

# Projet EDP 2026 : Equation de diffusion 1D transitoire en géométrie sphérique : modélisations linéaire et non linéaire

Albert Giraud

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

---

## Abstract

La méthode des volumes finis est appliquée à la modélisation numérique de l'équation de diffusion 1D transitoire en géométrie sphérique.

*Keywords:* , méthode des volumes finis, algorithme implicite

---

## 1. Problème posé

Il faut résoudre une équation de diffusion transitoire non linéaire de la forme

$$\frac{\partial \zeta}{\partial t} - \text{div} (D [\zeta] \underline{\text{grad}} \zeta) = 0 \quad (1)$$

où la variable  $\zeta$  représente la concentration volumique de l'eau,  $D [\zeta]$  représente le *coefficient de diffusion*

$$D [\zeta] = A \exp (B\zeta) \quad (2)$$

avec  $A$  et  $B$  sont des constantes

$$A = 1.0 \cdot 10^{-12} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}, \quad B = 0.05 \text{ m}^3 \text{ l}^{-1} \quad (3)$$

(4)

On se place en **géométrie sphérique 1D** et on considère une sphère de rayon  $R = 0.95 \text{ m}$ .

La condition initiale est de type concentration uniforme définie telle que :

$$\zeta(r, t = 0) = \zeta_0 \quad \forall r, \quad 0 \leq r \leq R \quad (5)$$

La condition à la limite en  $r = R$  est de type Dirichlet :

$$\zeta(r = R, t > 0) = \zeta_e \quad (6)$$

et une condition de symétrie est imposée en  $r = 0$  (flux nul)

$$\frac{\partial \zeta}{\partial r}(r = 0, t > 0) = 0 \quad (7)$$

On considèrera les valeurs numériques :

$$\zeta_e = 127. \text{ l m}^{-3}, \quad \zeta_0 = 87. \text{ l m}^{-3} \quad (8)$$

---

Email address: [Albert.Giraud@univ-lorraine.fr](mailto:Albert.Giraud@univ-lorraine.fr) (Albert Giraud)

### 1.1. Résolution par volumes finis du problème transitoire linéaire

Le problème non linéaire est simplifié et la fonction  $D[\zeta]$  est remplacée par une constante  $D_0$ . L'équation à résoudre se réduit donc à :

$$\frac{\partial \zeta}{\partial t} - \text{div} (D_0 \text{grad} \zeta) = 0 \quad (9)$$

On considèrera trois cas pour les applications numériques :

$$D_0^{(1)} = D[\zeta_0], \quad D_0^{(2)} = D\left[\frac{\zeta_0 + \zeta_e}{2}\right], \quad D_0^{(3)} = D[\zeta_e] \quad (10)$$

On doit donc résoudre le problème transitoire linéaire

$$\frac{\partial \zeta}{\partial t} - \text{div} (D_0 \text{grad} \zeta) = 0 \quad (11)$$

$$\zeta(r, t = 0) = \zeta_0 \quad \forall r, \quad 0 \leq r \leq R \quad (12)$$

$$\zeta(r = R, t > 0) = \zeta_e \quad (13)$$

$$\frac{\partial \zeta}{\partial r}(r = 0, t > 0) = 0 \quad (14)$$

à l'aide de la méthode des volumes finis, avec **algorithme implicite** pour l'intégration temporelle. Tracer la solution, pour les trois cas  $D_0^{(i)}$  aux instants demandés.

**Les résultats attendus sont les profils de  $\zeta$  aux instants 1 jour, 1 mois, 1 an, 5 ans, 10 ans et 50 ans.**

### 1.2. Résolution du problème transitoire non linéaire

On suggère de résoudre le problème non linéaire transitoire en utilisant l'algorithme du Point Fixe, plus simple à mettre en oeuvre que l'algorithme de Newton Raphson.

**Les résultats attendus sont les profils de  $\zeta$  aux instants 1 jour, 1 mois, 1 an, 5 ans, 10 ans et 50 ans.**

## 2. Evaluation du projet, précisions et suggestions

- La résolution numérique du problème de diffusion transitoire linéaire (cf. section 1.1) décrite dans un rapport de bonne qualité conduira à une validation du projet. Outre la présentation des résultats, une attention particulière sera portée aux détails et explications de mise en oeuvre de la méthode.
- La résolution numérique du problème transitoire non linéaire (cf. section 1.2) permettra d'atteindre l'évaluation A, à condition, bien sûr, que le rapport associé soit de bonne qualité et que les méthodes mises en oeuvre soient expliquées.
- Travail par groupes de 2 ou 3.
- Se reporter à la section 3, au polycopié de cours et aux diapositives dans lesquels l'adaptation de la méthode des volumes finis à la géométrie sphérique (équation de diffusion transitoire et condition aux limites de Neumann notamment) est présentée. Vous devrez établir l'équation discrétisée à résoudre.

### 3. Rappels et résultats utiles pour la géométrie sphérique

On rappelle que dans le cadre de la méthode des volumes finis, on intègre l'équation de bilan sur un volume de contrôle  $\Omega_j$

$$\int_{\Omega_j} \frac{\partial \zeta}{\partial t} d\Omega_j - \int_{\Omega_j} \text{div} (D(\zeta) \underline{\text{grad}} \zeta) d\Omega_j = 0 \quad (15)$$

Le théorème de la divergence est ensuite utilisé

$$\int_{\Omega_j} \frac{\partial \zeta}{\partial t} d\Omega_j - \int_{\partial \Omega_j} D(\zeta) \underline{\text{grad}} \zeta \cdot \underline{n} da = 0 \quad (16)$$

#### 3.1. Vecteur gradient 1D

— vecteur gradient 1D en géométrie sphérique (à symétrie radiale) : soit  $\zeta = \zeta(r)$ , une fonction scalaire du rayon  $r$

$$\underline{\text{grad}} \zeta = \frac{d\zeta}{dr} \underline{e}_r \quad (17)$$

#### 3.2. Volume et aires des interfaces en géométrie sphérique

Soit une grille régulière, de pas  $\Delta r$  et le volume de contrôle  $j$  de centre  $r_j$ , et de rayons d'interfaces gauche  $r_{j-1/2} = r_j - \frac{\Delta r}{2}$  et droite  $r_{j+1/2} = r_j + \frac{\Delta r}{2}$

— volume  $\Omega_j$

$$\Omega_j = \frac{4\pi}{3} \left( \left( r_j + \frac{\Delta r}{2} \right)^3 - \left( r_j - \frac{\Delta r}{2} \right)^3 \right) \quad (18)$$

— aire de l'interface gauche  $j - 1/2$  de rayon  $r_{j-1/2} = r_j - \frac{\Delta r}{2}$

$$S_{j-1/2} = 4\pi \left( r_j - \frac{\Delta r}{2} \right)^2 \quad (19)$$

— aire de l'interface droite  $j + 1/2$  de rayon  $r_{j+1/2} = r_j + \frac{\Delta r}{2}$

$$S_{j+1/2} = 4\pi \left( r_j + \frac{\Delta r}{2} \right)^2 \quad (20)$$

#### 3.3. Flux aux interfaces gauche et droite en géométrie sphérique

— pour rappel, en géométrie cartésienne les flux aux interfaces  $j \pm 1/2$  sont définis par

$$\varphi_{j+1/2} = D_{j+1/2} [\underline{\text{grad}} \zeta \cdot \underline{n}]_{j+1/2} = D_{j+1/2} \left[ \frac{d\zeta}{dx} \underline{e}_x \cdot \underline{e}_x \right]_{j+1/2} = D_{j+1/2} \left[ \frac{d\zeta}{dx} \right]_{j+1/2} \quad (21)$$

$$\varphi_{j-1/2} = D_{j-1/2} [\underline{\text{grad}} \zeta \cdot \underline{n}]_{j-1/2} = D_{j-1/2} \left[ \frac{d\zeta}{dx} \underline{e}_x \cdot (-\underline{e}_x) \right]_{j-1/2} = -D_{j-1/2} \left[ \frac{d\zeta}{dx} \right]_{j-1/2} \quad (22)$$

— en géométrie sphérique les flux aux interfaces  $j \pm 1/2$  sont définis par

$$\varphi_{j+1/2} = D_{j+1/2} [\underline{\text{grad}} \zeta \cdot \underline{n}]_{j+1/2} = D_{j+1/2} \left[ \frac{d\zeta}{dr} \underline{e}_r \cdot \underline{e}_r \right]_{j+1/2} = D_{j+1/2} \left[ \frac{d\zeta}{dr} \right]_{j+1/2} \quad (23)$$

$$\varphi_{j-1/2} = D_{j-1/2} [\underline{\text{grad}} \zeta \cdot \underline{n}]_{j-1/2} = D_{j-1/2} \left[ \frac{d\zeta}{dr} \underline{e}_r \cdot (-\underline{e}_r) \right]_{j-1/2} = -D_{j-1/2} \left[ \frac{d\zeta}{dr} \right]_{j-1/2} \quad (24)$$

— approximation de type dérivée première centrée pour le gradient aux interfaces

$$\left[ \frac{d\zeta}{dr} \right]_{j-1/2} = \frac{\zeta_j - \zeta_{j-1}}{\Delta r} \quad , \quad \left[ \frac{d\zeta}{dr} \right]_{j+1/2} = \frac{\zeta_{j+1} - \zeta_j}{\Delta r} \quad (25)$$

— flux aux interfaces  $j \pm 1/2$  avec approximation de type dérivée première centrée pour le gradient aux interfaces

$$\varphi_{j+1/2} = D_{j+1/2} \left( \frac{\zeta_{j+1} - \zeta_j}{\Delta r} \right) \quad , \quad \varphi_{j-1/2} = -D_{j-1/2} \left( \frac{\zeta_j - \zeta_{j-1}}{\Delta r} \right) \quad (26)$$

### 3.4. Intégration des flux aux interfaces gauche et droite en géométrie sphérique

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

$$\int_{\partial\Omega_j} D[\zeta] \underline{\text{grad}}\zeta \cdot \underline{n} \, da \quad (27)$$

Pour rappel, en géométrie cartésienne

$$\int_{\partial\Omega_j} D[\zeta] \underline{\text{grad}}\zeta \cdot \underline{n} \, da = S (\varphi_{j+1/2} + \varphi_{j-1/2}) \quad (28)$$

soit, en prenant en compte les relations (21-22)

$$\int_{\partial\Omega_j} D[\zeta] \underline{\text{grad}}\zeta \cdot \underline{n} \, da = S \left( D_{j+1/2} \left[ \frac{d\zeta}{dx} \right]_{j+1/2} - D_{j-1/2} \left[ \frac{d\zeta}{dx} \right]_{j-1/2} \right) \quad (29)$$

En géométrie sphérique

$$\int_{\partial\Omega_j} D[\zeta] \underline{\text{grad}}\zeta \cdot \underline{n} \, da = 4\pi (r_{j+1/2}^2 \varphi_{j+1/2} + r_{j-1/2}^2 \varphi_{j-1/2}) \quad (30)$$

soit, en prenant en compte les relations (23-24)

$$\int_{\partial\Omega_j} D[\zeta] \underline{\text{grad}}\zeta \cdot \underline{n} \, da = 4\pi \left( \left( r_j + \frac{\Delta r}{2} \right)^2 D_{j+1/2} \left[ \frac{d\zeta}{dr} \right]_{j+1/2} - \left( r_j - \frac{\Delta r}{2} \right)^2 D_{j-1/2} \left[ \frac{d\zeta}{dr} \right]_{j-1/2} \right) \quad (31)$$

Enfin, en prenant en compte l'approximation de type dérivée première centrée pour le gradient aux interfaces (relation 26)

$$\int_{\partial\Omega_j} D[\zeta] \underline{\text{grad}}\zeta \cdot \underline{n} \, da = 4\pi \left( \left( r_j + \frac{\Delta r}{2} \right)^2 D_{j+1/2} \left( \frac{\zeta_{j+1} - \zeta_j}{\Delta r} \right) - \left( r_j - \frac{\Delta r}{2} \right)^2 D_{j-1/2} \left( \frac{\zeta_j - \zeta_{j-1}}{\Delta r} \right) \right) \quad (32)$$

Dans le cas d'un problème linéaire, avec diffusion homogène  $D[\zeta] = D$ ,  $D_{j-1/2} = D_{j+1/2} = D$  l'équation (32) devient

$$\int_{\partial\Omega_j} D \underline{\text{grad}}\zeta \cdot \underline{n} \, da = 4\pi \frac{D}{\Delta r} \left( \left( r_j + \frac{\Delta r}{2} \right)^2 (\zeta_{j+1} - \zeta_j) - \left( r_j - \frac{\Delta r}{2} \right)^2 (\zeta_j - \zeta_{j-1}) \right) \quad (33)$$

Dans le cas d'un problème linéaire transitoire et algorithme implicite, les flux sont calculés à l'instant inconnu  $n+1$ . Dans le cas d'un problème linéaire, avec diffusion homogène  $D$  on obtient

$$\int_{\partial\Omega_j} D \underline{\text{grad}}\zeta \cdot \underline{n} \, da = 4\pi \frac{D}{\Delta r} \left( \left( r_j + \frac{\Delta r}{2} \right)^2 (\zeta_{j+1}^{n+1} - \zeta_j^{n+1}) - \left( r_j - \frac{\Delta r}{2} \right)^2 (\zeta_j^{n+1} - \zeta_{j-1}^{n+1}) \right) \quad (34)$$

Dans le cas d'un problème non linéaire transitoire et algorithme implicite, les flux sont calculés à l'instant inconnu  $n+1$ . L'approximation des flux par moyenne des fonctions conduit à

$$\begin{aligned} \int_{\partial\Omega_j} D[\zeta] \underline{\text{grad}}\zeta \cdot \underline{n} \, da = \frac{4\pi}{\Delta r} & \left( \left( r_j + \frac{\Delta r}{2} \right)^2 \left( \frac{D[\zeta_j^{n+1}] + D[\zeta_{j+1}^{n+1}]}{2} \right) (\zeta_{j+1}^{n+1} - \zeta_j^{n+1}) \right. \\ & \left. - \left( r_j - \frac{\Delta r}{2} \right)^2 \left( \frac{D[\zeta_j^{n+1}] + D[\zeta_{j-1}^{n+1}]}{2} \right) (\zeta_j^{n+1} - \zeta_{j-1}^{n+1}) \right) \end{aligned} \quad (35)$$

### 3.5. Intégrale de volume en géométrie sphérique

Dans l'équation (16), l'intégrale de volume est calculée par l'approximation suivante

$$\int_{\Omega_j} \frac{\partial \zeta}{\partial t} d\Omega_j = \Omega_j \left( \frac{\zeta_j^{n+1} - \zeta_j^n}{\Delta t} \right) \quad (36)$$

soit

$$\int_{\Omega_j} \frac{\partial \zeta}{\partial t} d\Omega_j = \frac{4\pi}{3} \left( \left( r_j + \frac{\Delta r}{2} \right)^3 - \left( r_j - \frac{\Delta r}{2} \right)^3 \right) \left( \frac{\zeta_j^{n+1} - \zeta_j^n}{\Delta t} \right) \quad (37)$$

### 3.6. Condition de Neumann en $r = 0$

L'équation de bilan du premier volume de contrôle (un demi volume sur le bord  $r = r_1 = 0$ ), s'écrit dans le cas d'une condition de type Neumann,  $\Phi_0 = 0$ , dans le cas d'un schéma implicite (et modélisation linéaire)

$$\frac{4\pi}{3} \left( \left( r_1 + \frac{\Delta r}{2} \right)^3 - r_1^3 \right) \left( \frac{\xi_1^{n+1} - \xi_1^n}{\Delta t} \right) - 4\pi \left( \left( r_1 + \frac{\Delta r}{2} \right)^2 D \left( \frac{\xi_2^{n+1} - \xi_1^{n+1}}{\Delta r} \right) - \Phi_0 \right) = 0 \quad (38)$$

qui se simplifie (un flux nul est imposé  $\Phi_0 = 0$ ).

$$\frac{4\pi}{3} \left( \left( r_1 + \frac{\Delta r}{2} \right)^3 - r_1^3 \right) \left( \frac{\xi_1^{n+1} - \xi_1^n}{\Delta t} \right) - 4\pi \left( r_1 + \frac{\Delta r}{2} \right)^2 D \left( \frac{\xi_2^{n+1} - \xi_1^{n+1}}{\Delta r} \right) = 0 \quad (39)$$

Dans le cas d'une modélisation non linéaire,  $D = D[\zeta]$ , l'équation (39) devient

$$\frac{4\pi}{3} \left( \left( r_1 + \frac{\Delta r}{2} \right)^3 - r_1^3 \right) \left( \frac{\xi_1^{n+1} - \xi_1^n}{\Delta t} \right) - 4\pi \left( r_1 + \frac{\Delta r}{2} \right)^2 D[\xi_1^{n+1}] \left( \frac{\xi_2^{n+1} - \xi_1^{n+1}}{\Delta r} \right) = 0 \quad (40)$$

Noter que toutes les équations peuvent se simplifier en mettant le coefficient  $4\pi$  en facteur.

## Références