

Introduction à la méthode des éléments finis en mécanique des fluides incompressibles

S. Gounand¹

26 septembre 2012

¹Commissariat à l'Énergie Atomique et aux Énergies Alternatives Centre de Saclay, DEN, DM2S, STMF, LMSF, F-91191 Gif-sur-Yvette, France <mailto:stephane.gounand@cea.fr>

Table des matières

Introduction	7
1 Rappels de mécanique des fluides	11
1.1 Équations de conservation	11
1.1.1 Conservation de la masse	11
1.1.2 Conservation de la quantité de mouvement	12
1.1.3 Conservation de l'énergie totale	12
1.1.4 Forme non conservative des équations de bilan	13
1.2 Lois de comportement	14
1.2.1 Loi de comportement pour la masse volumique	14
1.2.2 Loi de comportement pour le tenseur des contraintes	14
1.2.3 Loi de comportement pour le flux de chaleur	14
1.2.4 Loi de comportement pour l'énergie interne massique	15
1.3 Simplification des équations	15
2 Construction naturelle d'une méthode des éléments finis	17
2.1 Problème de Dirichlet	17
2.1.1 Le problème de Dirichlet continu	17
2.1.2 Le problème de Dirichlet discret	22
2.2 Exemples de solutions discrètes	24
2.2.1 Solutions régulières	24
2.2.2 Solutions singulières	25
2.3 Problème d'élasticité linéaire	29
2.4 Résumé	29
3 Méthode des éléments finis	31
3.1 Méthode des résidus pondérés	31
3.2 Equivalence convergence-stabilité	33
3.3 Fonctions de base	35
3.4 Éléments de référence	38
3.5 Formules de quadrature	39
3.6 Résumé	40
4 Convection-diffusion et décentrement	41
4.1 Problème modèle	41
4.2 Discrétisation spatiale centrée	42
4.2.1 Equivalence des discrétisations DF centrées et EF	42

4.2.2	Résultats numériques	44
4.3	Discrétisation spatiale décentrée	46
4.4	Extension multidimensionnelle	47
4.4.1	Problème modèle convectif 2D	47
4.4.2	Méthode de diffusion artificielle	48
4.4.3	Méthode de décentrement amont (SUPG)	50
4.4.4	Préservation asymptotique de l'ordre de la méthode	51
4.5	Oscillations résiduelles	51
4.5.1	Phénomène de Gibbs	51
4.5.2	Approximation d'un choc	53
4.5.3	Théorème de Godunov	56
4.6	Capture de choc : méthode SUPGDC	57
4.7	Résumé	58
5	Discrétisation en temps	59
5.1	Discrétisation en temps	59
5.1.1	Choix du type de discrétisation en temps	59
5.1.2	Discrétisation en temps implicite	60
5.2	Influence de la condition initiale	61
5.3	Résumé	63
6	Solution des EDP non linéaires	65
6.1	Méthode de Newton : zéro d'une fonction	65
6.2	Méthode de Newton : zéro d'une EDP non linéaire	66
6.2.1	Problème modèle	67
6.2.2	Dérivée au sens des opérateurs	67
6.2.3	Itération de Newton	68
6.2.4	Application au problème modèle	69
6.3	Méthode de point fixe	69
6.3.1	Forme incrémentale	70
6.3.2	Forme non incrémentale	70
6.4	Exemple numérique	70
6.5	Résumé	73
7	Formation de choc	75
7.1	Équation de Burgers	75
7.2	Formation d'un choc	76
7.3	Onde de raréfaction	78
7.4	Résultats numériques	79
7.5	Résumé	80
8	Problème de Stokes	83
8.1	Le problème continu	83
8.1.1	Fonctionnelle de Stokes	83
8.1.2	Condition de point-selle	84
8.1.3	Équation aux dérivées partielles équivalente	84
8.2	Le problème discret	85

8.2.1	Espaces de fonctions discrets	85
8.2.2	Condition de point-selle discrète	85
8.2.3	Stabilité du problème discret	86
8.2.4	Éléments finis compatibles	86
8.2.5	Exemples numériques	87
8.3	Résumé	91
9	Conditions aux limites et conservation	93
9.1	Problème de Neumann avec termes sources	94
9.1.1	Le problème de Neumann continu	94
9.1.2	Le problème de Neumann discret	94
9.1.3	Indétermination de l'inconnue et condition de compatibilité	95
9.2	Problème de diffusion général	97
9.2.1	Variations sur les conditions aux limites	97
9.2.2	Un exemple simple traité en détail	97
9.2.3	Multiplicateurs de Lagrange pour les conditions de Dirichlet	102
9.2.4	Conditions aux limites mixtes	106
9.2.5	Cas de la diffusion instationnaire	107
9.3	Problème de convection-diffusion	108
9.3.1	Formulations du problème	108
9.3.2	Indétermination de T et condition de compatibilité	110
9.3.3	Influence du décentrement	111
9.3.4	Résumé	112
9.4	Problème de Stokes	112
9.4.1	Conditions aux limites essentielles et naturelles	112
9.4.2	Conditions aux limites par direction	113
9.4.3	Conditions aux limites mixtes	114
9.4.4	Conditions de compatibilité	114
9.4.5	Formulations différentes du problème de Stokes	115
9.5	Problème de Navier-Stokes	116
9.6	Résumé	117
10	Résolution pratique d'un problème transitoire non-linéaire	119
10.1	Description en langage GIBIANE d'un problème	119
10.1.1	Syntaxe des opérateurs de discrétisation spatiale	119
10.1.2	Création des tables d'entrée	120
10.2	Algorithme transitoire non linéaire	121
10.2.1	Problème linéaire stationnaire	121
10.2.2	Problème linéaire transitoire	121
10.2.3	Problème non linéaire stationnaire	123
10.2.4	Problème non linéaire transitoire	124
10.2.5	Gestion des paramètres importants	126
10.3	Résumé	127
	Bibliographie	128

Introduction

Il pressait sa tête dans ses deux mains, comme pour en faire jaillir la vérité. Préciser une telle situation n'était pas facile ; simplifier le complexe, rien de plus malaisé ; il avait devant lui de redoutables chiffres dont il fallait faire le total ; faire l'addition de la destinée, quel vertige ! il l'essayait ; il tâchait de se rendre compte ; il s'efforçait de rassembler ses idées, de discipliner les résistances qu'il sentait en lui, et de récapituler les faits.

Quatrevingt-treize
Victor Hugo

Propos

Ce cours s'adresse à des étudiants en dernière année d'école d'ingénieur. Il suppose que l'étudiant a déjà suivi un cours de Mécanique des Fluides et a déjà été familiarisé à la méthode des Éléments finis. Toutefois, des rappels sont effectués sur ces deux sujets dans les chapitres 1 et 3. L'objectif de ce cours est de mettre en exergue les spécificités liées à l'utilisation de la méthode des éléments finis pour le calcul d'écoulements newtoniens incompressibles décrits par les équations de Navier-Stokes.

L'approche adoptée essaie de faire comprendre "avec les mains" et par l'exemple quelles sont les difficultés génériques et les points importants typiquement rencontrés lors de l'utilisation d'un code de calcul de mécanique des fluides. C'est pourquoi on ne trouvera pas de démonstration, mais plutôt des exemples illustratifs pratiques. Pour une approche plus complète et rigoureuse, on se référera, par exemple, au livre de A. Ern et J.-L. Guermond [EG02].

On considérera chaque difficulté en partant d'un problème modèle, issu d'une simplification des équations de Navier-Stokes incompressible, afin d'en identifier les causes et les remèdes. En tête de chaque chapitre, on encadre les termes des équations de Navier-Stokes que l'on regarde plus spécifiquement.

Le programme utilisé pour les exemples de ce cours est le code de calcul par éléments finis Cast3M, mais tout autre programme similaire utilisant les mêmes méthodes (FreeFEM, Comsol. . .) pourrait convenir car les difficultés examinées sont génériques. Afin que l'étudiant puisse reproduire, voire expérimenter avec les exemples donnés, la partie significative du fichier de données Cast3M correspondant est reproduite. Les jeux de données complets sont disponibles dans les exemples du site Internet : <http://www-cast3m.cea.fr/>.

Plan

Dans le chapitre 1, on dérive le système d'équations que l'on va étudier (Navier-Stokes incompressible) à partir d'équations générales de conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie, en indiquant les lois de comportement et les simplifications utilisées.

Le chapitre 2 propose d'examiner deux problèmes d'équilibre pour lesquels on a un principe variationnel de minimisation : le problème de Dirichlet (Thermique) et un problème d'élasticité linéaire (Mécanique). On montrera que ces deux problèmes se prêtent, de façon naturelle, à une discrétisation par la méthode des éléments finis.

En mécanique des fluides incompressibles, deux difficultés surgissent par rapport à ce cadre :

- l'absence de principe variationnel sous-jacent pour certains termes (convectifs) ;
- la présence d'un principe variationnel, plus compliqué, qui n'est plus une minimisation mais une minimisation sous contrainte (problème de Stokes).

Du fait de ces deux difficultés principales, l'application de la méthode des éléments finis à la mécanique des fluides incompressibles est moins naturelle.

Au chapitre 3, on généralise la méthode des éléments finis à des classes d'équations aux dérivées partielles plus générales que celles dérivant d'un principe variationnel, à l'aide de la méthode des résidus pondérés. Les notions de convergence, de consistance et de stabilité sont abordées.

Au chapitre 4, on s'intéresse à la discrétisation des termes convectifs et on montre qu'il faut parfois utiliser des méthodes dites de décentrement pour obtenir des solutions discrètes non oscillantes. On tentera d'expliquer les différentes origines possibles de la présence d'oscillations : problème de stabilité du problème discret se traduisant éventuellement par l'apparition d'oscillations non bornées, problème d'approximation de fonctions variant rapidement (chocs) par des fonctions continues se traduisant généralement par l'apparition d'oscillations bornées (phénomène de Gibbs).

Le chapitre 5 s'intéresse à la discrétisation en temps des problèmes instationnaires. On considérera essentiellement des discrétisations par différences finies implicites. L'importance du choix de la condition initiale sera également discuté.

Au chapitre 6, on s'attache à décrire les différentes façons possible de résoudre des équations aux dérivées partielles non linéaires, telles que Navier-Stokes. Les méthodes abordées sont les méthodes de Newton et de point fixe.

Au chapitre 7, on montre comment les non linéarités présentes dans les équations peuvent être à l'origine de phénomènes intéressants dans le comportement des solutions, tels l'apparition de discontinuités (choc). Un résumé de mi-parcours est effectuée à la fin de ce chapitre.

Le chapitre 8 s'attaque à la deuxième difficulté évoquée plus haut : le problème de minimisation sous contraintes dans le cas du problème modèle de Stokes. De cette difficulté s'ensuit que le choix des espaces d'éléments finis pour la variable principale (la vitesse) et pour la variable chargée d'assurer la contrainte d'incompressibilité (la pression) n'est pas libre et doit être effectué soigneusement pour que le problème discret soit bien posé.

Le chapitre 9 est un peu technique mais important : il s'attache à décrire en détail les conditions aux limites associées à la méthode des éléments finis et ses propriétés de conservation. En effet, la méthode des éléments finis permet de faire apparaître, sans artifice, la notion de conditions aux limites essentielles et naturelles. Il s'agit là d'un atout

important par rapport à d'autres méthodes. De manière liée aux conditions aux limites, on peut dériver d'importantes propriétés de conservation de la méthode des éléments finis.

Enfin, le chapitre 10 est un chapitre applicatif, rassemblant les méthodes décrites dans les chapitres précédents : on décrit un algorithme simple de point fixe relaxé, utilisé après discrétisation spatiale par la méthode des éléments finis pour approcher la solution de problèmes non linéaires et instationnaires de mécanique des fluides incompressibles. Son implémentation pratique dans le code de calcul Cast3M est abordée : il s'agit de la procédure EXEC que vous utiliserez pour vos projets. Les différents paramètres de l'algorithme (pas de temps, coefficient de relaxation...) et la manière de les ajuster sont également décrits dans ce chapitre.

Remerciements

Je remercie Alberto Beccantini, Serge Pascal et Matteo Bucci pour leur relecture attentive du manuscrit et leurs utiles suggestions. Elles ont été prises en compte. Frédéric Dabbène et Henri Paillère, auteurs d'un cours donné à l'ENSTA [DP00], ont été une source d'inspiration, ainsi que Jean-Paul Magnaud. Qu'ils en soient remerciés. Un certain nombre de logiciels accessibles librement ont été utilisés pour l'élaboration de ce document. Parmi ceux-ci : L^AT_EX, Xfig, Emacs, Cast3M. Je remercie les auteurs de ces logiciels.

Chapitre 1

Rappels de mécanique des fluides

On rappelle dans ce chapitre les différentes expressions des équations de conservation que nous allons considérer. Ce chapitre est en partie repris du livre de Bird et al. [BAH87]. Toutefois, on utilise les notations et les conventions de signe plus usuelles en mécanique des milieux continus, reprises du livre de Gurtin [Gur81].

1.1 Équations de conservation

Le mouvement d'un fluide est décrit par les équations de conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie.

1.1.1 Conservation de la masse

Considérons tout d'abord la conservation de la masse sous *forme intégrale*. Pour cela, on choisit un volume arbitraire *fixe* Ω de frontière $\delta\Omega$ et \mathbf{n} , la normale sortante à la frontière. On a alors :

$$\underbrace{\frac{d}{dt} \int_{\Omega} \rho \, d\Omega}_{\text{Vitesse de variation de la masse à l'intérieur de } \Omega} = \underbrace{- \int_{\delta\Omega} \rho \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} \, d\delta\Omega}_{\text{Flux de masse entrant par la frontière } \delta\Omega} \quad (1.1)$$

où ρ est la masse volumique du fluide et \mathbf{u} sa vitesse. En faisant rentrer la dérivée en temps sous le signe intégral¹ dans le terme de gauche et en utilisant le théorème de la divergence sur le terme de droite, on obtient :

$$\int_{\Omega} \frac{\partial \rho}{\partial t} + (\operatorname{div} \rho \mathbf{u}) \, d\Omega = 0 \quad (1.2)$$

Finalement, en utilisant le théorème de localisation [Gur81], vu que Ω est un volume arbitraire, on en déduit :

$$\boxed{\frac{\partial \rho}{\partial t} = - \operatorname{div} \rho \mathbf{u}} \quad (1.3)$$

Ceci est l'équation de *conservation de la masse* encore appelée équation de *continuité*.

¹Ceci est licite car Ω est fixe.

1.1.2 Conservation de la quantité de mouvement

Sous forme intégrale :

$$\begin{aligned}
 \underbrace{\frac{d}{dt} \int_{\Omega} \rho \mathbf{u} \, d\Omega}_{\text{Vitesse de variation de la quantité de mouvement à l'intérieur de } \Omega} &= \underbrace{- \int_{\delta\Omega} \rho (\mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) \mathbf{n} \, d\delta\Omega}_{\text{Flux de quantité de mouvement entrant dû au transport par le fluide à la frontière } \delta\Omega} \\
 &+ \underbrace{\int_{\delta\Omega} \boldsymbol{\sigma} \mathbf{n} \, d\delta\Omega}_{\text{Flux de quantité de mouvement entrant dû aux interactions moléculaires à la frontière } \delta\Omega} + \underbrace{\int_{\Omega} \rho \mathbf{g} \, d\Omega}_{\text{Force volumique exercée par la gravité sur le fluide}}
 \end{aligned} \tag{1.4}$$

où $\boldsymbol{\sigma}$ est le tenseur des contraintes et $\rho \mathbf{g}$ la force par unité de volume due à la gravité. En utilisant les théorèmes de la divergence et de localisation comme précédemment, on obtient :

$$\boxed{\frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} = - \operatorname{div} \rho (\mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) + \operatorname{div} \boldsymbol{\sigma} + \rho \mathbf{g}} \tag{1.5}$$

Ceci est l'équation de *conservation de la quantité de mouvement* et traduit le *bilan des forces* par unité de volume.

En prenant le produit scalaire du bilan des forces par le vecteur vitesse, on obtient la bilan d'énergie cinétique :

$$\frac{\partial \frac{1}{2} \rho u^2}{\partial t} = - \operatorname{div} \frac{1}{2} \rho u^2 \mathbf{u} + \operatorname{div} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{u} + \rho \mathbf{g} \cdot \mathbf{u} \tag{1.6}$$

Cette équation n'apporte pas d'information supplémentaire par rapport à (1.5) mais est utile car c'est un bilan de *puissance* (travail des différentes forces par unité de temps) par unité de volume. Il permet également de dériver des formes alternatives des bilans d'énergie.

1.1.3 Conservation de l'énergie totale

Sous forme intégrale :

$$\begin{aligned}
 \underbrace{\frac{d}{dt} \int_{\Omega} \frac{1}{2} \rho u^2 + \rho e \, d\Omega}_{\text{Vitesse de variation de l'énergie totale à l'intérieur de } \Omega} &= \underbrace{- \int_{\delta\Omega} \left(\frac{1}{2} \rho u^2 + \rho e \right) \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} \, d\delta\Omega}_{\text{Flux d'énergie totale entrant dû au transport par le fluide à la frontière } \delta\Omega} - \underbrace{\int_{\delta\Omega} \mathbf{q} \cdot \mathbf{n} \, d\delta\Omega}_{\text{Flux d'énergie entrant dû aux interactions moléculaires à la frontière } \delta\Omega} \\
 &- \underbrace{\int_{\delta\Omega} \boldsymbol{\sigma} \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} \, d\delta\Omega}_{\text{Flux d'énergie dû au travail du tenseur des contraintes à la frontière } \delta\Omega} + \underbrace{\int_{\Omega} \rho \mathbf{g} \cdot \mathbf{u} \, d\Omega}_{\text{Puissance dû au travail exercé par la gravité sur le fluide}}
 \end{aligned} \tag{1.7}$$

où e est l'énergie interne par unité de masse du fluide et \mathbf{q} le flux de chaleur² dû à la conduction thermique. En utilisant les théorèmes de divergence et de localisation comme précédemment, on obtient :

$$\frac{\partial(\frac{1}{2}\rho u^2 + \rho e)}{\partial t} = -\operatorname{div}(\frac{1}{2}\rho u^2 + \rho e)\mathbf{u} - \operatorname{div}\mathbf{q} + \operatorname{div}\boldsymbol{\sigma}\mathbf{u} + \rho\mathbf{g}\cdot\mathbf{u} \quad (1.8)$$

qui est l'expression locale (par unité de volume et par unité de temps) de la conservation de l'énergie totale. En soustrayant le bilan d'énergie cinétique et en supposant le tenseur des contraintes symétriques, on peut obtenir le bilan d'énergie interne (qui n'est plus une équation de conservation) :

$$\frac{\partial\rho e}{\partial t} = -\operatorname{div}\rho e\mathbf{u} - \operatorname{div}\mathbf{q} + \boldsymbol{\sigma}:\boldsymbol{\nabla}\mathbf{u} \quad (1.9)$$

1.1.4 Forme non conservative des équations de bilan

Nous venons d'écrire les équations de bilan sous deux formes :

- une forme intégrale (1.1, 1.4 et 1.7) qui est assez générale ;
- une forme locale, dite conservative³ (1.3, 1.5 et 1.8) plus pratique à manipuler mais qui est moins générale : en effet, nous avons utilisé le théorème de localisation qui suppose la *continuité* de l'argument contenu à l'intérieur du signe intégral.

Une troisième forme, locale, dite non conservative, est également pratique à utiliser car concise. Elle s'obtient en définissant l'opérateur de *dérivée matérielle* :

$$\frac{D}{Dt}s = \frac{\partial s}{\partial t} + \mathbf{u}\cdot\nabla s \quad (1.10)$$

$$\frac{D}{Dt}\mathbf{v} = \frac{\partial\mathbf{v}}{\partial t} + (\boldsymbol{\nabla}\mathbf{v})\cdot\mathbf{u} \quad (1.11)$$

Physiquement, il s'agit de la dérivée en temps d'une quantité vue par un observateur se déplaçant avec le fluide (à la vitesse \mathbf{u}). En partant des équations sous forme conservative, en développant les dérivées de produits et en utilisant l'équation de conservation de la masse, on peut obtenir :

$$\frac{D}{Dt}\rho = -\rho\operatorname{div}\mathbf{u} \quad (1.12a)$$

$$\rho\frac{D}{Dt}\mathbf{u} = \operatorname{div}\boldsymbol{\sigma} + \rho\mathbf{g} \quad (1.12b)$$

$$\rho\frac{D}{Dt}\rho e = -\operatorname{div}\mathbf{q} + \boldsymbol{\sigma}:\boldsymbol{\nabla}\mathbf{u} \quad (1.12c)$$

Ces trois formes des équations de bilan sont équivalentes (i.e. nous n'avons pas fait d'approximations pour les obtenir) sous les hypothèses de continuité déjà évoquées. De nombreuses autres formes des équations de bilan sont possibles, voir par exemple le livre de Candel [Can01].

²On devrait plutôt nommer \mathbf{q} : la densité surfacique de flux de chaleur mais ce n'est pas très concis.

³On appelle forme conservative d'une équation, une équation écrite sous la forme : $\frac{\partial(\text{quantité conservée})}{\partial t} + \operatorname{div}(\text{flux de la quantité}) = 0$

1.2 Lois de comportement

Les équations de conservation que nous venons d'écrire sont valables pour tout fluide. Nous allons maintenant nous restreindre à la classe des fluides *Newtoniens incompressibles*.

1.2.1 Loi de comportement pour la masse volumique

En général, la masse volumique ρ d'un fluide dépend des variables d'état thermodynamiques, telles que la pression p et la température T . Pour les liquides, ρ peut souvent être considérée comme constante :

$$\boxed{\rho = \rho_0 = C^{\text{ste}}} \quad (1.13)$$

On parle de fluide *incompressible*. Ceci permet de simplifier l'équation locale de conservation de la masse en :

$$\boxed{\text{div } \mathbf{u} = 0} \quad (1.14)$$

La relation (1.14) est également utilisée pour simplifier certains termes des autres équations de bilan.

1.2.2 Loi de comportement pour le tenseur des contraintes

Pour un fluide Newtonien isotrope, on écrit le tenseur des contraintes sous la forme :

$$\boldsymbol{\sigma} = -p\mathbf{l} + \boldsymbol{\tau} \quad (1.15)$$

$$= -p\mathbf{l} + \mu \left(\nabla \mathbf{u} + \nabla^t \mathbf{u} \right) + \left(\kappa - \frac{2}{3}\mu \right) \text{div } \mathbf{u} \quad (1.16)$$

où p est la pression thermodynamique, \mathbf{l} le tenseur unité, $\boldsymbol{\tau}$ le tenseur des contraintes *visqueuses*, μ la viscosité dynamique et κ la viscosité dilatationnelle.

Généralement, p est déterminée à l'aide d'une équation d'état thermodynamique : $p = p(\rho, T)$. Dans le cas du fluide incompressible, cette équation d'état se réduit à $\rho = C^{\text{ste}}$ qui ne dépend plus de la pression p . La pression p est donc indéterminée et devient une inconnue du problème⁴.

La viscosité dilatationnelle κ est nulle dans le cas du gaz idéal, monoatomique et, pour les fluides incompressibles, le terme $\left(\kappa - \frac{2}{3}\mu \right) \text{div } \mathbf{u}$ contenant κ est nul.

Nous pouvons alors simplifier l'expression du tenseur des contraintes en :

$$\boldsymbol{\sigma} = -p\mathbf{l} + \mu \left(\nabla \mathbf{u} + \nabla^t \mathbf{u} \right) \quad (1.17)$$

$$= -p\mathbf{l} + \mu \dot{\boldsymbol{\gamma}} \quad (1.18)$$

où $\dot{\boldsymbol{\gamma}} = \nabla \mathbf{u} + \nabla^t \mathbf{u}$ est appelé tenseur des taux de déformation.

1.2.3 Loi de comportement pour le flux de chaleur

Pour les fluides purs ou les mélanges non diffusifs, on considère que le flux de chaleur \mathbf{q} suit la loi de Fourier :

$$\boxed{\mathbf{q} = -k \nabla T} \quad (1.19)$$

où k est la conductivité thermique.

⁴Nous verrons au chapitre 8 que, dans le cas du fluide incompressible, p peut s'interpréter comme le multiplicateur de Lagrange permettant d'assurer la conservation de la masse (1.14).

1.2.4 Loi de comportement pour l'énergie interne massique

Pour un fluide incompressible, on utilise plutôt l'enthalpie massique h que l'énergie interne massique e :

$$h = e + \frac{p}{\rho} \quad (1.20)$$

En effet, on choisit comme variables d'état (p, T) , plutôt que (ρ, T) , vu que la masse volumique est considérée comme constante. On exprime alors h en fonction de ces variables d'état⁵ :

$$dh = \left(\frac{\partial h}{\partial T} \right)_p dT + \left(\frac{\partial h}{\partial p} \right)_T dp \quad (1.21)$$

$$= c_p dT + \left[\frac{1}{\rho} - T \left(\frac{\partial \frac{1}{\rho}}{\partial T} \right)_p \right] dp \quad (1.22)$$

où c_p est la capacité calorifique à pression constante. Cette expression générale se simplifie pour un fluide incompressible car $\left(\frac{\partial \frac{1}{\rho}}{\partial T} \right)_p = 0$. On peut écrire une équation de bilan pour l'enthalpie, en utilisant le bilan d'énergie interne (1.12c) et la conservation de la masse (1.3) :

$$\rho \frac{D}{Dt} h = -\operatorname{div} \mathbf{q} + \boldsymbol{\sigma} : \nabla \mathbf{u} + \frac{D}{Dt} p \quad (1.23)$$

1.3 Simplification des équations

En utilisant les équations de bilan de masse (1.14), de quantité de mouvement (1.12b) et d'enthalpie (1.23), les lois de comportement (1.13), (1.17), (1.19) et (1.21), en supposant les coefficients apparaissant dans ces lois (μ, k, c_p) constants, et en utilisant des identités vectorielles et tensorielles données dans [BAH87], on arrive à la forme suivante des équations de bilan :

$$\operatorname{div} \mathbf{u} = 0 \quad (1.24a)$$

$$\rho \frac{D}{Dt} \mathbf{u} = -\nabla p + \mu \Delta \mathbf{u} + \rho \mathbf{g} \quad (1.24b)$$

$$\rho c_p \frac{D}{Dt} T = k \Delta T + \frac{1}{2} \mu (\dot{\boldsymbol{\gamma}} : \dot{\boldsymbol{\gamma}}) \quad (1.24c)$$

Cette forme est attractive car il ne reste plus que les trois variables \mathbf{u}, p, T et trois équations. La forme que l'on retient finalement est obtenue en divisant (1.24b) (resp. (1.24c)) par la masse volumique ρ (resp. ρc_p) et en négligeant la production de chaleur par dissipation visqueuse $\frac{1}{2} \mu (\dot{\boldsymbol{\gamma}} : \dot{\boldsymbol{\gamma}})$:

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\nabla \mathbf{u}) \cdot \mathbf{u} = -\nabla p^* + \nu \Delta \mathbf{u} + \mathbf{s}_u \quad (1.25a)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (1.25b)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla T = \alpha \Delta T + s_T \quad (1.25c)$$

⁵On a supposé que h dépend uniquement de ces deux variables (et pas de l'état de contrainte du système par exemple).

où on a défini : $p^* = p/\rho$, $\nu = \mu/\rho$ la viscosité cinématique, $\alpha = k/(\rho c_p)$ la diffusivité thermique, \mathbf{s}_u un terme source pour l'équation sur la vitesse et s_T un terme source pour l'équation sur la température.

C'est cette forme simplifiée au maximum des équations de bilan que nous allons essayer de résoudre. Malgré les simplifications effectuées, l'interdépendance des différents termes de ces équations est source de nombreux comportements physiques et de difficultés de modélisation numérique.

Dans la suite de ce cours, nous étudierons le système (1.25) par petits bouts en en sélectionnant uniquement quelques termes (chapitres 2 à 8), le chapitre 9 s'intéressera aux conditions aux limites associées au système (1.25), ainsi que les propriétés de conservation des méthodes de discrétisation éléments finis utilisées. Un algorithme pour la résolution du système global (1.25) et son implémentation sera donnée au chapitre 10.

En tête de chaque chapitre, on rappelle l'expression du système (1.25) en encadrant les termes qui font l'objet du chapitre.

Chapitre 2

Construction naturelle d'une méthode des éléments finis

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\nabla \mathbf{u}) \cdot \mathbf{u} &= -\nabla p^* + \boxed{\nu \Delta \mathbf{u}} + \mathbf{s}_u \\ \nabla \cdot \mathbf{u} &= 0 \\ \frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla T &= \boxed{\alpha \Delta T} + s_T \end{aligned}$$

Dans ce chapitre, nous nous intéressons aux termes diffusifs des équations. Nous illustrons le caractère fondamental de l'opérateur Laplacien en considérant le problème de Dirichlet (section 2.1) sous la forme d'un problème d'optimisation d'une fonction (forme variationnelle). Nous montrons que cette forme variationnelle se prête particulièrement bien à une résolution par ordinateur, après discrétisation, pour donner la méthode des Éléments Finis.

Nous donnons des exemples de solutions du problème de Dirichlet en section 2.2 et discutons de leur régularité.

Nous parlons finalement du problème de l'élasticité linéaire en section 2.3, qui fait également apparaître un Laplacien, vectoriel cette fois-ci.

2.1 Problème de Dirichlet

2.1.1 Le problème de Dirichlet continu

Problème de prolongement

Intéressons-nous au problème suivant, illustré sur la figure 2.1 de gauche : soit un domaine fermé Ω de bord $\delta\Omega$ et une fonction T_0 définie sur $\delta\Omega$. On cherche une fonction T , définie sur tout le domaine Ω , qui prolonge T_0 , c'est-à-dire telle que :

$$T|_{\delta\Omega} = T_0 \tag{2.1}$$

Il existe évidemment une infinité de telles fonctions, c'est pourquoi nous allons demander à cette fonction d'être telle que son gradient ∇T , qui caractérise ses variations spatiales,

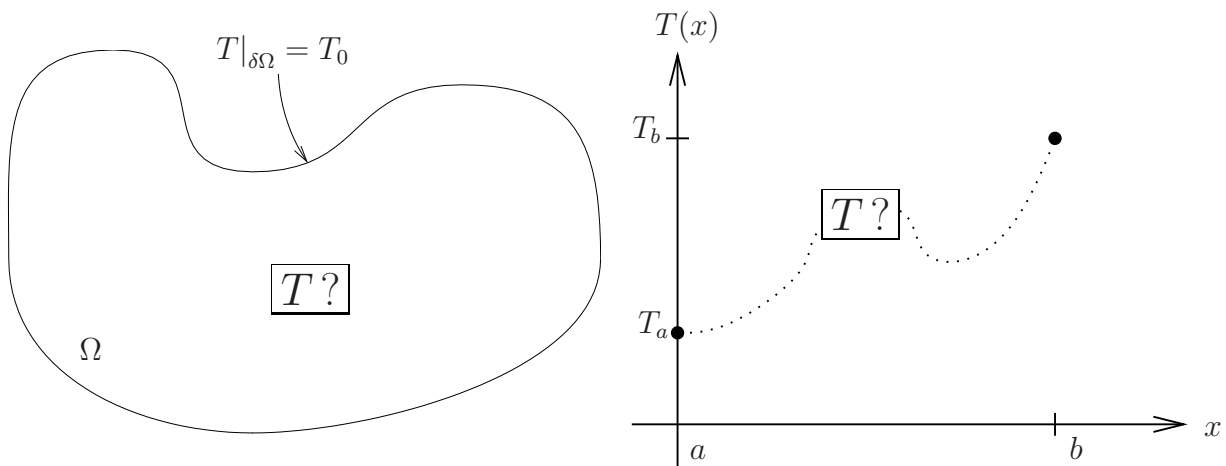


FIG. 2.1: Problème de prolongement. Gauche : en dimension 2. Droite : en dimension 1.

soit le plus petit possible, en un certain sens. Afin de prendre en compte ∇T sur l'ensemble du domaine Ω , il convient de faire intervenir une intégrale sur Ω , c'est-à-dire de considérer une moyenne du gradient.

La variation totale

Regardons comment formaliser mathématiquement le problème précédent en une dimension d'espace (figure 2.2 de droite). Une première idée peut être de considérer le problème d'optimisation suivant. Il s'agit de trouver une fonction T telle que le réel $J(T)$, appelé variation totale, soit minimum :

$$\min_{T \in \mathcal{L}_D^1(\Omega)} J(T) = \min_{T \in \mathcal{L}_D^1(\Omega)} \int_a^b \left| \frac{\partial T}{\partial x} \right| dx \quad (2.2)$$

Ici, $T(x) \in \mathcal{L}_D^1(\Omega)$ signifie que T est une fonction définie sur Ω appartenant à $\mathcal{L}^1(\Omega)$, c'est-à-dire dont la valeur absolue de la dérivée est intégrable (afin que $J(T)$ soit calculable), et dont la valeur est donnée sur le bord du domaine : $T|_{x=a,b} = T_{a,b}$. J est appelée une *fonctionnelle* à valeurs réelles, c'est-à-dire qu'il s'agit d'une fonction de fonction.

En fait, il est facile de voir quelles vont être les solutions du problème (2.2) : en calculant séparément l'intégrale sur les domaines où $\frac{\partial T}{\partial x} > 0$ et $\frac{\partial T}{\partial x} \leq 0$, on voit que $J(T)$ est la somme des dénivellés montants et des dénivellés descendants (figure 2.2 de gauche). $J(T)$ a donc pour valeur minimum $|T_b - T_a|$ et cette valeur est atteinte pour toutes les fonctions *monotones* sur $\Omega = [a, b]$. Ces fonctions ne sont pas forcément continues et elles sont forcément comprises dans le rectangle défini par les conditions aux limites (figure 2.2 de droite).

Par rapport au problème de prolongement de départ, le critère de minimisation (2.2) a permis de sélectionner un ensemble de solutions vérifiant une propriété de monotonie, mais pas de trouver une solution unique.

Fonctionnelle de Dirichlet

C'est pourquoi nous allons choisir une autre norme pour mesurer le gradient qui, cette fois-ci, va nous permettre d'exhiber une solution unique. On considère donc maintenant le

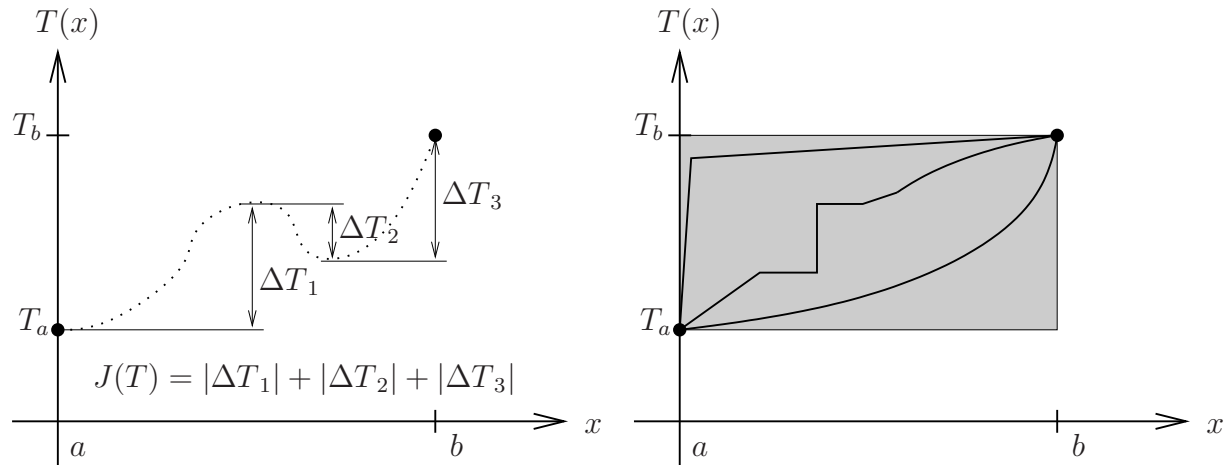


FIG. 2.2: Gauche : la variation totale $J(T)$ est la somme des dénivellés en valeur absolue. Droite : exemples de fonctions T telles que $T|_{x=a,b} = T_{a,b}$ et minimisant la variation totale $J(T)$.

problème d'optimisation suivant : il s'agit de trouver une fonction T telle que le réel $I(T)$ soit minimum :

$$\min_{T \in \mathcal{H}_D^1(\Omega)} I(T) = \min_{T \in \mathcal{H}_D^1(\Omega)} \int_{\Omega} \frac{\alpha}{2} \|\nabla T\|^2 d\Omega \quad (2.3)$$

Ici, $T(\mathbf{x}) \in \mathcal{H}_D^1(\Omega)$ signifie que T est une fonction définie sur Ω appartenant à $\mathcal{H}^1(\Omega)$, c'est-à-dire dont le gradient est de carré intégrable (afin que $I(T)$ soit calculable), et dont la valeur est donnée sur le bord du domaine :

$$T|_{\partial\Omega} = T_0 \quad (2.4)$$

Ici, α est un coefficient scalaire positif constant. Il ne joue pas de rôle dans ce chapitre sinon celui d'avoir les bonnes unités physiques. Le fait que ce problème d'optimisation, appelé *problème de Dirichlet*, soit *bien posé* (voir section 3.2 pour cette notion), c'est-à-dire, en particulier, qu'il admette une solution unique, est d'une importance fondamentale. La démonstration sortant du cadre de ce cours, nous nous contenterons de caractériser cette solution.

Notion de dérivée fonctionnelle

Sous des hypothèses de régularité de I , une condition nécessaire pour que I soit minimum est d'écrire que sa dérivée s'annule.

La notion de dérivée utilisée ici est la notion de *dérivée fonctionnelle*. De même que pour une fonction T dépendant d'un vecteur \mathbf{x} , on utilise la *dérivée directionnelle* suivant une direction \mathbf{y} :

$$D_{\mathbf{y}}T(\mathbf{x}) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{T(\mathbf{x} + \epsilon\mathbf{y}) - T(\mathbf{x})}{\epsilon} \quad (2.5)$$

Pour une fonctionnelle I dépendant d'une fonction T , on utilise la dérivée fonctionnelle suivant une "direction" U , qui est une fonction :

$$\delta_U I(T) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{d}{d\epsilon} I(T + \epsilon U) \quad (2.6)$$

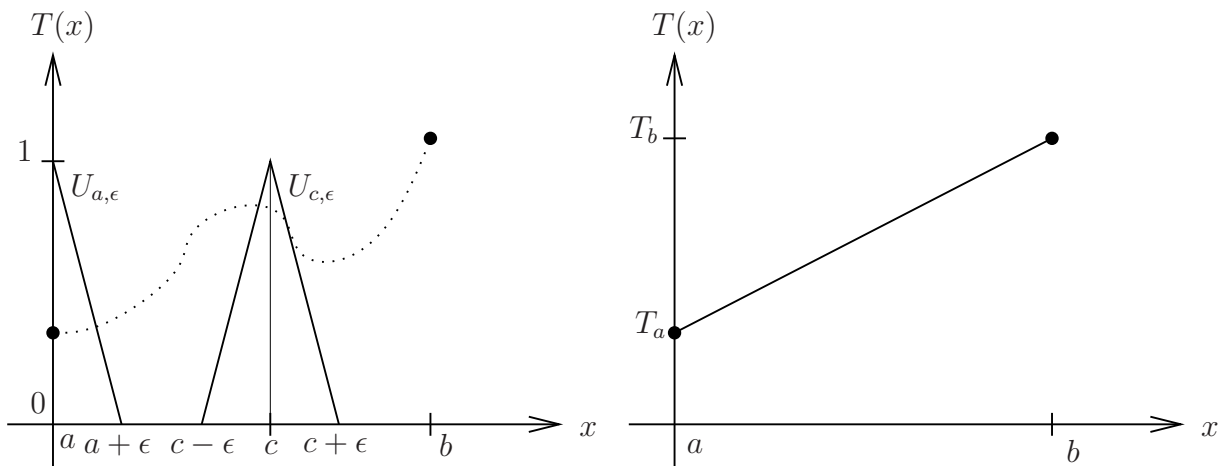


FIG. 2.3: Gauche : exemples de fonctions test U , appelée fonctions “chapeau”. Droite : solution T du problème de Dirichlet (2.3)–(2.4) en 1D.

ce qui se lit : la dérivée de la fonctionnelle I au “point” T , dans la “direction” de U égale... Lorsqu’on effectue la dérivation par rapport à ϵ , T et U sont fixées.

La dérivée fonctionnelle est également une fonctionnelle, qui, aux deux fonctions T et U , associe une valeur réelle $\delta_U I(T)$.

Condition de minimisation

La condition de minimisation du problème (2.3) s’écrit donc :

$$\delta_U I(T) = 0 \quad \forall U \in \mathcal{H}_0^1(\Omega) \quad (2.7)$$

comme, d’après la définition de la dérivée fonctionnelle (2.6) :

$$\delta_U I(T) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{d}{d\epsilon} \left(\int_{\Omega} \frac{\alpha}{2} \|\nabla T\|^2 d\Omega + \epsilon \int_{\Omega} \alpha \nabla T \cdot \nabla U d\Omega + \epsilon^2 \int_{\Omega} \frac{\alpha}{2} \|\nabla U\|^2 d\Omega \right) \quad (2.8)$$

finalement :

$$\delta_U I(T) = \int_{\Omega} \alpha \nabla T \cdot \nabla U d\Omega = 0 \quad \forall U \in \mathcal{H}_0^1(\Omega) \quad (2.9)$$

Ici, $U(\mathbf{x}) \in \mathcal{H}_0^1(\Omega)$ signifie que U , de même que T , est une fonction dont le gradient est de carré intégrable. Par contre, sa restriction au bord du domaine est *nulle* : $U|_{\partial\Omega} = 0$. Ceci vient du fait que l’on veut que $T + \epsilon U$ soit, de même que T , dans $\mathcal{H}_D^1(\Omega)$ pour tout ϵ .

Interprétation de la condition de minimisation en 1D

Afin d’interpréter la condition de minimisation (2.9) sur notre problème de Dirichlet en 1D, choisissons une fonction “test” U particulière, centrée en $c \in]a, b[$, d’extension ϵ et linéaire par morceaux, notée $U_{c,\epsilon}$ (voir figure 2.3 de gauche). Il s’agit d’une fonction chapeau.

On a :

$$\delta_{U_{c,\epsilon}} I(T) = \int_{c-\epsilon}^c \alpha \frac{dT}{dx} \frac{1}{\epsilon} dx + \int_c^{c+\epsilon} \alpha \frac{dT}{dx} \frac{-1}{\epsilon} dx = 0 \quad (2.10)$$

Ceci signifie que les moyennes de $\alpha \frac{dT}{dx}$ sur $[c - \epsilon, c]$ et $[c, c + \epsilon]$ sont égales. En considérant tous les points $c \in [a + \epsilon, b - \epsilon]$ et en passant à la limite $\epsilon \rightarrow 0^+$, on en déduit :

$$\alpha \frac{dT}{dx} = C^{\text{ste}} \quad \text{sur }]a, b[\quad (2.11)$$

où C^{ste} est une constante arbitraire. La condition (2.11) nous permet de déduire que la solution du problème de Dirichlet en 1D est la droite reliant les points correspondant aux conditions aux limites de Dirichlet $T|_{x=a,b} = T_{a,b}$ (figure 2.3 de droite).

Regardons également la fonction $U_{a,\epsilon}$. On ne peut pas la choisir pour le problème de Dirichlet car elle ne s'annule pas au bord et ne fait donc pas partie de $\mathcal{H}_0^1(\Omega)$. Néanmoins, si on écrit tout de même la condition de minimisation, on obtient :

$$\delta_{U_{a,\epsilon}} I(T) = \int_a^{a+\epsilon} \alpha \frac{dT}{dx} \frac{-1}{\epsilon} dx = 0 \quad (2.12)$$

Ceci signifie que la moyenne de $\frac{dT}{dx}$ sur $[a, a + \epsilon]$ est nulle. En passant à la limite $\epsilon \rightarrow 0^+$, on en déduit :

$$-\alpha \left. \frac{dT}{dx} \right|_a = 0 \quad (2.13)$$

Ceci est un deuxième type de condition à la limite possible, qui apparaît lorsque T n'est plus imposée au bord. Elle est appelée condition de *Neumann* ou condition *naturelle*.

Équation aux dérivées partielles équivalente

En dimension quelconque, la généralisation de l'interprétation effectuée en sous-section précédente fait intervenir l'*intégration par parties* qui permet, à partir de l'équation (2.9), de se ramener à une *équation aux dérivées partielles* (EDP) correspondante. Le but est de se ramener à une équation de la forme suivante :

$$\int_{\Omega} \text{EDP} \times U \, d\Omega = 0 \quad \forall U \quad (2.14)$$

D'où l'on déduira : $\text{EDP} = 0$ par le théorème de localisation (également appelé Lemme fondamental du calcul des variations, voir [Gur81]).

Appliquons la méthode en intégrant (2.9) par parties, on obtient :

$$\int_{\Omega} -\alpha \Delta T \times U \, d\Omega + \int_{\delta\Omega} \alpha \nabla T \cdot \mathbf{n} \times U \, d\delta\Omega = 0 \quad (2.15)$$

Le deuxième terme de (2.15) s'annule car U est nulle au bord du fait que T est connue au bord (condition de *Dirichlet* ou *essentielle*). Toutefois, la forme de ce deuxième terme permet de faire apparaître l'expression $\alpha \nabla T \cdot \mathbf{n}$ qui est un *flux* de la variable T à travers le bord. L'annulation de ce flux est un deuxième type de condition à la limite possible pour le problème que nous sommes en train d'étudier : elle se nomme condition de *Neumann* ou condition *naturelle*.

Nous reviendrons en détail sur l'expression des conditions aux limites dans le chapitre 9.

Le premier terme de (2.15) nous permet d'exprimer l'EDP dont nous cherchons la solution :

$$-\alpha \Delta T = 0 \quad \text{sur } \Omega \setminus \delta\Omega \quad (2.16)$$

Intérêt de la méthode

Pourquoi avoir effectué toutes ces circonvolutions et introduit des outils en apparence complexe pour aboutir à l'EDP (2.16) des plus simples? On peut donner les raisons suivantes :

1. La concision du principe (2.3) dont on peut déduire, non seulement l'EDP (2.16), mais également les conditions aux limites de Dirichlet et de Neumann licites.
2. L'apparition naturelle de l'espace de fonction $\mathcal{H}^1(\Omega)$ dans lequel on cherche la solution. Cet espace est plus étendu que celui qui apparaît à la seule lecture de l'EDP (2.16) et qui paraît requérir des fonctions deux fois dérivables. Le principe (2.3) est en ce sens plus général.
3. Le principe (2.3), dont la solution T est un élément d'un espace de fonctions continu, s'étend très simplement lorsqu'on cherche une solution approchée T_h discrète, c'est-à-dire dépendant d'un nombre fini de paramètres, comme nous allons le voir dans la section suivante.

On voit également que résoudre un Laplacien avec conditions aux limites de Dirichlet peut s'interpréter comme la réponse à la question suivante : *Quelle est la fonction la plus "régulière"¹ possible vérifiant les conditions aux limites ?*

Cette interprétation est importante car elle met en évidence le fait que l'opérateur Laplacien est un opérateur régularisant. Ce rôle régularisant apparaîtra de manière récurrente dans les prochains chapitres :

- Dans le chapitre 4, nous verrons qu'un schéma instable et un schéma stable pour l'équation de convection-diffusion diffèrent uniquement par un terme de type Laplacien discrétisé.
- Dans le chapitre 5, nous verrons qu'une équation de diffusion instationnaire (équation de la chaleur) ayant une condition initiale ($t = 0$) non régulière, admet une solution régulière dès que $t > 0$ dans le cas continu et après quelques pas de temps dans le cas discret.
- Dans le chapitre 7, nous verrons que l'on a besoin d'un petit terme de diffusion pour obtenir la solution physique d'un problème autrement mal posé (équation de Burgers)...

2.1.2 Le problème de Dirichlet discret

Espaces de fonctions discrets

L'espace de fonctions $\mathcal{H}_D^1(\Omega)$ dans lequel on cherche la solution T du problème de Dirichlet (2.3) est un espace de dimension infini. Il est donc trop grand pour pouvoir être représenté par un ordinateur ! C'est pourquoi on va plutôt chercher une solution approchée T_h dans un espace de fonctions fini, sous-espace de $\mathcal{H}_D^1(\Omega)$: $\mathbb{H}_D^1(\Omega)$ de dimension N . Si N_i est une base de cet espace de fonctions, on pourra écrire :

$$T_h(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^N T_i N_i(\mathbf{x}) \quad (2.17)$$

¹ici régularité signifie : ayant le gradient le plus petit possible au sens de la norme $\mathcal{L}^2(\Omega)$, i.e. la fonction la plus "constante" possible.

La *méthode des éléments finis* consiste à construire la base des N_i d'une certaine manière et à appliquer le principe de minimisation (2.3) en cherchant une solution dans l'espace $\mathbb{H}_D^1(\Omega)$.

Pour construire la base des N_i , on s'appuie sur un découpage du domaine Ω (maillage) en sous-domaine simples Ω_k (triangles, carrés, tétraèdres) et on construit les N_i de telle manière qu'elles s'expriment simplement sur chaque sous-domaine Ω_k .

Les inconnues du problème à résoudre sont désormais les inconnues T_i . Souvent, en élément finis, les T_i correspondent au valeur de T_h aux nœuds du maillage pour peu que N_i soit une *base nodale* de $\mathbb{H}_D^1(\Omega)$. Une base nodale vérifie les propriétés suivantes :

- Au nœud P_i de coordonnées \mathbf{x}_{P_i} : $N_i(\mathbf{x}_{P_i}) = 1$;
- Aux autres nœuds $j \neq i$ de coordonnées \mathbf{x}_j : $N_i(\mathbf{x}_{P_j}) = 0$.

Nous donnerons des exemples d'une telle base dans le chapitre 3.

Condition de minimisation discrète

Le principe (2.3) exprimé dans l'espace de fonctions discret consiste à trouver la fonction T_h minimisant le réel $I(T_h)$:

$$\min_{T_h \in \mathbb{H}_D^1(\Omega)} I(T_h) = \min_{T \in \mathcal{H}_D^1(\Omega)} \int_{\Omega} \frac{\alpha}{2} \|\nabla T\|^2 d\Omega \quad (2.18)$$

On aura forcément que : $\min_{T_h \in \mathbb{H}_D^1(\Omega)} I(T_h) \geq \min_{T \in \mathcal{H}_D^1(\Omega)} I(T)$ puisque $\mathbb{H}_D^1(\Omega) \subset \mathcal{H}_D^1(\Omega)$ mais on peut montrer, pour le problème de Dirichlet (théorème de Lax-Milgram, cf. [EG02]), que T_h tend vers T lorsqu'on augmente la dimension N de $\mathbb{H}_D^1(\Omega)$, c'est-à-dire lorsqu'on raffine le maillage.

La condition de minimisation (2.9) s'écrit alors pour le problème discret :

$$\delta_{N_i} I(T_h) = \int_{\Omega} \alpha \nabla T_h \cdot \nabla N_i d\Omega = 0 \quad \forall N_i \in \mathbb{H}_0^1(\Omega) \quad \text{i.e.} \quad \forall i \in \Omega \setminus \delta\Omega \quad (2.19)$$

Et, en développant T_h sur la base des N_i , on obtient le *système linéaire* d'inconnues T_j suivant :

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \alpha \nabla T_h \cdot \nabla N_i d\Omega &= \sum_j T_j \left(\int_{\Omega} \nabla N_j \cdot \nabla N_i d\Omega \right) \\ &= \sum_j T_j R_{ji} = \mathbf{R} \underline{T} = 0 \quad \forall i \in \Omega \setminus \delta\Omega \end{aligned} \quad (2.20)$$

où \underline{T} est le vecteur des inconnues T_j . La matrice R_{ij} est souvent appelée matrice de *rigidité* du fait que la méthode des éléments finis a été historiquement appliquée à des problèmes de mécanique (voir section 2.3).

Pour le problème de Dirichlet, on voit donc que l'on s'est ramené très simplement à un système linéaire qui se prête bien à une résolution par ordinateur, en appliquant un principe de minimisation et en discrétisant un espace de fonction.

Le processus de discrétisation effectué est résumé au tableau 2.1.

Un point important est, qu'une fois la discrétisation effectuée, on ne peut généralement plus utiliser l'intégration par parties dans la condition de minimisation discrète (2.19) car les fonctions de base N_i ne sont pas suffisamment régulières (pas deux fois dérivable). C'est

Continu	Discret	Système matriciel
$T \in \mathcal{H}_D^1(\Omega)$	$T_h = \sum_{i=1}^N T_i N_i$	
$\min_T \int_{\Omega} \frac{\alpha}{2} \ \nabla T\ ^2 d\Omega$	$\Rightarrow \min_{T_i} \int_{\Omega} \frac{\alpha}{2} \ \nabla T_h\ ^2 d\Omega$	
\downarrow	\Downarrow	
$\int_{\Omega} \alpha \nabla T \cdot \nabla U d\Omega = 0 \quad \forall U$	$\int_{\Omega} \alpha \nabla T_h \cdot \nabla N_j d\Omega = 0 \quad \forall N_j \Rightarrow \mathbf{RT} = 0$	
\downarrow		
$-\alpha \Delta T = 0$		

TAB. 2.1: Discrétisation du problème de Dirichlet : suivre les doubles flèches \Rightarrow . Du problème de Dirichlet à l'équation de Laplace : suivre les simples flèches \rightarrow .

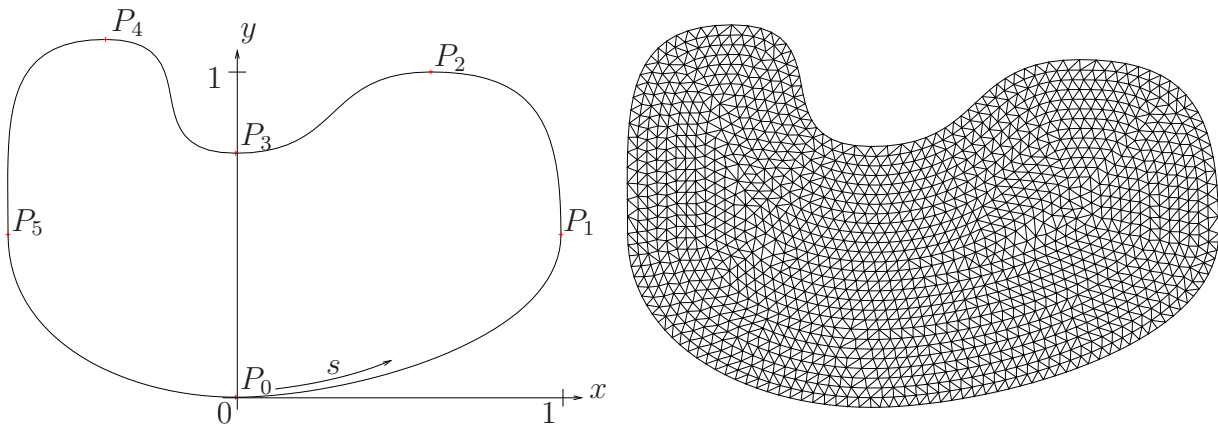


FIG. 2.4: Gauche : représentation de $\delta\Omega$ avec des points de contrôle. Droite : maillage en triangle du domaine Ω .

pourquoi on dit souvent que T_h est une *solution faible*² du problème de Dirichlet discret. Nous reviendrons sur ce point important dans le chapitre 9 consacré aux conditions aux limites car on verra que les conditions de Neumann sont également imposées de manière faible.

2.2 Exemples de solutions discrètes

2.2.1 Solutions régulières

Pour illustrer le comportement des solutions du problème (2.3)–(2.4) en 2D, on trace des solutions discrètes obtenues en résolvant le système linéaire (2.20). La figure 2.4 illustre le contour, ainsi que le maillage de domaine Ω choisi.

Choisissons tout d'abord comme condition à la limite une courbe Gaussienne dépendant de l'abscisse curviligne s et centrée au point P_1 :

$$T_h|_{\delta\Omega}(s) = \exp - \left(\frac{s - s_{P_1}}{0.15} \right)^2 \quad (2.21)$$

²Ce terme de “solution faible” n'est pas péjoratif. Il signifie juste que la *formulation faible* (2.9) du problème de Dirichlet, plus générale, admet plus de solutions que sa *formulation forte* (2.16).

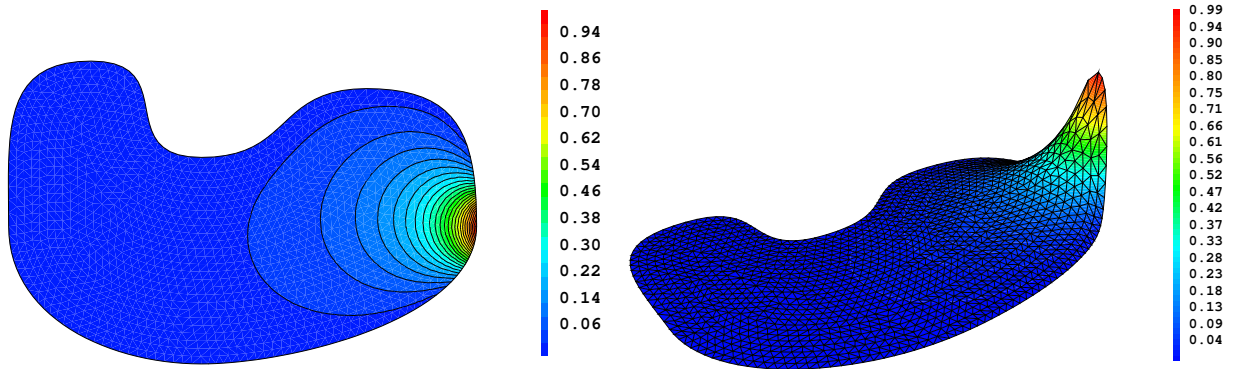


FIG. 2.5: Solution numérique T_h du problème (2.18)–(2.21). Gauche : représentation des isovalues de T_h . Droite : représentation en 3D de T_h ; $z = T_h(x, y)$.

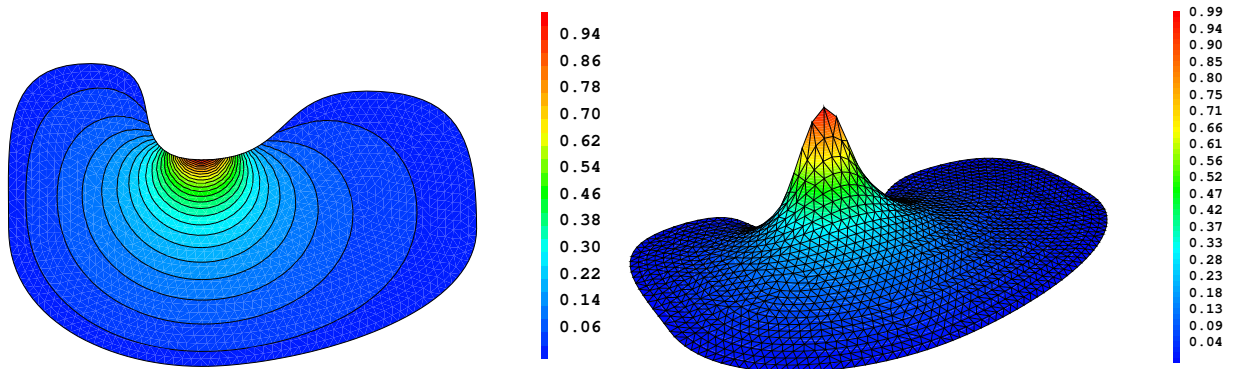


FIG. 2.6: Solution numérique T_h du problème (2.18)–(2.22). Gauche : représentation des isovalues de T_h . Droite : représentation en 3D de T_h ; $z = T_h(x, y)$.

On obtient la solution numérique de la figure 2.5. On observe que la solution T_h est régulière et s'atténue rapidement lorsqu'on s'éloigne du point P_1 de telle manière que $\|\nabla T\|^2$ est effectivement très faible dans l'essentiel de Ω .

Si on choisit maintenant comme condition à la limite une courbe Gaussienne centrée au point P_3 :

$$T_h|_{\delta\Omega}(s) = \exp - \left(\frac{s - s_{P_3}}{0.15} \right)^2 \quad (2.22)$$

On obtient la solution numérique de la figure 2.6. Cette fois-ci, on observe que la solution T_h s'atténue un peu moins rapidement lorsqu'on s'éloigne du point P_3 : ceci est dû au fait que P_3 est situé dans une partie concave de $\delta\Omega$.

2.2.2 Solutions singulières

On a dit que les solutions du problème de Dirichlet, du fait qu'elles sont de gradient minimum, sont généralement très régulières. Il y a néanmoins des cas d'intérêt où ces solutions peuvent exhiber des singularités. Citons en trois :

1. La fonction donnée au bord $T|_{\delta\Omega}$ est singulière ;
2. Le bord $\delta\Omega$ présente des coins rentrants ;

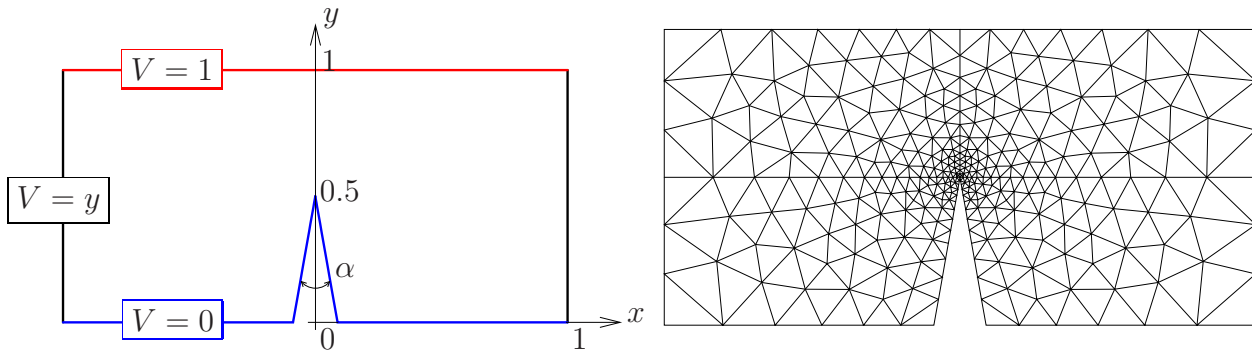


FIG. 2.7: Gauche : schéma représentant la géométrie Ω et les conditions aux limites du cas du paratonnerre. Droite : maillage en triangle du domaine Ω .

3. Les conditions aux limites changent de nature (passage Dirichlet–Neumann) sur le bord $\delta\Omega$.

Dans ces trois cas, la singularité “vient du bord”, ce qui est normal car les solutions du problème de Dirichlet sont entièrement déterminées par ce que l’on impose au bord.

Singularité de pointe : le paratonnerre

Considérons donc le deuxième cas avec le domaine Ω de la figure 2.7. Son bord $\delta\Omega$ présente une pointe “très concave” ($\alpha \rightarrow 0$). Imaginons maintenant que le bord bas représente un paratonnerre posé au sol au potentiel $V = 0$ et que le bord haut représente un nuage à un potentiel différent $V = 1$. On suppose que le potentiel électrique V vérifie l’équation de l’électrostatique $\Delta V = 0$, c’est-à-dire que V est solution du problème de Dirichlet (2.3)–(2.4).

Lorsque l’on calcule une solution discrète (figure 2.8), on s’aperçoit que les isovaleurs de V sont très resserrées près de la pointe, signe d’un gradient, donc d’un champ électrique élevé. C’est l’*effet de pointe*. Il permet d’expliquer que la foudre va préférentiellement tomber sur le paratonnerre : l’ionisation de l’air va se produire près de la pointe et ainsi générer une zone de conductivité électrique élevée qui va canaliser la foudre.

Singularité Dirichlet-Neumann

Considérons maintenant le cas du paratonnerre lorsque : $\alpha = 0$. On note que la géométrie et les conditions aux limites sont symétriques par rapport à l’axe $x = 0$. On peut donc se limiter au demi-domaine montré sur la figure 2.9.

Le bord rectiligne gauche AD du domaine présente maintenant un changement de conditions aux limites au point E :

- Condition de Dirichlet homogène $V = 0$ correspondant au paratonnerre sur AE ;
- Condition de Neumann homogène $\frac{\partial V}{\partial n} = 0$ sur ED. Cette condition traduit le fait que le flux de l’inconnue V à travers ED est nul du fait de la symétrie.

Les solutions présentent, de même que pour le paratonnerre, une singularité au point E. On peut montrer [SF88] que la solution près du point E se comporte comme $\sqrt{r} \sin \frac{\theta}{2}$ où r est la distance au point E. La figure 2.10 de droite illustre ce comportement sur le profil de potentiel électrique V selon les segments AD et EF.

La solution V est continue mais pas dérivable au point E. Par contre, son gradient ∇V reste malgré tout de carré intégrable sur Ω ! En effet, en passant en coordonnées

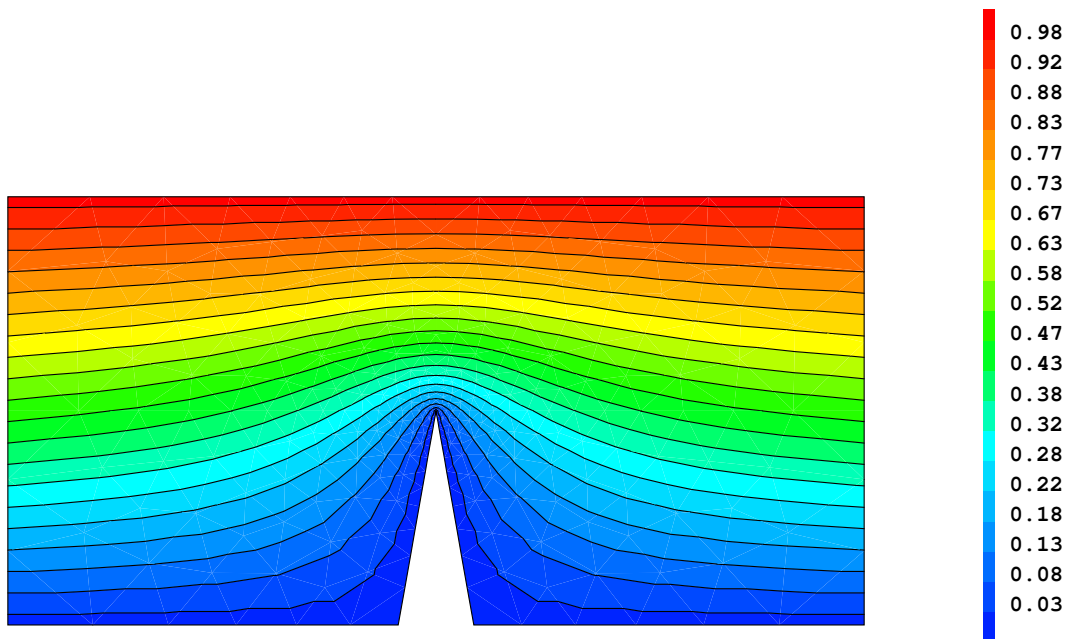


FIG. 2.8: Isovaleurs de la solution discrète V_h du cas du paratonnerre.

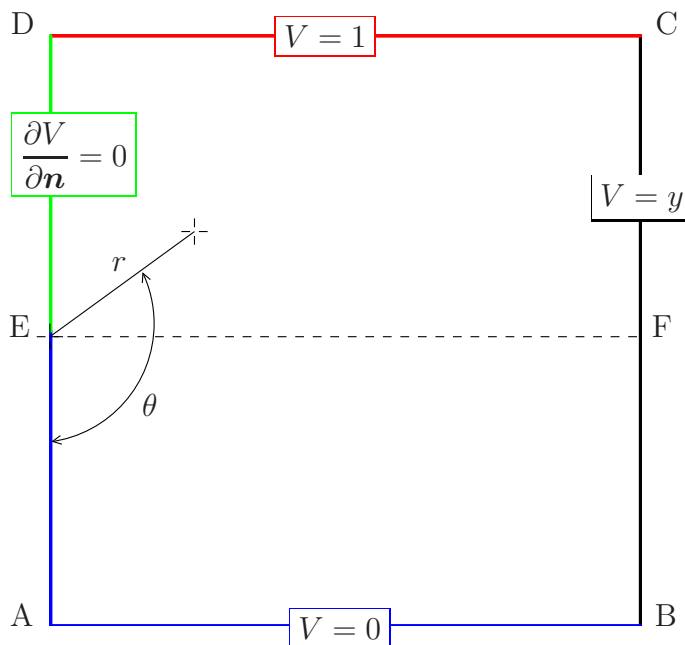


FIG. 2.9: Schéma représentant un demi-domaine Ω et les conditions aux limites associées au cas du paratonnerre, figure 2.7, lorsque $\alpha = 0$.

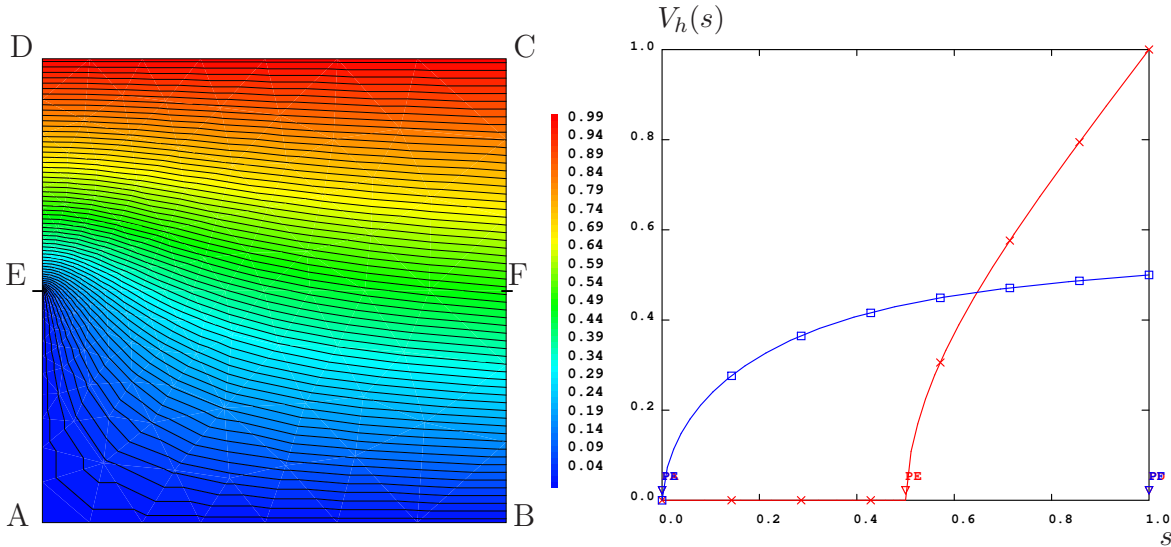


FIG. 2.10: Gauche : Isovaleurs de la solution discrète V_h du problème du paratonnerre avec $\alpha = 0$. Droite : profils de la solution discrète V_h en fonction de l'abscisse curviligne s . \times : suivant le segment AD. \square : suivant le segment EF.

cylindriques (r, θ) centrées en E, la norme $\mathcal{H}^1(\Omega)$ de la solution est de la forme :

$$\int_{\Omega} \|\nabla V(r, \theta)\|^2 d\Omega = \int_{\Omega} \left(\frac{\partial V}{\partial r} \right)^2 + \left(\frac{1}{r} \frac{\partial V}{\partial \theta} \right)^2 r dr d\theta \quad (2.23)$$

$$= \int_{\Omega} \left(C(\theta) \frac{1}{\sqrt{r}} \right)^2 + \left(D(\theta) \frac{\sqrt{r}}{r} \right)^2 r dr d\theta \quad (2.24)$$

qui est bien calculable.

La singularité du gradient de l'inconnue au changement de condition à la limite peut également se voir de manière qualitative sur les isovaleurs de l'inconnue, comme le montre la figure 2.10 de gauche :

- Au-dessus du point E, les isovaleurs sont perpendiculaires à la frontière AD, du fait de la condition de symétrie $\frac{\partial V}{\partial n} = 0$;
- En-dessous du point E, les isovaleurs ont tendance à être parallèles à la frontière AD, le morceau de frontière AE étant lui-même l'isovaleur $V = 0$.

Influence des singularités

Comme vous pourrez le voir dans le cadre de vos projets, dans la plupart des cas pratiques, une ou plusieurs singularités seront souvent présentes. Il est important de savoir les localiser car les ordres de convergence et la précision des méthodes de discrétisation sont en général moindres en leur présence. Un premier remède généralement adopté est de raffiner le maillage à proximité des singularités comme nous l'avons fait pour le cas du paratonnerre (figure 2.7 de droite).

Pour une étude plus complète de l'influence des singularités sur la méthode des éléments finis, on pourra consulter le chapitre 8 de Strang et Fix [SF88].

2.3 Problème d'élasticité linéaire

Comme autre exemple, plus complexe et historiquement important, d'application d'un principe de minimisation, on peut donner le principe suivant utilisé en mécanique dans le cadre de l'élasticité linéaire en petites déformations :

$$\min_{\mathbf{u} \in (\mathcal{H}_D^1(\Omega))^3} I(\mathbf{u}) = \min_{\mathbf{u} \in (\mathcal{H}_D^1(\Omega))^3} \frac{1}{2} \int_{\Omega} \mu \left\| \frac{\nabla \mathbf{u} + \nabla^t \mathbf{u}}{2} \right\|^2 + \lambda (\nabla \cdot \mathbf{u})^2 - \mathbf{f} \mathbf{u} \, d\Omega \quad (2.25)$$

où λ et μ sont les coefficients de Lamé. \mathbf{f} sont les forces volumiques appliquées sur le solide (par exemple la gravité) et \mathbf{u} sont les déplacements du solide par rapport à la configuration de référence choisie. La quantité que l'on veut minimiser, $I(\mathbf{u})$, est appelée *énergie élastique*. On a pris comme conditions aux limites des déplacements imposés sur la frontière $\delta\Omega$. Les coefficients de Lamé sont reliés au module d'Young E et au coefficient de Poisson ν :

$$E = \mu \frac{3\lambda + 2\mu}{\lambda + \mu} \quad ; \quad \nu = \frac{1}{2} \frac{\lambda}{\lambda + \mu} \quad (2.26)$$

La condition de minimisation s'écrit alors :

$$\delta_v I(\mathbf{u}) = \int_{\Omega} \mu \nabla \mathbf{u} : \nabla \mathbf{v} + (\lambda + \mu) \nabla \cdot \mathbf{u} \nabla \cdot \mathbf{v} - \mathbf{f} \mathbf{v} \, d\Omega = 0 \quad \forall \mathbf{u} \in (\mathcal{H}_0^1(\Omega))^3 \quad (2.27)$$

Cette condition est souvent évoquée sous le nom de *principe des travaux virtuels*.

De cette condition découlent les équations de Navier de l'élasticité linéaire :

$$\mu \Delta \mathbf{u} + (\lambda + \mu) \nabla \nabla \cdot \mathbf{u} + \mathbf{f} = 0 \quad (2.28)$$

que l'on peut écrire sous la forme, dite mixte, plus conventionnelle, suivante, en introduisant le tenseur des contraintes $\boldsymbol{\sigma}$:

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{f} = 0 \quad (2.29)$$

$$\boldsymbol{\sigma} = \lambda (\nabla \cdot \mathbf{u}) \mathbf{1} + \mu (\nabla \mathbf{u} + \nabla^t \mathbf{u}) \quad (2.30)$$

L'équation (2.29) exprime l'équilibre des forces et l'équation (2.30) donnant l'expression de $\boldsymbol{\sigma}$, est la loi de comportement.

Le problème d'élasticité linéaire nous servira en mécanique des fluides. En effet, nous verrons au chapitre 8 que, lorsque le premier coefficient de Lamé $\lambda \rightarrow \infty$, le système de l'élasticité linéaire tend vers les équations de Stokes incompressible, approximation des équations de Navier-Stokes à petit nombre de Reynolds.

2.4 Résumé

Nous avons insisté dans ce chapitre sur la dérivation de la méthode des éléments finis par un principe variationnel du fait de son caractère "naturel". Nous reviendrons sur le point important des conditions aux limites au chapitre 9. Il est connu que les principes variationnels jouent un rôle très important en physique et il nous a paru utile de relier ces principes plutôt théoriques à des applications concrètes : méthode des éléments finis et calcul de solutions approchées par ordinateur.

On pourrait également donner d'autres exemples de phénomènes physiques s'appuyant sur un principe variationnel et trouvant des applications en mécanique des fluides. Citons, par exemple, les phénomènes de tension superficielle qui produisent des forces tendant à minimiser des surfaces. . .

En mécanique des fluides incompressibles, au moins deux problèmes surgissent par rapport au cadre variationnel que nous venons d'examiner :

- certains termes des équations ne dérivent pas simplement d'un principe variationnel : notamment dans l'équation de convection-diffusion $\mathbf{u} \cdot \nabla T - \alpha \Delta T = 0$, le premier terme ne dérive pas simplement d'un principe variationnel ;
- des principes d'optimisation plus complexes que la simple minimisation, tels que la minimisation sous contraintes, peuvent être mis en jeu comme c'est le cas pour le problème de *Stokes incompressible*.

Du fait de ces deux points, la méthode des Éléments Finis s'applique moins "naturellement" à la mécanique des fluides incompressibles et on doit user d'astuces pour l'appliquer.

Au chapitre 3, on généralise la méthode des éléments finis à des classes d'équations aux dérivées partielles plus générales que celles qui découlent d'un principe variationnel. Au chapitre 4, on examine les difficultés liées au terme de convection sur une équation de convection-diffusion stationnaire d'un scalaire. Enfin, au chapitre 8, on examine les difficultés liées à la contrainte sur la divergence pour le problème de Stokes incompressible.

Chapitre 3

Méthode des éléments finis

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\nabla \mathbf{u}) \cdot \mathbf{u} &= -\nabla p^* + \nu \Delta \mathbf{u} + \mathbf{s}_u \\ \nabla \cdot \mathbf{u} &= 0 \\ \frac{\partial T}{\partial t} + \boxed{\mathbf{u} \cdot \nabla T} &= \boxed{\alpha \Delta T} + s_T \end{aligned}$$

Dans ce chapitre, nous décrivons comment dériver une méthode de discrétisation pour des équations aux dérivées partielles plus générales que celles vues au chapitre précédent. Il s'agit de la méthode des résidus pondérés (section 3.1). Nous l'appliquons, à titre d'exemple, à l'équation de convection-diffusion d'un scalaire qui servira de problème modèle au chapitre 4.

Nous introduisons ensuite les notions de convergence et de stabilité en section 3.2 car, contrairement au chapitre 2, la convergence des solutions discrètes obtenues par la méthode des résidus pondérés n'est pas acquise.

Enfin, en spécialisant la méthode des résidus pondérés à une base de fonctions particulières, nous obtenons la méthode des éléments finis et nous rappelons brièvement les outils mathématiques utilisés pour une implémentation pratique dans un code de calcul (sections 3.3 et suivantes).

3.1 Méthode des résidus pondérés

On applique la méthode du chapitre précédent “à l'envers” : on part de l'équation aux dérivées partielles pour parvenir à la formulation faible. Prenons l'exemple de l'équation de convection-diffusion stationnaire comme modèle, où \mathbf{u} est un champ de vecteurs donné :

$$\mathbf{u} \cdot \nabla T - \alpha \Delta T = 0 \tag{3.1}$$

L'expression à gauche du signe égal se nomme le résidu R . C'est un *opérateur* : à une fonction T , il associe une fonction $\mathbf{u} \cdot \nabla T - \alpha \Delta T$.

Résoudre le problème revient à trouver la fonction T qui annule le résidu. Comme il a été noté au chapitre précédent, avec un ordinateur, on est, en général, obligé de chercher

une fonction T_h approchant T dans un espace de fonctions de dimension finie \mathbf{F}_{pri} . Soit N_i ($i \in [1, N]$), une base de cet espace \mathbf{F}_{pri} sur laquelle on peut décomposer T_h :

$$T_h(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^N T_i N_i(\mathbf{x}) \quad (3.2)$$

Les inconnues du problème deviennent les N coefficients T_i qui sont appelés *degrés de liberté*. En général, on aura :

$$R(T_h) = \mathbf{u} \cdot \nabla T_h - \alpha \Delta T_h \neq 0 \quad (3.3)$$

car T_h ne représentera généralement qu'une approximation de la solution exacte T du problème (3.1).

Afin de déterminer les T_i , plusieurs méthodes sont possibles. On peut, par exemple, demander :

- que le résidu $R(T_h)$ s'annule en N points bien choisis : il s'agit d'une méthode de *collocation* ;
- que le résidu $R(T_h)$ soit minimum selon une certaine norme. Dans le cas de la norme $\mathcal{L}^2(\Omega)$, on aboutit à des méthode dites de *moindres carrés* ;
- que le résidu $R(T_h)$ soit *orthogonal* à un espace de fonctions \mathbf{F}_{dua} . Pour cela, il faut se placer dans des espaces de fonctions munis d'un produit scalaire (espace de Hilbert). Ceci constitue la méthode des *résidus pondérés*.

En général, on applique cette dernière méthode avec des espaces de fonctions qui sont des sous-espaces de $\mathcal{L}^2(\Omega)$ et avec le produit scalaire associé à la norme $\mathcal{L}^2(\Omega)$:

$$\langle u, v \rangle = \int_{\Omega} uv \, d\Omega \quad (3.4)$$

Si on choisit $\mathbf{F}_{\text{pri}} = \mathbf{F}_{\text{dua}}$, on obtient une méthode de *Galerkin* qui s'écrit :

$$\forall j \in [1, N] \quad \langle R(T_h), N_j \rangle = 0 \quad (3.5)$$

soit en exprimant R et T_h , en utilisant la linéarité de l'intégrale et l'intégration par parties sur le Laplacien :

$$\forall j \in [1, N] \quad \sum_{i=1}^N T_i \left(\int_{\Omega} \mathbf{u} \cdot \nabla N_i N_j + \alpha \nabla N_i \nabla N_j \, d\Omega - \int_{\delta\Omega} \alpha \nabla N_i \cdot \mathbf{n} N_j \, d\delta\Omega \right) = 0 \quad (3.6)$$

et après calcul des intégrales de volume (celle de bord est nulle si l'on suppose que les T_i sont fixées au bord) :

$$\forall j \in [1, N] \quad (\mathbf{C} + \mathbf{R})_{ji} T_i = 0 \quad (3.7)$$

où \mathbf{C} est la matrice de convection et \mathbf{R} est la même matrice de rigidité qu'au chapitre précédent (équation (2.20)). Là encore, on s'est ramené à un système linéaire susceptible d'être résolu par ordinateur. Le processus de discrétisation effectué est résumé sur le tableau 3.1, à comparer avec le tableau 2.1.

Par rapport à la méthode vue au chapitre précédent, la méthode des résidus pondérés paraît plus générale, puisqu'elle peut s'appliquer, a priori, à n'importe quelle équation aux dérivées partielles. Néanmoins, elle semble présenter également quelques inconvénients :

Continu	Discret	Système matriciel
$T \in \mathcal{H}_D^1(\Omega)$	$T_h = \sum_{i=1}^N T_i N_i$	
Pas de principe de minimisation		
$\int_{\Omega} \mathbf{u} \cdot \nabla T U \, d\Omega + \int_{\Omega} \alpha \nabla T \cdot \nabla U \, d\Omega = 0 \quad \forall U$	$\int_{\Omega} \mathbf{u} \cdot \nabla T_h N_j \, d\Omega + \int_{\Omega} \alpha \nabla T_h \cdot \nabla N_j \, d\Omega = 0 \quad \forall N_j$	$(\mathbf{C} + \mathbf{R}) \underline{T} = 0$
\uparrow $\mathbf{u} \cdot \nabla T - \alpha \Delta T = 0$		

TAB. 3.1: Discrétisation de l'équation de convection-diffusion par une méthode de Galerkin : suivre les doubles flèches \Rightarrow . À comparer avec le tableau 2.1.

1. elle nous dit peu de choses sur les espaces primaux de fonctions dans lesquels chercher la fonction T et son approchée T_h et sur les espaces duaux pour les résidus continus et discrets ;
2. les conditions aux limites licites pour résoudre le problème ne sont également pas précisées ;
3. l'utilisation de l'intégration par parties sur le Laplacien, pour "diminuer la régularité exigée sur les fonctions N_i ", paraît assez artificielle.

En outre, le fait que l'on puisse appliquer la méthode ne nous garantit pas que le système discret obtenu soit inversible et, s'il l'est, que la solution T_h obtenue approchera correctement T . Pour s'en assurer, il faut examiner la *convergence* de la méthode.

3.2 Equivalence convergence-stabilité

On écrit le théorème d'équivalence de *Lax* qui est le *théorème fondamental de l'analyse numérique*, il s'énonce ([Str07]) :

Théorème 1 (Lax) *La stabilité est équivalente à la convergence, pour une approximation consistante d'un problème linéaire bien posé.*

Notons $Lu = f$, le problème linéaire considéré où L représente l'opérateur linéaire associé au problème, f les données du problème (y compris les conditions aux limites) et u les inconnues du problème. Notons également $L_h U_h = f_h$ le problème issu de la discrétisation.

Consistance $f_h \rightarrow f$ et $L_h \tilde{u} \rightarrow L\tilde{u}$ pour des fonctions régulières \tilde{u} quand $h \rightarrow 0$. Ceci signifie que l'on approche correctement les données du problème f et le problème L .

Problème bien posé L'inverse de L est borné : $\|u\| = \|L^{-1}f\| \leq C\|f\|$. Ici, on a supposé que l'inverse de L existe, c'est-à-dire qu'il existe une solution unique u du problème pour chaque f .

Stabilité Les inverses discrets L_h sont uniformément bornés : $\|U_h\| = \|L_h^{-1}f_h\| \leq C'\|f_h\|, \forall h$. Grossièrement, ceci signifie que le module de la plus petite valeur propre des L_h , λ_{1h} , est supérieur à une constante strictement positive indépendante de h .

Convergence $u - U_h \rightarrow 0$ quand $h \rightarrow 0$.

On voit que la stabilité du problème discret est similaire au caractère bien posé du problème continu avec une difficulté supplémentaire due à la discrétisation h : le problème discret doit être *uniformément* bien posé.

Une idée de la preuve du théorème consiste à additionner et retrancher $L_h^{-1}Lu = L_h^{-1}f$ à $u - U_h$:

$$u - U_h = L_h^{-1}(L_h u - Lu) + L_h^{-1}(f - f_h) \rightarrow 0 \quad (3.8)$$

La consistance contrôle les termes entre parenthèses (ils tendent vers zéro). La stabilité contrôle les L_h^{-1} qui agissent dessus. Le caractère bien posé contrôle l'approximation des solutions u par des fonctions régulières \tilde{u} .

On note que l'énoncé du théorème de Lax est très général : en particulier, nous n'avons pas précisé le choix des espaces de fonctions et des normes. Nous verrons plus loin que ces choix sont importants (section 4.5.2). Des résultats plus forts que le théorème de Lax peuvent être obtenus dans des cas particuliers : par exemple, sur les ordres de convergence des méthodes.

En pratique, pour des problèmes linéaires bien posés, comme l'équation de convection-diffusion et le problème de Stokes avec des conditions aux limites adéquates, la méthode des résidus pondérés est consistante. Par contre, la stabilité n'est pas toujours acquise, ce que montreront les exemples numériques de la suite du cours : au chapitre 4 pour l'équation de convection-diffusion et au chapitre 8 pour le problème de Stokes.

Lorsque le problème à approcher est non linéaire, les choses peuvent se compliquer singulièrement. Nous en verrons un exemple simple sur l'équation de Burgers au chapitre 7. En ce qui concerne les équations de Navier-Stokes incompressible en 3D, il n'existe pas de théorème général d'existence de solutions : on ne sait pas, en général, si le problème continu est bien posé. Cela ne nous empêche pas d'en chercher des solutions numériquement ! Se posent toutefois des questions, notamment concernant l'apparition de la turbulence et sa modélisation (qui donne peut-être un problème mieux posé). Ces sujets sont d'actualité et des réponses partielles à ces questions font l'objet d'un prix (1000000\$) proposé par le Clay Mathematics Institute.

A notre modeste niveau, il faut toujours se poser des questions en présence d'un résultat de simulation numérique en mécanique des fluides et, en général, la confrontation à des données expérimentales est requise.

3.3 Fonctions de base

Une fois écrit le problème discret (2.20) ou (3.6), il reste à choisir une base N_i particulière. En une dimension d'espace, de nombreux choix sont possibles : décomposition en série de Fourier, base de polynômes orthogonaux (Legendre, Chebychev)... En dimension d'espace plus grande, on peut étendre facilement les bases précédentes en maillage cartésien, mais cela est plus difficile en maillage quelconque.

La méthode des éléments finis, elle, construit cette base N_i de la façon suivante :

Maillage Le domaine à modéliser Ω est partitionné en éléments de forme géométrique simple : $\Omega = \bigcup_k \Omega_k$;

Base nodale Les degrés de liberté T_i sont les valeurs de la fonction T_h en certains nœuds du maillage $P_i : T_h(P_i) = T_i$;

Base polynômiale par élément. La restriction d'une fonction de base N_i à un élément Ω_k est polynômiale en les coordonnées d'espace.

Plutôt que de détailler le calcul des fonctions de base (voir [DT84] ou [DP00]), on se contente de tracer une fonction de base N_i des espaces discrets les plus simples en une et deux dimensions d'espace, ainsi qu'un interpolé T_h d'une fonction arbitraire T dans cet espace discret.

Du fait du choix de fonctions polynômiales par élément, les sous-espaces V de $\mathcal{L}^2(\Omega)$ (fonctions de carré intégrables) seront continus par élément, mais peuvent être discontinus aux frontières des éléments. Par contre, les sous-espaces W de $\mathcal{H}^1(\Omega)$ (fonctions dont le gradient est de carré intégrable) devront être continus à la frontière entre éléments, sinon on ne peut pas évaluer leur gradient.

L'espace discret $V_0 \subset \mathcal{L}^2(\Omega)$ le plus simple est l'espace des fonctions constantes par élément. Une base de cet espace sont les fonctions indicatrices des éléments (voir figures 3.1 et 3.2).

L'espace discret $W_1 \subset \mathcal{H}^1(\Omega)$ le plus simple est l'espace des fonctions linéaires par élément. Une base de cet espace sont les fonctions "chapeaux" associées aux nœuds sommets des éléments (voir figures 3.3 et 3.4).

Le choix des trois propriétés de la base N_i effectué par la méthode des éléments finis à des conséquences intéressantes. La deuxième propriété (base nodale) conduit à :

$$N_i(P_j) = \delta_{ij} \quad (3.9)$$

où δ_{ij} est le symbole de Kronecker valant 1 si $i = j$ et 0 sinon. Ensuite, à l'aide de la troisième propriété (base polynômiale par élément), on en déduit que les fonctions N_i sont identiquement nulles sur tous les éléments qui ne contiennent pas le point P_i . Cette propriété de *localité* est très avantageuse pour le traitement subséquent par ordinateur : les termes A_{ij} de la matrice totale A d'un problème discrétisé (qui sont des intégrales impliquant les fonctions N_i et N_j et leurs dérivées) seront nuls si P_i et P_j n'appartiennent pas à un même élément Ω_k . La matrice A aura donc un grand nombre de termes nuls : elle est dite *creuse*. On pourra ne stocker que les termes non nuls afin d'économiser la mémoire de l'ordinateur.

Par contre, on peut noter que la base des N_i choisie pour l'espace W_1 n'est pas orthogonale :

$$M_{ij} = \langle N_i, N_j \rangle = \int_{\Omega} N_i N_j \, d\Omega \neq \delta_{ij} \quad (3.10)$$

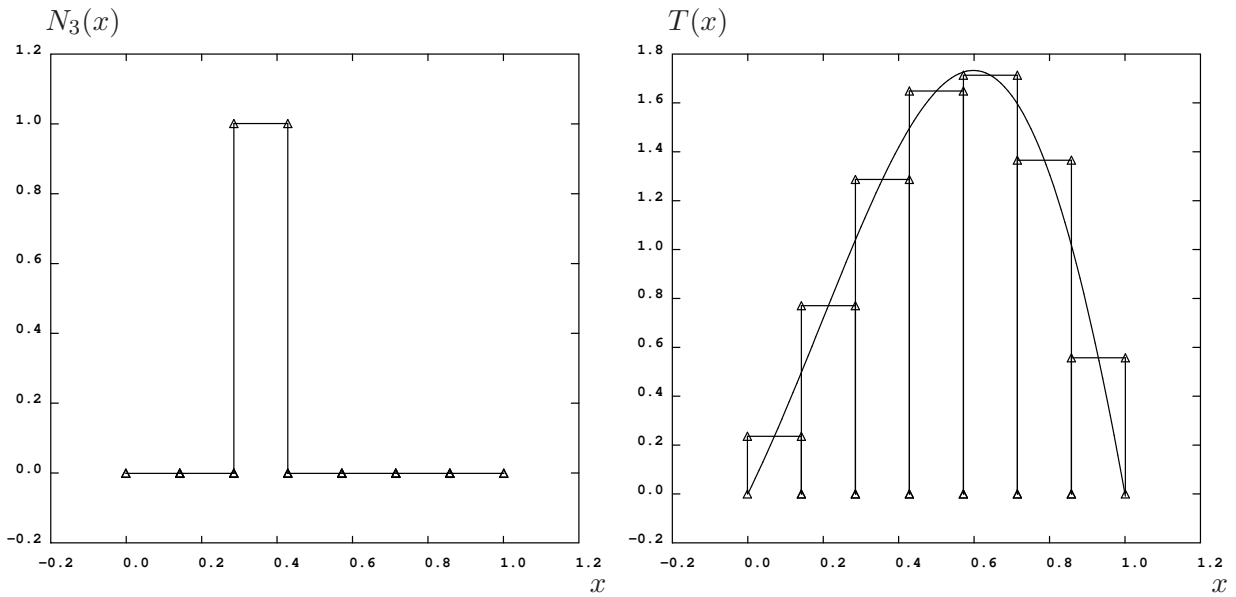


FIG. 3.1: Exemples de fonctions de l'espace V_0 en 1D. Gauche : la fonction de base N_3 , fonction indicatrice du 3^e élément. Droite : une fonction T (—) et son interpolé $T_h \in V_0$ (Δ).

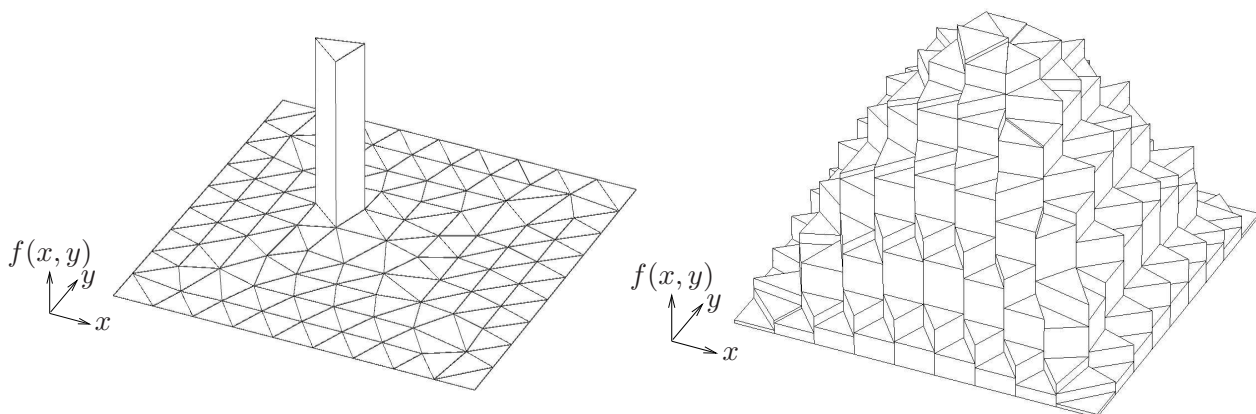


FIG. 3.2: Exemples de fonctions de l'espace V_0 en 2D. Gauche : une fonction de base N_i , fonction indicatrice du i^e élément. Droite : une fonction $T_h \in V_0$.

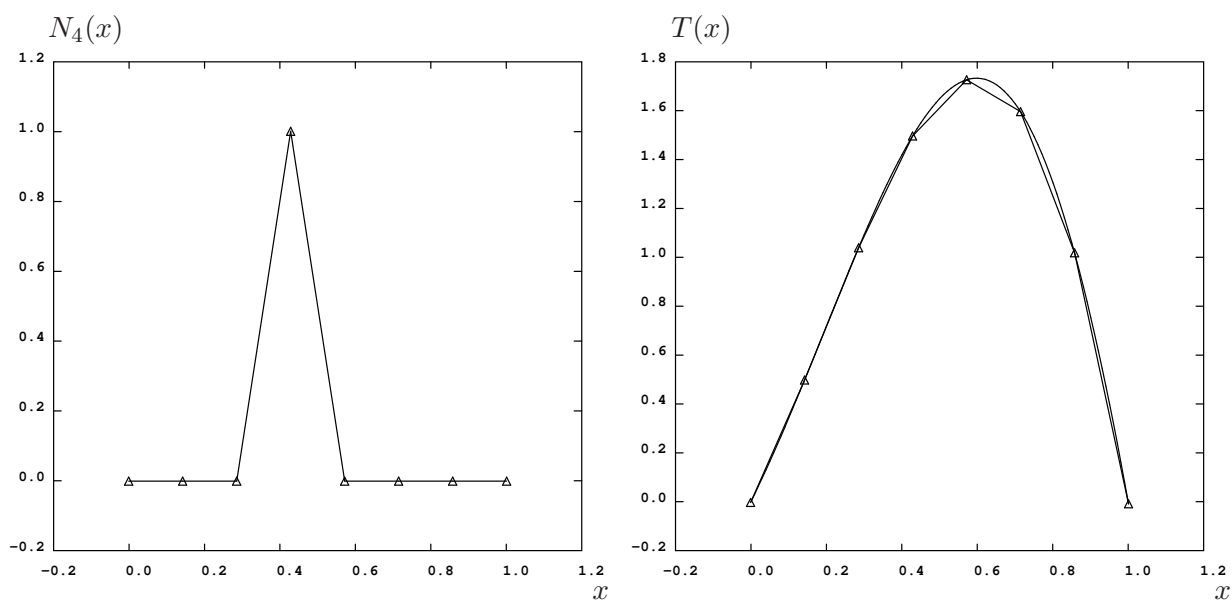


FIG. 3.3: Exemples de fonctions de l'espace W_1 en 1D. Gauche : la fonction de base N_4 , fonction chapeau associé au 4^e nœud du maillage. Droite : une fonction T (—) et son interpolé $T_h \in W_1$ (Δ).

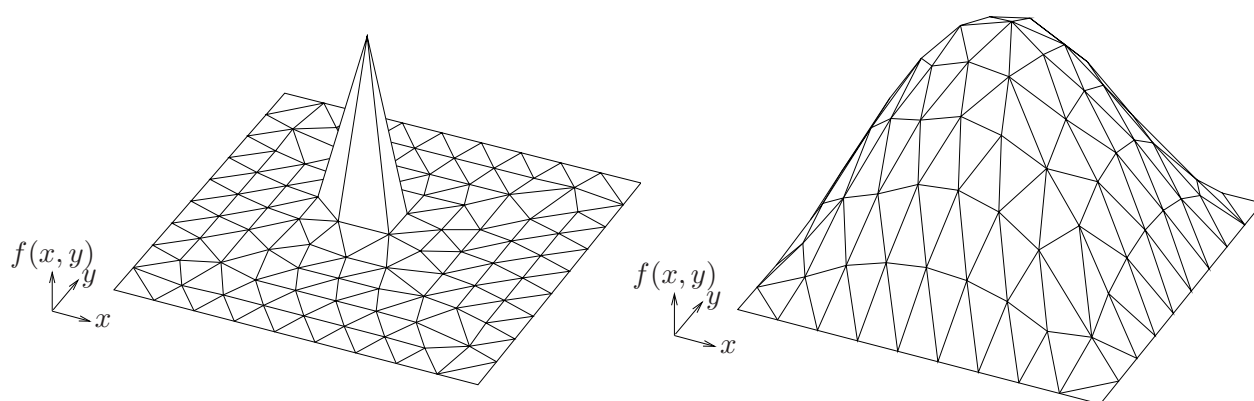


FIG. 3.4: Exemples de fonctions de l'espace W_1 en 2D. Gauche : une fonction de base N_j , fonction indicatrice du j^e nœud. Droite : une fonction $T_h \in W_1$.

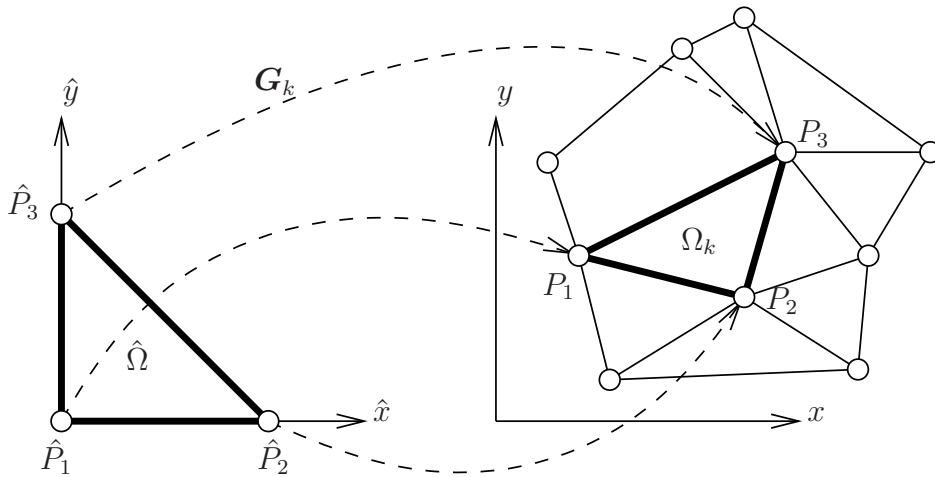


FIG. 3.5: Passage de l'élément de référence $\hat{\Omega}$ à un élément réel Ω_k par la transformation géométrique \mathbf{G}_k

La *matrice de masse* \mathbf{M} n'est donc pas diagonale, ce qui a quelques inconvénients : par exemple, même avec une discrétisation en temps explicite, il y aura un système linéaire impliquant la matrice masse à résoudre à chaque pas de temps (cf. chapitre 5). On utilise alors quelquefois des techniques de diagonalisation de la matrice masse (à utiliser avec précaution), qui sortent du cadre de ce cours.

3.4 Éléments de référence

Prenons comme exemple d'intégrale à calculer, celle associée à $\int_{\Omega} \mathbf{u} \cdot \nabla T_h \, d\Omega$:

$$\int_{\Omega} \mathbf{u} \cdot \nabla N_i N_j \, d\Omega = \sum_k \int_{\Omega_k} \mathbf{u} \cdot \nabla N_i N_j \, d\Omega_k \quad (3.11)$$

On s'aperçoit vite qu'il est plus facile de calculer les N_i , ainsi que les intégrales, sur chaque élément Ω_k , sur un domaine de référence où le système de coordonnées est fixe, orthogonal, et où les éléments sont réguliers (bord droits). Pour se ramener à un tel élément de référence $\hat{\Omega}$, on utilise une transformation géométrique \mathbf{G}_k , qui fait correspondre les points de $\hat{\Omega}$ aux points de Ω_k , comme sur la figure 3.5 :

$$\mathbf{G}_k : \hat{\mathbf{x}} \rightarrow \mathbf{x} \quad (3.12)$$

En supposant \mathbf{G}_k bijective (au moins sur l'intérieur de $\hat{\Omega}$), on peut associer à toute fonction à valeurs scalaires f , définie sur l'élément réel Ω_k , une fonction "chapeau" correspondante \hat{f} , définie sur l'élément de référence $\hat{\Omega}$:

$$\hat{f}(\hat{\mathbf{x}}) = f(\mathbf{G}_k(\hat{\mathbf{x}})) \quad (3.13)$$

En particulier, pour les fonctions de base :

$$\hat{N}_i(\hat{\mathbf{x}}) = N_i(\mathbf{G}_k(\hat{\mathbf{x}})) \quad (3.14)$$

Les transformations géométriques \mathbf{G}_k peuvent être choisies simplement, en les définissant à partir des fonctions de base de référence :

$$\mathbf{G}_k(\hat{\mathbf{x}}) = \sum_{i=1}^N \mathbf{x}_{P_i} \hat{N}_i(\hat{\mathbf{x}}) \quad (3.15)$$

où N est le nombre de points de Ω_k et où les \mathbf{x}_{P_i} sont les coordonnées des points P_i . Ceci est dû au fait que, comme pour les fonctions de base de l'espace réel N_i , les fonctions de base de l'espace de référence \hat{N}_i vérifient :

$$\hat{N}_i(\hat{\mathbf{x}}_{P_j}) = \delta_{ij} \quad (3.16)$$

La transformation des gradients fait intervenir la matrice jacobienne \mathbf{G} de la transformation géométrique \mathbf{G}_k . En effet :

$$\frac{\partial \hat{f}}{\partial \hat{x}_j} = \sum_i \frac{\partial f}{\partial x_i} \frac{\partial (\mathbf{G}_k)_i}{\partial \hat{x}_j} = \frac{\partial f}{\partial x_i} \mathbf{G}_{ij} \quad (3.17)$$

ou écrit plus succinctement :

$$\hat{\nabla} \hat{f} = \mathbf{G}^t \nabla f \quad (3.18)$$

Ceci est une généralisation de la formule de dérivation composée : $(f \circ g)' = f' \circ g \times g'$. Finalement, l'intégrale ramenée sur l'élément de référence devient :

$$\int_{\Omega_k} \mathbf{u} \cdot \nabla N_i N_j \, d\Omega_k = \int_{\hat{\Omega}} \hat{\mathbf{u}} \cdot (\mathbf{G}^{-t} \hat{\nabla} \hat{N}_i) \hat{N}_j \, \det \mathbf{G} \, d\hat{\Omega} \quad (3.19)$$

On voit que l'on a bien séparé les informations qui peuvent être calculées une fois pour toutes (les fonctions de base de référence \hat{N}_i) et celles qui vont changer pour chaque élément Ω_k (la matrice jacobienne \mathbf{G}).

3.5 Formules de quadrature

Une fois les intégrales exprimées sur l'élément de référence, il s'agit de les évaluer. Ceci peut se faire de manière analytique exacte dans les cas simples, mais le plus souvent, on utilise des formules de quadrature pour calculer les intégrales :

$$\int_{\hat{\Omega}} \hat{f}(\hat{\mathbf{x}}) \, d\hat{\Omega} \approx \sum_{i=1}^r w_i \hat{f}(\hat{\mathbf{x}}_{\hat{Q}_i}) \quad (3.20)$$

Ici, \hat{Q}_i sont des points d'évaluation de la fonction sur l'élément de référence (points d'intégration), $\hat{\mathbf{x}}_{\hat{Q}_i}$ leurs coordonnées et w_i sont les poids associés.

Vous connaissez sans doute de telles formules de quadrature pour approcher des intégrales en une dimension d'espace : méthode des rectangles, des trapèzes ou méthode dite de Simpson.

Toutefois, les formules de quadrature les plus utilisées sont celles dites *de Gauss*¹, qui permettent d'avoir la meilleure précision possible (elles intègrent exactement tous les polynômes jusqu'à un certain ordre sur le domaine considéré) avec le nombre minimum de points d'intégration².

¹Les points d'intégration de ces formules sont alors appelés points de Gauss.

²Déterminer de telles formules est un problème ouvert en dimension d'espace plus grande que 1.

3.6 Résumé

On vient de présenter un résumé rapide de la construction d'une discrétisation d'un problème par les méthodes des éléments finis. On voit que la construction elle-même de la méthode ne fait intervenir que des outils de base très simple : interpolation linéaire (ou polynôme de Lagrange pour des éléments finis d'ordre plus élevé), formules de changement de variable, intégration par parties, dérivation des fonctions composées et formules de quadrature.

Les difficultés arrivent ensuite du fait que le problème continu, comme discret, n'est pas forcément bien posé. L'étude rigoureuse du caractère bien posé des problèmes continus est le domaine privilégié de *l'analyse fonctionnelle*. En ce qui concerne les problèmes discrets, l'analyse fonctionnelle est également utile, ainsi que des techniques plus algébriques : analyse en modes propres. . . Pour notre part, nous allons nous contenter de montrer dans les chapitres suivants, sur des exemples pratiques, l'apparition des problèmes, ainsi que les manières les plus courantes de les circonvenir.

Chapitre 4

Convection-diffusion et décentrement

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \boxed{(\nabla \mathbf{u}) \cdot \mathbf{u}} &= -\nabla p^* + \boxed{\nu \Delta \mathbf{u}} + \mathbf{s}_u \\ \nabla \cdot \mathbf{u} &= 0 \\ \frac{\partial T}{\partial t} + \boxed{\mathbf{u} \cdot \nabla T} &= \boxed{\alpha \Delta T} + s_T \end{aligned}$$

Nous avons vu au chapitre précédent comment discrétiser une EDP quelconque par la méthode des éléments finis. Nous allons maintenant regarder ce qu'il en est de la convergence de cette méthode sur l'équation de convection-diffusion. On montrera qu'il y a nécessité de *décentrer* le schéma éléments finis pour obtenir la convergence sur une équation de convection pure et pour limiter les oscillations de la solution discrète sur une équation de convection-diffusion lorsque la convection est dominante.

4.1 Problème modèle

Reprenons notre problème modèle de convection-diffusion (3.1), cette fois-ci en dimension 1 sur le segment $[0, L]$ avec conditions aux limites de Dirichlet :

$$\begin{cases} u \frac{\partial T}{\partial x} - \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = 0 \\ T|_{x=0} = 0 \\ T|_{x=L} = 1 \end{cases} \quad (4.1)$$

La solution exacte de ce problème est une exponentielle croissante :

$$T(x) = \frac{1 - \exp \frac{xu}{\alpha}}{1 - \exp \frac{Lu}{\alpha}} \quad (4.2)$$

On reconnaît au dénominateur le nombre de *Péclet* basé sur la longueur du domaine : $Pe_L = \frac{Lu}{\alpha}$. Lorsque le nombre de Péclet est petit, la solution est quasiment une droite. Lorsque le nombre de Péclet est grand, la solution est quasiment nulle, sauf près du bord droit où la pente est très forte afin de satisfaire la condition à la limite $T|_{x=L} = 1$ (voir figure 4.1).

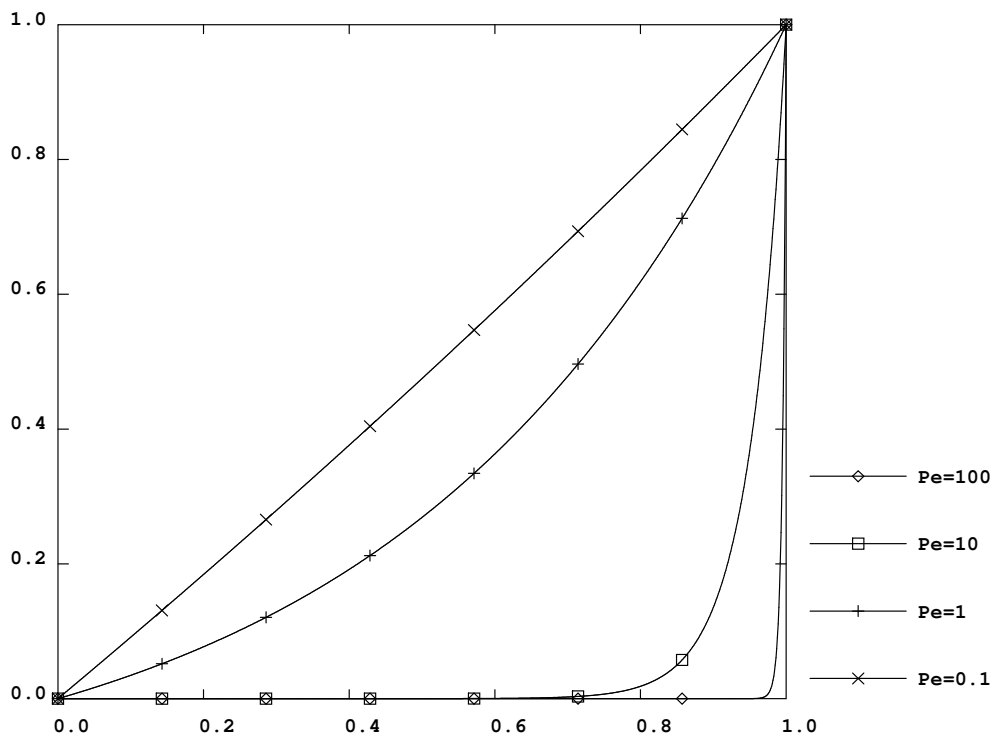


FIG. 4.1: Solution exacte $T(x)$ du problème (4.1) en fonction du nombre de Péclet Pe_L .

4.2 Discrétisation spatiale centrée

4.2.1 Equivalence des discrétisations DF centrées et EF

Méthode des différences finies (DF) centrées

Pour discrétiser le problème (4.1), utilisons une méthode de différences finies centrées d'ordre 2 à pas constant en espace Δx . En un certain point i , la discrétisation du problème modèle donne :

$$u \frac{T_{i+1} - T_{i-1}}{2\Delta x} - \alpha \frac{T_{i+1} - 2T_i + T_{i-1}}{\Delta x^2} = 0 \quad (4.3)$$

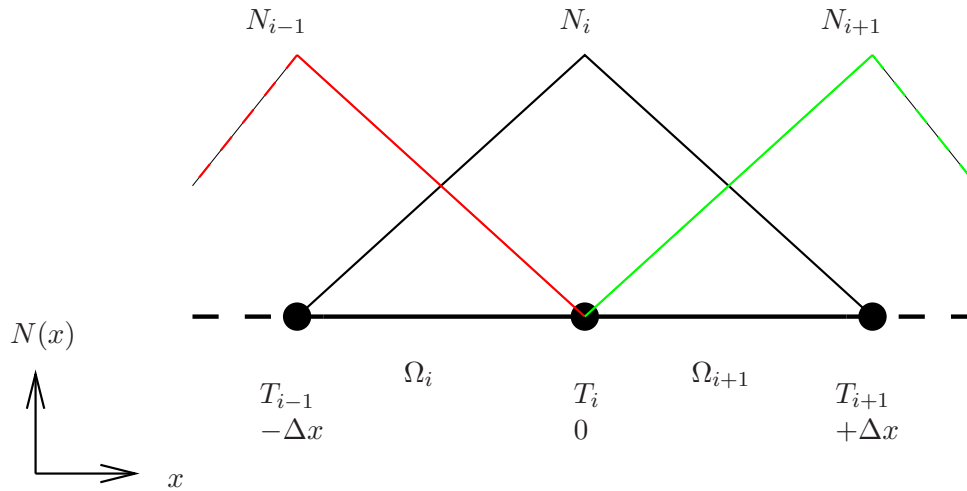
Nous savons que cette discrétisation centrée du problème peut produire des solutions *oscillantes* (cf. [DP00]).

Exemple à 3 points

Pour s'en convaincre, regardons ce qui se passe si nous restreignons la discrétisation à deux éléments ($\Delta x = L/2$). On a alors :

$$\begin{cases} T_3 = 1 & \text{et} & T_1 = 0 \\ T_3 - T_1 - \frac{2\alpha}{u\Delta x} (T_3 - 2T_2 + T_1) = 0 \end{cases} \Rightarrow T_2 = \frac{1 - Pe_{\Delta x}}{2} \quad (4.4)$$

où $Pe_{\Delta x}$ est le nombre de *Péclet de maille*, calculé avec la taille de maille locale. On voit que, lorsque $Pe_{\Delta x} \rightarrow \infty$, alors $T_2 \rightarrow -\infty$. En particulier, dès que $Pe_{\Delta x} > 1$, $T_2 < 0$, hors des bornes imposées par les conditions aux limites, soit $[0, 1]$.

FIG. 4.2: Fonctions de base autour du point i

On reconnaît l'importante condition (suffisante) pour ne pas avoir d'oscillations :

$$Pe_{\Delta x} \leq 1 \Rightarrow \Delta x \leq \frac{2\alpha}{u} \quad (4.5)$$

Méthode des éléments finis (EF)

Malheureusement, la méthode des éléments finis appliquée à ce même problème modèle conduit à un schéma identique à celui obtenu par différences finies centrées.

Montrons-le sur le terme convectif. Au nœud i , les intégrales à calculer sont de la forme :

$$\int_{\Omega} \left(\sum_{j=1}^n u T_j \frac{\partial N_j}{\partial x} \right) N_i \, d\Omega = I_i \quad (4.6)$$

Cette intégrale a des contributions non nulles pour $j = \{i-1, i, i+1\}$ sur les éléments Ω_i et Ω_{i+1} (cf. schéma 4.2) :

$$I_i = \left\{ \begin{array}{l} \int_{\Omega_i} u T_{i-1} \frac{\partial N_{i-1}}{\partial x} N_i \, d\Omega_i = u T_{i-1} \left(-\frac{1}{\Delta x} \right) \frac{1}{2} \Delta x \\ + \int_{\Omega_i} u T_i \frac{\partial N_i}{\partial x} N_i \, d\Omega_i = u T_i \left(+\frac{1}{\Delta x} \right) \frac{1}{2} \Delta x \\ + \int_{\Omega_{i+1}} u T_i \frac{\partial N_i}{\partial x} N_i \, d\Omega_{i+1} = u T_i \left(-\frac{1}{\Delta x} \right) \frac{1}{2} \Delta x \\ + \int_{\Omega_{i+1}} u T_{i+1} \frac{\partial N_{i+1}}{\partial x} N_i \, d\Omega_{i+1} = u T_{i+1} \left(+\frac{1}{\Delta x} \right) \frac{1}{2} \Delta x \end{array} \right\} = u \frac{T_{i+1} - T_{i-1}}{2} \quad (4.7)$$

Ce terme convectif est bien identique à celui obtenu en différences finies à l'équation (4.3) au facteur Δx près qui provient de l'intégration.

Exercice 1 Montrer que la discrétisation par éléments finis du terme diffusif est identique à celle obtenue en différences finies centrées en 1D sur maillage régulier.

Exercice 2 Refaire l'exemple à 3 points en discrétisant l'intervalle $[0, L]$ avec un seul élément fini quadratique.

```

1  Peclet = 10. ;
   typdec = 'CENTREE' ;
   typdec = 'SUPG' ;
   *
   rv = 'EQEX'
       'OPTI' 'EF' 'IMPL' typdec
       'ZONE' $mt 'OPER' 'KONV' 1. 'UN' 'ALF' 'INCO' 'TN'
       'OPTI' 'EF' 'IMPL' 'CENTREE'
       'ZONE' $mt 'OPER' 'LAPN' 'ALF' 'INCO' 'TN'
10  'CLIM' gau 'TN' 'TIMP' 0.
    'CLIM' dro 'TN' 'TIMP' 1. ;
   *
   rv . 'INCO' = 'TABLE' 'INCO' ;
   rv . 'INCO' . 'UN' = 'KCHT' $mt 'VECT' 'SOMMET' (1. 0.) ;
   rv . 'INCO' . 'ALF' = 'KCHT' $mt 'SCAL' 'CENTRE' ('/' 0.5 Peclet) ;
   rv . 'INCO' . 'TN' = 'KCHT' $mt 'SCAL' 'SOMMET' 0. ;
   *
   EXEC rv ;

```

Listing 4.1: Jeu de donnée convdif1d.dgibi correspondant au problème (4.3)

4.2.2 Résultats numériques

Montrons sur le problème modèle les comportements typiquement rencontrés. La partie significative du jeu de donnée en langage Gibiane, compris par Cast3M, traduisant le problème (4.1) est donnée sur le listing 4.1. Nous avons choisi comme paramètres :

$$\begin{cases} L = 1 \\ u = 1 \\ \alpha = 0.05 \end{cases} \Rightarrow Pe_L = 10 \quad (4.8)$$

En choisissant de discrétiser spatialement avec un maillage régulier de 6 mailles, on obtient le résultat illustré sur la figure 4.3. La solution exacte est en trait plein, la solution numérique, en pointillés, est oscillante. Notons que dans ce cas, le Péclet de maille vaut : $Pe_{\Delta x} = Pe_L/6 \approx 1.7 > 1$. La figure suivante 4.4 montre ce qui se passe si on raffine le maillage à 10 (resp. 40) mailles correspondant à un Péclet de maille $Pe_{\Delta x}$ de 1 (resp. 0.25). La solution discrète se rapproche de la solution exacte et n'oscille plus. En pratique, sur des cas réalistes, la condition sur le Péclet de maille (4.5) $Pe_{\Delta x} < 1$ est très restrictive. Par exemple, pour de l'air à 300 K, $\alpha = 2.25 \cdot 10^{-5} m^2.s^{-1}$, en choisissant comme échelle caractéristique $u = 1 m.s^{-1}$ et $L = 1 m$, on obtient $Pe_L \approx 2 \cdot 10^4$. Il n'est pas encore possible de mettre un tel nombre de mailles par direction d'espace avec nos ordinateurs.

Notons toutefois que la condition (4.5) est une condition suffisante mais nullement nécessaire : la figure 4.5 (gauche) montre qu'il est possible, avec 6 mailles, c'est-à-dire en ne respectant pas la condition (4.5) d'avoir une solution numérique convenable. Ici, nous avons *adapté* le maillage à la solution cherchée. Les méthodes d'adaptation de maillage sont une alternative intéressante pour tenter de limiter les coûts de calcul, elles ont toutefois pour principal inconvénient d'augmenter considérablement la complexité du problème à résoudre puisque le maillage devient, lui aussi, une inconnue du problème.

Avec un maillage "mal" adapté, nous avons la situation représentée figure 4.5 (droite), qui est aussi mauvaise que sans adaptation.

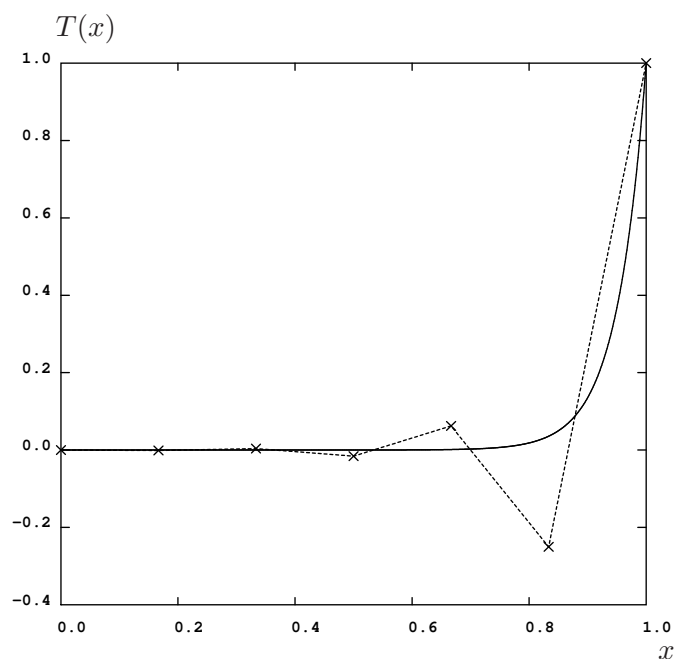


FIG. 4.3: Problème (4.1)-(4.8) avec $Pe_L = 10$. Maillage régulier de 6 mailles. — : solution exacte $T(x)$. × : solution numérique $T_h(x)$.

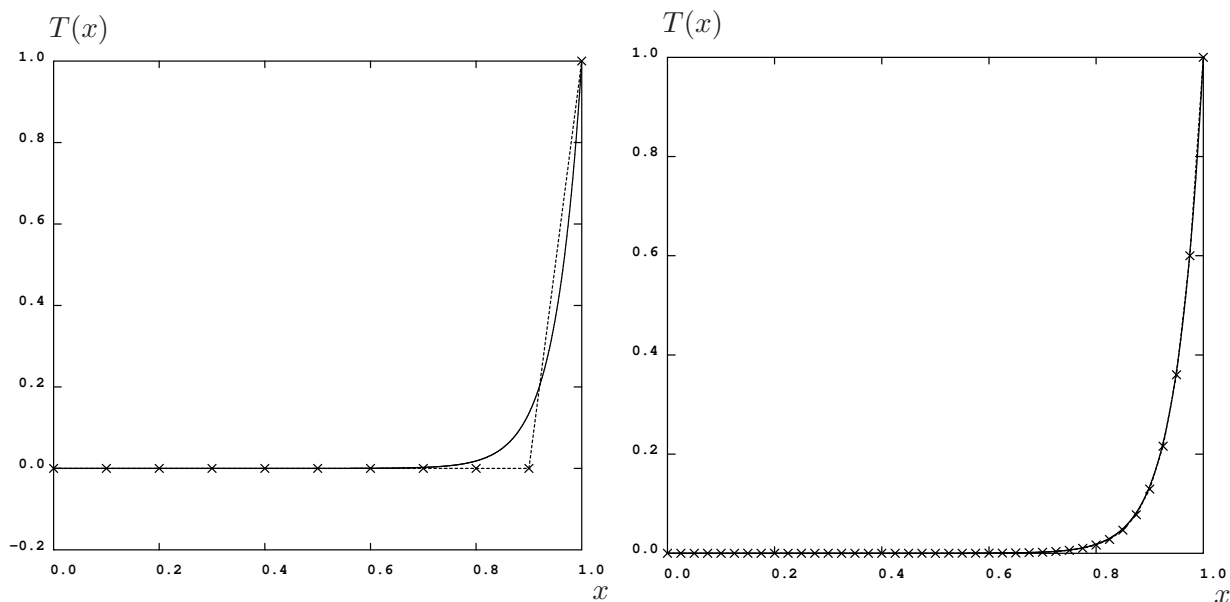


FIG. 4.4: Problème (4.1)-(4.8) avec $Pe_L = 10$. Gauche : maillage régulier de 10 mailles. Droite : maillage régulier de 40 mailles. — : solution exacte $T(x)$. × : solution numérique $T_h(x)$.

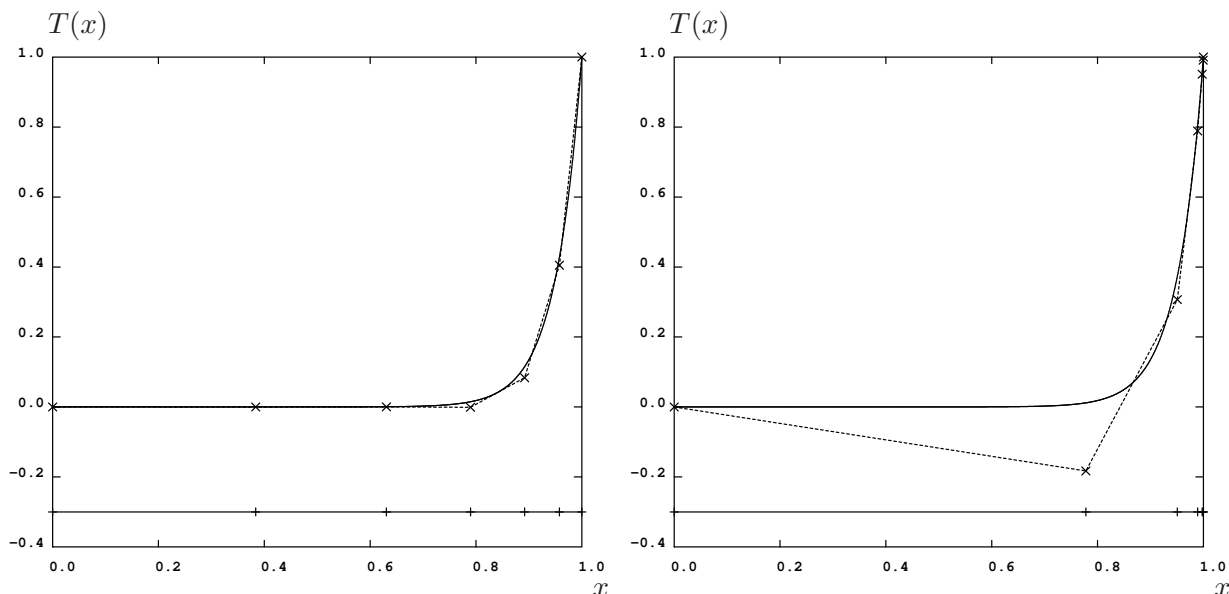


FIG. 4.5: Problème (4.1)-(4.8) avec $Pe_L = 10$. Maillage de 6 mailles raffiné dans la zone de forte variation de la solution. Gauche : correctement raffiné. Droite : “trop” raffiné. — : solution exacte. × : solution numérique $T_h(x)$. + : points du maillage.

En pratique, on préfère souvent utiliser des méthodes qui ont des contraintes de stabilité moins strictes, bien qu’ayant un ordre de précision moins élevé : les méthodes dites *décentrées*.

4.3 Discrétisation spatiale décentrée

Reprenons la discrétisation du problème modèle (4.1) par la méthode des différences finies à pas constant en espace Δx . Cette fois-ci, nous gardons la discrétisation *centrée* d’ordre 2 pour le terme diffusif mais, pour le terme convectif, nous utilisons une discrétisation *décentrée amont*, qui est d’ordre 1 (nous supposons $u \geq 0$) :

$$u \frac{T_i - T_{i-1}}{\Delta x} - \alpha \frac{T_{i+1} - 2T_i + T_{i-1}}{\Delta x^2} = 0 \quad (4.9)$$

Cette discrétisation du problème ne produit pas d’oscillation. Pour s’en convaincre, restreignons la discrétisation à deux éléments ($\Delta x = L/2$). On a alors :

$$\begin{cases} T_3 = 1 & \text{et} & T_1 = 0 \\ T_2 - T_1 - \frac{\alpha}{u\Delta x} (T_3 - 2T_2 + T_1) = 0 \end{cases} \Rightarrow T_2 = \frac{1}{2(1 + Pe_{\Delta x})} \quad (4.10)$$

Cette fois-ci, lorsque $Pe_{\Delta x} \rightarrow \infty$, $T_2 \rightarrow 0$ et, pour tout Péclet, on a : $0 < T_2 < 1$, ce qui est satisfaisant.

Si on regarde de plus près la différence entre la discrétisation centrée et la discrétisation décentrée amont du terme de convection, avec u de signe quelconque, on observe :

$$\begin{aligned} \left[u \frac{\partial T}{\partial x} \right]_{\text{décentrée amont}} - \left[u \frac{\partial T}{\partial x} \right]_{\text{centrée}} &= -\frac{\Delta x |u|}{2} \frac{T_{i+1} - 2T_i + T_{i-1}}{\Delta x^2} \\ &= \left[\frac{\Delta x |u|}{2} \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \right]_{\text{centrée}} \end{aligned} \quad (4.11)$$

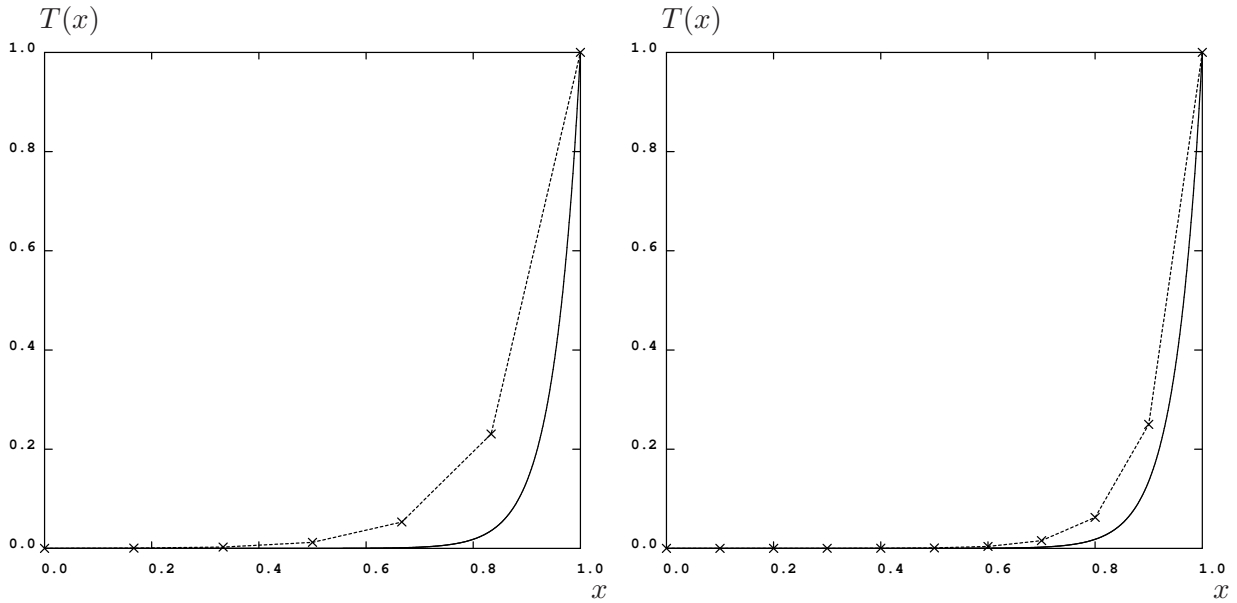


FIG. 4.6: Problème (4.1)-(4.8) avec $Pe_L = 10$. Méthode des éléments finis + diffusion artificielle $\tilde{\alpha}$ (4.11). Gauche : maillage régulier de 6 éléments ; Droite : maillage régulier de 10 éléments. — : solution exacte. × : solution numérique.

Ceci signifie que la discrétisation décentrée du terme convectif est égale à la discrétisation centrée du terme convectif auquel on a ajouté un terme de *diffusion numérique*, dont le coefficient de diffusivité est égal à : $\tilde{\alpha} = \frac{\Delta x |u|}{2}$. On remarque que ce coefficient tend vers 0 lorsque $\Delta x \rightarrow 0$: les discrétisations centrées et décentrées sont consistantes.

Cette idée est très importante et est à la base des méthodes de *diffusion artificielle* utilisées en éléments finis. Observons les résultats obtenus avec cette méthode de diffusion artificielle sur notre problème modèle, pour un maillage de 6 et 10 mailles, sur la figure 4.6. Comparés aux résultats précédents (figures 4.3 et 4.4 (gauche)), on observe l'absence d'oscillations, même si, pour le cas à 10 éléments, la solution avec diffusion artificielle est moins précise (gradient à la paroi droite plus faible).

4.4 Extension multidimensionnelle

4.4.1 Problème modèle convectif 2D

Essayons maintenant d'étendre l'idée de diffusion artificielle au cas multidimensionnel. Nous nous intéressons au problème 2D de transport pur suivant :

$$\begin{cases} \mathbf{u} \cdot \nabla T = 0 & \text{sur } \Omega = [0, L] \times [0, L] \\ T|_{y=0} = f(x) \\ T|_{x=0} = f(0) \end{cases} \quad (4.12)$$

où \mathbf{u} est un vecteur constant donné. Ceci correspond au schéma 4.7. En choisissant les paramètres :

$$\begin{cases} L = 1.5 \\ \|\mathbf{u}\|^2 = 1 \\ \theta = 10^\circ \\ f(x) = \frac{(\tanh((x-0.5)/-0.15))+1}{2} \end{cases} \quad (4.13)$$

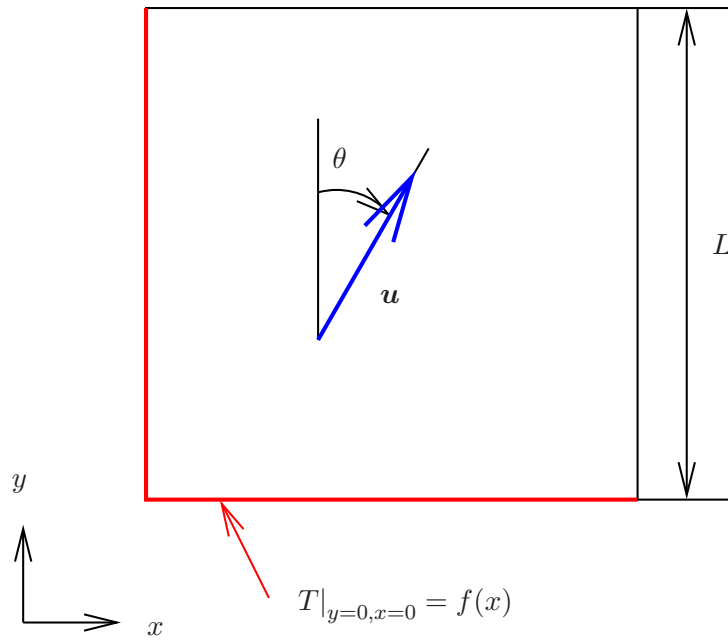


FIG. 4.7: Problème modèle convectif 2D (4.12).

Ce problème est strictement hyperbolique, on s'attend à ce que la fonction définie sur les bords où la vitesse est rentrante soit simplement *transportée* dans la direction définie par \mathbf{u} sur l'ensemble du domaine. En effet, $\mathbf{u} \cdot \nabla T = 0$ signifie que la dérivée de T est nulle (T ne varie pas) dans la direction de \mathbf{u} .

La traduction en Gibiane du problème (4.12) est donnée sur le listing 4.2.

Avec la méthode des éléments finis standard, on obtient le résultat de la figure 4.8 où la solution présente des oscillations de très grande amplitude.

Ceci traduit le fait que le problème discret est mal posé et que la matrice associée n'est pas inversible. Toutefois, en arithmétique à virgule flottante, la matrice associée n'est en général pas *exactement* singulière, à cause de la précision limitée de la représentation des nombres réels. Mais comme elle en est très proche, on obtient ces oscillations très grandes de la solution.

4.4.2 Méthode de diffusion artificielle

La *première* idée consiste à faire comme en une dimension d'espace : on rajoute le terme de diffusion artificielle à notre équation. L'équation que l'on discrétise devient :

$$\mathbf{u} \cdot \nabla T - \operatorname{div} \frac{h_{\mathbf{u}} |\mathbf{u}|}{2} \nabla T = 0 \quad (4.14)$$

où $h_{\mathbf{u}}$ est une taille de maille locale selon la direction \mathbf{u} et $\tilde{\alpha} = \frac{h_{\mathbf{u}} |\mathbf{u}|}{2}$ est le coefficient de diffusivité numérique. Le résultat obtenu est illustré à la figure 4.9. Sur la partie gauche, on observe l'absence d'oscillations. Par contre, en comparant les profils de la fonction transportée en entrée et en sortie, à droite de la figure, on observe que la méthode a notablement *diffusé* le profil au lieu de seulement le transporter. Cela n'est pas satisfaisant.


```

1  angle = 10. ;
   typdec = 'CENTREE' ; difart = 1.D-6 ; niter = 1 ; omeg = 1. ;
   * alfa = U dx / 2 Pem avec Peclet critique de maille = 1
   typdec = 'CENTREE' ; difart = 1. '/' (2 '*' nmail) ; niter=1 ; omeg=1. ;
   typdec = 'SUPG' ; difart = 0. ; niter = 1 ; omeg = 1. ;
   typdec = 'SUPGDC' ; difart = 0. ; niter = 15 ; omeg = 0.7 ;
   *
   rv = 'EQEX' 'NITER' niter 'OMEGA' omeg
       'OPTI' 'EF' 'IMPL' typdec
10  'ZONE' $mt 'OPER' 'KONV' 1. 'UN' 'ALF' 'INCO' 'TN'
       'OPTI' 'EF' 'IMPL' 'CENTREE'
       'ZONE' $mt 'OPER' 'LAPN' 'ALF' 'INCO' 'TN'
       'CLIM' mclim 'TN' 'TIMP' cclim
       ;
   rv . 'INCO' = 'TABLE' 'INCO' ;
   rv . 'INCO' . 'UN' = 'KCHT' $mt 'VECT' 'SOMMET'
                       (('SIN' angle) ('COS' angle)) ;
   rv . 'INCO' . 'ALF' = 'KCHT' $mt 'SCAL' 'CENTRE' difart ;
   rv . 'INCO' . 'TN' = 'KCHT' $mt 'SCAL' 'SOMMET' 0. ;
20  *
   EXEC rv ;

```

Listing 4.2: Jeu de donnée conv2d.dgibi correspondant au problème (4.12).

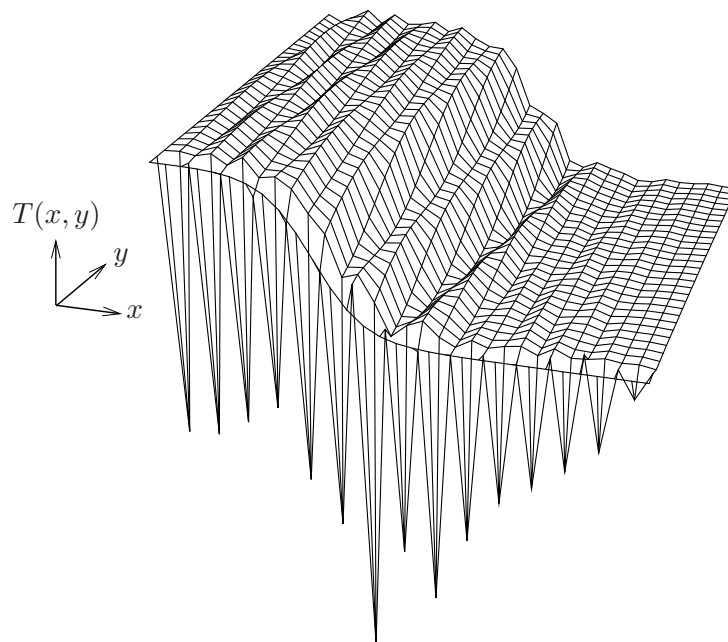


FIG. 4.8: Problème (4.12)–(4.13). Méthode des éléments finis standard (CENTREE).

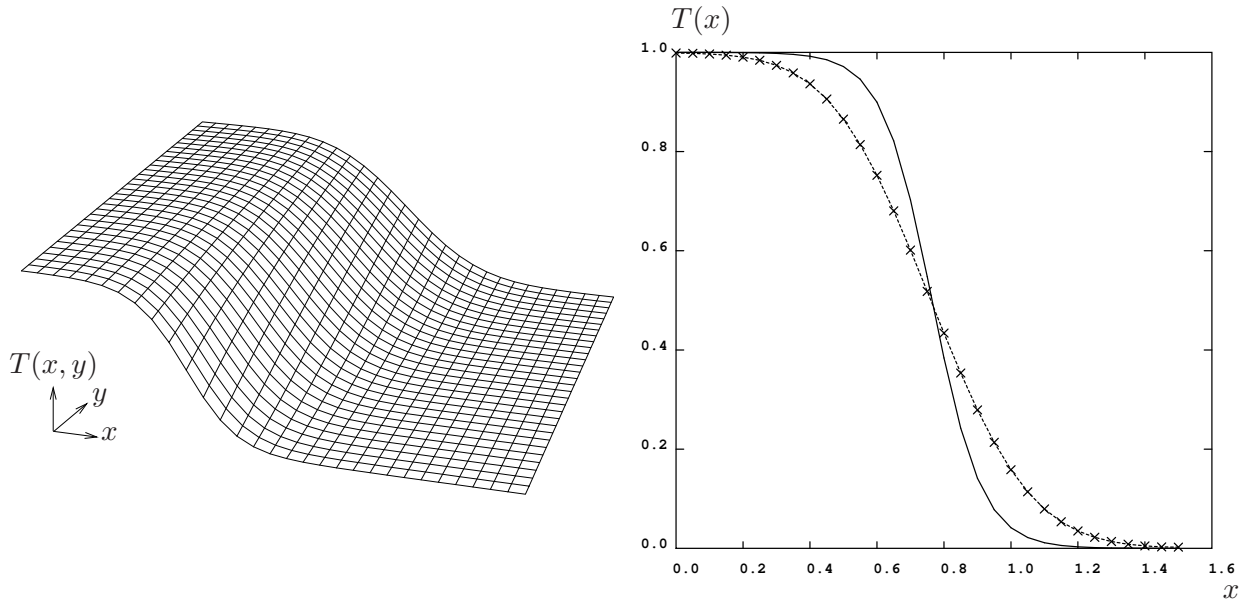


FIG. 4.9: Problème (4.12)–(4.13). Méthode des éléments finis standard + diffusion artificielle (4.14). Gauche : $T(x, y)$. Droite : profils de T en entrée $y = 0$ (—) et en sortie $y = 1$ (×).

4.4.3 Méthode de décentrement amont (SUPG)

La *deuxième* idée consiste à n'introduire de la diffusion numérique que dans la direction de la vitesse \mathbf{u} , le coefficient de diffusivité numérique $\tilde{\alpha}$ devient un tenseur d'ordre 2, noté \mathbf{A} . Le problème que l'on discrétise devient :

$$\mathbf{u} \cdot \nabla T - \operatorname{div} \mathbf{A} \nabla T = \mathbf{u} \cdot \nabla T - \operatorname{div} \frac{h_{\mathbf{u}} |\mathbf{u}|}{2} \frac{\mathbf{u} \otimes \mathbf{u}}{|\mathbf{u}|^2} \nabla T = 0 \quad (4.15)$$

Pourquoi la diffusion ne va-t-elle se faire que dans la direction de \mathbf{u} ? Cela se voit facilement en examinant les éléments principaux du tenseur $\frac{\mathbf{u} \otimes \mathbf{u}}{|\mathbf{u}|^2}$. En développant suivant les composantes d'une base cartésienne en dimension 2, on a :

$$\frac{\mathbf{u} \otimes \mathbf{u}}{|\mathbf{u}|^2} = \frac{1}{|\mathbf{u}|^2} \begin{pmatrix} u_x^2 & u_x u_y \\ u_y u_x & u_y^2 \end{pmatrix} \quad (4.16)$$

On vérifie aisément que ce tenseur a une seule valeur propre non nulle égale à 1 associée à \mathbf{u} comme vecteur propre. Le produit $\frac{\mathbf{u} \otimes \mathbf{u}}{|\mathbf{u}|^2} \nabla T$ ne va donc retenir que la partie de ∇T parallèle à \mathbf{u} .

Ceci est la généralisation correcte de la méthode décentrée amont (Streamline Upwind ou **SU** en anglais) en dimension d'espace supérieure à 1. Ces méthodes ont été popularisées par Hughes et al. [Hug87] au début des années 1980 sous le nom **SUPG** (Streamline Upwind Petrov Galerkin, c'est également le nom utilisé dans Cast3M) qui est une variante de la méthode **SU**. Un nombre impressionnant de publications ont été faites et continuent de se faire sur le sujet depuis.

Le résultat obtenu avec la méthode de décentrement amont est illustré en figure 4.10. À gauche, on observe l'absence d'oscillations et à droite que les profils en entrée et en sortie sont quasiment identiques.

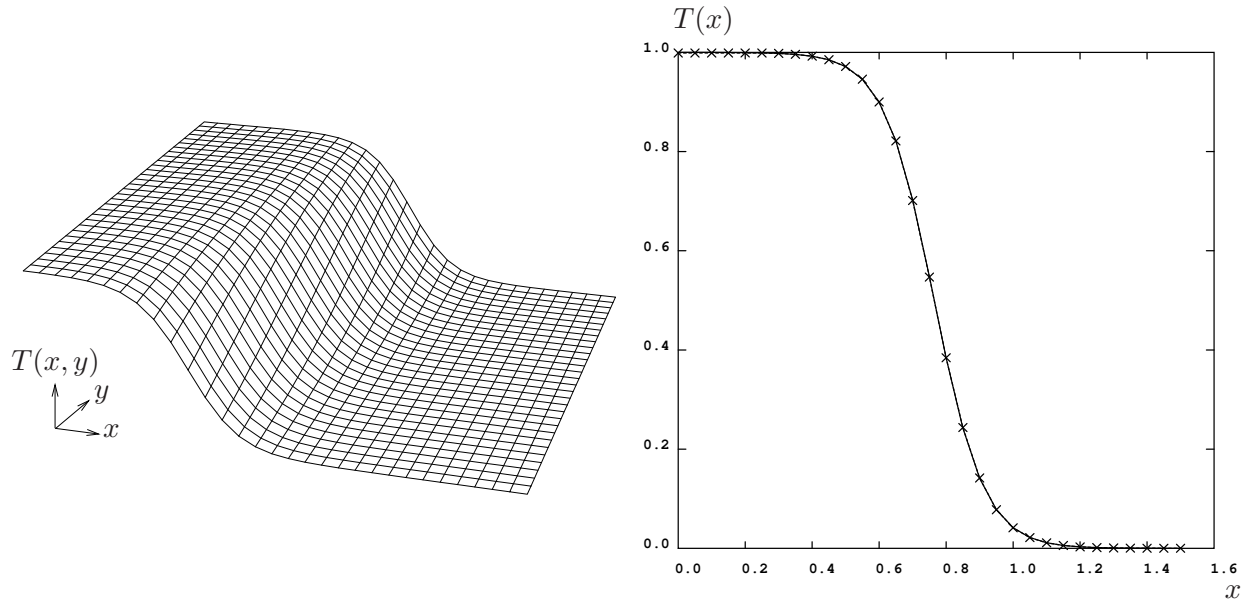


FIG. 4.10: Problème (4.12)–(4.13). Méthode des éléments finis standard + décentrement amont SUPG (4.16). Gauche : $T(x, y)$. Droite : profils de T en entrée $y = 0$ (—) et en sortie $y = 1$ (\times).

4.4.4 Préservation asymptotique de l'ordre de la méthode

Lorsqu'on s'intéresse au problème de convection-diffusion complet :

$$\mathbf{u} \cdot \nabla T - \operatorname{div} \alpha \nabla T = 0 \quad (4.17)$$

dont le problème de convection pure (4.12) est un cas particulier, un ultime raffinement de la méthode SUPG est le suivant : il consiste à multiplier le tenseur de diffusion numérique \mathbf{A} par un coefficient J dépendant du Péclet de maille $Pe_{h_u} = \frac{h_u u}{2\alpha}$. En effet, nous avons vu que le décentrement amont permet de gagner en *stabilité* au détriment de la *précision* : la discrétisation décentrée amont du terme convectif est d'ordre 1 en espace alors que la discrétisation centrée est d'ordre 2. L'idée est alors d'utiliser plutôt la méthode centrée si la condition de stabilité $Pe_{h_u} < 1$ est vérifiée et la méthode décentrée amont sinon. Le problème que l'on discrétise devient :

$$\begin{aligned} \mathbf{u} \cdot \nabla T - \operatorname{div} \mathbf{B}(Pe_{h_u}) \nabla T - \operatorname{div} \alpha \nabla T &= \mathbf{u} \cdot \nabla T - \operatorname{div} \frac{h_u |\mathbf{u}|}{2} J(Pe_{h_u}) \frac{\mathbf{u} \otimes \mathbf{u}}{|\mathbf{u}|^2} \nabla T \\ &- \operatorname{div} \alpha \nabla T = 0 \end{aligned} \quad (4.18)$$

où : $J(Pe) \rightarrow 1$ quand $Pe > 1$ et $J(Pe) \rightarrow 0$ quand $Pe \rightarrow 0$. La figure 4.11 illustre différents choix possibles de la fonction J effectués par différents auteurs.

4.5 Oscillations résiduelles

4.5.1 Phénomène de Gibbs

La méthode SUPG est-elle alors la panacée pour discrétiser les problèmes de convection-diffusion en éléments finis ? Pas tout à fait, comme on peut le voir sur la figure 4.12 qui

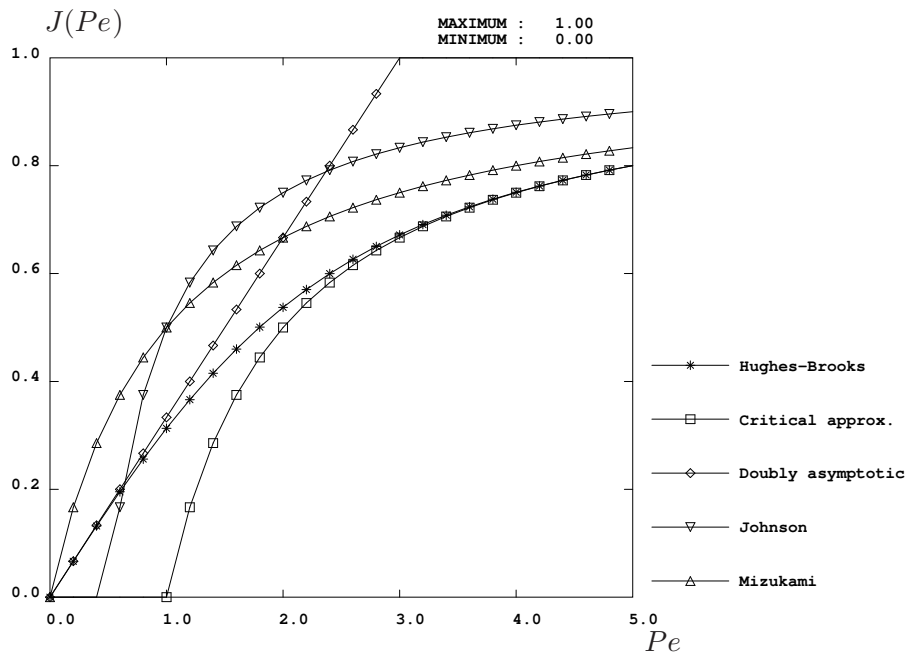


FIG. 4.11: Choix de la fonction $J(Pe)$ (coefficient multiplicateur du terme de diffusivité numérique dans (4.18)) par différents auteurs.

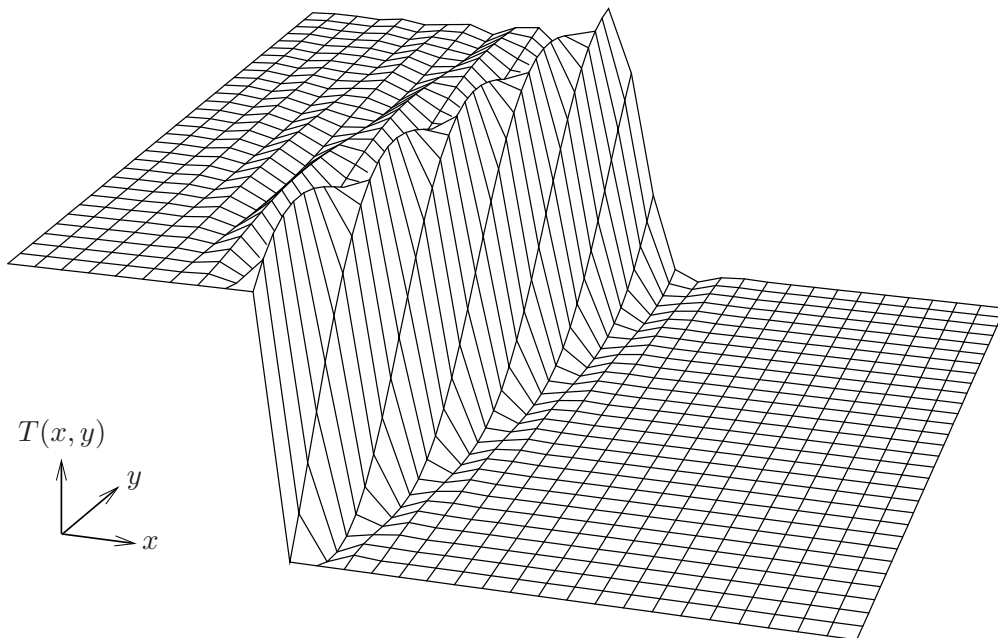


FIG. 4.12: Problème (4.12)–(4.19). Condition à la limite discontinue. Méthode des éléments finis standard + décentrement amont SUPG (4.15).

présente des oscillations résiduelles. Ici, le problème résolu est identique à (4.12) mais avec une condition à la limite moins régulière présentant un saut :

$$\begin{cases} L = 1.5 \\ \|\mathbf{u}\|^2 = 1 \\ \theta = 10^\circ \\ f(x) = 1 \quad \text{si } x < 0.5 \\ f(x) = 0 \quad \text{si } x \geq 0.5 \end{cases} \quad (4.19)$$

En fait, il ne s'agit pas d'une déficience propre à la méthode SUPG (nous verrons apparaître ces oscillations dans d'autres cas, par exemple aux sections 4.5.2 et 5.2) mais d'un problème d'approximation : nous essayons d'approcher une solution discontinue avec des fonctions continues. Cette approximation est oscillante : c'est le phénomène de *Gibbs*. Vous l'avez peut-être déjà rencontré : l'approximation d'une fonction créneau par des séries de Fourier oscille.

Dès lors, pourquoi ne pas abandonner la continuité pour approcher les solutions ? En éléments finis standard, nous ne pouvons pas abandonner la continuité car nous avons besoin de chercher les solutions dans $\mathcal{H}^1(\Omega)$ pour pouvoir discrétiser le Laplacien¹.

L'abandon de la continuité est l'approche choisie par les méthodes de *Volumes Finis* où les solutions sont généralement approchées de manière constante par maille (on calcule des moyennes des inconnues sur les mailles) ou par les méthodes des éléments finis *Galerkin Discontinues* (approximation polynômiale par maille non continue entre mailles). Toutefois, dans ces méthodes, dès que l'on a besoin du *gradient* des inconnues, par exemple, lorsque l'on a des termes diffusifs, se pose la question de l'approximation du gradient d'une fonction discontinue...

4.5.2 Approximation d'un choc

Nous allons regarder maintenant plus précisément le problème de l'approximation d'une fonction choc, présentant un saut. Nous avons vu que le théorème de Lax (section 3.2) nous laissait beaucoup de choix : celui des espaces de fonction, mais aussi celui des normes. Dans cette sous-section, nous allons garder le choix d'un espace de fonctions continues pour l'espace de discrétisation dans lequel on cherche une solution et regarder l'influence de la norme choisie pour approcher un choc.

Meilleure approximation d'une fonction donnée

Regardons tout d'abord le problème général de la recherche d'une meilleure approximation d'une fonction g donnée, en norme \mathcal{L}^2 :

$$\min_{T \in \mathcal{L}^2(\Omega)} A(T) = \min_{T \in \mathcal{L}^2(\Omega)} \int_{\Omega} \frac{1}{2} \|T - g\|^2 \, d\Omega \quad (4.20)$$

A priori, étant donnée la forme de la fonctionnelle A , il est légitime de requérir que T et g soient dans \mathcal{L}^2 . Comme au chapitre 2, on écrit la condition de minimisation :

$$\delta_U A(T) = \int_{\Omega} TU - gU \, d\Omega = 0 \quad \forall U \in \mathcal{L}^2(\Omega) \quad (4.21)$$

¹Le Laplacien n'est pas présent dans le problème (4.12) mais l'est dans son approximation par la méthode SUPG (4.15) !

La solution de ce problème est : $T = g$! Toutefois, lorsqu'on choisit T dans un espace discret de fonctions continues, alors que g est discontinue, cela n'est plus le cas car T et g vivent dans des espaces différents.

Une fois (4.21) discrétisée :

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} T_h N_i - g N_i \, d\Omega &= \sum_j T_j \left(\int_{\Omega} N_j N_i \, d\Omega \right) - \int_{\Omega} g N_i \, d\Omega \\ &= \sum_j T_j M_{ji} - g_i = 0 \quad \forall i \in \Omega \end{aligned} \quad (4.22)$$

On retrouve la matrice de masse M_{ji} dans le problème à résoudre. T_h est le meilleur représentant discret de g au sens de la norme \mathcal{L}^2 .

Meilleure approximation d'un choc par une fonction continue

Spécifions maintenant le problème d'approximation au cas du choc. Pour cela, on considère le problème suivant : soit $g(x)$ la fonction choc que l'on cherche à approcher :

$$\begin{cases} g(x) = 1 & \text{si } x > 1 \\ g(x) = 0 & \text{si } x < 1 \end{cases} \quad (4.23)$$

On cherche à approcher $g(x)$ par une fonction f continue la plus simple possible. On choisit donc $f_t(x)$ à un paramètre t , définie sur l'intervalle $\Omega = [0, 1]$, linéaire par morceaux et passant par les points $(0, 0)$, $(0.5, t)$ et $(1, 0.5)$ ². On a :

$$\begin{cases} f_t(x) = 2tx & \text{si } x \in [0, 0.5] \\ f_t(x) = (1 - 2t)x + (2t - 0.5) & \text{si } x \in [0.5, 1] \end{cases} \quad (4.24)$$

Le schéma 4.13 illustre le problème posé. Résolvons tout d'abord le problème de meilleure approximation en norme \mathcal{L}^2 :

$$\min_{t \in \mathbb{R}} I(t) = \min_{t \in \mathbb{R}} \int_{\Omega} (f_t - g)^2 \, d\Omega \quad (4.25)$$

Nous avons effectué la résolution de manière graphique en traçant $I(t)$ sur la figure 4.14. Le minimum de I est atteint pour $t = -0.25$, c'est-à-dire pour une fonction $f_{-0.25}$ qui est *oscillante*. Résolvons ensuite le problème de meilleure approximation en norme $\mathcal{L}^1(\Omega)$:

$$\min_{t \in \mathbb{R}} J(t) = \min_{t \in \mathbb{R}} \int_{\Omega} |f_t - g| \, d\Omega \quad (4.26)$$

$J(t)$ est également tracée sur la figure 4.14. Le minimum de J est atteint pour $t = 0$, c'est-à-dire pour une fonction f_0 qui est *monotone*. Ces résultats sont également valables si on discrétise le problème d'approximation avec plus de mailles (voir figure 4.15).

Une chose très importante à noter est que la fonctionnelle $J(t)$ atteint son minimum en un point où elle *n'est pas dérivable*. On ne pourra donc pas appliquer les techniques vues au chapitre 2, utilisant la dérivation fonctionnelle, pour trouver les minima de fonctionnelles utilisant la norme \mathcal{L}^1 : on entre là dans le domaine de l'*optimisation non différentiable*. La norme \mathcal{L}^1 n'admet pas de produit scalaire simple et on ne va pas pouvoir formuler de

²Ce dernier point est choisi pour raison de symétrie.

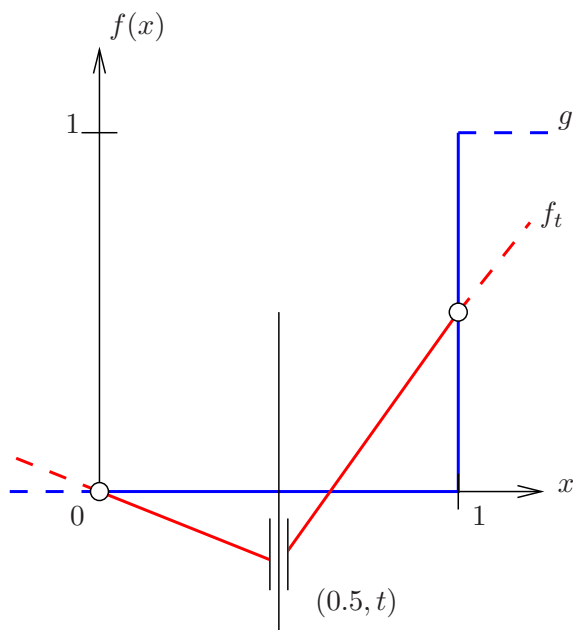


FIG. 4.13: Problème d'approximation d'une fonction choc g par une fonction continue f_t à un paramètre t .

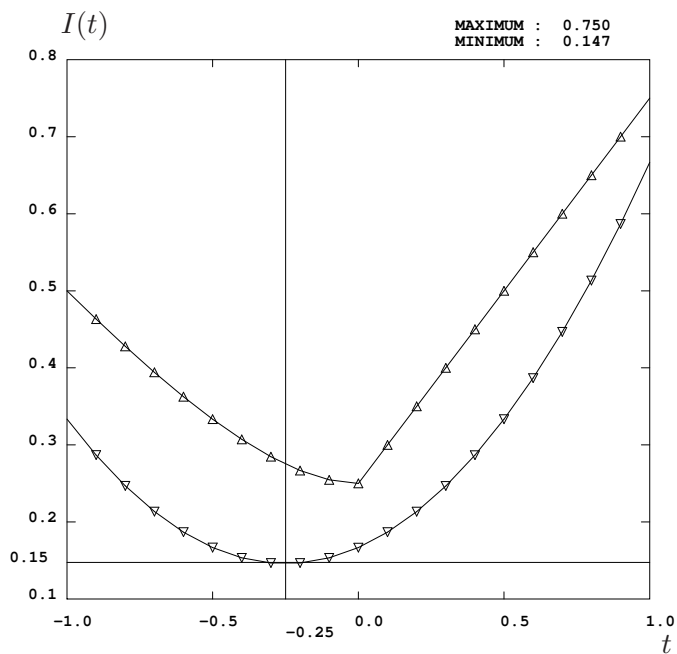


FIG. 4.14: Tracé des fonctionnelles $I(t) = \int_{\Omega} (f_t - g)^2 d\Omega$ (Norme \mathcal{L}^2 : ∇) et $J(t) = \int_{\Omega} |f_t - g| d\Omega$ (Norme $\mathcal{L}^1(\Omega)$: Δ).

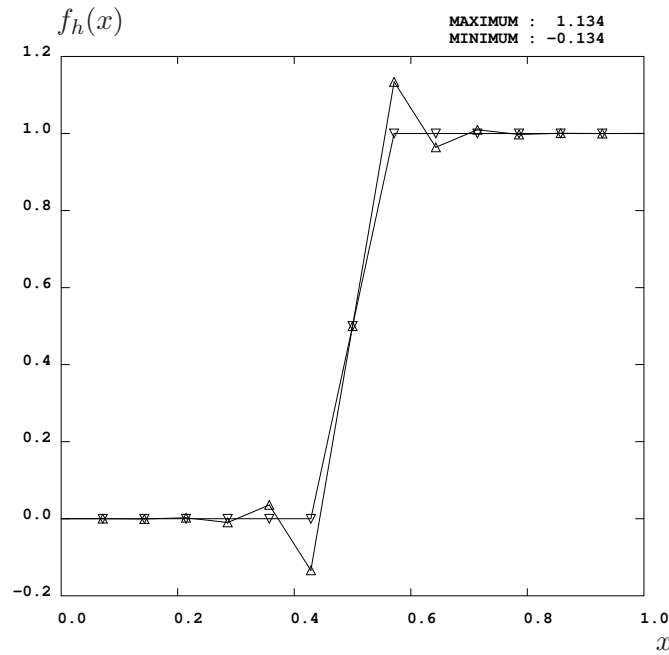


FIG. 4.15: Meilleure approximation d'un choc par une fonction discrète, continue, linéaire par morceaux, au sens des normes \mathcal{L}^1 (∇) et \mathcal{L}^2 (Δ).

méthode des résidus pondérés menant à un système linéaire à résoudre : le problème posé en norme \mathcal{L}^1 est *non linéaire*.

On peut néanmoins se ramener à un problème d'optimisation différentiable en *régularisant* la norme \mathcal{L}^1 à l'aide d'un "petit" paramètre ϵ :

$$\min_{t \in \mathbb{R}} K(t) = \min_{t \in \mathbb{R}} \int_{\Omega} \sqrt{(f_t - g)^2 + \epsilon} \, d\Omega \quad (4.27)$$

On peut à nouveau utiliser les techniques de l'optimisation différentiable mais le problème reste non linéaire.

Exercice 3 Reprendre le problème d'approximation du choc avec f_t en norme \mathcal{L}^1_ϵ et regarder l'influence du paramètre ϵ .

4.5.3 Théorème de Godunov

Les résultats trouvés pour le petit exemple précédent sont, en fait, assez généraux. On peut citer le théorème suivant, dû à Godunov :

Théorème 2 (Godunov) *Les schémas numériques linéaires pour résoudre les équations aux dérivées partielles, ayant la propriété de ne pas générer de nouveaux extrema (monotonie), ne sont au mieux que d'ordre 1.*

Dans notre exemple, nous utilisons des fonctions linéaires par morceaux, qui peuvent approcher les solutions à l'ordre 2, et la solution trouvée par un schéma linéaire (avec la norme \mathcal{L}^2) n'est pas monotone.

Nous avons tenu à évoquer ces problèmes d'approximation car il est des domaines où l'utilisation de la norme \mathcal{L}^1 s'impose et il faut absolument que les solutions trouvées n'oscillent pas hors des bornes : c'est notamment le cas en traitement d'image.

En mécanique des fluides, ces méthodes trouvent leur utilité dans certains problèmes, par exemple, pour l'approximation et le transport de front (méthodes de lignes de niveaux, en anglais *level set*, pour capturer des interfaces entre deux phases liquides immiscibles...). Pour les méthodes dites de *capture de choc*, on va souvent requérir une propriété liée à la monotonie : la propriété *TVD* (Total Variation Diminishing). La variation totale d'une fonction f différentiable est définie comme la norme \mathcal{L}^1 du gradient :

$$TV(f) = \int_{\Omega} |\nabla f| \, d\Omega \quad (4.28)$$

Nous avons déjà vu cette notion de variation totale en section 2.1.1 et montré qu'en 1D, elle permettait de sélectionner les fonctions monotones allant d'un point à un autre.

En ce qui nous concerne, nous resterons dans le cadre de la norme $\mathcal{L}^2(\Omega)$ pour des raisons pratiques : si les solutions obtenues peuvent osciller, elles sont simples à obtenir (résolution de systèmes linéaires) et vérifient de manière naturelle des conditions à la limite et des propriétés de conservation que nous décrirons amplement au chapitre 9.

Pour en savoir plus sur ces principes d'optimisation en norme \mathcal{L}^1 , on pourra se reporter à Strang [Str07].

4.6 Capture de choc : méthode SUPGDC

Pour tenter d'améliorer la méthode SUPG dans le cas où il y a présence de chocs (fortes variations de la solution, comme sur la figure 4.12), Hughes et al. [Hug87] proposent de rajouter un terme dit de capture de choc (DC : discontinuity capturing). C'est un terme de diffusion numérique qui agit dans la direction du gradient de la solution. On définit \mathbf{u}_{\parallel} , la projection de la vitesse transportante sur le gradient de la solution :

$$\mathbf{u}_{\parallel}(T) = \left(\frac{\mathbf{u} \cdot \nabla T}{|\nabla T|^2} \right) \nabla T \quad (4.29)$$

Le problème que l'on discrétise devient alors, avec la méthode SUPGDC :

$$\begin{aligned} \mathbf{u} \cdot \nabla T - \operatorname{div} \mathbf{B} \nabla T - \operatorname{div} \mathbf{C} \nabla T - \operatorname{div} \alpha \nabla T &= \mathbf{u} \cdot \nabla T \\ &- \operatorname{div} \frac{h_{\mathbf{u}} |\mathbf{u}|}{2} J(Pe_{h_{\mathbf{u}}}) \frac{\mathbf{u} \otimes \mathbf{u}}{|\mathbf{u}|^2} \nabla T \\ &- \operatorname{div} \frac{h_{\mathbf{u}_{\parallel}} |\mathbf{u}_{\parallel}|}{2} J(Pe_{h_{\mathbf{u}_{\parallel}}}) \frac{\mathbf{u}_{\parallel} \otimes \mathbf{u}_{\parallel}}{|\mathbf{u}_{\parallel}|^2} \nabla T \\ &- \operatorname{div} \alpha \nabla T = 0 \end{aligned} \quad (4.30)$$

La solution obtenue sur le problème modèle (4.12), où le coefficient de diffusion physique $\alpha = 0$, est montrée figure 4.16. On note qu'il n'y a quasiment plus d'oscillations. Par contre, le choc est notablement diffusé en sortie (sur 6 mailles).

Il est également important de noter que le terme diffusif de capture de choc est *non linéaire* en T puisque T intervient par le biais de $\mathbf{u}_{\parallel}(T)$ dans le coefficient. Ceci est compatible avec le théorème de Godunov que nous venons de voir puisque nous cherchons à avoir une méthode formellement d'ordre 2, qui ne crée pas d'oscillations : il s'agit donc forcément d'une méthode non linéaire.

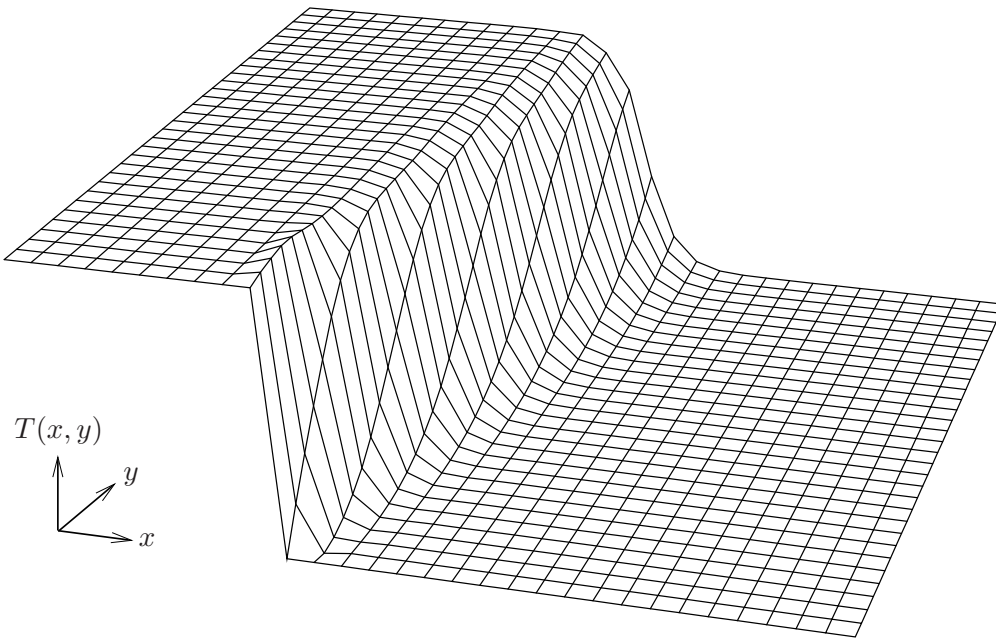


FIG. 4.16: Problème (4.12)–(4.19). Condition à la limite discontinue. Méthode des éléments finis standard + décentrement SUPGDC (4.30).

4.7 Résumé

Le tableau suivant résume les propriétés des différentes méthodes de discrétisation du terme linéaire de convection $\mathbf{u} \cdot \nabla T$ que nous avons vues dans ce chapitre.

Méthode	Ordre de précision	Absence d'oscillations numériques	Linéarité
CENTREE	2	oscillations possibles si $Pe_h < 1$	oui
SUPG	2 si $Pe_h < 1$ 1 si $Pe_h > 1$	si solution sans choc	oui
SUPGDC	2 si $Pe_h < 1$ 1 si $Pe_h > 1$	oui	non linéaire

À ce jour, la méthode par défaut utilisée dans Cast3M est la méthode SUPGDC mais on conseille plutôt à l'utilisateur d'essayer les méthodes dans l'ordre de complexité croissante : CENTREE, puis SUPG et enfin SUPGDC.

On conseille aussi à l'utilisateur d'évaluer son Péclet de maille Pe_h tout en se rappelant que la condition $Pe_h < 1$ n'est nullement nécessaire : il est parfaitement possible d'avoir une solution sans oscillations numériques même si $Pe_h > 1$.

Chapitre 5

Discrétisation en temps

$$\begin{aligned} \boxed{\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t}} + (\nabla \mathbf{u}) \cdot \mathbf{u} &= -\nabla p^* + \boxed{\nu \Delta \mathbf{u}} + \mathbf{s}_u \\ \nabla \cdot \mathbf{u} &= 0 \\ \boxed{\frac{\partial T}{\partial t}} + \mathbf{u} \cdot \nabla T &= \boxed{\alpha \Delta T} + s_T \end{aligned}$$

Prediction is very difficult, especially about the future.

Niels Bohr

Pour l'instant, nous n'avons parlé que de problèmes stationnaires, sans terme de dérivée en temps $\frac{\partial}{\partial t}$. Dans ce chapitre, nous examinons ce qui se passe lorsque nous rajoutons ce terme et que nous le discrétisons. Nous nous limiterons à des discrétisations en temps implicites (section 5.1) en choisissant comme problème modèle une équation de diffusion instationnaire (également appelée équation de la chaleur).

Le fait d'avoir un terme de dérivée en temps est caractéristique d'un *problème d'évolution*, qui nécessite de spécifier une *condition initiale*. Nous discutons du choix de cette condition en section 5.2.

5.1 Discrétisation en temps

5.1.1 Choix du type de discrétisation en temps

Les discrétisations en temps explicites (voir [DP00] pour une introduction) sont plus simples à mettre en oeuvre dans un code de calcul car il n'y a pas de système linéaire à résoudre à chaque pas de temps. Par contre, elles sont en général soumises à des critères de stabilité sur le pas de temps.

En mécanique des fluides incompressibles, on choisit souvent une discrétisation en temps implicite du système des équations de Navier-Stokes pour les raisons suivantes :

- L'équation de conservation de la masse $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$, n'a pas de terme instationnaire en $\frac{\partial}{\partial t}$. Elle agit donc comme une contrainte (voir chapitre 8) et a donc, par nature, un caractère implicite¹.
- Lorsque les termes diffusifs sont importants, les critères de stabilité sur le pas de temps des méthodes explicites sont très restrictifs.
- Du fait de l'utilisation de la méthode des éléments finis, même avec une discrétisation explicite en temps, il reste une matrice de masse à inverser².

5.1.2 Discrétisation en temps implicite

En ce qui nous concerne, nous choisirons donc toujours, par simplicité, une discrétisation en temps implicite par différences finies d'ordre 1 (Euler implicite) ou une formule de différences finies amont d'ordre 2 (BDF2, en anglais Backward Difference Formula of order 2) :

$$\begin{cases} \frac{\partial T}{\partial t} - S(T) \approx \frac{T_h^{k+1} - T_h^k}{\Delta t} - S(T_h^{k+1}) & \text{Euler implicite} \\ \frac{\partial T}{\partial t} - S(T) \approx \frac{3T_h^{k+1} - 4T_h^k + T_h^{k-1}}{2\Delta t} - S(T_h^{k+1}) & \text{BDF2} \end{cases} \quad (5.1)$$

où $S(T)$ correspond à la partie stationnaire (sans dérivées en temps) du problème considéré.

La matrice du schéma discrétisé en temps et en espace est alors la somme de la partie stationnaire et d'une matrice masse pondérée par $1/\Delta t$:

$$\int_{\Omega} \frac{T_h^{k+1} - T_h^k}{\Delta t} N_i - S'(T_h^{k+1}, N_i) d\Omega = 0 \quad \forall N_i \quad (5.2)$$

soit en développant T_h^{k+1} et T_h^k (ce dernier est connu, c'est la valeur de l'inconnue trouvée au pas de temps précédent ou la condition initiale si $k = 0$) :

$$\sum_j T_j^{k+1} \left(\int_{\Omega} \frac{1}{\Delta t} N_j N_i - S''(N_j, N_i) d\Omega \right) - \sum_j T_j^k \left(\int_{\Omega} \frac{1}{\Delta t} N_j N_i d\Omega \right) = 0 \quad \forall N_i \quad (5.3)$$

D'où le système linéaire en \mathbf{T}^{k+1} à résoudre :

$$\left(\frac{\mathbf{M}}{\Delta t} + \mathbf{S} \right) \mathbf{T}^{k+1} = \frac{\mathbf{M}}{\Delta t} \mathbf{T}^k \quad (5.4)$$

avec la matrice de masse $\mathbf{M}_{ij} = \int_{\Omega} N_i N_j d\Omega$ et \mathbf{S} la matrice du problème stationnaire.

Cette matrice $\mathbf{T} = \frac{\mathbf{M}}{\Delta t} + \mathbf{S}$ a, en général, de meilleures propriétés que la partie stationnaire \mathbf{S} seule, du fait d'une plus grande dominance de la partie diagonale.

Dit autrement, si la discrétisation est stable pour le problème stationnaire, elle le sera pour le problème instationnaire correspondant, avec discrétisation en temps par différences finies implicite.

¹On peut s'affranchir partiellement de ce caractère implicite en découplant les équations de conservation de la masse et de la quantité de mouvement dans le cadre des méthodes dites *de projection* [EG02]. Nous n'aborderons pas ces méthodes ici.

²Des techniques de *diagonalisation* de la matrice de masse existent, afin que son inversion soit triviale, mais ces techniques sont d'un usage délicat.

5.2 Influence de la condition initiale

Nous allons juste évoquer ici un cas où la condition initiale donnée est une condition *fortement variable* (type choc), voire même une condition *qui ne vérifie pas les conditions aux limites ou les autres contraintes* (par exemple, la contrainte $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$ du problème de Stokes ou de Navier-Stokes). Ce deuxième cas se présente en fait assez souvent, lorsqu'on ne fait pas assez attention ou lorsqu'il n'est pas facile de construire une condition initiale qui vérifie toutes les contraintes.

Pour cela, nous allons considérer le problème suivant de diffusion instationnaire, avec α constant égal à 1 et des conditions de Dirichlet au bord :

$$\begin{cases} \frac{\partial T}{\partial t} - \operatorname{div} \alpha \nabla T = 0 & \text{sur } [0, 1] \\ T|_{x=0} = 1 \\ T|_{x=1} = 0 \end{cases} \quad (5.5)$$

Ce problème est un problème “facile” au sens où l'opérateur Laplacien, comme nous l'avons vu au chapitre 2, est un opérateur régularisant.

Une fois discrétisé en temps et en espace, on obtient le problème discret :

$$\int_{\Omega} \frac{T_h^{k+1} - T_h^k}{\Delta t} N_i + \alpha \nabla T_h^{k+1} \cdot \nabla N_i \, d\Omega = 0 \quad \forall N_i \in \Omega \setminus \delta\Omega \quad (5.6)$$

D'où le système linéaire en \mathbf{T}^{k+1} à résoudre :

$$\left(\frac{\mathbf{M}}{\Delta t} + \alpha \mathbf{R} \right) \mathbf{T}^{k+1} = \frac{\mathbf{M}}{\Delta t} \mathbf{T}^k \quad (5.7)$$

avec la matrice de masse $\mathbf{M}_{ij} = \int_{\Omega} N_i N_j \, d\Omega$ et la matrice de rigidité $\mathbf{R}_{ij} = \int_{\Omega} \nabla N_i \nabla N_j \, d\Omega$.

Prenons tout d'abord comme condition initiale :

$$T_h^0 = 0 \quad \text{sur } [0, 1] \quad (5.8)$$

Cette condition *ne vérifie pas* les conditions aux limites du problème (5.5).

La traduction en Gibiane du problème (5.5) est donnée sur le listing 5.1.

La figure 5.1 montre le résultat obtenu avec un “grand” pas de temps à gauche ($\Delta t = 10^{-1}$) et un “petit” pas de temps ($\Delta t = 10^{-4}$) à droite. On observe l'absence d'oscillations avec le pas de temps élevé mais la solution obtenue n'est pas très précise en temps. Par contre, avec un pas de temps faible, la solution obtenue oscille dès le premier pas, puis s'amortit grâce à l'effet régularisant du Laplacien.

En fait, il est facile de comprendre ce qui se passe car, quand $\Delta t \rightarrow 0$, le problème sous forme faible au premier pas de temps s'écrit :

$$\begin{cases} \int_{\Omega} (T_h^1 - T_h^0) N_i \, d\Omega = 0 & \forall N_i \in \Omega \setminus \delta\Omega \\ T_h|_{x=0} = 1 \\ T_h|_{x=1} = 0 \end{cases} \quad (5.9)$$

Comme $T_h^0 = 0$, on retrouve exactement le problème de l'approximation du choc de la section 4.5.2. Les oscillations obtenues sont dues au fait que le schéma éléments finis cherche

```

1  dt = 1.D-1 ;    dt = 1.D-4 ;

    ....

rv = 'EQEX' 'NITER' 1 'OMEGA' 1. 'ITMA' nitma
    'OPTI' 'EF' 'IMPL' 'CENTREE'
    'ZONE' $mt 'OPER' 'DFDT' 1. 'CNM1' dt 'INCO' 'CN'
    'OPTI' 'EF' 'IMPL' 'CENTREE'
10  'ZONE' $mt 'OPER' 'LAPN' 1. 'INCO' 'CN'
    'CLIM' gau 'CN' 'TIMP' 1.
    'CLIM' dro 'CN' 'TIMP' 0. ;

*
rv . 'INCO' = 'TABLE' 'INCO' ;
rv . 'INCO' . 'CN' = 'KCHT' $mt 'SCAL' 'SOMMET' cini ;
rv . 'INCO' . 'CNM1' = 'KCHT' $mt 'SCAL' 'SOMMET' cini ;

```

Listing 5.1: Jeu de donnée diff1d.dgibi correspondant au problème (5.5)

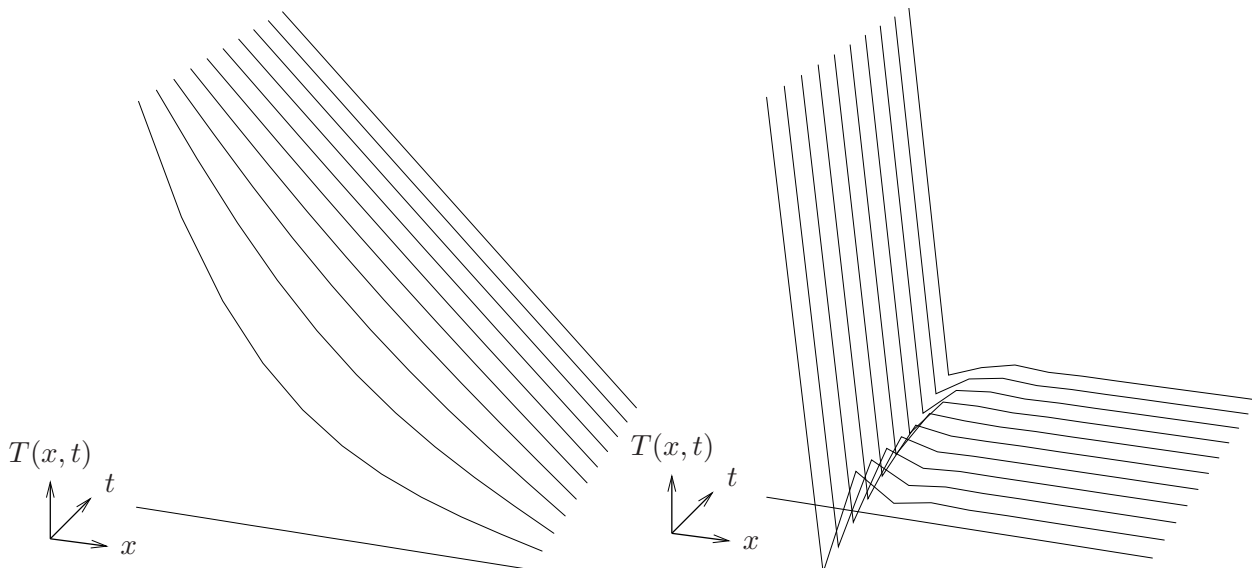


FIG. 5.1: Problème (5.5) avec condition initiale impropre (5.8). Gauche : $\Delta t = 10^{-1}$. Droite : $\Delta t = 10^{-4}$.

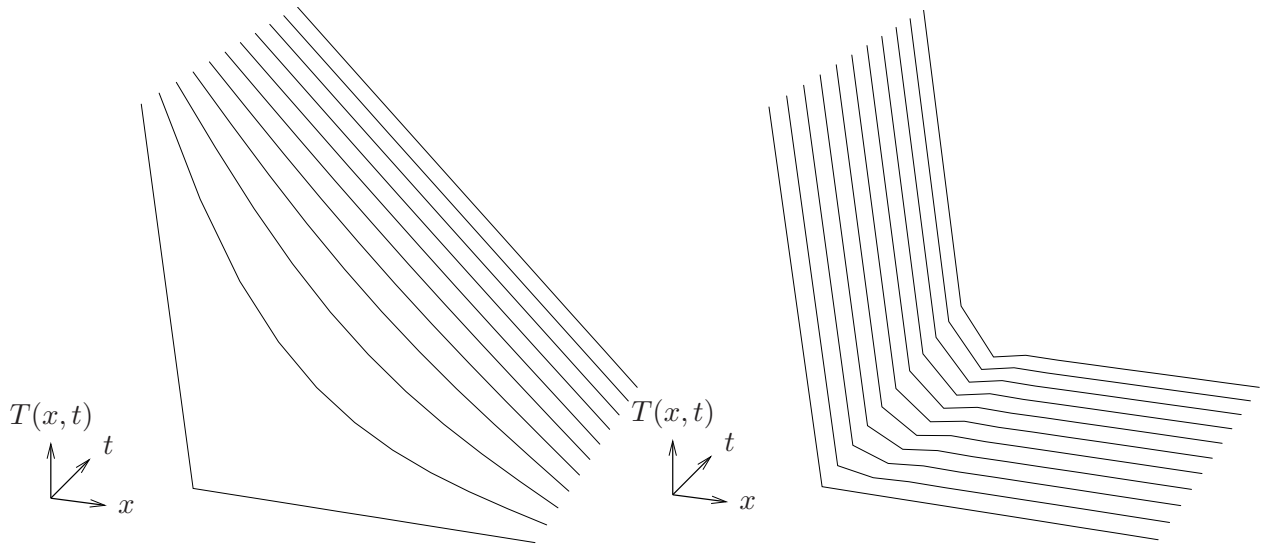


FIG. 5.2: Problème (5.5) avec condition initiale compatible avec les conditions aux limites (5.10). Gauche : $\Delta t = 10^{-1}$. Droite : $\Delta t = 10^{-4}$.

à approcher une solution choc avec des fonctions continues. La meilleure solution au sens de la norme \mathcal{L}^2 est une fonction oscillante.

Si, maintenant, on prend une condition initiale vérifiant les conditions aux limites :

$$\begin{cases} T_h^0 = 1 - \frac{x}{\Delta x} & \text{sur } [0, \Delta x] \\ T_h^0 = 0 & \text{sur } [\Delta x, 1] \end{cases} \quad (5.10)$$

où Δx est la taille du premier élément, on obtient les solutions de la figure 5.2. Avec un pas de temps “grand”, la solution obtenue est quasiment identique à la précédente car le Laplacien a déjà eu le temps de régulariser la discontinuité, c’est-à-dire de l’oublier.

Pour le pas de temps “petit”, on obtient beaucoup moins d’oscillations avec la condition initiale compatible avec les conditions aux limites car celle-ci est plus régulière que la condition initiale “choc” et mieux approchée par les fonctions continues en norme \mathcal{L}^2 .

Dans le cas d’un problème plus complexe, où la diffusion n’est plus dominante, ou si le problème est non linéaire, les erreurs commises sur la condition initiale peuvent être beaucoup plus longue à s’amortir, voire même fausser complètement la solution numérique trouvée.

5.3 Résumé

L’opérateur de dérivée en temps discrétisé par une méthode de différences finies implicite fait apparaître une matrice de masse divisée par Δt qui se rajoute à la matrice du problème stationnaire, ainsi qu’un second membre.

Lorsque la condition initiale est impropre (ne vérifie pas les contraintes et/ou les conditions aux limites) ou peu régulière (mal approchée par les fonctions de discrétisations choisies), il peut y avoir des oscillations.

Chapitre 6

Solution des EDP non linéaires

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \boxed{(\nabla \mathbf{u}) \cdot \mathbf{u}} &= -\nabla p^* + \boxed{\nu \Delta \mathbf{u}} + \mathbf{s}_u \\ \nabla \cdot \mathbf{u} &= 0 \\ \frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla T &= \alpha \Delta T + s_T \end{aligned}$$

Dans ce chapitre, nous nous intéressons à la résolution d'un problème *non-linéaire*. Pour résoudre ce problème, nous étudions deux méthodes : la méthode de Newton et la méthode de point fixe. Ces deux méthodes consistent à *linéariser* le problème non linéaire autour d'un état donné, puis de résoudre le problème linéaire résultant en vue de se rapprocher, par itérations successives, de la solution du problème non linéaire de départ. Pour linéariser une équation aux dérivées partielles, nous utilisons la dérivée au sens des opérateurs.

6.1 Méthode de Newton : zéro d'une fonction

On rappelle le principe de la méthode de Newton pour trouver le zéro d'une fonction f à valeurs réelles d'une variable réelle x . Soit à résoudre :

$$f(x) = 0 \tag{6.1}$$

L'idée de la méthode de Newton est de se ramener du problème non linéaire (6.1), que l'on ne sait a priori résoudre exactement, à une suite de problèmes linéaires que l'on sait résoudre. Une itération de la méthode de Newton repose sur les étapes suivantes :

1. une *estimation de départ* de la solution cherchée x_0 ;
2. une *linéarisation* g de la fonction f autour de l'état de départ x_0 : g est la droite tangente à la fonction f au point d'abscisse x_0 :

$$g(x) = f'(x_0)(x - x_0) + f(x_0) \tag{6.2}$$

3. la *résolution* du problème tangent

$$g(x_1) = 0 \tag{6.3}$$

qui permet d'obtenir un nouvel état x_1 , que l'on espère plus proche de la solution de (6.1) que x_0 .

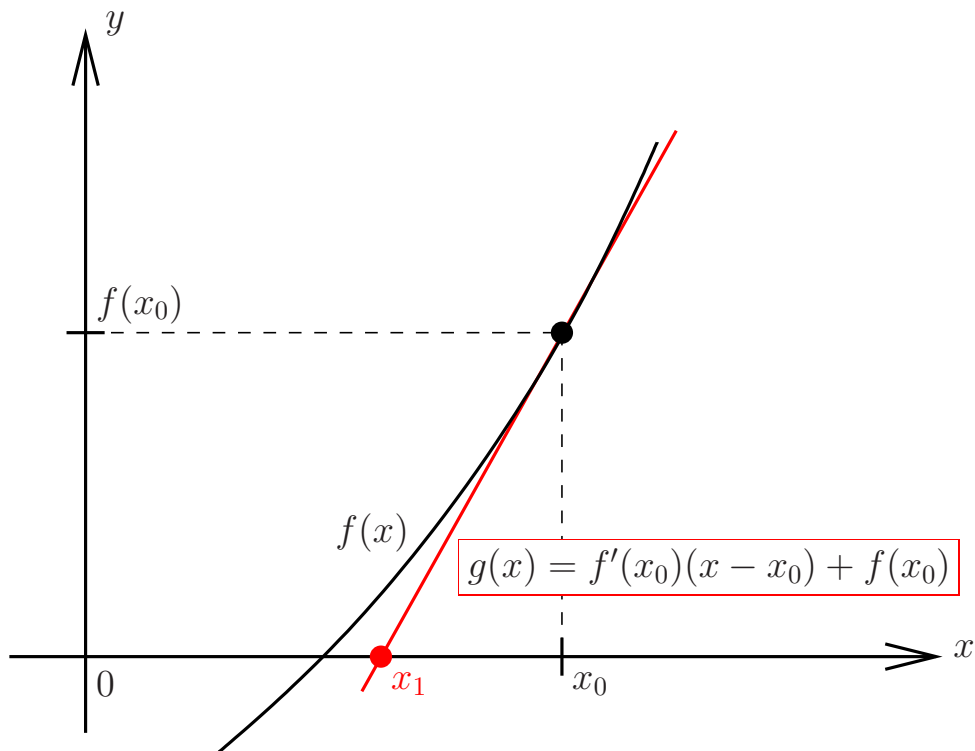


FIG. 6.1: Une itération de la méthode de Newton. x_0 : estimation initiale de la solution. x_1 : nouvelle estimation de la solution.

Une itération de la méthode de Newton est montrée sur la figure 6.1.

On itère ensuite la méthode de Newton n fois jusqu'à ce que $f(x_n)$ soit suffisamment proche de 0. La résolution du problème tangent (6.3) peut s'écrire sous deux formes algébriquement équivalentes :

– une forme *incrémentale* où l'inconnue Δx est l'incrément de la variable x :

1. $\Delta x = \frac{1}{f'(x_0)} \times -f(x_0)$;

2. $x_1 = x_0 + \Delta x$.

– une forme *non incrémentale* où l'inconnue est directement l'état cherché x_1 :

1. $x_1 = x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)}$.

6.2 Méthode de Newton : zéro d'une EDP non linéaire

La méthode vue en sous-section précédente s'étend également aux équations aux dérivées partielles non linéaires et plus généralement à tout problème non linéaire pour lequel on peut définir une notion de *dérivée* pertinente, permettant d'exprimer un problème linéaire tangent que l'on sait résoudre.

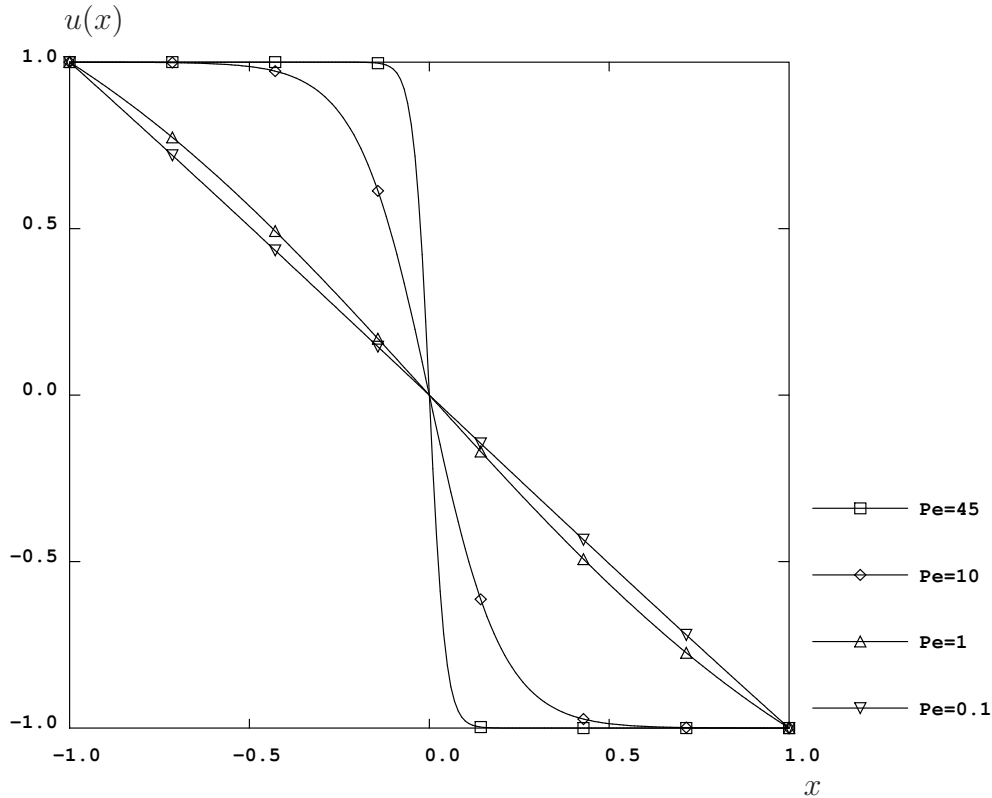


FIG. 6.2: Solution exacte $u(x)$ du problème (6.4) en fonction du nombre de Péclet Pe .

6.2.1 Problème modèle

On définit le problème de convection-diffusion non linéaire suivant en 1D sur le segment $[-1, 1]$ avec conditions aux limites de Dirichlet :

$$\begin{cases} u \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{1}{Pe} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0 \\ u|_{x=-1} = 1 \\ u|_{x=1} = -1 \end{cases} \quad (6.4)$$

Ce problème est l'équivalent non linéaire du problème de convection-diffusion (4.1). Sa solution exacte ressemble à une tangente hyperbolique dont la pente en $x = 0$ augmente avec le nombre de Péclet Pe , comme le montre la figure 6.2.

6.2.2 Dérivée au sens des opérateurs

Le problème modèle peut s'écrire formellement :

$$R(u) = 0 \quad (6.5)$$

où R est un *opérateur*, c'est-à-dire un objet qui, à une fonction, associe une autre fonction. Ici, R associe à la fonction inconnue $u(x)$, la fonction $u \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{1}{Pe} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$. R est souvent appelé l'opérateur *résidu*, il donne une fonction uniformément nulle lorsqu'on a trouvé la solution u du problème. En mécanique des milieux continus, R est également souvent appelé *déséquilibre*.

Au chapitre 2, on avait défini la notion de dérivée fonctionnelle. On définit ici, de la même manière, la dérivée au sens des opérateurs :

$$\delta_v R(u) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{d}{d\epsilon} R(u + \epsilon v) \quad (6.6)$$

ce qui se lit : la dérivée de l'opérateur R au "point" u , dans la "direction" de v , égale...

La dérivée au sens des opérateurs est également un opérateur qui, aux deux fonctions u et v associe une fonction $\delta_v R(u)$. Un point important est que $\delta_v R(u)$ est *linéaire* en v .

Si on applique la définition (6.6) à notre problème modèle (6.4), on trouve :

$$\delta_v R(u) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{d}{d\epsilon} \left(u \frac{\partial u}{\partial x} + \epsilon \left(v \frac{\partial u}{\partial x} + u \frac{\partial v}{\partial x} \right) + \epsilon^2 v \frac{\partial v}{\partial x} - \frac{1}{Pe} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \epsilon \frac{1}{Pe} \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} \right) \quad (6.7)$$

soit :

$$\delta_v R(u) = \left(v \frac{\partial u}{\partial x} + u \frac{\partial v}{\partial x} \right) - \frac{1}{Pe} \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} \quad (6.8)$$

Le troisième terme de l'expression ne dépend pas du "point" de dérivation u . Ceci caractérise le fait que $-\frac{1}{Pe} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$ est un opérateur linéaire.

6.2.3 Itération de Newton

On peut maintenant écrire une itération de la méthode de Newton pour la résolution du problème non linéaire (6.5) :

1. *estimation de départ* de la solution cherchée u_0 ;
2. *linéarisation* S du résidu R autour de l'état de départ u_0 :

$$S(u) = \delta_{(u-u_0)} R(u_0) + R(u_0) \quad (6.9)$$

3. *résolution* du problème tangent

$$S(u_1) = 0 \quad (6.10)$$

qui permet d'obtenir un nouvel état u_1 , que l'on espère plus proche de la solution de (6.5) que u_0 .

On itère ensuite la méthode de Newton n fois jusqu'à ce que $R(u_n)$ soit suffisamment proche de la fonction nulle. La résolution du problème tangent (6.10) peut s'écrire sous deux formes algébriquement équivalentes :

- une forme incrémentale où l'inconnue δu est l'incrément de la fonction u :
 1. Résoudre $\delta_{\delta u} R(u_0) = -R(u_0)$;
 2. $u_1 = u_0 + \delta u$.
- une forme non incrémentale où l'inconnue est directement l'état cherché u_1 :
 1. Résoudre $\delta_{u_1} R(u_0) = -R(u_0) + \delta_{u_0} R(u_0)$.

Remarque 1 Pour passer de la forme incrémentale à la forme non incrémentale, on utilise le fait que $\delta_v R(u)$ est linéaire en v .

Remarque 2 En forme incrémentale, on voit que, dans le cas scalaire, la résolution du problème tangent correspondait à la division par $f'(x_0)$ du second membre $-f(x_0)$. Dans le cas des EDP, la résolution du problème tangent correspond à trouver la solution de l'EDP linéaire avec second membre $\delta_{\delta u} R(u_0) = -R(u_0)$.

6.2.4 Application au problème modèle

Appliquons la méthode de Newton qui vient d'être décrite au problème modèle (6.4). Sous forme incrémentale, la première itération s'écrit :

1. étant donné u_0 ;
2. résoudre l'EDP linéaire en l'inconnue δu :

$$\begin{cases} \delta u \frac{\partial u_0}{\partial x} + u_0 \frac{\partial \delta u}{\partial x} - \frac{1}{Pe} \frac{\partial^2 \delta u}{\partial x^2} = -u_0 \frac{\partial u_0}{\partial x} - \frac{1}{Pe} \frac{\partial^2 u_0}{\partial x^2} \\ \delta u|_{x=-1} = 1 - u_0|_{x=-1} \\ \delta u|_{x=1} = -1 - u_0|_{x=1} \end{cases} \quad (6.11)$$

3. nouvelle estimation : $u_1 = u_0 + \delta u$.

Sous forme non incrémentale, la première itération s'écrit :

1. étant donné u_0 ;
2. résoudre l'EDP linéaire en l'inconnue u_1 :

$$\begin{cases} u_1 \frac{\partial u_0}{\partial x} + u_0 \frac{\partial u_1}{\partial x} - \frac{1}{Pe} \frac{\partial^2 u_1}{\partial x^2} = +u_0 \frac{\partial u_0}{\partial x} \\ u_1|_{x=-1} = 1 \\ u_1|_{x=1} = -1 \end{cases} \quad (6.12)$$

Les formes incrémentales et non incrémentales sont algébriquement équivalentes mais, en pratique, elles ont chacune leurs avantages :

Forme non incrémentale : en général, il y a moins de termes à calculer et on économise l'étape d'incrémentalation de l'inconnue ;

Forme incrémentale : cette forme fait apparaître explicitement l'incrément δu et le résidu R . La norme de ces quantités permet d'estimer respectivement l'erreur sur l'inconnue (primale) et l'erreur sur l'équation (duale), ce qui est très utile.

Dans Cast3M, en mécanique du solide, on utilise plutôt la forme incrémentale (procédure PASAPAS) et en mécanique des fluides, la forme non incrémentale (procédure EXEC, voir chapitre 10).

6.3 Méthode de point fixe

La méthode de Newton que nous venons de décrire a l'avantage de converger en général rapidement vers la solution cherchée lorsque l'estimation de départ est "proche" de la solution cherchée. Dans le cas contraire, on est souvent obligé d'utiliser d'autres variantes de la méthode de Newton, plus "robustes".

C'est le cas de la méthode de *point fixe*, également appelée méthode de *Picard*. Celle-ci peut être vue comme une méthode de Newton où l'on remplace la dérivée exacte ($f'(x_0)$ ou $\delta R(u_0)$) par une expression approchée. Par exemple, dans le cas du problème modèle (6.4), à la place de l'expression exacte (6.8), on peut utiliser :

$$\widetilde{\delta}_v R(u) = u \frac{\partial v}{\partial x} - \frac{1}{Pe} \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} \quad (6.13)$$

où on n'a gardé que le deuxième terme¹ de la linéarisation de l'opérateur $u \frac{\partial u}{\partial x}$.

¹Le choix des termes à garder est souvent effectué de manière heuristique (par expérience) ou dicté par d'autres considérations (nombre de termes à calculer...)

6.3.1 Forme incrémentale

Sous forme incrémentale, une itération de la méthode de point fixe s'écrit :

1. Résoudre $\widetilde{\delta_{\delta u}}R(u_0) = -R(u_0)$;
2. $u_1 = u_0 + \delta u$.

À noter que l'on n'a modifié que le membre de gauche de l'étape 1 : si la méthode de point fixe converge, elle converge vers une solution u telle que $R(u) = 0$, de même que la méthode de Newton !

6.3.2 Forme non incrémentale

Sous forme non incrémentale, pour le problème modèle (6.4), la première itération de la méthode de point fixe s'écrira :

1. étant donné u_0 ;
2. résoudre l'EDP linéaire en l'inconnue u_1 :

$$\begin{cases} u_0 \frac{\partial u_1}{\partial x} - \frac{1}{Pe} \frac{\partial^2 u_1}{\partial x^2} = 0 \\ u_1|_{x=-1} = 1 \\ u_1|_{x=1} = -1 \end{cases} \quad (6.14)$$

On voit qu'une itération de la méthode de point fixe est équivalente à résoudre le problème (6.4) pour lequel on a juste changé $u \frac{\partial u}{\partial x}$ en $u_0 \frac{\partial u}{\partial x}$: la vitesse de convection est "fixée" à la valeur estimée u_0 , d'où le nom de méthode de point fixe.

La méthode de point fixe sous forme non incrémentale est la méthode utilisée par la procédure EXEC pour résoudre les équations non linéaires. On donne plus de détails dans le chapitre 10.

6.4 Exemple numérique

On illustre ce qui vient d'être dit en résolvant le problème modèle (6.4) par les méthodes de Newton et de point fixe en choisissant :

- maillage régulier de 100 mailles;
- discrétisation par éléments finis linéaires;
- $Pe = 10$ ou $Pe = 45$;
- estimation initiale : $u_0(x) = -x$.

Une fois le problème discrétisé, et si on utilise, par exemple, la méthode de Newton sous forme incrémentale (6.11), la première itération sous forme matricielle s'écrit :

1. étant donné \mathbf{u}_0 ;
2. résoudre le système linéaire en l'inconnue $\delta \mathbf{u}$:

$$\mathbf{N}_{u_0} \delta \mathbf{u} = \mathbf{b}(\mathbf{u}_0) \quad (6.15)$$

3. nouvelle estimation : $\mathbf{u}_1 = \mathbf{u}_0 + \delta \mathbf{u}$.

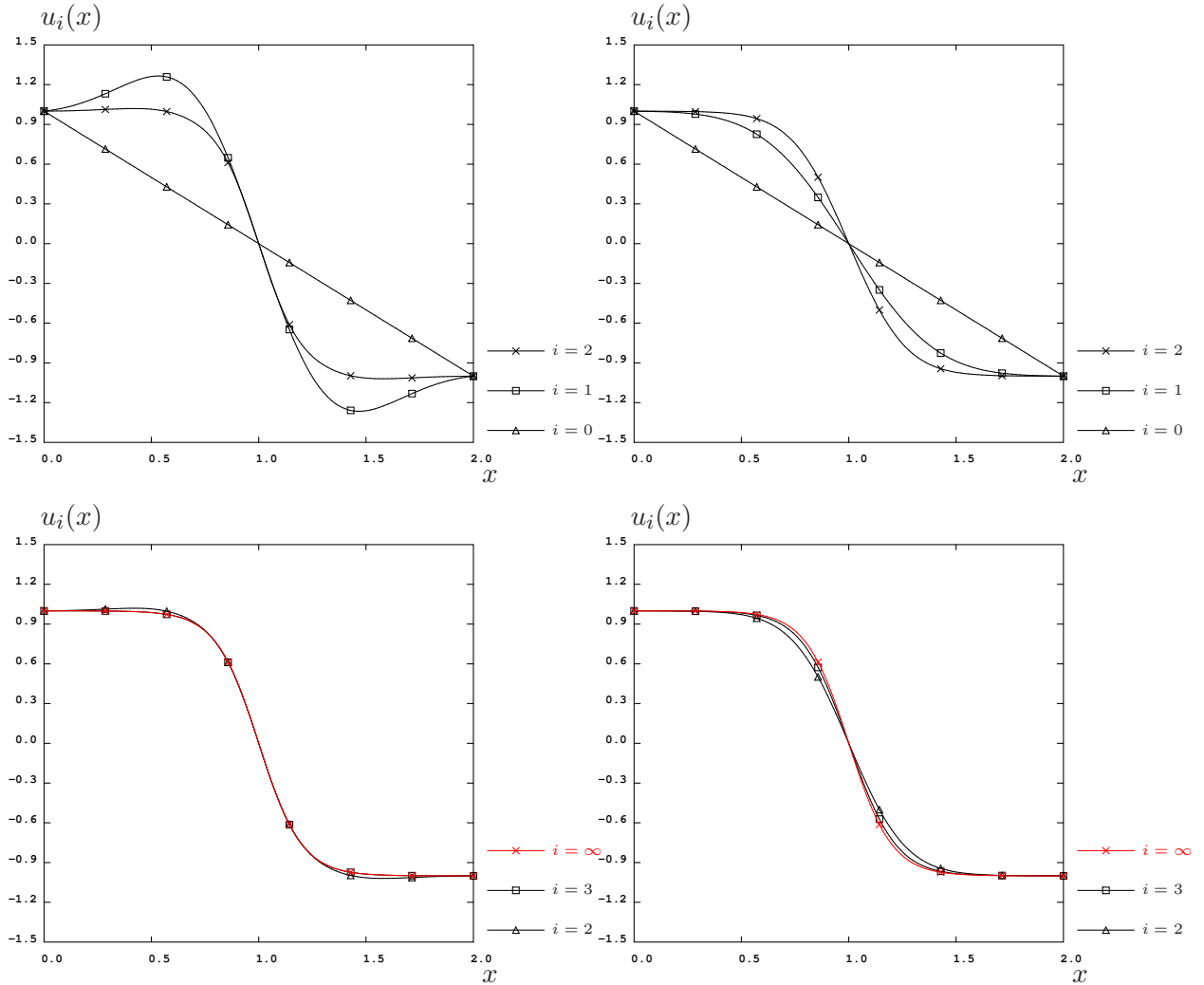


FIG. 6.3: Solution u_i du problème (6.4) pour $Pe = 10$ obtenue à l'itération i . Gauche : méthode de Newton. Droite : méthode de point fixe. Haut : $i < 3$. Bas $i > 2$

La matrice N_{u_0} varie à chaque itération car elle dépend de u_0 .

Sur la figure 6.3, on trace la solution obtenue u_i par chaque méthode en fonction du nombre d'itérations effectuées i , dans le cas $Pe = 10$. On observe la convergence des deux méthodes vers la solution, mais on observe une différence de comportement aux premières itérations où la méthode de Newton passe par des états oscillant hors des bornes -1 et 1 .

Sur la figure 6.4, on trace l'erreur $\max |u_i - u_\infty|$ en fonction de i pour la méthode de Newton et la méthode de point fixe avec $Pe = 10$. On observe la convergence rapide de la méthode de Newton une fois que l'on s'est suffisamment rapproché de la solution (pour $i = 2$ et plus).

Sur la figure 6.5, on trace également l'erreur pour $Pe = 45$: on observe que la méthode de Newton ne converge plus, contrairement à la méthode de point fixe, plus robuste. Les comportements observés dans cet exemple particulier se retrouvent dans la plupart des cas pour d'autres problèmes.

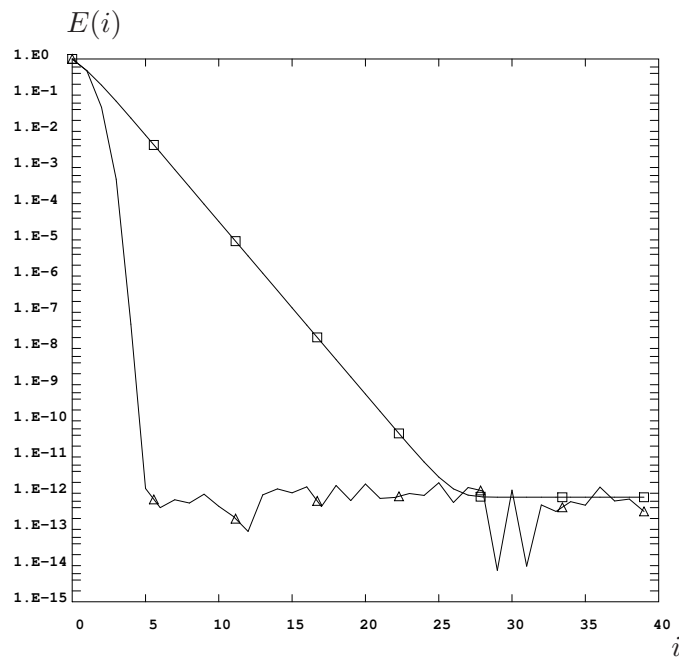


FIG. 6.4: Graphe de l'erreur $E = \max |u_i - u_\infty|$ en fonction de i pour le problème modèle (6.4) avec $Pe = 10$. \square : méthode de point fixe. \triangle : méthode de Newton.

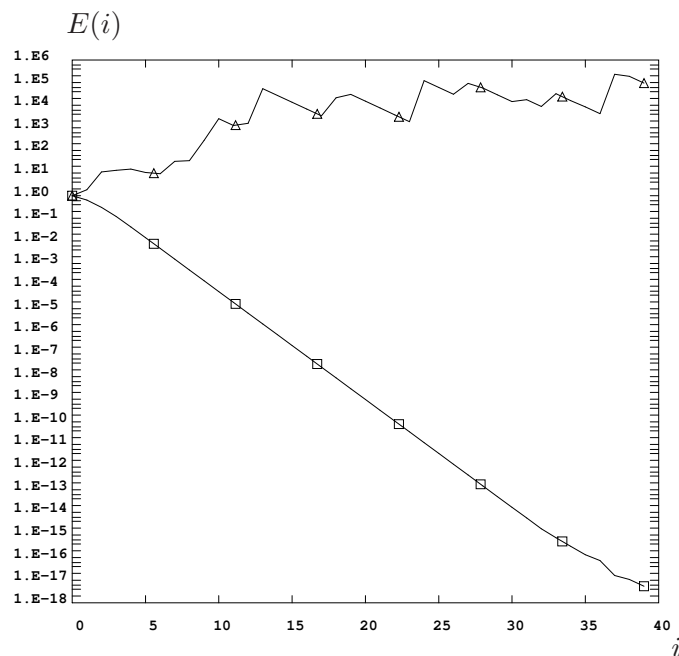


FIG. 6.5: Graphe de l'erreur $E = \max |u_i - u_\infty|$ en fonction de i pour le problème modèle (6.4) avec $Pe = 45$. \square : méthode de point fixe. \triangle : méthode de Newton.

6.5 Résumé

Pour résoudre un problème non linéaire, on se donne une estimation de la solution du problème, on linéarise le problème autour de cette estimation et on résoud le problème linéaire ainsi posé pour obtenir une nouvelle estimation de la solution.

Linéariser implique une notion de dérivée : pour les EDP, nous avons vu qu'il s'agit de la dérivée au sens des opérateurs.

Lorsque la linéarisation est exacte, la méthode que nous venons de décrire s'appelle méthode de Newton. Elle se caractérise par sa convergence rapide lorsqu'on s'approche de la solution du problème.

Lorsque la linéarisation est approchée, on obtient des méthodes dérivées telles la méthode de point fixe. Elles se caractérisent souvent par une meilleure robustesse et un moindre coût que la méthode de Newton au prix d'une vitesse de convergence souvent plus faible.

Chapitre 7

Formation de choc

$$\begin{aligned} \boxed{\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\nabla \mathbf{u}) \cdot \mathbf{u}} &= -\nabla p^* + \nu \Delta \mathbf{u} + \mathbf{s}_u \\ \nabla \cdot \mathbf{u} &= 0 \\ \frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla T &= \alpha \Delta T + s_T \end{aligned}$$

7.1 Équation de Burgers

Examinons maintenant un problème non linéaire et instationnaire, le plus simple possible, il s'agit de l'équation de *Burgers* instationnaire. Celle-ci peut s'écrire sous plusieurs formes, en particulier, une forme dite *conservative* :

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \nabla \cdot \frac{u^2}{2} = \frac{\partial u}{\partial t} + \nabla \cdot f(u) = 0 \quad (7.1)$$

où $f(u)$ est appelé le flux. Il dépend de la quantité extensive inconnue u dont on écrit la conservation. Le fait que l'équation $\frac{\partial u}{\partial t} + \nabla \cdot f(u) = 0$ exprime la conservation de la quantité u se verra mieux sous la forme intégrale faible (7.4).

L'équation de Burgers peut également s'écrire sous une forme *non conservative*, équivalente au niveau de l'EDP. En 1D, elle s'écrit :

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} = 0 \quad (7.2)$$

Le terme de convection non linéaire $u \frac{\partial u}{\partial x}$ montre que l'inconnue u joue deux rôles :

- un rôle “passif” d'inconnue transportée $u \frac{\partial \boxed{u}}{\partial x}$;
- un rôle “actif” de vitesse transportante $\boxed{u} \frac{\partial u}{\partial x}$.

Ce double rôle est à l'origine de propriétés intéressantes.

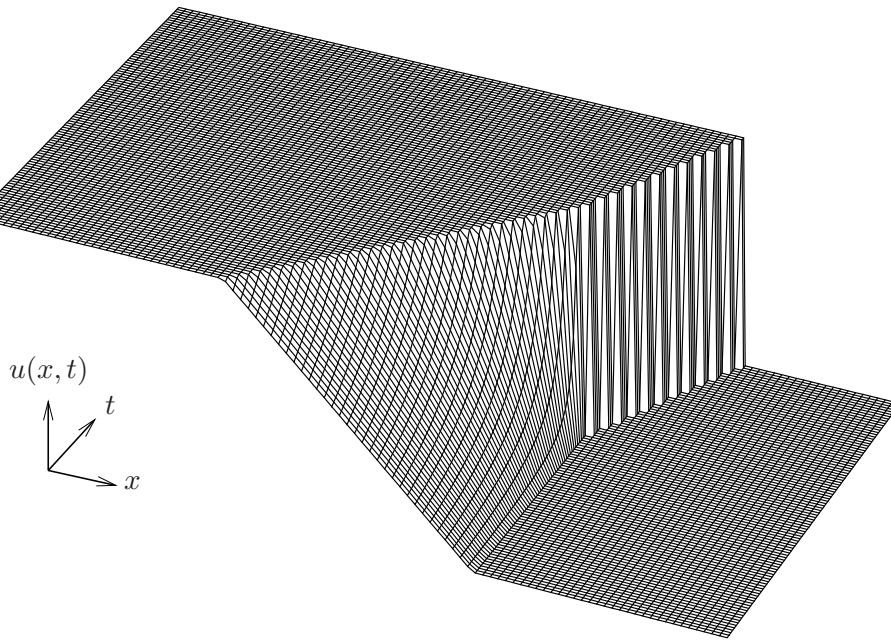


FIG. 7.1: Solution exacte $u(x, t)$ du problème (7.2) (équation de Burgers) avec la condition initiale (7.3). Formation d'un choc.

7.2 Formation d'un choc

Considérons par exemple la condition initiale continue suivante :

$$\begin{cases} u^0(x) = 1 & \text{si } x < 0 \\ u^0(x) = 1 - x & \text{si } 0 \leq x < 1 \\ u^0(x) = 0 & \text{si } x \geq 1 \end{cases} \quad (7.3)$$

La solution *exacte* de l'équation de Burgers 1D instationnaire que l'on obtient est représentée en espace-temps sur la figure 7.1. On comprend assez bien ce qui se passe :

- la partie de la solution, à gauche, qui est à $u = 1$ va vouloir avancer vers la droite avec cette même vitesse unité;
- la partie de la solution, à droite, qui est à $u = 0$ va vouloir rester sur place.

À l'instant où les parties gauche et droite de la solution se rejoignent, il y a formation d'un *choc*.

Ce choc pose un problème car la solution devient alors discontinue et on ne peut plus donner de sens aux dérivées spatiales $\frac{\partial u}{\partial x}$ dans l'EDP (7.2). Autour du choc, il faut alors revenir à la forme faible, plus générale, de l'équation de conservation. Celle-ci s'exprime en intégrant l'EDP (7.1) en temps et en espace¹ pour donner :

$$\int_t^{t+\Delta t} \int_x^{x+\Delta x} \frac{\partial u}{\partial t} + \nabla \cdot f(u) dt dx = 0 \quad \forall t, x, \Delta t, \Delta x \quad (7.4)$$

ou encore :

$$\int_x^{x+\Delta x} u(t + \Delta t) - u(t) dx + \int_t^{t+\Delta t} f(u(x + \Delta x)) - f(u(x)) dt = 0 \quad \forall t, x, \Delta t, \Delta x \quad (7.5)$$

¹En fait, comme dans la méthode des résidus pondérés du chapitre 3, on fait le chemin à l'envers. C'est bien la forme faible qui est le principe physique fondamental exprimant la conservation. La forme EDP s'en déduit sous des hypothèses de régularité, ici non vérifiées au choc. La forme EDP présente par contre l'avantage de s'écrire de manière plus concise et d'être plus facile à manipuler algébriquement.

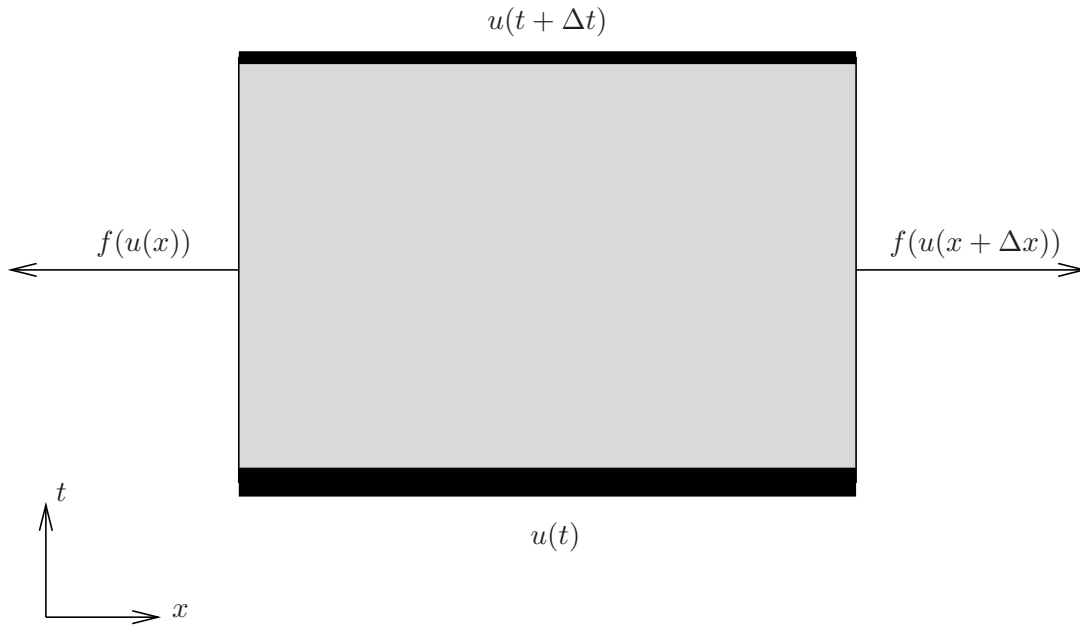


FIG. 7.2: Bilan de la quantité extensive u sur la maille $[x, x + \Delta x] \times [t, t + \Delta t]$ (équation (7.5))

ce qui se lit : l'augmentation de la quantité extensive u , contenue dans tout intervalle d'espace $[x, x + \Delta x]$, pendant tout intervalle de temps $[t, t + \Delta t]$, est égale à la quantité de u (le flux de u) entrant par les bords, en x et en $x + \Delta x$, pendant ce même intervalle de temps. Ceci est dessiné sur la figure 7.2.

La forme faible de la conservation nous permet de préciser ce qui se passe en présence d'un choc et, en particulier, d'écrire des *relations de saut* reliant les états à gauche et à droite du choc à la vitesse de ce choc : on les appellent *conditions de Rankine-Hugoniot*. Pour cela, exprimons la conservation sur une maille espace-temps $[x, x + dx] \times [t, t + dt]$ contenant un choc, qui fait passer la solution de u_L à u_R , et avançant à la vitesse s , comme sur la figure 7.3 :

$$\begin{aligned}
 \int_x^{x+\Delta x} u(t + \Delta t) - u(t) dx + \int_t^{t+\Delta t} f(u(x + \Delta x)) - f(u(x)) dt &= 0 \quad \forall t, x, \Delta t, \Delta x \\
 \Rightarrow dt(s(u_L - u_R)) + dt(f(u_R) - f(u_L)) &= 0 \\
 \Rightarrow s = \frac{f(u_L) - f(u_R)}{u_L - u_R} = \frac{u_L + u_R}{2}
 \end{aligned} \tag{7.6}$$

Le choc, une fois formé, avance donc à la moyenne des deux vitesses, en amont et en aval du choc. En pratique, on peut utiliser l'EDP dans les zones où la solution est régulière et, en présence d'un choc, identifié par sa position, caractériser sa vitesse à l'aide des relations de Rankine-Hugoniot.

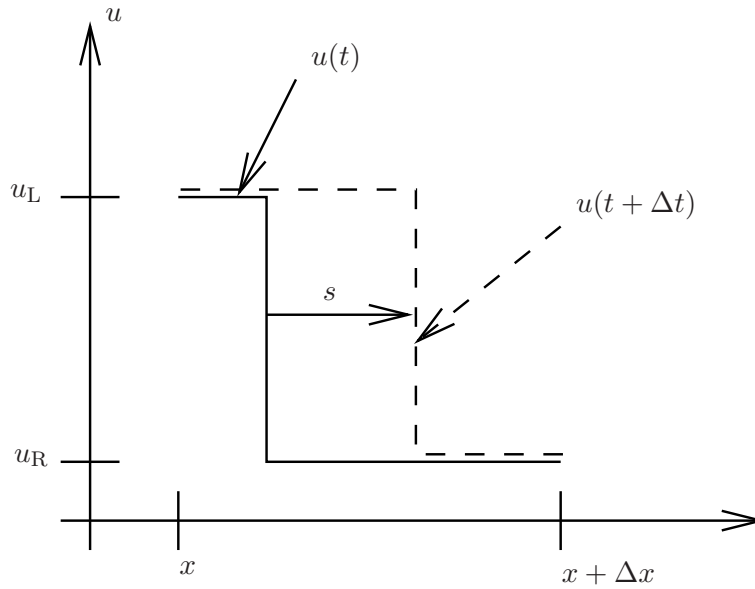


FIG. 7.3: Variation de la quantité extensive u sur un intervalle $[x, x + \Delta x]$ en présence d'un choc (équation (7.6)).

7.3 Onde de raréfaction

Toutefois, nos ennuis ne s'arrêtent pas là. Considérons en effet la condition initiale suivante, qui est un choc "à l'envers" :

$$\begin{cases} u^0(x) = 0 & \text{si } x < 0 \\ u^0(x) = 1 & \text{si } x \geq 0 \end{cases} \quad (7.7)$$

On peut vérifier que les deux solutions tracées sur la figure 7.4 sont solutions du problème de Burgers, c'est-à-dire de l'EDP (7.2) là où la solution est continue et, dans le cas du choc non physique, qu'elles vérifient les relations de Rankine-Hugoniot. Ceci est caractéristique d'un problème *mal posé* car il admet plusieurs solutions. Heuristiquement, "il manque de la physique" dans le problème de Burgers tel qu'il est posé.

Pour rendre le problème de Burgers mieux posé et, en particulier, pour avoir une solution unique, une manière de faire est d'ajouter des *conditions d'entropie* supplémentaires [Lev02] et de considérer la limite du problème bien posé :

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left(\frac{\partial u}{\partial t} + \nabla \cdot \frac{u^2}{2} - \epsilon \Delta u = 0 \right) \quad (7.8)$$

Lorsqu'on considère ce problème, on obtient la solution tracée sur la figure 7.4 à droite qui s'appelle une *onde de raréfaction*.

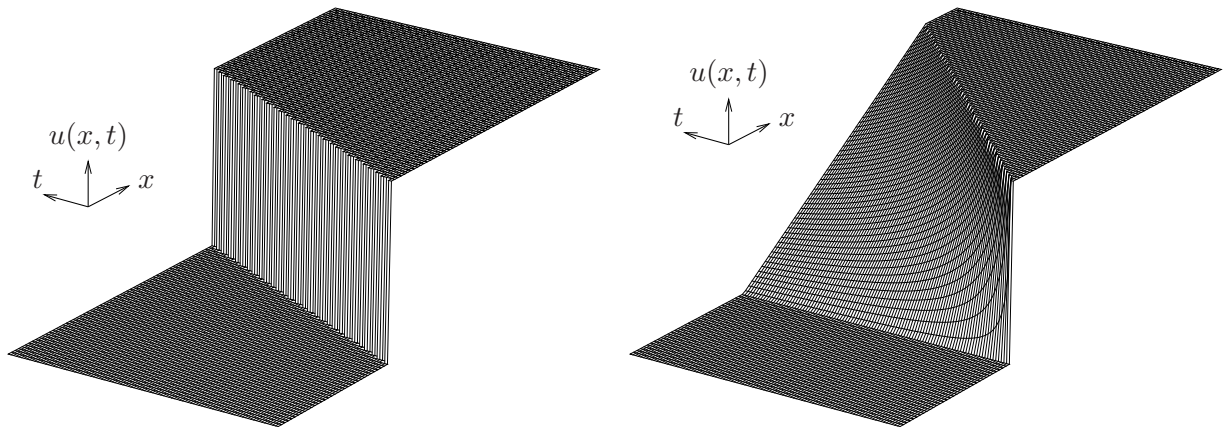


FIG. 7.4: Deux solutions exactes $u(x, t)$ du problème (7.1) (équation de Burgers) avec la condition initiale (7.7). Gauche : choc non physique. Droite : onde de raréfaction.

```

1  typdec = 'CENTREE' ;
   typdec = 'SUPG' ;
   nmail = 10 ; cfl = 0.5 ; dt = '/' cfl nmail ; tfinal = 2. ;
   nitma = 'ENTIER' ('/' tfinal dt) ;
   *
   rv = 'EQEX' 'NITER' niter 'OMEGA' omeg 'ITMA' nitma
       'OPTI' 'EF' 'IMPL' 'CENTREE'
       'ZONE' $mt 'OPER' 'DFDT' 1. 'CNM1' dt 'INCO' 'CN' ;
       'ZONE' $mt 'OPER' MAJUN
10  'OPTI' 'EF' 'IMPL' typdec
       'ZONE' $mt 'OPER' 'KONV' 1. 'UN' 'ALF' 'INCO' 'CN'
       'OPTI' 'EF' 'IMPL' 'CENTREE'
       'ZONE' $mt 'OPER' 'LAPN' 'ALF' 'INCO' 'CN'
       'CLIM' gau 'CN' 'TIMP' cgau
       'CLIM' dro 'CN' 'TIMP' cdro ;

```

Listing 7.1: Jeu de donnée burgers1d.dgibi correspondant au problème (7.2)

7.4 Résultats numériques

Considérons maintenant les solutions du problème de Burgers obtenues en discrétisant l'EDP (7.2) par la méthode des éléments finis².

La traduction en Gibiane du problème (7.2) est donnée sur le listing 7.1.

Choc Considérons tout d'abord le cas de la formation du choc, obtenu avec la condition initiale (7.3). La figure 7.5 montre les résultats obtenus avec une discrétisation centrée (à gauche) et une discrétisation décentrée SUPG (à droite) du terme convectif. La discrétisation centrée conduit à une solution qui se met à osciller dès la formation du choc. Le point important est que ces oscillations s'amplifient à cause de la non linéarité, jusqu'à contaminer tout le domaine de calcul, rendant la solution numérique inexploitable. En utilisant une

²Avant d'appliquer la méthode des résidus pondérés, il y a besoin de discrétiser en temps (chapitre 5) et de *linéariser* le terme de convection non linéaire (chapitre 6). Nous décrivons l'algorithme complet au chapitre 10.

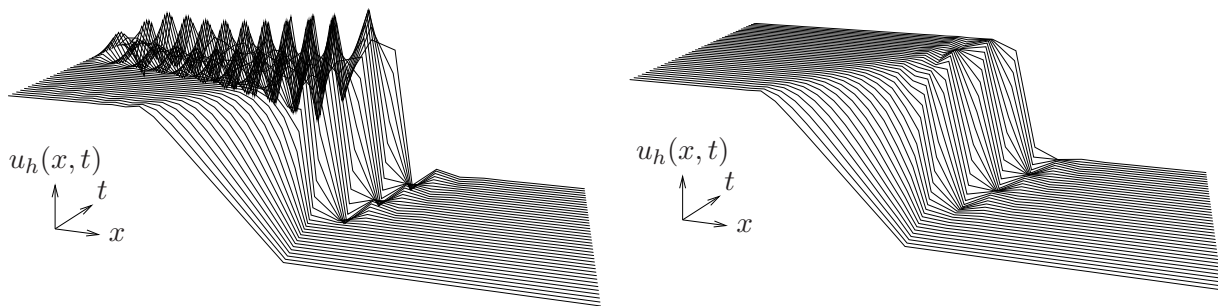


FIG. 7.5: Solution numérique $u_h(x,t)$ du problème (7.2) (équation de Burgers) pour la condition initiale (7.3) conduisant à la formation d'un choc. Gauche : discrétisation CENTREE du terme convectif. Droite : discrétisation SUPG du terme convectif.

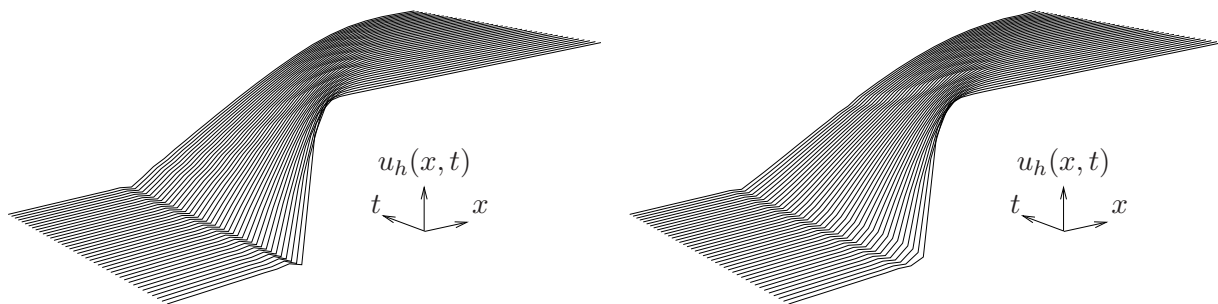


FIG. 7.6: Solution numérique $u_h(x,t)$ du problème (7.2) (équation de Burgers) pour la condition initiale (7.7) conduisant à une onde de détente. Gauche : discrétisation CENTREE du terme convectif. Droite : discrétisation SUPG du terme convectif.

discrétisation décentrée SUPG, des oscillations persistent à cause du phénomène de Gibbs, vu en section 4.5, mais ces dernières restent cantonnées aux abords du choc.

Onde de raréfaction Considérons maintenant la condition initiale (7.7). Les résultats numériques obtenus sont tracés sur la figure 7.6. Ici, on obtient bien l'onde de raréfaction. Dans le cas de la discrétisation SUPG, ceci peut s'expliquer par le fait que le schéma numérique sélectionne la "bonne" solution (l'onde de raréfaction) grâce à la diffusion numérique ajoutée. Dans le cas de la discrétisation centrée, on remarque le transport d'une petite oscillation, ne s'atténuant pas avec le temps, là où le choc "à l'envers" initial était présent. Ceci rejoint la remarque faite en fin de la section 5.2 sur l'importance des erreurs commises sur la condition initiale, particulièrement pour les problèmes non linéaires.

Il y aurait beaucoup à dire sur la résolution des EDP et des systèmes d'EDP issues de l'expression des lois de conservation. En particulier, un système important est celui des *équations d'Euler* qui correspond aux équations de Navier-Stokes *sans termes diffusifs*. Pour les lecteurs intéressés, nous renvoyons à l'ouvrage de Leveque [Lev02].

Le point important à retenir est que la non linéarité rend possible l'apparition de solutions non régulières, comme des chocs, même avec une condition initiale régulière.

7.5 Résumé

Résumons certains points importants évoqués dans ce chapitre et les précédents :

1. l'approximation d'un problème convectif pur par éléments finis n'est, en général, pas *stable*, il y a nécessité de décentrer c'est-à-dire d'ajouter une diffusion numérique pour rendre le problème discret bien posé ;
2. la méthode des éléments finis utilisant des éléments finis continus approche les solutions au mieux au sens de la norme \mathcal{L}^2 : les solutions discrètes oscillent près des endroits où la vraie solution varie fortement, *même* pour un problème discret bien posé ;
3. l'opérateur Laplacien est régularisant : il permet de rendre le problème discret de convection pur bien posé, il permet de lisser un choc sur une certaine échelle de temps en diffusion instationnaire ;
4. les non linéarités des équations peuvent produire des solutions chocs, même à partir de conditions initiales régulières.

Nous avons donc rencontré, en pratique, deux types de difficultés avec la méthode des éléments finis pour les problèmes modèles regardés jusqu'à maintenant :

1. la stabilité du problème discret. Si on ne l'a pas, on obtient généralement des oscillations non bornées des solutions discrètes ;
2. l'approximation des fonctions non régulières (choc) par des fonctions régulières (continues). La notion de choc dépend en fait de la discrétisation utilisée. Une fois le maillage fixé, est un choc toutes les solutions qui ne peuvent pas être interpolées correctement par le maillage utilisé. En ce cas, on obtient des oscillations de la solution numérique mais celles-ci restent généralement bornées.

Les deux difficultés évoquées sont *indépendantes* : il est indispensable d'avoir la stabilité du problème discret pour pouvoir espérer *converger* vers une solution, la deuxième difficulté nous renseigne sur le fait que le maillage utilisé ne nous permet pas d'approcher *correctement* la solution exacte si elle existe.

On voit également l'importance de regarder les échelles caractéristiques de chaque phénomène et la façon dont ils vont s'équilibrer :

- les effets convectifs vont plutôt jouer sur les grandes échelles de longueur et les petites échelles de temps, ils vont pouvoir “raidir” les solutions en non linéaire ;
- les effets diffusifs vont plutôt jouer sur les petites échelles de longueur et les grandes échelles de temps, ils ont un effet régularisant sur les solutions trouvées.

Lorsque les échelles caractéristiques des phénomènes sont très différentes, on parle de problème multi-échelles : en mécanique des fluides, les formations de *choc*, les problèmes de *couches limites* et la *turbulence* en fournissent des exemples. La discrétisation ajoute des échelles en plus de celles du problème étudié : une échelle de longueur due à la taille des mailles et une échelle de temps due à la taille des pas de temps. Ceci va faire que l'on ne va peut-être pas toujours pouvoir capturer toutes les échelles, donc tous les phénomènes du problème étudié : il faudra peut-être *modéliser* certains phénomènes si l'on n'est pas capable de les *capturer*, compte tenu de la discrétisation effectuée.

C'est ce caractère multi-échelles qui fait tout l'intérêt de la mécanique des fluides et toute la difficulté de sa modélisation physique et numérique.

Chapitre 8

Problème de Stokes

$$\begin{aligned}\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\nabla \mathbf{u}) \cdot \mathbf{u} &= \boxed{-\nabla p^* + \nu \Delta \mathbf{u}} + \mathbf{s}_u \\ \boxed{\nabla \cdot \mathbf{u}} &= 0 \\ \frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla T &= \alpha \Delta T + s_T\end{aligned}$$

Dans ce chapitre, on regarde comment discrétiser le problème de *Stokes*. De même que le problème de Dirichlet au chapitre 2, le problème de Stokes peut s'interpréter comme un problème d'optimisation mais, cette fois-ci, il s'agit d'une minimisation *sous contraintes* au lieu d'une minimisation sans contraintes. Ceci a des répercussions sur la stabilité du problème de Stokes, une fois discrétisé.

Ce chapitre suit donc globalement le même plan que celui du chapitre 2 mais avec une sous-section 8.2.3 consacrée à la stabilité.

8.1 Le problème continu

8.1.1 Fonctionnelle de Stokes

Le problème de Stokes est lié aux équations de Navier (2.29)-(2.30), dont nous rappelons l'expression :

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{f} = 0 \quad (8.1)$$

$$\boldsymbol{\sigma} = \lambda(\nabla \cdot \mathbf{u})\mathbf{I} + \mu(\nabla \mathbf{u} + \nabla^t \mathbf{u}) \quad (8.2)$$

Lorsque le premier coefficient de Lamé : $\lambda \rightarrow \infty$, du fait de la forme de la fonctionnelle de Navier (2.25), il s'ensuit que : $\nabla \cdot \mathbf{u} \rightarrow 0$. En introduisant une nouvelle inconnue : $p = \lambda \nabla \cdot \mathbf{u}$, qui peut être identifiée à une pression, on obtient l'expression suivante pour le tenseur des contraintes :

$$\boldsymbol{\sigma} = p\mathbf{I} + \mu(\nabla \mathbf{u} + \nabla^t \mathbf{u}) \quad (8.3)$$

A noter que \mathbf{u} a changé de signification : en élasticité linéaire, il représentait des déplacements (supposés petits par rapport à une configuration de référence), en mécanique des

fluides \mathbf{u} représente désormais la vitesse locale du fluide. Un solide se déforme, un fluide s'écoule.

Le principe d'optimisation que l'on va écrire fait désormais intervenir la fonctionnelle suivante, qui dépend des deux fonctions d'espace \mathbf{u} et p :

$$I(\mathbf{u}, p) = \int_{\Omega} \frac{\mu}{2} \|\nabla \mathbf{u}\|^2 - p \nabla \cdot \mathbf{u} \, d\Omega \quad (8.4)$$

La fonctionnelle qui vient d'être écrite est la fonctionnelle associée au problème de Stokes. Elle n'admet pas de minimum du fait de sa forme (il ne s'agit plus d'une somme de carrés) mais admet un *point-selle*. Ceci est caractéristique d'un problème de minimisation sous contraintes. En fait, la solution (\mathbf{u}, p) cherchée minimise $\int_{\Omega} \frac{\mu}{2} \|\nabla \mathbf{u}\|^2 \, d\Omega$ sous la contrainte $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$. p est le *multiplicateur de Lagrange* qui permet d'imposer cette contrainte.

8.1.2 Condition de point-selle

Une condition suffisante pour que (\mathbf{u}, p) soit un point-selle est d'écrire que la dérivée fonctionnelle de I est nulle en ce point :

$$\delta_{(\mathbf{v}, q)} I(\mathbf{u}, p) = 0 \quad \forall (\mathbf{v}, q) \quad (8.5)$$

comme, par définition de la dérivée fonctionnelle :

$$\begin{aligned} \delta_{(\mathbf{v}, q)} I(\mathbf{u}, p) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{d}{d\epsilon} [& \int_{\Omega} \frac{\mu}{2} \|\nabla \mathbf{u}\|^2 - p \nabla \cdot \mathbf{u} \, d\Omega \\ & + \epsilon \int_{\Omega} \mu \nabla \mathbf{u} : \nabla \mathbf{v} - q \nabla \cdot \mathbf{u} - p \nabla \cdot \mathbf{v} \, d\Omega \\ & + \epsilon^2 \int_{\Omega} \frac{\mu}{2} \|\nabla \mathbf{v}\|^2 - q \nabla \cdot \mathbf{v} \, d\Omega] \end{aligned} \quad (8.6)$$

finalement :

$$\delta_{(\mathbf{v}, q)} I(\mathbf{u}, p) = \int_{\Omega} \mu \nabla \mathbf{u} : \nabla \mathbf{v} - p \nabla \cdot \mathbf{v} - q \nabla \cdot \mathbf{u} \, d\Omega = 0 \quad \forall (\mathbf{v}, q) \quad (8.7)$$

8.1.3 Équation aux dérivées partielles équivalente

Afin d'expliciter la signification de l'équation (8.7), on peut se ramener à l'équation aux dérivées partielles (EDP) correspondante. Pour ce faire, on utilise l'intégration par parties pour se ramener à un système d'équations de la forme suivante :

$$\int_{\Omega} \text{EDP}_{\mathbf{u}} \times \mathbf{v} + \text{EDP}_p \times q \, d\Omega = 0 \quad \forall (\mathbf{v}, q) \quad (8.8)$$

D'où l'on déduira : $\text{EDP}_{\mathbf{u}} = 0$ et $\text{EDP}_p = 0$.

Utilisons donc l'intégration par parties sur les termes $\int_{\Omega} \mu \nabla \mathbf{u} : \nabla \mathbf{v} \, d\Omega$ et $\int_{\Omega} -p \nabla \cdot \mathbf{v} \, d\Omega$ dans l'équation (8.7), on obtient :

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} -\mu \Delta \mathbf{u} \cdot \mathbf{v} \, d\Omega + \int_{\delta\Omega} (\mu \nabla \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}) \cdot \mathbf{v} \, d\delta\Omega + \int_{\Omega} \nabla p \cdot \mathbf{v} \, d\Omega - \int_{\delta\Omega} p \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} \, d\delta\Omega \\ - \int_{\Omega} q \nabla \cdot \mathbf{u} \, d\Omega = 0 \end{aligned} \quad (8.9)$$

Pour simplifier, on va supposer que l'on a imposé des conditions de Dirichlet pour \mathbf{u} sur l'ensemble de $\delta\Omega$: ceci a pour effet d'annuler les termes de bord dans l'expression ci-dessus car \mathbf{v} s'annule alors sur $\delta\Omega$.

Nous reviendrons sur les conditions aux limites pour le problème de Stokes au chapitre 9. On obtient finalement le système d'EDP dont nous cherchons la solution :

$$\begin{cases} -\mu\Delta\mathbf{u} + \nabla p = 0 \\ \nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \end{cases} \quad (8.10)$$

La première ligne du système est l'équation de conservation de la *quantité de mouvement*. La deuxième ligne du système est l'équation de conservation de la *masse*.

8.2 Le problème discret

8.2.1 Espaces de fonctions discrets

Afin de discrétiser le problème de Stokes, nous allons choisir des espaces de fonctions discrets éléments finis pour \mathbf{u} et p . Nous n'avons pas trop parlé des espaces de fonctions à choisir pour le problème de Stokes, mais vu la forme de la fonctionnelle (8.4), il paraît naturel de chercher \mathbf{u} dans un sous-espace discret de $(\mathcal{H}_D^1(\Omega))^3$ (à cause du terme $\|\nabla\mathbf{u}\|^2$) et p dans un sous-espace discret de $\mathcal{L}^2(\Omega)$ (à cause du terme $p\nabla \cdot \mathbf{u}$). Si \mathbf{N}_i est une base de l'espace de fonction pour \mathbf{u} , de dimension n_u et P_k une base de l'espace de fonction pour p , on pourra écrire :

$$\mathbf{u}_h(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{n_u} \mathbf{u}_i \mathbf{N}_i(\mathbf{x}) \quad (8.11)$$

$$p_h(\mathbf{x}) = \sum_{k=1}^{n_p} p_k P_k(\mathbf{x}) \quad (8.12)$$

8.2.2 Condition de point-selle discrète

La condition de point-selle discrète équivalente à (8.9) est :

$$\delta_{(\mathbf{N}_j, P_l)} I(\mathbf{u}_h, p_h) = \int_{\Omega} \mu \nabla \mathbf{u}_h : \nabla \mathbf{N}_j - p_h \nabla \cdot \mathbf{N}_j - P_l \nabla \cdot \mathbf{u}_h \, d\Omega = 0 \quad \forall (\mathbf{N}_j, P_l) \quad (8.13)$$

Et, en développant \mathbf{u}_h et p_h sur la base de leurs fonctions test, on obtient un système linéaire impliquant les degrés de liberté \mathbf{u}_i et p_k :

$$\begin{aligned} \delta_{(\mathbf{N}_j, P_l)} I(\mathbf{u}_h, p_h) &= \sum_i \mathbf{u}_i \int_{\Omega} \mu \nabla \mathbf{N}_i : \nabla \mathbf{N}_j - P_l \nabla \cdot \mathbf{N}_i \, d\Omega \\ &\quad + \sum_k p_k \int_{\Omega} -P_k \nabla \cdot \mathbf{N}_j \, d\Omega = 0 \quad \forall (\mathbf{N}_j, P_l) \end{aligned} \quad (8.14)$$

ou, plus succinctement, en posant $R_{ji} = \int_{\Omega} \nabla \mathbf{N}_j : \nabla \mathbf{N}_i \, d\Omega$ et $B_{li} = \int_{\Omega} -P_l \nabla \cdot \mathbf{N}_i \, d\Omega$:

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \mathbf{R} & \mathbf{B}^t \\ \mathbf{B} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{u}_h \\ p_h \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (8.15)$$

A_h est la matrice totale associée au problème de Stokes, R est la matrice de rigidité et B la matrice de divergence. On note la structure symétrique de la matrice A : le bloc $(1, 2)$ correspondant au gradient de pression dans l'équation de quantité de mouvement est le transposé du bloc $(2, 1)$ correspondant à la contrainte de divergence nulle et le bloc $(2, 2)$ est nul. Cette structure de A_h est caractéristique d'un système associé à un problème de point-selle : le bloc diagonal correspondant aux multiplicateurs de Lagrange (ici p) est nul. Dans le cas d'un problème de minimisation, la matrice du système discret était symétrique définie positive avec toutes ses valeurs propres positives. Dans le cas du système de point-selle, la matrice A_h est symétrique mais indéfinie, avec n_u valeurs propres positives et n_p valeurs propres négatives.

8.2.3 Stabilité du problème discret

Pour pouvoir appliquer le théorème de Lax (section 3.2), nous devons d'abord nous assurer que le problème de Stokes continu (8.9) est bien posé et que son expression discrète (8.15) est stable, c'est-à-dire que A_h est inversible et que sa valeur propre de plus petite valeur absolue est uniformément bornée par une constante $\beta > 0$ indépendante du paramètre de discrétisation h .

Nous n'effectuons pas la démonstration du caractère bien posé du problème de Stokes continu, qui est donnée, par exemple, dans [EG02] et qui conduit à devoir vérifier une condition inf-sup, encore appelée condition LBB (Ladyzhenskaya–Brezzi–Babuska) de la forme :

$$\inf_{q \in \mathcal{L}_0^2(\Omega)} \sup_{\mathbf{v} \in (\mathcal{H}_0^1(\Omega))^3} \int_{\Omega} \frac{q \nabla \cdot \mathbf{v}}{\|\mathbf{v}\|_{\mathcal{H}^1} \|q\|_{\mathcal{L}^2}} d\Omega \geq \beta \quad (8.16)$$

La stabilité du problème discret conduit à devoir vérifier des conditions inf-sup discrètes de la même forme que celles ci-dessus avec \mathbf{u}_h et p_h . En pratique, cela se traduit par le fait que l'on ne peut pas choisir comme on veut les espaces d'éléments finis pour \mathbf{u}_h et p_h : il faut qu'ils soient *compatibles*.

8.2.4 Éléments finis compatibles

Élément fini le plus simple

L'élément fini conforme le plus simple que l'on peut considérer fait intervenir les espaces d'éléments finis que nous avons vus en section 3.3 :

$$\mathbf{u}_h \in W_1 \subset \mathcal{H}^1(\Omega) \quad (8.17)$$

$$p_h \in V_0 \subset \mathcal{L}^2(\Omega) \quad (8.18)$$

Cet élément fini est représenté figure 8.1. Il présente un intérêt particulier, non seulement du fait de sa simplicité, mais également parce qu'il permet d'exprimer une *conservation locale* de la masse. En effet, si on regarde la k^e ligne de la matrice de divergence B , elle s'exprime comme :

$$\int_{\Omega} \nabla \cdot \mathbf{u}_h P_k d\Omega = 0$$

Or P_k est la fonction indicatrice de l'élément Ω_k , l'intégrale précédente devient donc, en utilisant l'intégration par parties :

$$\int_{\Omega_k} \nabla \cdot \mathbf{u}_h d\Omega_k = \int_{\delta\Omega_k} \mathbf{u}_h \cdot \mathbf{n} d\delta\Omega_k = 0$$

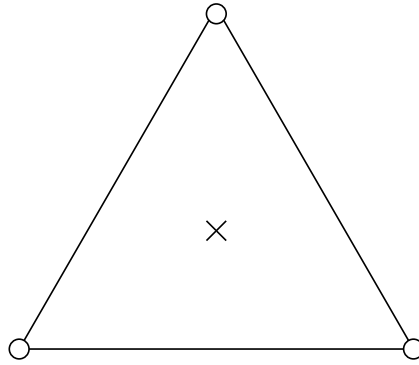


FIG. 8.1: Élément fini le plus simple pour le problème de Stokes. \circ : nœuds pour la vitesse. \times : nœud pour la pression.

Cette dernière égalité exprime le fait que la solution discrète \mathbf{u}_h trouvée, si elle existe, vérifiera la conservation locale de la masse¹.

Malheureusement, cet élément fini *n'est pas stable*. Ceci se traduit ici par le fait que la matrice complète \mathbf{A}_h *n'est pas inversible*. Nous verrons ce que cela donne en pratique sur un exemple numérique en section 8.2.5.

Éléments finis de Cast3M

Les principaux éléments finis de Cast3M utilisés en mécanique des fluides sont montrés dans le tableau 8.1. La famille d'éléments que l'on conseille d'utiliser est : **QUAF/CENTREP1**. Ces éléments sont, en effet, stables, précis spatialement (ordre 3 en vitesse et 2 en pression), comprennent toutes les formes géométriques simples en 2D et en 3D et permettent d'avoir une expression de la conservation locale de la masse par élément comme l'élément simple vu ci-dessus. La contrepartie est que ces éléments sont coûteux : les matrices sont longues à calculer et résoudre le système linéaire impliquant \mathbf{A}_h est difficile.

8.2.5 Exemples numériques

On considère le problème de Stokes suivant sur le domaine $\Omega = [0, 1] \times [0, 1]$:

$$\begin{cases} -\mu \Delta \mathbf{u} + \nabla p = 0 \\ \nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \end{cases} \quad (8.19)$$

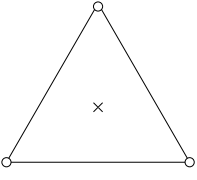
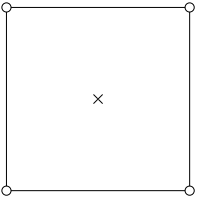
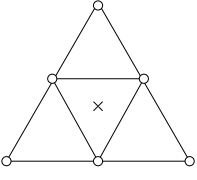
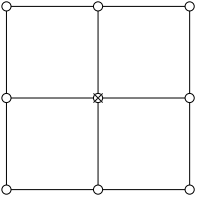
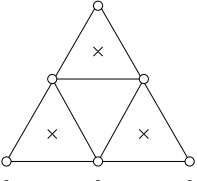
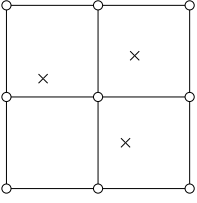
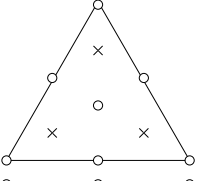
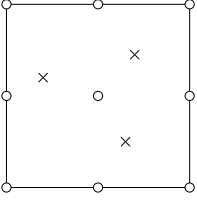
avec les conditions aux limites de Dirichlet pour \mathbf{u} sur le bord du domaine :

$$\mathbf{u}|_{\partial\Omega} = \begin{pmatrix} 4x(1-x)y \\ 0 \end{pmatrix} \quad (8.20)$$

On impose également la pression en un point quelconque du domaine. En effet, la pression est définie à une constante près car nous sommes en domaine fermé. Nous explicitons cette indétermination en section 9.4.4.

La partie significative du jeu de donnée en langage Gibiane, compris par Cast3M, traduisant le problème (8.19)-(8.20) est donnée sur le listing 8.1. Si on utilise l'élément

¹Nous reviendrons en détail dans le chapitre 9 sur les propriétés de conservation de la méthode des éléments finis.

Élément	Interpolation \mathbf{u}_h/p_h	Nom Cast3M	Stable
	$\mathbb{P}_1/\mathbb{P}_0$	LINE/CENTRE	non
	$\mathbb{Q}_1/\mathbb{P}_0$	LINE/CENTRE	non
	$4\mathbb{P}_1/\mathbb{P}_0$	MACRO/CENTREPO	oui
	$4\mathbb{Q}_1/\mathbb{P}_0$	MACRO/CENTREPO	oui
	$4\mathbb{P}_1/\mathbb{P}_1^{\text{disc}}$	MACRO/CENTREP1	non
	$4\mathbb{Q}_1/\mathbb{P}_1^{\text{disc}}$	MACRO/CENTREP1	oui
	$\mathbb{P}_2^+/\mathbb{P}_1^{\text{disc}}$	QUAF/CENTREP1	oui
	$\mathbb{Q}_2/\mathbb{P}_1^{\text{disc}}$	QUAF/CENTREP1	oui

TAB. 8.1: Principaux éléments finis en 2D pour le problème de Stokes utilisés dans Cast3M. \circ : points d'interpolation pour la vitesse \mathbf{u}_h . \times : points d'interpolation pour la pression p_h .


```

1  * kvit = 'LINE' ;   kpre = 'CENTRE' ;
   kvit = 'QUAF' ;   kpre = 'CENTREP1' ;
   *
   $mt = 'MODE' _mt 'NAVIER_STOKES' kvit ;
   *
   mclim = bas 'ET' dro 'ET' hau 'ET' gau ;
   xm ym = 'COORDONNEE' mclim ;
   cux   = 'NOMC' 'UX' (xm '*' ('-' xm 1.) '*' ym '*' -4.) ;
   mp1 = 'POIN' ('DOMA' $mt kpre) 1 ;
10 *
   rv = 'EQEX' 'NITER' 1 'OMEGA' 1.DO 'ITMA' 1
        'OPTI' 'EF' 'IMPL' 'CENTREE' kpre
        'ZONE' $mt 'OPER' 'KBBT' 1. 'INCO' 'UN' 'PN'
        'OPTI' 'EF' 'IMPL' 'CENTREE'
        'ZONE' $mt 'OPER' 'LAPN' 1. 'INCO' 'UN'
        'CLIM' 'UN' 'UIMP' mclim cux
        'CLIM' 'UN' 'VIMP' mclim 0.
        'CLIM' 'PN' 'TIMP' mp1 0. ;
   *
20 rv . 'INCO' = 'TABLE' 'INCO' ;
   rv . 'INCO' . 'UN' = 'KCHT' $mt 'VECT' 'SOMMET' (0. 0.) ;
   rv . 'INCO' . 'PN' = 'KCHT' $mt 'SCAL' kpre 0. ;
   *
   EXEC rv ;

```

Listing 8.1: Jeu de donnée `infsup.dgibi` correspondant au problème (8.19)-(8.20).

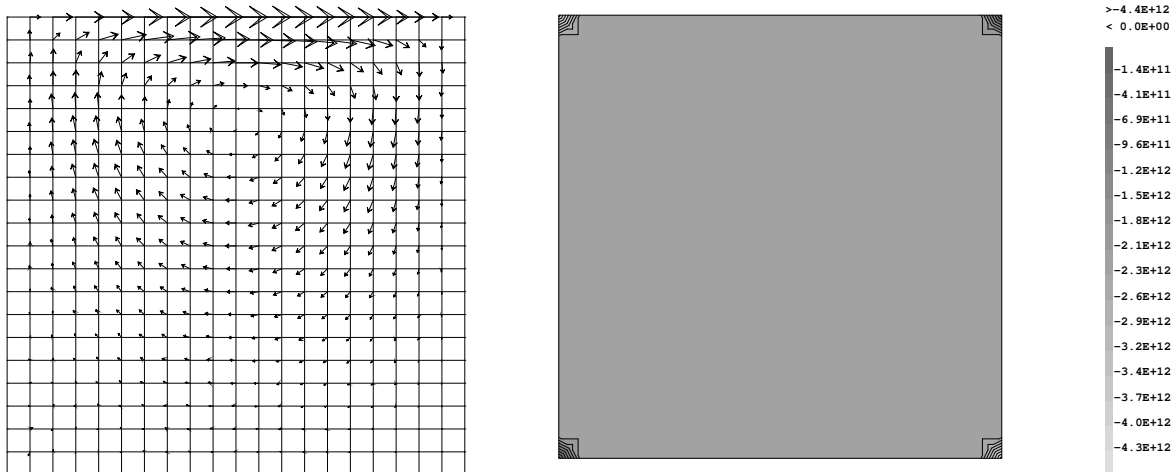


FIG. 8.2: Solution numérique du problème de Stokes (8.19)-(8.20) avec des éléments finis carrés de la famille LINE/CENTRE. Gauche : vitesse \mathbf{u}_h . Droite : pression p_h .

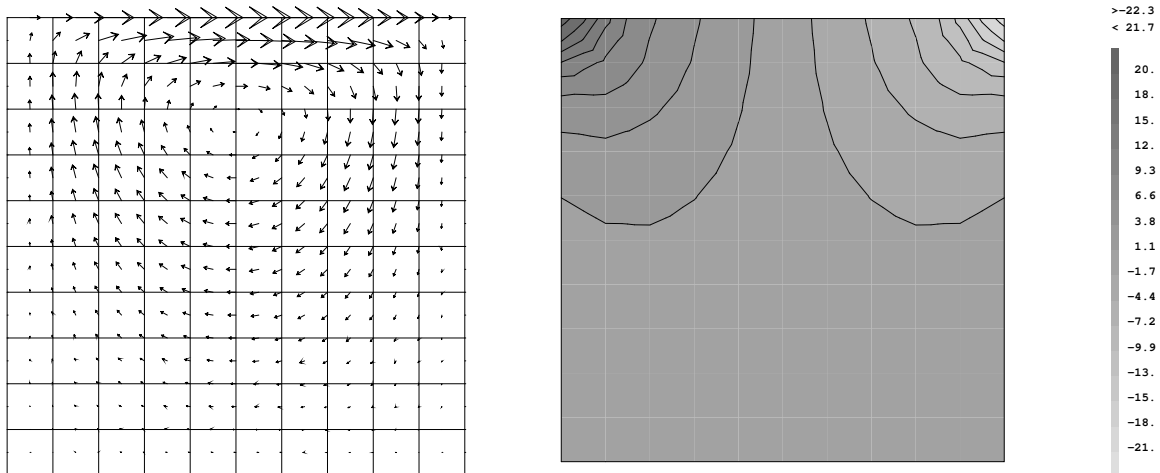


FIG. 8.3: Solution numérique du problème de Stokes (8.19)-(8.20) avec des éléments finis carrés de la famille QAF/CENTREP1. Gauche : vitesse \mathbf{u}_h . Droite : pression p_h .

instable $\mathbb{Q}_1/\mathbb{P}_0$, on obtient le résultat montré figure 8.2. Le champ de vitesses a l'air correct malgré la présence de vitesses parasite, visibles dans le coin en bas à gauche. Par contre, l'examen du champ de pression montre que celle-ci n'est pas correcte, les valeurs aux coins obtenues étant de l'ordre de 10^{12} . Ceci est le signe d'une explosion de l'algorithme de résolution du système linéaire : en arithmétique à virgule flottante, la matrice \mathbf{A}_h n'est pas *exactement* singulière, à cause de la précision limitée de la représentation des nombres réels. Mais comme elle en est très proche, on obtient ces valeurs très grandes pour les inconnues pression.

Si on utilise l'élément stable $\mathbb{Q}_2/\mathbb{P}_1^{\text{disc}}$, on obtient le résultat montré figure 8.3, qui est correct en vitesse et en pression.

Exercice 4 Vérifier numériquement qu'en raffinant le maillage, on tend vers une solution avec les bons ordres de convergence.

8.3 Résumé

Dans ce chapitre, nous avons montré la formulation du problème de Stokes comme problème de minimisation sous contraintes (ou point-selle), faisant apparaître l'inconnue p , qui est le multiplicateur de Lagrange permettant d'imposer la conservation de la masse, vue comme une contrainte $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$.

D'un point de vue matriciel, le système obtenu a une structure caractéristique $\mathbf{A}_h = \begin{pmatrix} \mathbf{R} & \mathbf{B}^t \\ \mathbf{B} & 0 \end{pmatrix}$ des problèmes d'optimisation sous contraintes.

La condition de stabilité pour le problème discret induit des contraintes sur le choix des éléments finis pour la vitesse \mathbf{u}_h et la pression p_h .

Chapitre 9

Conditions aux limites et conservation

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\nabla \mathbf{u}) \cdot \mathbf{u} &= -\nabla p^* + \nu \Delta \mathbf{u} + \mathbf{s}_u \\ \nabla \cdot \mathbf{u} &= 0 \\ \frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla T &= \alpha \Delta T + s_T \end{aligned}$$

Conditions aux limites ?

Nous consacrons ce chapitre à l'étude des conditions aux limites pour les différents problèmes modèles que nous avons examinés jusqu'ici.

Nous commençons par une variante du problème de Dirichlet vu au chapitre 2 : le problème de Neumann, en section 9.1. Ce dernier nous permet d'exhiber une propriété très importante du problème continu, qui est préservée par la méthode des Éléments Finis : la notion de *conservation globale* d'une quantité. De manière liée à la conservation, on fait apparaître une condition de compatibilité sur les flux que l'on impose aux bords du domaine.

En section 9.2, on montre comment la notion de conservation globale peut être exprimée pour un problème de diffusion stationnaire avec des conditions aux limites plus générales que celles du problème de Neumann en introduisant la notion de *multiplicateur de Lagrange* pour l'imposition des conditions aux limites de Dirichlet.

En section 9.3, consacrée à l'équation de convection-diffusion stationnaire, on montre que l'intégration par parties ou non du terme convectif donne lieu à deux types de conditions aux limites naturelles différentes.

En section 9.4, les conditions aux limites essentielles, naturelles et mixtes pour le problème de Stokes sont mises en évidence, ainsi que les conditions de compatibilité éventuellement associées. Le terme visqueux peut s'écrire de plusieurs manières, qui sont équivalentes pour le problème continu mais qui donnent lieu à des conditions aux limites naturelles différentes pour le problème discret.

Enfin, en section 9.5, nous donnons un exemple numérique sur les équations de Navier-Stokes stationnaires illustrant les différentes conditions aux limites naturelles obtenues en variant les formulations des termes convectifs et diffusifs.

9.1 Problème de Neumann avec termes sources

9.1.1 Le problème de Neumann continu

Reprenons le problème de Dirichlet (2.3) sous la forme suivante :

$$\min_{T \in \mathcal{H}^1(\Omega)} I(T) = \min_{T \in \mathcal{H}^1(\Omega)} \int_{\Omega} \frac{\alpha}{2} \|\nabla T\|^2 - sT \, d\Omega - \int_{\delta\Omega} qT \, d\delta\Omega \quad (9.1)$$

Cette fois-ci, $T(\mathbf{x}) \in \mathcal{H}^1(\Omega)$ au lieu de $T(\mathbf{x}) \in \mathcal{H}_D^1(\Omega)$ pour le problème (2.3) : nous n'avons pas imposé de conditions aux limites de Dirichlet pour T sur le bord du domaine $\delta\Omega$. s est une fonction définie sur Ω qui représente un terme source *volumique* : ceci se verra mieux sur l'équation aux dérivées partielles équivalente. q est une fonction définie sur $\delta\Omega$ qui représente un terme source surfacique.

Une condition de minimisation pour I s'écrit :

$$\delta_U I(T) = \int_{\Omega} \alpha \nabla T \cdot \nabla U \, d\Omega - \int_{\Omega} sU \, d\Omega - \int_{\delta\Omega} qU \, d\delta\Omega = 0 \quad \forall U \in \mathcal{H}^1(\Omega) \quad (9.2)$$

En supposant que T , la solution du problème continu, est suffisamment régulière, on utilise l'intégration par parties pour obtenir :

$$\int_{\Omega} (-\alpha \Delta T - s) \times U \, d\Omega + \int_{\delta\Omega} (\alpha \nabla T \cdot \mathbf{n} - q) \times U \, d\delta\Omega = 0 \quad (9.3)$$

Choisissons U dans l'ensemble des fonctions définies sur Ω qui s'annulent sur $\delta\Omega$: la deuxième intégrale de (9.3) est nulle du fait du choix de U , ce qui implique que la première intégrale s'annule également. La seule manière pour que la première intégrale soit nulle quelle que soit U est d'avoir :

$$-\alpha \Delta T - s = 0 \quad \text{sur } \Omega \quad (9.4)$$

Choisissons maintenant U dans l'ensemble des fonctions définies sur Ω qui s'annulent partout *sauf* sur $\delta\Omega$: la première intégrale de (9.3) est nulle du fait du choix de U , ce qui implique que la deuxième intégrale s'annule également. La seule manière pour que la deuxième intégrale soit nulle quelle que soit U est d'avoir :

$$\alpha \nabla T \cdot \mathbf{n} - q = 0 \quad \text{sur } \delta\Omega \quad (9.5)$$

q représente donc une condition de flux entrant sur $\delta\Omega$. En effet, le flux thermique est défini comme : $\mathbf{q} = -\alpha \nabla T$, la condition à la limite (9.5) correspond donc à : $\mathbf{q} \cdot \mathbf{n} = -q$. \mathbf{n} étant définie comme la normale sortante, q est donc un flux entrant.

La condition aux limites sur le flux (9.5) est appelée condition de *Neumann* ou condition *naturelle* du problème de Dirichlet, par opposition à la condition aux limites sur l'inconnue T traitée au chapitre 2, appelée condition de *Dirichlet* ou condition *essentielle*.

9.1.2 Le problème de Neumann discret

Le problème de Neumann discret s'écrit :

$$\min_{T_h \in \mathcal{H}^1(\Omega)} I(T_h) = \min_{T_h \in \mathcal{H}^1(\Omega)} \int_{\Omega} \frac{\alpha}{2} \|\nabla T_h\|^2 - sT_h \, d\Omega - \int_{\delta\Omega} qT_h \, d\delta\Omega \quad (9.6)$$

La condition de minimisation pour le problème discret s'écrit :

$$\delta_{N_i} I(T_h) = \int_{\Omega} \alpha \nabla T_h \cdot \nabla N_i - s N_i \, d\Omega - \int_{\delta\Omega} q N_i \, d\delta\Omega = 0 \quad \forall N_i \in \mathbf{H}^1(\Omega) \quad \text{i.e.} \quad \forall i \in \Omega \quad (9.7)$$

À noter qu'ici, contrairement au cas du problème continu, on ne peut pas utiliser l'intégration par parties car T_h n'est pas suffisamment régulière : en effet, le gradient de T_h n'est en général pas continu à l'interface entre deux éléments (se rappeler la figure 3.3 par exemple) et on ne pourrait pas donner un sens à l'intégrale $\int_{\Omega} (-\alpha \Delta T_h) \times N_i \, d\Omega$.

La deuxième intégrale de (9.3) semble avoir un sens, même pour le problème discret, puisque : $\int_{\delta\Omega} (\alpha \nabla T_h \cdot \mathbf{n} - q) \times N_i \, d\delta\Omega = 0$ est calculable mais, en fait, ceci ne peut pas nous servir à déduire $\alpha \nabla T_h \cdot \mathbf{n} - q = 0$ sur $\delta\Omega$ car N_i , même si i est un point du bord, n'est pas nulle sur $\Omega \setminus \delta\Omega$: c'est une fonction chapeau. Répétons-le :

$$\alpha \nabla T_h \cdot \mathbf{n} - q \neq 0 \quad \text{sur} \quad \delta\Omega \quad (9.8)$$

Dès lors, peut-on vraiment dire que q est un flux entrant imposé une fois que l'on a discrétisé le problème ? La réponse est heureusement oui. Le fait que l'on ne puisse plus utiliser l'intégration par parties dans le problème discret n'empêche pas que, si le problème discret est stable, nous allons avoir la convergence de T_h vers la solution du problème continu (9.2) : T . Et, si T est suffisamment régulière pour que l'on puisse appliquer l'intégration par parties, on a l'interprétation de q comme flux de T entrant.

On dit que la condition de Neumann $\alpha \nabla T \cdot \mathbf{n} - q = 0$ est imposée de manière *faible* lorsque la formulation (9.7) est utilisée. Par opposition, la condition de Dirichlet $T = T_0$ est imposée de manière *forte* dans la formulation discrète correspondante à (2.19) : on a exactement $T = T_0$ sur les nœuds de discrétisation qui sont sur $\delta\Omega$.

Nous tentons d'expliciter ce point sur un exemple simple en section 9.2.2. Pour des détails supplémentaires, on pourra consulter l'ouvrage classique de Strang et Fix [SF88].

Finalement, en développant T_h sur la base des N_i , on obtient le système linéaire avec second membre b sur les inconnues T_j :

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \alpha \nabla T_h \cdot \nabla N_i - s N_i \, d\Omega - \int_{\delta\Omega} q N_i \, d\delta\Omega &= \sum_j T_j \left(\int_{\Omega} \nabla N_j \cdot \nabla N_i \, d\Omega \right) - b_i(s, q) \\ &= \sum_j T_j R_{ji} - b_i(s, q) \\ &= 0 \quad \forall i \end{aligned} \quad (9.9)$$

soit encore, sous forme matricielle :

$$\mathbf{R}\mathbf{T} - \mathbf{s} - \bar{\mathbf{q}} = \mathbf{0} \quad (9.10)$$

où \mathbf{R} est la matrice de rigidité $R_{ji} = \int_{\Omega} \nabla N_j \cdot \nabla N_i \, d\Omega$, \mathbf{s} est la contribution au second membre du terme source volumique $\mathbf{s}_i = \int_{\Omega} s N_i \, d\Omega$ et $\bar{\mathbf{q}}$ est la contribution au second membre du terme source surfacique (flux entrant) $\bar{\mathbf{q}}_i = \int_{\delta\Omega} q N_i \, d\delta\Omega$.

9.1.3 Indétermination de l'inconnue et condition de compatibilité

Reprenons le problème (9.1). Celui-ci est souvent appelé *problème de Neumann* pour insister sur le fait qu'il n'y a pas de conditions imposées sur la valeur de l'inconnue T au

bord. Du fait que T n'est pas imposée au bord et que seul ∇T apparaît dans la fonctionnelle, on en déduit que, si T est une solution du problème, $T + c$ où c est une constante quelconque est également une solution. T est *indéterminée* à une constante près.

De manière duale à cette indétermination de T , il existe une *condition de compatibilité* sur les termes sources qu'il faut vérifier. Pour la faire apparaître, écrivons la condition de minimisation (9.2) pour une variation U particulière, constante sur Ω , il vient :

$$\int_{\Omega} s \, d\Omega + \int_{\delta\Omega} q \, d\delta\Omega = 0 \quad (9.11)$$

Ceci est l'expression d'une *conservation globale* : la quantité de chaleur sortant par le bord $\delta\Omega$ est égale à la quantité de chaleur produite dans le domaine Ω .

Ce qui vient d'être dit s'applique également directement au problème discret lorsque T_h est dans un espace d'éléments finis car les fonctions constantes sur Ω font partie de cet espace. En effet, la somme de toutes les fonctions de base vaut 1 sur chaque nœud P_j d'après la propriété de base nodale :

$$\left(\sum_i N_i(\mathbf{x}) \right) \Big|_{\mathbf{x}=P_j} = 1 \quad \forall j \quad (9.12)$$

et comme les N_i sont polynômes sur chaque élément, on en déduit :

$$\left(\sum_i N_i(\mathbf{x}) \right) = 1 \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega \quad (9.13)$$

En sommant sur i les conditions de minimisation du problème discret (9.7), on obtient à nouveau la condition de compatibilité (9.11) car :

$$\begin{aligned} & \sum_i \left(\int_{\Omega} \alpha \nabla T_h \cdot \nabla N_i - s N_i \, d\Omega - \int_{\delta\Omega} q N_i \, d\delta\Omega \right) \\ &= \int_{\Omega} \alpha \nabla T_h \cdot \nabla \left(\sum_i N_i \right) - s \left(\sum_i N_i \right) \, d\Omega - \int_{\delta\Omega} q \left(\sum_i N_i \right) \, d\delta\Omega \\ &= - \left(\int_{\Omega} s \, d\Omega + \int_{\delta\Omega} q \, d\delta\Omega \right) \\ &= 0 \end{aligned} \quad (9.14)$$

soit encore, sous forme matricielle :

$$\sum_i \mathbf{s}_i + \sum_i \bar{\mathbf{q}}_i = 0 \quad (9.15)$$

Remarque 3 La solution discrète T_h obtenue vérifie donc la conservation globale de la chaleur. Ceci est une propriété très importante de la méthode des éléments finis.

Remarque 4 Par contre, la solution discrète T_h obtenue ne vérifie pas de conservation locale, sur un élément Ω_k , de la chaleur. Ceci est dû au fait que les fonctions indicatrices des éléments $\mathbf{1}_k$ (valant 1 sur Ω_k et 0 ailleurs) ne font pas partie de l'espace de fonctions de $T_h : H^1(\Omega)$. Toutefois, la i^e équation du système discret (l'expression $\sum_j T_j R_{ji} - b_i = 0$ de l'équation (9.9)) est une expression de la conservation locale de la chaleur "autour" du nœud i .

Au niveau du système linéaire (9.9) à résoudre, l'indétermination fait que la matrice $R_{ij} = \int_{\Omega} \nabla N_i \cdot \nabla N_j \, d\Omega$ a une valeur propre nulle associée au vecteur propre $\mathbf{1}$ ne contenant que des 1. Dit autrement, $R\mathbf{1} = 0 \cdot \mathbf{1}$, la somme des termes de chaque ligne de R est donc nulle. La condition de compatibilité impose que le second membre b soit orthogonal à $\mathbf{1}$ c'est-à-dire : $\sum_i b_i = 0$ (9.15) pour que le système admette des solutions.

Enfin, une fois la condition de compatibilité vérifiée, il faut lever l'indétermination, par exemple en imposant la valeur de T_h en un point, pour que le système ait une solution unique.

9.2 Problème de diffusion général

9.2.1 Variations sur les conditions aux limites

En général, dans les problèmes de diffusion que l'on veut résoudre, on va avoir des conditions aux limites de Dirichlet sur une partie de $\delta\Omega$ et des conditions aux limites de Neumann sur une autre. On partitionne donc $\delta\Omega$ en : $\delta\Omega = \delta\Omega_D \cup \delta\Omega_N$ avec $\delta\Omega_D \cap \delta\Omega_N = \emptyset$.

Au niveau discret, le problème devient :

$$\begin{aligned} \delta_{N_i} I(T_h) = \int_{\Omega} \alpha \nabla T_h \cdot \nabla N_i - s N_i \, d\Omega - \int_{\delta\Omega_N} q N_i \, d\delta\Omega_N = 0 \quad \forall N_i \in H_D^1(\Omega) \\ \text{i.e.} \quad \forall i \in (\Omega - \delta\Omega_D) \quad (9.16) \\ T_i = T_0(P_i) \quad \forall i \in \delta\Omega_D \end{aligned}$$

Dans Cast3M, c'est la directive 'CLIM' de l'opérateur 'EQEX' qui va permettre de préciser les conditions aux limites de Dirichlet. Elles seront imposées par le solveur de systèmes linéaires appelé par EXEC. Les termes sources surfaciques $\int_{\delta\Omega_N} q N_i \, d\delta\Omega_N$ et volumiques $\int_{\Omega} s N_i \, d\Omega$ peuvent être calculés par l'opérateur 'FIMP' (Flux IMPosé).

Qu'en est-il maintenant de la propriété de conservation globale de la méthode des éléments finis? Dès que nous avons des conditions aux limites de Dirichlet, nous n'avons plus $\sum_i N_i = 1$ sur le domaine car nous avons imposé à la variation d'être nulle sur le bord du domaine d'où $(\sum_i N_i)(P_j) = 0 \quad \forall i \in \delta\Omega_D$. De façon heureuse, nous pouvons retrouver la propriété de conservation globale de la méthode. La façon la plus élégante est de ne plus contraindre la variation à être nulle au bord mais d'imposer les conditions de Dirichlet à l'aide de *multiplicateurs de Lagrange*.

Nous avons déjà rencontré cette notion de multiplicateur lorsque nous avons parlé du problème de Stokes au chapitre 8. Le multiplicateur p servait à imposer la contrainte $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$ et avait la signification physique d'une pression.

Ici, les multiplicateurs de Lagrange λ serviront à imposer les contraintes de Dirichlet $T_i = T_0(P_i)$ et auront une signification physique de *flux*. Comprendre cette notion de *dualité* entre les conditions aux limites essentielles (valeur imposée) et naturelles (flux) est fondamental. C'est pourquoi nous allons maintenant traiter en détail un exemple simple et concret, avant de décrire de manière plus abstraite et générale l'utilisation de la méthode des multiplicateurs de Lagrange pour l'imposition des conditions aux limites de Dirichlet.

9.2.2 Un exemple simple traité en détail

Dans cette sous-section, nous regardons un problème simple de diffusion 1D stationnaire avec terme source constant et condition à la limite de Dirichlet à gauche et de Neumann

à droite. La solution exacte de ce problème est connue. On regarde le résultat obtenu par la méthode des éléments finis sur un maillage de deux éléments en détaillant différentes manières d'imposer la condition à la limite de Dirichlet.

Problème continu

Le problème que l'on regarde s'écrit donc :

$$\begin{cases} -\alpha \Delta T = s \\ T|_{x=0} = T_{\text{imp}} \\ -\alpha \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x=1} = f_{\text{imp}} \end{cases} \quad (9.17)$$

où le terme source s , ainsi que le coefficient α , sont constants en espace.

Solution exacte Le problème (9.17) admet une solution exacte parabolique en x qui s'exprime comme :

$$\begin{cases} T(x) = ax^2 + bx + c \\ a = -\frac{s}{2\alpha} \\ b = \frac{s - f_{\text{imp}}}{\alpha} \\ c = T_{\text{imp}} \end{cases} \quad (9.18)$$

Problème discret

La discrétisation du problème (9.17) conduit à écrire :

$$\begin{cases} \int_{\Omega} \alpha \nabla T_h \nabla N_i \, d\Omega = \int_{\delta\Omega} -f_{\text{imp}} N_i \, d\delta\Omega + \int_{\Omega} s N_i \, d\Omega \quad \forall i \\ T_h|_{x=0} = T_{\text{imp}} \end{cases} \quad (9.19)$$

avec T_h cherché sous la forme :

$$T_h(x) = T_0 N_0(x) + T_1 N_1(x) + T_2 N_2(x) \quad (9.20)$$

Désormais, $\begin{pmatrix} T_0 \\ T_1 \\ T_2 \end{pmatrix}$ est le vecteur des inconnues recherchées.

En calculant les intégrales, on est conduit à la formulation matricielle du problème (9.19) suivante :

$$\frac{\alpha}{\Delta x} \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} T_0 \\ T_1 \\ T_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -f_{\text{imp}} \end{pmatrix} + s \Delta x \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ 1 \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix} \quad (9.21)$$

où nous n'avons pas encore imposé la condition de Dirichlet $T_0 = T_{\text{imp}}$. On vérifie bien que la matrice du système sans avoir imposé cette condition a une valeur propre nulle, puisque la somme des termes de chaque ligne est nul.

On remarque également, en regardant la dernière ligne, que :

$$f_{\text{imp}} = -\alpha \frac{T_2 - T_1}{\Delta x} + s \frac{\Delta x}{2} \quad (9.22)$$

De plus, on a :

$$-\alpha \frac{\partial T_h}{\partial x} \Big|_{x=1} = -\alpha \frac{T_2 - T_1}{\Delta x} \quad (9.23)$$

On voit bien que, dans le discret, conformément à la discussion de la section 9.1.2 :

$$-\alpha \frac{\partial T_h}{\partial x} \Big|_{x=1} \neq f_{\text{imp}} \quad (9.24)$$

Ceci est dû au fait que la condition de flux est imposée de manière faible par la méthode des éléments finis. Par contre, quand $\Delta x \rightarrow 0$, $-\alpha \frac{\partial T_h}{\partial x} \Big|_{x=1} \rightarrow f_{\text{imp}}$.

Imposition des conditions aux limites

Regardons maintenant quelques méthodes pour imposer la condition de Dirichlet $T_0 = T_{\text{imp}}$.

Calcul incomplet des intégrales La première méthode est en fait celle que nous avons utilisée jusqu'à présent : elle consiste à ne pas calculer les intégrales impliquant les N_i pour lesquels T_i est imposé, dans la formulation (9.19). Ceci se traduit dans notre cas sur le système matriciel par :

$$\frac{\alpha}{\Delta x} \begin{pmatrix} -1 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} T_0 \\ T_1 \\ T_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ -f_{\text{imp}} \end{pmatrix} + s\Delta x \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix} \quad (9.25)$$

La matrice du système obtenue est rectangulaire. En utilisant la valeur de la condition de Dirichlet $T_0 = T_{\text{imp}}$, on se ramène à un système carré sur les inconnues non imposées :

$$\frac{\alpha}{\Delta x} \begin{pmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} T_1 \\ T_2 \end{pmatrix} = \frac{\alpha}{\Delta x} \begin{pmatrix} T_{\text{imp}} \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ -f_{\text{imp}} \end{pmatrix} + s\Delta x \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix} \quad (9.26)$$

La solution discrète obtenue est, en utilisant $\Delta x = 0.5$:

$$\begin{cases} T_1 = T_{\text{imp}} - \frac{f_{\text{imp}}}{2\alpha} + \frac{3s}{8\alpha} \\ T_2 = T_{\text{imp}} - \frac{f_{\text{imp}}}{\alpha} + \frac{s}{2\alpha} \end{cases} \quad (9.27)$$

Une propriété remarquable est que, dans le cas particulier du problème (9.17), *la solution discrète coïncide avec la solution exacte aux nœuds du maillage*. En effet : $T_1 = T|_{x=0.5}$ et $T_2 = T|_{x=1}$.

La méthode de calcul incomplet des intégrales n'est toutefois pas très pratique à utiliser dans un code de calcul car tous les opérateurs de discrétisation doivent connaître les conditions aux limites de Dirichlet.

Méthode d'élimination La deuxième méthode est quasiment la même que la précédente mais sa mise en œuvre est différente : on calcule toutes les intégrales, y compris

celle impliquant les N_i pour lesquels T_i est imposé. Une fois toutes les contributions calculées (système de départ (9.21)), on change les lignes de la matrice et les seconds membres correspondant aux conditions de Dirichlet :

$$\frac{\alpha}{\Delta x} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} T_0 \\ T_1 \\ T_2 \end{pmatrix} = \frac{\alpha}{\Delta x} \begin{pmatrix} T_{\text{imp}} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -f_{\text{imp}} \end{pmatrix} + s\Delta x \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix} \quad (9.28)$$

Puis, on symétrise la matrice en utilisant les valeurs connues des conditions de Dirichlet :

$$\frac{\alpha}{\Delta x} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} T_0 \\ T_1 \\ T_2 \end{pmatrix} = \frac{\alpha}{\Delta x} \begin{pmatrix} T_{\text{imp}} \\ T_{\text{imp}} \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -f_{\text{imp}} \end{pmatrix} + s\Delta x \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix} \quad (9.29)$$

Cette méthode est très similaire à la première méthode et donne exactement la même solution. Il est toutefois dommage que l'on ait calculé tous les termes de la première ligne du système pour ensuite ne plus les prendre en compte. Or ceux-ci peuvent nous fournir des informations utiles.

Méthode des multiplicateurs de Lagrange Dans cette troisième méthode, la condition à la limite de Dirichlet $T_0 = T_{\text{imp}}$ est imposée, non en modifiant la première ligne du système, mais en introduisant une inconnue supplémentaire μ , le *multiplicateur de Lagrange*, chargée d'imposer la condition de Dirichlet. Sur la ligne correspondant à μ , on écrit $T_0 = T_{\text{imp}}$. La colonne agissant sur μ est prise comme la transposée de la ligne¹, on obtient

ainsi un système matriciel symétrique augmenté à quatre inconnues $\begin{pmatrix} T_0 \\ T_1 \\ T_2 \\ \mu \end{pmatrix}$:

$$\begin{pmatrix} 1\frac{\alpha}{\Delta x} & -1\frac{\alpha}{\Delta x} & 0 & 1 \\ -1\frac{\alpha}{\Delta x} & 2\frac{\alpha}{\Delta x} & -1\frac{\alpha}{\Delta x} & 0 \\ 0 & -1\frac{\alpha}{\Delta x} & 1\frac{\alpha}{\Delta x} & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} T_0 \\ T_1 \\ T_2 \\ \mu \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ T_{\text{imp}} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -f_{\text{imp}} \\ 0 \end{pmatrix} + s\Delta x \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ 1 \\ \frac{1}{2} \\ 0 \end{pmatrix} \quad (9.30)$$

Cette méthode fournit *exactement* la même solution que les deux méthodes précédentes pour les inconnues $\begin{pmatrix} T_0 \\ T_1 \\ T_2 \end{pmatrix}$. Elle est algébriquement équivalente : en effet, on obtient $T_0 =$

T_{imp} avec la quatrième ligne du système (9.30), puis T_1, T_2 sont obtenus avec les lignes 2 et 3 qui n'ont pas été modifiées par rapport aux méthodes précédentes. Enfin, μ est obtenu à partir de la première ligne connaissant les T_i :

$$\mu = -\alpha \frac{T_0 - T_1}{\Delta x} + s \frac{\Delta x}{2} \quad (9.31)$$

Cette équation est très similaire à l'équation (9.22) impliquant le flux imposé f_{imp} à droite. Et c'est exactement l'interprétation que l'on donne à μ : μ est le flux qui, imposé à la place de la condition de Dirichlet $T_0 = T_{\text{imp}}$, aurait fourni la même solution T_h^2 .

¹La raison pour laquelle on prend la transposée de la ligne est due au problème d'optimisation sous contrainte sous-jacent : cf. section 8.2.

²Ici, T_h serait identique à une constante près car on n'aurait plus que des conditions de Neumann.

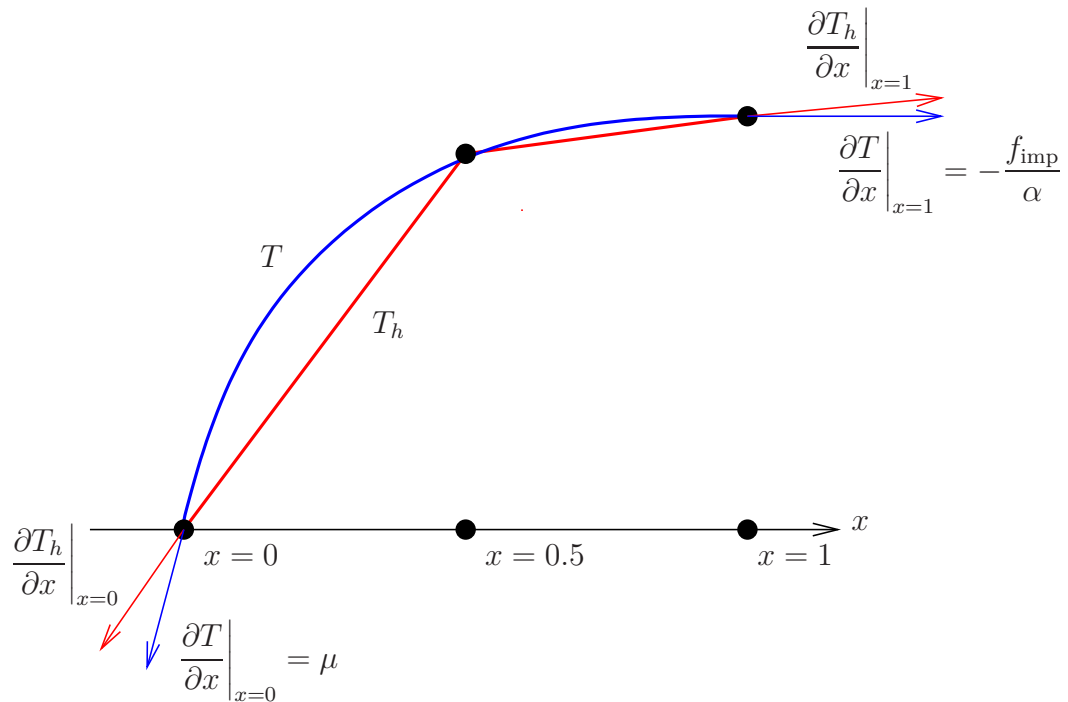


FIG. 9.1: Problème de diffusion 1D à 3 points (9.17).

Ce flux μ est également un flux “faible”, en effet $\mu \neq -\alpha \frac{\partial T_h}{\partial x} \Big|_{x=0}$. Dans notre cas particulier, μ est, par contre, égal au flux de la solution exacte! En effet : $\mu = -\alpha \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x=0}$.

En sommant les trois première lignes du système (9.30), on retrouve une expression de la *conservation globale de la chaleur* :

$$\int_{\Omega} s \, d\Omega = s = f_{\text{imp}} + \mu \quad (9.32)$$

On voit donc l’importance de la méthode des multiplicateurs de Lagrange : algébriquement, elle est équivalente aux autres méthodes et fournit donc la même solution, par contre, elle nous fournit de l’information supplémentaire : la valeur du flux faible μ aux points où l’on a imposé la température. Ce flux μ est très important puisque c’est lui qui nous permet d’exprimer à nouveau la propriété de conservation globale de la méthode des éléments finis en présence de conditions de Dirichlet.

Propriétés de la solution discrète La figure 9.1 illustre les propriétés de la solution discrète au problème (9.17). La solution discrète obtenue par la méthode des éléments finis est exacte aux nœuds du maillage. Les flux faibles sont également exacts, contrairement aux flux forts.

Exercice 5 Vérifier que les propriétés d’exactitude évoquées pour le problème (9.17) sont également vérifiées lorsque le maillage a plus de deux éléments et lorsque le maillage n’est pas régulier.

Exercice 6 Tracer la valeur de la fonctionnelle $(\int_{\Omega} \frac{\alpha}{2} \|\nabla T_h\|^2 - s T_h \, d\Omega)$ en fonction de la position du point milieu, pour un maillage de deux éléments. En déduire le maillage optimal, qui minimise cette valeur, pour ce cas.

Les résultats obtenus par la méthode des éléments finis sur le problème (9.17) sont tout à fait remarquables, plus difficiles à obtenir simultanément avec d'autres méthodes de discrétisation :

- avec une méthode de *Différences Finies*, il sera difficile d'imposer la condition de Neumann. On le fait généralement de manière forte (par exemple avec : $-\alpha \frac{T_2 - T_1}{\Delta x} = f_{\text{imp}}$) mais ceci a pour effet de dégrader l'ordre de convergence au bord car on a ici une différence finie d'ordre 1, alors que l'ordre est en général de 2 sur le Laplacien dans le domaine ;
- avec une méthode de *Volumes Finis* centrés sur les mailles, on aura la propriété de conservation locale, par maille, de la chaleur. Par contre, il sera difficile d'imposer les conditions de Dirichlet car les inconnues ne sont pas définies au bord de façon naturelle.

En outre, la méthode des multiplicateurs de Lagrange et la propriété de conservation globale se généralisent en plusieurs dimensions d'espace, et pour d'autres équations de conservation, ce que nous allons voir maintenant.

9.2.3 Méthode des multiplicateurs de Lagrange pour les conditions de Dirichlet

Méthode des multiplicateurs de Lagrange continue

Nous reformulons maintenant le problème de diffusion (9.16) avec termes sources, conditions de Dirichlet sur $\delta\Omega_D$ et conditions de Neumann sur $\delta\Omega_N$ sous la forme d'un problème de *minimisation sous contraintes* ou de *point-selle* mettant en jeu la fonctionnelle :

$$I(T, \lambda) = \int_{\Omega} \frac{\alpha}{2} \|\nabla T\|^2 - sT \, d\Omega + \int_{\delta\Omega_N} f_{\text{imp}} T \, d\delta\Omega_N + \int_{\delta\Omega_D} \lambda(T - T_0) \, d\delta\Omega_D \quad (9.33)$$

où nous avons introduit le multiplicateur de Lagrange λ , défini sur $\delta\Omega_D$, pour imposer les conditions de Dirichlet $T = T_0$.

La condition pour que (T, λ) soit un point-selle de I s'écrit :

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \alpha \nabla T \cdot \nabla U - sU \, d\Omega + \int_{\delta\Omega_N} f_{\text{imp}} U \, d\delta\Omega_N \\ + \int_{\delta\Omega_D} \lambda U \, d\delta\Omega_D + \int_{\delta\Omega_D} \mu(T - T_0) \, d\delta\Omega_D = 0 \quad \forall (U, \mu) \end{aligned} \quad (9.34)$$

Sous des conditions de régularité sur T , on peut utiliser une intégration par parties pour obtenir :

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} (-\alpha \Delta T - s) U \, d\Omega + \int_{\delta\Omega} \alpha \nabla T \cdot \mathbf{n} U \, d\delta\Omega + \int_{\delta\Omega_N} f_{\text{imp}} U \, d\delta\Omega_N \\ + \int_{\delta\Omega_D} \lambda U \, d\delta\Omega_D + \int_{\delta\Omega_D} \mu(T - T_0) \, d\delta\Omega_D = 0 \quad \forall (U, \mu) \end{aligned} \quad (9.35)$$

Ce qui nous donne l'EDP avec les conditions aux limites :

$$\begin{cases} -\alpha \Delta T = s \\ -\alpha \nabla T \cdot \mathbf{n}|_{\delta\Omega_N} = f_{\text{imp}} \\ T|_{\delta\Omega_D} = T_0 \end{cases} \quad (9.36)$$

On en déduit également le sens physique de λ :

$$\lambda = -\alpha \nabla T \cdot \mathbf{n}|_{\delta\Omega_D} \quad (9.37)$$

Il s'agit d'un *flux sortant* sur le bord du domaine $\delta\Omega_D$ où on a imposé les conditions de Dirichlet. On a l'expression de la *dualité* entre les deux types de conditions aux limites : là où T est fixé, on calcule le flux λ ; là où f_{imp} est fixé, T est calculé.

On retrouve également l'expression de la *conservation globale* en choisissant comme variation particulière dans (9.34) : $(U, \mu) = (1, 0)$. On obtient :

$$\int_{\Omega} s \, d\Omega = \int_{\delta\Omega_N} f_{\text{imp}} \, d\delta\Omega_N + \int_{\delta\Omega_D} \lambda \, d\delta\Omega_D$$

La méthode des multiplicateurs de Lagrange continue, que nous venons d'exposer, présente toutefois quelques inconvénients :

- le choix de l'espace de fonctions dans lequel choisir λ n'est pas évident. En regardant la fonctionnelle, on peut choisir un espace présentant une régularité moindre que celui pour T (puisque λ n'est pas dérivé spatialement) et défini uniquement sur $\delta\Omega_D$;
- le choix de cet espace devra être tel que le problème continu soit bien posé ;
- il faudra trouver un sous-espace discret, élément fini, de cet espace tel que le problème discret soit stable.

En fait, trouver un espace qui vérifie ces conditions n'est pas facile, particulièrement si la frontière $\delta\Omega$ n'est pas régulière, c'est pourquoi nous allons procéder autrement.

Méthode des multiplicateurs de Lagrange discrète

Nous avons vu, en traitant le problème 1D simple (9.17), que la méthode des multiplicateurs de Lagrange que nous avons introduite, *après discrétisation spatiale* du problème, était *algébriquement* équivalente à la méthode d'élimination des inconnues soumises aux conditions de Dirichlet.

C'est pourquoi nous formulons à nouveau le problème de diffusion (9.16) sous la forme d'un problème de *point-selle discret* mettant en jeu la fonctionnelle :

$$I(T_h, \lambda_h) = \int_{\Omega} \frac{\alpha}{2} \|\nabla T_h\|^2 - s T_h \, d\Omega + \int_{\delta\Omega_N} f_{\text{imp}} T \, d\delta\Omega_N + \sum_{i \in \delta\Omega_D} \lambda_i (T_i - T_{0i}) \quad (9.38)$$

où nous avons introduit les multiplicateurs de Lagrange discret λ_h , pour imposer les conditions de Dirichlet $T|_{P_i} = T_0|_{P_i}$ aux nœuds P_i , supports de T_h , appartenant à la frontière $\delta\Omega_D$.

La condition de point-selle s'écrit alors :

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \alpha \nabla T_h \cdot \nabla N_i - s N_i \, d\Omega + \int_{\delta\Omega_N} f_{\text{imp}} N_i \, d\delta\Omega_N \\ + [\lambda_i + \mu_i (T_i - T_{0i})]|_{i \in \delta\Omega_D} = 0 \quad \forall (i, \mu_i) \end{aligned} \quad (9.39)$$

On retrouve également l'expression de la *conservation globale*, en sommant sur i les équations (9.39), en utilisant $\sum_i N_i = 1$ et en choisissant $\mu_i = 0$:

$$\int_{\delta\Omega} f_{\text{imp}} \, d\delta\Omega + \sum_{i \in \delta\Omega_D} \lambda_i = \int_{\Omega} s \, d\Omega$$

À noter qu'ici, l'interprétation physique de λ_i est un peu différente : il s'agit maintenant d'un *flux intégré*.

Ceci est une conséquence du fait suivant (cf. la section 3.1) : on utilise une méthode des *résidus pondérés* pour résoudre l'EDP sur Ω et imposer les flux sur $\delta\Omega_N$. Par contre, on utilise une méthode de *collocation* pour imposer, aux nœuds de discrétisation, les conditions de Dirichlet $T_h - T_0 = 0$.

On peut montrer, de la même façon que pour l'exemple simple traité en section 9.2.2, que la méthode des multiplicateurs de Lagrange discrète est algébriquement équivalente à la méthode d'élimination pour imposer les conditions de Dirichlet : elle fournit exactement la même solution discrète T_h . En particulier, la *stabilité* du problème discret concernant l'inconnue T_h est la même pour les deux méthodes, ce qui est primordial³.

Retour sur le problème de Neumann

Revenons sur le problème de Neumann sous forme variationnelle (9.2) :

$$\int_{\Omega} \alpha \nabla T \cdot \nabla U - sU \, d\Omega - \int_{\delta\Omega} qU \, d\delta\Omega = 0 \quad \forall U \in \mathcal{H}^1(\Omega)$$

Nous avons vu que, pour ce problème, il y avait indétermination de T à une constante près et que les termes sources donnés devaient vérifier la condition de compatibilité (9.11) :

$$\int_{\Omega} s \, d\Omega + \int_{\delta\Omega} q \, d\delta\Omega = 0$$

pour que le problème continu admette des solutions.

Que se passe-t-il si les données s et q ne vérifient pas la condition de compatibilité (9.11) ? La méthode des multiplicateurs de Lagrange peut nous aider à comprendre. Par exemple, nous pouvons lever l'indétermination sur T en imposant sa valeur à T_0 en un point quelconque P_0 avec un multiplicateur de Lagrange λ . Le problème (9.2) devient :

$$\int_{\Omega} \alpha \nabla T \cdot \nabla U - sU \, d\Omega - \int_{\delta\Omega} qU \, d\delta\Omega + \lambda U|_{P_0} + \mu (T|_{P_0} - T_0) = 0 \quad \forall (U, \mu) \in \mathcal{H}^1(\Omega) \times \mathbb{R}$$

La conservation de la chaleur globale s'obtient en choisissant la variation particulière $(U, \mu) = (1, 0)$, d'où :

$$\int_{\Omega} s \, d\Omega + \int_{\delta\Omega} q \, d\delta\Omega = \lambda$$

λ a la signification d'un terme source intégré appliqué au point P_0 . Si s et q vérifient la condition de compatibilité (9.11), on aura $\lambda = 0$ sinon $\lambda = (\int_{\Omega} s \, d\Omega + \int_{\delta\Omega} q \, d\delta\Omega)$ contrebalance exactement l'écart à la condition de compatibilité. Il va sans dire que la solution obtenue autour du point P_0 avec le terme source λ non nul ne sera sans doute pas celle attendue.

Imposer la température en un point pour lever l'indétermination n'est pas la seule façon possible. On peut, par exemple, imposer plutôt la moyenne de T sur Ω . Pour plus de détails sur la meilleure façon de résoudre le problème de Neumann numériquement, on peut consulter l'article de synthèse [BL05].

³Par contre, nous fermons les yeux sur une éventuelle convergence des $\lambda_i \dots$ Celle-ci n'est d'ailleurs pas facile à définir puisque, lorsque le paramètre de discrétisation h varie, le nombre de multiplicateurs λ_i varie également.

Prescription simultanée des conditions essentielles et naturelles

Regardons maintenant ce qui se passe si on se trompe sur les conditions aux limites, par exemple, si on impose simultanément des conditions aux limites de Dirichlet et de Neumann sur $\delta\Omega$. En utilisant la méthode des multiplicateurs de Lagrange continue (pour simplifier), on a le problème de minimisation suivant :

$$I(T, \lambda) = \int_{\Omega} \frac{\alpha}{2} \|\nabla T\|^2 - sT \, d\Omega + \int_{\delta\Omega} f_{\text{imp}} T \, d\delta\Omega + \int_{\delta\Omega} \lambda(T - T_0) \, d\delta\Omega \quad (9.40)$$

La condition pour que (T, λ) soit un point-selle de I s'écrit :

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \alpha \nabla T \cdot \nabla U - sU \, d\Omega + \int_{\delta\Omega} f_{\text{imp}} U \, d\delta\Omega \\ + \int_{\delta\Omega} \lambda U \, d\delta\Omega + \int_{\delta\Omega} \mu(T - T_0) \, d\delta\Omega = 0 \quad \forall (U, \mu) \end{aligned} \quad (9.41)$$

On voit ce qui va se passer :

- la condition de Dirichlet (forte) sera vérifiée sur $\delta\Omega$;
- la condition de Neumann (faible) f_{imp} ne sera donc pas vérifiée et le multiplicateur λ va "absorber" le flux f_{imp} que l'on a ajouté dans la formulation : $\lambda = -f_{\text{imp}}$.

Imposition des conditions aux limites dans Cast3M

En mécanique des fluides, c'est la méthode d'élimination qui est utilisée par défaut pour imposer les conditions de Dirichlet, lorsqu'on utilise la directive 'CLIM' de l'opérateur 'EQEX'. Il ne vous sera donc moins évident de vérifier vos bilans car les flux faibles λ_i ne sont pas exhibés.

En général dans Cast3M (mécanique du solide, thermique...), c'est la méthode des multiplicateurs de Lagrange discrète qui est utilisée pour imposer les conditions de Dirichlet via les opérateurs 'BLOQ' pour BLOQuer un degré de liberté et 'DEPI' (DEPlacement Imposé) pour préciser la valeur du blocage. Ces mêmes opérateurs peuvent être utilisés en mécanique des fluides.

À noter que la méthode des multiplicateurs de Lagrange ne sert pas qu'à imposer des conditions aux limites de Dirichlet. Nous avons déjà vu qu'elle pouvait servir à imposer d'autres types de contraintes, comme par exemple $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$ dans le cadre du problème de Stokes. L'opérateur 'RELA' (RELAtion) de Cast3M permet d'imposer des contraintes assez générales. Quelques exemples possibles : contraintes de périodicité sur les inconnues, blocage de la vitesse dans une direction quelconque au bord...

Généralisation aux autres problèmes

Dans toute la suite du chapitre, il est possible d'utiliser la méthode des multiplicateurs pour imposer des conditions essentielles. La signification du multiplicateur correspondra à celle de la condition naturelle (intégrée sur la surface dans le cas de la méthode discrète) pour le problème considéré. Cette dualité est bien connue en mécanique, par exemple, où lorsqu'on impose des conditions sur le déplacement, le multiplicateur correspond à une force de réaction. Cette dualité est toute aussi importante en mécanique des fluides, même si elle est moins souvent utilisée. En particulier, comme nous venons de le voir, elle permet d'exprimer simplement les propriétés de conservation globale de la méthode des éléments finis.

9.2.4 Conditions aux limites mixtes

Outre les conditions aux limites de Dirichlet et de Neumann, un troisième type de condition à la limite est souvent utilisée en thermique, la condition à la limite d'échange, dite de *Robin* :

$$-\alpha \nabla T \cdot \mathbf{n} = h(T - T_\infty) \quad (9.42)$$

où h est un coefficient d'échange et T_∞ une température caractéristique du milieu environnant, extérieure au domaine que l'on modélise. La condition de Robin est souvent appelée condition à la limite *mixte* car elle fait intervenir à la fois l'inconnue T et son flux $-\alpha \nabla T \cdot \mathbf{n}$ sur le bord.

Un problème de Robin sans terme source volumique peut s'exprimer en modifiant le problème de Dirichlet (9.1) de la manière suivante :

$$\min_{T \in \mathcal{H}^1(\Omega)} I(T) = \min_{T \in \mathcal{H}^1(\Omega)} \int_{\Omega} \frac{\alpha}{2} \|\nabla T\|^2 d\Omega + \int_{\delta\Omega} h \frac{T^2}{2} - hTT_\infty d\delta\Omega \quad (9.43)$$

et la condition de minimisation s'écrit alors :

$$\delta_U I(T) = \int_{\Omega} \alpha \nabla T \cdot \nabla U d\Omega + \int_{\delta\Omega} h(T - T_\infty) U d\delta\Omega = 0 \quad \forall U \in \mathcal{H}^1(\Omega) \quad (9.44)$$

Une fois la discrétisation effectuée :

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} \alpha \nabla T_h \cdot \nabla N_i d\Omega + \int_{\delta\Omega} h(T_h - T_\infty) N_i d\delta\Omega \\ &= \sum_{j \in \Omega} T_j \left(\int_{\Omega} \nabla N_j \cdot \nabla N_i d\Omega \right) + \sum_{k \in \delta\Omega} T_k \left(\int_{\delta\Omega} h N_k N_i d\delta\Omega \right) - b_i(T_\infty) = 0 \quad \forall i \end{aligned} \quad (9.45)$$

soit, sous forme matricielle :

$$(\mathbf{R} + h\bar{\mathbf{M}}) \mathbf{T} = h\bar{\mathbf{M}}\bar{\mathbf{T}}_\infty \quad (9.46)$$

On voit que la condition de Robin fait apparaître une matrice de masse sur le bord du domaine : $h\bar{\mathbf{M}} = \int_{\delta\Omega} h N_k N_i d\delta\Omega$.

Dans Cast3M, le terme de masse surfacique $\int_{\delta\Omega} h N_k N_i d\delta\Omega$ et le terme source surfacique $\int_{\delta\Omega} h T_\infty N_i d\delta\Omega$ peuvent être calculés par l'opérateur 'ECHI' (EChange Imposé)⁴.

Formellement, la condition à la limite de Robin s'apparente à la condition de Neumann car elle est imposée de manière faible. Par contre, dans le problème de Robin, on n'a pas d'indétermination de l'inconnue (ni de condition de compatibilité à vérifier) car T apparaît dans la formulation du problème, par opposition au problème de Neumann où seul ∇T apparaissait. Au niveau de la matrice du système linéaire associée au problème de Robin, la matrice masse de surface ajoutée à la matrice de rigidité fait que la matrice totale est inversible (pas de valeur propre nulle).

La solution approchée T_h , de même que la solution exacte T , vérifient la propriété de conservation de la chaleur, qui s'écrit, pour le problème de Robin considéré :

$$\int_{\delta\Omega} h(T_h - T_\infty) d\delta\Omega = 0 \quad (9.47)$$

⁴L'opérateur 'CONV' (condition d'échange CONVectif) peut également être utilisé.

9.2.5 Cas de la diffusion instationnaire

Écrivons l'équation de la diffusion instationnaire avec conditions de Neumann semi-discrétisée en temps par une méthode de différences finies (Euler implicite) :

$$\frac{T - \hat{T}}{\Delta t} - \alpha \Delta T = 0 \quad (9.48)$$

avec les conditions aux limites :

$$-\alpha \nabla T \cdot \mathbf{n} = -q \quad \text{sur} \quad \delta\Omega \quad (9.49)$$

T est la température que l'on cherche à l'instant courant, \hat{T} est la température à l'instant précédent et Δt est le pas de temps entre les deux instants.

Un tel problème peut être interprété comme la solution du problème de Neumann instationnaire suivant :

$$\min_{T \in \mathcal{H}^1(\Omega)} I(T) = \min_{T \in \mathcal{H}^1(\Omega)} \int_{\Omega} \frac{T^2}{2\Delta t} - \frac{\hat{T}T}{\Delta t} + \frac{\alpha}{2} \|\nabla T\|^2 d\Omega - \int_{\delta\Omega} qT d\delta\Omega \quad (9.50)$$

dont la condition de minimisation s'écrit :

$$\delta_U I(T) = \int_{\Omega} \frac{T - \hat{T}}{\Delta t} U + \alpha \nabla T \cdot \nabla U d\Omega - \int_{\delta\Omega} qU d\delta\Omega = 0 \quad \forall U \in \mathcal{H}^1(\Omega) \quad (9.51)$$

Une fois la discrétisation effectuée :

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} \frac{T_h - \hat{T}}{\Delta t} N_i + \alpha \nabla T_h \cdot \nabla N_i d\Omega - \int_{\delta\Omega} q N_i d\delta\Omega \\ & = \sum_{j \in \Omega} T_j \left(\int_{\Omega} \frac{1}{\Delta t} N_j N_i + \nabla N_j \cdot \nabla N_i d\Omega \right) - b_i(\hat{T}) = 0 \quad \forall i \end{aligned} \quad (9.52)$$

soit, sous forme matricielle :

$$\left(\frac{\mathbf{M}}{\Delta t} + \mathbf{R} \right) \mathbf{T} = \frac{\mathbf{M}}{\Delta t} \hat{\mathbf{T}} + \bar{\mathbf{q}} \quad (9.53)$$

On voit que la discrétisation en temps Euler implicite a fait apparaître une matrice de masse sur le domaine : $\frac{\mathbf{M}}{\Delta t} = \int_{\Omega} \frac{1}{\Delta t} N_j N_i d\Omega$.

Dans Cast3M, le terme de masse volumique $\int_{\Omega} \frac{1}{\Delta t} N_j N_i d\Omega$ et le terme source volumique $\int_{\Omega} -\frac{\hat{T} N_i}{\Delta t} d\Omega$ peuvent être calculés par l'opérateur 'DFDT' (Dérivée d'une Fonction par rapport au Temps)⁵.

Pour le problème de Neumann instationnaire, on n'a pas d'indétermination de l'inconnue (non plus que de condition de compatibilité à vérifier) car T apparaît dans la formulation du problème, par opposition au problème de Neumann stationnaire où seul ∇T apparaissait. Au niveau de la matrice du système linéaire associée au problème de Neumann instationnaire, la matrice de masse ajoutée à la matrice de rigidité fait que la matrice totale est inversible (pas de valeur propre nulle).

⁵L'opérateur 'CAPA' (CAPAcité) peut également être utilisé.

La solution approchée T_h , de même que la solution exacte T , vérifie la propriété de conservation globale de la chaleur, qui s'écrit, pour le problème de Neumann instationnaire considéré :

$$\int_{\Omega} T_h - \hat{T} \, d\Omega = \Delta t \int_{\delta\Omega} q \, d\delta\Omega \quad (9.54)$$

ce qui se lit : l'augmentation de la quantité de chaleur contenue dans le domaine entre l'instant t et l'instant $t + \Delta t$ est égale à l'intégrale du flux de chaleur entrant par les bords du domaine.

On voit également sur cette expression que, si on désire que le problème considéré admette une solution stationnaire où T_h n'évolue plus ($T_h = \hat{T}$), on va retomber sur une condition de compatibilité ressemblant à (9.11) :

$$\int_{\delta\Omega} q \, d\delta\Omega = 0 \quad (9.55)$$

9.3 Problème de convection-diffusion

Le but de cette section est de montrer qu'il y a différentes façons de discrétiser le terme convectif (il ne découle pas naturellement d'un principe de minimisation) et que ces différentes façons conduisent à des conditions aux limites naturelles *différentes*. Cette souplesse dans le choix des conditions aux limites est un atout de la méthode des éléments finis.

9.3.1 Formulations du problème

Formulation non conservative

Intéressons-nous maintenant au cas de l'équation de convection-diffusion stationnaire sans terme source, écrite tout d'abord sous forme *non conservative* et sans conditions de Dirichlet :

$$\mathbf{u} \cdot \nabla T - \operatorname{div} \alpha \nabla T = 0 \quad (9.56)$$

En appliquant la méthode des résidus pondérés et en intégrant par parties, on obtient la formulation continue suivante :

$$\int_{\Omega} \mathbf{u} \cdot \nabla T U + \alpha \nabla T \cdot \nabla U \, d\Omega - \int_{\delta\Omega} \alpha \nabla T \cdot \mathbf{n} U \, d\delta\Omega = 0 \quad \forall U \quad (9.57)$$

On voit que la condition à la limite naturelle qui apparaît dans le terme de bord est *la même* que celle du problème de Neumann en diffusion pure, à savoir une condition sur le *flux diffusif* :

$$-\alpha \nabla T \cdot \mathbf{n} = 0 \quad (9.58)$$

Ici ce flux diffusif est nul car nous n'avons pas ajouté de terme source surfacique dans (9.57).

Formulation conservative

Ecrivons maintenant l'équation de convection-diffusion stationnaire avec terme source sous forme *conservative* (toujours sans conditions de Dirichlet) :

$$\operatorname{div} \mathbf{u} T - \operatorname{div} \alpha \nabla T = 0 \quad (9.59)$$

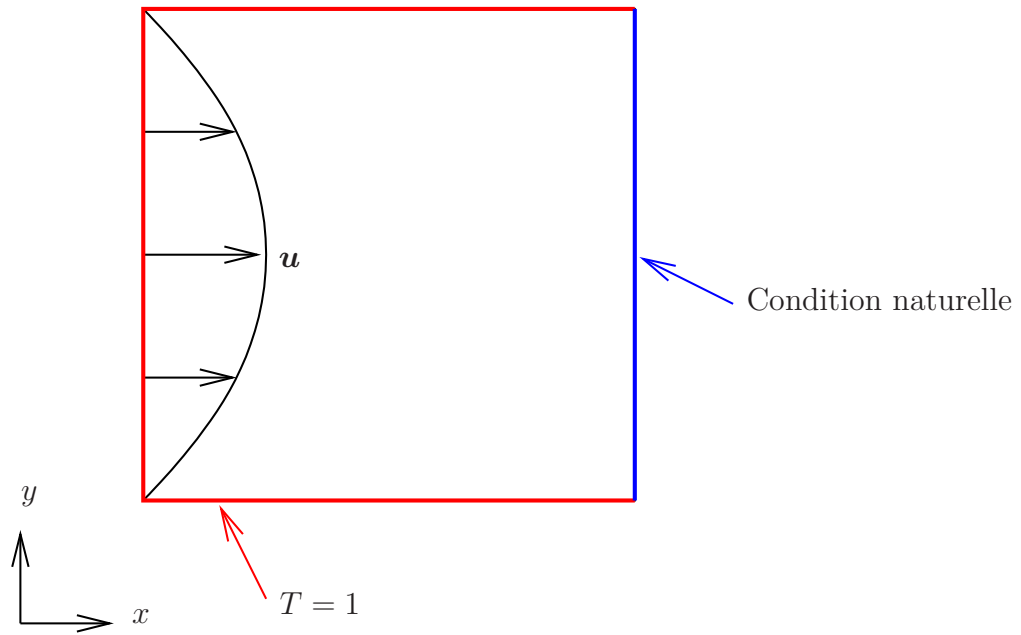


FIG. 9.2: Problème de convection-diffusion stationnaire 2D (9.63).

ou :

$$\operatorname{div}(\mathbf{u}T - \alpha \nabla T) = 0 \quad (9.60)$$

Cette formulation est équivalente à la précédente au niveau de l'EDP lorsque $\operatorname{div} \mathbf{u} = 0$. En appliquant la méthode des résidus pondérés et en intégrant par parties, on obtient la formulation continue suivante :

$$\int_{\Omega} (-\mathbf{u}T + \alpha \nabla T) \cdot \nabla U \, d\Omega + \int_{\delta\Omega} (T\mathbf{u} \cdot \mathbf{n} - \alpha \nabla T \cdot \mathbf{n}) U \, d\delta\Omega = 0 \quad \forall U \quad (9.61)$$

Cette fois-ci, nous avons également intégré par parties le terme convectif. La condition à la limite naturelle qui apparaît est *différente* de la précédente : il s'agit d'une condition de *flux total* nul :

$$T\mathbf{u} \cdot \mathbf{n} - \alpha \nabla T \cdot \mathbf{n} = 0 \quad (9.62)$$

$T\mathbf{u}$ est le flux convectif et $-\alpha \nabla T$ le flux diffusif.

Cette liberté d'utiliser ou non l'intégration par parties sur le terme convectif permet une souplesse dans le choix des conditions aux limites naturelles.

Exemple numérique

Pour cette exemple, on considère le problème modèle suivant :

$$\begin{cases} \mathbf{u} \cdot \nabla T - \operatorname{div} \alpha \nabla T = 0 \\ T|_{\delta\Omega \setminus (x=1)} = 1 \\ \mathbf{u} = \begin{pmatrix} 4y(1-y) \\ 0 \end{pmatrix} \end{cases} \quad (9.63)$$

La figure 9.2 illustre ce problème. On note que l'on a bien : $\operatorname{div} \mathbf{u} = 0$.

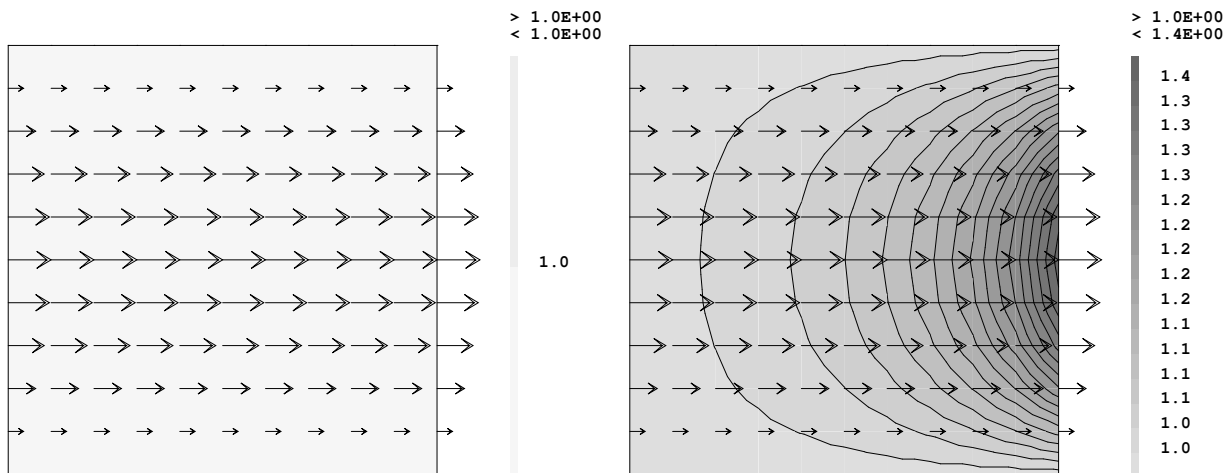


FIG. 9.3: Solution numérique T_h (éléments finis linéaires LINE) du problème de convection-diffusion 2D stationnaire (9.63) avec $\alpha = 1$ et conditions aux limites naturelles en sortie. Gauche : condition naturelle de flux diffusif nul (9.64). Droite : condition naturelle de flux total nul (9.65).

Pour discrétiser le terme convectif, on utilise l'opérateur 'KONV' avec les options 'NOCONS' (par défaut) et 'CONS'. Ces options correspondent respectivement aux formulations conservatives (9.57) et non conservatives (9.61) du terme convectif, soit respectivement à deux conditions à la limite naturelles différentes :

1. option 'NOCONS' : condition à la limite de flux diffusif nul

$$-\alpha \nabla T \cdot \mathbf{n}|_{x=1} = 0 \quad (9.64)$$

2. option 'CONS' : condition à la limite de flux total nul

$$T \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} - \alpha \nabla T \cdot \mathbf{n}|_{x=1} = 0 \quad (9.65)$$

Les résultats numériques obtenus sont montrés sur la figure 9.3. Avec la condition de flux diffusif nul, la solution obtenue est constante égale à 1, alors qu'avec la condition de flux total, il y a apparition d'un flux diffusif entrant qui vient contrebalancer exactement le flux convectif sortant.

9.3.2 Indétermination de T et condition de compatibilité

Reprenons l'équation de convection-diffusion sous forme conservative (9.59) et intégrons-la sur Ω . On obtient l'équation suivante :

$$\int_{\Omega} \operatorname{div}(\mathbf{u}T - \alpha \nabla T) \, d\Omega = \int_{\delta\Omega} T \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} - \alpha \nabla T \cdot \mathbf{n} \, d\delta\Omega = 0 \quad (9.66)$$

Ceci est l'expression de la *conservation globale* de T : le flux total sortant de Ω est égal au flux total entrant dans Ω . Cette condition ne dépend pas de la façon dont on discrétise, elle est propre à l'équation de conservation que l'on est en train de résoudre.

Au niveau discret, la situation est claire en formulation conservative, c'est la même que pour le problème de Neumann : on a indétermination de T du fait que seule ses dérivées

apparaissent dans la formulation. D'autre part, en choisissant une variation U valant 1 sur Ω dans l'équation (9.61), on obtient *exactement* l'expression (9.66). Ceci signifie que, si on impose des flux totaux non nuls sur l'ensemble du bord $\delta\Omega$ (toujours avec l'opérateur 'FIMP' dans Cast3M) :

$$T\mathbf{u} \cdot \mathbf{n} - \alpha \nabla T \cdot \mathbf{n} = q \quad (9.67)$$

Ils devront vérifier :

$$\int_{\delta\Omega} q \, d\delta\Omega = 0 \quad (9.68)$$

pour que le problème discret admette une solution.

Pour la formulation non-conservative, c'est un peu plus compliqué : on a également l'indétermination de T . Par contre, comme les flux que l'on impose sont uniquement les flux diffusifs, il n'y a pas de conditions sur ces derniers. La solution discrète obtenue vérifiera néanmoins une expression de la conservation globale de T . Celle-ci s'exprime, comme toujours en choisissant une variation unité U dans (9.57). Si on impose les flux diffusifs :

$$-\alpha \nabla T \cdot \mathbf{n} = q \quad (9.69)$$

On aura :

$$\int_{\Omega} \mathbf{u} \cdot \nabla T \, d\Omega - \int_{\delta\Omega} q \, d\delta\Omega = 0 \quad (9.70)$$

En utilisant des intégrations par parties⁶, cette expression devient :

$$\int_{\Omega} T \nabla \cdot \mathbf{u} + \nabla \cdot (T\mathbf{u}) \, d\Omega + \int_{\delta\Omega} q \, d\delta\Omega = 0 \quad (9.71)$$

Et, dans le cas où : $\int_{\Omega} T \nabla \cdot \mathbf{u} \, d\Omega = 0$ (si $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$ par exemple), on obtient une expression similaire à (9.66) en utilisant le théorème de la divergence sur l'intégrale volumique.

9.3.3 Influence du décentrement

L'utilisation du décentrement par la méthode SUPG vue en section 4.4.3 peut modifier la condition à la limite naturelle car il s'agit d'un terme diffusif que l'on ajoute à la discrétisation de l'équation de départ. Plus précisément, si on considère le problème de convection-diffusion (9.56) discrétisé en formulation non-conservative et que l'on applique la méthode de décentrement SUPG, on obtient :

$$\begin{cases} \mathbf{u} \cdot \nabla T - \operatorname{div} A' \nabla T = 0 \\ A' = \alpha I + \frac{h_u |\mathbf{u}|}{2} J(Pe_{h_u}) \frac{\mathbf{u} \otimes \mathbf{u}}{|\mathbf{u}|^2} \end{cases} \quad (9.72)$$

La condition à la limite naturelle qui apparaît lorsqu'on effectue la formulation variationnelle est une condition de Neumann similaire à celle obtenue en diffusion pure mais avec une diffusion modifiée, tensorielle qui plus est :

$$(-A' \cdot \nabla T) \cdot \mathbf{n} = 0 \quad (9.73)$$

Cette condition se ramène à la condition de Neumann scalaire :

$$-\alpha \nabla T \cdot \mathbf{n} = 0 \quad (9.74)$$

dans deux cas :

⁶Ici, contrairement au cas du Laplacien vu plus haut, il est possible d'utiliser l'intégration par parties dans la formulation discrète, lorsque T est remplacée par T_h , car les fonctions de base N_i ont une régularité qui le permet.

1. lorsque $J(Pe_{h_u}) = 0$ c'est-à-dire lorsque le décentrement n'agit pas ;
2. lorsque $\mathbf{u} \cdot \mathbf{n} = 0$ au bord. En effet, nous avons vu en section 4.4.3 que l'on ajoute de la diffusion uniquement dans la direction de \mathbf{u} et pas dans les directions orthogonales à \mathbf{u} .

Exercice 7 Démontrer que l'on a bien (9.74) dans le cas 2 ($\mathbf{u} \cdot \mathbf{n} = 0$).

9.3.4 Résumé

Les conditions aux limites naturelles dépendent de la façon dont on écrit le terme de convection dans l'équation de convection-diffusion, par exemple sous forme non conservative $\mathbf{u} \cdot \nabla T$ ou sous forme conservative $\text{div}(\mathbf{u}T)$. On a une certaine liberté car le terme de convection ne découle pas d'une formulation variationnelle. L'utilisation du décentrement peut également modifier la condition naturelle.

9.4 Problème de Stokes

9.4.1 Conditions aux limites essentielles et naturelles

Comme nous avons étudié précisément la question des conditions aux limites sur l'équation de convection-diffusion, nous allons passer un peu plus vite sur les problèmes de Stokes et Navier-Stokes en soulignant surtout les différences par rapport au cas précédent. Rappelons l'expression du problème de Stokes :

$$\begin{cases} -\mu \Delta \mathbf{u} + \nabla p = 0 \\ \nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \end{cases} \quad (9.75)$$

et sa formulation faible :

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} -\mu \Delta \mathbf{u} \cdot \mathbf{v} \, d\Omega + \int_{\delta\Omega} (\mu \nabla \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}) \cdot \mathbf{v} \, d\delta\Omega + \int_{\Omega} \nabla p \cdot \mathbf{v} \, d\Omega - \int_{\delta\Omega} p \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} \, d\delta\Omega \\ - \int_{\Omega} q \nabla \cdot \mathbf{u} \, d\Omega = 0 \end{aligned} \quad (9.76)$$

Les termes de bord que nous avons annulés dans la formulation faible en supposant que l'on avait imposé des conditions de Dirichlet pour \mathbf{u} sur l'ensemble de $\delta\Omega$ sont :

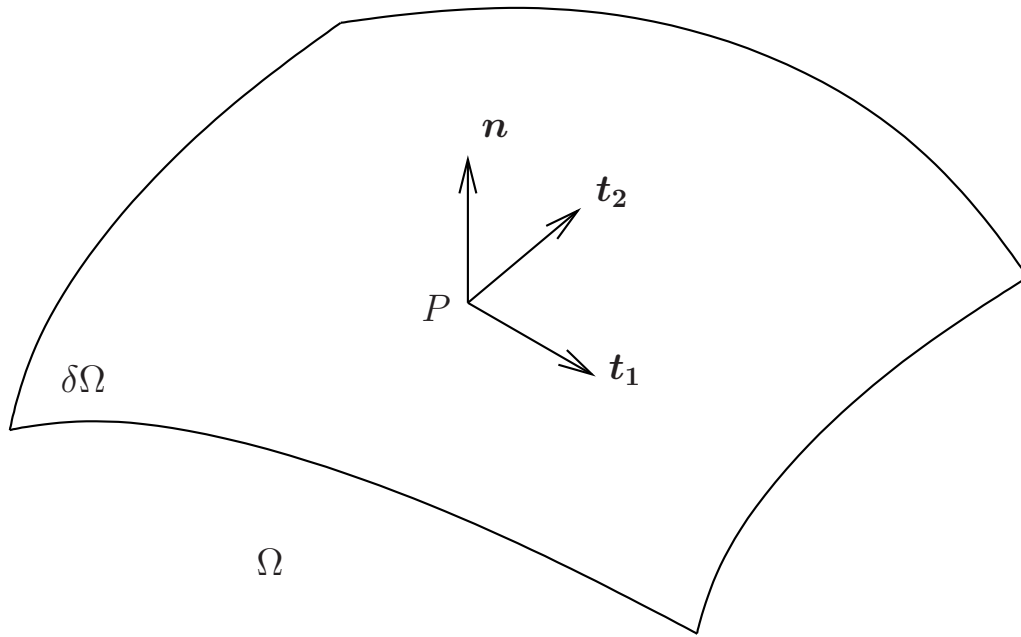
$$\int_{\delta\Omega} (\mu \nabla \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}) \cdot \mathbf{v} \, d\delta\Omega - \int_{\delta\Omega} p \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} \, d\delta\Omega \quad (9.77)$$

ou encore :

$$\int_{\delta\Omega} [(\mu \nabla \mathbf{u} - p\mathbf{l}) \cdot \mathbf{n}] \cdot \mathbf{v} \, d\delta\Omega \quad (9.78)$$

Le premier terme $(\mu \nabla \mathbf{u} - p\mathbf{l}) \cdot \mathbf{n}$, appelé *traction* et que nous noterons \mathbf{f} , a la dimension d'une force par unité de surface, il comprend une partie visqueuse et une partie pression. C'est ce terme qui va être la condition naturelle imposée de manière faible. Le deuxième terme \mathbf{v} s'annule lorsque on impose des conditions de Dirichlet sur \mathbf{u} : $\mathbf{u} = \mathbf{u}_0$. Les deux types de condition à la limite, que l'on va pouvoir appliquer à la frontière sont donc :

Dirichlet	$\mathbf{v} = \mathbf{0}$	$\mathbf{u} = \mathbf{u}_0$	'CLIM'	essentielle
Neumann	\mathbf{v} varie	$\mathbf{f} = \mathbf{f}_0$	'TOIM'	naturelle

FIG. 9.4: Repère local en un point P de $\delta\Omega$.

Les conditions de Dirichlet sont prescrites, dans Cast3M, à l'aide de la directive 'CLIM' de l'opérateur 'EQEX', tandis que l'opérateur 'TOIM' (τ IMposé) permet de discrétiser les termes sources de bord apparaissant pour l'imposition faible des conditions aux limites naturelles.

Cette situation est similaire à la situation en mécanique du solide linéaire isotrope où l'on impose, soit un déplacement (ici, remplacé par une vitesse), soit une force surfacique. Noter qu'ici, la traction \mathbf{f} n'est pas la force surfacique au sens de la composante normale du tenseur des contraintes $\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}$ car nous avons simplifié les équations aux dérivées partielles du problème de Stokes pour obtenir $\mu \Delta \mathbf{u}$ au lieu de $\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}$ en utilisant $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$. La formulation en $\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}$ donne une condition à la limite naturelle *différente*, en *force* et non plus en traction, ce que nous verrons plus loin (section 9.4.5).

9.4.2 Conditions aux limites par direction

En fait, les conditions aux limites que l'on impose sont sur des quantités vectorielles et non plus scalaires, comme dans le cas de la convection-diffusion. Il est donc possible d'imposer des conditions de Dirichlet selon une ou des directions et des conditions de Neumann dans les directions complémentaires, orthogonales à celles de Dirichlet. Explicitons ceci en introduisant un repère local sur le bord du domaine, comme sur la figure 9.4. On peut décomposer \mathbf{u} et \mathbf{f} dans ce repère local :

$$\begin{cases} \mathbf{u} = u_n \mathbf{n} + u_{t_1} \mathbf{t}_1 + u_{t_2} \mathbf{t}_2 \\ \mathbf{f} = f_n \mathbf{n} + f_{t_1} \mathbf{t}_1 + f_{t_2} \mathbf{t}_2 \end{cases} \quad (9.79)$$

avec :

$$\begin{cases} f_n = \mu (\nabla \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}) \cdot \mathbf{n} - p \\ f_{t_1} = \mu (\nabla \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}) \cdot \mathbf{t}_1 \\ f_{t_2} = \mu (\nabla \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}) \cdot \mathbf{t}_2 \end{cases} \quad (9.80)$$

Considérons maintenant deux cas qui se présentent fréquemment :

1. Conditions à la limite à la sortie d'un tube en *régime établi*, on va imposer par exemple :

Dirichlet	$u_{t_1} = 0$	'CLIM'
Dirichlet	$u_{t_2} = 0$	'CLIM'
Neumann	$f_n = \mu (\nabla \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}) \cdot \mathbf{n} - p = 0$	'TOIM'

Si on suppose qu'on est dans un cas tel que : $\mu (\nabla \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}) \cdot \mathbf{n}$ est négligeable devant p , c'est-à-dire, soit μ petit, soit $\nabla \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}$ ne variant plus dans la direction normale à la surface de sortie (on parle de régime établi), alors la condition à la limite de Neumann s'apparente à une condition de *pression imposée* en sortie.

2. Conditions à la limite de type *traction sur une paroi*, on imposera par exemple :

Dirichlet	$u_n = 0$	'CLIM'
Neumann	$f_{t_1} = f_{0t_1}$	'TOIM'
Neumann	$f_{t_2} = f_{0t_2}$	'TOIM'

9.4.3 Conditions aux limites mixtes

Comme dans le cas de la convection-diffusion, vu en 9.2.4, on peut rencontrer un troisième type de conditions à la limite, dites mixtes ou de Robin, de la forme :

$$\mathbf{f} = -k(\mathbf{u} - \mathbf{u}_\infty) \quad (9.81)$$

Ce type de conditions à la limite permet de modéliser des *pertes de charge* dues à un frottement en paroi. Ce type de conditions est discrétisé, dans Cast3M, par l'opérateur 'FROT' (FROTtement en paroi). On peut l'utiliser, par exemple, de la même façon que pour la traction sur une paroi :

Dirichlet	$u_n = 0$	'CLIM'
Neumann	$f_{t_1} = -k(u_{t_1} - u_{t_1\infty})$	'FROT'
Neumann	$f_{t_2} = -k(u_{t_2} - u_{t_2\infty})$	'FROT'

9.4.4 Conditions de compatibilité

Dans le cas des problèmes de Stokes et de Navier-Stokes, nous avons deux conditions de compatibilité que l'on peut être amené à vérifier, qui correspondent aux deux équations de conservation : celle de la quantité de mouvement et celle de la masse.

Conditions de compatibilité sur l'équation de quantité de mouvement

Si on n'impose aucune condition de Dirichlet sur la vitesse pour le problème de Stokes stationnaire (9.75) sans terme source, mais uniquement des conditions de Neumann : $\mathbf{f} = \mathbf{f}_0$ sur $\delta\Omega$. Alors, on doit avoir :

$$\int_{\delta\Omega} \mathbf{f}_0 \, d\delta\Omega = \mathbf{0} \quad (9.82)$$

pour que le problème admette des solutions. De manière duale à cette condition, on a que l'inconnue \mathbf{u} est indéterminée à un vecteur constant près car seule ses dérivées apparaissent alors dans la formulation faible (9.76). On retrouve une condition bien connue en mécanique du point : un système soumis à des forces dont la résultante est nulle a un mouvement rectiligne uniforme : $\mathbf{u} = \text{constante}$.

Conditions de compatibilité sur l'équation de la masse

Cette condition est en pratique plus importante que la précédente car elle se rencontre beaucoup plus souvent. La conservation globale de la masse impose en effet :

$$\int_{\Omega} \nabla \cdot \mathbf{u} \, d\Omega = \int_{\delta\Omega} \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} \, d\delta\Omega = 0 \quad (9.83)$$

En particulier, dès que l'on impose u_n sur $\delta\Omega$ complet, cette condition doit être vérifiée pour que l'on puisse avoir des solutions au problème. C'est le cas en *écoulement fermé*, où l'on a $u_n = 0$ sur $\delta\Omega$.

Cette condition est de nature légèrement différente des conditions de compatibilité rencontrées jusqu'à maintenant car elle concerne les inconnues soumises aux conditions de Dirichlet, et non pas les flux correspondants.

De manière duale à cette condition, on a que l'inconnue p est *indéterminée* à une constante près car seul son gradient apparaît alors dans la formulation faible (9.76). Il convient alors de lever cette indétermination, par exemple en imposant la valeur de p en un point, pour sélectionner une solution unique.

9.4.5 Formulations différentes du problème de Stokes

En fait, il existe plusieurs manières de formuler le terme visqueux des équations de Navier-Stokes. Pour l'instant, nous avons utilisé la formulation en Laplacien de vitesse : $\mu \Delta \mathbf{u}$. Cette formulation est souvent utilisée car elle est pratique : en coordonnées cartésiennes, l'opérateur Laplacien vectoriel se ramène à un Laplacien scalaire sur chaque composante de la vitesse.

Forme en rotationnel Il est toutefois possible d'utiliser d'autres formulations. Par exemple, en utilisant l'identité vectorielle :

$$\Delta \mathbf{u} = \text{rot rot } \mathbf{u} - \nabla \text{div } \mathbf{u} \quad (9.84)$$

et en annulant le deuxième terme du fait que : $\text{div } \mathbf{u} = 0$, on obtient une formulation en rotationnel. Le point important est que, bien qu'au niveau de l'EDP nous n'ayons rien changé, au niveau de la formulation variationnelle, les conditions aux limites naturelles obtenues sont *différentes*. Ici, par exemple, l'intégrale de bord prend la forme :

$$\int_{\delta\Omega} (\mathbf{n} \wedge \text{rot } \mathbf{u}) \cdot \mathbf{v} \, d\delta\Omega \quad (9.85)$$

Forme en tenseur des contraintes visqueuses Une autre expression, plus importante, fait intervenir la forme complète du tenseur des contraintes visqueuses pour un fluide Newtonien :

$$\boldsymbol{\tau} = \mu (\nabla \mathbf{u} + \nabla^t \mathbf{u}) - \frac{2}{3} \mu (\nabla \cdot \mathbf{u}) \mathbf{1} \quad (9.86)$$

Lorsque μ est constant et que $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$, il est facile de voir que la divergence du tenseur des contraintes visqueuses se ramène à un Laplacien vectoriel car on a les identités :

$$\begin{cases} \nabla \cdot \nabla^t \mathbf{u} = \nabla \text{div } \mathbf{u} \\ \nabla \cdot ((\nabla \cdot \mathbf{u}) \mathbf{1}) = \nabla \text{div } \mathbf{u} \end{cases} \quad (9.87)$$

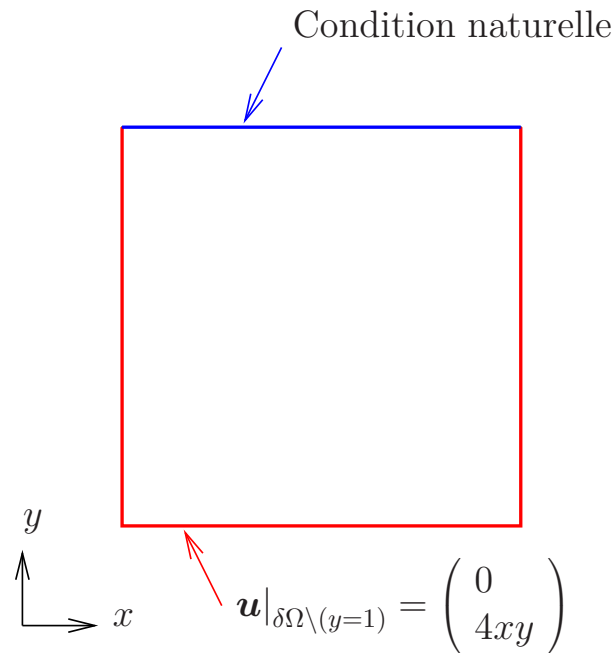


FIG. 9.5: Problème de Navier-Stokes stationnaire 2D (9.89).

En intégrant par parties la divergence du tenseur des contraintes visqueuses et en négligeant le terme en $\text{div } \mathbf{u}$, on obtient :

$$\begin{aligned}
 - \int_{\Omega} \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} \mathbf{v} \, d\Omega &= \int_{\Omega} \mu (\nabla \mathbf{u} : \nabla \mathbf{v} + \nabla^t \mathbf{u} : \nabla \mathbf{v}) \, d\Omega \\
 &\quad - \int_{\delta\Omega} \mu ((\nabla \mathbf{u} + \nabla^t \mathbf{u}) \cdot \mathbf{n}) \cdot \mathbf{v} \, d\delta\Omega
 \end{aligned} \tag{9.88}$$

Le terme $\mu (\nabla \mathbf{u} + \nabla^t \mathbf{u}) \cdot \mathbf{n} = \boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{n}$ est la force visqueuse s'exerçant sur $\delta\Omega$. En y ajoutant la force de pression $-p\mathbf{n}$, on obtient la force totale s'exerçant sur $\delta\Omega$, qui est la condition à la limite naturelle pour cette formulation.

9.5 Problème de Navier-Stokes

Dans cette section, on se contente de montrer un exemple numérique sur un problème de Navier-Stokes stationnaire, pour lequel on utilise les formulations conservatives et non conservatives du terme convectif, et les formulations en Laplacien vectoriel ou tenseur des contraintes du terme visqueux. Ceci correspond respectivement aux options 'NOCONS' (par défaut) et 'CONS' de l'opérateur 'KONV' et aux options 'MUCONS' (par défaut) et 'FTAU' de l'opérateur 'LAPN'. Le problème est défini comme suit :

$$\begin{cases}
 (\nabla \mathbf{u}) \cdot \mathbf{u} = -\nabla p^* + \frac{1}{Re} \Delta \mathbf{u} \\
 \nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \\
 \mathbf{u}|_{\delta\Omega \setminus (y=1)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 4xy \end{pmatrix}
 \end{cases} \tag{9.89}$$

La figure 9.5 illustre ce problème.

On laisse le soin au lecteur de déterminer quelles sont les conditions aux limites naturelles pour chaque formulation différente du problème, ce qui permettra d'interpréter les

résultats numériques de la figure 9.6, en particulier les différences de profils de vitesse en $y = 1$.

9.6 Résumé

Ce chapitre a été consacré aux conditions aux limites que l'on peut imposer lorsque l'on utilise la méthode des éléments finis pour discrétiser les différents termes des équations de Navier-Stokes. Les notions de conservation et de conditions de compatibilité ont également été abordées.

Quelques points d'importance pratique sur lesquels on peut insister :

1. La méthode des multiplicateurs de Lagrange est une méthode intéressante pour imposer les conditions aux limites de Dirichlet car le multiplicateur a une signification physique de flux (c'est l'expression de la dualité entre condition de Dirichlet et de Neumann).
2. C'est ce flux qui permet d'exprimer le plus simplement la conservation globale d'une quantité lorsqu'on a discrétisé une équation de conservation par la méthode des éléments finis.
3. La méthode des multiplicateurs de Lagrange discrets étant algébriquement équivalente à la méthode d'élimination pour l'imposition des conditions de Dirichlet, les solutions trouvées sont les mêmes et vérifient le même type de conservation.
4. Pour les équations de conservation stationnaires écrites sous forme conservative, pour lesquelles on prescrit des conditions naturelles sur l'intégralité du bord du domaine, il existe une condition de compatibilité à vérifier. La condition de ce type qui se rencontre le plus fréquemment est celle associée à l'équation de conservation de la masse : si on impose $\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}$ sur l'intégralité de $\delta\Omega$, on doit avoir $\int_{\delta\Omega} \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} \, d\delta\Omega = 0$.
5. Associée par dualité à cette condition de compatibilité est l'indétermination d'une inconnue (ici, la pression p). Pour lever l'indétermination, il faut, par exemple, imposer la valeur en un point de l'inconnue concernée.
6. Il existe plusieurs manières d'écrire les termes de convection $\mathbf{u} \cdot \nabla T$, $(\nabla \mathbf{u}) \cdot \mathbf{u}$ et le terme visqueux $\mu \Delta \mathbf{u}$ qui sont toutes équivalentes pour le problème continu mais qui donnent lieu à des conditions aux limites naturelles différentes une fois le problème discrétisé.

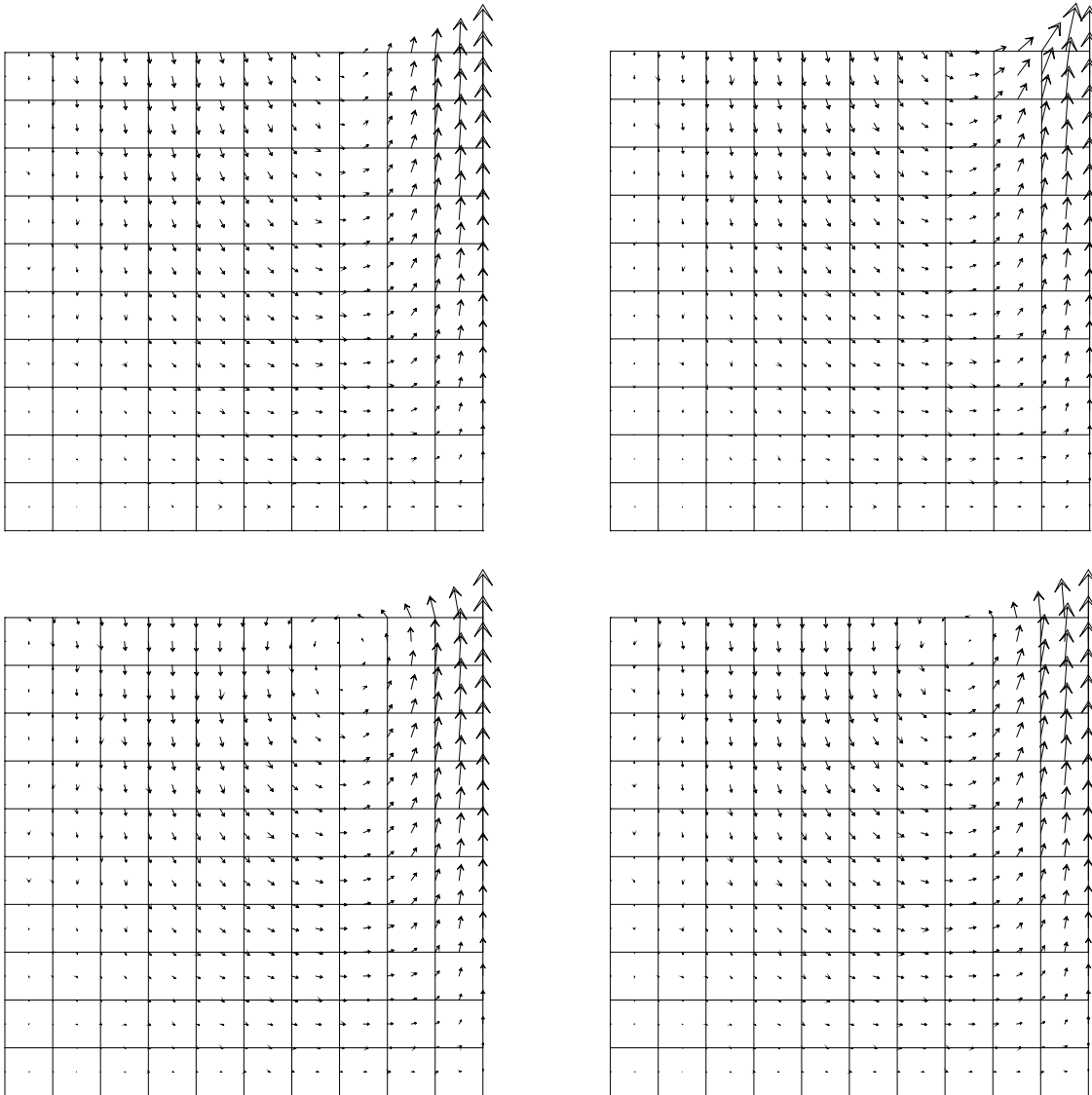


FIG. 9.6: Solution numérique \mathbf{u}_h (éléments finis QUAF/CENTREP1) du problème de Navier-Stokes 2D (9.89) avec $Re = 15$. Haut : formulation en Laplacien vectoriel du terme visqueux ('MUCONS'). Bas : formulation en tenseur des contraintes du terme visqueux ('FTAU'). Gauche : formulation non conservative du terme convectif ('NOCONS'). Droite : formulation conservative du terme convectif ('CONS').

Chapitre 10

Résolution pratique d'un problème transitoire non-linéaire

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\nabla \mathbf{u}) \cdot \mathbf{u} &= -\nabla p^* + \nu \Delta \mathbf{u} + \mathbf{s}_u \\ \nabla \cdot \mathbf{u} &= 0 \\ \frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla T &= \alpha \Delta T + s_T \end{aligned}$$

Dans les chapitres précédents, nous avons listé la partie significative des jeux de données Cast3M. Dans ce chapitre, nous décrivons plus en détail le fonctionnement des opérateurs de discrétisation qui permettent de calculer les matrices et seconds membres obtenus par le processus de discrétisation spatiale par éléments finis.

La description du problème à résoudre (système d'équations aux dérivées partielles, conditions aux limites et conditions initiales) se fait principalement à l'aide de l'opérateur 'EQEX', décrit en section 10.1.

La résolution du problème proprement dite fait appel à la procédure EXEC. Cette dernière est l'implémentation d'un algorithme de point fixe relaxé qui permet de résoudre des problèmes transitoires non linéaires. L'algorithme utilisé est décrit en section 10.2.

10.1 Description en langage Gibiane d'un problème

10.1.1 Syntaxe des opérateurs de discrétisation spatiale

Les opérateurs de discrétisation de Cast3M en mécanique des fluides (dont une liste est fournie dans le tableau 10.2) ont une syntaxe unifiée :

```
chpo matk = OPER RVX ;
```

où OPER est le nom de l'opérateur, RVX est un objet de type TABLE contenant toutes les entrées nécessaires à l'opérateur, matk est un objet de type MATRIK et chpo est un objet de type CHPOINT contenant respectivement la matrice et le second membre créé par l'opérateur de discrétisation. Un des deux objets en sortie (ou les deux) peut être vide si l'opérateur n'est censé créer qu'une matrice ou qu'un second membre.

10.1.2 Création des tables d'entrée

La structure de la table d'entrée RVX pour chaque opérateur de discrétisation spatiale est un peu compliquée, c'est pourquoi on utilise généralement un opérateur utilitaire, nommé 'EQEX', qui va permettre de créer, entre autres, les tables RVX. En fait, l'opérateur 'EQEX' va permettre de décrire l'ensemble des paramètres d'un problème de mécanique des fluides. Sa syntaxe est :

```
RV = 'EQEX' MOT1 val1 MOT2 val2 ...
      'OPTI' motopt11 motopt12 ....
      'ZONE' mod1 'OPER' oper1 arg11 arg12 ... 'INCO' nominco1
      'OPTI' motopt21 motopt22 ....
      'ZONE' mod2 'OPER' oper2 arg21 arg22 ... 'INCO' nominco2
      ...
      'CLIM' nominco1 typclim1 mail1 chclim1
      'CLIM' nominco2 typclim2 mail2 chclim2
      ...
      ;
RV . 'INCO' = 'TABLE' 'INCO' ;
RV . 'INCO' . nominco1 = 'KCHT' mod1 typinco1 disinco1 valinco1 ;
RV . 'INCO' . nominco2 = 'KCHT' mod2 typinco2 disinco2 valinco2 ;
...
```

ici RV est un objet de type TABLE contenant toutes les informations données en entrée, structurées d'une certaine façon. Les données d'entrées sont :

1. des *options* globales pour le calcul données sous la forme de couples (MOT-clé valeur). Le tableau 10.1 donne les principales options globales.
2. des *opérateurs de discrétisation* oper1, oper2... L'opérateur oper1 va agir sur le domaine mod1, va porter sur l'inconnue de nom nominco1 et a besoin des arguments arg1i. motopt1i sont des mots-clés décrivant les options de discrétisation pour oper1. Le tableau 10.2 donne la liste des principaux opérateurs de discrétisation.
3. des *conditions de valeur imposée* (Dirichlet) qui seront imposées sur les inconnues (directives 'CLIM');
4. des *valeurs initiales* pour les inconnues. Ces dernières ne sont pas créées par 'EQEX' et doivent être mises "à la main" dans la table RV . 'INCO'. Cette table est indispensable même si l'on résoud un problème stationnaire, qui n'a pas besoin de conditions initiales, car elle donne aussi des informations sur les espaces de discrétisation des inconnues.

Remarque 5 Pour chaque opérateur de discrétisation operi, il est recommandé de préciser les options de discrétisation 'EF' (Éléments Finis), 'IMPL' (IMPLicite) et 'CENTREE' (discrétisation spatiale CENTRÉE) afin de surcharger d'éventuelles options par défaut. Pour l'opérateur 'KONV' uniquement, on pourra préciser les options de décentrement 'SUPG' ou de décentrement avec capture de choc 'SUPGDC à la place de 'CENTREE' (cf. section 4.7).

Remarque 6 On peut se référer à la notice en ligne (en tapant : 'INFO' oper ;) pour connaître les options disponibles et les arguments à donner aux opérateurs de discrétisation.

Mot-clé	Valeur	Signification
ITMA	n_{ITMA}	Nombre de pas de temps
NITER	n_{NITER}	Nombre d'itérations non linéaires
OMEGA	ω	Coefficient de relaxation pour les itérations non linéaires

TAB. 10.1: Principales options globales de calcul en mécanique des fluides.

Pour chaque opérateur de discrétisation `operi` (donné après le mot-clé '`OPER`'), '`EQEX`' va créer une table `RVX` stockée à l'indice `RV . ioperi`.

Cette table a la structure suivante :

- `RVX . 'EQEX'` pointe sur la table `RV` ;
- `RVX . 'DOMZ'` pointe sur le modèle `modi` ;
- `RVX . 'ARGj'` contient le j ème argument de `operi` ;
- `RVX . 'LISTINCO'` contient le nom de l'inconnue `nomincoi`.

10.2 Algorithme transitoire non linéaire

On rappelle tout d'abord, par ordre de difficulté croissante, les types de problème modèle que nous avons rencontrés avant de décrire l'algorithme de résolution complet.

10.2.1 Problème linéaire stationnaire

Dans ce type de problème, le temps n'intervient pas (pas d'opérateur de dérivée partielle en temps $\frac{\partial}{\partial t}$). En outre, tous les opérateurs de l'équation aux dérivées partielles sont linéaires par rapport à l'inconnue considérée. Un exemple de problème de ce type est l'équation de convection-diffusion vue au chapitre 4 :

$$\mathbf{u} \cdot \nabla T - \alpha \Delta T = 0 \quad (10.1)$$

Ici \mathbf{u} est un champ vectoriel donné et T est l'inconnue considérée. Une fois (10.1) discrétisée spatialement par la méthode des Éléments finis, le problème prend la forme suivante :

$$\mathbf{L}\mathbf{x} = \mathbf{b} \quad (10.2)$$

Ici, \mathbf{x} représente le vecteur des inconnues (ici, cela correspondrait à l'ensemble des valeurs T_i aux nœuds $i \in [1, n]$ du maillage). \mathbf{L} est une matrice carrée $n \times n$, indépendante de l'inconnue \mathbf{x} , issue de la discrétisation spatiale des opérateurs $\mathbf{u} \cdot \nabla$ et $-\alpha \Delta$. \mathbf{b} est un second membre qui contient la contribution des termes connus (terme source, égal à 0 dans (10.1), et conditions aux limites).

Résoudre le problème (10.1) après discrétisation revient à résoudre un système linéaire (10.2) en les inconnues \mathbf{x} impliquant la matrice carrée \mathbf{L} . Dans Cast3M, cette résolution se fait à l'aide de l'opérateur '`KRES`' ou de l'opérateur '`RESO`'.

10.2.2 Problème linéaire transitoire

Dans ce type de problème, on a un opérateur de dérivée partielle en temps $\frac{\partial}{\partial t}$ et tous les opérateurs de l'équation aux dérivées partielles sont linéaires par rapport à l'inconnue

Opérateur	Nom	Options	Données	Matrice	Second Membre
Termes volumiques					
$\begin{cases} -\alpha \Delta T \\ \alpha \nabla T \cdot \mathbf{n} _{\delta\Omega_N} \end{cases}$	LAPN	–	α	$\int_{\Omega} \alpha \nabla N_i \nabla N_j$	–
$\begin{cases} -\nu \Delta \mathbf{u} \\ \nu \nabla \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} _{\delta\Omega_N} \end{cases}$	LAPN	<u>MUCONS</u>	ν	$\int_{\Omega} \nu \nabla \mathbf{N}_i : \nabla \mathbf{N}_j$	–
$\begin{cases} -\nabla \cdot \boldsymbol{\tau} \\ \boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{n} _{\delta\Omega_N} \end{cases}$	LAPN	FTAU	μ, \mathbf{u}	$\int_{\Omega} \mu \nabla \mathbf{N}_i : \nabla \mathbf{N}_j$	$\int_{\Omega} -\mu \nabla \mathbf{N}_i : \nabla^t \mathbf{u}$
$\rho \mathbf{u} \cdot \nabla T$	KONV	CENTREE	ρ, \mathbf{u}	$\int_{\Omega} \rho \mathbf{u} \cdot \nabla N_j N_i$	–
$\begin{cases} \rho \mathbf{u} \cdot \nabla T \\ \mathbf{B} \nabla T \cdot \mathbf{n} _{\delta\Omega_N} \end{cases}$	KONV	SUPG	ρ, \mathbf{u}, α	$+\int_{\Omega} \nabla N_j \mathbf{B}(\rho, \mathbf{u}, \alpha) \nabla N_i$	–
$\begin{cases} \rho \mathbf{u} \cdot \nabla T \\ (\mathbf{B}+\mathbf{C}) \nabla T \cdot \mathbf{n} _{\delta\Omega_N} \end{cases}$	KONV	<u>SUPGDC</u>	$\rho, \mathbf{u}, \alpha, T$	$+\int_{\Omega} \nabla N_j \mathbf{C}(\rho, \mathbf{u}, \alpha, T) \nabla N_i$	–
$\rho \mathbf{u} \cdot \nabla T$	KONV	<u>NOCONS</u>	ρ, \mathbf{u}	$\int_{\Omega} \rho \mathbf{u} \cdot \nabla N_j N_i$	–
$\begin{cases} \nabla \cdot \rho \mathbf{u} T \\ -T \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} _{\delta\Omega_N} \end{cases}$	KONV	CONS	ρ, \mathbf{u}	$\int_{\Omega} -\rho \mathbf{u} N_j \nabla N_i$	–
$\rho (\nabla \mathbf{u}) \cdot \mathbf{u}$	KONV	<u>NOCONS</u>	ρ, \mathbf{u}	$\int_{\Omega} \rho (\nabla \mathbf{N}_j) \cdot \mathbf{u} N_i$	–
$\begin{cases} \nabla \cdot \rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} \\ -\rho (\mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) \cdot \mathbf{n} _{\delta\Omega_N} \end{cases}$	KONV	CONS	ρ, \mathbf{u}	$\int_{\Omega} -\rho (\mathbf{u} \otimes \mathbf{N}_j) \nabla N_i$	–
$-\nabla \cdot \mathbf{u}$	KMAB	–	–	$\int_{\Omega} -\nabla \cdot \mathbf{N}_j N_i$	–
$\begin{cases} \nabla p \\ -p \mathbf{n} _{\delta\Omega_N} \end{cases}$	KMBT	–	–	$\int_{\Omega} -N_j \nabla \cdot \mathbf{N}_i$	–
$\begin{pmatrix} 0 & \nabla p \\ -\nabla \cdot \mathbf{u} & 0 \end{pmatrix}$	KBBT	–	–	$\int_{\Omega} -\nabla \cdot \mathbf{N}_j N_i - N_j \nabla \cdot \mathbf{N}_i$	–
$\rho \frac{T^{k+1} - T^k}{\Delta t}$	DFDT	CENTREE	$\rho, T^k, \Delta t$	$\int_{\Omega} \frac{\rho}{\Delta t} N_i N_j$	$\int_{\Omega} \frac{\rho}{\Delta t} T^k N_i$
$\rho \frac{\mathbf{u}^{k+1} - \mathbf{u}^k}{\Delta t}$	DFDT	CENTREE	$\rho, \mathbf{u}^k, \Delta t$	$\int_{\Omega} \frac{\rho}{\Delta t} \mathbf{N}_i \mathbf{N}_j$	$\int_{\Omega} \frac{\rho}{\Delta t} \mathbf{u}^k \mathbf{N}_i$
$-s_T$	FIMP	–	s_T	–	$\int_{\Omega} s_T N_i$
$\begin{cases} \rho c \mathbf{u} \cdot \nabla T \\ -\lambda \Delta T - s_T \end{cases}$	TSCA	–	$\rho c, \mathbf{u}, \lambda, s_T$	$\int_{\Omega} \rho c \mathbf{u} \cdot \nabla N_j N_i + \lambda \nabla N_i \nabla N_j$	$\int_{\Omega} s_T N_i$
$\begin{cases} \rho (\nabla \mathbf{u}) \cdot \mathbf{u} \\ -\mu \Delta \mathbf{u} - s_u \end{cases}$	NS	–	$\rho, \mathbf{u}, \mu, s_u$	$\int_{\Omega} \rho (\nabla \mathbf{N}_j) \cdot \mathbf{u} N_i + \mu \nabla N_i \nabla N_j$	$\int_{\Omega} s_u N_i$
Termes surfaciques					
$-q$	FIMP	–	q	–	$\int_{\delta\Omega} q N_i$
$h(T - T_{\infty})$	ECHI	–	h, T_{∞}	$\int_{\delta\Omega} h N_j N_i$	$\int_{\delta\Omega} h T_{\infty} N_i$
$-\mathbf{f}_0$	TOIM	–	\mathbf{f}_0	–	$\int_{\delta\Omega} \mathbf{f}_0 N_i$
$k(\mathbf{u} - \mathbf{u}_{\infty})$	FROT	–	k, \mathbf{u}_{∞}	$\int_{\delta\Omega} k \mathbf{N}_j \mathbf{N}_i$	$\int_{\delta\Omega} k \mathbf{u}_{\infty} \mathbf{N}_i$

TAB. 10.2: Principaux opérateurs de discrétisation de Cast3M en mécanique des fluides. Les options soulignées sont les options par défaut.

considérée. Un exemple de problème de ce type est l'équation de la chaleur vue en section 5.1 :

$$\frac{\partial T}{\partial t} - \alpha \Delta T = 0 \quad (10.3)$$

On commence généralement par discrétiser en temps cette équation par une méthode de différences finies. Pour cela, on discrétise l'intervalle de temps $[0, t]$ sur lequel on veut résoudre le problème en un nombre fini de points : $\{0, \Delta t, \dots, k\Delta t, (k+1)\Delta t, \dots, n_{\text{ITMA}}\Delta t\}$ ¹. L'équation (10.3) discrétisée en temps par une méthode d'Euler implicite prend alors la forme :

$$\frac{T^{k+1} - T^k}{\Delta t} - \alpha \Delta T^{k+1} = 0 \quad \forall k \in [1, n_{\text{ITMA}}] \quad (10.4)$$

où T^k est l'inconnue au temps $k\Delta t$.

On se ramène donc à n_{ITMA} problèmes "linéaires stationnaires" à résoudre séquentiellement. T^0 , la condition initiale est une donnée qui permet de résoudre T^1 . Puis, par récurrence, T^k est connu, ce qui permet d'obtenir T^{k+1} . Après discrétisation spatiale par la méthode des Éléments finis, le problème (10.4) prend la forme suivante :

$$\left(\frac{\mathbf{M}}{\Delta t} + \mathbf{L}\right)\mathbf{x}^{k+1} = \frac{\mathbf{M}\mathbf{x}^k}{\Delta t} \quad \forall k \in [1, n_{\text{ITMA}}] \quad (10.5)$$

Résoudre le problème (10.3) après discrétisation revient à résoudre n_{ITMA} systèmes linéaires (10.5) séquentiellement en les inconnues \mathbf{x}^{k+1} impliquant la matrice carrée $(\frac{\mathbf{M}}{\Delta t} + \mathbf{L})$, indépendante de \mathbf{x} .

10.2.3 Problème non linéaire stationnaire

Dans ce type de problème, le temps n'intervient pas (pas d'opérateur de dérivée partielle en temps $\frac{\partial}{\partial t}$) mais au moins un des opérateurs de l'équation aux dérivées partielles n'est pas linéaire par rapport à l'inconnue considérée. Un exemple de problème de ce type est l'équation de Burgers, dont la version instationnaire a été vue au chapitre 7 :

$$(\nabla \mathbf{u}) \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (10.6)$$

Méthode de point fixe

Une manière de résoudre ce problème et de se ramener au cas du problème linéaire stationnaire est de le linéariser. Nous avons examiné ce point en détail au chapitre 6. Ici, nous utilisons la méthode de point fixe. Pour cela, on introduit un état initial $\mathbf{u}_{[0]}$ autour duquel on rend linéaire l'opérateur traité. Dans notre cas particulier, on suppose que la vitesse transportante est donnée par $\mathbf{u}_{[0]}$ et l'inconnue cherchée devient la vitesse transportée $\mathbf{u}_{[1]}$:

$$\left(\nabla \mathbf{u}_{[1]}\right) \cdot \mathbf{u}_{[0]} = 0 \quad (10.7)$$

L'opérateur est maintenant linéaire en l'inconnue $\mathbf{u}_{[1]}$ et on peut le discrétiser spatialement, puis résoudre le problème. Une fois $\mathbf{u}_{[1]}$ connue, on itère le processus n_{NITER} fois :

$$\left(\nabla \mathbf{u}_{[i+1]}\right) \cdot \mathbf{u}_{[i]} = 0 \quad \forall i \in [1, n_{\text{NITER}}] \quad (10.8)$$

¹On a choisi ici, par simplicité, de discrétiser $[0, t]$ en $(n_{\text{ITMA}} + 1)$ points équidistants

On a convergence lorsque les itérations permettent de tendre vers un *point fixe* : $\mathbf{u}_{[i]} \xrightarrow{i \rightarrow \infty} \mathbf{u}_{[\infty]}$. En pratique, on effectue un nombre fini n_{NITER} d'itérations non linéaires et on vérifie que $\|\mathbf{u}_{[n_{\text{NITER}}]} - \mathbf{u}_{[n_{\text{NITER}}-1]}\|$ est "petit".

On s'est donc ramené à n_{NITER} problèmes "linéaires stationnaires" à résoudre séquentiellement. Cette méthode de résolution d'équations non linéaires s'appelle itération de *point fixe* ou de *Picard*.

Après discrétisation spatiale par la méthode des Éléments finis, les problèmes (10.8) prennent la forme suivante :

$$\left[\mathbf{N}(\mathbf{x}_{[i]}) \right] \mathbf{x}_{[i+1]} = \mathbf{b} \quad \forall i \in [1, n_{\text{NITER}}] \quad (10.9)$$

Résoudre le problème (10.6), après discrétisation, revient à résoudre n_{NITER} systèmes linéaires (10.9) séquentiellement sur les inconnues $\mathbf{x}_{[i+1]}$ impliquant la matrice carrée \mathbf{N} , qui varie à chaque itération non linéaire i puisqu'elle dépend de $\mathbf{x}_{[i]}$.

Relaxation de la méthode de point fixe

À noter que l'on n'a généralement pas de garantie que le processus itératif défini par (10.9) converge : cela va dépendre des propriétés spectrales de la matrice \mathbf{N} . Comme cette matrice dépend de l'inconnue cherchée, le point de départ initial $\mathbf{x}_{[0]}$ va également être important : il est souvent préférable qu'il ne soit pas trop éloigné de la solution cherchée.

Afin d'augmenter le rayon de convergence de l'itération de point fixe (10.9), on introduit souvent un *paramètre de relaxation* $0 < \omega \leq 1$ et on effectue une mise à jour relaxée de l'inconnue :

$$\mathbf{N}(\mathbf{x}_{[i]}) \tilde{\mathbf{x}}_{[i+1]} = \mathbf{b} \quad (10.10)$$

$$\mathbf{x}_{[i+1]} = \omega \tilde{\mathbf{x}}_{[i+1]} + (1 - \omega) \mathbf{x}_{[i]} \quad \forall i \in [1, n_{\text{NITER}}] \quad (10.11)$$

L'inconvénient de cette méthode de relaxation est qu'elle peut ralentir la convergence vers $\mathbf{x}_{[\infty]}$ lorsque cette convergence a lieu.

10.2.4 Problème non linéaire transitoire

En rassemblant les méthodes vues dans les sections précédentes, on peut finalement écrire un algorithme de Picard relaxé pour un problème transitoire. Une itération de l'algorithme sous forme discrétisée en temps et en espace s'écrira :

$$\left(\frac{\mathbf{M}}{\Delta t} + \mathbf{L} + \mathbf{N}(\mathbf{x}_{[i]}^{k+1}) \right) \tilde{\mathbf{x}}_{[i+1]}^{k+1} = \frac{\mathbf{M} \mathbf{x}_{[i]}^k}{\Delta t} + \mathbf{b} \quad (10.12)$$

$$\mathbf{x}_{[i+1]}^{k+1} = \omega \tilde{\mathbf{x}}_{[i+1]}^{k+1} + (1 - \omega) \mathbf{x}_{[i]}^{k+1} \quad \forall (k, i) \in [1, n_{\text{ITMA}}] \times [1, n_{\text{NITER}}] \quad (10.13)$$

Ici, \mathbf{M} est associée à l'opérateur $\frac{\partial}{\partial t}$, \mathbf{L} aux opérateurs linéaires et \mathbf{N} à la linéarisation des opérateurs non linéaires. Au total, on aura à résoudre $n_{\text{ITMA}} \times n_{\text{NITER}}$ systèmes linéaires. L'algorithme complet est donnée dans le tableau 10.3.

La traduction en langage GIBIANE dans Cast3M découle directement de l'algorithme 10.3. Elle est effectuée dans la procédure EXEC dont la partie significative est donnée sur le listing 10.1.

```

1  'DEBPROC' EXEC ;
   'ARGUMENT' rv*'TABLE' ;
   omeg = rv . 'OMEGA' ;
   itma = rv . 'ITMA' ;
   *
   * Itérations en temps
   *
   'REPETER' bloc1 itma ;
   *
10  * Itérations internes (non-linéarités)
   *
   'REPETER' bloci (rv . 'NITER') ;
       sf mau = 'KOPS' 'MATRIK' ;
   *
   * Construction de la matrice et du second membre au pas de temps &bloc1
   * a l'itération interne &bloci
   *
       'REPETER' bloc2 ('DIME' (rv . 'LISTOPER')) ;
           nomper = 'EXTRAIRE' &bloc2 (rv . 'LISTOPER') ;
20  notable= 'CHAINE' &bloc2 nomper ;
       msi mai= ('TEXTE' nomper) (rv . notable) ;
       mau = mau 'ET' mai ;
       sf = sf 'ET' msi ;
       'FIN' bloc2 ;
       s1 = rv . 'CLIM' ;
   *
   * Résolution du système lineaire
   *
       res = 'KRES' ma1 'TYPI' (rv . 'METHINV')
30  'CLIM' s1 'SMBR' s2 ;
   *
   * Calcul de l'erreur
   *
       eps = 'TCRR' res omeg (rv . 'INCO') ;
       'FIN' bloci ;
   *
   * Mise a jour des inconnues
   *
       irt = 'TCNM' rv ;
40  'SI' ('EGA' irt 1) ;
       'MESSAGE' ' Temps final atteint : ' (rv . 'PASDETPS' . 'TPS') ;
       'QUITTER' bloc1 ;
       'FINSI' ;
       'FIN' bloc1 ;
   ***** E X E C *****
   'FINPROC' ;

```

Listing 10.1: Partie significative de la procédure `exec.procedur` correspondant à l'algorithme 10.3.

```

Condition initiale :  $\mathbf{x}^0$ 
for  $k = 0, n_{ITMA} - 1$  do {Boucle en temps}
   $\mathbf{x}_{[0]}^{k+1} \leftarrow \mathbf{x}^k$ 
  for  $i = 0, n_{NITER} - 1$  do {Boucle de point fixe (non-linéarité)}
     $\mathbf{A} \leftarrow 0$    $\mathbf{b} \leftarrow 0$ 
    for  $j = 1, n_{OPER}$  do {Boucle sur les opérateurs}
       $\mathbf{A} \leftarrow \mathbf{A} + \mathbf{A}_j(\mathbf{x}_{[i]}^{k+1}, \mathbf{x}^k)$ 
       $\mathbf{b} \leftarrow \mathbf{b} + \mathbf{b}_j(\mathbf{x}_{[i]}^{k+1}, \mathbf{x}^k)$ 
    end for
     $\tilde{\mathbf{x}}_{[i+1]}^{k+1} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{b}$  {Résolution du système linéaire}
     $\mathbf{x}_{[i+1]}^{k+1} = \mathbf{x}_{[i]}^{k+1} + \omega(\tilde{\mathbf{x}}_{[i+1]}^{k+1} - \mathbf{x}_{[i]}^{k+1})$  {Mise à jour relaxée}
  end for
   $\mathbf{x}^{k+1} \leftarrow \mathbf{x}_{[n_{NITER}-1]}^{k+1}$ 
   $t^{k+1} \leftarrow t^k + \Delta t$ 
end for

```

TAB. 10.3: Algorithme de Picard relaxé pour la résolution de problèmes transitoires non linéaires en mécanique des fluides.

Type de problème	Δt	n_{ITMA}	n_{NITER}	ω
Linéaire Stationnaire	–	1	1	1.0
Linéaire Instationnaire	○	○	1	1.0
Non-Linéaire Stationnaire	–	1	○	$0.1 < \omega \leq 1$.
Non-Linéaire Instationnaire	○	○	○	$0.4 < \omega \leq 1$.

TAB. 10.4: Choix des paramètres importants de la procédure EXEC pour la résolution d'un problème de mécanique des fluides. – : non applicable. ○ : à choisir.

10.2.5 Gestion des paramètres importants

En pratique, la procédure EXEC permet de résoudre tous les types de problème, linéaires ou non, stationnaires ou transitoires, dont nous avons parlé dans cette section. Le tableau 10.4 résume les choix possibles pour les quatre paramètres importants de l'algorithme : Δt , n_{ITMA} , n_{NITER} , ω .

Le cas le plus courant et le plus complexe est celui du problème non linéaire instationnaire où il faut choisir convenablement quatre paramètres. En pratique, il faut s'assurer qu'à chaque pas de temps, l'itération de Picard relaxé converge, c'est-à-dire que la non linéarité du problème est effectivement résolue. Lorsque ce n'est pas le cas (par exemple, lorsque $\|\mathbf{u}_{[i+1]} - \mathbf{u}_{[i]}\|$ ne diminue pas), deux solutions sont possibles :

1. diminuer ω (c'est ce que nous avons vu en section 10.2.3) mais, alors, il faut augmenter n_{NITER} dans des proportions inverses. En pratique, on recommande de ne pas avoir $\omega < 0.4$ et, dans le cas où $\omega = 0.4$, une valeur typique pour n_{NITER} est 5.
2. diminuer Δt . Dans ce cas, c'est n_{ITMA} qui va augmenter pour atteindre un même temps final t_∞ .

En général, diminuer le pas de temps Δt est plus efficace que de diminuer ω car, non seulement diminuer Δt améliore la convergence de l'itération non linéaire (meilleures pro-

priétés spectrales de la matrice du système linéaire et solution initiale $\mathbf{x}_{[0]}^{k+1}$ plus proche de la solution cherchée $\mathbf{x}_{[\infty]}^{k+1}$) mais, de plus, on augmente la précision temporelle des solutions obtenues.

Choisir un bon pas de temps fait encore partie de l'art de l'ingénieur. Il existe des méthodes automatiques mais qui ne sont pas satisfaisantes dans tous les cas. Le choix d'un bon pas de temps fait généralement intervenir une analyse physique préalable du problème (adimensionnement...) ou peut se faire a posteriori en analysant le comportement des solutions numériques obtenues (varie-t-elle beaucoup d'un pas de temps au suivant, la convergence des itérations non linéaires est-elle difficile?).

Si l'on ne parvient toujours pas à obtenir la convergence des itérations non linéaires, il faudra également intervenir sur des paramètres qui ne sont pas directement impliqués dans l'algorithme de résolution mais dont l'importance n'est pas moindre :

1. les options de décentrement éventuelles des termes convectifs (voir le chapitre 4 et l'opérateur 'KONV' dans le tableau 10.2);
2. le maillage : il faut qu'il puisse approcher spatialement les solutions cherchées de manière correcte.

10.3 Résumé

Dans ce chapitre, on a décrit la manière de résoudre un problème de mécanique des fluides avec Cast3M. Ceci s'effectue en quatre étapes :

1. création du maillage sur lequel s'appuie la discrétisation spatiale;
2. description du problème à l'aide de l'opérateur 'EQEX';
3. résolution du problème à l'aide de la procédure EXEC;
4. post-traitement et analyse des résultats.

Seules les étapes 2 et 3 ont été vues ici, les deux autres seront vues en Travaux Dirigés. On peut se référer aux jeux de donnée utilisée dans ce cours comme exemples complets. Ils sont disponibles sur le site Web Cast3M [Cas].

L'algorithme de résolution implanté dans la procédure EXEC est un algorithme de point fixe relaxé. Les paramètres importants, fournis par l'utilisateur et gouvernant la résolution, sont le pas de temps Δt , le nombre de pas de temps n_{ITMA} , le nombre d'itérations non linéaires n_{NITER} et le coefficient de relaxation ω . Le choix correct du pas de temps est en particulier important.

Bibliographie

- [BAH87] Robert Byron Bird, Robert C. Armstrong, and Ole Hassager. *Dynamics of Polymeric Liquids*, volume 1. Fluid Mechanics. Wiley Interscience, 2nd edition, 1987.
- [BL05] Pavel Bochev and R. B. Lehoucq. On the Finite Element Solution of the Pure Neumann Problem. *SIAM Review*, 47(1) :50–66, 2005.
- [Can01] Sébastien Candel. *Mécanique des fluides*. Dunod, 2^e edition, 2001.
- [Cas] Cast3M. Web site. <http://www-cast3m.cea.fr/>.
- [DP00] Frédéric Dabbène and Henri Paillère. Initiation à la simulation numérique en mécanique des fluides : éléments d’analyse numérique. Technical Report SEMT/LTMF/RT/00–015/A, CEA, 2000. Cours B2-1 ENSTA, <http://www-cast3m.cea.fr/>.
- [DT84] Gouri Dhatt and Gilbert Touzot. *Une présentation de la méthode des éléments finis*. Collection universitaire de Compiègne. MALOINE S.A., 27, rue de l’Ecole–de–Médecine, 75006 PARIS, 2^e edition, 1984.
- [EG02] Alexandre Ern and Jean-Luc Guermond. *Éléments finis : théorie, applications, mise en œuvre*. Springer, 2002.
- [Gur81] Morton E. Gurtin. *An Introduction to Continuum Mechanics*, volume 158 of *Mathematics in Science and Engineering*. Academic Press, 1981.
- [Hug87] T.J.R Hughes. Recent progress in the development and understanding of SUPG methods with special reference to the compressible Euler and Navier-Stokes equations. *IJNMF*, 7(11) :1261–1275, 1987.
- [Lev02] Randall J. Leveque. *Finite Volume Methods for Hyperbolic Problems*. Cambridge Texts in Applied Mathematics. Cambridge University Press, first edition, 2002. see also <http://amath.washington.edu/~rjl>.
- [SF88] Gilbert Strang and George J. Fix. *An Analysis of the Finite Element Method*. Wellesley-Cambridge Press, 2nd edition, 1988. <http://math.mit.edu/~gs>.
- [Str07] Gilbert Strang. *Computational Science and Engineering*. Wellesley-Cambridge Press, 2007. See also <http://math.mit.edu/cse>.