$

L'inconnue recherchée ζ est a priori comprise entre 0 et 1. Soit la fonction conductivité $\lambda(\zeta)$ de type exponentielle, définie sur l'intervalle $[0, 1]$

$$\lambda(\zeta) = \alpha^\zeta, \quad 0 \leq \zeta \leq 1 \quad (301)$$

avec

$$\lambda(\zeta = 0) = 1 \quad (302)$$

$$\lambda(\zeta = 1) = \alpha \quad (303)$$

Tester la convergence des algorithmes en fonction de la non linéarité caractérisée par les valeurs extrémales λ_a, λ_b . Par exemple dans le cas linéaire $\lambda_a = \lambda_b = 1$ et dans un cas fortement non linéaire $\lambda_a = 1$ et $\lambda_b = 10^{-4}$ (pour le

problème stationnaire, seul le contraste de conductivité, caractérisé par le ratio λ_a/λ_b est important). Dans le cas de l'algorithme de Newton Raphson on utilise la fonction dérivée

$$d\lambda\zeta(\zeta) = \alpha^\zeta \ln(\alpha), \quad 0 \leq \zeta \leq 1 \quad (304)$$

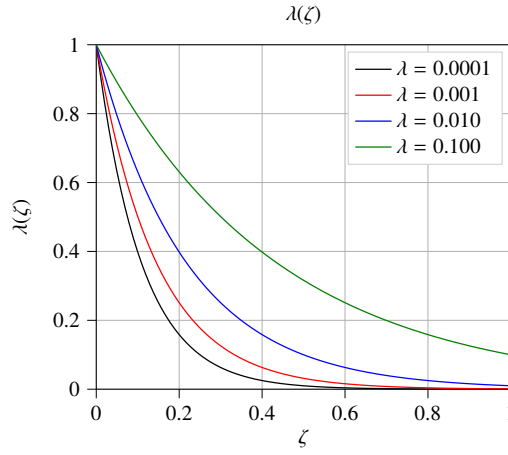


FIGURE 18: Fonction conductivité $\lambda(\zeta)$ avec $\alpha = 10^{-1} - 10^{-2} - 10^{-3} - 10^{-4}$

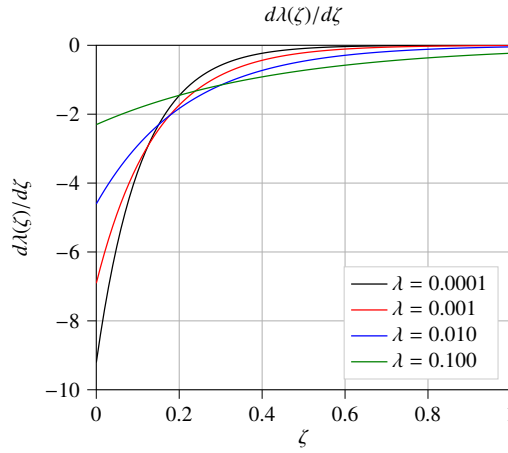


FIGURE 19: Fonction dérivée de la conductivité $d\lambda\zeta(\zeta)$ avec $\alpha = 10^{-1} - 10^{-2} - 10^{-3} - 10^{-4}$

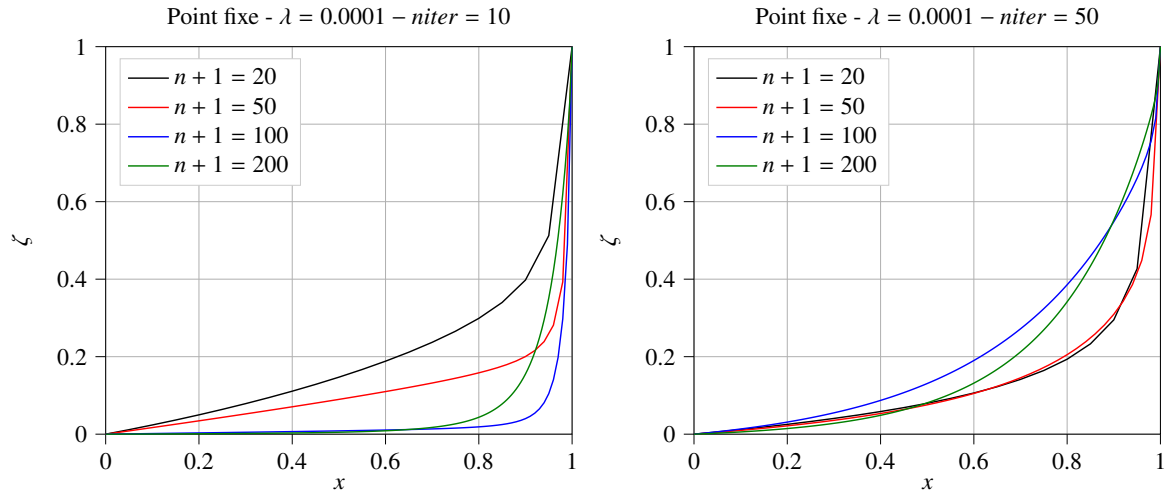


FIGURE 20: Résultats algorithme Point Fixe avec $\alpha = 10^{-4}$, sensibilité au maillage, $niter = 10$ itérations (gauche), $niter = 50$ itérations (droite)

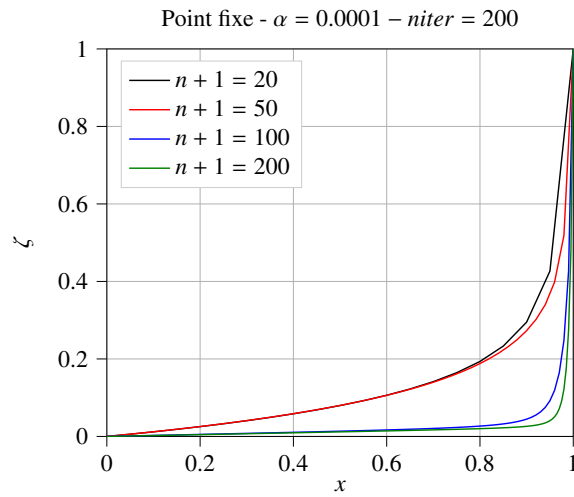


FIGURE 21: Résultats algorithme Point Fixe avec $\alpha = 10^{-4}$, sensibilité au maillage, $niter = 200$ itérations

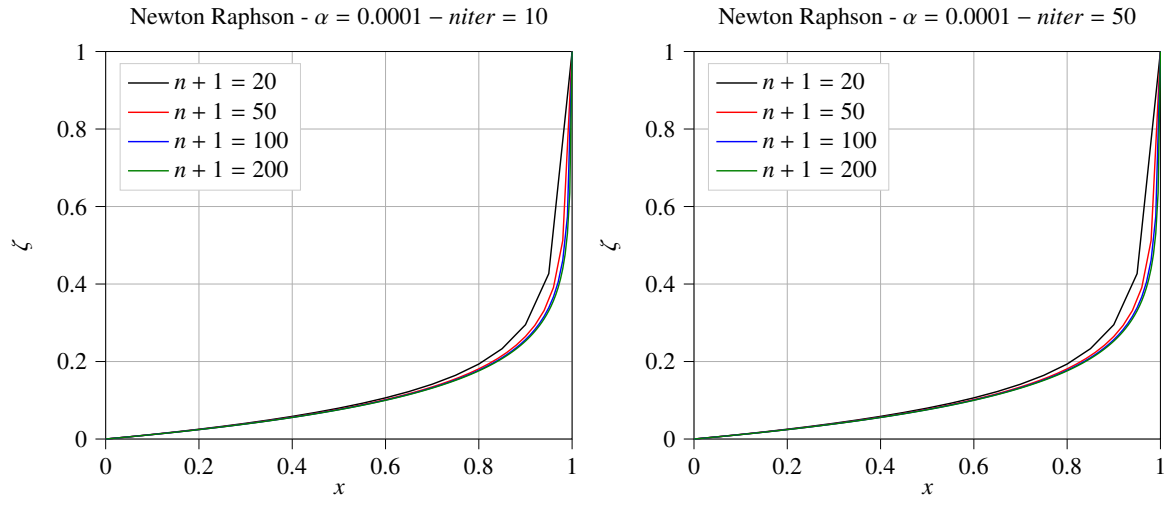


FIGURE 22: Résultats algorithme Newton Raphson avec $\alpha = 10^{-4}$, sensibilité au maillage, niter = 10 itérations (gauche), niter = 50 itérations (droite)

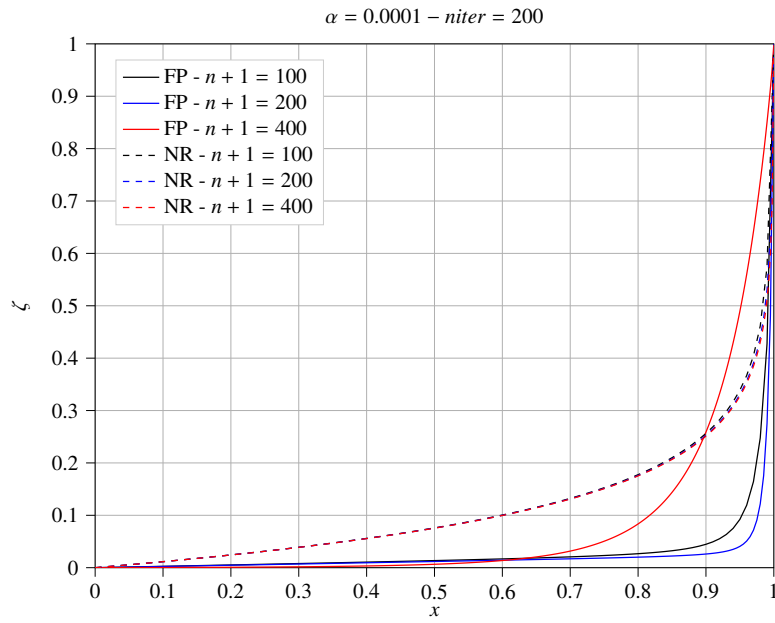


FIGURE 23: Comparaison algorithme Newton Raphson et Point Fixe avec $\alpha = 10^{-4}$

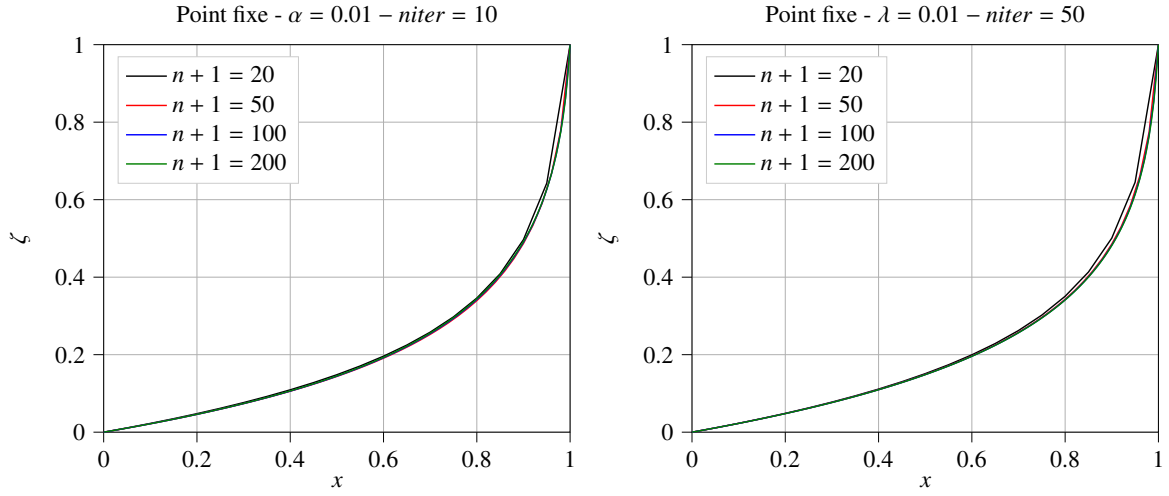


FIGURE 24: Résultats algorithme Point Fixe avec $\alpha = 10^{-2}$, sensibilité au maillage, niter = 10 itérations (gauche), niter = 50 itérations (droite)

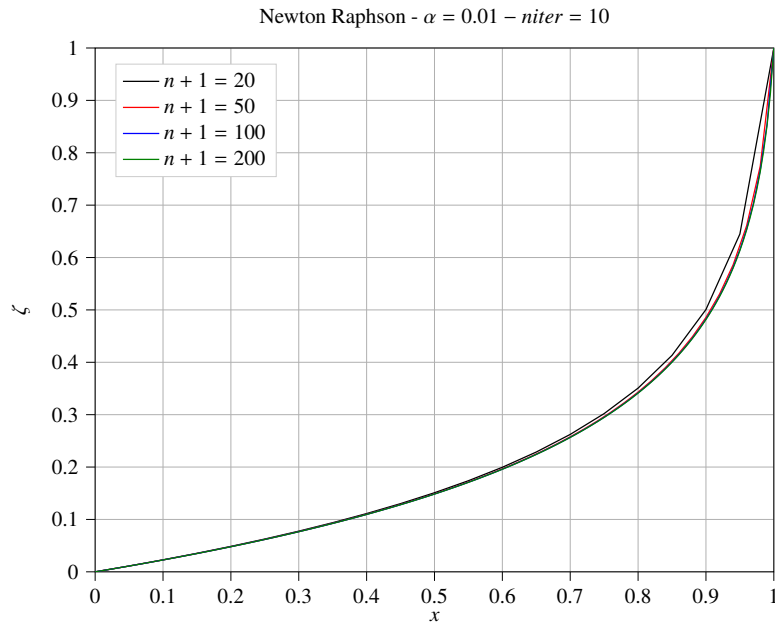


FIGURE 25: Résultats algorithme Newton Raphson avec $\alpha = 10^{-2}$

5.7. Géométrie cylindrique

Dans le cas d'une grille régulière, pour un volume de contrôle Ω_j **intérieur** (on a simplifié avec $L = 1$)

$$\Omega_j = \pi \left(\left(r_j + \frac{\Delta r}{2} \right)^2 - \left(r_j - \frac{\Delta r}{2} \right)^2 \right) \quad (305)$$

et l'équation 239 devient

$$\frac{1}{\pi \left(\left(r_j + \frac{\Delta r}{2} \right)^2 - \left(r_j - \frac{\Delta r}{2} \right)^2 \right)} \times \left(2\pi \left(\left(r_j + \frac{\Delta r}{2} \right) \lambda_{j+1/2} \left[\frac{\partial \zeta}{\partial r} \right]_{j+1/2} - \left(r_j - \frac{\Delta r}{2} \right) \lambda_{j-1/2} \left[\frac{\partial \zeta}{\partial r} \right]_{j-1/2} \right) = 0 \quad (306)$$

L'approximation de type *moyenne des fonctions* pour la conductivité et de type dérivée première centrée pour le gradient aux interfaces donne

$$\varphi_{j+1/2} \approx \left(\frac{\lambda(\zeta_j) + \lambda(\zeta_{j+1})}{2} \right) \left(\frac{\zeta_{j+1} - \zeta_j}{\Delta r} \right) \quad (307)$$

$$\varphi_{j-1/2} \approx - \left(\frac{\lambda(\zeta_j) + \lambda(\zeta_{j-1})}{2} \right) \left(\frac{\zeta_j - \zeta_{j-1}}{\Delta r} \right) \quad (308)$$

L'équation discrétisée 306 devient alors

$$\frac{1}{\left(\left(r_j + \frac{\Delta r}{2} \right)^2 - \left(r_j - \frac{\Delta r}{2} \right)^2 \right)} \times \left(\left(r_j + \frac{\Delta r}{2} \right) (\lambda(\zeta_j) + \lambda(\zeta_{j+1})) \left(\frac{\zeta_{j+1} - \zeta_j}{\Delta r} \right) - \left(r_j - \frac{\Delta r}{2} \right) (\lambda(\zeta_j) + \lambda(\zeta_{j-1})) \left(\frac{\zeta_j - \zeta_{j-1}}{\Delta r} \right) \right) = 0 \quad (309)$$

5.8. Géométrie sphérique

En géométrie sphérique, des calculs analogues fournissent

$$\frac{3}{\left(\left(r_j + \frac{\Delta r}{2} \right)^3 - \left(r_j - \frac{\Delta r}{2} \right)^3 \right)} \times \left(\left(r_j + \frac{\Delta r}{2} \right)^2 \left(\frac{\lambda(\zeta_j) + \lambda(\zeta_{j+1})}{2} \right) \left(\frac{\zeta_{j+1} - \zeta_j}{\Delta r} \right) - \left(r_j - \frac{\Delta r}{2} \right)^2 \left(\frac{\lambda(\zeta_j) + \lambda(\zeta_{j-1})}{2} \right) \left(\frac{\zeta_j - \zeta_{j-1}}{\Delta r} \right) \right) = 0 \quad (310)$$

5.9. Condition aux limites de Neumann en régime stationnaire

5.9.1. Géométrie cartésienne

On considère l'équation discrétisée 241 dans le cas particulier du bord droit de la structure $x = x_{max} = L$. On rappelle que les volumes finis situés sur les bords sont des *demi-volumes* d'épaisseur $\Delta x/2$. On note M le numéro du demi-volume situé au contact du bord droit :

$$x_{j=M} = x_{max} = L, \quad \zeta_{j=M} = \zeta_M \quad (311)$$

$$\Delta x = \frac{L}{M-1} \quad (312)$$

On considère une condition de type Neumann, c'est à dire un flux Φ_L imposé en $x_{j=M} = L$. L'équation de bilan du demi-volume $j = M$ s'écrit alors (on note la division par le demi-volume $\Delta x/2$, au lieu du volume Δx pour un volume de contrôle intérieur)

$$\frac{2}{\Delta x} (\Phi_L + \varphi_{M-1/2}) = 0 \quad (313)$$

Par rapport à l'équation générale 241, on a $\varphi_{j+1/2} = \Phi_L$ et $\varphi_{j-1/2} = \varphi_{M-1/2}$. Le point particulier à noter est que le point de discrétisation x_M d'inconnue ζ_M est situé sur l'interface

$$\frac{2}{\Delta x} (\Phi_L + \varphi_{M-1/2}) = 0 \quad (314)$$

En considérant un problème non linéaire avec les mêmes hypothèses (moyenne des fonctions et dérivée première centrée) pour l'interface gauche de l'élément on aboutit à l'équation discrétisée

$$\frac{2}{\Delta x} \left(\Phi_L - \left(\frac{\lambda[\zeta_M] + \lambda[\zeta_{M-1}]}{2} \right) \left(\frac{\zeta_M - \zeta_{M-1}}{\Delta x} \right) \right) = 0 \quad (315)$$

Dans le cas particulier d'un flux nul imposé $\Phi_L = 0$, l'équation discrétisée sur le bord devient (315)

$$- \left(\frac{\lambda[\zeta_M] + \lambda[\zeta_{M-1}]}{2} \right) \left(\frac{\zeta_M - \zeta_{M-1}}{\Delta x} \right) = 0 \quad (316)$$

Dans le cas d'une conductivité non nulle on en déduit

$$\zeta_M - \zeta_{M-1} = 0 \quad (317)$$

5.10. Approximation des flux aux interfaces : exemples de la moyenne de la fonction et de la fonction de la moyenne

L'approximation des flux aux interface de type *moyenne de la fonction* (244) utilisée dans ce cours n'est pas la seule à être utilisée. On trouvera par exemple dans [5] une approximation de type *fonction de la moyenne*

$$\varphi_{j+1/2} \approx \lambda \left[\frac{\zeta_j + \zeta_{j+1}}{2} \right] \left(\frac{\zeta_{j+1} - \zeta_j}{\Delta x} \right) \quad (318)$$

$$\varphi_{j-1/2} \approx -\lambda \left[\frac{\zeta_j + \zeta_{j-1}}{2} \right] \left(\frac{\zeta_j - \zeta_{j-1}}{\Delta x} \right) \quad (319)$$

L'équation discrétisée 241 devient alors

$$\frac{1}{\Delta x} \left(\lambda \left[\frac{\zeta_j + \zeta_{j+1}}{2} \right] \left(\frac{\zeta_{j+1} - \zeta_j}{\Delta x} \right) - \lambda \left[\frac{\zeta_j + \zeta_{j-1}}{2} \right] \left(\frac{\zeta_j - \zeta_{j-1}}{\Delta x} \right) \right) = 0 \quad (320)$$

A titre d'exercice, développer les algorithmes du point fixe et de Newton Raphson dans ce cas, et comparer avec les résultats obtenus à l'aide de l'approximation de type *moyenne de la fonction*.

6. Equation discrétisée par volumes finis dans le cas 1D non linéaire en régime transitoire

On adopte une discrétisation *implicite* des flux ainsi que la *méthode de la moyenne des fonctions* aux interfaces. Les fonctions matériaux $C(\zeta)$ et $\lambda(\zeta)$ sont des données matériaux. Dans le cas de l'algorithme de Newton Raphson, on utilisera leurs dérivées premières, notées $dC(\zeta)$ et $d\lambda(\zeta)$, et connues également

$$dC(\zeta) = C'(\zeta) = \frac{dC(\zeta)}{d\zeta} \quad (321)$$

$$d\lambda(\zeta) = \lambda'(\zeta) = \frac{d\lambda(\zeta)}{d\zeta} \quad (322)$$

6.1. Géométrie cartésienne

On considère un problème de diffusion 1D non linéaire en régime transitoire

$$C(\zeta) \frac{\partial \zeta}{\partial t} - \text{div} \left(\lambda(\zeta) \underline{\text{grad}} \zeta \right) = 0 \quad (323)$$

On intègre l'équation de bilan sur un volume de contrôle Ω_j

$$\frac{1}{\Omega_j} \int_{\Omega_j} C(\zeta) \frac{\partial \zeta}{\partial t} d\Omega_j - \frac{1}{\Omega_j} \int_{\Omega_j} \text{div} \left(\lambda(\zeta) \underline{\text{grad}} \zeta \right) d\Omega_j = 0 \quad (324)$$

Dans le cas d'un **algorithme implicite**, d'une grille régulière, pour un volume de contrôle Ω_j **intérieur** (240) l'équation discrétisée par volumes finis s'écrit

$$C(\zeta_j^{n+1}) \left(\frac{\zeta_j^{n+1} - \zeta_j^n}{\Delta t} \right) - \frac{1}{\Delta x} \left(\left(\frac{\lambda(\zeta_{j+1}^{n+1}) + \lambda(\zeta_{j+1}^n)}{2} \right) \left(\frac{\zeta_{j+1}^{n+1} - \zeta_j^{n+1}}{\Delta x} \right) - \left(\frac{\lambda(\zeta_j^{n+1}) + \lambda(\zeta_{j-1}^{n+1})}{2} \right) \left(\frac{\zeta_j^{n+1} - \zeta_{j-1}^{n+1}}{\Delta x} \right) \right) = 0 \quad (325)$$

On multiplie par Δt et on factorise

$$\begin{aligned} & -\frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} \left(\frac{\lambda(\zeta_{j-1}^{n+1}) + \lambda(\zeta_j^{n+1})}{2} \right) \zeta_{j-1}^{n+1} \\ & + \left[C(\zeta_j^{n+1}) + \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} \left(\frac{\lambda(\zeta_{j-1}^{n+1}) + 2\lambda(\zeta_j^{n+1}) + \lambda(\zeta_{j+1}^{n+1})}{2} \right) \right] \zeta_j^{n+1} \\ & - \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} \left(\frac{\lambda(\zeta_j^{n+1}) + \lambda(\zeta_{j+1}^{n+1})}{2} \right) \zeta_{j+1}^{n+1} \\ & - C(\zeta_j^{n+1}) \zeta_j^n = 0 \end{aligned} \quad (326)$$

Dans le cas d'un problème linéaire homogène l'équation 326 devient

$$-\frac{\lambda \Delta t}{(\Delta x)^2} \zeta_{j-1}^{n+1} + \left[C + \frac{2\lambda \Delta t}{(\Delta x)^2} \right] \zeta_j^{n+1} - \frac{\lambda \Delta t}{(\Delta x)^2} \zeta_{j+1}^{n+1} - C \zeta_j^n = 0 \quad (327)$$

6.1.1. Mise en oeuvre de l'algorithme implicite transitoire du point fixe

On détaille le cas d'un volume de contrôle intérieur j . L'algorithme transitoire non linéaire du point fixe nécessite de factoriser l'équation discrétisée (326) par rapport aux trois inconnues, ζ_{j-1}^{n+1} , ζ_j^{n+1} , ζ_{j+1}^{n+1} . On peut la réexprimer sous la forme

$$\begin{aligned} & -\frac{\Delta t}{2(\Delta x)^2} (\lambda(\zeta_{j-1}^{n+1}) + \lambda(\zeta_j^{n+1})) \zeta_{j-1}^{n+1} \\ & + \left[C(\zeta_j^{n+1}) + \frac{\Delta t}{2(\Delta x)^2} (\lambda(\zeta_{j-1}^{n+1}) + 2\lambda(\zeta_j^{n+1}) + \lambda(\zeta_{j+1}^{n+1})) \right] \zeta_j^{n+1} \\ & - \frac{\Delta t}{2(\Delta x)^2} (\lambda(\zeta_j^{n+1}) + \lambda(\zeta_{j+1}^{n+1})) \zeta_{j+1}^{n+1} \\ & = C(\zeta_j^{n+1}) \zeta_j^n \end{aligned} \quad (328)$$

La factorisation du membre de gauche fournit les coefficients ligne j , colonnes $j - 1$, j et $j + 1$ de la matrice tridiagonale $\mathbf{A} [\mathbf{X}_{n+1}^k]$ et le membre de droite fournit la ligne j du vecteur second membre $\mathbf{B} [\mathbf{X}_{n+1}^k]$. On obtient ainsi

$$A_{j,j-1} = -\frac{\Delta t}{2(\Delta x)^2} (\lambda (\zeta_{j-1}^{n+1}) + \lambda (\zeta_j^{n+1})) \quad (329)$$

$$A_{j,j} = C (\zeta_j^{n+1}) + \frac{\Delta t}{2(\Delta x)^2} (\lambda (\zeta_{j-1}^{n+1}) + 2\lambda (\zeta_j^{n+1}) + \lambda (\zeta_{j+1}^{n+1})) \quad (330)$$

$$A_{j,j+1} = -\frac{\Delta t}{2(\Delta x)^2} (\lambda (\zeta_j^{n+1}) + \lambda (\zeta_{j+1}^{n+1})) \quad (331)$$

$$B_j = C (\zeta_j^{n+1}) \zeta_j^n \quad (332)$$

6.1.2. Mise en oeuvre de l'algorithme implicite transitoire de Newton Raphson

On détaille le cas d'un volume de contrôle intérieur j . L'algorithme transitoire non linéaire de Newton Raphson, nécessite de dériver l'équation discrétisée (326) par rapport aux trois inconnues, ζ_{j-1}^{n+1} , ζ_j^{n+1} , ζ_{j+1}^{n+1} . Cette dérivation fournit les coefficients ligne j , colonnes $j - 1$, j et $j + 1$ de la matrice tridiagonale $\mathbf{DF} [\mathbf{X}_{n+1}^k]$, dite matrice gradient ou matrice dérivée

$$DF_{j,j-1} = -\frac{\Delta t}{2(\Delta x)^2} (\lambda (\zeta_{j-1}^{n+1}) + \lambda (\zeta_j^{n+1})) + \frac{\Delta t}{2(\Delta x)^2} d\lambda (\zeta_{j-1}^{n+1}) (\zeta_j^{n+1} - \zeta_{j-1}^{n+1}) \quad (333)$$

$$DF_{j,j} = C (\zeta_j^{n+1}) + \frac{\Delta t}{2(\Delta x)^2} (\lambda (\zeta_{j-1}^{n+1}) + 2\lambda (\zeta_j^{n+1}) + \lambda (\zeta_{j+1}^{n+1})) + dC (\zeta_j^{n+1}) (\zeta_j^{n+1} - \zeta_j^n) + \frac{\Delta t}{2(\Delta x)^2} d\lambda (\zeta_j^{n+1}) (-\zeta_{j-1}^{n+1} + 2\zeta_j^{n+1} - \zeta_{j+1}^{n+1}) \quad (334)$$

$$DF_{j,j+1} = -\frac{\Delta t}{2(\Delta x)^2} (\lambda (\zeta_j^{n+1}) + \lambda (\zeta_{j+1}^{n+1})) + \frac{\Delta t}{2(\Delta x)^2} d\lambda (\zeta_{j+1}^{n+1}) (\zeta_j^{n+1} - \zeta_{j+1}^{n+1}) \quad (335)$$

La ligne j du vecteur second membre est égale à l'équation discrétisée (326)

$$F_j = -\frac{\Delta t}{2(\Delta x)^2} (\lambda (\zeta_{j-1}^{n+1}) + \lambda (\zeta_j^{n+1})) \zeta_{j-1}^{n+1} + \left[C (\zeta_j^{n+1}) + \frac{\Delta t}{2(\Delta x)^2} (\lambda (\zeta_{j-1}^{n+1}) + 2\lambda (\zeta_j^{n+1}) + \lambda (\zeta_{j+1}^{n+1})) \right] \zeta_j^{n+1} - \frac{\Delta t}{2(\Delta x)^2} (\lambda (\zeta_j^{n+1}) + \lambda (\zeta_{j+1}^{n+1})) \zeta_{j+1}^{n+1} - C (\zeta_j^{n+1}) \zeta_j^n \quad (336)$$

6.1.3. Cas particulier

On trouve fréquemment l'équation de diffusion non linéaire exprimée sous la forme

$$\frac{\partial \zeta}{\partial t} - \text{div} (D(\zeta) \text{grad} \zeta) = 0 \quad (337)$$

Cela revient à appliquer le cas général avec

$$C(\zeta) = 1, \quad dC(\zeta) = 0 \quad (338)$$

et en faisant les substitutions $\lambda(\zeta) \rightarrow D(\zeta)$, $d\lambda(\zeta) \rightarrow dD(\zeta)$. On obtient dans le cas de l'algorithme du point fixe

$$A_{j,j-1} = -\frac{\Delta t}{2(\Delta x)^2} (D(\zeta_{j-1}^{n+1}) + D(\zeta_j^{n+1})) \quad (339)$$

$$A_{j,j} = 1 + \frac{\Delta t}{2(\Delta x)^2} (D(\zeta_{j-1}^{n+1}) + 2D(\zeta_j^{n+1}) + D(\zeta_{j+1}^{n+1})) \quad (340)$$

$$A_{j,j+1} = -\frac{\Delta t}{2(\Delta x)^2} (D(\zeta_j^{n+1}) + D(\zeta_{j+1}^{n+1})) \quad (341)$$

$$B_j = \zeta_j^n \quad (342)$$

Les relations correspondantes pour l'algorithme de Newton Raphson sont

$$\begin{aligned} DF_{j,j-1} &= -\frac{\Delta t}{2(\Delta x)^2} (D(\zeta_{j-1}^{n+1}) + D(\zeta_j^{n+1})) \\ &+ \frac{\Delta t}{2(\Delta x)^2} dD(\zeta_{j-1}^{n+1}) (\zeta_j^{n+1} - \zeta_{j-1}^{n+1}) \end{aligned} \quad (343)$$

$$\begin{aligned} DF_{j,j} &= 1 + \frac{\Delta t}{2(\Delta x)^2} (D(\zeta_{j-1}^{n+1}) + 2D(\zeta_j^{n+1}) + D(\zeta_{j+1}^{n+1})) \\ &+ \frac{\Delta t}{2(\Delta x)^2} dD(\zeta_j^{n+1}) (-\zeta_{j-1}^{n+1} + 2\zeta_j^{n+1} - \zeta_{j+1}^{n+1}) \end{aligned} \quad (344)$$

$$\begin{aligned} DF_{j,j+1} &= -\frac{\Delta t}{2(\Delta x)^2} (D(\zeta_j^{n+1}) + D(\zeta_{j+1}^{n+1})) \\ &+ \frac{\Delta t}{2(\Delta x)^2} dD(\zeta_{j+1}^{n+1}) (\zeta_j^{n+1} - \zeta_{j+1}^{n+1}) \end{aligned} \quad (345)$$

La ligne j du vecteur second membre est égale à l'équation discrétisée

$$\begin{aligned} F_j &= -\frac{\Delta t}{2(\Delta x)^2} (D(\zeta_{j-1}^{n+1}) + D(\zeta_j^{n+1})) \zeta_{j-1}^{n+1} \\ &+ \left[1 + \frac{\Delta t}{2(\Delta x)^2} (D(\zeta_{j-1}^{n+1}) + 2D(\zeta_j^{n+1}) + D(\zeta_{j+1}^{n+1})) \right] \zeta_j^{n+1} \\ &- \frac{\Delta t}{2(\Delta x)^2} (D(\zeta_j^{n+1}) + D(\zeta_{j+1}^{n+1})) \zeta_{j+1}^{n+1} \\ &- \zeta_j^n \end{aligned} \quad (346)$$

6.2. Géométrie cylindrique

$$\begin{aligned} &C(\zeta_j^{n+1}) \left(\frac{\zeta_j^{n+1} - \zeta_j^n}{\Delta t} \right) \\ &- \frac{1}{\left(\left(r_j + \frac{\Delta r}{2} \right)^2 - \left(r_j - \frac{\Delta r}{2} \right)^2 \right)} \times \\ &\times \left(\left(r_j + \frac{\Delta r}{2} \right) (\lambda(\zeta_j^{n+1}) + \lambda(\zeta_{j+1}^{n+1})) \left(\frac{\zeta_{j+1}^{n+1} - \zeta_j^{n+1}}{\Delta r} \right) \right. \\ &\left. - \left(r_j - \frac{\Delta r}{2} \right) (\lambda(\zeta_j^{n+1}) + \lambda(\zeta_{j-1}^{n+1})) \left(\frac{\zeta_j^{n+1} - \zeta_{j-1}^{n+1}}{\Delta r} \right) \right) \\ &= 0 \end{aligned} \quad (347)$$

On multipliera l'équation (352) par Δt et on factorisera par rapport à ζ_{j-1}^{n+1} , ζ_j^{n+1} et ζ_{j+1}^{n+1} .

6.3. Géométrie sphérique

$$\begin{aligned}
& C(\zeta_j^{n+1}) \left(\frac{\zeta_j^{n+1} - \zeta_j^n}{\Delta t} \right) \\
& - \frac{\left(\left(r_j + \frac{\Delta r}{2} \right)^3 - \left(r_j - \frac{\Delta r}{2} \right)^3 \right)}{3} \times \\
& \times \left(\left(r_j + \frac{\Delta r}{2} \right)^2 \left(\frac{\lambda(\zeta_j^{n+1}) + \lambda(\zeta_{j+1}^{n+1})}{2} \right) \left(\frac{\zeta_{j+1}^{n+1} - \zeta_j^{n+1}}{\Delta r} \right) \right. \\
& \left. - \left(r_j - \frac{\Delta r}{2} \right)^2 \left(\frac{\lambda(\zeta_j^{n+1}) + \lambda(\zeta_{j-1}^{n+1})}{2} \right) \left(\frac{\zeta_j^{n+1} - \zeta_{j-1}^{n+1}}{\Delta r} \right) \right) \\
& = 0
\end{aligned} \tag{348}$$

On multipliera de même l'équation (348) par Δt et on factorisera par rapport à ζ_{j-1}^{n+1} , ζ_j^{n+1} et ζ_{j+1}^{n+1} .

6.4. Condition aux limites de Neumann en régime transitoire

6.4.1. Géométrie cartésienne

On considère l'équation discrétisée dans le cas particulier du bord droit de la structure $x = x_{max} = L$. Dans le cas particulier d'un flux nul imposé $\Phi_L = 0$, l'équation discrétisée sur le bord devient (315)

$$C(\zeta_M^{n+1}) \left(\frac{\zeta_M^{n+1} - \zeta_M^n}{\Delta t} \right) - \frac{2}{\Delta x} \left(\Phi_L - \left(\frac{\lambda(\zeta_M^{n+1}) + \lambda(\zeta_{M-1}^{n+1})}{2} \right) \left(\frac{\zeta_M^{n+1} - \zeta_{M-1}^{n+1}}{\Delta x} \right) \right) = 0 \tag{349}$$

après simplification et factorisation

$$\begin{aligned}
& - \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} (\lambda(\zeta_{M-1}^{n+1}) + \lambda(\zeta_M^{n+1})) \zeta_{M-1}^{n+1} \\
& + \left(C(\zeta_M^{n+1}) + \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} (\lambda(\zeta_{M-1}^{n+1}) + \lambda(\zeta_M^{n+1})) \right) \zeta_M^{n+1} \\
& - C(\zeta_M^{n+1}) \zeta_M^n = 0
\end{aligned} \tag{350}$$

et pour un problème linéaire et homogène

$$- \frac{2\lambda\Delta t}{(\Delta x)^2} \zeta_{M-1}^{n+1} + \left(C + \frac{2\lambda\Delta t}{(\Delta x)^2} \right) \zeta_M^{n+1} - C\zeta_M^n = 0 \tag{351}$$

6.4.2. Géométrie cylindrique

Après simplification et division par le coefficient πL , l'équation de diffusion 1D non linéaire transitoire discrétisée du contrôle intérieur j s'écrit

$$\begin{aligned}
& C(\zeta_j^{n+1}) \left(\frac{\zeta_j^{n+1} - \zeta_j^n}{\Delta t} \right) \left(\left(r_j + \frac{\Delta r}{2} \right)^2 - \left(r_j - \frac{\Delta r}{2} \right)^2 \right) \\
& - \left(\left(r_j + \frac{\Delta r}{2} \right) (\lambda(\zeta_j^{n+1}) + \lambda(\zeta_{j+1}^{n+1})) \left(\frac{\zeta_{j+1}^{n+1} - \zeta_j^{n+1}}{\Delta r} \right) \right. \\
& \left. - \left(r_j - \frac{\Delta r}{2} \right) (\lambda(\zeta_j^{n+1}) + \lambda(\zeta_{j-1}^{n+1})) \left(\frac{\zeta_j^{n+1} - \zeta_{j-1}^{n+1}}{\Delta r} \right) \right) = 0
\end{aligned} \tag{352}$$

On multipliera l'équation (352) par Δt et on factorisera par rapport à ζ_{j-1}^{n+1} , ζ_j^{n+1} et ζ_{j+1}^{n+1} (dans le cas de l'algorithme non linéaire du point fixe).

On rappelle que le maillage est régulier, de pas d'espace Δr , distance entre les points de discrétisation et épaisseur des volumes de contrôle intérieurs, et que des demi-volumes sont placés sur les bords (d'épaisseur $\Delta r/2$ donc).

— condition de flux nul sur le bord intérieur $r = r_i$

$$\begin{aligned} & C(\zeta_1^{n+1}) \left(\frac{\zeta_1^{n+1} - \zeta_1^n}{\Delta t} \right) \left(\left(r_i + \frac{\Delta r}{2} \right)^2 - r_i^2 \right) \\ & - \left(2 \left(r_i + \frac{\Delta r}{2} \right) \left(\frac{\lambda(\zeta_1^{n+1}) + \lambda(\zeta_2^{n+1})}{2} \right) \left(\frac{\zeta_2^{n+1} - \zeta_1^{n+1}}{\Delta r} \right) - \Phi_{r_i} \right) = 0 \end{aligned} \quad (353)$$

qui se simplifie avec $\Phi_{r_i} = 0$

$$\begin{aligned} & C(\zeta_1^{n+1}) \left(\frac{\zeta_1^{n+1} - \zeta_1^n}{\Delta t} \right) \left(\left(r_i + \frac{\Delta r}{2} \right)^2 - r_i^2 \right) \\ & - 2 \left(r_i + \frac{\Delta r}{2} \right) \left(\frac{\lambda(\zeta_1^{n+1}) + \lambda(\zeta_2^{n+1})}{2} \right) \left(\frac{\zeta_2^{n+1} - \zeta_1^{n+1}}{\Delta r} \right) = 0 \end{aligned} \quad (354)$$

ou encore

$$\begin{aligned} & C(\zeta_1^{n+1}) \left(\frac{\zeta_1^{n+1} - \zeta_1^n}{\Delta t} \right) \left(\left(r_i + \frac{\Delta r}{2} \right)^2 - r_i^2 \right) \\ & - \left(r_i + \frac{\Delta r}{2} \right) (\lambda(\zeta_1^{n+1}) + \lambda(\zeta_2^{n+1})) \left(\frac{\zeta_2^{n+1} - \zeta_1^{n+1}}{\Delta r} \right) = 0 \end{aligned} \quad (355)$$

On multiplie l'équation (355) par Δt , et on sépare intant connu n et inconnu $n + 1$ (attention : le second membre dépend de ζ_1^{n+1})

$$\begin{aligned} & \left(C(\zeta_1^{n+1}) \left(\left(r_i + \frac{\Delta r}{2} \right)^2 - r_i^2 \right) + \frac{\Delta t}{\Delta r} \left(r_i + \frac{\Delta r}{2} \right) (\lambda(\zeta_1^{n+1}) + \lambda(\zeta_2^{n+1})) \right) \zeta_1^{n+1} \\ & - \frac{\Delta t}{\Delta r} \left(r_i + \frac{\Delta r}{2} \right) (\lambda(\zeta_1^{n+1}) + \lambda(\zeta_2^{n+1})) \zeta_2^{n+1} = C(\zeta_1^{n+1}) \left(\left(r_i + \frac{\Delta r}{2} \right)^2 - r_i^2 \right) \zeta_1^n \end{aligned} \quad (356)$$

— condition de flux nul sur le bord extérieur $r = r_e$

$$\begin{aligned} & C(\zeta_M^{n+1}) \left(\frac{\zeta_M^{n+1} - \zeta_M^n}{\Delta t} \right) \left(r_e^2 - \left(r_e - \frac{\Delta r}{2} \right)^2 \right) \\ & - \left(\Phi_{r_e} - 2 \left(r_e - \frac{\Delta r}{2} \right) \left(\frac{\lambda(\zeta_{M-1}^{n+1}) + \lambda(\zeta_M^{n+1})}{2} \right) \left(\frac{\zeta_M^{n+1} - \zeta_{M-1}^{n+1}}{\Delta r} \right) \right) = 0 \end{aligned} \quad (357)$$

qui se simplifie avec $\Phi_{r_e} = 0$

$$\begin{aligned} & C(\zeta_M^{n+1}) \left(\frac{\zeta_M^{n+1} - \zeta_M^n}{\Delta t} \right) \left(r_e^2 - \left(r_e - \frac{\Delta r}{2} \right)^2 \right) \\ & + 2 \left(r_e - \frac{\Delta r}{2} \right) \left(\frac{\lambda(\zeta_{M-1}^{n+1}) + \lambda(\zeta_M^{n+1})}{2} \right) \left(\frac{\zeta_M^{n+1} - \zeta_{M-1}^{n+1}}{\Delta r} \right) = 0 \end{aligned} \quad (358)$$

ou encore

$$\begin{aligned} & C(\zeta_M^{n+1}) \left(\frac{\zeta_M^{n+1} - \zeta_M^n}{\Delta t} \right) \left(r_e^2 - \left(r_e - \frac{\Delta r}{2} \right)^2 \right) \\ & + \left(r_e - \frac{\Delta r}{2} \right) (\lambda(\zeta_{M-1}^{n+1}) + \lambda(\zeta_M^{n+1})) \left(\frac{\zeta_M^{n+1} - \zeta_{M-1}^{n+1}}{\Delta r} \right) = 0 \end{aligned} \quad (359)$$

7. Références

Références

- [1] B. Lucquin, O. Pironneau, Introduction au calcul scientifique, Masson, Paris, 1996.

- [2] D. Euvrard, 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, 3rd Edition, Masson, Paris, 1994.
- [3] A. L. Pourhiet, Résolution numérique des Equations aux Dérivées Partielles. Une première approche, Editions Cepadues, Toulouse, 1988.
- [4] P. Rappaz, M. Bellet, M. Deville, Modélisation numérique en sciences des matériaux, Presses Polytechniques et Universitaires Romandes, Lausanne, 1998.
- [5] D. R. Croft, D. G. Giley, Heat transfer calculations using finite difference equations, Applied Science Publishers LTD, London, 1977.
- [6] S. V. Patankar, Numerical Heat Transfer and Heat Flow, Hemisphere Publishing Corporation, 1980.
- [7] H. Versteeg, W. Malalasekera, An introduction to computational fluid dynamics. The finite volume method, ISBN 0-582-21884-5, Addison Wesley Longman Limited., England, 1998.
- [8] P. Roux, Méthode des volumes finis en thermoélasticité. Application à l'homogénéisation des milieux continus, Ph.D. thesis, Université de Bordeaux I, Bordeaux (1994).
- [9] M. Mainguy, Modèles de diffusion non linéaires en milieux poreux. Application à la dissolution et au séchage des matériaux cimentaires, Ph.D. thesis, ENPC, Paris (1999).
- [10] H. Lomax, T. H. Pulliam, D. W. Zingg, Finite-Volume Methods, Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2001, pp. 67–79.
- [11] J. H. Ferziger, M. Perić, Finite Volume Methods, Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2002, pp. 71–89.
- [12] H. Versteeg, W. Malalasekera, An introduction to computational fluid dynamics. The finite volume method, 2nd Edition, Pearson Education Limited, England, 2007.
- [13] O. C. Zienkiewicz, R. L. Taylor, The Finite Element Method. Volume 1 : The Basis, fifth version Edition, Butterworth-Heinemann, 2000.
- [14] M. Rappaz, M. Bellet, M. Deville, Numerical Modeling in Materials Science and Engineering, Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2003.
- [15] F. Moukalled, L. Mangani, M. Darwish, The Finite Volume Method, Springer International Publishing, 2016, pp. 103–135.
- [16] R. Eymard, T. Gallouet, R. Herbin, The Finite Volume Methods, in : P. Ciarlet, J. Lions (Eds.), Handbook of Numerical analysis, North Holland, 2000, pp. 715–1022.
- [17] B. Haq, J. Liu, K. Liu, E. Malaki, D. Al-Shehri, Modification of Eclipse simulator for microbial enhanced oil recovery, Journal of Petroleum Exploration and Production Technology 9 (3) (2019) 2247–2261.
- [18] F. Archambeau, N. Méchitoua, M. Sakiz, Code Saturne : A Finite Volume Code for the computation of turbulent incompressible flows - Industrial Applications, International Journal on Finite Volumes 1 (1) (2004) 1–62.
- [19] A. Giraud, R. Giot, F. Homand, A. Koriche, Permeability identification of a weakly permeable partially saturated porous rock, Transport in Porous Media 69 (2) (2007) 259–280.