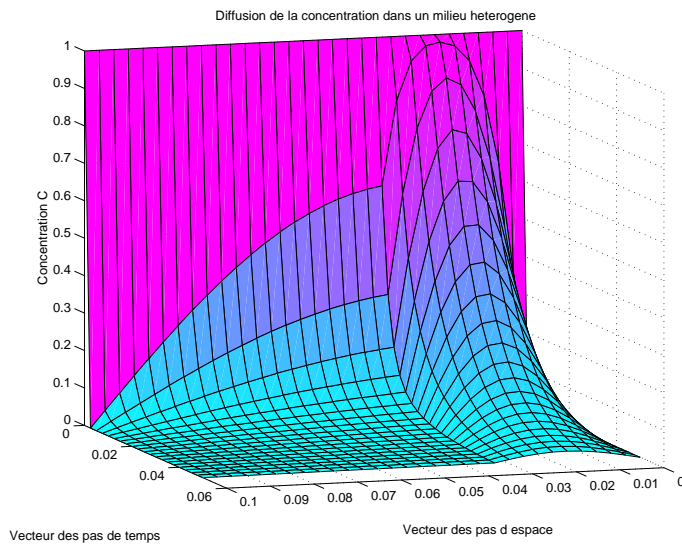


Projet d'analyse numérique

DIFFUSION EN MILIEU HETEROGENE



Céline CATTOEN, Bénédicte LIENHARDT

Table des matières

1	Présentation du Projet	5
1.1	Présentation du Sujet	5
1.2	Etude théorique	5
1.3	Choix de la méthode de discrétisation	6
1.3.1	Espace d'étude et définition des paramètres	6
1.3.2	Schéma de discrétisation	7
2	Ecriture des matrices de discrétisation	11
2.1	La matrice M	11
2.2	La matrice K1	12
2.3	La matrice K2	12
2.4	Ordre du schéma de discrétisation	12
2.5	Résolution	14
3	Algorithme de programmation	15
3.1	Saisie des matrices	15
3.2	Résolution	15
3.2.1	Cas général, θ est quelconque	16
3.2.2	Cas explicite $\theta = 0$	16
3.2.3	Cas implicite $\theta = 1$	16
3.3	Tracés de la solution obtenue	17
4	Etude des conditions de stabilité	19
4.1	Etude du cas général: $0 \leq \theta \leq 1$	19
4.2	Etude du cas explicite: $\theta = 0$	22
4.2.1	Etude théorique:	22
4.2.2	Résultats obtenus:	23
4.3	Etude du cas implicite: $\theta = 1.0$	23
4.3.1	Etude théorique:	23
4.3.2	Résultats obtenus:	24
4.4	Etude du cas intermédiaire: $\theta = 0.5$	24
4.4.1	Etude théorique:	24
4.4.2	Résultats obtenus:	24

Remerciements

Nous tenons à remercier vivement M.HUARD, notre responsable de projet, pour sa grande disponibilité. Nous n'oublions pas Julien POMMIER qui a toujours su nous consacrer du temps et nous aider dans la recherche de nos erreurs.

Introduction

Notre projet consiste à calculer et à visualiser la fonction $C(r, t)$, qui décrit la concentration de matière diffusant dans un milieu confiné entre deux plaques parallèles et suffisamment longues pour que cette diffusion soit homogène.

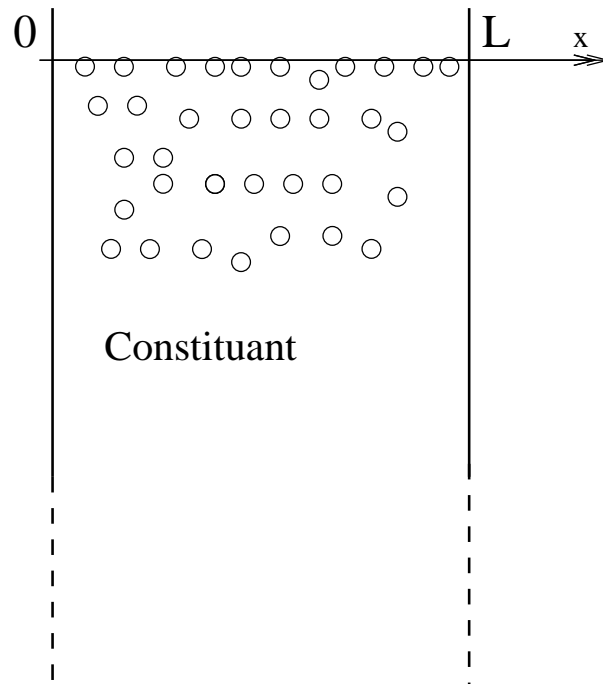


FIG. 1 – *Diffusion entre deux plaques*

Cette concentration peut être décrite par des équations aux dérivées partielles en une dimension d'espace.

Le milieu étant hétérogène et constitué de deux phases où la diffusivité est différente, on travaille au sens des distributions.

Nous avons étudié plus particulièrement le comportement de deux schémas de discrétisation: un schéma explicite et un schéma implicite.

Le rapport présente de manière détaillée la façon dont nous avons résolu ce problème et les choix que nous avons faits. En annexe sont fournies les courbes permettant de visualiser les résultats obtenus ainsi que le programme.

Chapitre 1

Présentation du Projet

1.1 Présentation du Sujet

On s'intéresse à la diffusion en milieu hétérogène. Initialement, la concentration de matière vaut C_0 et on fait un changement de fonction inconnue, en remplaçant C^* , par $C = \frac{C_0 - C^*}{C_0}$. On doit donc résoudre le système suivant:

$$(P) = \begin{cases} \frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial(D(x) * \frac{\partial C(x,t)}{\partial x})}{\partial x} & (x, t) \in [0, L] \times [0, +\infty[\\ C(0, t) = C(L, t) = 0, \forall t > 0 \\ C(x, 0) = 1, \forall x \in [0, L] \end{cases}$$

1.2 Etude théorique

En se plaçant dans le cas stationnaire, on va dégager des conditions pour calculer la solution de ce problème.

La discontinuité de la diffusivité nécessite de travailler au sens des distributions pour établir l'existence et l'unicité d'une solution au problème.

On note:

- D la diffusivité.

$$D = D_I 1_{]0, L/3[} + D_S 1_{]L/3, L[}$$

- C de classe C^1 par morceaux telle que:

$$C(x) = \begin{cases} C_I(x), & 0 \leq x < L/3 \\ C_S(x), & L/3 < x \leq L \end{cases}$$

- C' la dérivée de C au sens des distributions sur $]0, L[$
- $\varphi \in D[0, L]$

C' et D sont des fonctions continues par morceaux avec une coupure en $L/3$. Le produit de ces fonctions $C'D$ est continu par morceaux et appartient à l'ensemble L^1_{loc} . La dérivée de ce produit contient une mesure de Dirac avec un saut en $L/3$. Or en $\delta(L/3)$, on n'a pas de valeur car ce n'est pas défini. La condition $C_I(L/3) = C_S(L/3)$ est nécessaire pour que $T = DC'$ soit une distribution.

Calcul de la distribution T' :

$$\langle T', \varphi \rangle = - \langle T, \varphi' \rangle = - \int_0^L D(x)C'(x)\varphi'(x)dx$$

En intégrant par parties, on obtient:

$$\langle T', \varphi \rangle = - \left[D(x)C'(x)\varphi(x) \right]_0^L + \int_0^L (D'(x)C'(x) + D(x)C''(x) + \delta_{L/3}(D_I C'_I - D_S C'_S))\varphi(x)dx$$

Sachant que $\varphi \in D[0, L]$ et $D'(x) = 0$ sur $[0, L/3[$ et $]L/3, L]$

$$= \int_0^{L/3} D'(x)C'(x)\varphi(x)dx + \int_{L/3}^L D'(x)C'(x)\varphi(x)dx + \int_0^L (D(x)C''(x) + \delta_{L/3}(D_I C'_I - D_S C'_S))\varphi(x)dx$$

$$\langle T', \varphi \rangle = \int_0^L (D(x)C''(x) + \delta_{L/3}(D_I C'_I - D_S C'_S))\varphi(x)dx$$

$$\boxed{\langle T', \varphi \rangle = \langle D(x)C''(x) + \delta_{L/3}(D_I C'_I - D_S C'_S) \varphi(x) \rangle}$$

Supposons f une fonction continue sur $]0, L[$ et C tels que $-T' = f$ dans $D'[0, L]$:

$$-T' = f \iff -D(x)C''(x) - \delta_{L/3}(D_I C'_I - D_S C'_S) = f$$

si $D_I C'_I(L/3) = D_S C'_S(L/3)$ alors $-D(x)C''(x) = f$

C est ainsi solution du problème

$$(P') = \begin{cases} -D_I C''_I(x) = f(x) & 0 < x < \frac{L}{3} \\ -D_S C''_S(x) = f(x) & \frac{L}{3} < x < L \\ C_I(\frac{L}{3}) = C_S(\frac{L}{3}) & D_I C'_I(\frac{L}{3}) = D_S C'_S(\frac{L}{3}) \end{cases}$$

1.3 Choix de la méthode de discrétisation

1.3.1 Espace d'étude et définition des paramètres

On définit:

$$- \text{un pas d'espace } h = \frac{L}{N+1}$$

- un pas de temps $\tau = \frac{T_f}{K}$
- N le nombre de points déterminant la discrétisation de l'espace
- K le nombre de points discrétisant le temps
- T_f le temps de fin d'étude
- $L = lg$ la longueur des plaques.

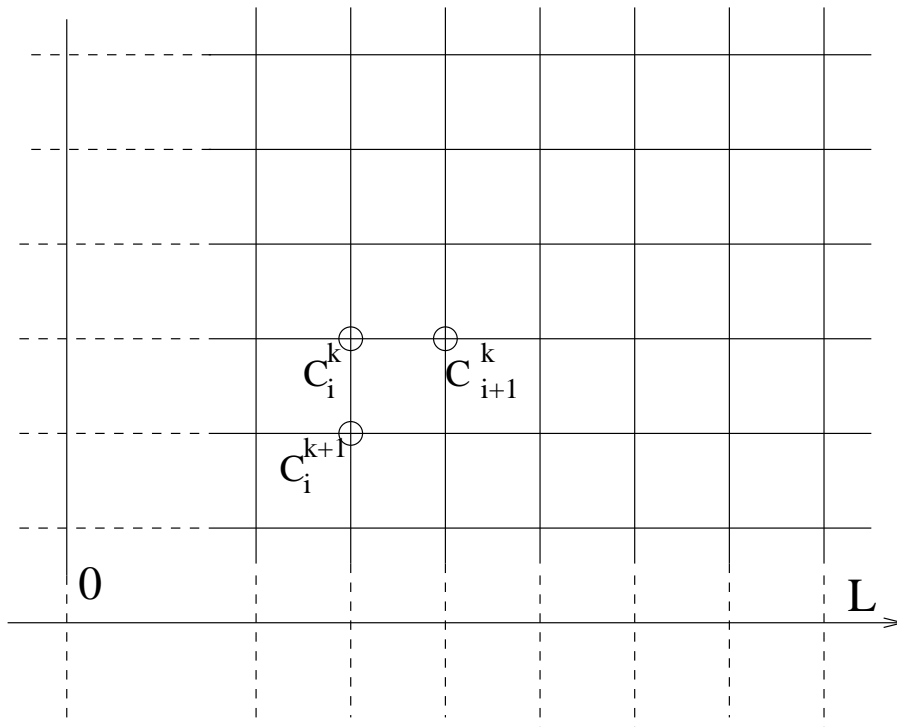


FIG. 1.1 – Maillage de discrétisation

Le vecteur $C^{(k)} \in \mathbb{R}^N$ représentera à l'instant $t_k = k * \tau$ (avec $0 \leq k \leq K$) les valeurs de la solution $C = \frac{C_0 - C^*}{C_0}$ aux points $x_i = i * h$.

En fait, C n'est pas une vrai concentration, la concentration C^* est donnée par $C^* = C_0 - \frac{C_0}{C}$ aux points $x_i = i * h$.

1.3.2 Schéma de discrétisation

A l'aide d'expressions en différences finies, on discrétise les 2 parties de l'équation aux dérivées partielles.

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial(D(x)\frac{\partial C(x,t)}{\partial x})}{\partial x}$$

- La discrétisation de $\frac{\partial(D(x)\frac{\partial C(x,t)}{\partial x})}{\partial x}$ à l'instant t_k est donnée par $\frac{-MC^{(k)}}{h^2}$
ou $\frac{-MC^{(k+1)}}{h^2}$.

M est une matrice dont l'ordre du schéma est 2 aux points $x_i \in [0, L]$.

- La discrétisation de $\frac{\partial C}{\partial t}$ à l'instant t_k est donnée par $\frac{C^{(k+1)} - C^{(k)}}{\tau}$.

On peut donc obtenir 2 schémas de discrétisation différents:

- l'un explicite:

$$\underline{C^{(k+1)} = (I - \frac{\tau}{h^2}M) C^{(k)}}$$

- l'autre implicite:

$$\underline{(I + \frac{\tau}{h^2}M)C^{(k+1)} = C^{(k)}}$$

Prenons $\theta \in [0, 1]$, en multipliant le schéma explicite par $(1 - \theta)$ et le schéma implicite par θ et en effectuant la somme des 2 équations, on obtient:

$$\underline{(I + \theta\frac{\tau}{h^2}M)C^{(k+1)} = (I - (1 - \theta)\frac{\tau}{h^2}M) C^{(k)}}$$

Cette équation est le schéma que nous allons étudier et que nous noterons:

$$K_2 C^{(k+1)} = K_1 C^{(k)}$$

On retrouve le schéma explicite pour $\theta = 0$ $C^{(k+1)} = K_1 C^{(k)}$ et le schéma implicite pour $\theta = 1$ $K_2 C^{(k+1)} = C^{(k)}$

Equation au raccordement

Quand $x = \frac{L}{3}$, il faut gérer le raccordement grâce aux équations mises en évidence dans l'étude théorique.

Ainsi, on discrétise l'équation $D_I C'_I(\frac{L}{3}) = D_S C'_S(\frac{L}{3})$.

En notant *ind* l'indice du raccordement, tel que $x_{ind} = \frac{L}{3}$:

$$\frac{D_I}{h}(C_I(x_{ind}, k) - C_I(x_{ind-1}, k)) = \frac{D_S}{h}(C_S(x_{ind+1}, k) - C_S(x_{ind}, k))$$

On discrétise $C_I(x_{ind-1}, k) = C_I(x_{ind}, k) - h \frac{\partial C_I(x_{ind}, k)}{\partial x} + D_I \frac{h^2}{2} \frac{\partial^2 C_I(x_{ind}, k)}{\partial x^2}$
 et $C_S(x_{ind+1}, k) = C_S(x_{ind}, k) + h \frac{\partial C_S(x_{ind}, k)}{\partial x} + \frac{h^2}{2} \frac{\partial^2 C_S(x_{ind}, k)}{\partial x^2}$.

De plus, puisque on a:

$$C_I\left(\frac{L}{3}\right) = C_S\left(\frac{L}{3}\right) \text{ et } D_I C_I'\left(\frac{L}{3}\right) = D_S C_S'\left(\frac{L}{3}\right)$$

$$\frac{1}{h^2}[-D_I C_I(x_{ind-1}, k) + (D_I + D_S)C(x_{ind}, k) - D_S C(x_{ind+1}, k)] = \frac{D_I}{2} \frac{\partial^2 C_I(x_{ind}, k)}{\partial x^2} + \frac{D_S}{2} \frac{\partial^2 C_S(x_{ind}, k)}{\partial x^2}$$

et comme $\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial(D(x) \frac{\partial C(x, t)}{\partial x})}{\partial x}$ l'équation devient:

$$\Rightarrow \frac{1}{h^2}[-D_I C_I(x_{ind-1}, k) + (D_I + D_S)C(x_{ind}, k) - D_S C(x_{ind+1}, k)] = \frac{1}{2} \frac{\partial C_I(x_{ind}, k)}{\partial t} + \frac{1}{2} \frac{\partial C_S(x_{ind}, k)}{\partial t}$$

et

$$\frac{1}{2} \frac{\partial C_I(x_{ind}, k)}{\partial t} + \frac{1}{2} \frac{\partial C_S(x_{ind}, k)}{\partial t} = \frac{\partial C(x_{ind}, k)}{\partial t}$$

On obtient ainsi pour le schéma explicite:

$$\frac{C(x_{ind}, k+1) - C(x_{ind}, k)}{\tau} = \frac{1}{h^2}[-D_I C_I(x_{ind-1}, k) + (D_I + D_S)C(x_{ind}, k) - D_S C(x_{ind+1}, k)]$$

c'est-à-dire

$$C^{(k+1)} = \left(I - \frac{\tau M}{h^2}\right) C^{(k)}$$

On obtient de la même manière pour le schéma implicite:

$$\left(I + \frac{\tau M}{h^2}\right) C^{(k+1)} = C^{(k)}$$

Chapitre 2

Ecriture des matrices de discrétisation

Notre objectif est d'obtenir une discrétisation du problème avec une erreur en h^2 et en τ (sauf cas particuliers).

2.1 La matrice M

La matrice carré M permet de discrétiser $\frac{\partial(D(x) \frac{\partial C(x,t)}{\partial x})}{\partial x}$ par $-\frac{1}{h^2} MC^{(k)}$ selon un schéma d'ordre deux pour $x < L/3$ et $x > L/3$ et de gérer le raccordement $x = L/3$ avec une équation d'ordre un.

Ces affirmations seront justifiées par la suite.

$$M = \begin{pmatrix} 2DI & -DI & 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 \\ -DI & 2DI & -DI & 0 & \dots & \dots & \dots & & \vdots \\ 0 & -DI & 2DI & -DI & 0 & \dots & & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \ddots & \ddots & & & 0 & \vdots \\ \vdots & & -DI & 2DI & -DI & & & & \vdots \\ \vdots & & & -DI & DI + DS & -DS & & & \vdots \\ \vdots & & & & -DS & 2DS & -DS & & \vdots \\ \vdots & 0 & & & \ddots & \ddots & \ddots & & \vdots \\ \vdots & \dots & \dots & & 0 & -DS & 2DS & -DS & 0 \\ \vdots & \dots & \dots & \dots & & 0 & -DS & 2DS & -DS \\ 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & & 0 & -DS & 2DS \end{pmatrix}$$

Les inconnues étant représentées par

$$C^{(k)} = \begin{pmatrix} C_0^{(k)} \\ C_1^{(k)} \\ \vdots \\ C_N^{(k)} \\ C_{N+1}^{(k)} \end{pmatrix}$$

Il s'agit du vecteur contenant les valeurs de notre concentration modifiée au temps $t = k * \tau$ aux points $x_i = i * h$. Cependant $C_0^{(k)}$ et $C_{N+1}^{(k)}$ sont déterminés par les conditions aux limites, on se retrouve avec:

$$C^{(k)} = \begin{pmatrix} C_1^{(k)} \\ \vdots \\ C_N^{(k)} \end{pmatrix}$$

D'où la taille $N * N$ de la matrice M .

2.2 La matrice K1

La matrice K_1 est calculée à partir de la matrice M et de la matrice identité avec la relation:

$$K_1 = (I - (1 - \theta) \frac{\tau}{h^2} M)$$

2.3 La matrice K2

La matrice K_2 est calculée à partir de la matrice M et de la matrice identité avec la relation:

$$K_2 = (I + \theta \frac{\tau}{h^2} M)$$

2.4 Ordre du schéma de discrétisation

Etudions l'ordre de notre schéma de discrétisation sans tenir compte du raccourcissement dans un premier temps.

On sait d'après le cours que la discrétisation de $\frac{\partial(D(x) * \frac{\partial C(x,t)}{\partial x})}{\partial x}$, donne à l'instant k :

$$\frac{\partial(D(x) * \frac{\partial C(x,t)}{\partial x})}{\partial x} = -\frac{M}{h^2} C_k + o(h^2)$$

On décide de discrétiser $\frac{\partial C}{\partial t}$ par $\frac{C_{k+1} - C_k}{\tau}$. Il nous reste donc à calculer l'erreur que l'on commet en faisant cette discrétisation.

$$\begin{cases} C_{k+1} = C_k + \tau C'_k + \frac{\tau^2}{2} C''_k + o(\tau^2) & (1) \\ C_k = C_{k+1} - \tau C'_{k+1} + \frac{\tau^2}{2} C''_{k+1} + o(\tau^2) & (2) \end{cases}$$

$$\Leftrightarrow \begin{cases} \frac{\partial C_k}{\partial t} = \frac{C_{k+1} - C_k}{\tau} - \frac{\tau}{2} C''_k + o(\tau^2) & (1) \\ \frac{\partial C_{k+1}}{\partial t} = \frac{C_{k+1} - C_k}{\tau} + \frac{\tau}{2} C''_{k+1} + o(\tau^2) & (2) \end{cases}$$

On a donc 2 schémas de discrétisation qui sont :

– Schéma explicite de discrétisation :

$$\frac{C_{k+1} - C_k}{\tau} = -\frac{M}{h^2} C_k + o(h^2) + \frac{\tau}{2} C''_k + o(\tau^2)$$

– Schéma implicite de discrétisation :

$$\frac{C_{k+1} - C_k}{\tau} = -\frac{M}{h^2} C_{k+1} + o(h^2) - \frac{\tau}{2} C''_{k+1} + o(\tau^2)$$

Ensuite on fait l'addition du schéma explicite multiplié par θ , avec le schéma implicite multiplié par $(1 - \theta)$ et on obtient :

$$\frac{C_{k+1} - C_k}{\tau} = -(1-\theta) \frac{M}{h^2} C_k - \theta \frac{M}{h^2} C_{k+1} + o(h^2) + (1-\theta) \frac{\tau}{2} C''_k - \theta \frac{\tau}{2} C''_{k+1} + o(\tau^2) \quad (3)$$

De plus comme C est suffisamment régulière, on a :

$$C''_{k+1} = C''_k + \tau C'''_k + o(\tau^2)$$

et donc

$$(3) \quad \frac{C_{k+1} - C_k}{\tau} = -(1-\theta) \frac{M}{h^2} C_k - \theta \frac{M}{h^2} C_{k+1} + o(h^2) + (1-\theta) \frac{\tau}{2} C''_k - \theta \frac{\tau}{2} (C''_k + \tau C'''_k) + o(\tau^2)$$

\Leftrightarrow

$$(4) \quad \frac{C_{k+1} - C_k}{\tau} = -(1-\theta) \frac{M}{h^2} C_k - \theta \frac{M}{h^2} C_{k+1} + o(h^2) + (1-2\theta) \frac{\tau}{2} C''_k + o(\tau^2)$$

Notre discrétisation est donc globalement d'ordre deux dans l'espace ,sauf pour le raccordement en $x = L/3$ où on a une équation d'ordre un d'après le cours , obtenue à partir de la condition limite:

$$D_I C'_I\left(\frac{L}{3}\right) = D_S C'_S\left(\frac{L}{3}\right)$$

Elle est par ailleurs d'ordre un dans le temps, c'est à dire que notre erreur sur la solution est en h^2 dans l'espace et en τ dans le temps.

Ceci explique l'importance de prendre K beaucoup plus grand que N pour ne pas avoir de problèmes de divergence de la solution.

2.5 Résolution

On doit résoudre le problème suivant:

$$K2 * C^{(k+1)} = K1 * C^{(k)}$$

où $K1$ et $K2 \in M_N(\mathbb{R})$ et $C^{(k)}$ est un vecteur de \mathbb{R}^N de la forme :

$$C^{(k)} = \begin{pmatrix} C_1^{(k)} \\ C_2^{(k)} \\ \vdots \\ C_N^{(k)} \end{pmatrix}$$

Remarque: Les concentrations $C_0^{(k)}$ et $C_{N+1}^{(k)}$ du bord ne sont pas stockées dans ce vecteur mais seront rajoutées lors des sorties graphiques.

On résoud ce système par une méthode de factorisation LU appropriée suivie d'une résolution traditionnelle.

Chapitre 3

Algorithme de programmation

On a présenté dans la partie précédente les matrices permettant de discrétiser le système à résoudre.

Notre travail consistait alors à traduire de manière informatique nos équations pour pouvoir les résoudre.

Pour avoir un maximum de précision nous avons utilisé la double précision de l'ordinateur en rajoutant -r8 dans le makefile.

3.1 Saisie des matrices

Cette partie est caractéristique du module 'saisie mat' qui se trouve en annexe.

Nous avons à stocker trois matrices différentes: la matrice $(I + \theta * \frac{\tau}{h^2} M)$, la matrice $(I - (1 - \theta) * \frac{\tau}{h^2} M)$ et la matrice M .

Comme nous avons vu que ces matrices sont tridiagonales, nous ne stockerons que les trois diagonales afin de limiter l'espace mémoire occupé par la matrice et de gagner du temps de calcul.

- La matrice M est stockée dans la subroutine 'matrice A3'
- Les matrices $(I + \theta \frac{\tau}{h^2} M)$ et $(I - (1 - \theta) \frac{\tau}{h^2} M)$ sont calculées dans la subroutine 'Discrétisation' et stockées respectivement dans K2 et K1

3.2 Résolution

Après avoir stocké les matrices de discrétisation $K_1 = I - (1 - \theta) \frac{\tau}{h^2} M$ et $K_2 = I + \theta \frac{\tau}{h^2} M$, il est nécessaire de résoudre le système suivant:

$$(I + \theta \frac{\tau}{h^2} M)C^{(k+1)} = (I - (1 - \theta) \frac{\tau}{h^2} M)C^{(k)}$$

3.2.1 Cas général, θ est quelconque

- Factorisation LU de la matrice K_2 :

Notre matrice K_2 étant une matrice tridiagonale réelle, nous avons utilisé une fonction de Lapack s'adaptant à notre problème. Nous avons ainsi obtenu les matrices L et U qui ne changeront plus. C'est à dire que

$$K_2 = L * U$$

- Résolution du système linéaire du type $AX = B$:

Le principe de cette résolution est de nouveau fourni par Lapack. Nous n'avons eu qu'à l'adapter à notre problème.

Pour cela, nous avons effectué un calcul de proche en proche en utilisant une sorte de relation de récurrence:

- $L * U * C^{(1)} = K_1 * C^{(0)}$ on calcule $K_1 * C^{(0)}$ puis on résoud en utilisant une fonction de la bibliothèque Lapack.
- $L * U * C^{(2)} = K_1 * C^{(1)}$ on calcule $K_1 * C^{(1)}$ puis on résoud en utilisant une fonction de la bibliothèque Lapack.
- Si on connaît $C^{(k)}$ on peut calculer de la même manière $C^{(k+1)}$

Le calcul se termine pour $t_k = T_{fin}$.

3.2.2 Cas explicite $\theta = 0$

Le système à résoudre devient pour $\theta = 0$ $C^{(k+1)} = K_1 C^{(k)}$.

Pour cela nous avons effectué un calcul de proche en proche en utilisant la même relation de récurrence que dans le cas général:

Connaissant $C^{(k)}$ on peut calculer $C^{(k+1)}$, il suffit d'utiliser une fonction de la bibliothèque Lapack pour effectuer le produit $K_1 * C^{(k)}$.

3.2.3 Cas implicite $\theta = 1$

Le système à résoudre pour $\theta = 1$ équivaut à $K_2 C^{(k+1)} = C^{(k)}$.

Pour cela nous avons effectué un calcul de proche en proche en utilisant la même relation de récurrence que dans le cas général:

Connaissant $C^{(k)}$ on peut calculer $C^{(k+1)}$, mais il faut utiliser dans ce cas une fonction qui factorise la matrice K_2 en matrice LU puis une fonction qui résoud le système linéaire $L * U * C^{(k+1)} = C^{(k)}$ (du type $AX = B$).

3.3 Tracés de la solution obtenue

Pour observer la solution obtenue, nous avons décidé d'utiliser les tracés de Matlab. Nous avons trois types de graphique pour observer la diffusion de la concentration sur une plaque de largeur $lg = 0, 1$:

- Un tracé en 2 dimensions qui représente la concentration C en fonction de la position à différents instants sur un même graphique.
- Un tracé qui visualise la diffusion de la concentration en fonction du temps à différentes positions.
- Un graphique qui représente en 3 dimensions la diffusion de la concentration en fonction de la position et du temps.

Diverses représentations seront présentées par la suite.

Pour obtenir 20 instants de visualisation, on stocke 20 vecteurs $C^{(k)}$ au cours du calcul dans une matrice A dans un fichier matlab. Les différents tracés sont effectués à l'aide de cette matrice dans un seul fichier traces.m.

Chapitre 4

Etude des conditions de stabilité

Le schéma principal s'écrit de la manière suivante :

$$[I + \theta \frac{\tau}{h^2} M] C^{k+1} = [I - (1 - \theta) \frac{\tau}{h^2} M] C^k$$

4.1 Etude du cas général : $0 \leq \theta \leq 1$

Caractéristiques de la matrice M :

Nous avons vérifié que la matrice M est définie positive sur un exemple grâce au système Matlab. En effet, la recherche des valeurs propres de M pour une valeur de $N = 8$ nous indique que toutes les valeurs propres de M sont strictement positives, et inférieures à 2.2627.

$$M' = \begin{pmatrix} 0.0094 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0.0285 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0.0398 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0.3046 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0.7766 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1.3460 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1.8824 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2.2627 \end{pmatrix}$$

Par conséquent, la matrice M et la matrice $[I + \theta \frac{\tau}{h^2} M]$ sont inversibles (toutes les valeurs propres sont positives).

Pour trouver les conditions de stabilité, il faut exprimer C^{k+1} en fonction de C^k , à partir du schéma principal.

On obtient alors :

$$[I + \theta \frac{\tau}{h^2} M] C^{k+1} = [I - (1 - \theta) \frac{\tau}{h^2} M] C^k$$

Sachant que $[I + \theta \frac{\tau}{h^2} M]$ est inversible on a,

$$\iff C^{k+1} = [I + \theta \frac{\tau}{h^2} M]^{-1} [I - (1 - \theta) \frac{\tau}{h^2} M] C^k$$

$$\iff C^k = \left[[I + \theta \frac{\tau}{h^2} M]^{-1} [I - (1 - \theta) \frac{\tau}{h^2} M] \right]^k C^0$$

Pour que la solution de ce système ne diverge pas il faut que :

$$\lim_{k \rightarrow +\infty} \left[[I + \theta \frac{\tau}{h^2} M]^{-1} [I - (1 - \theta) \frac{\tau}{h^2} M] \right]^k = 0$$

Cette condition se traduit par le fait que le spectre de $\left[[I + \theta \frac{\tau}{h^2} M]^{-1} [I - (1 - \theta) \frac{\tau}{h^2} M] \right]$ soit plus petit que 1. C'est à dire que toutes les valeurs propres doivent être plus petites que 1 en valeur absolue.

Si λ est valeur propre de M alors :

$$\left[[1 + \theta \frac{\tau}{h^2} \lambda]^{-1} [1 - (1 - \theta) \frac{\tau}{h^2} \lambda] \right] \text{ est valeur propre de } \left[[I + \theta \frac{\tau}{h^2} M]^{-1} [I - (1 - \theta) \frac{\tau}{h^2} M] \right] \text{ et donc il faut que :}$$

$$\forall \lambda \quad \left| [1 + \theta \frac{\tau}{h^2} \lambda]^{-1} [1 - (1 - \theta) \frac{\tau}{h^2} \lambda] \right| < 1 \text{ pour avoir une méthode convergente.}$$

$$\iff -1 < \frac{1 - (1 - \theta) \frac{\tau}{h^2} \lambda}{1 + \theta \frac{\tau}{h^2} \lambda} < 1$$

Or $\tau = \frac{Tfin}{K} \geq 0$ où K est le nombre de visualisations dans le temps de la concentration, et $\lambda > 0$. On a donc

$$\iff -[1 + \theta \frac{\tau}{h^2} \lambda] < [1 - (1 - \theta) \frac{\tau}{h^2} \lambda] < [1 + \theta \frac{\tau}{h^2} \lambda]$$

Et comme $[1 - (1 - \theta) \frac{\tau}{h^2} \lambda] < [1 + \theta \frac{\tau}{h^2} \lambda]$ est toujours vrai, il reste à étudier la condition suivante :

$$-[1 + \theta \frac{\tau}{h^2} \lambda] < [1 - (1 - \theta) \frac{\tau}{h^2} \lambda]$$

$$\iff (1 - \theta) \frac{\tau}{h^2} \lambda - \theta \frac{\tau}{h^2} \lambda < 2$$

$$\iff (1 - 2\theta) \frac{\tau}{h^2} \lambda < 2$$

Sachant que $\frac{\tau}{h^2} \lambda > 0$, il faut distinguer 3 cas :

$$- \text{1er cas: } (1 - 2\theta) > 0 \iff \theta < \frac{1}{2}$$

Dans ces conditions là,

$$\frac{\tau}{h^2} < \frac{2}{\lambda(1 - 2\theta)}$$

$$\iff \tau > \frac{2h^2}{\lambda(1-2\theta)}$$

Sachant que $h = \frac{L}{N+1}$ et $\tau = \frac{Tfin}{K}$ on a

$$\iff K > \frac{\lambda(1-2\theta)Tfin(N+1)^2}{2L^2}$$

Le système sera convergent si $K > \frac{\lambda(1-2\theta)Tfin(N+1)^2}{2L^2} \forall \lambda$

$$\iff K > \frac{\max(\lambda)(1-2\theta)Tfin(N+1)^2}{2L^2}$$

qui est atteint pour $\lambda = \max(\lambda)$ λ , valeur propre de M. Par conséquent, la condition de stabilité du système s'écrit:

$$K > \frac{\lambda_{max}(1-2\theta)Tfin(N+1)^2}{2L^2}$$

Calcul de λ_{max} :

On admettra que pour la matrice M:

$$\lambda_{max} \leq 4 \max(D_I, D_S)$$

En prenant $D_I = 0.01$ et $D_S = 0.6$, on obtient une approximation de λ_{max} :

$$\lambda_{max} \leq 2.4$$

La condition de stabilité du problème pour $\theta < 0.5$ est donc :

$$K > \frac{1.2(1-2\theta)Tfin(N+1)^2}{L^2}$$

- 2^{eme} cas: $(1-2\theta) < 0 \iff \theta > \frac{1}{2}$

Dans ces conditions là,

$$\frac{\tau}{h^2} > \frac{2}{\lambda(1-2\theta)} \quad (1)$$

avec $\frac{\tau}{h^2} > 0$ et $(1-2\theta) < 0 \implies \frac{2}{\lambda(1-2\theta)} < 0$,

et alors la condition (1) est toujours respectée, et le système sera convergent $\forall \theta > \frac{1}{2}$.

- 3^{eme} cas: $(1 - 2\theta) = 0 \iff \theta = \frac{1}{2}$

Pour ce cas là, la condition de stabilité s'écrit :

$$\left| \frac{1 - \frac{1}{2} \frac{\tau}{h^2} \lambda}{1 + \frac{1}{2} \frac{\tau}{h^2} \lambda} \right| < 1, \text{ pour avoir une méthode convergente.}$$

De plus, on a toujours $1 + \frac{1}{2} \frac{\tau}{h^2} \lambda > 0$, et donc

$$\begin{aligned} & \left| \frac{1 - \frac{1}{2} \frac{\tau}{h^2} \lambda}{1 + \frac{1}{2} \frac{\tau}{h^2} \lambda} \right| < 1 \\ \iff & -1 - \frac{1}{2} \frac{\tau}{h^2} \lambda < 1 - \frac{1}{2} \frac{\tau}{h^2} \lambda < 1 + \frac{1}{2} \frac{\tau}{h^2} \lambda \end{aligned}$$

Or, ces deux inégalités sont toujours respectées.

Par conséquent, le système sera toujours convergent pour $\theta = \frac{1}{2}$

4.2 Etude du cas explicite : $\theta = 0$

4.2.1 Etude théorique:

Le schéma explicite correspond à $\theta = 0$. On obtient alors comme schéma à résoudre, le schéma suivant :

$$C^{k+1} = \left[I - \frac{\tau}{h^2} M \right] C^k$$

Comme on l'a vu précédemment la condition de stabilité pour $\theta < \frac{1}{2}$ est :

$$K > \frac{1.2(1 - 2\theta)Tfin(N + 1)^2}{L^2}$$

ce qui est équivalent pour le cas explicite à :

$$K > \frac{1.2 * Tfin(N + 1)^2}{L^2}$$

Vérification expérimentale de la condition de stabilité:

On prend :

- un pas d'espace $h = \frac{0.1}{29+1} = 3.33E^{-4}$
- un temps final $Tfin = 0.05$
- et $\theta = 0.0$

On trouve ainsi pour ces valeurs que le schéma explicite est stable si $K > 5400$.

4.2.2 Résultats obtenus:

Courbes en annexe 1, schéma explicite stable

Pour une valeur de $K = 6000$, nous nous trouvons dans les conditions de stabilité théorique. Le graphique en 3 dimensions représenté ci-dessous, montre les résultats obtenus de la résolution numérique du problème pour un schéma explicite stable. (Courbes annexe 1)

On distingue nettement la zone de raccordement des 2 diffusivités au point d'espace $\frac{lg}{3}$, c'est-à-dire au point $x = 0.0333$. Plus la diffusivité est grande et plus la concentration se diffuse rapidement, ce qui explique que pour une valeur de $D_S = 0.6$ (supérieure à $D_I = 0.01$), on atteint une concentration nulle rapidement dans le temps.

La courbe qui représente la diffusion de la concentration en fonction de l'espace montre aussi de manière claire le point de raccordement des 2 milieux de diffusivités différentes en $x = \frac{lg}{3}$.

La courbe, représentant la diffusion de la concentration en fonction du temps à différents points d'espace, montre la rapidité avec laquelle la concentration se diffuse dans le temps à partir d'un certain point d'espace (point de raccordement).

Ces 3 courbes, cohérentes et complémentaires, permettent différents angles de vue de la même observation expérimentale.

Courbes en annexe 2, schéma explicite instable

Pour une valeur de $K = 5000$, nous nous trouvons dans les conditions d'instabilité.

Les 3 graphiques présentent en effet des résultats très aberrants (concentration de l'ordre de 10^{296} , tantôt positive, tantôt négative). Les oscillations des courbes montrent de manière expérimentale que l'on a bien un schéma explicite instable pour des valeurs de $K < 5400$ dans les conditions initiales standard.

Si la condition de stabilité n'est pas respectée, on obtient donc des résultats complètement aberrants même avec une valeur de K proche de la valeur de K limite.

4.3 Etude du cas implicite : $\theta = 1.0$

4.3.1 Etude théorique:

Le schéma implicite correspond à $\theta = 1$. On obtient alors comme schéma à résoudre, le schéma suivant :

$$\left[I + \frac{\tau}{h^2} M \right] C^{k+1} = C^k$$

Comme on l'a vu précédemment la stabilité pour $\theta > \frac{1}{2}$ est valable pour n'importe quelle valeur de K .

4.3.2 Résultats obtenus:

Courbes en annexe 3, schéma implicite

La stabilité numérique du schéma implicite est valable pour n'importe quelle valeur de K .

Le graphique en 3 dimensions représenté ci-dessous, montre les résultats obtenus de la résolution numérique du problème pour un schéma implicite.

On obtient les mêmes résultats qu'avec la résolution numérique utilisant un schéma explicite stable.

4.4 Etude du cas intermédiaire : $\theta = 0.5$

4.4.1 Etude théorique:

Le schéma de résolution pour $\theta = 0.5$ est le suivant :

$$[I + 0.5 \frac{\tau}{h^2} M] C^{k+1} = [I - 0.5 \frac{\tau}{h^2} M] C^k$$

Comme on l'a vu précédemment il n'y a pas de condition de stabilité pour $\theta = \frac{1}{2}$. Par conséquent, la méthode de résolution est toujours convergente dans le cas ou $\theta = 0.5$.

Le principal intérêt de l'étude de ce cas là provient du fait que la discrétisation est toujours d'ordre 2 par rapport à l'espace, mais de plus, on a aussi une discrétisation d'ordre 2 dans le temps.

En effet le schéma de discrétisation est le suivant

$$(4) \quad \frac{C_{k+1} - C_k}{\tau} = -(1 - \theta) \frac{M}{h^2} C_k - \theta \frac{M}{h^2} C_{k+1} + o(h^2) + (1 - 2\theta) \frac{\tau}{2} C_k'' + o(\tau^2)$$

et si $\theta = \frac{1}{2}$ alors on a :

$$\frac{C_{k+1} - C_k}{\tau} = -\frac{1}{2} \frac{M}{h^2} C_k - \frac{1}{2} \frac{M}{h^2} C_{k+1} + o(h^2) + o(\tau^2)$$

On obtient donc pour le cas $\theta = \frac{1}{2}$ un schéma de discrétisation d'ordre 2 pour l'espace : $o(h^2)$, mais aussi un schéma d'ordre 2 pour le temps : $o(\tau^2)$.

4.4.2 Résultats obtenus:

Courbes en annexe 4 et 5, schémas intermédiaire

La stabilité numérique du schéma intermédiaire est valable pour n'importe quelle valeur de K .

Le graphique en 3 dimensions représenté ci-dessous, montre les résultats obtenus de la résolution numérique du problème pour un schéma intermédiaire avec des valeurs différentes des données initiales (diffusivités plus grandes, plus extrêmes, temps final plus ou moins grand selon la vitesse de diffusion, nombres de points d'espaces plus élevés...).

Ces courbes confirment la cohérence des résultats et montrent l'influence des valeurs des diffusivités sur la diffusion de la concentration au point de raccordement. En effet, pour $D_I = 0.01$ et $D_S = 9$, la diffusion de la concentration dans le milieu de diffusivité D_S est instantanée comparativement au milieu de diffusivité D_I . Pour une valeur de la longueur des plaques plus élevée $lg = 5$ on peut aussi visualiser le raccordement en $x = \frac{L}{3}$.

On peut remarquer que le schéma qui assure un ordre 2 à la fois en espace et en temps est le schéma intermédiaire avec $\theta = 0.5$, ce qui procure une précision plus fine.

Conclusion

Ce projet consistait en une mise en œuvre informatique de nos connaissances d'analyse numérique matricielle sur le problème particulier d'approximation des problèmes aux limites.

Nous avons en effet résolu un problème de diffusion de concentration dans un milieu hétérogène en discrétisant le problème à l'aide de la méthode des différences finies.

L'utilisation de la bibliothèque Lapack pour la résolution de systèmes linéaires était un point essentiel de notre projet puisqu'il fallait judicieusement choisir des fonctions s'adaptant à notre problème informatique particulier.

De plus, nous avons pu étudier le comportement de différents schémas de discrétisation, notamment d'un schéma explicite et d'un schéma implicite. Nous avons mis en évidence l'intérêt de l'étude des conditions de stabilité des schémas pour obtenir des résultats corrects et non aberrants.

On aurait pu avec un peu plus de temps comparer les solutions données par les divers schémas, afin de mieux apprécier la robustesse et la précision de chacun.

Chapitre 5

Annexes

Sont répertoriés dans les annexes les graphes et le programme. Nous vous conseillons toutefois de visualiser les courbes en exécutant le programme, les couleurs permettent en effet de mieux apprécier les résultats obtenus.

Voici la liste des différentes annexes :

- 1 Diverses courbes obtenues

- 2 Programme

Données initiales:

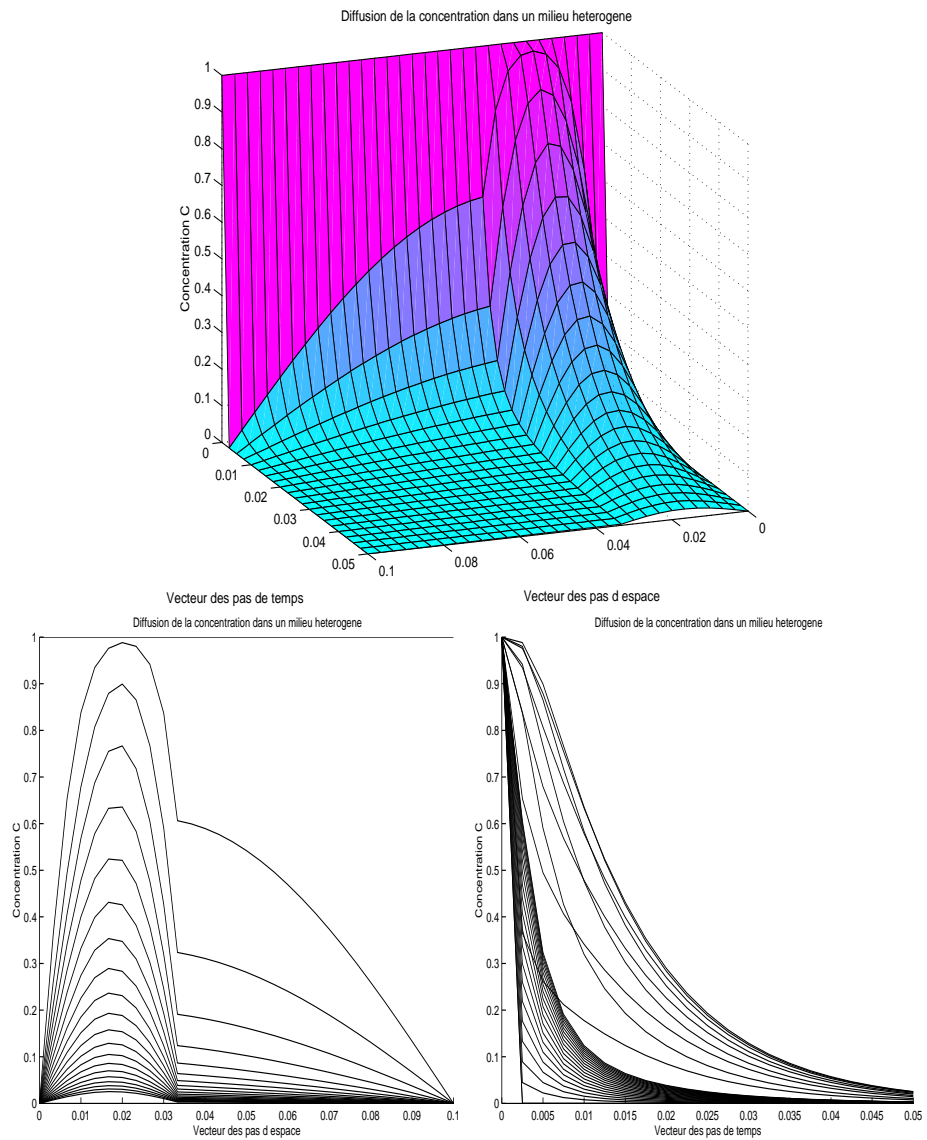
$$DI = 0.01 \quad N = 29$$

$$DS = 0.6 \quad K = 6000$$

$$lg = 0.1 \quad t_F = 0.05$$

$$visua = 20 \quad \theta = 0$$

Diffusion de la concentration dans un milieu hétérogène, schéma explicite stable



Données initiales:

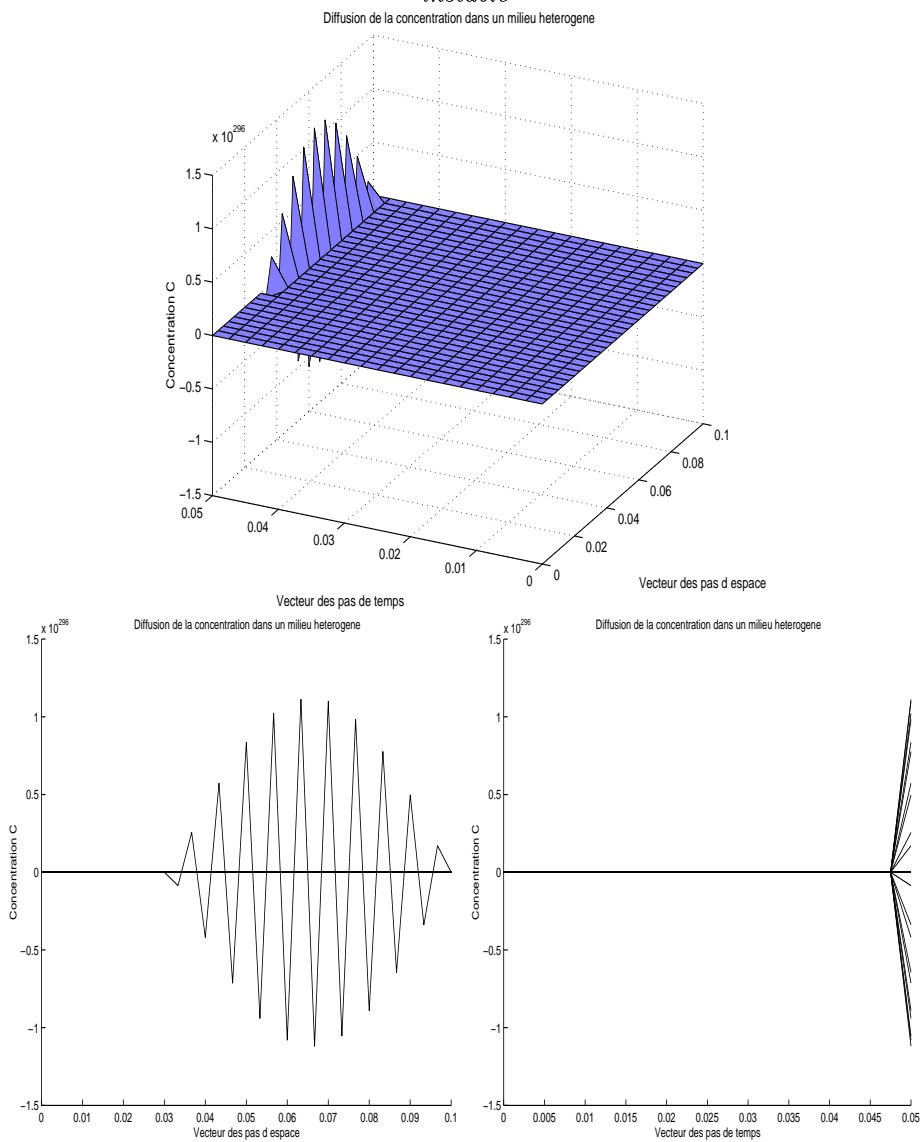
$$DI = 0.01 \quad N = 29$$

$$DS = 0.6 \quad K = 5000$$

$$lg = 0.1 \quad t_F = 0.05$$

$$visua = 20 \quad \theta = 0$$

Diffusion de la concentration dans un milieu hétérogène, schéma explicite instable



Données initiales:

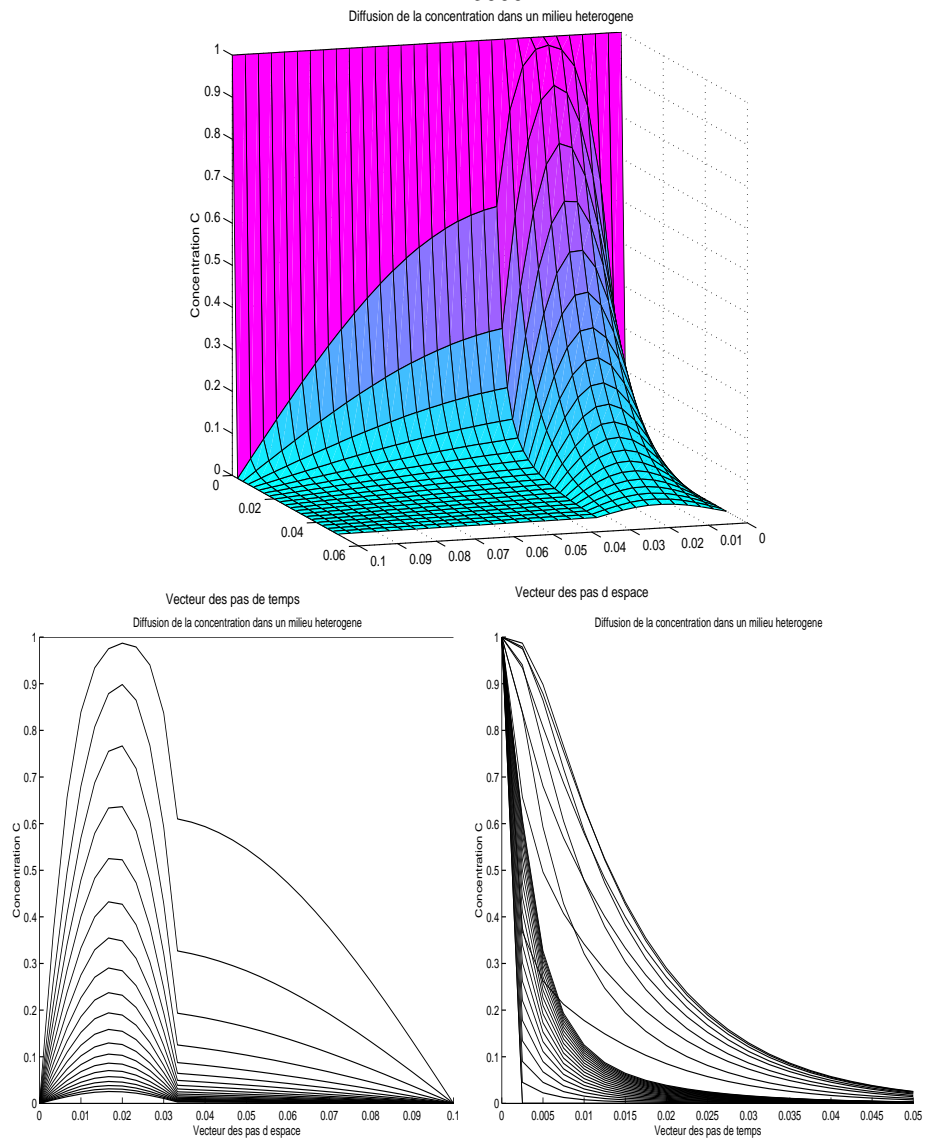
$$DI = 0.01 \quad N = 29$$

$$DS = 0.6 \quad K = 5000$$

$$lg = 0.1 \quad t_F = 0.05$$

$$visua = 20 \quad \theta = 1$$

Diffusion de la concentration dans un milieu hétérogène, schéma implicite
 $K = 5000$



Données initiales:

$$DI = 0.01 \quad N = 59$$

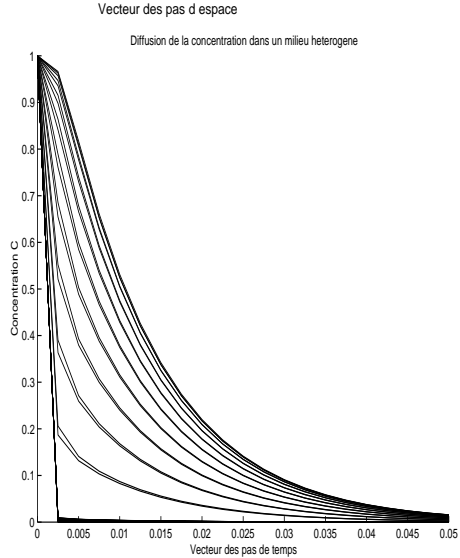
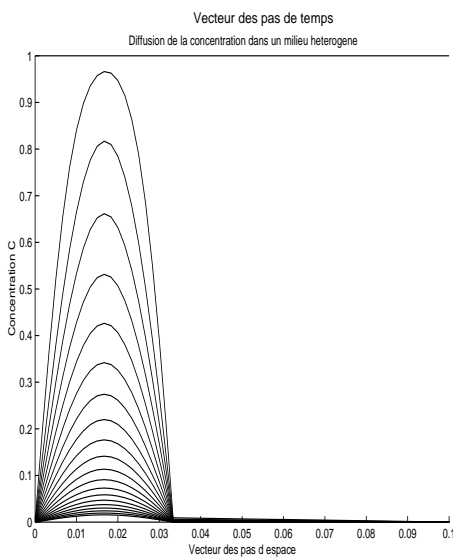
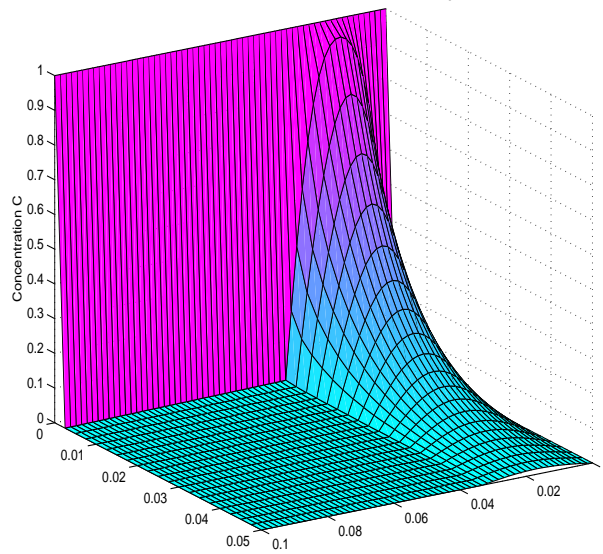
$$DS = 9 \quad K = 5000$$

$$lg = 0.1 \quad t_F = 0.05$$

$$visua = 20 \quad \theta = 0.5$$

Diffusion de la concentration dans un milieu hétérogène, schéma intermédiaire

Diffusion de la concentration dans un milieu heterogene

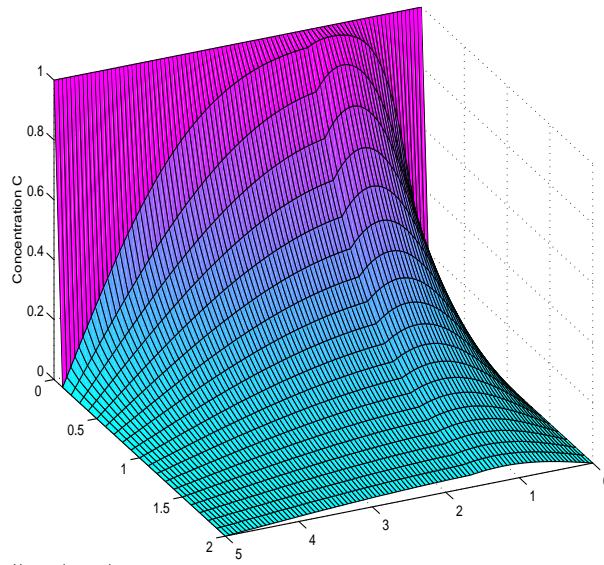


Données initiales:

$$\begin{aligned} DI &= 1 & N &= 89 \\ DS &= 10 & K &= 4500 \\ lg &= 5 & t_F &= 2 \\ visua &= 20 & \theta &= 0.5 \end{aligned}$$

Diffusion de la concentration dans un milieu hétérogène, schéma intermédiaire

Diffusion de la concentration dans un milieu heterogene



Vecteur des pas de temps

Vecteur des pas d'espace

