

---

**Initiation à la simulation numérique  
en mécanique des fluides :  
Eléments d'analyse numérique.**

Cours ENSTA MF307

---

6 juin 2003

Frédéric DABBENE et Henri PAILLÈRE

---

## Résumé

Nous présentons dans ce rapport des éléments d'analyse numérique nécessaires à la réalisation de simulations numériques en mécanique des fluides. Les notes du cours donné à l'ENSTA depuis 1997 en ont été le catalyseur.

Après avoir mis en situation les différents ingrédients intervenant dans un calcul, les problèmes modèles sous-tendant les équations de Navier-Stokes sont abordés.

La discrétisation et les contraintes de stabilité associées aux équations de type elliptique, parabolique ou hyperbolique sont présentés.

# Table des matières

<b>Introduction</b>	<b>6</b>
<b>1 Introduction à la simulation numérique en mécanique des fluides</b>	<b>8</b>
1.1 Introduction . . . . .	8
1.2 Genèse . . . . .	8
1.3 Algorithme . . . . .	9
1.3.1 Notions de base et définitions . . . . .	9
1.3.2 Non-linéarité . . . . .	10
1.3.3 Problème transitoire et schémas explicite/implicite . . . . .	10
1.4 Jeu de données . . . . .	12
1.5 Maillage . . . . .	12
1.5.1 Analyse descendante . . . . .	12
1.5.2 Réalisation ascendante . . . . .	13
1.6 Castem 2000 . . . . .	13
1.6.1 Gibiane . . . . .	14
1.6.2 Opérateurs . . . . .	14
1.6.3 Objets . . . . .	15
1.6.4 Opérateur DOMA . . . . .	17
1.6.5 Opérateur EQEX . . . . .	19
<b>2 Equations de Navier-Stokes, nature d'une EDP, discrétisation</b>	<b>24</b>
2.1 Modélisation d'un fluide Newtonien . . . . .	24
2.1.1 Dérivée particulaire . . . . .	24
2.1.2 Equation de conservation de la masse . . . . .	25
2.1.3 Equation de conservation de la quantité de mouvement . . . . .	26
2.1.4 Equation de conservation de l'énergie . . . . .	27

2.1.5	Lois d'état . . . . .	27
2.1.6	Forme conservative des lois de conservation . . . . .	28
2.2	Nature des EDP . . . . .	29
2.2.1	Problème elliptique . . . . .	29
2.2.2	Problème parabolique . . . . .	30
2.2.3	Problème hyperbolique . . . . .	31
2.2.4	Liens avec les équations de Navier-Stokes . . . . .	33
2.3	Principales méthodes de discrétisation . . . . .	33
2.3.1	Discrétisation spatiale et temporelle . . . . .	34
2.3.2	Différences finies . . . . .	34
2.3.3	Eléments finis . . . . .	35
2.3.4	Volumes finis . . . . .	36
<b>3</b>	<b>Convergence et conditions aux limites</b>	<b>38</b>
3.1	Convergence, stabilité et consistance . . . . .	38
3.1.1	Définitions . . . . .	38
3.1.2	Consistance du schéma différences finies pour l'équation de la chaleur . . . . .	38
3.1.3	Stabilité du schéma différences finies pour l'équation de transport . . . . .	40
3.1.4	Discrétisation temporelle et approximations de Padé . . . . .	45
3.1.5	Etude de la stabilité par la méthode de Von Neumann . . . . .	46
3.1.6	Consistance et stabilité en volumes finis . . . . .	48
3.2	Imposition des conditions aux limites de type Dirichlet . . . . .	49
3.2.1	Méthode de substitution . . . . .	49
3.2.2	Méthode de pénalisation . . . . .	50
3.2.3	Utilisation d'un multiplicateur de Lagrange . . . . .	50
<b>4</b>	<b>Méthode des éléments finis</b>	<b>52</b>
4.1	Introduction . . . . .	52
4.1.1	Éléments géométriques . . . . .	52
4.1.2	Fonctions d'interpolation et espaces associés . . . . .	53
4.1.3	Principe de la méthode des éléments finis . . . . .	54
4.2	Espaces discrets de plus bas degré . . . . .	54

4.2.1	Espace $V_0 \subset L^2(\Omega)$ . . . . .	55
4.2.2	Élément $W_1 \subset H^1(\Omega)$ . . . . .	55
4.3	Résolution d'un problème modèle par éléments finis . . . . .	57
4.4	Éléments de référence . . . . .	59
4.4.1	Éléments de référence . . . . .	60
4.4.2	Intégrations de polynômes . . . . .	61
4.4.3	Matrice Jacobienne . . . . .	61
4.4.4	Transformation des gradients . . . . .	62
4.4.5	Discretisation temporelle . . . . .	63
4.5	Décentrement en éléments finis . . . . .	63
4.5.1	Schémas SUPG, SUPGDC et viscosité artificielle de Johnson	63
4.5.2	Évaluations des différents paramètres . . . . .	65
4.6	Formation de choc . . . . .	66
	<b>Bibliographie</b>	<b>69</b>

# Introduction

Ce rapport regroupe la première partie des notes du cours MF307 intitulé “Initiation à la simulation numérique en mécanique des fluides” dispensé à l’Ecole Nationale Supérieure de Techniques Avancées depuis 1997 dans le cadre du module B2 “Dynamique des fluides : Modélisation numérique”.

L’objectif de ce cours est d’initier les étudiants de troisième année de l’E.N.S.T.A. à la simulation numérique en mécanique des fluides et de les préparer à utiliser, voire développer, des logiciels de CFD (Computational Fluid Dynamics).

Le cours se déroule sur dix-huit demi-journées : les douze premières sont consacrées aux notions théoriques suivies par des travaux pratiques ; les six dernières à la réalisation d’un projet. Le support informatique permettant la réalisation des travaux pratiques et des projets est le logiciel Castem2000 développé au sein du Service d’Etudes Mécaniques et Thermiques du C.E.A.. Un recueil d’exemples commentés constitue la documentation associée à la partie fluide de Castem2000 et illustre quelques uns des thèmes susceptible d’être traités à l’aide du logiciel.

Nous présentons dans ce cours différentes méthodes de discrétisation en espace (différences finies, éléments finis et volumes finis), en temps (schémas explicites et implicites associés aux approximations de Padé) ainsi que les modélisations associées à différents régimes d’écoulement (incompressible/compressible, visqueux/non visqueux, monophasique/diphasique, etc).

Dans ce document, seuls sont abordés les éléments de base en analyse numérique permettant la résolution numérique des écoulements fluides (quatre premières demi-journées). Chaque chapitre correspond à un cours :

- le chapitre 1 introduit les principes généraux, la construction d’un maillage et présente Castem2000.
- le chapitre 2 introduit les différents problèmes modèles scalaires associés aux équations aux dérivées partielles elliptiques, paraboliques et hyperboliques ainsi que le lien entre ces problèmes modèles et les équations de Navier-Stokes. L’équation de la chaleur permet d’illustrer les principales méthodes de discrétisation spatiale habituellement rencontrées.
- le chapitre 3 aborde les notions de convergence et de conditions aux limites pour les différents problèmes modèles. Le problème de transport d’un champ scalaire par diffusion-convection permet d’illustrer ces différentes notions. La discrétisation, tant en temps qu’en espace de l’équation de transport est réalisée,

dans ce chapitre, par différences finies.

- le chapitre 4 est consacré à la discrétisation par éléments finis et au décentrement des termes convectifs. Le transport convectif d'un champ scalaire permet d'illustrer la notion de décentrement.

A terme, ce document sera complété par les modélisations associées à différents régimes d'écoulement. Le support de cours des parties non encore finalisées sera constitué des photocopies de transparents.

Nous tenons à remercier notre collègue Mr Lamoureux pour sa participation à la mise en forme de ces notes de cours.

# Chapitre 1

## Introduction à la simulation numérique en mécanique des fluides

### 1.1 Introduction

La *CFD*, Computational (or Colored) Fluid Dynamics, se situe au carrefour de plusieurs disciplines scientifiques :

- ▷ la physique (mécanique des fluides, du solide, ...);
- ▷ les mathématiques (analyse numérique, ...);
- ▷ l'informatique (programmation, utilisation, ...).

Il est rare qu'à l'issue de sa formation un individu possède ces trois compétences. L'objectif de ce cours est d'illustrer à l'aide d'un certain nombre d'exemples la façon dont ces trois domaines interagissent en CFD.

Le support informatique de ce cours sera la partie mécanique des fluides du code Castem 2000 que nous développons au CEA.

Avant de présenter ce logiciel, il nous apparaît important d'aborder la genèse, la réalisation et la conduite d'un calcul de mécanique des fluides.

### 1.2 Genèse

Au début était la question :

- ▷ Que se passe-t-il si ... ;
- ▷ Quand ... ;
- ▷ Comment ... .

On identifie alors les systèmes physiques à considérer, les phénomènes physiques au sein de chaque système ainsi que les interactions entre ces différents systèmes.

Il est rare que l'ensemble des phénomènes physiques mis en évidence puissent être considérés. On doit alors s'interroger sur l'importance relative de ces phénomènes



afin de simplifier le modèle obtenu :

- Peut-on négliger les effets visqueux ?
- Compressibilité / Incompressibilité / Dilatabilité ?
- Mélange homogène / multi-espèces / multi-phasiques ?
- ...

A l'issue de cette analyse, on connaît la(les) équation(s) qui va(vont) constituer notre modèle. Les compétences physiques ne serviront presque plus jusqu'à l'analyse des résultats.

Il faut maintenant faire appel à des compétences numériques afin de choisir l'algorithme de résolution le mieux adapté au problème obtenu.

## 1.3 Algorithme

### 1.3.1 Notions de base et définitions

L'objectif des méthodes de discrétisation est de parvenir, in fine, à un système matriciel le plus simple possible à inverser :

$$Ax = b$$

où  $A$  est une matrice ;  $x$  l'inconnue cherchée et  $b$  le second membre indépendant de l'inconnue  $x$ .

La méthode utilisée est dite *explicite* si la matrice  $A$  est diagonale et à coefficient indépendant de l'inconnue  $x$ . On connaît alors directement — explicitement — la solution  $x$  puisque  $x = b/A$ , l'abus de notation — division par une matrice ! — signalant le caractère diagonale de la matrice  $A$ . Sinon, la méthode est dite *implicite*.

Le problème à traiter est dit *linéaire* si les coefficients de la matrice  $A$  sont indépendants de l'inconnue  $x$ , *non-linéaire* sinon.

En général, les problèmes à traiter sont non-linéaires. Comme on ne sait inverser que les systèmes matriciels linéaires, l'emploi de techniques de linéarisation est incontournable.

La plupart de ces méthodes sont des variantes de la méthode du point fixe (où méthode de Picard). Afin de résoudre

$$A(x) x = b$$

la méthode du point fixe consiste à :

1. choisir a priori une valeur initiale  $x_0$  de l'inconnue ;
2. résoudre le problème linéaire  $A(x_k)x_{k+1} = b$  ;
3. tant que  $\delta x_k \geq \epsilon$  retourner à l'étape précédente (avec  $\delta x_k = x_{k+1} - x_k$ ).

Précisons que la méthode du point fixe peut ne pas converger puisque

- ▷ la fonctionnelle associée à  $A$  doit être contractante (ce qui dans la pratique est très délicat à démontrer) ;
- ▷ le choix de  $x_0$  est souvent crucial pour assurer la convergence de l'algorithme. Indiquons enfin que la forme présentée est celle qui est la plus souvent codée. Un observateur attentif notera que le test de convergence au point 3 ne garantit pas que la solution obtenue soit la solution du point fixe. On teste en effet la vitesse de convergence des itérés vers la solution du problème non linéaire et non pas la vérification, à une tolérance près, du problème non linéaire. On devrait tester le résidu  $R_k$  défini par

$$R_k = b - A(x_k)x_k$$

Compte tenu de la définition de  $R_k$  on peut remarquer que  $R_k$  et  $\delta x_k$  sont liés par la relation

$$R_k = A(x_k)\delta x_k$$

### 1.3.2 Non-linéarité

#### Exemple type de non-linéarité dans le cas scalaire

Considérons comme problème scalaire modèle l'équation de la chaleur en régime permanent :

$$\text{div}(-\lambda \nabla T) = S$$

où  $T$  désigne la température,  $\lambda$  la conductivité thermique et  $S$  un terme source indépendant de  $T$ .

Si  $\lambda = \lambda(\vec{x})$ , le problème est *linéaire*. Si  $\lambda = \lambda(\vec{x}, T)$ , le problème est *non-linéaire*.

Dans le cas d'une équation scalaire, la dépendance des propriétés physiques à l'inconnue cherchée est une cause importante de non-linéarité.

#### Exemple de non linéarité dans le cas système

Les causes essentielles de non linéarité dans le cas système sont

- ▷ comme dans le cas scalaire, la dépendance des propriétés physiques aux inconnues ;
- ▷ les termes faisant apparaître des produits entre inconnues :  $\rho \vec{u} \otimes \vec{u}, \rho u h, \dots$

Ces deux sources de non-linéarité sont bien entendu présentes dans les équations d'Euler et de Navier-Stokes.

### 1.3.3 Problème transitoire et schémas explicite/implicite

Dans le cas *de problèmes transitoires* (évolutions des quantités cherchées en fonction du temps) deux types de schéma sont possibles :

▷ des schémas dits *explicites*;

▷ des schémas dits *implicites*.

Un schéma est dit explicite si la solution discrète  $x$  au temps  $t^{n+1}$ , notée  $x^{n+1}$ , ne dépend pas de  $x^{n+1}$ . Quel que soit le point  $k$  de la discrétisation spatiale on connaît explicitement la valeur de la solution au point  $k$  au temps  $t^{n+1}$  :

$$x_k^{n+1} = f(x^n, x^{n-1}, \text{données}).$$

L'inconvénient des schémas explicites réside dans la limitation du pas de temps par des contraintes de stabilité numérique.

Un schéma non-explicite est implicite et la solution  $x$  au temps  $t^{n+1}$  dépend de  $x^{n+1}$ . On doit donc résoudre un système matriciel avec une matrice non diagonale :

$$Ax^{n+1} = f(x^n, x^{n-1}, \text{données}).$$

Parmi les schémas implicites, on utilisera dans ce cours ceux qui possèdent des propriétés de stabilité qui permettent de s'affranchir de contrainte sur le pas de temps lorsque on les applique à un problème linéaire. Par abus de langage on appellera schémas implicites cette classe de schémas numériques.

Le rang de la matrice  $A$  étant en général élevé — il est proportionnel au nombre de points du maillage — l'évaluation de  $A^{-1}$  est coûteuse en terme de CPU et de stockage. L'évaluation d'un pas de temps (calcul de  $x^{n+1}$  à partir de  $x^n$ ) coûte donc beaucoup plus cher avec un schéma implicite, sans compter le surcoût éventuel de la linéarisation si le problème est non linéaire. Par contre, le pas de temps  $\Delta t = t^{n+1} - t^n$  n'est pas limité en implicite par des contraintes de stabilité linéaire contrairement à l'explicite.

Soient  $t_{max}$  la durée du phénomène étudié et  $N$  le nombre de pas de temps nécessaire pour atteindre  $t_{max}$ .  $N$  étant imposé par des contraintes de stabilité en explicite alors qu'il est librement fixé par l'utilisateur en implicite, on obtient (pour un utilisateur normalement constitué)

$$N_{implicite} < N_{explicite}.$$

Comme d'autre part :

$$CPU_{implicite} > CPU_{explicite},$$

on voit que le choix entre explicite et implicite n'est pas a priori évident, tous ces critères dépendant bien entendu du problème à traiter et du nombre de mailles.

Si le choix de  $\Delta t_{implicite}$  n'est pas contraint par des problèmes de stabilité, des contraintes de précision imposent d'être raisonnable :

$$\Delta t_{implicite} < 10^3 \Delta t_{explicite}.$$

Cette contrainte disparaît dans le cas de recherche d'un état stationnaire en tant que limite asymptotique d'un transitoire. Dans ce type d'applications, l'implicite est souvent plus efficace.

## 1.4 Jeu de données

Les analyses physique et numérique du problème étant effectuées, on peut passer à la réalisation du calcul. Quel que soit le logiciel utilisé, on doit construire un jeu de données décrivant le problème à résoudre. Trois types d'instructions apparaissent au sein du jeu de données :

- ▷ la description géométrique ;
- ▷ la description des modèles physique et numérique ;
- ▷ le tracé des résultats en vue de l'analyse physique.

Il est souhaitable que ces trois parties soient distinctes. Cela oblige à réfléchir *avant* d'aller sur la machine, ce qui n'est pas plus mal. Il est inefficace de ne penser au post-traitement qu'une fois les calculs effectués et sauves sur disque. Les ennuis commencent lorsque l'on essaie d'extraire les informations à visualiser sur une zone qui n'a pas été identifiée au préalable.

De plus, la zonation du domaine de calcul en essayant d'identifier les zones "intéressantes" permet d'être beaucoup plus efficace dans le cas où l'outil utilisé ne dispose pas d'un mailleur adaptatif et où c'est l'utilisateur qui fixe, une fois pour toute en début de calcul, la densité de mailles. Par essais successifs, on peut diminuer grandement le nombre de mailles nécessaires à la réalisation du calcul, la zonation permettant de se focaliser sur les parties sensibles du domaine à mailler.

## 1.5 Maillage

Il est rare qu'un seul calcul soit suffisant. Il est souhaitable d'effectuer au moins deux calculs sur des maillages de finesses différentes afin d'étudier la sensibilité des résultats au maillage — de même avec le pas de temps dans le cas transitoire.

Compte tenu du coût engendré par le redécoupage des mailles, seules les zones "où cela bouge" seront redécoupées. Même si la CAO aide beaucoup (exemple FLUENT...), il est important d'identifier ces zones a priori au moment de la construction du maillage.

C'est pourquoi la réalisation d'un maillage est délicate. L'utilisation de la technique d'Analyse descendante-Réalisation ascendante offre une démarche systématique et permet de minimiser les efforts et les erreurs.

### 1.5.1 Analyse descendante

L'analyse descendante consiste à identifier au sein du tout des parties. L'analyse d'un volume tridimensionnel conduit ainsi à différentes sous parties dont l'entité la plus petite est le point. Le processus suivant présente la procédure à suivre :

1. Volume =  $\cup$  Volume élémentaire
2. Volume élémentaire<sub>i</sub>  $\cap$  Volume élémentaire<sub>j</sub> = Surface<sub>ij</sub>

3.  $\text{Surface}_{ij} = \cup \text{Surface élémentaire}$
4.  $\text{Surface élémentaire}_k \cap \text{Surface élémentaire}_l = \text{Segment}_{kl}$
5.  $\text{Segment}_{kl} = \cup \text{Segment élémentaire}$
6. Un segment élémentaire est caractérisé par
  - ▷ 2 points extrémités
  - ▷ 1 découpage

A l'issue de cette analyse, tous les points importants supports d'un maillage filaire de la géométrie sont identifiés. De plus, chaque entité n'est identifiée qu'une fois ce qui évite les problèmes de "point double".

L'expérience montre qu'il est raisonnable de consigner cette analyse sur papier. Nos anciens avaient bien des "cahiers de manip". Ce n'est pas parce que l'on est passé à l'ère informatique que l'on peut s'en passer (problème de traçabilité).

### 1.5.2 Réalisation ascendante

La réalisation ascendante consiste simplement à reconstruire le tout avec les parties. Il suffit de dérouler à l'envers la procédure précédente :

1. construction des points.
2. construction des segments élémentaires.
3. construction des segments.
4. construction des surfaces élémentaires.
5. construction des surfaces.
6. construction des volumes élémentaires.
7. construction du volume.

## 1.6 Castem 2000

*Castem 2000* est un code de calcul de type boîte à outils dont nous utiliserons les composants permettant la résolution de problèmes de mécanique des fluides par éléments finis et volumes finis.

Le langage de données *GIBIANE* permet de définir :

- ▷ le maillage,
- ▷ les modèles physique et numérique,
- ▷ les post-traitements.

L'ensemble des instructions est regroupé dans un fichier constituant le jeu de données.

Une instruction correspond à la réalisation d'une tâche élémentaire par un *opérateur*. Chaque tâche est en effet décomposée en tâches élémentaires. Par exemple,

```
'OPTI' 'DIME' 2 'ELEM' 'QUA4'; ← définition du contexte.
P1 = 1. 1.; P2 = 1. 2.;          ← création de 2 points.
P1P2 = 'DROI' P1 10 P2;         ← création d'une ligne.
'TRAC' P1P2;                    ← visualisation.
```

Ces quelques lignes montrent la logique qui sous-tend Castem. On commence par créer deux points P1 et P2, puis une ligne composée de 10 segments que l'on trace. Le nom associé à chaque objet (à gauche du signe égal) est choisi librement par l'utilisateur.

Nous allons dans les différentes sections de ce paragraphe décrire les différents ingrédients nécessaires à la construction d'un jeu de données : le langage GIBIANE, la notion d'opérateur, les principaux objets, les opérateurs DOMA et EQEX associés respectivement à la construction des différents maillages utilisés et à la description du problème de mécanique des fluides à résoudre.

### 1.6.1 Gibiane

Les principales règles syntaxiques de GIBIANE sont les suivantes :

1. Le ; termine une instruction.
2. Une instruction fait au plus 9 lignes.
3. Une ligne fait au plus 72 caractères.
4. Une ligne peut contenir plusieurs instructions.
5. Les lignes de commentaires débutent par \* .
6. Seules les 4 premières lettres des opérateurs sont significatives : ('TRAC'  $\iff$  'TRACER', 'DEBP'  $\iff$  'DEBPROC'...).
7. Une procédure doit être orthographiée avec toutes ses lettres.
8. Une instruction est décodée/interprétée de gauche à droite :

```
a = 1 + 2 * 3;
'LIST' a;      ← a = 9
b = 1 + (2 * 3);
'LIST' b;      ← b = 7
```

Les + , \* , / , \*\* ... sont des opérateurs au même titre que 'LIST'.

9. La longueur du nom d'un objet est au plus 8 caractères. C'est le signe = qui permet d'associer un nom à un objet. Il est conseillé d'ajouter un chiffre au nom des objets afin de ne pas 'écraser' un opérateur :

```
TRAC = 1 + 2 + 3;
et l'opérateur 'TRAC' n'est plus accessible...
```

### 1.6.2 Opérateurs

On distingue trois types d'opérateurs :

- ▷ Les *directives* (absence de '=' dans l'instruction) comme par exemple la directive de tracer TRAC. La syntaxe générique d'une directive est donc :

**DIRECTIVE OPERANDES ;**

- ▷ Les *opérateurs* comme 'DROI' dont la syntaxe est :

**RESULTAT(S) = OPERATEUR OPERANDES ;**

- ▷ Les *procédures* qui sont des sous-programmes écrits en langage GIBIANE et qui s'utilisent comme les directives et les opérateurs (enrichissement des possibilités par création de MACRO) :

```
'DEBP' MSUR ;
'ARGU' P1*'POINT' P2*'POINT' P3*'POINT' P4*'POINT' ;
P1P2 = 'DROI' P1 10 P2 ;
P2P3 = 'DROI' P2 10 P3 ;
P3P4 = 'DROI' P3 10 P4 ;
P4P1 = 'DROI' P4 10 P1 ;
MAIL1 = 'DALLER' P1P2 P2P3 P3P4 P4P1 ;
'FINP' MAIL1 ;
```

Les procédures peuvent rendre un(des) résultat(s) ou modifier l'un des arguments. De ce fait une procédure s'appelle comme un opérateur ou comme une directive suivant l'implémentation retenue par l'utilisateur.

**Exercice** : La directive 'INFO' permet d'afficher à l'écran la notice d'un opérateur (essayer 'INFO' 'INFO'). Pour chacun des opérateurs de la procédure ci-dessus, consultez sa notice puis essayez de comprendre le rôle de la procédure MSUR.

Gibiane étant un langage, il existe des opérateurs de test, de boucle ... dont on pourra consulter la notice :

```
'SI', 'SINO', 'FINS', 'REPE', 'QUIT', 'FIN',
'DEBP', 'FINP', 'OBTE', 'MESS', 'TEXT'.
```

Ces opérateurs permettent d'écrire des algorithmes et offrent à l'utilisateur un environnement de modélisation.

### 1.6.3 Objets

Chaque OPERANDE est typé. Aux objets Fortran habituels (entier, flottant, mot, logique) ont été ajoutés des objets spécifiques à Castem 2000. Nous allons indiquer les principaux opérateurs associés aux objets susceptibles d'être manipulés dans le cadre de ce cours,

**A savoir** : L'opérateur 'LIST' — voir sa notice — liste l'objet donné en argument et précise son type.

#### Objets de type Fortran

*Entier, flottant et mot* : ils sont créés simplement par :

```

a = 1 ;
b = 1. ;
c1 = MONMOT ;
c2 = 'monmot' ;

```

La différence de syntaxe entre la définition de *c1* et *c2* est la suivante : lorsque un mot est entre quotes ('), la distinction minuscule/majuscule est conservée. Lorsque le mot n'est pas entre quotes, la chaîne de caractères est transformée en majuscules. Pour s'en convaincre, listez le contenu de *c1* et *c2* après avoir tapé les deux lignes de définitions.

L'intérêt des quotes est également de protéger le nom des opérateurs dans les procédures. Un utilisateur n'a en général qu'une connaissance partielle de Castem 2000. Ne connaissant pas tous les opérateurs de Castem 2000, il peut "écraser" par mégarde un opérateur en nommant un objet par le nom d'un opérateur. Si l'opérateur ainsi écrasé est appelé par une procédure, tout se passera bien si l'opérateur est appelé entre quotes ; au mieux, une erreur sera détectée si l'opérateur n'est pas protégé.

Les *logiques* sont créés par :

```

a = VRAI ;
b = FAUX ;

```

et via les opérateurs :

```
'<', '>', '<EG', '>EG', 'EG', 'NEG', 'ET', 'OU', 'NON'.
```

Il ne faut surtout pas mettre les initialisations VRAI et FAUX des booleens *a* et *b* entre quotes ('). Sinon, ils sont considérés comme des objets de type MOTS et non comme des LOGIQUES.

### Objets de type LIST... et EVOLUTION

Les *listenti*, *listreel* et *listmot* sont des listes d'entiers, de réels et de mots (créés respectivement par les opérateurs 'LECT', 'PROG' et 'MOTS').

Les listes de réels sont utilisés pour créer des *évolutions* qui peuvent être tracées avec 'DESS'. Un objet évolution, créé par 'EVOL', contient deux listreels, le premier listreel étant associé aux abscisses, le deuxième aux ordonnées :

```

LISTX = 'PROG' 0. 'PAS' 1 9. ;
LIST1 = 'PROG' 0. 'PAS' 0.5 'NPAS' 5 4*2.5 ;
EVOL1 = 'EVOL' 'MANU' 't' LISTX 'f(t)' LIST1 ;
'DESS' EVOL1 ;

```

### Objets associés aux maillages

L'objet de type *point* contient un point de l'espace de travail (en 2D si 'OPTI' 'DIME' 2 ; en 3D si 'OPTI' 'DIME' 3 ). Pour créer un point il suffit d'associer un nom avec les coordonnées du point (voir également les opérateurs 'POIN' et 'BARY').



L'objet *maillage* contient des maillages (volumiques, surfaciques, linéiques) et/ou des collections de points. Les principaux opérateurs de maillage sont :

- ▷ création de droites (au sens lignes) : 'DROI', 'CERC', 'COTE', 'CONT';
- ▷ création de surfaces : 'SURF', 'DALL', 'TRAN', 'ROTA', 'PLUS', 'DEPL';
- ▷ création de volumes : 'PAVE', 'VOLU', 'REGE'.

### Objet TABLE

L'objet *table* permet de créer des structures de données arborescentes (création par l'opérateur 'TABLE' ). On accède à un objet contenu dans une table en précisant l'indice sous lequel il est rangé.

Deux objets de type table sont très utilisés en mécanique des fluides : l'une contient l'ensemble des informations géométriques, l'autre les modélisations physique et numérique (créées par les opérateurs 'DOMA' et 'EQEX').

**A savoir :** Depuis la version 2000 de Castem, l'objet modèle est utilisé en mécanique des fluides et contient les informations géométriques nécessaires à la résolution des problèmes de mécanique des fluides. L'opérateur 'DOMA' n'est plus utilisé pour créer la table contenant les informations géométriques si on passe par l'objet modèle.

### Objet CHPOINT (ou CHPO)

Le dernier objet important est l'objet *CHPO* (champ par point) qui associe à chaque point d'un maillage de points une ou plusieurs valeurs.

Afin de pouvoir distinguer les différentes composantes des champs vectoriels, chaque composante de même rang est identifiée par un nom. Les noms sont, soit choisis par l'utilisateur, soit déterminés par l'opérateur qui crée le chpoint considéré.

Les chpoints ont une *nature* qui permet d'indiquer si la quantité discrétisée représentée par le chpoint est intensive ou extensive. Ainsi, les opérateurs algébriques +, -, ... fournissent les résultats attendus. L'opérateur 'ET' permet également de manipuler les chpoints. Suivant la nature des chpoints, les opérateurs 'ET' et '+' conduisent à des résultats différents. On se reportera à la notice de ces opérateurs pour de plus amples informations.

**Exercice :** tracez une courbe représentant l'évolution de la coordonnée x le long d'une ligne d'un maillage (voir en particulier l'opérateur 'COOR').

#### 1.6.4 Opérateur DOMA

L'opérateur 'DOMA' permet de récupérer les informations contenues dans la table de sous-type DOMAINE ou dans l'objet modèle afin de pouvoir manipuler un ensemble cohérent d'informations géométriques utilisées en mécanique des fluides. Dans les versions antérieures à la version 2000 de Castem, l'opérateur DOMA crée

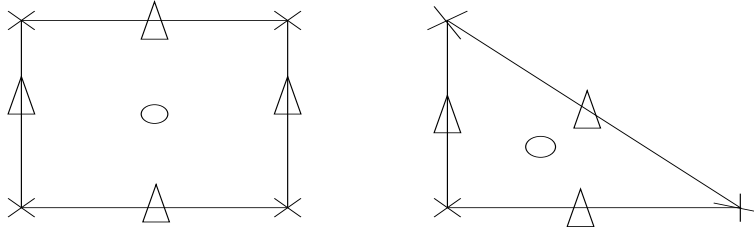
physiquement cette TABLE. Depuis, cette structure n'est plus exhibée. C'est l'objet modèle 'NAVIER\_STOKES' qui gère cet objet. Au delà de ces considérations informatiques, notons que l'objet DOMAINE a trois fonctions :

- ▷ structurer les classes de points supports des chpoints,
- ▷ compléter les connectivités,
- ▷ conserver des informations géométriques afin de ne pas avoir à les recalculer à chaque utilisation (préconditionnement).

Les *classes de points* sont au nombre de trois lorsque l'on utilise les éléments finis (au sens large) de plus bas degré :

- ▷ les SOMMETS des éléments associés aux champs  $H^1$ ,
- ▷ les CENTRES des éléments associés aux champs  $L^2$ ,
- ▷ les FACES des éléments associés aux champs  $H_{div}$  et  $H_{rot}$ .

Depuis la version 2000 de Castem, l'élément 'QUAF' regroupe l'ensemble de ces supports, chacun d'entre eux étant toujours accessible individuellement.



Un CHPO CENTRE contient le plus souvent la valeur moyenne du champ sur l'élément (aspect volumes finis), un CHPO FACE la valeur moyenne sur la face considérée (un flux par exemple), un CHPO SOMMET la valeur du champ aux SOMMETS (aspect éléments finis).

La table DOMAINE est créée par l'opérateur 'DOMA' à partir d'un objet maillage construit au préalable.

**Exercice :**

- Créer un maillage et construire la table DOMAINE associée.
- Lister et tracer le contenu de la table DOMAINE.

Pour créer un CHPO, il faut toujours préciser le support géométrique associé. C'est pourquoi les indices CENTRE, FACE et SOMMET de la table DOMAINE sont très utilisés.

Dans l'exemple suivant, nous créons un champ vectoriel de composantes 'UX', 'UY' identiquement nul et de support les CENTRES de gravité des éléments.

U1 = 'KCHT' DOM1 'VECT' 'CENTRE' (0. 0.);

⇔ U2 = 'MANU' 'CHPO' DOM1.'CENTRE' 2 'UX' 0. 'UY' 0.;

Des opérateurs de projection permettent de transformer un CHPO CENTRE en CHPO SOMMET et inversement : voir les opérateurs NOEL et ELNO.

### 1.6.5 Opérateur EQEX

La résolution des problèmes de mécanique des fluides est réalisée par la procédure EXEC. Cette procédure exploite le contenu d'une table créée par l'opérateur EQEX. Cette table contient les descriptions physique et numérique du problème traité.

Nous allons illustrer le fonctionnement de l'opérateur EQEX et l'utilisation de la procédure EXEC à l'aide de l'exemple de l'équation de la chaleur :

$$\frac{\partial T}{\partial t} - \Delta T = 0$$

Cette équation est constituée de deux monômes. On associe à chaque monôme un opérateur de discrétisation :

$$\begin{aligned} \frac{\partial T}{\partial t} &\rightarrow DFDT \\ \Delta T &\rightarrow LAPN \end{aligned}$$

Pour chaque monôme, on doit indiquer le type de schéma numérique EF, VF ... (discrétisation spatiale) et la discrétisation temporelle retenue (IMPLicite ou EXPLicite).

#### Cas d'une équation scalaire

Pour chaque opérateur, on doit donner le nom d'une table DOMAINE et les données associées à l'opérateur. La table domaine précise "l'endroit" où s'applique l'opérateur, les données sont précisées au cas par cas et dépendent de l'opérateur.

Pour DFDT, on doit indiquer : le pas de temps, le coefficient multiplicateur devant le monôme de dérivée temporelle, le nom du champ au pas de temps précédent et au pas de temps courant. En effet,

$$\alpha \frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \frac{TN - TNM}{DT}$$

où  $\alpha$  désigne le coefficient multiplicateur ; 'TN' le nom de l'inconnue au pas de temps courant ; 'TNM' le nom de l'inconnue au pas de temps précédent et 'DT' le pas de temps.

D'où pour une formulation éléments finis implicite, la déclaration de 'DFDT' dans 'EQEX' est réalisé par

```
RV = 'EQEX' $DOMAINE
      'OPTI' 'EF' 'IMPL'
      'ZONE' $D 'OPER' 'DFDT' 1. 'TNM' 'DT' 'INCO' 'TN' ;
```

Il faut ensuite initialiser les champs dont les noms se trouvent entre ' ' en créant les chpoints avec le bon support géométrique. Les chpoints doivent être rangés dans la table RV.'INCO' aux indices 'TNM', 'DT' et 'TN' :

```

RV.'INCO'.'TNM' = 'KCHT' $D 'SCAL' 'SOMMET' 0. ;
RV.'INCO'.'TN' = 'KCHT' $D 'SCAL' 'SOMMET' 0. ;
RV.'INCO'.'DT' = 100. ;
RV.'DT' = RV.'INCO'.'DT' ;

```

Pour le laplacien, on procède de la même manière :

```

RV = 'EQEX' RV
      'OPTI' 'EF' 'IMPL'
      'ZONE' $D 'OPER' 'LAPN' 1. 'INCO' 'TN' ;

```

Remarque : La table RV est créée lors de la déclaration de 'DFDT'. Elle doit être complétée avec la déclaration de 'LAPN'. C'est pourquoi l'argument qui suit 'EQEX' est la table domaine au premier appel, le nom de la table à étendre aux appels suivants.

En plus des informations spatiales, il ne faut pas oublier de préciser un certain nombre d'informations temporelles :

```

RV.'NITER' ← nombre d'itérations internes (problème non-linéaire).
RV.'OMEGA' ← relaxation.
RV.'ITMA' ← nombre de pas de temps.
RV.'EPS' ← critère d'arrêt.

```

Lorsque toutes les indications sont stockées dans la table créée par EQEX, il suffit d'invoquer la procédure EXEC pour que la résolution ait lieu :

```

EXEC RV ; ← Pas de quote autour du nom d'une procédure.

```

Pour tracer le résultat, le champ de température étant aux sommets, il suffit de coder :

```

'TRAC' $DOMAINE.'MAILLAGE' RV.'INCO'.'TN' ;

```

Dans le cas d'un champ vectoriel comme la vitesse ou le champ magnétique, il faut au préalable transformer l'objet CHPO en VECTEUR en utilisant l'opérateur 'VECT'.

Dans le cas où le support géométrique est au centre de gravité des éléments, il convient de transformer le chpoint avec l'opérateur 'KCHA' avant d'effectuer le tracé.

### Cas d'un système d'équations

Dans le cas des systèmes d'équations, nous devons introduire la notion d'inconnue primale et d'inconnue duale.

Considérons le système d'équations linéaire

$$\begin{cases} \frac{\partial U}{\partial t} + V = 0. \\ \frac{\partial V}{\partial t} + U = 0. \end{cases}$$

Une résolution implicite conduit au système matriciel

$$\begin{bmatrix} \textit{Contribution} & . & \textit{Contribution} \\ \frac{\partial U}{\partial t} & . & V \\ \dots\dots\dots & . & \dots\dots\dots \\ \textit{Contribution} & . & \textit{Contribution} \\ U & . & \frac{\partial V}{\partial t} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U \\ \dots\dots\dots \\ V \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \textit{second} \\ \textit{membre} \\ \textit{eq.U} \\ \dots\dots\dots \\ \textit{second} \\ \textit{membre} \\ \textit{eq.V} \end{bmatrix}$$

Comment indiquer que la contribution à la matrice du terme  $V$  dans l'équation portant sur  $U$  doit être rangée en première ligne deuxième colonne ?

- La ligne est précisée par l'équation traitée. L'inconnue associée à une équation est appelée *inconnue duale*.
- La colonne est précisée par l'inconnue par laquelle on va multiplier le bloc considéré. Cette inconnue est appelée *inconnue primale*.

Dans EQEX, on précise les inconnues primale et duale associées à un opérateur après le mot clé 'INCO'. Dans le cas où primale et duale sont identiques, il n'est pas nécessaire de donner deux fois le même nom :

'OPER' 'DFDT' ... 'INCO' 'TN' 'TN';

est équivalent à

'OPER' 'DFDT' ... 'INCO' 'TN' ;

Par contre, pour l'opérateur 'MDIA' qui traite le monôme  $V$ , il est important et obligatoire d'indiquer les inconnues primale et duale :

'OPER' 'MDIA' ... 'INCO' 'V' 'U' ;

où 'V' désigne le nom de l'inconnue primale et 'U' le nom de l'inconnue duale. Sans ces précisions, nous ne pouvons ranger cette contribution en première ligne et deuxième colonne.

### Conditions aux limites

Deux opérateurs sont plus particulièrement dévolus au traitement des conditions aux limites :

'FIMP' permet d'imposer un flux (C.L. de type *Neumann*) ;

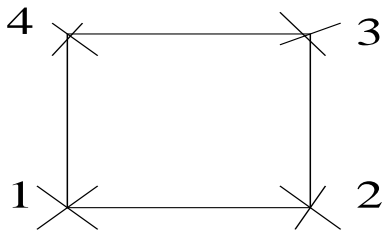
'CLIM' permet d'imposer la valeur d'une inconnue (C.L. de type *Dirichlet*).

En fait, 'CLIM' n'est pas un opérateur mais une des directives de l'opérateur 'EQEX'.

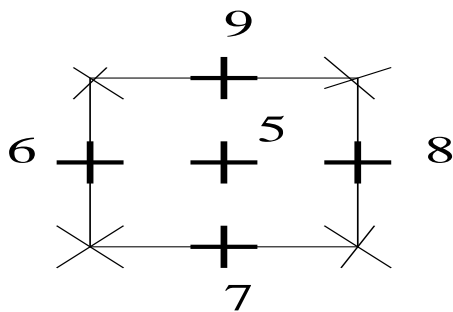
Les arguments des ces opérateurs sont les valeurs à imposer ainsi que "le maillage" qui indique l'endroit où on impose la condition aux limites. Au lieu du maillage, on transmet aux opérateurs la table domaine associée à la zone où on impose la condition aux limites. Lorsque on génère cette table domaine locale il faut veiller à ne pas créer de points doubles (points confondus géométriquement mais portant des numéros différents). Pour les versions antérieures à la version 2000 de Castem et pour ceux qui n'utilisent pas l'objet modèle 'NAVIER\_STOKES', il faut utiliser l'option 'INCL' de l'opérateur 'DOMA'. Cela permet de fusionner

les points de la table domaine locale avec ceux de la table domaine globale. Pour ceux qui utilisent l'objet modèle 'NAVIER\_STOKES' il faut s'assurer que les maillages sous-tendant chaque partie s'appuient sur des frontières communes. En cas de doutes, l'opérateur 'ELIM' permet de fusionner les points géométriquement confondus.

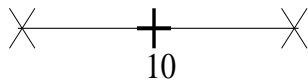
Afin d'éclaircir nos propos, considérons un élément et sa frontière AB sur laquelle on souhaite imposer une valeur. Supposons que le numéro du point A (resp. du point B) soit 1 (resp. 2).



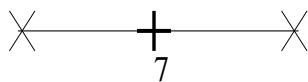
L'opérateur 'DOMA' crée les points 'CENTRE' et 'FACE' associés à cet élément. L'ensemble des points associés à l'élément est alors



Si on applique l'opérateur 'DOMA' sans l'option 'INCL' au segment AB, on obtient



Les points 7 et 10, bien que confondus géométriquement seront considérés comme différents puisqu'ils ont des numéros différents. Le rôle de l'option 'INCL' est de les fusionner afin d'aboutir à la situation suivante :



Grâce à l'option 'INCL' de 'DOMA', les points 'SOMMET' et 'CENTRE' d'une ligne sont donc respectivement inclus dans la classe de points 'SOMMET' et 'FACE' du maillage surfacique associé.

Au delà de la vertu pédagogique de cet exemple, on doit remarquer que les points 'CENTRE' d'une ligne sont les points faces du maillage surfacique.

En complément à cette présentation rapide de la partie mécanique des fluides de Castem, on consultera le recueil d'exemples commentés qui a été réalisé dans le cadre de ce cours. Les principaux thèmes que nous aborderons y sont illustrés. Les jeux de données ainsi regroupés doivent permettre de répondre à la plupart des blocages syntaxiques que les utilisateurs de la partie fluide de Castem sont susceptibles de rencontrer.

## Chapitre 2

# Equations de Navier-Stokes, nature d'une EDP et principales méthodes de discrétisation

### 2.1 Modélisation d'un fluide Newtonien

#### 2.1.1 Dérivée particulière

On appelle *dérivée particulière* la dérivée par rapport au temps d'une quantité  $A(x, t)$  attachée à une particule élémentaire  $M(t)$  que l'on suit dans son mouvement. Elle est notée

$$\frac{dA}{dt}$$

et a pour expression en variables d'Euler

$$\frac{dA}{dt} = \frac{\partial A}{\partial t} + (\vec{v} \cdot \nabla) A$$

Cette expression est valable que  $A$  soit un scalaire, un vecteur ou un tenseur d'ordre quelconque. En particulier, considérons

$$I(t) = \int_{a(t)}^{b(t)} f(\xi) d\xi$$

Les règles élémentaires de dérivation d'une fonction composée conduisent à

$$\frac{dI(t)}{dt} = \int_{a(t)}^{b(t)} \frac{\partial f}{\partial t} dV + b'(t) \cdot f(b(t)) - a'(t) \cdot f(a(t))$$

Pour un domaine  $D(t)$  se déplaçant à la vitesse  $\vec{v}$ , on obtient ainsi



$$\begin{aligned}
\frac{dI(t)}{dt} &= \int_{D(t)} \frac{\partial f}{\partial t} dV + \int_{\gamma(t)} f \vec{v} \cdot \vec{n} d\gamma \\
&= \int_{D(t)} \left\{ \frac{\partial f}{\partial t} + \operatorname{div}(f \vec{v}) \right\} dV \\
&= \int_{D(t)} \left\{ \frac{\partial f}{\partial t} + f \operatorname{div} \vec{v} + \vec{v} \cdot \nabla f \right\} dV \\
&= \int_{D(t)} \left\{ \frac{df}{dt} + f \operatorname{div} \vec{v} \right\} dV
\end{aligned}$$

On déduit donc les expressions suivantes qui vont nous permettre d'obtenir les équations de la mécanique des fluides :

$$\frac{d}{dt} \int_{D(t)} f dV = \int_{D(t)} \left\{ \frac{df}{dt} + f \operatorname{div} \vec{v} \right\} dV$$

$$\frac{d}{dt} \int_{D(t)} f dV = \int_{D(t)} \left\{ \frac{\partial f}{\partial t} + \operatorname{div}(f \vec{v}) \right\} dV$$

$$\frac{d}{dt} \int_{D(t)} f dV = \int_{D(t)} \frac{\partial f}{\partial t} dV + \int_{\gamma(t)} f \vec{v} \cdot \vec{n} d\gamma$$

### 2.1.2 Equation de conservation de la masse

L'équation de *conservation de la masse* — ou de continuité — exprime le fait que dans tout écoulement la masse se conserve. Si on considère un volume  $D$  du milieu continu que l'on suit dans son mouvement, on a alors :

$$\frac{dM(t)}{dt} = 0 \text{ avec } M(t) = \int_{D(t)} \rho dV$$

En appliquant les résultats précédents, on obtient

$$\int_{D(t)} \left\{ \frac{d\rho}{dt} + \rho \operatorname{div} \vec{v} \right\} dV = \int_{D(t)} \left\{ \frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \vec{v}) \right\} dV = 0$$

Comme ces relations sont vérifiées pour tout domaine  $D(t)$ , on obtient l'équation aux dérivées partielles (EDP) — équation ponctuelle —

$$\frac{d\rho}{dt} + \rho \operatorname{div} \vec{v} = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \vec{v}) = 0$$

La *forme conservative*

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \vec{v}) = 0$$

est agréable à manipuler puisque après utilisation de la formule de Green, il apparaît le flux de matière à l'interface :

$$\underbrace{\int_{D(t)} \frac{\partial \rho}{\partial t} dV}_{\text{terme d'accumulation}} + \underbrace{\int_{\gamma(t)} \rho \vec{v} \cdot \vec{n} d\gamma}_{\text{bilan de flux}} = 0$$

### 2.1.3 Equation de conservation de la quantité de mouvement

L'équation de conservation de la quantité de mouvement s'obtient en appliquant la loi fondamentale de la dynamique à une particule  $D$  du milieu continu

$$\sum \vec{F} = m\vec{\gamma}$$

Comme  $\vec{\gamma} = \frac{d\vec{v}}{dt}$ , on déduit en appliquant la définition de la dérivée particulaire que

$$\vec{\gamma} = \frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + (\vec{v} \cdot \nabla) \vec{v}$$

Les forces à considérer sont de deux natures : les forces volumiques et les forces surfaciques. La gravité constitue l'exemple le plus classique de force extérieure volumique. Les forces surfaciques — ou contraintes — sont les forces de contact exercées sur la frontière de la particule fluide considérée. On peut montrer qu'il existe une relation linéaire entre la normale à la surface et la densité de forces surfaciques  $\vec{F}$  définie par

$$\vec{F} = \bar{\bar{\sigma}} \cdot \vec{n}$$

où  $\bar{\bar{\sigma}}$  désigne le tenseur des contraintes et  $\vec{n}$  la normale sortante.

Un fluide Newtonien est caractérisé par la loi de comportement

$$\bar{\bar{\sigma}} = -p\bar{\bar{I}} + \bar{\bar{\tau}}$$

où  $p$  désigne la pression — contrainte lorsque le fluide est au repos — et  $\bar{\bar{\tau}}$  le tenseur des contraintes visqueuses.

Le tenseur des contraintes visqueuses  $\bar{\bar{\tau}}$  est lié au tenseur des déformations  $\bar{\bar{D}}$  par

$$\bar{\bar{\tau}} = \lambda \text{div} \vec{v} \bar{\bar{I}} + 2\mu \bar{\bar{D}}$$

où  $\lambda$  et  $\mu$  sont les coefficients de Lamé — qui dépendent de la température  $T$  —,  $\bar{\bar{D}}$  étant défini par

$$\bar{\bar{D}} = \frac{1}{2}(\nabla \vec{v} + {}^t \nabla \vec{v})$$

Si on néglige les effets visqueux ( $\lambda = \mu = 0$ ), on obtient la loi de comportement dite de *fluide parfait*.

L'équation de quantité de mouvement s'écrit donc

$$\rho \frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + \rho(\vec{v} \cdot \nabla) \vec{v} = \text{div}(\overline{\overline{\sigma}}) + \rho \vec{g}$$

**Remarque :**  $\text{div}(-p\overline{\overline{I}}) = -\nabla p$ , ce qui permet de faire apparaître le gradient de pression dans l'équation de quantité de mouvement si on le souhaite.

### 2.1.4 Equation de conservation de l'énergie

Le premier principe de la thermodynamique appliqué à tout instant  $t$  et à toute particule  $D$  du milieu continu nous dit que la variation au cours du temps de l'énergie totale — somme de l'énergie cinétique  $E_c$  et de l'énergie interne  $E_i$  — est égale à la puissance des forces extérieures  $\mathcal{P}_e$  augmentée de la puissance calorifique reçue  $\mathcal{P}_c$ .

Comme :

$$E_c = \int_D \frac{1}{2} \rho \vec{v}^2 dV$$

$$E_i = \int_D \rho e dV$$

$$\mathcal{P}_e = \int_D \rho \vec{g} \vec{v} dV + \int_\gamma \overline{\overline{\sigma}} \cdot \vec{n} \cdot \vec{v} d\gamma$$

$$\mathcal{P}_c = - \int_D \text{div} \vec{q} dV$$

où la dépendance du flux de chaleur  $\vec{q}$  à la température est modélisée par une loi de Fick :

$$\vec{q} = -k \nabla T$$

En notant  $E$  l'énergie totale spécifique définie par

$$E = e + \frac{v^2}{2}$$

on obtient alors en appliquant le premier principe que

$$\frac{d}{dt}(\rho E) + \rho E \text{div} \vec{v} = \rho \vec{g} \cdot \vec{v} - \text{div} \vec{q} + \text{div}(\overline{\overline{\sigma}} \cdot \vec{v})$$

### 2.1.5 Lois d'état

Pour que le système à résoudre soit complet, il manque encore les équations définissant la pression  $p$  et la température  $T$ .

La pression  $p$  est définie par la *loi d'état thermique*. Dans le cas des gaz parfaits, on a

$$p = \rho RT$$

où  $R$  désigne la “constante” des gaz parfaits (rapport entre la constante des gaz [8.314 S.I.] et la masse molaire du gaz).

La température  $T$  est définie par la *loi d'état calorifique*. Dans le cas des gaz parfaits, on a

$$e(T) = c_v T.$$

### 2.1.6 Forme conservative des lois de conservation

Si l'équation de continuité s'obtient naturellement sous forme conservative, il n'en est pas de même pour les équations de conservation de quantité de mouvement et d'énergie.

Il suffit simplement de remarquer que :

$$\begin{aligned} \rho \frac{d\vec{v}}{dt} &= \rho \frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + \rho(\vec{v} \cdot \nabla) \vec{v} \\ &= \frac{\partial \rho \vec{v}}{\partial t} - \vec{v} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho(\vec{v} \cdot \nabla) \vec{v} \\ &= \frac{\partial \rho \vec{v}}{\partial t} + \vec{v} \operatorname{div}(\rho \vec{v}) + \rho(\vec{v} \cdot \nabla) \vec{v} \\ &= \frac{\partial \rho \vec{v}}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \vec{v} \otimes \vec{v}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}(\rho E) + \rho E \operatorname{div} \vec{v} &= \frac{\partial}{\partial t}(\rho E) + \vec{v} \cdot \nabla(\rho E) + \rho E \operatorname{div} \vec{v} \\ &= \frac{\partial}{\partial t}(\rho E) + \operatorname{div}(\rho E \vec{v}) \end{aligned}$$

De plus, en introduisant l'enthalpie spécifique  $h$  et l'enthalpie totale spécifique  $H$  définis respectivement par

$$h = e + \frac{p}{\rho} \text{ et } H = E + \frac{p}{\rho} = h + \frac{v^2}{2}$$

on obtient

$$\operatorname{div}(\rho E \vec{v}) + \operatorname{div}(\rho \vec{v} \bar{I}) = \operatorname{div}(\rho \vec{v} H)$$

Les équations de Navier-Stokes sous forme conservative, pour un fluide Newtonien en considérant la gravité comme seule force de volume, s'écrivent donc :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \vec{v}) = 0$$

$$\frac{\partial \rho \vec{v}}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \vec{v} \otimes \vec{v} + p \bar{\mathbf{I}}) = \operatorname{div} \bar{\vec{\tau}} + \rho \vec{g}$$

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \vec{v} H) = \operatorname{div}(k \nabla T + \bar{\vec{\tau}} \vec{v}) + \rho \vec{g} \cdot \vec{v}$$

Avec dans le cas des gaz parfaits :

$$p = \rho R T$$

$$e = c_v T$$

Et les définitions suivantes :

$$E = e + \frac{1}{2} \vec{v}^2$$

$$H = E + \frac{p}{\rho}$$

$$\bar{\vec{\tau}} = \lambda \operatorname{div} \vec{v} \bar{\mathbf{I}} + \mu (\nabla \vec{v} + {}^t \nabla \vec{v})$$

$$3\lambda + 2\mu = 0$$

## 2.2 Nature des EDP

Le système d'équations obtenu est incomplet dans la mesure où l'on n'a pas précisé les conditions initiales, les conditions aux limites ... ni le domaine de calcul.

Quelle que soit la méthode numérique choisie, il faut que le problème soit bien posé, c'est à dire que les conditions aux limites en temps et en espace soient compatibles avec le problème à traiter. On ne peut pas faire n'importe quoi. Les bons choix sont dictés par la nature du problème à traiter, à savoir :

- ▷ elliptique,
- ▷ parabolique,
- ▷ hyperbolique.

Pour chaque type de problème, nous allons présenter un problème modèle associé et les conditions aux limites à considérer.

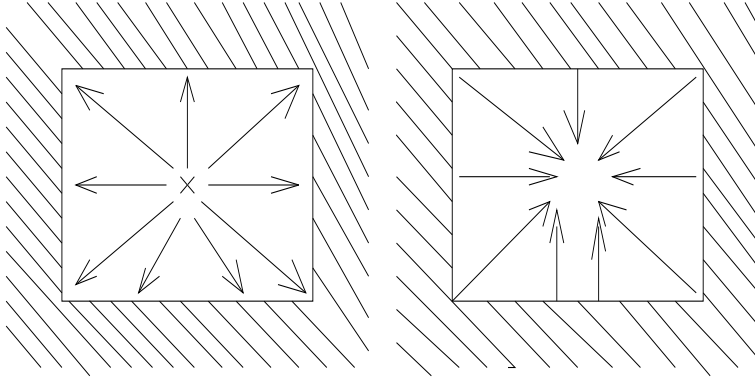
### 2.2.1 Problème elliptique

Le problème modèle est l'équation de la chaleur en régime permanent :

$$\Delta T = 0$$

Afin de connaître le type de conditions aux limites à imposer, il convient de définir la zone d'influence de la température en un point P du domaine de calcul et la zone de dépendance de ce point.

Dans le cas d'un problème elliptique, la zone de dépendance et la zone d'influence d'un point sont identiques : c'est l'ensemble du domaine considéré.



On doit donc imposer la température  $T$  ou le flux de température  $\frac{\partial T}{\partial n}$  sur l'ensemble de la frontière du domaine. La température et son gradient ne pouvant pas être imposés simultanément en un point de la frontière, le problème sera bien posé si :

- ▷  $T$  connue sur  $\Gamma_1$ ,
  - ▷  $\frac{\partial T}{\partial n}$  connu sur  $\Gamma_2$ ,
- où  $\Gamma_1$  et  $\Gamma_2$  sont une partition de la frontière
- ▷  $\Gamma_1 \cap \Gamma_2 = \emptyset$
  - ▷  $\Gamma_1 \cup \Gamma_2 = \Gamma$

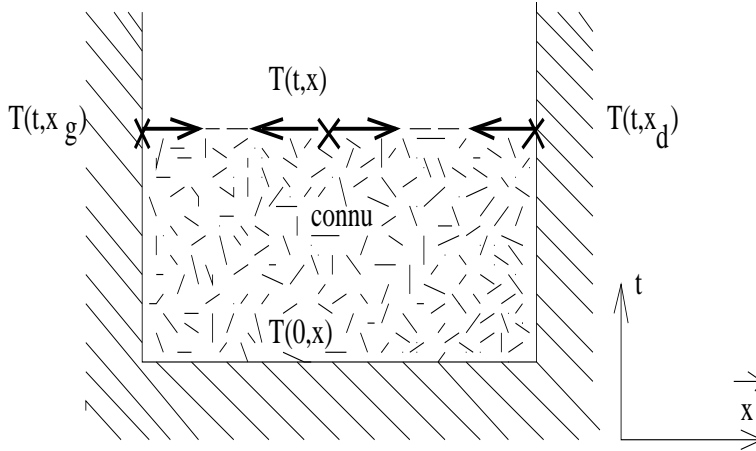
Si  $\Gamma_1 = \emptyset$ , la température  $T$  est connue à une constante près.

Les conditions aux limites sur  $\Gamma_1$  (resp. sur  $\Gamma_2$ ) sont dites de *Dirichlet* (resp. de *Neumann*).

### 2.2.2 Problème parabolique

Le problème modèle est l'équation de la chaleur en régime transitoire :

$$\frac{\partial T}{\partial t} - \Delta T = 0$$



A un instant donné, on se retrouve dans le cas précédent, on doit donc imposer  $T(t, x_\Gamma)$  sur  $\Gamma_1$  et  $\frac{\partial T}{\partial n}(t, x_\Gamma)$  sur  $\Gamma_2$  où  $\Gamma_1$  et  $\Gamma_2$  sont une partition de la frontière du domaine.

Si  $\Gamma_1 = \emptyset$ , la température est parfaitement connue par la donnée de la condition initiale qui “fixe” la constante.

### 2.2.3 Problème hyperbolique

Le problème modèle est l'équation de transport par convection d'un champ scalaire :

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla c = 0$$

Considérons le problème mono-dimensionnel dans le cas où la composante du vecteur  $\vec{u}$  est constante et positive :

$$\frac{\partial c}{\partial t} + u \frac{\partial c}{\partial x} = 0.$$

Pour  $c = c(x(t), t)$ , on obtient en appliquant les règles élémentaires de dérivation

$$\frac{dc}{dt} = \frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\partial x}{\partial t} \frac{\partial c}{\partial x}$$

En identifiant cette dernière expression avec l'équation de transport on obtient que

$$\frac{dc}{dt} = 0 \text{ si } \frac{\partial x}{\partial t} = u$$

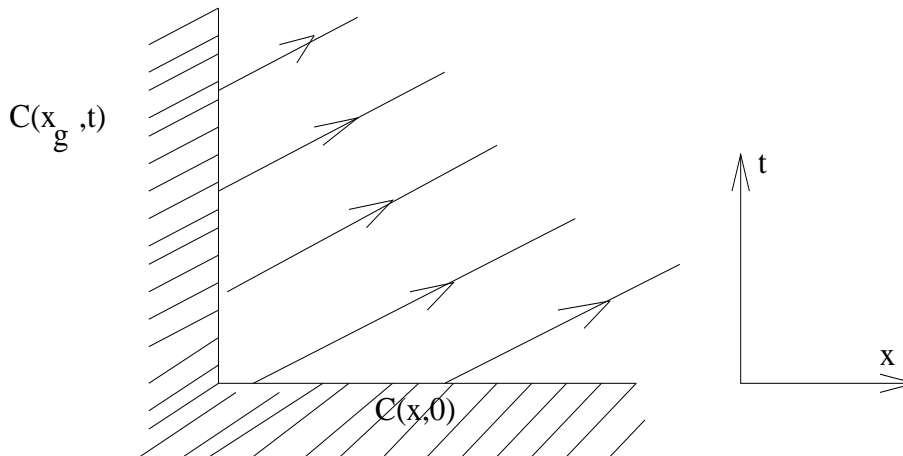
Le champ  $c$  est donc constant le long de la *caractéristique*  $x(t)$  définie par

$$x(t) = ut + x_0.$$

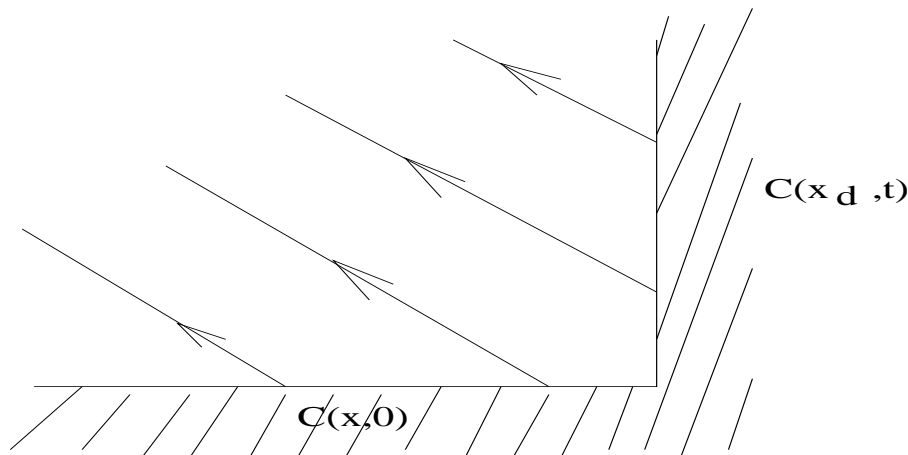
Le point  $x_0$  est appelé le pied de la caractéristique.

On doit imposer  $c$  sur toute la partie de la frontière dont sont issues les caractéristiques (domaine de dépendance de l'ensemble des points du domaine). Le domaine d'influence d'un point sera constitué par l'ensemble des points situés sur la caractéristique en aval du point considéré. Les domaines de dépendance et d'influence dépendent donc du signe du champ de vitesse.

Cas  $u > 0$



Cas  $u < 0$



Dans le cas où  $u > 0$  (resp.  $u < 0$ ) on doit imposer  $c$  sur la frontière gauche (resp. droite) du domaine.

On peut remarquer qu'aucune caractéristique n'est issue des frontières par lesquelles le fluide sort du domaine. Il n'y a donc aucune condition aux limites à imposer sur ces frontières.



### 2.2.4 Liens avec les équations de Navier-Stokes

Pourquoi introduire ces différents problèmes modèles alors que ce sont les équations de Navier-Stokes qui in fine nous intéressent ?

Considérons un champ de vitesse constant en espace. L'équation de continuité devient :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + u \frac{\partial \rho}{\partial x} = 0$$

qui est le problème modèle associé à une équation hyperbolique du premier ordre.

Négligeons la vitesse dans l'équation de l'énergie — cas d'un fluide au repos — et exprimons l'évolution de l'énergie interne spécifique  $e$  en fonction de la température  $T$  ( $e = c_v T$ ) :

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{k}{\rho c_v} \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$$

qui est le problème associé à une équation parabolique en temps.

Si le fluide est incompressible, l'équation de continuité devient

$$\frac{\partial u}{\partial x} = 0$$

La vitesse est donc constante et l'équation de l'énergie devient :

$$\frac{\partial T}{\partial t} + u \frac{\partial T}{\partial x} = \frac{k}{\rho c_v} \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$$

qui est toujours un problème parabolique en temps mais comportant deux phénomènes physiques : convection de la température par le champ de vitesse et diffusion de la température par une loi de Fick avec un coefficient de diffusion  $D = k/(\rho c_v)$ .

Le nombre de Peclet, noté  $Pe$  et défini par  $Pe = uL/D$  où  $L$  est une longueur caractéristique associée à la convection, mesure l'importance relative de la convection par rapport à la diffusion. Nous verrons que d'un point de vue aussi bien numérique que physique, ce nombre adimensionnel est très important.

Si on néglige dans l'équation de quantité de mouvement les forces de pression, on obtient :

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} = 0$$

et on obtient un problème hyperbolique non-linéaire.

## 2.3 Principales méthodes de discrétisation

Les équations de Navier-Stokes contiennent donc bien des difficultés. Avant d'en aborder la résolution, il convient de bien maîtriser les spécificités des équations scalaires présentées ci-dessus et des méthodes numériques associées.

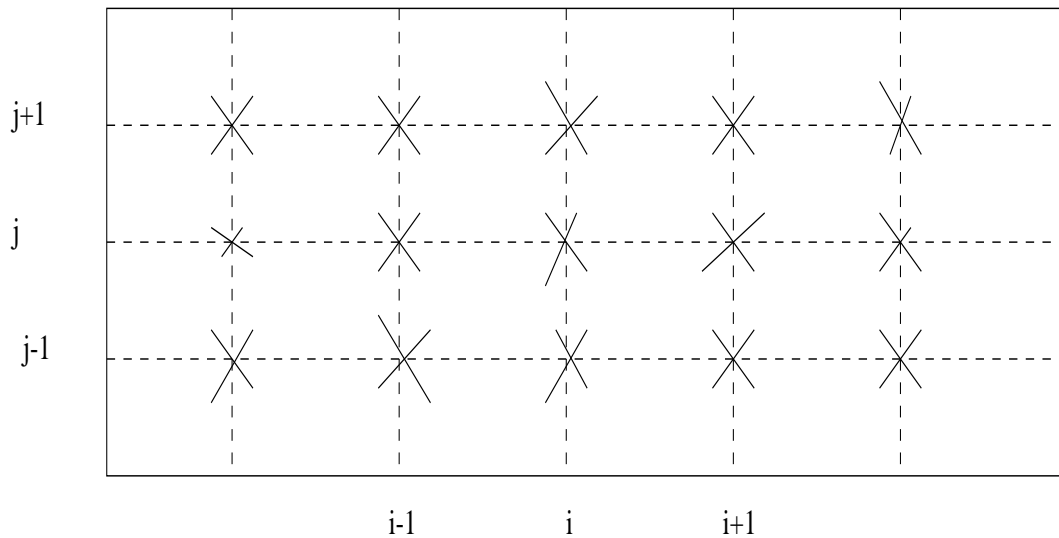
### 2.3.1 Discrétisation spatiale et temporelle

Les méthodes numériques les plus utilisées en mécanique des fluides sont les différences finies, les éléments finis et les volumes finis. Il en existe d'autres (méthodes spectrales ...) dont nous ne parlerons pas dans ce cours.

Ces méthodes transforment le problème continu en un problème discret : l'intervalle d'étude en temps  $[0, t_{max}]$  est découpé en intervalles plus réduits en considérant  $0 = t_0 < \dots < t_i < \dots < t_{N-1} < t_N = t_{max}$ . Lorsque la discrétisation temporelle est régulière on a

$$\forall i, \Delta t_i = t_{i+1} - t_i = \Delta t = \text{constante.}$$

De même, en espace, un ensemble de points est introduit :



Une fonction inconnue  $f(x, t)$  sera représentée par l'ensemble de ses valeurs aux différents points et aux différents instants de la discrétisation ( $f(x_{i,j}, t_n)$ ). L'objet des méthodes numériques est de déterminer ces valeurs.

### 2.3.2 Différences finies

La méthode des différences finies consiste à remplacer les dérivées partielles aux points du maillage par des développements de Taylor :

$$f(x_{i+1}) = f(x_i + h) = f(x_i) + h \frac{\partial f(x_i)}{\partial x} + \dots + \frac{h^n}{n!} \frac{\partial^{(n)} f(x_i)}{\partial x^n} + O(h^{n+1})$$

$$f(x_{i-1}) = f(x_i - h) = f(x_i) - h \frac{\partial f(x_i)}{\partial x} + \dots + (-1)^n \frac{h^n}{n!} \frac{\partial^{(n)} f(x_i)}{\partial x^n} + O(h^{n+1})$$

les termes de troncature  $O(h^{n+1})$  ayant la signification suivante :

$$a = b + O(h^{n+1}) \Leftrightarrow \exists K \text{ indépendant de } h / |a - b| \leq Kh^{n+1}$$

Par combinaisons linéaires des développements de Taylor, on exprime les dérivées partielles en fonction des valeurs aux points de discrétisation. Ainsi, en négligeant les erreurs de troncature,

$$\left(\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}\right)_i = \frac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{h^2}$$

$$\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_i = \begin{cases} \frac{1}{h}(f_{i+1} - f_i) \\ \frac{1}{h}(f_i - f_{i-1}) \\ \frac{1}{2h}(f_{i+1} - f_{i-1}) \end{cases}$$

On peut noter qu'a priori, on a le choix entre trois formes d'approximation de la dérivée première.

Lorsque chaque monôme de l'EDP à résoudre est remplacé par une des approximations obtenues, en figeant les données matérielles, on obtient des combinaisons linéaires entre les valeurs des inconnues aux points de discrétisation, soit sous forme matricielle

$$Af = b$$

### 2.3.3 Eléments finis

La méthode des éléments finis consiste à minimiser l'erreur commise en remplaçant le problème continu par le problème discret.

Soient  $V_h$  un espace vectoriel de dimension finie dont les vecteurs de base seront notés  $N_i$ ,  $i$  variant de 1 à  $N$ ,  $V$  un espace vectoriel de dimension infinie et  $f_h \in V_h$  la fonction approchant  $f \in V$  :

$$f_h(x) = \sum_{i=1}^N f_i N_i(x)$$

En général, on choisit  $V_h$  de telle sorte que  $V_h \subset V$  (approximation dite conforme).

Soit  $E(f) = 0$  l'équation différentielle vérifiée par  $f$ . En remplaçant  $f$  par  $f_h$ , on commet une erreur d'où  $E(f_h) = \varepsilon_h$ .

On va chercher à annuler l'erreur sur un espace de fonction de dimension finie — méthode de résidus pondérés — ; par exemple, en choisissant comme espace de projection l'espace  $V_h$  (méthode dite de Galerkin), on a

$$\forall i, \langle \varepsilon_h, N_i \rangle = 0 \Leftrightarrow \forall i, \langle E(f_h), N_i \rangle = 0$$

En explicitant  $E$  et  $f_h$ , on obtient la formulation variationnelle du problème discret. Elle conduit aussi à un système matriciel de la forme

$$Af = b$$

**Rappel :**

$$\langle E(f_h), N_i \rangle = \int E(f_h) N_i$$

### 2.3.4 Volumes finis

La méthode des volumes finis est bien adaptée à des problèmes conservatifs :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \text{div}(\vec{F}(f)) = 0$$

En discrétisant le domaine simulé, on écrit la loi de conservation sur chaque élément puis on intègre en considérant comme degré de liberté — ou inconnue — associé à l'élément la valeur moyenne sur l'élément :

$$\int_K \left\{ \frac{\partial f}{\partial t} + \text{div} \vec{F}(f) \right\} dV = 0$$

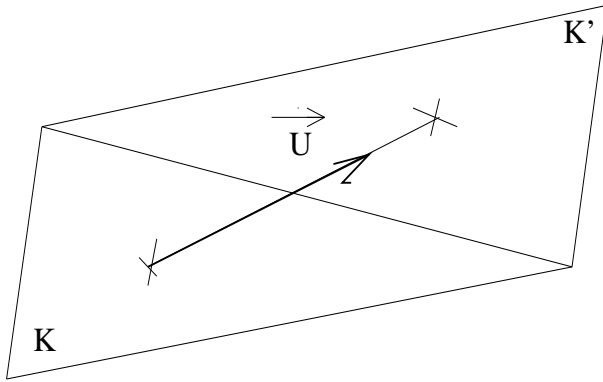
$$\int_K \frac{f^{n+1} - f^n}{\Delta t} dV + \int_{\gamma_K} \vec{F}(f) \cdot \vec{n} d\gamma = 0$$

$$\frac{|K|}{\Delta t} (f_K^{n+1} - f_K^n) + \int_{\gamma_K} \vec{F}(f) \cdot \vec{n} d\gamma = 0$$

Il reste à exprimer le flux numérique à partir des valeurs de l'inconnue sur chaque élément. Le schéma sera explicite (resp. implicite) si le flux est exprimé à partir des données au temps  $n$  (resp.  $n + 1$ ).

Dans le cas où le flux correspond au flux convectif  $\vec{F}(f) = \vec{u}f$  on pourrait envisager les expressions suivantes du flux :

$$\vec{F}(f) \cdot \vec{n} = \begin{cases} \vec{u} \cdot \vec{n} f_K \\ \vec{u} \cdot \vec{n} f_{K'} \\ \vec{u} \cdot \vec{n} \frac{f_K + f_{K'}}{2} \end{cases}$$



Une fois que le flux à travers chaque face du maillage est exprimé en fonction des valeurs moyennes de l'inconnue en chaque élément, on obtient un système matriciel de la forme

$$Af = b$$

La question qui reste pour l'instant sans réponse est la suivante :  
A-t'on  $f_h \rightarrow f$  lorsque  $h$  et  $\Delta t \rightarrow 0$  (convergence de la solution numérique vers la solution du problème continu) ?

Cela constituera la question centrale du prochain chapitre.

## Chapitre 3

# Convergence et conditions aux limites

### 3.1 Convergence, stabilité et consistance

#### 3.1.1 Définitions

La *convergence*, lorsque le pas du maillage en espace — noté  $h$  ou  $\Delta x$  — et lorsque le pas de temps  $\Delta t$  tendent simultanément vers 0, de la solution approchée  $f_h$  vers la solution exacte  $f$  d'une EDP est délicate à démontrer.

C'est pourquoi on utilise le plus souvent le *théorème de Lax* : pour un problème linéaire bien posé, il y a équivalence entre convergence et (stabilité + consistance).

La *consistance* est une notion qui doit permettre de dire si lorsque  $h$  et  $\Delta t$  tendent vers 0 le système d'équations algébriques est égal à l'EDP.

La *stabilité* est une traduction du principe du maximum. Pour les problèmes de diffusion-convection, en absence de terme source, la solution est bornée par le minimum et le maximum de la condition initiale. Le schéma numérique, pour vérifier ce principe, ne doit donc pas amplifier les erreurs.

Nous allons illustrer les notions de consistance et de stabilité à l'aide de l'équation de transport par diffusion-convection d'un champ scalaire passif — et de ses formes dégénérées comme l'équation de la chaleur et l'équation de transport par convection — en appliquant une méthode de discrétisation spatiale par différences finies.

#### 3.1.2 Consistance du schéma différences finies pour l'équation de la chaleur

Le schéma aux différences finies appliqué à l'équation de la chaleur 1D

$$\frac{\partial T}{\partial t} - \nu \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = 0$$

s'écrit dans le cas où une discrétisation temporelle explicite est choisie

$$T_j^{n+1} = sT_{j-1}^n + (1 - 2s)T_j^n + sT_{j+1}^n$$

avec  $s = \frac{\nu \Delta t}{\Delta x^2}$ .

Pour montrer que ce schéma est consistant, on va montrer que la différence entre  $\bar{T}_j^{n+1}$ , *solution exacte* du problème, et  $T_j^{n+1}$ , *solution numérique* obtenue en considérant comme condition à l'instant  $n$  la solution exacte  $\bar{T}_j^n$ , est au moins en  $O(\Delta t, \Delta x)$ .

Dans un premier temps, on effectue des développements limités en espace autour du point  $j$  au temps  $n$  pour les différents termes intervenant dans le schéma aux différences finies. On applique alors le schéma numérique ; par combinaisons linéaires des développements limités on obtient une expression permettant de comparer la solution numérique à la solution exacte et à ses gradients :

$$(\times s)\bar{T}_{j+1}^n = \bar{T}_j^n + \Delta x \left[ \frac{\partial \bar{T}}{\partial x} \right]_j^n + \frac{\Delta x^2}{2} \left[ \frac{\partial^2 \bar{T}}{\partial x^2} \right]_j^n + \dots$$

$$(\times (1 - 2s))\bar{T}_j^n = \bar{T}_j^n$$

$$(\times s)\bar{T}_{j-1}^n = \bar{T}_j^n - \Delta x \left[ \frac{\partial \bar{T}}{\partial x} \right]_j^n + \frac{\Delta x^2}{2} \left[ \frac{\partial^2 \bar{T}}{\partial x^2} \right]_j^n + \dots$$

$$T_j^{n+1} = \bar{T}_j^n + s\Delta x^2 \left[ \frac{\partial^2 \bar{T}}{\partial x^2} \right]_j^n + \frac{s\Delta x^4}{12} \left[ \frac{\partial^4 \bar{T}}{\partial x^4} \right]_j^n + O(s\Delta x^6)$$

Dans un deuxième temps, on effectue un développement limité en temps de la solution exacte au point  $j$  au temps  $n + 1$  :

$$\bar{T}_j^{n+1} = \bar{T}_j^n + \Delta t \left[ \frac{\partial \bar{T}}{\partial t} \right]_j^n + \frac{\Delta t^2}{2} \left[ \frac{\partial^2 \bar{T}}{\partial t^2} \right]_j^n + O(\Delta t^3)$$

En différenciant les deux expressions obtenues ci-dessus et en remarquant que  $\bar{T}$  étant solution de l'équation de la chaleur on a

$$\frac{\partial^2 \bar{T}}{\partial t^2} = \nu^2 \frac{\partial^4 \bar{T}}{\partial x^4}$$

on obtient

$$\begin{aligned}
& \bar{T}_j^{n+1} - T_j^{n+1} \\
&= \Delta t \left\{ \left[ \frac{\partial \bar{T}}{\partial t} \right]_j^n - \frac{s \Delta x^2}{\Delta t} \left[ \frac{\partial^2 \bar{T}}{\partial x^2} \right]_j^n \right\} + \nu^2 \frac{\Delta t^2}{2} \left[ \frac{\partial^4 \bar{T}}{\partial x^4} \right]_j^n \left\{ 1 - \frac{s \Delta x^4}{6 \Delta t^2 \nu^2} \right\} \\
&= \Delta t \left\{ \left[ \frac{\partial \bar{T}}{\partial t} \right]_j^n - \nu \left[ \frac{\partial^2 \bar{T}}{\partial x^2} \right]_j^n \right\} + \frac{\nu \Delta t \Delta x^2}{2} \left( s - \frac{1}{6} \right) \left[ \frac{\partial^4 \bar{T}}{\partial x^4} \right]_j^n
\end{aligned}$$

Comme  $\bar{T}$  est solution de l'équation, on obtient en prenant également en compte les termes de troncature passés sous silence ci-dessus

$$\bar{T}_j^{n+1} - T_j^{n+1} = \frac{\nu \Delta t \Delta x^2}{2} \left( s - \frac{1}{6} \right) \left[ \frac{\partial^4 \bar{T}}{\partial x^4} \right]_j^n + \Delta t O(\Delta t^2, \Delta x^4)$$

### 3.1.3 Stabilité du schéma différences finies pour l'équation de transport

Plusieurs méthodes permettent de montrer la stabilité d'un schéma numérique :

- ▷ Mettre le schéma sous la forme  $f^{n+1} = A f^n$  et montrer que les valeurs propres de A sont de normes inférieures à 1 (car  $f^{n+1} = A^{n+1} f^0$  par récurrence) ;
- ▷ Utiliser les transformées de Fourier et montrer que la norme du facteur d'amplification reste inférieure à 1 (analyse spectrale, due à Von Neumann) ;
- ▷ Une méthode un peu moins numérique enfin où on considère une condition initiale particulière dont on étudie l'évolution afin de vérifier si à l'issue d'un pas de temps le principe du maximum discret est réalisé ; on vérifie ainsi la façon dont d'éventuelles perturbations sont susceptibles de s'amplifier — méthode des perturbations — ; le défaut de cette méthode est de ne pas être générale, les conditions de stabilité obtenues pouvant dépendre de la condition initiale choisie.

Dans ce paragraphe, nous allons étudier la stabilité de plusieurs schémas numériques basés sur une discrétisation spatiale par différences finies. Ces schémas seront appliqués à l'équation de transport par diffusion-convection d'un champ scalaire passif :

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \text{div}(\vec{u}c - \overline{\overline{D}} \nabla c) = 0$$

où le vecteur vitesse  $\vec{u}$  et le tenseur de diffusion  $\overline{\overline{D}}$  sont supposés connus et indépendants du champ transporté.

Dans le cas mono-dimensionnel, en supposant le fluide incompressible, l'équation de transport dégénère en

$$c_t + u c_x - d c_{xx} = 0$$

Pourquoi des instabilités numériques apparaissent-elles ? Existe-t-il des instabilités numériques liées à la discrétisation spatiale ? à la discrétisation temporelle ?



Nous allons tenter de répondre à ces questions dans les paragraphes suivants en utilisant pour les analyses de stabilité la méthode des perturbations.

### Instabilités numériques et discrétisation spatiale

Afin de comprendre le lien entre instabilités numériques et discrétisation spatiale éliminons le temps de l'équation de transport en considérant le problème permanent :

$$uc_x - dc_{xx} = 0$$

Pour un maillage uniforme de pas  $\Delta x$ , en utilisant un schéma centré pour le terme convectif on obtient :

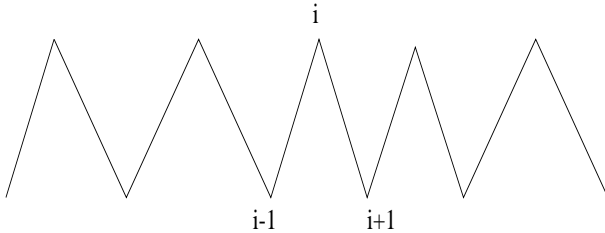
$$(1 - \gamma_P)c_{i+1} - 2c_i + (1 + \gamma_P)c_{i-1} = 0$$

où  $\gamma_P = \frac{u\Delta x}{2d}$  désigne le Peclet de maille.

En remarquant que  $(1 - \gamma_P) + (1 + \gamma_P) = 2$ , on peut associer  $c_i$  avec les termes  $c_{i+1}$  et  $c_{i-1}$  :

$$(1 - \gamma_P)(c_{i+1} - c_i) = (1 + \gamma_P)(c_i - c_{i-1})$$

Cette expression montre que dès que  $\gamma_P \geq 1$ , les pentes à droite et à gauche du point  $i$  sont de signes contraires. On a donc un extrémum local au point  $i$ . Ce raisonnement pouvant s'appliquer à l'ensemble des points de la discrétisation spatiale, tous les points sont des extrema locaux : la solution est donc nécessairement oscillante.



Pour qu'il n'y ait pas d'oscillation, la contrainte de stabilité  $\gamma_P \leq 1$  conduit à la contrainte suivante sur le pas d'espace

$$\Delta x \leq \frac{2d}{u}$$

### Instabilités numériques et discrétisation temporelle

**Problème de transport diffusif :** Négligeons dans un premier temps le terme convectif. L'équation à considérer s'écrit donc

$$c_t - dc_{xx} = 0$$

Un schéma explicite centré conduit à :

$$c_i^{n+1} - c_i^n = \gamma_F (c_{i+1}^n - 2c_i^n + c_{i-1}^n)$$

où  $\gamma_F = \frac{d\Delta t}{\Delta x^2}$  désigne le nombre de Fourier.

Le schéma sera stable si d'éventuelles perturbations ne sont pas amplifiées au cours du temps. Supposons donc que  $c \equiv 0$  sauf au point  $i$  où  $c_i = \epsilon$ . En injectant cette solution particulière de  $c^n$  dans le schéma numérique, on obtient pour le point  $x_i$  :

$$c_i^{n+1} = \epsilon(1 - 2\gamma_F)$$

Le schéma sera donc stable si

$$\left| \frac{c_i^{n+1}}{c_i^n} \right| \leq 1$$

Ce qui conduit à la contrainte de stabilité

$$\gamma_F \leq 1$$

Si de plus on souhaite imposer la *positivité* de  $c_i$  on doit vérifier

$$\frac{c_i^{n+1}}{c_i^n} \geq 0 \Rightarrow \gamma_F \leq \frac{1}{2}$$

La contrainte obtenue sur le pas de temps est donc

$$\boxed{\Delta t \leq \frac{\Delta x^2}{2d}}$$

**Problème de transport par diffusion-convection** : Associons à l'équation de transport par diffusion-convection le schéma explicite en temps et centré en espace

$$c_i^{n+1} - c_i^n = -\frac{\gamma_C}{2}(c_{i+1}^n - c_{i-1}^n) + \gamma_F(c_{i+1}^n - 2c_i^n + c_{i-1}^n)$$

où  $\gamma_C = \frac{u\Delta t}{\Delta x}$  désigne le nombre de Courant-Friedrichs-Lewy (CFL).

Supposons  $u > 0$ . Si  $u < 0$ , il suffit de permuter dans ce qui suit le rôle des points  $x_{i+1}$  et  $x_{i-1}$ . Considérons à nouveau la condition initiale particulière exhibée précédemment, à savoir  $c \equiv 0$  sauf en  $x_i$  où  $c_i = \epsilon$ .

En exprimant le schéma au point  $x_{i+1}$ , on obtient :

$$c_{i+1}^{n+1} = \epsilon\left(\frac{\gamma_C}{2} + \gamma_F\right)$$

La stabilité conduit à la double inégalité suivante :

$$-1 \leq \frac{\gamma_C}{2} + \gamma_F \leq 1$$

Comme nous avons supposé que le champ de vitesse  $u$  est positif, l'inégalité de gauche est vérifiée ; celle de droite conduit à la contrainte suivante sur le pas de temps :

$$\Delta t \leq \frac{2}{\frac{2d}{\Delta x^2} + \frac{u}{\Delta x}}$$

En exprimant le schéma au point  $x_{i-1}$ , on obtient :

$$-1 \leq -\frac{\gamma_C}{2} + \gamma_F \leq 1$$

La contrainte précédente suffit, mais pour garantir *la positivité* on obtient la contrainte plus restrictive

$$\frac{\gamma_C}{2\gamma_F} \leq 1, \text{ soit } \gamma_P \leq 1.$$

On retrouve à nouveau la contrainte obtenue dans le cas permanent.

En exprimant le schéma au point  $x_i$ , on obtient :

$$\gamma_F \leq \frac{1}{2}$$

Compte tenu des définitions de  $\gamma_P, \gamma_F$  et  $\gamma_C$  :

$$2\gamma_P\gamma_F = \gamma_C$$

Comme on doit vérifier simultanément  $\gamma_F \leq 0.5$  et  $\gamma_P \leq 1$ , on obtient finalement la contrainte suivante sur le nombre CFL :

$$\gamma_C \leq 1$$

La contrainte sur le pas de temps devient alors

$$\boxed{\Delta t \leq \frac{2d}{u^2}}$$

**Problème de transport convectif** : Négligeons maintenant dans l'équation de transport le terme diffusif. L'équation à considérer s'écrit donc

$$c_t + uc_x = 0$$

Une discrétisation centrée du terme convectif en explicite conduit à

$$c_i^{n+1} - c_i^n = -\frac{\gamma_C}{2}(c_{i+1}^n - c_{i-1}^n)$$

où  $\gamma_C = \frac{u\Delta t}{\Delta x}$  désigne le nombre de Courant-Friedrichs-Lewy (CFL).

On voit les limites de la méthode employée puisque dans le cas du schéma centré on s'aperçoit que les conditions de stabilité obtenues dépendent du choix de la solution particulière injectée dans le schéma. Il faut donc recourir à une méthode plus générale.

L'étude de la stabilité via la méthode de Von Neumann que nous détaillons plus loin dans ce chapitre, conduit à comparer la norme du facteur d'amortissement  $G$  avec 1. Le schéma sera stable pour  $G < 1$ . Dans le cas du schéma centré, on obtient pour le nombre d'onde  $k$

$$G = 1 - i\gamma_C \sin k$$

D'où

$$\forall \gamma_C \neq 0 \quad |G| > 1$$

Le schéma centré explicite dans le cas d'une équation de transport sans terme diffusif est donc **inconditionnellement instable**.

**Remarque :** Si on intègre en temps sur un intervalle suffisamment court, le temps nécessaire pour que l'amplitude des oscillations soit significative devant les variations de la solution peut ne pas être atteint.

Afin de s'affranchir des *instabilités numériques d'origine spatiale*, on ajoute de la diffusion numérique au schéma. Pour cela, *on décentre* la discrétisation du terme convectif selon le sens de la vitesse. Le décentrement amont — ou upwind — est réalisé à l'aide des parties positive et négative de la vitesse définies par

$$u^+ = \frac{u + |u|}{2} \quad \text{et} \quad u^- = \frac{u - |u|}{2}$$

Il suffit alors d'associer à chaque partie de la vitesse l'approximation de la dérivée première faisant intervenir le point amont :

$$[uc_x]_i = \frac{1}{\Delta x} \{u^+(c_i - c_{i-1}) + u^-(c_{i+1} - c_i)\}$$

En remplaçant les parties positive et négative de la vitesse par leurs définitions, on obtient

$$[uc_x]_i = \frac{u}{2\Delta x}(c_{i+1} - c_{i-1}) - \frac{\Delta x |u|}{2} \frac{c_{i+1} - 2c_i + c_{i-1}}{\Delta x^2}$$

Le décentrement du terme convectif revient donc à ajouter au schéma centré de la diffusion numérique, le coefficient de viscosité étant égal à  $\Delta x |u| / 2$ . La contrainte de stabilité obtenue dans le cas d'une équation de transport d'un champ scalaire passif par diffusion et convection,  $\Delta x \leq 2d/u$ , est alors automatiquement vérifiée.

D'autre part,  $\Delta t \leq 2d/u^2$  l'est aussi dès que  $\gamma_C \leq 1$ . Le schéma explicite décentré amont sera donc stable sous la condition CFL.

Nous venons de voir qu'en agissant sur la discrétisation spatiale du terme convectif, on obtenait un schéma conditionnellement stable. Une autre façon de stabiliser le schéma centré est d'agir sur la discrétisation temporelle.

### 3.1.4 Discrétisation temporelle et approximants de Padé

La stabilisation des oscillations d'origine temporelle peut être réalisée en construisant un schéma explicite d'ordre 2 en temps. On utilise pour cela les *approximants de Padé*.

#### Approximants de Padé

Soit  $B$  la matrice associée à un opérateur différentiel. On définit l'exponentielle d'une matrice par :

$$e^B = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{B^i}{i!}$$

Les approximants de Padé consistent à chercher  $e^{-Z}$  sous la forme d'une fraction rationnelle  $\frac{P(Z)}{Q(Z)}$  où  $P$  et  $Q$  sont deux polynômes de degré  $p$  et  $q$  approchant  $e^{-Z}$  à l'ordre  $r$ . Cela signifie qu'en effectuant la division de  $P$  par  $Q$  on obtient le développement limité de  $e^{-Z}$  jusqu'à l'ordre  $r$ .

Le lien entre les approximants de Padé et la discrétisation temporelle d'une EDP est assez simple à condition de séparer les discrétisations spatiale et temporelle. Supposons que l'EDP à résoudre s'écrive

$$\frac{\partial c}{\partial t} + Bc = 0.$$

La solution de cette équation est bien entendu

$$c = c_0 e^{-Bt}.$$

En utilisant les approximants de Padé, on obtient un schéma en temps consistant d'ordre  $r$  en considérant  $c$  sous la forme

$$\underbrace{Q(tB)c}_{\text{implicite}} = \underbrace{P(tB)c_0}_{\text{explicite}}.$$

Approximants de Padé pour  $(p,q)$  allant jusqu'à  $(2,2)$   
(approximation de  $e^{-Z}$ )

		$p = 1$	$p = 2$
		$1 - Z$ (ordre 1)	$1 - Z + \frac{Z^2}{2}$ (ordre 2)
$q = 1$	$\frac{1}{1+Z}$ (ordre 1)	$\frac{1-\frac{Z}{2}}{1+\frac{Z}{2}}$ (ordre 2)	$\frac{1-\frac{2Z}{3}+\frac{Z^2}{6}}{1+\frac{Z}{3}}$ (ordre 3)
$q = 2$	$\frac{1}{1+Z+\frac{Z^2}{2}}$ (ordre 2)	$\frac{1-\frac{Z}{3}}{1+\frac{2Z}{3}+\frac{Z^2}{2}}$ (ordre 3)	$\frac{1-\frac{Z}{2}+\frac{Z^2}{12}}{1+\frac{Z}{2}+\frac{Z^2}{12}}$ (ordre 4)

**Remarques :**

- ▷ Les schémas au dessus de la diagonale sont à dominante explicite. Ceux en dessous à dominante implicite, la diagonale étant à traiter au cas par cas ;
- ▷ On retrouve la plupart des schémas via les approximants de Padé : Euler explicite ( $p=1$  et  $q=0$ ), Euler implicite ( $p=0$  et  $q=1$ ), Crank-Nicolson ( $p=q=1$ ), Lax-Wendroff ( $p=2$  et  $q=0$ ), ... ;
- ▷ Notons qu'en évaluant  $Z^2$ , on peut obtenir un schéma en temps d'ordre 4 ! ;
- ▷ Si les valeurs principales de  $B$  sont réelles et positives, on peut montrer que le schéma obtenu via les approximants de Padé est inconditionnellement stable pour  $p \geq q$ .

**Stabilisation temporelle**

En quoi l'utilisation d'une discrétisation temporelle particulière permet-elle d'éviter le développement d'instabilités numériques ?

Afin de répondre à cette question, intéressons nous au schéma explicite d'ordre 2 en temps de Lax-Wendroff. Ce schéma correspond à  $Q(Z) = 1$  et  $P(Z) = 1 - Z + Z^2/2$ .

Dans le cas d'une équation de transport par convection pure, on a  $Bc = \text{div}(\vec{u}c)$ , d'où  $B^2c = \text{div}(\vec{u}\text{div}(\vec{u}c))$ . Si on suppose le fluide incompressible,  $\text{div}(\vec{u}) = 0$ , et le terme supplémentaire à ajouter au schéma centré est  $D_\nu \Delta c$ , le coefficient de viscosité étant donné par  $D_\nu = (\Delta t/2)\vec{u} \otimes \vec{u}$ .

On obtient donc dans le cas mono-dimensionnel  $d = u^2 \Delta t/2$ . On peut remarquer que dans le cas où le nombre CFL  $\gamma_C$  est égal à un, les viscosités numériques liées au décentrement d'une part, au schéma de Lax-Wendroff d'autre part, sont égales.

Compte tenu de l'expression de  $d$ , la contrainte de stabilité  $\Delta t \leq 2d/u^2$  est vérifiée et  $\gamma_F \leq 1/2$  dès que  $\gamma_C \leq 1$ . De plus,  $\gamma_P \gamma_C = 1$  et donc  $\gamma_P \geq 1$ . La solution pourra donc présenter des oscillations en espace. Cependant, à cause de la stabilité en temps, ces oscillations resteront bornées.

**3.1.5 Etude de la stabilité par la méthode de Von Neumann**

Si les schémas explicites souffrent de problèmes de stabilité, il n'en est pas de même des schémas implicites. Nous allons nous servir de la méthode de Von Neumann pour montrer ces résultats. En particulier, nous montrerons que le schéma centré explicite d'ordre un en temps est inconditionnellement instable.

Pour une fonction intégrable  $f$ , on définit sa transformée de Fourier, notée  $\hat{f}$ , par

$$\hat{f}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int e^{ikx} f(x) dx$$

où  $k$  désigne le nombre d'onde.

Nous avons vu que la discrétisation d'un problème d'évolution linéaire conduisait à  $f^{n+1} = Af^n$ . Par récurrence, on obtient  $f^{n+1} = A^{n+1}f^0$ . En considérant la transformée de Fourier de  $f$ , on retrouve également ces égalités :

$$\begin{aligned}\widehat{f}^{n+1} &= \widehat{A} \widehat{f}^n \\ \widehat{f}^{n+1} &= \widehat{A}^{n+1} \widehat{f}^0\end{aligned}$$

La transformée de Fourier étant une isométrie, les normes  $\|A\|$  et  $\|\widehat{A}\|$  sont égales (égalité de Parseval). De plus, lorsque les opérateurs de discrétisation spatiale agissent sur la transformée de Fourier, les dérivées deviennent des produits. En effet, on a

$$\begin{aligned}\frac{\partial \widehat{f}}{\partial x} &= -ik \widehat{f} \\ \frac{\partial^n \widehat{f}}{\partial x^n} &= (-ik)^n \widehat{f}.\end{aligned}$$

En appliquant les propriétés de dérivation au développement de Taylor au point  $i$  on obtient

$$\begin{aligned}\widehat{f}_{i+1} &= \widehat{f}_i \left(1 - ik\Delta x + \frac{(ik\Delta x)^2}{2!} + \dots\right) = \widehat{f}_i e^{-ik\Delta x} \\ \widehat{f}_{i-1} &= \widehat{f}_i \left(1 + ik\Delta x + \frac{(ik\Delta x)^2}{2!} + \dots\right) = \widehat{f}_i e^{ik\Delta x}\end{aligned}$$

On obtient ainsi facilement le coefficient d'amortissement  $\widehat{A}$  dont il suffit d'évaluer le module —  $\widehat{A}$  est un nombre complexe — afin d'estimer la stabilité du schéma étudié. Il est plus facile de comparer à 1 le facteur d'amortissement que de comparer à 1 les valeurs propres de la matrice  $A$ .

Appliquons une  $\theta$ -méthode à l'équation de convection pure discrétisée par un schéma centré. On obtient alors

$$c_i^{n+1} - c_i^n = -\frac{\gamma_C}{2} \left\{ \theta (c_{i+1}^{n+1} - c_{i-1}^{n+1}) + (1 - \theta)(c_{i+1}^n - c_{i-1}^n) \right\}$$

Le schéma ainsi obtenu conduit pour la transformée de Fourier de  $c$  à

$$\widehat{c}_i^{n+1} = \frac{1 + i\gamma_C(1 - \theta) \sin(k\Delta x)}{1 - i\gamma_C\theta \sin(k\Delta x)} \widehat{c}_i^n$$

La norme du facteur d'amortissement est donc donnée par

$$\|\widehat{A}\|^2 = \frac{[1 - \gamma_C^2(1 - \theta)\theta \sin^2(k\Delta x)]^2 + \gamma_C^2 \sin^2(k\Delta x)}{(1 + \gamma_C^2\theta^2 \sin^2(k\Delta x))^2}$$

Après quelques calculs, la condition de stabilité  $\|\widehat{A}\|^2 \leq 1$  conduit à

$$\gamma_C^2 \sin^2(k\Delta x)(1 + \gamma_C^2\theta^2 \sin^2(k\Delta x))(1 - 2\theta) \leq 0$$

Le schéma proposé est donc inconditionnellement stable si  $\theta \geq 0.5$ , instable sinon. Les schémas de Crank-Nicholson ( $\theta = 0.5$ ) et d'Euler implicite ( $\theta = 1.0$ ) sont donc inconditionnellement stables. Euler explicite ( $\theta = 0.0$ ) est inconditionnellement instable si on utilise un schéma centré pour la convection.

Appliquons une  $\theta$ -méthode à l'équation de diffusion :

$$c_i^{n+1} - c_i^n = \gamma_F [\theta (c_{i+1}^{n+1} - 2c_i^{n+1} + c_{i-1}^{n+1}) + (1 - \theta)(c_{i+1}^n - 2c_i^n + c_{i-1}^n)]$$

Les propriétés de la transformée de Fourier conduisent à

$$\widehat{c}_{i+1} - 2\widehat{c}_i + \widehat{c}_{i-1} = -2(1 - \cos(k\Delta x)) = -4 \sin^2\left(\frac{k\Delta x}{2}\right)$$

D'où l'expression suivante du facteur d'amortissement

$$\widehat{A} = \frac{1 + 4\gamma_F(\theta - 1) \sin^2\left(\frac{k\Delta x}{2}\right)}{1 + 4\gamma_F\theta \sin^2\left(\frac{k\Delta x}{2}\right)}$$

Comme  $\theta \in [0, 1]$  et que  $\gamma_F > 0$ , il est clair que  $\widehat{A} \leq 1$ . Par contre l'inégalité  $-1 \leq \widehat{A}$  n'est vérifiée que sous la condition

$$-2 \leq 4\gamma_F \sin^2\left(\frac{k\Delta x}{2}\right)(2\theta - 1)$$

Pour  $\theta \geq 0.5$ , le schéma est donc inconditionnellement stable. Pour  $\theta < 0.5$ , le schéma est stable sous la condition  $\gamma_F \leq 0.5$ .

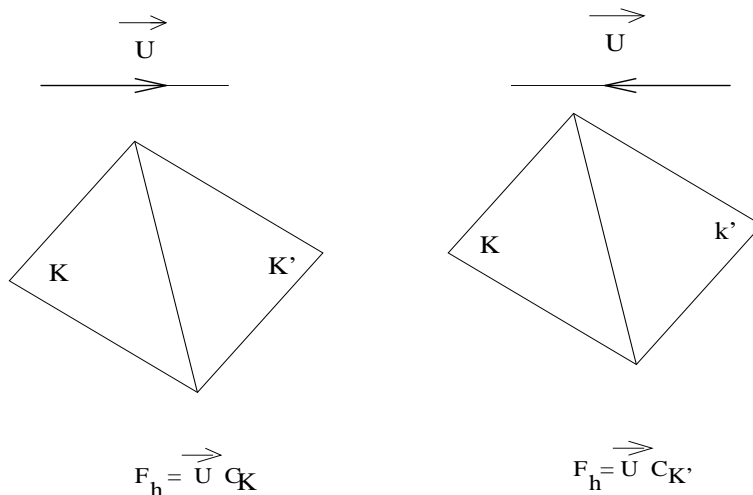
**Exercice** : Retrouver les résultats obtenus avec la méthode des perturbations dans le cas de l'équation de diffusion-convection.

### 3.1.6 Consistance et stabilité en volumes finis

En volumes finis, la notion de stabilité est la même qu'en différences finies. Par contre la notion de consistance (compatibilité en français) est différente : la définition de la consistance présentée au début de ce cours est associée aux différences finies (développements de Taylor).

En volumes finis, on cherche à évaluer les flux aux interfaces à l'aide des valeurs du champ de part et d'autre de l'interface. Le flux sera dit consistant si le flux numérique  $F_h$  tend vers le flux physique  $F$  lorsque le maillage s'affine.

La notion de décentrement existe aussi en volumes finis. Le flux à l'interface est décentré en faisant intervenir les éléments situés en amont du champ de vitesse.

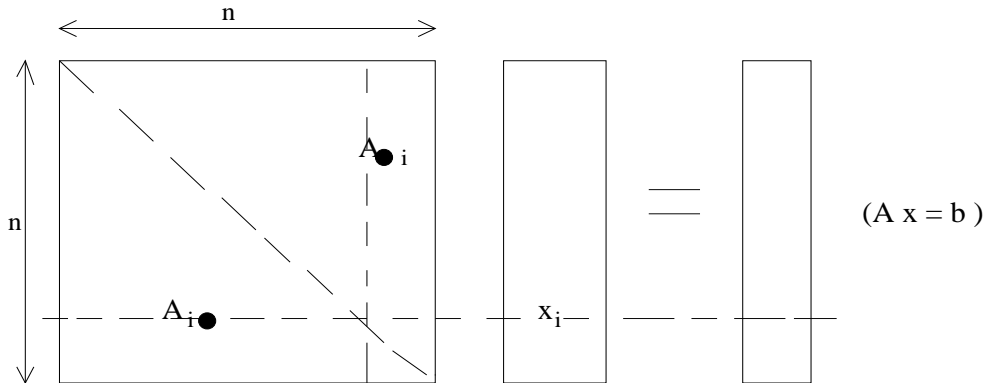




## 3.2 Imposition des conditions aux limites de type Dirichlet

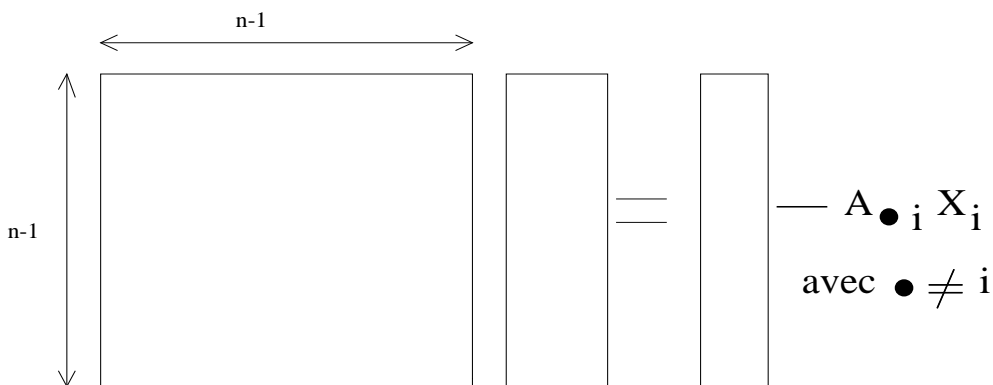
Nous avons vu dans le chapitre précédent que suivant le type de problème à traiter, on devait imposer la valeur du champ ou de son flux à la frontière du domaine. Nous allons présenter dans ce paragraphe les trois méthodes classiquement utilisées afin d'imposer la valeur d'une inconnue en un point.

Soit  $x$  l'inconnue du système matriciel  $Ax = b$ . Comment imposer au point  $i$  la valeur  $x_i = X_i$ ?



### 3.2.1 Méthode de substitution

La première méthode, dite de substitution, consiste à remplacer la matrice de rang  $n$  par une matrice de rang  $(n - 1)$  en supprimant la ligne  $i$  et la colonne  $i$  correspondant à l'inconnue  $x_i$ ; à modifier le second membre en y retranchant le produit de la colonne  $i$  par  $X_i$ .

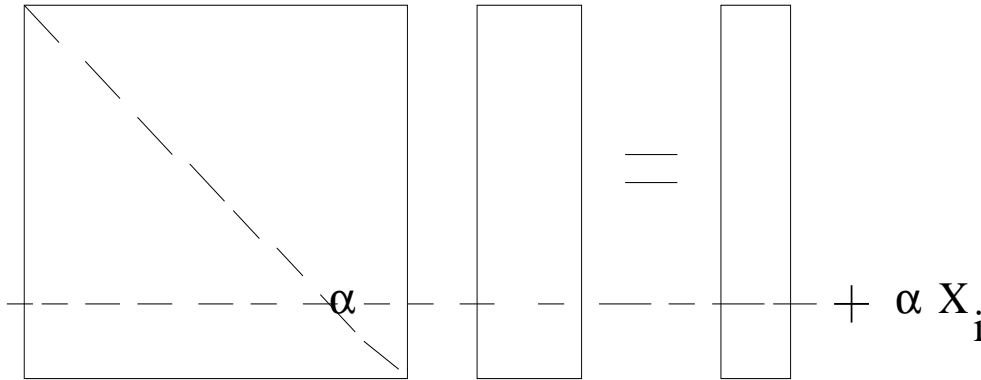


Cette méthode est délicate à mettre en oeuvre d'un point de vue informatique car on doit modifier la matrice et le second membre obtenu avant l'imposition des conditions aux limites. En général, la matrice est stockée sous une forme

condensée (morse, ...) afin de gagner de l'espace mémoire et il n'est pas toujours trivial d'y supprimer une ligne et une colonne.

### 3.2.2 Méthode de pénalisation

La deuxième méthode, dite de pénalisation, est très simple à mettre en oeuvre. Elle consiste à ajouter sur la diagonale en position  $i$  un gros coefficient  $\alpha$  et au second membre  $\alpha X_i$ .



L'équation associée à la ligne  $i$  ainsi modifiée s'écrit

$$\sum_{j=1}^n a_{ij}x_j + \alpha x_i = b_i + \alpha X_i$$

Ce qui conduit à

$$x_i = X_i + \frac{1}{\alpha}(b_i - \sum_{j=1}^n a_{ij}x_j)$$

Pour  $\alpha$  suffisamment grand, le second terme du second membre est négligeable. Dans certains cas cependant, le choix du coefficient  $\alpha$  est délicat. Les puristes reprocheront également à cette méthode de ne pas être exacte.

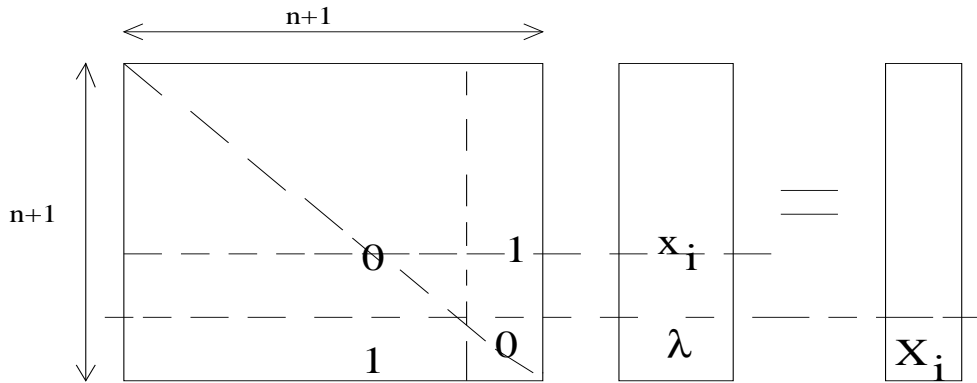
### 3.2.3 Utilisation d'un multiplicateur de Lagrange

La dernière méthode utilise les multiplicateurs de Lagrange. On introduit donc  $\lambda_i$  le multiplicateur de Lagrange associé à la contrainte  $x_i - X_i = 0$ .

Prendre en compte cette contrainte revient à transformer le problème initial en un problème d'optimisation sous contrainte, d'où l'ajout à la matrice  $A$  de la contribution

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_i \\ \lambda_i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ X_i \end{pmatrix}$$

On passe ainsi d'une matrice de rang  $n$  à une matrice de rang  $n + 1$  puisque on doit ajouter la ligne et la colonne associées au multiplicateur de Lagrange.



L'intérêt de la méthode est qu'elle s'intègre assez bien dans le cadre d'une discrétisation par éléments finis : la matrice élémentaire associée au multiplicateur de Lagrange est assemblée aux autres matrices élémentaires de façon générique. La difficulté est le plus souvent de pouvoir interpréter la signification du multiplicateur de Lagrange.

## Chapitre 4

# Méthode des éléments finis

### 4.1 Introduction

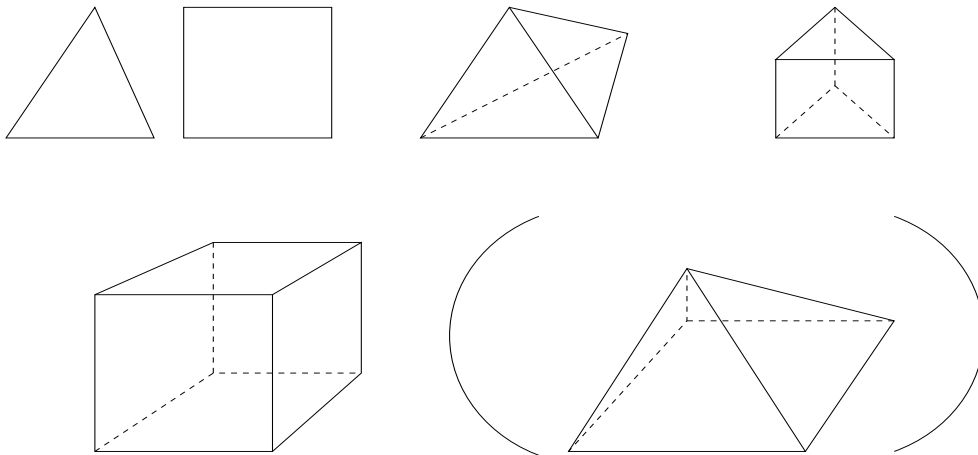
On appelle élément fini l'association :

- ▷ d'un élément géométrique ;
- ▷ de fonctions d'interpolation ;
- ▷ de points (ou noeuds) support géométriques des inconnues.

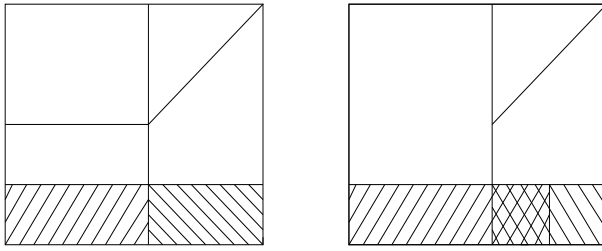
Ce triplet n'est pas le résultat du hasard mais de contraintes liées aux propriétés mathématiques vérifiées par la solution cherchée et d'une démarche visant à optimiser le nombre de terme nul de la matrice du système final.

#### 4.1.1 Éléments géométriques

L'ensemble *des éléments* — ou maillage — doit constituer un recouvrement du domaine de calcul. En 2D, les éléments utilisés sont des triangles et des quadrangles. En 3D, des tétraèdres, des prismes, des cubes et parfois des pyramides. Si d'autres polygones sont possibles leurs utilisations restent confidentielles.



Les différents éléments du maillage sont soumis à quelques contraintes puisqu'ils doivent constituer un recouvrement du domaine. Ainsi, deux éléments adjacents du maillage ont en commun un sommet ou une face.



Autorisé

Interdit

#### 4.1.2 Fonctions d'interpolation et espaces associés

Sur chaque élément du maillage, l'inconnue du problème continu, notée  $c$  par la suite, est approchée par une fonction simple, notée  $c_h$ .

Si on suppose la fonction approchée connue en un certain nombre de points de l'élément, elle est évaluée en n'importe quel point de l'élément par interpolation. Les fonctions d'interpolation choisies sont en général des polynômes. Les éléments finis sont alors dits de *Lagrange*. D'autres choix sont possibles mais ne seront pas évoqués ici.

La restriction de la fonction approchée à un élément  $K$  du maillage, notée  $c_h^K$ , est de la forme

$$c_h^K(x, y) = \sum_{i=1}^{N_k} c_i N_i(x, y)$$

où  $c_i$  désigne la valeur de la fonction approchée  $c_h$  au point  $\vec{x}_i$  de coordonnées  $(x_i, y_i)$ ;  $N_i$  la *fonction d'interpolation* associée à  $\vec{x}_i$ ;  $N_k$  le nombre de fonctions utilisées pour l'élément  $K$ .

Les coefficients  $c_i$  de cette combinaison linéaire sont les inconnues — ou degré de liberté — du problème discret. Les fonctions d'interpolation sont les fonctions de base d'un espace vectoriel de dimension finie  $N_h$  dans lequel on cherche a priori la solution discrète  $c_h$ .

Pour les problèmes de type diffusion-convection, la fonction continue appartient à l'un des espaces vectoriels — de dimension infinie — suivants :

$$\begin{aligned} L^2(\Omega) &= \left\{ f : \Omega \rightarrow \mathbf{R} / \left( \int_{\Omega} f^2 \right)^{\frac{1}{2}} < \infty \right\} \\ H^1(\Omega) &= \left\{ f \in L^2(\Omega) / \frac{\partial f}{\partial x_j} \in L^2(\Omega) \forall j \right\} \\ H_{div}(\Omega) &= \left\{ \vec{f} \in L^2(\Omega)^n / div \vec{f} \in L^2(\Omega) \right\} \end{aligned}$$

Signalons, à titre culturel, qu'il peut apparaître également l'espace  $H_{rot}$  défini par

$$H_{rot}(\Omega) = \left\{ \vec{f} \in L^2(\Omega)^n / rot \vec{f} \in L^2(\Omega)^n \right\}$$

Dans le cas des éléments finis dits *conformes*, l'espace vectoriel de dimension finie dans lequel on recherche la fonction approchée est inclus dans l'espace de dimension infinie auquel appartient la fonction continue.

La caractérisation des espaces de dimension finie permet de préciser les fonctions d'interpolation et la localisation des points  $\vec{x}_i$  supportant les degrés de liberté  $c_i$ .

Pour les espaces dits de plus bas degré — espaces les plus simples que l'on puisse considérer —, les points servant à l'interpolation sont situés au centre de gravité de chaque élément pour  $L^2$ ; aux sommets de l'éléments pour  $H^1$ ; au centre de gravité des faces pour  $H_{div}$ . Nous précisons les raisons qui ont conduit à cette localisation des degrés de liberté au prochain paragraphe.

### 4.1.3 Principe de la méthode des éléments finis

Afin de déterminer les inconnues du problème discret, on va utiliser une méthode de *résidus pondérés* : on minimise l'*erreur* commise en remplaçant dans les équations aux dérivées partielles la fonction exacte par la fonction approchée. Pour cela, on *projette* l'erreur sur un espace de fonctions  $\Phi_h$  à préciser. On appelle *fonctions de pondération*, que l'on note  $\phi_h$ , les fonctions de base de cet espace. Les différentes étapes sous forme mathématique s'écrivent donc

1.  $E(c) = 0$
2.  $E(c_h) = \epsilon_h$
3.  $\forall \phi_h \in \Phi_h, \langle \epsilon_h, \phi_h \rangle = 0$

La *méthode de Galerkin* est un cas particulier de la méthode des résidus pondérés : l'espace de projection est le même que l'espace d'approximation de la solution du problème ; autrement dit  $\Phi_h = N_h$ .

Lorsque l'espace de projection et l'espace d'interpolation sont différents, la méthode est dite de *Petrov-Galerkin*. Nous verrons que le *décentrement* des termes convectifs en éléments finis conduit à des schémas numériques appartenant à cette dernière famille.

## 4.2 Espaces discrets de plus bas degré

Soient  $V_n$  et  $W_n$  deux espaces vectoriels de dimension finie inclus respectivement dans  $L^2(\Omega)$  et  $H^1(\Omega)$ , l'indice  $n$  désignant le degré du polynôme de l'élément fini de Lagrange associé.

Une fonction  $c_h$  appartient à  $V_n$  si sa restriction à chaque élément du maillage est continue. Une fonction  $c_h$  appartient à  $W_n$  si  $c_h$  appartient à  $V_n$  et si sur une arête commune à deux éléments la restriction de  $c_h$  à cette arête est continue.

Parmi tous les espaces  $V_n$  et  $W_n$  possibles, il convient d'exhiber les espaces dits de plus bas degré qui sont ceux qui permettent dans chaque cas de représenter l'inconnue avec le moins de degrés de liberté.

#### 4.2.1 Espace $V_0 \subset L^2(\Omega)$

Le polynôme de plus bas degré continu sur chaque élément est une fonction constante sur chaque élément. La dimension de l'espace  $V_0$  est donc égale au nombre d'éléments du maillage et la fonction d'interpolation  $I_K$  associée à chaque élément est la fonction indicatrice définie par

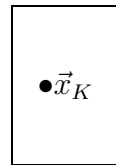
$$I_K(\vec{x}) = \begin{cases} 1 & \text{si } \vec{x} \in K. \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

Une fonction  $v_0 \in V_0$  s'écrit donc :

$$v_0(\vec{x}) = \sum_{k=1}^{nb\text{el}} v_K I_K(\vec{x})$$

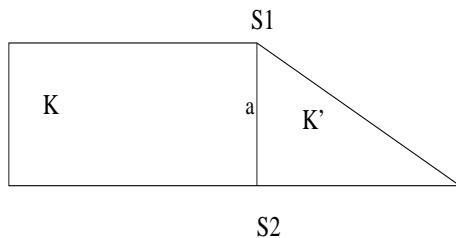
où  $v_K$  représente le degré de liberté associé à l'élément  $K$ . C'est la valeur moyenne de  $v$  sur  $K$ .

Le point de l'élément associé au degré de liberté  $v_K$  est, par convention, le centre de gravité de l'élément.



#### 4.2.2 Élément $W_1 \subset H^1(\Omega)$

Un polynôme constant par élément n'étant pas continu à l'interface entre deux éléments adjacents — sauf si le polynôme est constant sur l'ensemble du domaine mais on veut un espace plus riche — nous devons au moins considérer des polynômes de degré 1. Il reste à assurer la continuité de  $c_h$  sur chaque arête  $a$  commune à deux éléments adjacents  $K$  et  $K'$ .



Sur chaque élément, l'approximation de la solution ne dépend que des polynômes d'interpolation liés à l'élément. Soit  $c_K$  (resp.  $c_{K'}$ ) la restriction de  $c_h$  à l'élément  $K$  (resp.  $K'$ ). Assurer la continuité de  $c_h$  sur  $a$  c'est assurer l'égalité des polynômes  $c_K$  et  $c_{K'}$  sur  $a$ . Compte tenu du degré des polynômes considérés — dans le cas présent de degré 1 par rapport à  $s$ ,  $s$  désignant l'abscisse curviligne le long de l'arête — il suffit de montrer que  $c_K$  et  $c_{K'}$  sont égaux en deux points de  $a$ . En assurant l'égalité des polynômes aux extrémités  $s_1$  et  $s_2$  de  $a$ , on assure alors la continuité de  $c_K$  et  $c_{K'}$  sur  $a$ .

Il est donc naturel de considérer comme noeuds les extrémités des arêtes, c'est à dire les sommets des éléments. A chaque sommet  $\vec{s}_i$  du maillage est donc associé une fonction d'interpolation  $N_i$  valant 1 au sommet  $\vec{s}_i$  et 0 aux autres sommets. En fait, la fonction  $N_i$  est nulle sur tous les éléments ne contenant pas  $\vec{s}_i$ .

Une fonction  $c_h$  de  $W_1$  s'écrit donc

$$c_h(x, y) = \sum_{i=1}^{n_{stot}} c_i N_i(x, y)$$

où  $n_{stot}$  désigne le nombre de sommets du maillage;  $c_i$  la valeur de la fonction au sommet  $\vec{s}_i$ ;  $N_i$  la fonction d'interpolation associée au sommet  $\vec{s}_i$ .

La restriction de  $c_h$  à un élément  $K$  du maillage, noté  $c_h^K$  s'écrit simplement

$$c_h^K(x, y) = \sum_{i=1}^{n_K} c_i N_i(x, y)$$

où  $n_K$  désigne le nombre de sommets de l'élément  $K$ .

Compte tenu de la définition de  $N_i$ , dès qu'un sommet n'appartient pas à une arête, la fonction  $N_i$  est identiquement nulle sur cette arête puisqu'elle s'annule aux deux extrémités de l'arête. La restriction de  $c_h$  à une arête ne dépend donc que des valeurs prises par  $c_h$  aux extrémités  $s_1$  et  $s_2$  de l'arête.

Comme la valeur prise par le polynôme en un sommet du maillage est indépendante de l'élément auquel appartient le sommet, les polynômes  $c_K$  et  $c_{K'}$  sont égaux en  $s_1$  et  $s_2$ . Par suite,  $c_h$  est continue sur chaque arête.

La dimension de l'espace  $W_1 \subset H^1(\Omega)$  est donc égale au nombre de sommets du maillage. Chaque fonction d'interpolation  $N_i$  associée à un sommet  $\vec{s}_i$  est caractérisée par  $N_i(\vec{s}_j) = \delta_{ij}$ .

Le nombre de sommets d'un élément variant selon la forme de l'élément, les fonctions d'interpolation vont dépendre de l'élément considéré. Ainsi, si le maillage est constitué de triangles, on cherchera  $N_i$  sous la forme

$$N_i(x, y) = \alpha_0 + \alpha_1 x + \alpha_2 y$$

puisque un triangle a trois sommets.

Dans le cas d'un quadrangle, on a

$$N_i(x, y) = \alpha_0 + \alpha_1 x + \alpha_2 y + \alpha_3 xy$$



La détermination des paramètres  $\alpha_i$  est simple : il suffit d'exprimer  $N_i$  en chacun des sommets de l'élément considéré. On obtient alors pour chaque fonction test autant d'équations que de coefficients  $\alpha_i$  à déterminer.

**Exemple :** Soit un triangle de sommet  $\vec{s}_i = (x_i, y_i), i = 1, 3$ .

$$N_1(x_1, y_1) = \alpha_0 + \alpha_1 x_1 + \alpha_2 y_1 = 1$$

$$N_1(x_2, y_2) = \alpha_0 + \alpha_1 x_2 + \alpha_2 y_2 = 0$$

$$N_1(x_3, y_3) = \alpha_0 + \alpha_1 x_3 + \alpha_2 y_3 = 0$$

D'où en résolvant ce système linéaire en  $\alpha_i$ , on obtient :

$$\alpha_0 = (x_2 y_3 - x_3 y_2) / \det$$

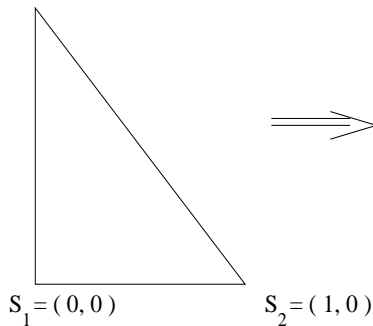
$$\alpha_1 = (y_2 - y_3) / \det$$

$$\alpha_2 = (x_3 - x_2) / \det$$

avec  $\det = (x_3 - x_1)(y_3 - y_2) + (y_3 - y_1)(x_2 - x_1)$

Dans le cas du triangle de référence on obtient donc

$$S_3 = (0, 1)$$



$$\alpha_0 = 1$$

$$\alpha_1 = -1$$

$$\alpha_2 = -1$$

et par suite

$$N_1(x, y) = 1 - x - y$$

**Exercice :**

1. Calculer  $N_2$  et  $N_3$  pour le triangle de référence.
2. Calculer  $N_1$  à  $N_4$  pour le carré centré en  $(0, 0)$  et de côté 2.

Les éléments finis de Lagrange de plus bas degré étant définis pour  $L^2(\Omega)$  et  $H^1(\Omega)$  — nous verrons  $H_{div}$  dans le prochain chapitre —, il reste à appliquer *la méthode des résidus pondérés* afin de calculer les inconnues  $c_i$ .

### 4.3 Résolution d'un problème modèle par éléments finis

Afin d'illustrer la méthode des éléments finis, considérons le problème classique  $-\Delta c = 0$  où  $\Delta$  désigne l'opérateur Laplacien. La démarche est la suivante : Après avoir projeté le résidu sur les fonctions tests choisies a priori — ce qui revient à faire un produit scalaire —, on remplace le produit scalaire par sa définition sous forme intégrale. On effectue au besoin des intégrations par parties afin de diminuer la régularité des fonctions approchées. On introduit alors la

triangulation du domaine de calcul dans les intégrales et on remplace la fonction cherchée par son expression discrète. Les propriétés des fonctions tests font que les évaluations ne font intervenir que les fonctions tests locales à l'élément ce qui permet d'aboutir à une sommation de matrices locales à chaque élément. Sous forme mathématique, on obtient

$$\begin{aligned} \forall i &< -\Delta c_h, N_i > = 0. \\ \int_{\Omega} -\Delta c_h \cdot N_i d\Omega &= 0. \\ \int_{\Omega} \nabla c_h \cdot \nabla N_i - \int_{\Gamma} \nabla c_h \cdot \vec{n} \cdot N_i d\Gamma &= 0. \\ \sum_K \int_K \nabla c_h \cdot \nabla N_i &= \int_{\Gamma} \nabla c_h \cdot \vec{n} \cdot N_i d\Gamma \\ \sum_K \sum_j \left( \int_K \nabla N_i \nabla N_j \right) \{c_j^K\} &= \int_{\Gamma} \nabla c_h \cdot \vec{n} \cdot N_i d\Gamma \end{aligned}$$

En posant

$$\begin{aligned} (R_K)_{ij} &= \int_K \nabla N_i \nabla N_j dK \text{ (élément de la matrice dite de rigidité } R_K), \\ \{c^K\} &\text{ (restriction à } K \text{ de l'inconnue),} \\ RHS_{\Gamma} &\text{ (terme de bord ou condition } \textit{aux limites naturelles}), \end{aligned}$$

on fait apparaître la sommation sur l'ensemble des éléments de la discrétisation du problème local discrétisé :

$$\boxed{\sum_K R_K \{c^K\} = RHS_{\Gamma}}$$

Ce qui fait *la force* de la méthode des éléments finis c'est que :

1. la méthode est constructive : on évalue indépendamment la contribution de chaque élément du maillage au système linéaire final (intéressant pour la parallélisation et les techniques de zonation/multi-domaine);
2. les fonctions tests n'ont pas à vérifier les conditions aux limites ( $\neq$  méthode de Ritz);
3. la souplesse du maillage permet des situations géométriques complexes;
4. les matrices sont creuses (beaucoup de termes nuls) et on peut facilement augmenter la précision (en augmentant le degré des polynômes d'interpolation).

Par contre, l'évaluation des matrices élémentaires est *pénible* puisque les données utilisées sont locales à chaque élément (manque de généralité) :

1. les fonctions d'interpolation,
2. les intégrations  $\int_K \dots$

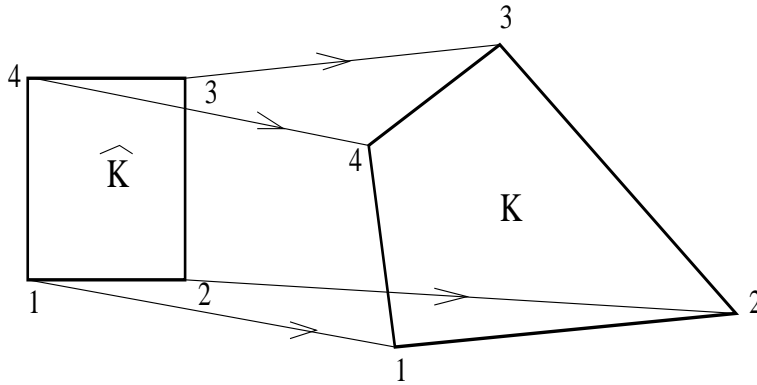
Fort heureusement, les éléments de référence permettent de contrecarrer ce hiatus. Le prochain paragraphe sera donc consacré aux éléments de référence.

## 4.4 Éléments de référence

L'élément de référence va permettre de définir des opérations génériques, les quantités définies sur l'élément de référence étant indépendantes de l'élément fini réel (fonctions d'interpolation, points de Gauss et poids de Gauss utilisés afin de calculer les intégrales, ...).

Soient  $K$  l'élément réel et  $\widehat{K}$  l'élément de référence. Par convention, les quantités définies sur  $\widehat{K}$  seront surmontées d'un  $\widehat{\cdot}$ . Ainsi  $\widehat{s}_i$  désignera un des sommets de l'élément de référence. Cherchons la fonction  $F_K$  transformant  $K$  en  $\widehat{K}$  — nous verrons que nous n'avons pas besoin de  $F_K^{-1}$  —.  $F_K$  est définie de façon unique si :

- $\forall i \quad \vec{s}_i = F_K(\widehat{s}_i)$
- le sens de parcours du contour est identique.



On peut définir sur  $\widehat{K}$  un élément fini. Comme la transformation géométrique est dans  $H^1(\widehat{K})$ , on obtient en faisant intervenir *les fonctions de formes* caractérisant  $\widehat{K}$  :

$$x = \sum_{i=1}^{\widehat{N}_s} x_i \cdot \widehat{N}_i(\widehat{x}, \widehat{y})$$

$$y = \sum_{i=1}^{\widehat{N}_s} y_i \cdot \widehat{N}_i(\widehat{x}, \widehat{y})$$

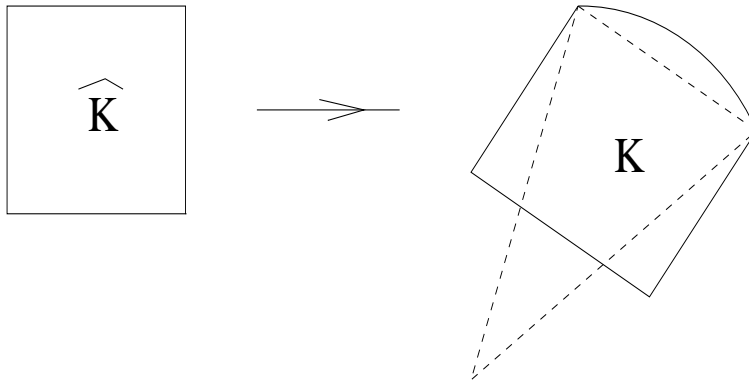
où  $\widehat{N}_i$  désigne la fonction de forme associée au  $i$ ème point caractérisant la transformation géométrique et  $\widehat{N}_s$  le nombre de points caractérisant la transformation géométrique.

$F_K$  est en fait un changement de variable qui permet de définir la correspondance entre la valeur de la fonction en un point de l'élément de référence et en l'image de ce point par  $F_K$  :

$$\widehat{c}_h(\widehat{x}, \widehat{y}) = c_h(\widehat{x}, \widehat{y}) = c_h(x, y) \text{ avec } F_K(\widehat{x}, \widehat{y}) = (x, y).$$

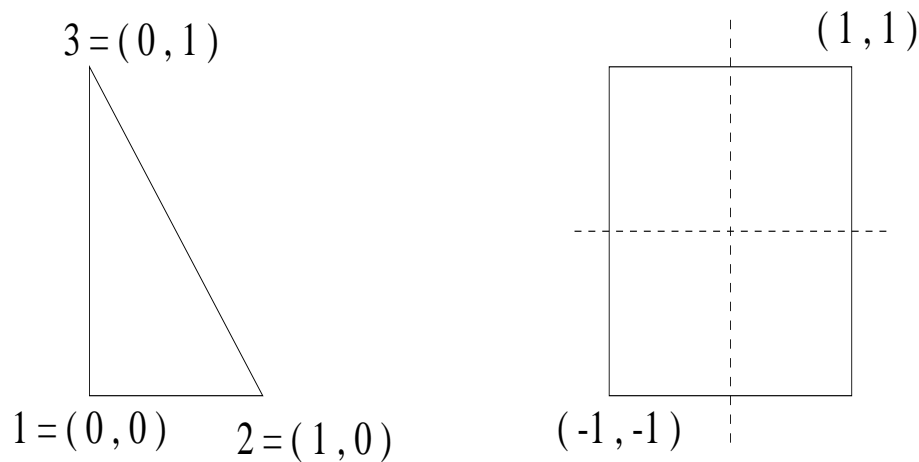
Si l'élément fini associé à  $F_K$  est identique à l'élément fini associé à  $c_h$ , les fonctions d'interpolation et les fonctions de forme sont identiques. Les interpolations géométriques et les interpolations de l'inconnue sont effectuées avec la même précision : ces éléments sont dits *iso-paramétriques*. Si le degré des fonctions de forme est inférieur (respectivement supérieur) au degré des polynômes d'interpolation, les éléments sont dits *sub-paramétriques* (respectivement *super-paramétriques*).

L'intérêt des éléments iso-paramétriques est clair pour les éléments de degré 2 qui permettent d'approcher sans erreur les frontières de domaines courbes à partir d'un élément de référence de côtés droits.



#### 4.4.1 Éléments de référence

Les éléments de référence que nous utilisons en 2D sont les suivants :



Les fonctions tests associées à cet élément triangulaire sont donc

$$N_1(x, y) = 1 - x - y$$

$$N_2(x, y) = x$$

$$N_3(x, y) = y$$

Pour l'élément quadrangulaire

$$N_{\alpha\beta}(x, y) = \frac{(1 + \alpha x)(1 + \beta y)}{4}$$

avec  $\alpha$  et  $\beta$  permutations de 1 et  $-1$ .

**Remarque :**  $\sum_i N_i \equiv 1$ . On ne commet donc pas d'erreur d'interpolation sur les fonction constantes.

#### 4.4.2 Intégrations de polynômes

L'évaluation d'une intégrale comporte des étapes : le changement de variable ou passage des coordonnées réelles aux coordonnées de référence et le calcul effectif de l'intégrale par une formule de quadrature.

$$I_K = \int_K f(x, y) dK = \int_{\widehat{K}} \widehat{f}(\widehat{x}, \widehat{y}) \det J d\widehat{K}$$

où  $J$  désigne la matrice Jacobienne de la transformation géométrique  $F_K$ .

Supposons connus le degré du polynôme  $\widehat{f}$  ainsi que celui de  $\det J$ . On est alors à même d'évaluer le nombre de points de Gauss  $N_{pg}$ , la localisation des points de Gauss  $(\widehat{x}_i^{pg}, \widehat{y}_i^{pg})$  et les poids associés  $\omega_i$  permettant d'évaluer *exactement*  $I_K$  :

$$I_K = \sum_{i=1}^{N_{pg}} \omega_i \widehat{f}_i \det J_i$$

où les quantités indicées par  $i$  désignent la valeur de la fonction au  $i$ ème point de Gauss.

#### 4.4.3 Matrice Jacobienne

La matrice jacobienne de la transformation géométrique de l'élément de référence vers l'élément réel est définie par

$$J(\widehat{x}, \widehat{y}) = \begin{pmatrix} \frac{\partial x}{\partial \widehat{x}} & \frac{\partial x}{\partial \widehat{y}} \\ \frac{\partial y}{\partial \widehat{x}} & \frac{\partial y}{\partial \widehat{y}} \end{pmatrix}$$

$$\text{et } \det J = \frac{\partial x}{\partial \widehat{x}} \frac{\partial y}{\partial \widehat{y}} - \frac{\partial x}{\partial \widehat{y}} \frac{\partial y}{\partial \widehat{x}}$$

Les termes de la matrice jacobienne étant calculés en différenciant l'expression des coordonnées réelles par rapport aux coordonnées de référence :

$$x = \sum_{i=1}^{\widehat{N}_s} x_i \cdot \widehat{N}_i(\widehat{x}, \widehat{y})$$

$$y = \sum_{i=1}^{\widehat{N}_s} y_i \cdot \widehat{N}_i(\widehat{x}, \widehat{y})$$

#### 4.4.4 Transformation des gradients

Dans le cas où la fonction à intégrer comporte des gradients, il ne faut pas oublier de les exprimer dans les coordonnées de référence.

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial \widehat{x}}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \widehat{x}} + \frac{\partial \widehat{y}}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \widehat{y}}$$

$$\frac{\partial}{\partial y} = \frac{\partial \widehat{x}}{\partial y} \frac{\partial}{\partial \widehat{x}} + \frac{\partial \widehat{y}}{\partial y} \frac{\partial}{\partial \widehat{y}}$$

Sous forme matricielle, on obtient donc :

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial \widehat{x}}{\partial x} & \frac{\partial \widehat{y}}{\partial x} \\ \frac{\partial \widehat{x}}{\partial y} & \frac{\partial \widehat{y}}{\partial y} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial \widehat{x}} \\ \frac{\partial}{\partial \widehat{y}} \end{pmatrix} = {}^t j \widehat{\nabla}$$

De même :

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial \widehat{x}}{\partial x} \\ \frac{\partial \widehat{x}}{\partial y} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial x}{\partial \widehat{x}} & \frac{\partial y}{\partial \widehat{x}} \\ \frac{\partial x}{\partial \widehat{y}} & \frac{\partial y}{\partial \widehat{y}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \end{pmatrix} = {}^t J \nabla$$

Ces deux expressions vont nous permettre de calculer effectivement la matrice Jacobienne. En remarquant que  $j = J^{-1}$ , comme

$$J^{-1} = \frac{1}{\det J} \begin{pmatrix} \frac{\partial y}{\partial \widehat{y}} & -\frac{\partial y}{\partial \widehat{x}} \\ -\frac{\partial x}{\partial \widehat{y}} & \frac{\partial x}{\partial \widehat{x}} \end{pmatrix} = \frac{J}{\det J}$$

on obtient par identification l'ensemble des coefficients de la matrice jacobienne :

$$\frac{\partial \widehat{x}}{\partial x} = \frac{1}{\det J} \frac{\partial y}{\partial \widehat{y}}, \dots,$$

On possède donc tous les ingrédients permettant d'évaluer les différents termes de la matrice de rigidité. En effet,

$$\begin{aligned} \int_K {}^t \nabla N_i \cdot \nabla N_j dK &= \int_{\widehat{K}} ({}^t j \widehat{\nabla} N_i) \cdot ({}^t j \widehat{\nabla} N_j) \det J d\widehat{K} \\ &= \int_{\widehat{K}} {}^t \widehat{\nabla} N_i \cdot j \widehat{\nabla} N_j \det J d\widehat{K} = \int_{\widehat{K}} {}^t \widehat{\nabla} N_i \frac{J \cdot J}{\det J} \widehat{\nabla} N_j d\widehat{K} \end{aligned}$$

**Remarque :** Quelques remarques s'imposent quand aux termes de la matrice de rigidité après passage sur l'élément de référence. Comme

$$f = {}^t \widehat{\nabla} N_i \frac{J \cdot J}{\det J} \widehat{\nabla} N_j$$

dès que  $\det J$  n'est pas une constante,  $f$  est une fraction rationnelle. On commet alors une *erreur d'intégration* si on utilise les points de Gauss. Il faudrait intégrer analytiquement  $f$  pour supprimer cette erreur. Nous reviendrons sur ce point au cours du Tp2.  $\det J$  est une constante si la transformation géométrique est affine — si le quadrangle est un parallélogramme, si l'élément est un triangle ou un prisme —, un polynôme sinon — dès qu'une face quadrangulaire n'est pas un parallélogramme —.

### 4.4.5 Discrétisation temporelle

Le plus souvent, la discrétisation temporelle est réalisée par différences finies :

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{c^{n+1} - c^n}{\Delta t}$$

La contribution de ce terme à la formulation variationnelle comporte donc deux parties :

Une partie explicite,  $\left( \int_K N_j \phi_i \right) \{c_K^n\}$

Une partie implicite,  $\left( \int_K N_j \phi_i \right) \{c_K^{n+1}\}$

Par conséquent, pour qu'en utilisant une méthode explicite le schéma EF soit explicite, il faut pouvoir diagonaliser la matrice masse définie par

$$M_{ij} = \left( \int_K N_j \phi_i \right)_{1 \leq i, j \leq N_K}$$

Dans le cas où  $\phi_i = N_i$  (méthode de Galerkin), la technique de lumping (ou condensation) consiste à ramener les termes extra-diagonaux sur la diagonale :

$$D_{ii} = \sum_j \int_K N_j N_i = \int_K \left( \sum_j N_j \right) N_i = \int_K N_i dK$$

Dans le cas où  $\phi_i \neq N_i$ , il est délicat d'appliquer brutalement le lumping.

## 4.5 Décentrement en éléments finis

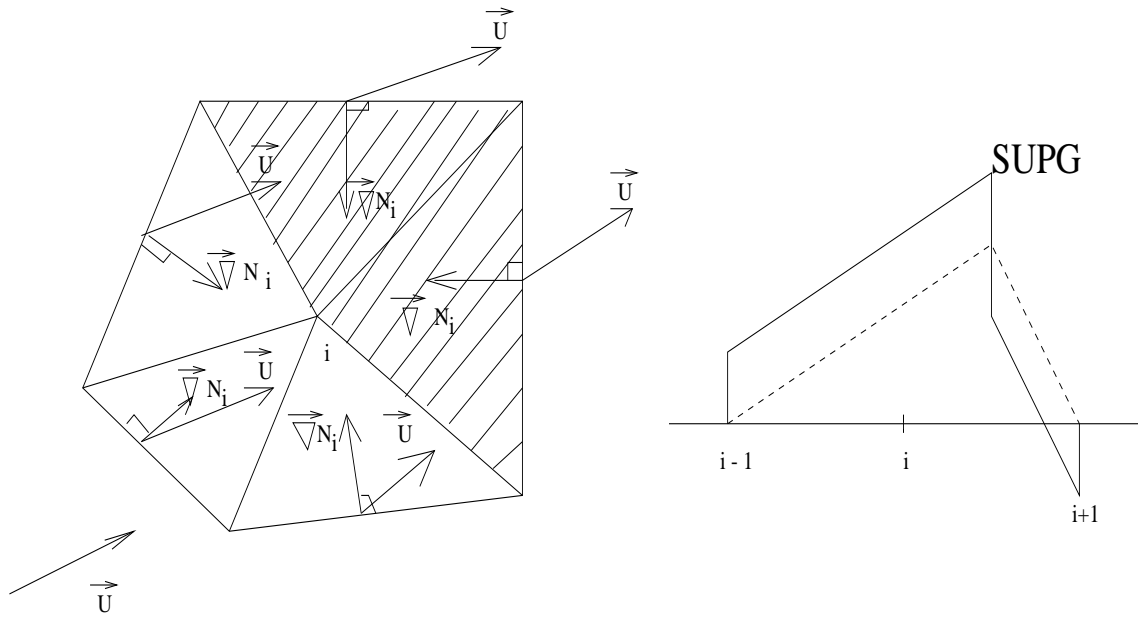
### 4.5.1 Schémas SUPG, SUPGDC et viscosité artificielle de Johnson

Le décentrement des termes convectifs est obtenu en éléments finis par la méthode SUPG (Streamline Upwind Petrov Galerkin). Pour cela on considère :

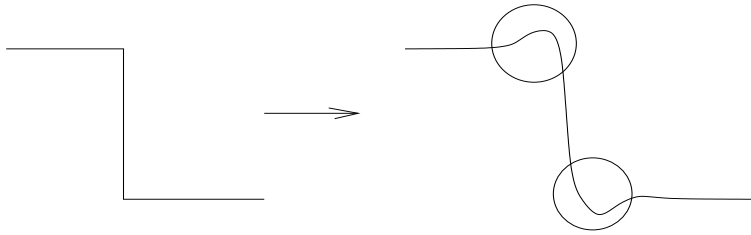
$$\phi_i = N_i + \tau \vec{u} \cdot \nabla N_i$$

où  $N_i$  est la fonction de base choisie ;  $\tau > 0$  un paramètre de stabilisation et  $\vec{u}$  le champ de vitesse associé au terme convectif.

Pour un élément en amont du noeud  $i$ ,  $\vec{u} \cdot \nabla N_i$  est positif. La fonction de pondération associée sur cet élément au noeud  $i$  devient donc plus importante.



Malgré le décentrement, des oscillations subsistent. Cela est lié au fait que le schéma est linéaire et du second ordre en espace. D'après le théorème de Godunov, on sait qu'un schéma linéaire d'ordre 2 ne préserve pas la monotonie, d'où l'apparition possible d'oscillations.



C'est pour cela qu'on ajoute au schéma SUPG un second terme correctif non linéaire (ce qui conduit à l'option SUPGDC [pour Discontinuity Capturing]). Comme les oscillations observées sont orthogonales au gradient du champ transporté, Hughes, Mallet et Mizukami proposent d'introduire de la diffusion dans cette direction :

$$\phi_i = N_i + \tau_1 \vec{u} \cdot \nabla N_i + \tau_2 \vec{u}_{//} \cdot \nabla N_i$$

où  $\tau_1$  est l'analogie de  $\tau$  en SUPG ;  $\tau_2$  est un paramètre de stabilisation ;  $\vec{u}_{//}$  la projection du vecteur vitesse sur le gradient du champ scalaire

$$\vec{u}_{//} = \left( \frac{\vec{u} \cdot \nabla c}{|\nabla c|^2} \right) \nabla c$$



Une autre façon de procéder (Johnson) est d'ajouter au schéma SUPG un terme diffusif via un laplacien et une viscosité numérique non linéaire  $D_\nu$  :

$$\int \vec{u} \cdot \nabla c (N_i + \tau \vec{u} \cdot \nabla N_i) + \int D_\nu \nabla c \nabla N_i$$

#### 4.5.2 Évaluations des différents paramètres

##### Premier paramètre : $\tau$

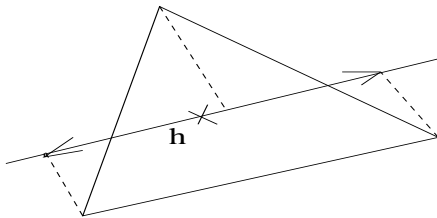
Dans sa forme générale,  $\tau$  fait intervenir une longueur caractéristique de l'élément  $h$ , la vitesse  $\vec{u}$  et une fonction du Peclet de maille :

$$\tau = \frac{h}{2|\vec{u}|} \mathcal{I}$$

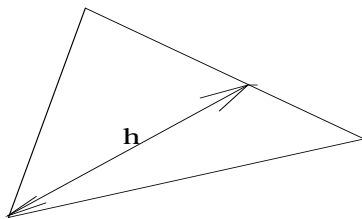
Si dans le cas monodimensionnel ces différents paramètres sont bien identifiés, en multiD c'est beaucoup moins claire. C'est pourquoi on trouve différents choix dans la littérature scientifique.

*Première difficulté : évaluation de la longueur caractéristique  $h$ .* En se restreignant au cas bidimensionnel, dans le cas de l'élément triangulaire les choix suivants sont possibles :

- ▷ diamètre du cercle de même aire que l'élément ;
- ▷ longueur de l'arête la plus longue



( De Mulder )



( Mizukami )

$$\triangleright h = 2 \left( \sum_{i=1}^3 \left| \frac{\vec{u}}{|\vec{u}|} \cdot \nabla N_i \right| \right)^{-1} \quad (\text{Tezduyar})$$

*Deuxième difficulté : évaluation de la fonction dépendant du nombre de Peclet  $\mathcal{I}$ .*  
Hughes et Brooks ont montré qu'un design optimal de  $\mathcal{I}$  était

$$\mathcal{I} = \coth\left(\frac{h|\vec{u}|}{2D}\right) - \left(\frac{2D}{h|\vec{u}|}\right)$$

Si on étudie le comportement asymptotique en fonction du Peclet de  $\mathcal{I}$  on observe que

1.  $\mathcal{I}$  tend vers 1 lorsque le Peclet tend vers l'infini ;
2.  $\mathcal{I}$  a une pente à l'origine en  $\frac{Pe}{6}$  ;
3.  $\mathcal{I}$  est nul si le Peclet est nul.

On va chercher à retrouver ce comportement dans les propositions suivantes :

- ▷  $\mathcal{I} = \max\left(0, 1 - \frac{2D}{h|\vec{u}|}\right)$  (critical approximation) ;
- ▷  $\mathcal{I} = \min\left(1, \frac{h|\vec{u}|}{2D} \frac{1}{3}\right)$  (doubly asymptotic) ;
- ▷  $\mathcal{I} = \max\left(0, 1 - \frac{D}{h|\vec{u}|}\right)$  (Johnson) ;
- ▷  $\mathcal{I} = 1 - \frac{1}{\frac{h|\vec{u}|}{2D} + 1}$  (Mizukami).

**Remarque :** Lorsque la viscosité physique  $D$  est nulle, tous les choix conduisent à  $\mathcal{I} = 1$  et donc  $\tau = \tau_1 = h/(2u)$ .

**Deuxième paramètre :**  $\tau_2$ .

- ▷  $\tau_2 = \frac{h}{2|\vec{u}|} \mathcal{I}$
- ▷  $\tau_2 = \max\left(0, \frac{h}{2|\vec{u}|} \mathcal{I} - \frac{h}{2|\vec{u}|} \mathcal{I}\right)$

**Troisième paramètre :** viscosité non-linéaire de Johnson.

$$D_\nu = \max\left(D_\phi, \frac{1}{2}h \frac{|\vec{u} \cdot \nabla c_h - \text{div}(D_\nu \nabla c)|}{|\nabla c| + h}\right)$$

## 4.6 Formation de choc

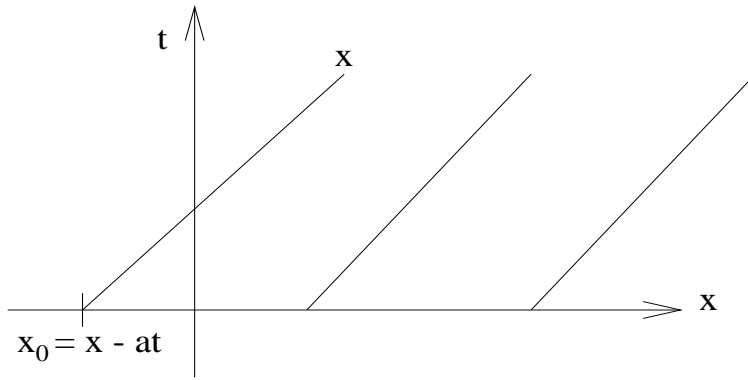
Avant d'aborder dans un prochain cours la résolution des équations d'Euler, nous aimerions évoquer la formation de choc — ou discontinuité — pouvant survenir dans certains écoulements. Numériquement, cela correspond à la résolution de problèmes hyperboliques.

L'équation de transport d'un champ scalaire passif par un écoulement uniforme de vitesse  $a$  s'écrit

$$c_t + ac_x = 0.$$

La solution de cette équation est tout simplement

$$c(x, t) = c(x - at, 0)$$



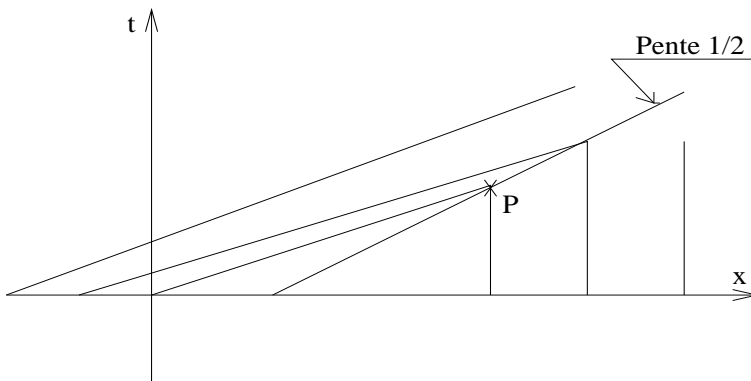
Considérons maintenant l'équation de convection non linéaire suivante — dite équation de Burger non visqueuse — :

$$c_t + cc_x = 0.$$

sous les conditions initiales suivantes

$$c(x, 0) = \begin{cases} 1 & x < 0 \\ 1 - x & 0 \leq x < 1 \\ 0 & x \geq 1 \end{cases}$$

Bien que les conditions initiales soient continues, on observe une discontinuité de la solution. Il y a formation d'un choc car les caractéristiques issues des conditions initiales se croisent. En un point où les caractéristiques se croisent, on a donc deux valeurs possibles de la solution !



On appelle *problème de Riemann* la résolution d'un problème hyperbolique à données initiales discontinues :

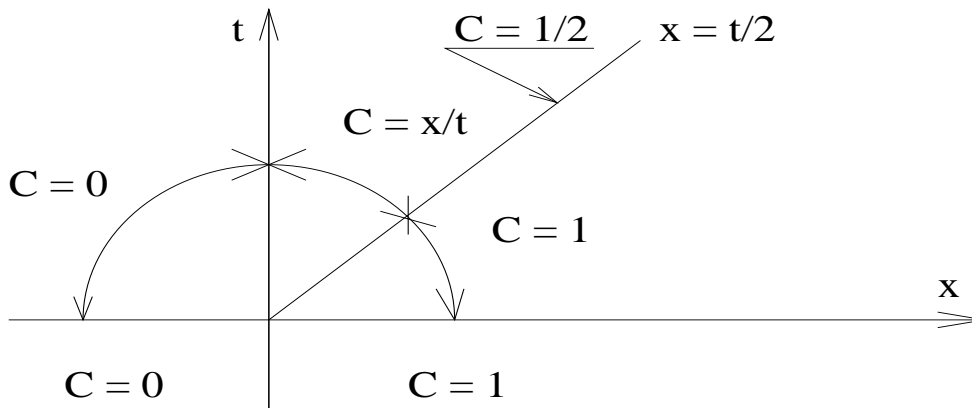
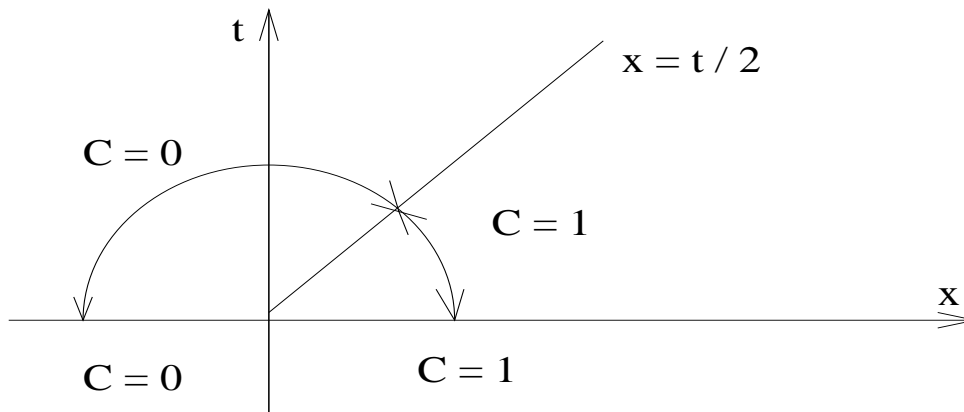
$$c_t + f(c)_x = 0 \text{ avec } c(x, 0) = \begin{cases} c_g \text{ si } x < 0 \\ c_d \text{ si } x > 0 \end{cases}$$

La *condition de Rankine-Hugoniot* exprime la condition de saut au niveau de choc si il y a formation de choc et donne la vitesse de propagation du choc :

$$\frac{dx}{dt} = \frac{f(c_g) - f(c_d)}{c_g - c_d}$$

Ce n'est pas parce que les états gauche et droit du problème de Riemann sont différents qu'il y a formation d'un choc. La formation d'une détente permet de relier continuellement les états gauche et droit.

Pour  $c_g = 0$  et  $c_d = 1$  la résolution du problème de Riemann associé à l'équation de Burger permet d'exhiber deux (!) solutions qui vérifient la condition de Rankine Hugoniot.



L'exemple présenté montre qu'il n'y a pas unicité de la solution faible du problème de Riemann. Pour trier entre toutes les solutions mathématiques, il est nécessaire d'introduire la notion d'entropie. Plus simplement, on considère que la solution physiquement admissible est celle obtenue en résolvant l'équation de diffusion-convection et en faisant tendre la viscosité vers 0.

# Bibliographie

Nous avons regroupé dans cette partie différentes références bibliographiques qui compléteront ces notes de cours.

Pour le chapitre 1, la documentation associée à Castem2000 peut être consultée (<http://www.castem.org:8001>) ainsi que la référence suivante pour la réalisation d'un maillage :

1 JOLY P., *Mise en oeuvre de la méthode des éléments finis*, SMAI, coll. Mathématiques & applications, Ellipses, 1990.

Pour les chapitres 2 et 3, les ouvrages généraux suivants constituent une bonne base pour appréhender la simulation numérique en mécanique des fluides :

2 HIRSCH C., *Numerical computation of internal and external flows, volume 1, Fundamental of numerical discretization*, Wiley, 1988.

3 FLETCHER C.A.J., *Computational techniques for fluid dynamics, volume 1, Fundamental and general techniques*, Springer, 1991.

4 ROACHE P.J., *Computational fluid dynamics*, Hermosa, 1976.

Pour le chapitre 4, la littérature sur les éléments finis est très importante. Les références suivantes privilégient une approche plus pratique que théorique, la dernière d'entre elles étant plus spécialement consacrée au décentrement :

5 REDDY J.N., *An introduction to the finite element method*, McGraw-Hill, 1984.

6 MARCHOUK G. et AGOCHKOV V., *Introduction aux méthodes des éléments finis*, Mir, 1985.

7 DHATT G. et TOUZOT G., *Une présentation de la méthode des éléments finis*, Presses de l'Université de Laval, 1981.

8 HUGHES T.J.R., *Recent progress in the development and understanding of SUPG methods with special reference to the compressible Euler and NS equations*, Int. J. for Numerical methods in fluids, vol 7, 1261-1275 (1987).