HAL
open science

Contribution au développement de méthodes numériques destinées à résoudre des problèmes couplés raides rencontrés en mécanique des matériaux

Andrea Ramazzotti

To cite this version:

Andrea Ramazzotti. Contribution au développement de méthodes numériques destinées à résoudre des problèmes couplés raides rencontrés en mécanique des matériaux. Autre. ISAE-ENSMA Ecole Nationale Supérieure de Mécanique et d'Aérotechique - Poitiers, 2016. Français. NNT : 2016ESMA0007 . tel-01371753

HAL Id: tel-01371753

https://theses.hal.science/tel-01371753v1

Submitted on 26 Sep 2016

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

THESE

Pour l'obtention du Grade de
DOCTEUR DE L'ECOLE NATIONALE SUPERIEURE DE MECANIQUE ET D'AEROTECHNIQUE
(Diplôme National – Arrêté du 7 août 2006)

Ecole Doctorale :
Sciences et Ingénierie en Matériaux, Mécanique, Energétique et Aéronautique

Secteur de Recherche : Mécanique des Solides, des Matériaux, des Structures et des Surfaces

Présentée par :

Andrea RAMAZZOTTI

****

Contribution au développement de méthodes numériques destinées à résoudre des problèmes couplés raides rencontrés en mécanique des matériaux

****

Directeur de thèse : Jean-Claude GRANDIDIER
Co-encadrant : Marianne BERINGHIER

****

Soutenue le 11 Juillet 2016

****

JURY

X. COLIN	Professeur, ENSAM Paris
P. JOYOT	Maître de Conférences HDR, ESTIA-Recherche, Bidart
D. NERON	Professeur, ENS Cachan
J.C. GRANDIDIER	Professeur, ENSMA Poitiers
M. BERINGHIER	Maître de Conférences, ENSMA Poitiers

Résumé

Titre : Contribution au développement de méthodes numériques destinées à résoudre des problèmes couplés raides rencontrés en mécanique des matériaux

Résumé

Ce travail de recherche est une contribution au développement de la méthode Décomposition Propre Généralisée (PGD) à la résolution de problèmes de diffusion-réaction raides dédiés à la mécanique des matériaux. Ce type d'équations est notamment rencontré lors de l'oxydation des matériaux polymères et il est donc nécessaire de mettre en place un outil pour simuler ce phénomène afin de prédire numériquement le vieillissement de certains matériaux composites à matrice organique utilisés dans l'aéronautique. La méthode PGD a été choisie dans cette thèse car elle permet un gain en temps de calcul notable par rapport à la méthode des éléments finis. Néanmoins cette famille d'équations n'a jamais été traitée avec cette méthode. Cette dernière se résume à la recherche de solutions d'Equations aux Dérivées Partielles sous forme séparée. Dans le cas d'un problème 1D transitoire, cela revient à chercher la solution sous la forme d'une représentation séparée espace-temps. Dans le cadre de cette thèse, un outil numérique a été mis en place permettant une flexibilité telle que différents algorithmes peuvent être testés. La diffusion Fickienne 1D est tout d'abord évaluée avec en particulier une discussion sur l'utilisation d'un schéma de type Euler ou Runge-Kutta à pas adaptatif pour la détermination des fonctions temporelles. Le schéma de Runge-Kutta permet de réduire notablement le temps de calcul des simulations. Ensuite, la mise en place de l'outil pour les systèmes d'équation de type diffusion-réaction nécessite des algorithmes de résolution de systèmes non linéaires, couplés et raides. Pour cela, différents algorithmes ont été implémentés et discutés. Dans le cas d'un système non linéaire, l'utilisation de la méthode de Newton-Raphson dans les itérations pour la recherche du nouveau mode permet de réduire le temps de calcul en limitant le nombre de modes à considérer pour une erreur donnée. En ce qui concerne les couplages, deux stratégies de résolution ont été évaluées. Le couplage fort mène aux mêmes conclusions que dans le cas non linéaire. Les systèmes raides mais linéaires ont ensuite été traités en implémentant l'algorithme de Rosenbrock pour la détermination des fonctions temporelles. Cet algorithme permet contrairement à Euler et à Runge-Kutta de construire une solution avec un temps de calcul raisonnable liée à l'adaptation du maillage temporel sous-jacent à l'utilisation de cette méthode. La résolution d'un système d'équations de diffusion-réaction raides non linéaires utilisée pour la prédiction de l'oxydation d'un composite issu de la littérature a été testée en utilisant les différents algorithmes mis en place. Néanmoins, les non linéarités et la raideur du système génèrent des équations différentielles intermédiaires à coefficients variables pour lesquelles la méthode de Rosenbrock montre ses limites. Il sera donc nécessaire de tester ou développer d'autres algorithmes pour lever ce verrou.

Mots clés : Proper Generalized Decomposition (PGD), réduction de modèles, séparation de variables, mécanique des matériaux, Diffusion-réaction, systèmes raides, Nonlinéarité, Problèmes couplés.

Abstract

Title: Contribution to the development of numerical methods for solving stiff coupled problems in the framework of mechanics of materials

Abstract:
This work presents the development of the Proper Generalized Decomposition (PGD) method for solving stiff reaction-diffusion equations in the framework of mechanics of materials. These equations are particularly encountered in the oxidation of polymers and it is therefore necessary to develop a tool to simulate this phenomenon for example for the ageing of organic matrix composites in aircraft application. The PGD method has been chosen in this work since it allows a large time saving compared to the finite element method. However this family of equations has never been dealt with this method. The PGD method consists in approximating a solution of a Partial Differential Equation with a separated representation. The solution is sought under a space-time separated representation for a 1D transient equation. In this work, a numerical tool has been developed allowing a flexibility to test different algorithms. The 1D Fickian diffusion is first evaluated and two numerical schemes, Euler and Runge-Kutta adaptive methods, are discussed for the determination of the time modes. The Runge-Kutta method allows a large time saving. The implementation of the numerical tool for reaction-diffusion equations requires the use of specific algorithms dedicated to nonlinearity, coupling and stiffness. For this reason, different algorithms have been implemented and discussed. For nonlinear systems, the use of the Newton-Raphson algorithm at the level of the iterations to compute the new mode allows time saving by decreasing the number of modes required for a given precision. Concerning the couplings, two strategies have been evaluated. The strong coupling leads to the same conclusions as the nonlinear case. The linear stiff systems are then studied by considering a dedicated method, the Rosenbrock method, for the determination of the time modes. This algorithm allows time saving compared to the Runge-Kutta method. The solution of a realistic nonlinear stiff reaction-diffusion system used for the prediction of the oxidation of a composite obtained from the literature has been tested by using the various implemented algorithms. However, the nonlinearities and the stiffness of the system generate differential equations with variable coefficients for which the Rosenbrock method is limited. It will be necessary to test or develop other algorithms to overcome this barrier.

Keywords: Proper Generalized Decomposition (PGD), Model reduction, Separation of variables, Mechanics of materials, Reaction-diffusion equations, Stiff system, Nonlinearity, Coupled problems.

Table des matières

- **Contexte** ... 2

0.1. Présentation de la famille des problèmes multiphysiques traités dans le contexte de la mécanique des matériaux ... 5

0.1.1. Diffusion d'espèces chimiques ... 6

0.1.2. Phénomène d'oxydation ... 7

0.2. Problématiques numériques et objectifs ... 10

0.2.1. Couplage de plusieurs inconnues ... 10

0.2.2. Présence de non-linéarités dans le modèle ... 10

0.2.3. Raideur du système ... 11

0.3. La méthode PGD ... 12

0.3.1. Application des conditions aux bords et initiales ... 15

0.3.2. Illustration de l'algorithme PGD dans le cas de la diffusion Fickienne 1D ... 15

0.4. Méthodes à un pas ... 18

0.4.1. La méthode d'Euler explicite ... 19

0.4.2. Les méthodes de Runge-Kutta ... 21

0.4.3. Les méthodes de Rosenbrock ... 24

0.5. Méthodes de résolution non-linéaires ... 25

0.6. Structure et implémentation du code ... 26

0.6.1. Les objets de support ... 29

0.6.2. Les objets de calcul ... 30

0.6.3. Implémentations des méthodes d'intégration ... 33

0.7. Conclusion ... 34

Partie A. Problèmes de diffusion, loi de Fick ... 38

A.1. Présentation du problème 1D ... 39

A.1.1. Solutions de référence ... 40

A.1.2. Résolution PGD du problème diffusion 1D ... 45

A.2. Application des conditions aux bords et initiales ... 48

A.3. Stabilité et convergence ... 54

A.3.1. Recherche des fonctions en temps ... 54

A.3.2. Recherche des fonctions en espace ... 59

A.4. Propagation de l'erreur ... 60

A.5. Résolution des modes temporels avec la méthode de Runge-Kutta ... 64

A.6. Conclusions de la partie A ... 71

Partie B. Problèmes de diffusion non-linéaire 74
B.1. Diffusion non-linéaire 75
B.2. Solutions de référence 76
B.3. Résolution PGD du problème de diffusion 1D non-linéaire 76
B.3.1. La méthode Newton 1 79
B.3.2. La méthode Newton 2 79
B.4. Comparaison des deux méthodes 80
B.5. Influence du maillage sur la solution PGD 83
B.6. Utilisation de la méthode de Runge-Kutta pour le calcul des fonctions temporelles 83
B.7. Conclusions Partie B 87
Partie C. Problèmes de diffusion-réaction : couplage et raideur 90
C.1. Résolution PGD des problèmes couplés 91
C.2. Modèle de diffusion-réaction 1D 94
C.2.1. Solution de référence 94
C.2.2. Résolution PGD 95
C.3. Systèmes couplés non-linéaires 97
C.3.1. Solution de référence 98
C.3.2. Résolution PGD 98
C.4. Systèmes raides 100
C.4.1. Solution de référence 102
C.4.2. Résolution PGD 103
C.5. Systèmes raides non-linéaires 113
C.5.1. Solution de Référence 116
C.5.2. Résolution PGD 117
C.5.3. Premier mode PGD 119
C.5.4. Deuxième mode PGD 126
C.6. Conclusions Partie C 128
- **Conclusion** 130
- **Perspectives** 132
Bibliographie 133

• Contexte

Contexte 2.

0.1. Présentation de la famille des problèmes multiphysiques traités dans le contexte de la mécanique des matériaux 5.

0.1.1. Diffusion d'espèces chimiques 6.

0.1.2. Phénomène d'oxydation 7.

0.2. Problématiques numériques et objectifs 10.

0.2.1. Couplage de plusieurs inconnues 10.

0.2.2. Présence de non-linéarités dans le modèle 10.

0.2.3. Raideur du système 11.

0.3. La méthode PGD 12.

0.3.1. Application des conditions aux bords et initiales 15.

0.3.2. Illustration de l'algorithme PGD dans le cas de la diffusion Fickienne 1D 15.

0.4. Méthodes à un pas 18.

0.4.1. La méthode d'Euler explicite 19.

0.4.2. Les méthodes de Runge-Kutta 21.

0.4.3. Les méthodes de Rosenbrock 24.

0.5. Méthodes de résolution non-linéaires 25.

0.6. Structure et implémentation du code 26.

0.6.1. Les objets de support 29.

0.6.2. Les objets de calcul 30.

0.6.3. Implémentations des méthodes d'intégration 33.

0.7. Conclusion 34.

Aujourd'hui les contraintes en termes de performance qui doivent être respectées par les produits industriels sont de plus en plus sévères. Ces contraintes peuvent apparaître pour différentes raisons, comme par exemple des raisons écologiques, de sécurité ou des raisons économiques.

Par exemple, l'utilisation des matériaux composites dans l'industrie aéronautique a permis, dans les dernières années, d'atteindre une série d'objectifs en termes d'allégement des aéronefs. Ces objectifs se traduisent par une augmentation des performances générales des avions et une diminution de la consommation de carburant. Dans une optique de réduction de gaz à effet de serre, l'utilisation de composites joue donc un rôle important. En 2011, le Government Accountability Office (GAO) des Etats-Unis a publié un rapport (1) montrant que le pourcentage de matériaux composites dans l'aviation civile est de plus en plus élevé. Même si certains composites peuvent être plus légers et plus résistants que beaucoup de matériaux métalliques, des problèmes de sécurité peuvent néanmoins apparaître et doivent être étudiés. Ce rapport se focalise d'ailleurs sur la maitrise de défauts qui peuvent être générés pendant la durée de vie de l'avion.

Plus précisément, lors de la conception des avions, pour prévoir le comportement à long terme d'un composite, il est impératif de suivre une démarche de certification de pièces (2). Cette démarche permet d'obtenir un modèle empirique ou mathématique qui rend compte des phénomènes qui peuvent altérer une ou plusieurs propriétés de la pièce en composite. Ces phénomènes sont connus sous le nom de phénomènes de vieillissement du matériau.

Les matériaux composites sont constitués par deux ou plusieurs matériaux différents assemblés entre eux. Le résultat de cet assemblage est un nouveau matériau qui possède des caractéristiques physiques et chimiques qui sont un mélange des caractéristiques des matériaux de départ. On peut identifier deux parties principales dans un matériau composite : le renfort, qui sert à assurer la résistance mécanique de la pièce et la matrice qui sert à transmettre les efforts mécaniques au renfort, afin d'assurer la forme finale de la pièce et de protéger le renfort des conditions environnementales. Différents types de composites sont aujourd'hui utilisés dans le secteur aéronautique. Ils diffèrent selon l'application visée. Par exemple, pour des températures inférieures à 300°C, les Composites à Matrice Organique (CMO) sont très répandus. Les matrices principalement utilisées pour les CMO sont les résines époxydes, vinylesters, phénoliques et polyamides. Toutes ces résines font partie de la catégorie des matériaux plastiques. Les matériaux plastiques sont des substances polymères formées pour la plupart de grandes chaînes d'atomes de carbone, d'oxygène, d'hydrogène et d'azote.

Les matériaux plastiques subissent plusieurs types de vieillissement, une classification générale des différents processus de vieillissement est présentée dans les « Techniques de l'ingénieur », où on peut trouver plusieurs numéros (3) (4) (5) (6) dédiés à ces problématiques. Les auteurs distinguent deux principaux types de vieillissement : le vieillissement physique, pendant lequel la structure chimique du matériau ne subit pas des changements et le vieillissement chimique, où un changement des structures chimiques a lieu.
Les phénomènes de vieillissement physique englobent les phénomènes de vieillissement sous contraintes mécaniques, les phénomènes de relaxation et les phénomènes de transfert de masse. Les phénomènes de vieillissement chimique englobent eux le vieillissement thermochimique, thermo-oxydatif, photochimique et biochimique. La modélisation des phénomènes de vieillissement des CMO donnent lieu à des modèles mathématiques dont la résolution numérique fait apparaître un certain nombre de difficultés.
L'enjeu de l'industrie est un bon choix des matériaux utilisés pour la réalisation des produits industriels pour rendre plus facile le respect de ces contraintes. La vitesse de développement de nouveaux produits joue un rôle de première importance, il est donc nécessaire d'obtenir des solutions numériques fiables et rapides aux modèles (physiques, chimiques, thermiques, mécaniques, etc.) qui décrivent le comportement des matériaux. À travers ces solutions, des informations importantes peuvent être obtenues pour effectuer les choix les plus appropriés vis-à-vis du matériau utilisé et ou à utiliser. Pour augmenter les performances des bureaux d'étude, le développement de nouvelles méthodes numériques s'avère nécessaire et constitue une étape obligée.

Le travail réalisé dans cette thèse se situe dans ce contexte. Il s'agit d'une étude sur l'application et le développement de la méthode Proper Generalized Decomposition (PGD) pour répondre à des problématiques industrielles concernant la diffusion et l'oxydation de certains matériaux composites.

La méthode PGD (7) est une méthode de réduction de modèles a priori qui vise à réduire la complexité de la résolution numérique des problèmes mathématiques décrits par des équations aux dérivées partielles. Elle est basée sur l'écriture des inconnues du problème sous forme séparée afin d'en réduire la complexité computationnelle. La réduction de complexité rend la recherche de solutions plus rapide par rapport aux méthodes classiques comme par exemple la méthode des éléments finis. Cette diminution de complexité de résolution vient du fait qu'au lieu de chercher une fonction dans un domaine à *n* dimensions, les fonctions cherchées sont de

dimensions plus petites voire en général monodimensionnelles. La méthode PGD a été et peut être appliquée dans un grand nombre de problèmes notamment dans le cadre de la mécanique des matériaux (8). Dans ce manuscrit, on se focalise sur l'étude des problèmes liés à l'utilisation de matériaux composites pour des applications aéronautiques. Néanmoins les problématiques numériques traitées dans ce travail concernent un domaine plus large.

Dans cette thèse, nous souhaitons évaluer la capacité d'utiliser la méthode PGD pour résoudre des problèmes dont les équations ont la structure de celle des problèmes couplant diffusion – réaction. Des modifications aux algorithmes classiquement utilisés seront proposées pour lever les difficultés numériques rencontrées. Nous évaluerons ces algorithmes par rapport à une méthode classique.

Les modèles physiques étudiés dans cette thèse ainsi que les principales difficultés numériques liées à la résolution de ces modèles, quelle que soit la méthode numérique envisagée, sont tout d'abord présentés de manière succincte. La méthode PGD est ensuite exposée afin de mettre en avant ses spécificités. Dans le cas des modèles physiques visés dans cette thèse, il est nécessaire de combiner la méthode PGD à d'autres méthodes classiques, ces dernières seront donc décrites succinctement. Enfin, la description de la structure du code développé dans cette thèse sera présentée. Une évaluation des méthodes numériques est menée pour des problèmes à complexité croissante afin d'évaluer la capacité de tels outils à résoudre des problèmes multiphysiques couplés et raides dans le contexte de la mécanique des matériaux.

0.1. Présentation de la famille des problèmes multiphysiques traités dans le contexte de la mécanique des matériaux

L'application matériau envisagée dans le cadre de cette thèse est le phénomène de thermo-oxydation des matériaux polymères massifs et des matrices des matériaux composites. Ce phénomène est un phénomène de vieillissement qui englobe deux mécanismes différents : la diffusion d'oxygène à l'intérieur du matériau (vieillissement physique) et la dégradation chimique du polymère due à la présence de l'oxygène qui déclenche une série de réactions chimiques (vieillissement chimique). Ce phénomène a été largement étudié au laboratoire tant d'un point de vue expérimentale que numérique (9) (10) (11) (12). Néanmoins, les études numériques réalisées avec la méthode des éléments finis ont mené à des temps de calcul très élevés liés aux différentes échelles de temps et d'espace apparaissant lors de l'étude de ce phénomène. Des impossibilités d'obtenir la solution ont été fréquemment rencontrées (13). Il est donc apparu comme essentiel d'étudier la possibilité d'utiliser de(s) méthode(s)

numérique(s) alternative(s). Nous avons choisi ici la méthode PGD qui est une méthode de réduction de modèles a priori. Cette méthode a été déjà utilisée au laboratoire dans le cadre de modèles multiphysiques couplés (14) (15) et plus récemment dans le cadre de l'identification des paramètres matériaux de composites (16) (17). Lors de la thèse de Nguyen Tuan Linh (14) à laquelle je fais suite, seuls des problèmes thermoélastiques et diffuso-thermiques ont été étudiés restreints au cas 1D et avec des modèles de diffusion simples type Fick. Il a été montré que la méthode PGD était prometteuse dans ce type d'application lorsque cette dernière était couplée à une méthode d'adaptation de maillage temporelle, seule une adaptation a posteriori a été testée.

0.1.1. Diffusion d'espèces chimiques

Dans la littérature, le phénomène de diffusion d'espèces chimiques est souvent modélisé par la loi proposée par Adolph Fick en 1855 (18). La loi de Fick est obtenue à partir des travaux de Jean Baptiste Joseph Fourier qui concernent la diffusion de la chaleur publiés dans son ouvrage « Théorie Analytique de la chaleur » en 1822. L'équation différentielle décrite par Fourier représente le point de départ de nombreux modèles physiques (19).

L'équation de diffusion est obtenue par l'écriture de l'équation d'équilibre entre la masse de matière qui entre et qui sort d'un volume élémentaire de dimensions 2dx, 2dy, 2dz. En supposant que la vitesse de diffusion est proportionnelle au gradient de concentration de l'espèce qui diffuse, l'équation de diffusion ainsi obtenue est la diffusion Fickienne. Selon le phénomène physique étudié, différents cas peuvent être envisagés : la diffusion unidimensionnelle, la diffusion tridimensionnelle. Pour ce dernier cas, on pourra avoir une diffusion isotrope ou encore anisotrope. Les équations pour ces différents cas sont les suivantes :

1D	$\frac{\partial C}{\partial t} = D\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}$	(0.01)
3D isotrope	$\frac{\partial C}{\partial t} = D\left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial z^2}\right)$	(0.02)
3D anisotrope	$\frac{\partial C}{\partial t} = D_{xx} \cdot \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + D_{yy} \cdot \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + D_{zz} \cdot \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} + (D_{xy} + D_{yx}) \cdot \frac{\partial^2 C}{\partial x \partial y} + (D_{xz} + D_{zx}) \cdot \frac{\partial^2 C}{\partial x \partial z} + (D_{yz} + D_{zy}) \cdot \frac{\partial^2 C}{\partial y \partial z}$	(0.03)

où C est la concentration de l'espèce chimique qui diffuse (elle dépend de l'espace et du temps) et les coefficients D sont les coefficients de diffusion qui dépendent du matériau, et de l'espace

dans le cas anisotrope. Les conditions appliquées aux bords sont soit un flux de matière nul soit une concentration à saturation. Pour des conditions particulières de géométrie et de conditions aux limites, des solutions analytiques de ces problèmes peuvent être déterminées (20). Néanmoins, dans la plupart des cas, ces dernières ne sont pas disponibles et des méthodes de résolution numériques de ces équations sont envisagées. Ces méthodes consistent généralement au calcul de l'évolution de la concentration en fonction du temps couplé à une méthode de discrétisation spatiale telle que la méthode des différences finies ou encore la méthode des éléments finis dans le cas de domaines de formes géométriques complexes. Dans le cadre de cette thèse, ces solutions numériques classiques seront utilisées comme des solutions de référence pour valider l'implémentation de la méthode PGD.

0.1.2. Phénomène d'oxydation

Le phénomène d'oxydation, favorisé par une température élevée, consiste en une dégradation du matériau due à des réactions chimiques déclenchées par la présence d'oxygène à l'intérieur du matériau. En effet, le phénomène d'oxydation est naturellement associé au phénomène de diffusion d'oxygène : au fur et à mesure que l'oxygène pénètre dans le matériau à cause de la diffusion, l'oxydation a lieu et une partie de l'oxygène est consommée.

Le phénomène d'oxydation est modélisé par deux types d'approches : des modèles phénoménologiques (21) (22) (23) (24) (25) et un schéma standard en chaîne radicalaire ou schéma mécanistique comme celui proposé notamment par Colin et Verdu (26) (27) (28) (29) (30). Les deux types d'approches mènent à des modèles obtenus en rajoutant à l'équation de diffusion une quantité appelée vitesse d'oxydation que l'on notera R_r. Cette quantité représente la quantité d'oxygène consommée dans le temps par les réactions chimiques.

Dans le cas monodimensionnel, cela mène à l'équation suivante.

$$\frac{\partial[O_2]}{\partial t} = -R_r(t,x) + D\frac{\partial^2[O_2]}{\partial x^2} \tag{0.04}$$

L'approche phénoménologique et le schéma mécanistique diffèrent par le calcul de la quantité R_r. Dans cette thèse, nous souhaitons étudier la résolution de ces deux types d'approches. Il est donc nécessaire de présenter l'écriture de cette quantité R_r dans le cas du schéma mécanistique en commençant par présenter la modélisation de ce type de schéma et en particulier celui étudié dans cette thèse et issu des travaux de Colin et Verdu sur le phénomène d'oxydation (31).

Le schéma standard en chaîne radicalaire est composé généralement de trois étapes différentes : amorçage, propagation et terminaison. Le tableau suivant résume les principales réactions décrites par ce modèle.

(I)	$POOH + \gamma PH \rightarrow 2P° + H_2O + vV$	k1	Amorçage
(II)	$P° + O_2 \rightarrow PO_2°$	k2	Propagation
(III)	$PO_2 + PH \rightarrow POOH + P$	k3	Propagation
(IV)	$P + P \rightarrow$ *produits inactive 1*	k4	Terminaison
(V)	$P + PO_2° \rightarrow$ *produits inactive 2*	k5	Terminaison
(VI)	$PO_2 + PO_2° \rightarrow$ *produits inactive 3* $+ O_2$	k6	Terminaison

La dissociation des hydropéroxydes *POOH* en radicaux *P°* (I) représente l'étape d'amorçage de la chaîne. Ce phénomène a lieu grâce à une très faible énergie de dissociation des hydropéroxydes. Dans les étapes de propagation, une réaction en boucle fermée se déclenche due au fait que la réaction d'oxydation produit son propre amorceur, c'est-à-dire que les radicaux P° en présence d'oxygène forment des radicaux $PO_2°$ qui se lient avec des atomes d'hydrogène pour reformer des hydropéroxydes. Pendant ce processus une certaine quantité d'oxygène est consommée. Les coefficients k_i sont les constantes des réactions chimiques. Ces dernières ont des valeurs d'un ordre de grandeur très distincte comme cela est détaillé dans la partie C - tableau C.20.

Dans ces réactions chimiques, différentes phases sont actives et il est communément écrit de manière schématique que la vitesse d'amorçage est lente, les vitesses de terminaison sont très rapides et les vitesses de propagation sont intermédiaires.

Ce type de schéma mécanistique peut être modélisé par un système d'équations différentielles ordinaires (EDO) qui décrit l'évolution dans le temps de la concentration des espèces qui participent à l'oxydation.

$$\begin{aligned}
\frac{d[P°]}{dt} &= 2k_1[POOH] - k_2O_2[P°] + k_3[PH][PO_2] - 2k_4[P°]^2 - k_5[P°][PO_2] \\
\frac{d[PO_2]}{dt} &= k_2O_2[P°] - k_3[PH][PO_2] - k_5[P°][PO_2] - 2k_6[PO_2]^2 \\
\frac{d[POOH]}{dt} &= -k_1[POOH] + k_3[PH][PO_2] \\
\frac{d[PH]}{dt} &= -k_3[PH][PO_2] - 2k_1[POOH]
\end{aligned} \tag{0.05}$$

Etant donnée la complexité de ce système, il n'est pas possible d'obtenir une solution analytique. Il est donc nécessaire de le résoudre numériquement. Une fois ce dernier résolu, la vitesse d'oxydation est ensuite calculée à l'aide de la relation suivante.

$$R_r(O_2) = -\frac{d[O_2]}{dt} = (k_2[O_2][P°] - k_6[PO_2]^2) \qquad (0.06)$$

La loi de Fick est ensuite modifiée en rajoutant la vitesse d'oxydation pour tenir compte de l'oxygène consommée pendant les réactions.

Dans le cas monodimensionnel, l'équation de diffusion de l'oxygène devient donc :

$$\frac{d[O_2]}{dt} = (-k_2 O_2[P°] + k_6[PO_2]^2) + D\frac{\partial^2 O_2}{\partial x^2} \qquad (0.07)$$

L'évolution de l'oxygène dépend ainsi de celle des espèces chimiques. Il est donc nécessaire pour traiter numériquement ce problème de résoudre un problème non linéaire couplé composé d'une équation aux dérivées partielles et d'un système d'équations différentielles ordinaires. Les valeurs numériques des coefficients présents dans le modèle peuvent être déterminées de façon expérimentale ou trouvés dans la littérature selon la résine étudiée (32). Dans le cas de la résine étudiée dans cette thèse, les coefficients sont reportés dans le tableau 0.01 et issus de (20).

Le système à étudier est donc un système d'équations raides, les différents temps apparaissant variant de plusieurs décades.

T [°C]	120	150	180	200
PH₀	17	17	17	17
POOH₀	10^{-4}	10^{-4}	10^{-4}	10^{-4}
Dens₀	1.32×10^{3}	1.32×10^{3}	1.32×10^{3}	1.32×10^{3}
Volat	45	65	90	97
C_s [mol/L]	3.3×10^{-3}	3.3×10^{-3}	3.3×10^{-3}	3.3×10^{-3}
D [m²/s]	8×10^{-13}	1.3×10^{-12}	1.8×10^{-12}	2.2×10^{-12}
Cte_1 [s^{-1}] [a]	1.84×10^{-6}	3.09×10^{-5}	3.58×10^{-4}	1.54×10^{-3}
Cte_2 [$L/mol^{-1}s^{-1}$] [b]	10^{8}	10^{8}	10^{8}	10^{8}
2β [c]	1.13×10^{2}	3.00×10^{2}	6.99×10^{2}	1.16×10^{3}
Cte_3 [$L/mol^{-1}s^{-1}$] [d]	7.22×10^{-1}	2.96	10.1	20.9
ψ [e]	0.1	0.1	0.1	0.1
R_0 [f]	1.03×10^{-6}	5.03×10^{-6}	1.99×10^{-5}	4.51×10^{-5}

[a] $\mathrm{Cte}_1 = \mathrm{k}_1$

[b] $\mathrm{Cte}_2 = \mathrm{k}_2$

[c] $2\beta = \frac{k_2 k_6}{k_5 k_3 PH_0}$

[d] $Cte_3 = k_3 PH_0$

[e] $\psi = \frac{k_4 k_6}{k_5^2}$

[f] $R_0 = \frac{k_3^2 PH_0^2}{k_6}$

Tab 0.01 : Valeurs des paramètres du schéma mécanistique en fonction de la température

0.2. Problématiques numériques et objectifs

D'un point de vue numérique, certaines caractéristiques du modèle de thermo oxydation décrit précédemment méritent une attention particulière dans la mesure où elles nécessitent une résolution numérique spécifique. Dans ce paragraphe, ces caractéristiques sont listées et discutées, elles constituent les problématiques numériques étudiées dans cette thèse.

0.2.1. Couplage de plusieurs inconnues

Le modèle de thermo oxydation possède un grand nombre d'inconnues fortement couplées. Ce couplage est dû au fait que plusieurs espèces chimiques évoluent pendant le phénomène. L'évolution de la concentration de toutes ces espèces dépendent fortement l'une de l'autre. Le couplage entre plusieurs grandeurs rend la résolution des problèmes plus compliquée d'un point de vue de la gestion des données. En général, les méthodes de résolution numériques classiques peuvent être utilisées pour la résolution de problèmes couplés. Leur implémentation doit nécessairement prendre en compte la présence de plusieurs inconnues et des dépendances qu'elles ont les unes par rapport aux autres.

Le développement proposé dans ce travail doit donc être suffisamment flexible afin de permettre la gestion de problèmes couplés de la manière la plus efficace possible.

0.2.2. Présence de non-linéarités dans le modèle

La présence de termes non-linéaires dans les équations qui décrivent le modèle de thermo oxydation nécessite l'implémentation d'algorithmes particuliers. Les méthodes classiques de résolution numériques sont généralement adaptées à la résolution de problèmes linéaires. La résolution d'un système non linéaire nécessite de les coupler à une méthode de linéarisation. La méthode de linéarisation la plus répandue dans les codes de calcul éléments finis est la méthode de Newton-Raphson. C'est une méthode itérative qui évalue la non-linéarité au fur-et-à-mesure des itérations. D'autres méthodes de linéarisation existent dans la littérature (33) (34) (35), leur efficacité dépend du problème étudié.

Le développement mené dans ce travail doit donc permettre le traitement des modèles non-linéaires à travers plusieurs stratégies de linéarisation afin de pouvoir aborder le problème de thermo oxydation.

0.2.3. Raideur du système

La présence de réactions chimiques dans les modèles peut, pour certaines valeurs des paramètres, amener à considérer des systèmes d'équations différentielles dits raides, comme c'est le cas pour le schéma mécanistique que nous souhaitons étudier (32).

Il n'existe pas dans la littérature une définition mathématique rigoureuse du terme « raide ». Néanmoins, on peut identifier un système « raide » comme un système bien conditionné caractérisé par la présence, à l'intérieur de la solution, de temps caractéristiques très différents entre eux (36) (37). Dans le cas de modèles chimiques, cette différence est due à la présence de réactions plus ou moins rapides qui font évoluer les concentrations des espèces de manière très différente (38).

Dans le cas des systèmes linéaires, le système est dit raide lorsque le rapport entre les valeurs propres du jacobien du problème est grand. Pour les systèmes non-linéaires, aucun indicateur n'est universellement reconnu. La raideur des systèmes nécessite une résolution numérique particulière.

A titre d'exemple, considérons le système d'équations différentielles suivant issu de (39) :

$$\begin{cases} y_1' = \dfrac{\lambda_1 + \lambda_2}{2} y_1 + \dfrac{\lambda_1 - \lambda_2}{2} y_2 \\ y_2' = \dfrac{\lambda_1 - \lambda_2}{2} y_1 + \dfrac{\lambda_1 - \lambda_2}{2} y_2 \end{cases} \qquad (0.08)$$

La solution générale de ce système est :

$$\begin{aligned} y_1(t) &= C_1 e^{\lambda_1 t} + C_2 e^{\lambda_2 t} \\ y_2(t) &= C_1 e^{\lambda_1 t} - C_2 e^{\lambda_2 t} \end{aligned} \qquad (0.09)$$

où λ_1 et λ_2 représentent les deux vitesses caractéristiques du système.

En choisissant comme vitesses caractéristiques $\lambda_1=-1$ et $\lambda_2=-10000$, le système devient un système raide. Le terme $C_2 e^{\lambda_2 t}$ a une influence sur la variation de la solution uniquement pour des temps très petits. En effet, pour des temps grands, ce terme devient constant. Le choix du pas de temps qui garantit la stabilité des méthodes numériques utilisées pour la résolution du problème est influencé par la vitesse caractéristique λ_2.

Remarque : L'utilisation de certaines méthodes de résolution nécessite, même aux temps longs, un pas de temps très petit, même si le terme a une influence seulement aux temps courts. C'est le cas par exemple pour la méthode d'Euler explicite lors de la résolution du problème (0.08).

Le développement numérique mené dans ce travail doit donc permettre de choisir le schéma temporel de résolution spécifique aux types d'équations traitées. Par exemple

dans le cas du problème de thermo oxydation, des méthodes spécifiques pour la résolution des systèmes raides doivent être combinées à la méthode PGD.

0.3.La méthode PGD

La méthode PGD est une méthode numérique développée depuis une dizaine d'années (7) qui vise à réduire la complexité de résolution des problèmes décrits par des équations aux dérivées partielles sur des domaines multidimensionnelles.

La réduction de complexité est liée au fait que la solution du problème est recherchée sous une forme séparée, c'est-à-dire que chaque inconnue du problème, comme par exemple la concentration d'oxygène pour un problème de diffusion, est écrite sous la forme suivante (cas 3D non-stationnaire):

$$I(x,y,z,t) = \sum_{i=1}^{\infty} F_{xi}(x) \cdot F_{yi}(y) \cdot F_{zi}(z) \cdot F_{ti}(t) \qquad (0.10)$$

Chaque terme de la somme est appelé mode. Une approximation de la solution de l'inconnue peut être donnée à partir d'un nombre limité de modes (40). Il est ainsi possible de reconstruire une fonction multidimensionnelle à partir de fonctions définies sur des domaines de dimensions réduites (dimension 1 dans l'écriture (0.10)).

La recherche d'une fonction multidimensionnelle par une méthode de discrétisation classique comporte une complexité qui augmente de manière proportionnelle par rapport au nombre de points de discrétisation. Le nombre total de ces points est le produit des nombres de points de discrétisation sur chaque variable. En limitant le nombre de variables, la méthode PGD permet ainsi d'obtenir une complexité réduite par rapport aux méthodes classiques.

Par exemple, pour une fonction qui dépend d'une seule variable la complexité augmente linéairement par rapport au nombre de points de discrétisation. Si dans la formulation PGD, on considère seulement des fonctions monodimensionnelles, la complexité de la recherche de chaque mode sera proportionnelle à la somme des complexités linéaires. Si le nombre de modes n'est pas trop élevé, la complexité totale de la recherche de la solution reste moins élevée que celle des méthodes classiques.

La méthode PGD est une méthode de réduction de modèles a priori. La recherche de la solution avec la méthode PGD se fait par enrichissements successifs, c'est-à-dire que les modes sont trouvés les uns après les autres. Comme chaque mode représente une partie des informations qui compose la solution, en rajoutant un nouveau mode on rajoute à la solution des nouvelles

informations. Le but de chaque enrichissement est donc celui de trouver un mode qui améliore l'approximation de la solution. Il est donc raisonnable de penser que les premiers modes contiennent les informations grossières et au fur et à mesure les modes rajoutés amènent un raffinement de la solution.

Détaillons l'algorithme itératif pour l'enrichissement. On suppose pour cela que les *n* premiers modes sont connus et on recherche le mode *n+1*. La solution est recherchée sous la forme suivante :

$$I(x,y,z,t) = \sum_{i=1}^{n} F_{xi}(x) \cdot F_{yi}(y) \cdot F_{zi}(z) \cdot F_{ti}(t) + R_x(x) \cdot R_y(y) \cdot R_z(z) \cdot R_t(t) \qquad (0.11)$$

Le nouveau mode est représenté par le produit des fonctions notées *R*. Les fonctions *R* sont donc les fonctions qui doivent être calculées afin d'améliorer la solution. L'écriture PGD de la solution est ensuite introduite dans les équations du problème et les équations sont intégrées. Le nouveau mode peut être rajouté à la collection des modes qui composent la solution. Comme le nouveau mode est cherché sous la forme d'un produit de fonctions, cela mène à la résolution d'un système non-linéaire qui nécessite donc l'utilisation d'un algorithme approprié. L'algorithme de résolution de systèmes non linéaires le plus utilisé dans le cadre de la méthode PGD est l'algorithme de point fixe à directions alternées (7). Cet algorithme permet de résoudre le système non-linéaire à l'aide d'une procédure itérative qui consiste à considérer à chaque itération toutes les fonctions *R* connues sauf une et à les permuter comme écrit dans l'étape Point Fixe de la figure 0.01.

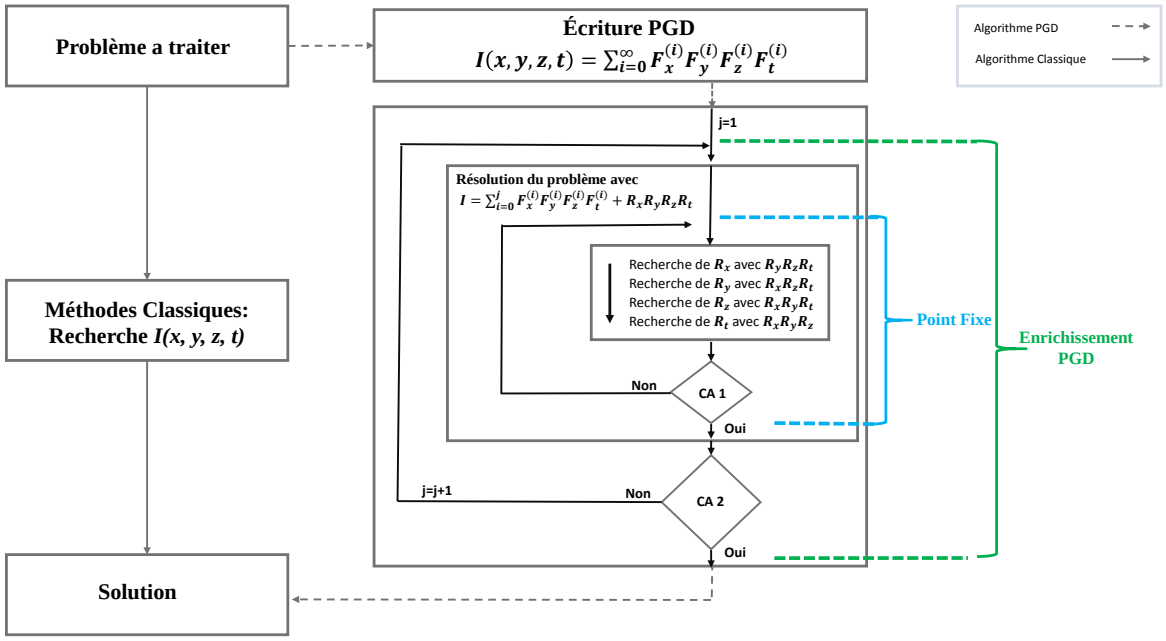


Fig 0.01 : Schéma général de l'algorithme PGD

La figure 0.01 montre deux parcours de résolution par discrétisation d'un problème générique : un pour les méthodes classiques (par exemple la méthode des éléments finis) et un pour la méthode PGD. Les méthodes classiques cherchent la solution « entière » sur tout le domaine *(x, y, z, t)* tandis que la méthode PGD cherche, à travers l'algorithme du point fixe, des fonctions à une seule variable (dans cet exemple).

Deux boucles principales sont donc présentes dans l'algorithme PGD : celle du *point fixe* et celle de *l'enrichissement PGD*. Les critères d'arrêt de ces deux boucles sont différents et notés sur le schéma *CR 1* pour celui du point fixe et *CR 2* pour celui de l'enrichissement.

- Le test *CR 1* permet la détermination de la convergence de l'algorithme de point fixe. Au fur et à mesure de l'avancement du point fixe, les fonctions *R* sont actualisées à travers la résolution des problèmes définis sur chaque variable. Une fois que la convergence est atteinte, le produit des fonctions *R* trouvées est un mode de la solution du problème. Le principe du critère d'arrêt du point fixe est donc de vérifier que des itérations ultérieures de l'algorithme ne modifient pas les fonctions *R*. Le critère est donné par l'équation ci-après.

  $$res \geq \|R - R_{old}\|_2 \tag{0.12}$$

  Où R est le produit des fonctions R sur toutes les variables $(R_x \cdot R_y \cdot R_z \cdot R_t)$ du problème à l'itération courante et R_{old} est le produit des fonctions R à l'itération précédente.

  Dans l'équation (0.12), *res* représente le résidu minimum à atteindre pour pouvoir considérer l'algorithme de point fixe comme convergé. La valeur de ce résidu est fixée par l'utilisateur et doit être suffisamment petite.

- Le test *CR 2* permet la détermination de la convergence de la solution. Le but de ce critère d'arrêt est de déterminer le nombre minimum de modes nécessaire pour obtenir une bonne approximation de la solution du problème considéré. Plus le nombre de modes est petit, moins la complexité totale de l'algorithme PGD est élevée. Deux estimations peuvent être mises en place pour vérifier ce critère. La première consiste simplement à fixer un nombre maximal de modes à rajouter à la solution. Celle-ci sera largement utilisée dans ce travail car elle permet de déterminer la précision de la solution pour un nombre de modes donné. Une deuxième méthode est de vérifier comment la solution évolue lorsque l'on rajoute des modes. Si la solution ne présente pas d'évolutions importantes avec *n* ou *n+1* modes, on peut arrêter l'enrichissement.

  Le critère s'écrit (cf. équation 2.21 dans (40)) :

  $$\frac{\left\|F_{xn}(x) \cdot F_{yn}(y) \cdot F_{zn}(z) \cdot F_{tn}(t)\right\|}{\left\|\sum_{i=1}^{n} F_{xi}(x) \cdot F_{yi}(y) \cdot F_{zi}(z) \cdot F_{ti}(t)\right\|} < \varepsilon(n) \tag{0.13}$$

Remarque : L'initialisation de la boucle du point fixe nécessite de connaître certaines fonctions *R*. A la première itération du point fixe, ces fonctions ne sont pas connues, on part d'une valeur initiale que l'on se donne. Généralement, les fonctions sont initialisées soit avec une valeur constante, soit une valeur choisie au hasard ou une valeur proche de la solution présumée.

0.3.1. Application des conditions aux bords et initiales

La méthode PGD est généralement présentée pour des conditions initiales et aux bords nulles. Nous allons détailler ici comment sont prises en compte des conditions non nulles. Dans ce travail, pour intégrer ce type de conditions, on utilise un changement de variables. En particulier, l'inconnue sur laquelle on veut appliquer les conditions aux bords et/ou initiales peut être écrite sous la forme suivante :

$$u_{complete} = u + u_0 \tag{0.14}$$

où u_0 représente une fonction qui respecte les conditions aux bords et initiales et u est la nouvelle inconnue à calculer. La concentration d'oxygène s'écrit ainsi.

$$u_{complete} = \sum_{i=1}^{n} F_i^x(x) \cdot F_i^t(t) + F_0^x(x) \cdot F_0^t(t) = \sum_{i=0}^{n} F_i^x(x) \cdot F_i^t(t) \tag{0.15}$$

où un mode « artificiel » est introduit. Ce mode est composé par le produit de fonctions $F_0^x(x)$ et $F_0^t(t)$. Il peut être choisi de façon arbitraire pour autant qu'il respecte les conditions imposées. Tous les autres modes sont cherchés en supposant des conditions aux bords et initiales nulles.

Remarque : Nous considérons pour simplifier que les conditions aux bords et initiales peuvent être représentées par un seul produit de fonctions mais il pourrait y avoir une somme de produits de fonctions.

Le choix de ce produit de fonctions est discuté dans le chapitre suivant où plusieurs types de fonctions sont testés (paragraphe A.2).

0.3.2. Illustration de l'algorithme PGD dans le cas de la diffusion Fickienne 1D

L'algorithme PGD décrit précédemment est illustré ici dans le cas d'un problème de diffusion monodimensionnelle Fickienne.

Considérons l'équation de diffusion suivante :

$$\frac{\partial O_2}{\partial t} = D \cdot \frac{\partial^2 O_2}{\partial x^2} \tag{0.16}$$

où D représente le coefficient de diffusion.

La forme faible de l'équation 0.16 est :

$$\int_\Omega O_2^* \cdot \frac{\partial O_2}{\partial t}\, d\Omega = \int_\Omega O_2^* \cdot D \cdot \frac{\partial^2 O_2}{\partial x^2}\, d\Omega \tag{0.17}$$

Les inconnues du problème, dans ce cas uniquement la concentration d'oxygène, sont écrites sous une forme séparée. Les n modes de la solution déjà calculés sont notés F. Les fonctions R représentent le mode recherché à l'enrichissement $n+1$.

$$O_2(x,t) = \sum_{i=1}^{n} F_i^x(x) \cdot F_i^t(t) + R^x(x) \cdot R^t(t) \tag{0.18}$$

Le champ virtuel O_2^* est choisi sous la forme suivante :

$$O_2^* = R^{x*} \cdot R^t + R^x \cdot R^{t*} \tag{0.19}$$

En remplaçant les champs réel et virtuel par leurs expressions (équation 0.18 et équation 0.19) dans la formulation faible (équation 0.17), on obtient la forme faible suivante :

$$\begin{aligned}\int_\Omega (R^{x*}R^t + R^x R^{t*}) \cdot (\sum_{i=1}^{n} F_i^x \frac{\partial F_i^t}{\partial t} + R^x \frac{\partial R^t}{\partial t} \\ - D(\sum_{i=1}^{n} \frac{\partial^2 F_i^x}{\partial x^2} F_i^t + \frac{\partial^2 R^x}{\partial x^2} R^t))\, d\Omega = 0\end{aligned} \tag{0.20}$$

Le système obtenu pour déterminer R^x, R^t devient non linéaire, dû à la présence du produit entre les deux fonctions inconnues. Notons que les fonctions R^x, R^t ne sont pas uniques alors que leur produit l'est. Comme montré dans la figure 0.01, la recherche d'un couple $R^x R^t$est faite à travers l'algorithme du point fixe à directions alternées. Cet algorithme est de type itératif, pour chaque itération il considère une inconnue fixée (donc connue) et il cherche l'autre, ce qui permet de résoudre, à chaque itération du point fixe, un système linéaire.

Considérons par exemple que pour l'itération n du point fixe R^x est connue, il faut donc calculer la valeur de R^t et vice versa pour l'itération suivante. En effet, à l'itération n, comme on a supposé la fonction R^x connue, R^{x*} est nulle et l'équation 0.20 réarrangée pour la recherche de R^t s'écrit :

$$\begin{aligned}\int_x \int_t (R^{t*}R^x)\,(R^x \frac{\partial R^t}{\partial t} - D \frac{\partial^2 R^x}{\partial x^2} R^t)\, dxdt \\ = \int_x \int_t (R^{t*}R^x)\,(-\sum_{i=1}^{n} (F_i^x \frac{\partial F_i^t}{\partial t} - D \frac{\partial^2 F_i^x}{\partial x^2} F_i^t))\, dxdt\end{aligned} \tag{0.21}$$

Notons que cela mène bien à un système linéaire pour déterminer R^t.

Plaçons-nous maintenant à l'itération *n+1* du point fixe, la fonction R^t est connue et l'équation 0.20 réarrangée pour la recherche de R^x s'écrit :

$$\int_x \int_t (R^t R^{x*}) \left(R^x \frac{\partial R^t}{\partial t} - D \frac{\partial^2 R^x}{\partial x^2} R^t\right) dx dt = \int_x \int_t (R^t R^{x*}) \left(-\sum_{i=1}^{n} \left(F_i^x \frac{\partial F_i^t}{\partial t} - D \frac{\partial^2 F_i^x}{\partial x^2} F_i^t\right)\right) dx dt \quad (0.22)$$

Pour chaque itération du point fixe, il est donc nécessaire de résoudre un problème qui dépend de la variable temporelle (*t*) quand on considère la fonction R^x connue (0.21) et un autre qui dépend de la variable spatiale (*x*) quand la fonction R^t est connue (0.22). Deux types d'équations sont donc générés selon la variable de dépendance de la fonction inconnue. Lorsque l'on recherche la fonction temporelle, toutes les fonctions qui dépendent de l'espace étant connues (et vice versa), l'intégration de ces fonctions connues peut être faite à travers une formule de quadrature.

L'équation à résoudre pour la recherche de la fonction temporelle R^t peut être écrite sous la forme générique suivante.

$$a \cdot \frac{dR^t(t)}{dt} + b \cdot R^t(t) = \sum_{i=0}^{n} \left(c_{1i} \cdot \frac{dF_i^t(t)}{dt} + c_{2i} \cdot F_i^t(t)\right) \quad (0.23)$$

Cette équation est une équation différentielle ordinaire en temps où les coefficients *a*, *b*, c_{1i} et c_{2i} englobent les valeurs des intégrales en espace et des paramètres de l'équation d'origine à résoudre.

Sans perte de généralités, l'équation précédente peut être mise sous la forme :

$$a \cdot \frac{dR^t(t)}{dt} + b \cdot R^t(t) = X(t) \quad (0.24)$$

De la même façon, l'équation à résoudre pour la recherche de la fonction spatiale R^x (0.22) peut être mise sous la forme générique suivante.

$$a \cdot \frac{d^2R^x(x)}{dx^2} + b \cdot R^x(x) = X(x) \quad (0.25)$$

En appliquant les conditions aux bords et/ou initiales, on obtient donc deux types de problèmes à résoudre à chaque itération de l'algorithme du pont fixe :

1. Pour la recherche des fonctions temporelles, un **Problème de Cauchy** de la forme :

$$y' = f\big(t, y(t)\big) \quad ; \quad y(t_0) = y_0 \quad (0.26)$$

2. Pour la recherche des fonctions spatiales, un **Problème aux limites** de la forme :

$$y'' + y = f\big(t, y(x)\big) \qquad ; \qquad y(0) = y_0; \quad y(L) = y_L \qquad (0.27)$$

Ces deux problèmes peuvent être résolus avec les méthodes classiquement utilisées dans la littérature.

Revenons maintenant aux cas d'application étudiés dans ce travail les problèmes de vieillissement des CMO ainsi qu'aux problématiques numériques qui leur sont associées : couplages, raideur, non linéarités. Il est raisonnable de penser que ces difficultés numériques subsistent lors de la résolution, même si l'on considère la méthode PGD (représentation séparée de la solution). La résolution des problèmes en temps, problèmes de Cauchy, nécessitent donc une attention particulière.

Les méthodes de résolution des problèmes de Cauchy (0.26) sont en général classées en deux catégories : les méthodes à un pas et les méthodes multi-pas. Dans le cadre de ce travail, nous nous limiterons aux méthodes à un pas, afin d'utiliser les mêmes méthodes que celles utilisés dans le laboratoire dans le cadre de la méthode des éléments finis (9).

Dans les modèles étudiés, des termes non-linéaires apparaissent et nécessitent de considérer des méthodes de résolution particulières. Nous nous limiterons ici à la description de la méthode de Newton-Raphson, sur la base de laquelle sont construites les stratégies de résolution non-linéaires étudiées dans la partie B de ce manuscrit.

0.4.Méthodes à un pas

Dans cette partie, une description non exhaustive des méthodes à un pas est présentée. Nous détaillerons la plus répandue qui est la méthode d'Euler explicite puis nous décrirons la méthode de Runge-Kutta et la méthode de Rosenbrock.

Commençons par quelques commentaires d'ordre très général sur les méthodes à un pas afin de rappeler le vocabulaire et les définitions usuelles pour l'étude de ces méthodes.

Toutes les méthodes à un pas sont des méthodes incrémentales, c'est-à-dire qu'on part du calcul de la solution à l'instant $t=t_0$ et on réalise des incréments de temps de taille h successifs, où h est soit un paramètre fixé par l'utilisateur soit un paramètre calculé par la méthode elle-même.

Les méthodes d'intégration discrète d'un système d'équations différentielles nécessitent l'utilisation d'un schéma pour le calcul numérique de la dérivée notée $D_h f(t)$ de la fonction $f(t)$. Trois schémas sont classiquement utilisés : le schéma avant, arrière et centré pour le calcul de la dérivée. Les formules relatives à ces schémas sont :

•Avant $$D_h f(t) = \frac{f(t+h) - f(t)}{h} \quad (0.28)$$

•Arrière $$D_h f(t) = \frac{f(t) - f(t-h)}{h} \quad (0.29)$$

•Centré $$D_h f(t) = \frac{f(t+h) - f(t-h)}{2h} \quad (0.30)$$

Les deux premiers schémas sont largement utilisés dans l'intégration des équations différentielles ordinaires et donnent lieu à deux méthodes différentes : les méthodes explicites (schéma avant) et les méthodes implicites (schéma arrière). Notons que dans le cas des méthodes explicites, l'évaluation de la fonction f n'est pas nécessaire à l'instant $n+1$, contrairement aux méthodes implicites.

Lorsque l'on utilise des schémas numériques, il est important de savoir mesurer l'erreur commise par la méthode appelée *Erreur Globale*. Cette erreur est la somme de deux erreurs : *l'Erreur de Propagation* et *l'Erreur Locale*. L'erreur locale est directement liée à l'ordre de la méthode, en particulier une méthode d'ordre p possède une erreur locale en $O(h^{p+1})$. Un bon compromis doit être choisi vis-à-vis de l'ordre de la méthode : l'ordre ne doit pas être trop bas pour éviter des erreurs locales trop élevées (et donc un pas de temps trop petit) et en même temps l'ordre ne doit pas être trop élevé pour éviter des problèmes numériques.

Nous reviendrons sur ces points lors de la présentation des différents algorithmes des méthodes à un pas.

0.4.1. La méthode d'Euler explicite

La méthode à un pas la plus simple et classiquement utilisée dans la méthode PGD (40) est la méthode d'Euler explicite dont le schéma s'écrit :

$$y_{n+1} = y_n + h \cdot f(t_n, y_n) \quad (0.31)$$

Où y_{n+1} est la solution approchée à l'instant t_{n+1}, y_n celle à l'instant t_n, h le pas de temps h et $f(t_n, y_n)$ la dérivé de y à l'instant t_n (voire équation 0.01).

Cela revient à supposer que la fonction y varie linéairement entre deux instants consécutifs.

L'ordre de la méthode d'Euler est égal à 1, l'erreur locale est en $O(h^2)$. L'expansion en série de Taylor de la solution exacte $y(t_{n+1})$ est égale à :

$$y(t_{n+1}) = y(t_n) + hy'(t_n) + O(h^2) \tag{0.32}$$

La différence entre la solution obtenue avec la méthode d'Euler (solution approchée y_{n+1}) et la solution exacte ($y(t_{n+1})$) se décompose de la façon suivante :

$$\underbrace{y(t_{n+1}) - y_{n+1}}_{\text{Erreur Globale}} = \underbrace{y(t_n) - y_n + h\big(f(t_n, y(t_n)) - f(t_n, y_n)\big)}_{\text{Erreur de propagation}} + \underbrace{O(h^2)}_{\text{Erreur locale}} \tag{0.33}$$

où l'Erreur Globale est égale à la somme de :

- l'Erreur de propagation, due à l'erreur commise aux pas de temps précédents
- l'Erreur locale, due à l'ordre de la méthode.

En général, une méthode est stable si sa réponse est bornée pour un temps $t \to \infty$. Etudions la stabilité de la méthode d'Euler en considérant une équation différentielle ordinaire de la forme

$$a \cdot \frac{dy(t)}{dt} + b \cdot y(t) = X(t) \tag{0.34}$$

La solution de l'équation 0.34 peut être trouvée analytiquement comme étant la somme de la solution de l'équation homogène associée et d'une solution particulière.

$$y(t) = y(0) \cdot e^{-\frac{a}{b}t} + \int_{t_0}^{t} \frac{1}{a} \cdot X(t) \cdot e^{\frac{b}{a}t} dt \tag{0.35}$$

La solution de l'équation homogène dépend de l'état initial du système tandis que la solution particulière dépend de la fonction $X(t)$. Si la fonction $X(t)$ est bornée pour $t \to \infty$, la solution particulière sera aussi bornée pour $t \to \infty$.

Considérons l'équation homogène et sa solution :

$$\begin{aligned} &a \cdot \frac{dy(t)}{dt} + b \cdot y(t) = 0 \\ &y(t) = y(0) \cdot e^{-\frac{b}{a}t} \end{aligned} \tag{0.36}$$

On remarque que la solution de l'équation homogène est monotone décroissante et est égale à 0 pour $t \to \infty$. De plus, elle représente la réponse du système à l'application d'une impulsion unitaire (dans le cas où $y(0)=1$).

Une forme discrétisée de l'équation homogène s'écrit :

$$a \cdot \frac{y_{n+1} - y_n}{h} + b \cdot y_n = 0 \tag{0.37}$$

où h représente le pas de temps.

La solution pour t appartenant à l'intervalle t_n, t_{n+1} s'écrit :

$$y_{n+1} = (1 - \frac{b}{a}h) \cdot y_n \tag{0.38}$$

Remarquons qu'elle dépend de y_n et du pas de discrétisation choisi.

Pour que la solution soit stable, il faut donc que l'équation 0.39 soit vérifiée.

$$\lim_{t \to \infty} y(t) = 0 \tag{0.39}$$

La solution discrète doit avoir la même forme que la solution donnée en (0.36). Pour cela, l'inégalité suivante doit être vérifiée où d est une constante générique positive.

$$|y_{n+1}| \leq d \cdot |y_n| \tag{0.40}$$

A partir de l'équation (0.40), on peut montrer que l'on a :

$$\left|(1 - \frac{b}{a}h)\right| \leq 1 \tag{0.41}$$

La convergence de la méthode d'Euler est démontrée dans la littérature comme par exemple dans (41), pour ne pas alourdir ce paragraphe la démonstration n'est pas reportée ici.

D'un point pratique, la méthode d'Euler explicite ne peut pas toujours être utilisée. En effet, dans certains problèmes, afin d'en garantir la stabilité, un pas de temps extrêmement petit est nécessaire. Pour ces problèmes, des méthodes avec une région de stabilité plus grande sont plus appropriées.

0.4.2. Les méthodes de Runge-Kutta

Les méthodes de Runge-Kutta sont souvent utilisées en raison d'une meilleure efficacité par comparaison à la méthode d'Euler.

Le schéma de ces méthodes est de la forme :

$$y(t_{n+1}) = y_n + \int_{t_n}^{t_{n+1}} f(t)dt \tag{0.42}$$

Remarque : La méthode d'Euler peut être vue comme une méthode de Runge-Kutta particulière pour laquelle l'évaluation de l'intégrale se fait de façon linéaire. Les incréments de temps peuvent donc devenir très nombreux selon la fonction *f(t)* considérée.

La formulation générale des méthodes de Runge-Kutta explicites est :

$$y_{n+1} = y_n + h \cdot \sum_{i=1}^{s} (b_i \cdot k_i) \tag{0.43}$$

$$k_i = f((t_n + c_i h), (y_n + \sum_{j=1}^{s} (a_{ij} \cdot k_j)))$$

où *s* représente l'ordre de la méthode et les coefficients a_{ij} b_i *et* c_i sont des coefficients qui sont propres à chaque méthode de Runge-Kutta.

La valeur de l'intégrale à l'intérieur du pas de temps est approximée par une formule de quadrature, la précision de l'intégration augmentant avec l'ordre *s* de la méthode de Runge-Kutta. Des détails concernant le choix des coefficients a_{ij}, b_i, *et* c_i peuvent être trouvés dans la littérature et notamment dans (41).

L'erreur locale commise pendant l'intégration du problème par les méthodes de Runge-Kutta peut être calculée de la même façon que pour la méthode d'Euler. Une erreur locale en $O(h^{p+1})$ est obtenue lorsque la méthode de Runge-Kutta considérée est d'ordre *p* (41).

Afin de rendre le plus efficace possible les méthodes de Runge-Kutta sur une large plage de problèmes, elles sont généralement combinées à une méthode automatique d'adaptation du pas de temps *h* basée à chaque pas de temps sur une estimation de l'erreur commise par la méthode même (41). Le pas de temps doit être le plus grande possible mais, en même temps suffisamment petit pour garantir une erreur locale petite.

Pour chaque incrément temporel $n+1$, deux approximations de la solution sont calculées y_{n+1} et $\hat{y}_{n+1}$. Notons *h* le pas de temps utilisé dans cet incrément. *h* est considéré comme suffisamment petit lorsque la relation suivante est vérifiée :

$$|y_{n+1} + \hat{y}_{n+1}| \leq err$$

avec

$$err = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \left(\frac{y_{n+1} - \hat{y}_{n+1}}{sc} \right)} \qquad (0.44)$$

où

$$sc = Atol + \max(|y_n|, |y_{n+1}|) \cdot Rtol$$

Les quantités *Atol* et *Rtol* sont respectivement les tolérances absolue et relative choisies par l'utilisateur et *N* est le nombre d'équations (ou d'inconnues) du problème.

Si le pas de temps *h* ne satisfait pas le test, un nouveau pas de temps est proposé et cette procédure est menée jusqu'à avoir un pas de temps répondant au critère.

Les deux approximations de la solution y_{n+1} et $\hat{y}_{n+1}$ doivent donc être calculées. Les méthodes de Runge-Kutta qui fournissent de manière autonome ces deux approximations sont dites méthodes emboîtées. Elles sont construites de manière à intégrer deux méthodes différentes en même temps : une d'ordre p, qui fournit y_{n+1}, et une autre d'ordre $p-1$ qui fournit $\hat{y}_{n+1}$ où les coefficients de chacune des méthodes sont choisis de telle sorte à rendre la recherche de la solution la plus efficace possible.

Les méthodes de Runge-Kutta à pas de temps adaptatif fournissent la solution dans des points qui ne sont pas choisis a priori par l'utilisateur. Pour obtenir la solution à l'intérieur d'un pas de temps, il est donc nécessaire d'effectuer une opération d'interpolation.
Dans le cas de la méthode d'Euler, les fonctions d'interpolation sont choisis linéaires, l'intégration de du problème étant linéaire. L'erreur est donc en $O(h^2)$.
Dans le cas des méthodes de Runge-Kutta, l'interpolation doit être faite par un polynôme de degré compatible avec l'ordre de la méthode. Par exemple, si on considère une méthode d'ordre p, l'erreur commise pendant l'intégration est en $O(h^{p+1})$, de la même façon si on utilise une interpolation de degré p l'erreur d'interpolation est en $O(h^{p+1})$.
En considérant des fonctions d'interpolation du même degré que l'ordre de la méthode, toutes les informations générées au cours du calcul sont préservées et la solution s'avère être plus précise dans tous les points du domaine d'intégration. Une interpolation de degré élevé permet non seulement d'avoir une meilleure représentation des fonctions, mais aussi de calculer son intégrale ainsi que sa dérivée de façon plus précise. Plus de détails sur ce point sont donnés dans la partie dédiée à l'implémentation du code, paragraphe 0.6 de ce chapitre.

Notons que le manque de précision peut se répercuter directement sur la qualité du calcul PGD d'autant plus que la méthode PGD est basée sur une procédure itérative qui utilise les fonctions calculées aux étapes précédentes pour calculer les fonctions des étapes successives. On peut donc penser que plus l'erreur commise à chaque étape est grande, plus elle peut se répercuter sur les étapes suivantes.

La région de stabilité des méthodes Runge-Kutta explicites augmente avec l'ordre des méthodes utilisées. En effet, plus l'ordre de la méthode est élevé, plus l'erreur locale est petite. Pour plus de détails sur ce sujet, le lecteur pourra se référer à (41).
En comparaison à la méthode d'Euler, la méthode de Runge-Kutta à pas adaptatifs permet de réduire le temps de calcul des simulations en limitant le nombre de pas de temps. Néanmoins,

dans le cas particulier des systèmes raides, les méthodes de Runge-Kutta explicites présentent des points faibles : l'estimation de l'erreur de troncature est moins fiable et l'adaptation du pas de temps s'avère être moins efficace. Les méthodes de Runge-Kutta explicites ne sont donc pas classiquement utilisées dans le cas des systèmes raides.

Pour garantir la stabilité de la résolution d'un problème raide, il est possible d'utiliser une méthode A-stable. La condition d'A-stabilité implique que la méthode est stable pour toutes les valeurs positives de *h*. Certaines méthodes implicites, y compris la méthode d'Euler implicite, sont A-stables, mais leur implémentation nécessite la résolution d'un problème non-linéaire à chaque incrément de temps (42). Cette résolution est typiquement faite de façon itérative à travers la méthode de Newton-Raphson. La linéarisation du problème à résoudre à chaque incrément de temps à travers une seule itération de l'algorithme de Newton-Raphson donne naissance aux méthodes dites semi-implicites. Les méthodes semi-implicites sont aussi connues sous le nom de méthodes de Rosenbrock (43).

0.4.3. Les méthodes de Rosenbrock

Les méthodes de Rosenbrock (43) cherchent la solution sous la forme suivante.

$$\begin{aligned} y_{n+1} &= y_n + \sum_{i=1}^{s} (b_i \cdot k_i) \\ (1 - \gamma h f') \cdot k_i &= h \cdot f(y_n + \sum_{j=1}^{i-1} (a_{ij} \cdot k_j)) + h \cdot f' \cdot \sum_{j=1}^{i-1} \gamma_{ij}\, k_j \end{aligned} \tag{0.45}$$

où f' représente la matrice jacobienne de *f*. Les coefficients γ, b_i, α_{ij} et γ_{ij} sont propres à la méthode et ne dépendent pas du système d'équations à résoudre.

Afin de rendre plus efficace la recherche de la solution, on écrit que :

$$h \cdot f(y_n + \sum_{j=1}^{i-1} (a_{ij} \cdot k_j)) + h \cdot f' \cdot \sum_{j=1}^{i-1} \gamma_{ij}\, k_j = g_i = \sum_{j=1}^{i-1} \gamma_{ij} k_j + \gamma k_i \tag{0.46}$$

Le système d'équations qui permet le déroulement de la méthode est donc :

$$\begin{aligned} &\left({}^{1}/_{\gamma h} - f'\right) \cdot g_1 = f(y_0) \\ &\left({}^{1}/_{\gamma h} - f'\right) \cdot g_2 = f(y_0 + a_{21} g_1) + (c_{21} g_1)/h \\ &\left({}^{1}/_{\gamma h} - f'\right) \cdot g_3 = f(y_0 + a_{31} g_1 + a_{32} g_2) + (c_{31} g_1 + c_{32} g_2)/h \\ &\left({}^{1}/_{\gamma h} - f'\right) \cdot g_4 = f(y_0 + a_{41} g_1 + a_{42} g_2 + a_{43} g_3) + (c_{41} g_1 + c_{42} g_2 + c_{43} g_3)/h \end{aligned} \tag{0.47}$$

Afin d'aborder la résolution des problèmes raides dans ce travail, une méthode de Rosenbrock a été utilisée. Pour plus de détails il est possible de consulter le paragraphe sur l'implémentation du code (cf. 0.6) et la partie C où sont présentés les résultats issus de cette application.

0.5.Méthodes de résolution non-linéaires

La présence des termes non-linéaires dans les équations des modèles de thermo oxydation des CMO nécessite d'utiliser une méthode de linéarisation. De nombreuses stratégies de linéarisation ont été couplées à la méthode PGD et sont disponibles dans la littérature (40) (44) (45). La partie B de ce manuscrit est dédiée à la discussion des stratégies de résolution adoptées dans ce travail. Certaines de ces stratégies sont basées sur la méthode de Newton-Raphson qui est rappelée ici.

Considérons un problème non linéaire écrit sous la forme d'un système d'équations

$$[K(u)]\{u\} = \{F\} \tag{0.48}$$

La méthode de Newton-Raphson est une méthode itérative qui consiste à rajouter une certaine quantité à la solution de l'itération précédente jusqu'à convergence :

$$\{u^{i+1}\} = \{u^i\} + \{\Delta u^i\} \tag{0.49}$$

Pour la première itération, la solution $u^{(1)}$ correspond en général à la solution du problème linéaire associé.

En considérant la solution à l'itération i (pas encore convergé), il est possible de calculer un résidu défini comme suit.

$$\{R(u^i)\} = \{F\} - [K(u^i)]\{u^i\} \neq 0 \tag{0.50}$$

En supposant que le résidu $R(u^{i+1})$ est égal à zéro et en développant son expression en série de Taylor, il vient :

$$\begin{aligned} &\{R(u^{i+1})\} = \{R(u^i + \Delta u^i)\} = \{R(u^i)\} + \left[\frac{\partial R}{\partial u}\right]_{u=u^i}\{\Delta u^i\} + \cdots = 0 \\ &[K_t(u^i)]\{\Delta u^i\} = \{R(u^i)\} \end{aligned} \tag{0.51}$$

En ne conservant que les termes d'ordre 1, on obtient :

$$[K_t(u)] = [K(u)] + \left[\frac{\partial [K(u)]}{\partial u}\{u\}\right] \tag{0.52}$$

La méthode de Newton-Raphson consiste donc à réactualiser la matrice tangente K_t à chaque itération. Cette étape peut s'avérer coûteuse. Certaines variantes consistent à ne la réactualiser

que sous certaines conditions. Le traitement des non linéarités avec la méthode PGD est détaillé et illustré Partie B de cette thèse.

0.6. Structure et implémentation du code

Comme cela a été présenté dans les paragraphes précédents, il existe une série de problématiques dans le cadre de la résolution des problèmes de vieillissement des CMO, problèmes modélisés par des équations aux dérivées partielles de différentes formes. Ces modèles peuvent introduire des difficultés numériques spécifiques comme les couplages, les non-linéarités, la raideur. Elles sont toutes rassemblées dans l'exemple de la thermo oxydation décrite par une approche mécanistique (0.05).

Néanmoins dans cette thèse, on examinera un certain nombre de modèles afin de considérer les difficultés numériques les unes après les autres. Il est important de mentionner que certains de ces modèles ne représentent pas nécessairement des phénomènes physiques ou chimiques réels mais ont été choisis afin de mieux cerner et différencier les problématiques numériques.

La ligne directrice suivie doit donc permettre l'étude de la faisabilité et l'efficacité de la méthode PGD pour un grand nombre de modèles. Dans cette optique et afin de maximiser le nombre de cas d'étude possible (couplé ou non, linéaire ou non, raide ou non), une implémentation de la méthode la plus générale possible représente une étape obligatoire de ce travail.

Pour rendre le code le plus flexible possible, la démarche adoptée a été de déterminer un certain nombre de structures qui, à travers des interactions, permettent de dérouler le calcul PGD. Pour cela, le langage de programmation choisi est de type orienté objet et noté OOP (Object Oriented Programming).

Ce type langage, de plus en plus utilisé, vise à diviser la structure des programmes en parties plus simples nommées objets. Les objets peuvent contenir des donnés et exécuter des actions, leur interaction permet d'obtenir le résultat désiré. L'idée à la base de cette programmation est donc de déterminer des entités qui ont un sens physique ou abstrait et d'implémenter leurs caractéristiques.

À titre d'exemple, imaginons vouloir créer un programme qui modélise un essai de traction. Deux objets sont déterminés : la machine de traction et l'éprouvette. La machine de traction génère une force d'un certain type qui interagit avec l'éprouvette. Cette dernière implémente des caractéristiques physiques et subit une déformation qui dépend à la fois de la

force appliquée et de ses propres caractéristiques. On peut imaginer d'implémenter plusieurs types d'éprouvettes avec des caractéristiques totalement différentes et les utiliser avec la même machine virtuelle. Les langages OOP amènent donc avec eux une série d'avantages en termes de modularité, de simplification du code et de gestion de projets de grandes dimensions.

Nous présentons ici une description des principaux objets développés pendant ce travail. Cette description n'est pas exhaustive et elle a pour but de permettre une lecture plus facile de la thèse en donnant les informations essentielles sur les briques les plus importantes de la structure du code et sur la logique du travail développé.

Deux catégories d'objets sont individualisées à l'intérieur du logiciel : des objets de support et des objets de calcul. Les objets de support sont tous les objets qui rendent possibles le stockage des données et l'exécution d'opérations simples. Leur but est de supporter les objets dits de calcul afin de dérouler le calcul PGD.
Les objets de support les plus importants qui ont été développés sont les suivants :

1. **Variable**. Les problèmes à résoudre dépendent en général d'un certain nombre de variables, elles peuvent être de type spatial (x, y, z), temporel (t) ou paramétrique. Les informations principales stockées dans cet objet sont la dimension du domaine et le type de variable. L'ensemble des variables représente le domaine sur lequel le problème est défini.
2. **Fonctions**. Comme déjà discuté dans les sections précédentes, la solution d'un problème à travers la méthode PGD est construite sous forme de somme de produit de fonctions mathématiques $f(x)$ qui dépendent d'une seule variable, x dans ce cas. Il existe plusieurs représentations possibles pour modéliser une fonction mathématique : de manière analytique ou de manière discrète. Pour les représentations discrètes, on trouve par exemple les fonctions basées sur un maillage avec une interpolation de type Lagrange ou Hermite, ou des représentations sans maillage. Dans l'implémentation choisie dans ce travail, le type de fonction choisi est une fonction discrète avec une interpolation lagrangienne. Plus de détails sur le fonctionnement de cet objet sont donnés dans la suite du chapitre.
3. **Discrétisation.** La discrétisation permet de stocker toutes les informations relatives à un maillage de type lagrangien et d'exécuter des opérations simples.
4. **Inconnue**. Une inconnue représente ce que l'on cherche dans la résolution du problème. Par exemple classiquement la température, la concentration ou encore le déplacement

sont des inconnues. Cet objet contient notamment la collection des modes PGD de la solution.

5. **Conditions aux bords et initiales.** Le but de cet objet est celui de stocker les informations sur les conditions initiales et les conditions aux bords. Une discussion plus complète sur l'application de ces conditions sera donnée dans la suite de ce chapitre.
6. **Paramètre.** En général, quand on définit les équations d'un problème, il y a des constantes en produit avec les termes des équations. Ces constantes sont définies en utilisant cet objet.
7. **Terme.** Les problèmes sont définis à travers des équations et chaque équation peut être vue comme une somme de termes.

   Par exemple, l'équation $\frac{\partial O_2}{\partial t} = C_p + D\frac{\partial^2 O_2}{\partial x^2}$ contient trois termes : $\frac{\partial O_2}{\partial t}$, $-C_p$ et $-D\frac{\partial^2 O_2}{\partial x^2}$. Il y a donc deux inconnues (O_2, C_p) et un paramètre (D). Cet objet rend possible la définition du problème PGD à résoudre.
8. **Équation.** L'objet Equation permet de stocker un ensemble de termes qui représentent une équation différentielle. A travers les termes stockés, il est aussi possible d'effectuer des opérations d'analyse du type d'équation.

Le cœur du calcul PGD est implémenté à travers les deux objets suivants :

1. **Problème.** L'objet Problème contient principalement le domaine du problème (liste de variables), la liste de paramètres, la liste des équations, les conditions aux bords et la liste des inconnues. Avec ces informations, une définition complète du problème est donnée. L'implémentation de la méthode PGD est contenue dans cet objet en permettant sa résolution. En d'autre mots, une fois que le problème est correctement défini, il est possible de le résoudre en faisant appel à l'action « solve() ».
2. **Méthode d'intégration.** Cet objet représente une abstraction d'une méthode générique de résolution d'équations différentielles. Précédemment, nous avons vu que pour appliquer la PGD deux types de problèmes devaient être résolus à chaque itération du point fixe afin d'obtenir la solution complète du problème de départ. Ces deux problèmes sont le problème de Cauchy et le problème aux limites. Un schéma d'intégration, une fois initialisé avec la définition d'un problème, permet d'obtenir une nouvelle fonction R solution du problème. Les différentes méthodes de résolution implémentées dans ce travail sont présentées après.

Décrivons plus en détail les objets de support et les objets de calcul implémentés.

0.6.1. Les objets de support

La base sur laquelle s'appuie le logiciel développé est l'objet *fonction*. Pour répondre aux problèmes étudiés dans cette thèse, les objets *fonctions* doivent être capables de fournir une série d'informations :

- La valeur de la fonction pour un point p de son domaine ($f(p)$)
- La valeur de la dérivée de la fonction dans un point p de son domaine ($f'(p)$)
- La valeur de l'intégrale de la fonction sur son domaine ($\int_{x_0}^{x_1} f(x)dx$)
- Une *fonction* qui représente sa propre dérivée ($f'(x)$)

De plus, il est nécessaire de pouvoir multiplier deux fonctions entre elles. Cette opération est faite à partir du principe que les fonctions discrètes de Lagrange sont représentées par un polynôme d'un certain degré sur chaque élément de la discrétisation. La multiplication de deux fonctions est donc la multiplication de deux polynômes sur chaque élément. Le degré de la discrétisation de la fonction résultante est la somme des degrés de deux discrétisations des fonctions de départ.

Ici nous nous limitons à décrire la structure des fonctions de type monodimensionnel discrète avec interpolation de Lagrange. La propriété d'héritage des objets permet l'utilisation de différents types de fonctions dans le même contexte de résolution. Les deux schémas suivants, figure 0.02, montrent les caractéristiques les plus importantes des objets ***discrétisation*** et ***fonction***. D'autres implémentations de types de fonctions sont possibles à condition que ces implémentations fournissent les mêmes possibilités que celles décrites précédemment.

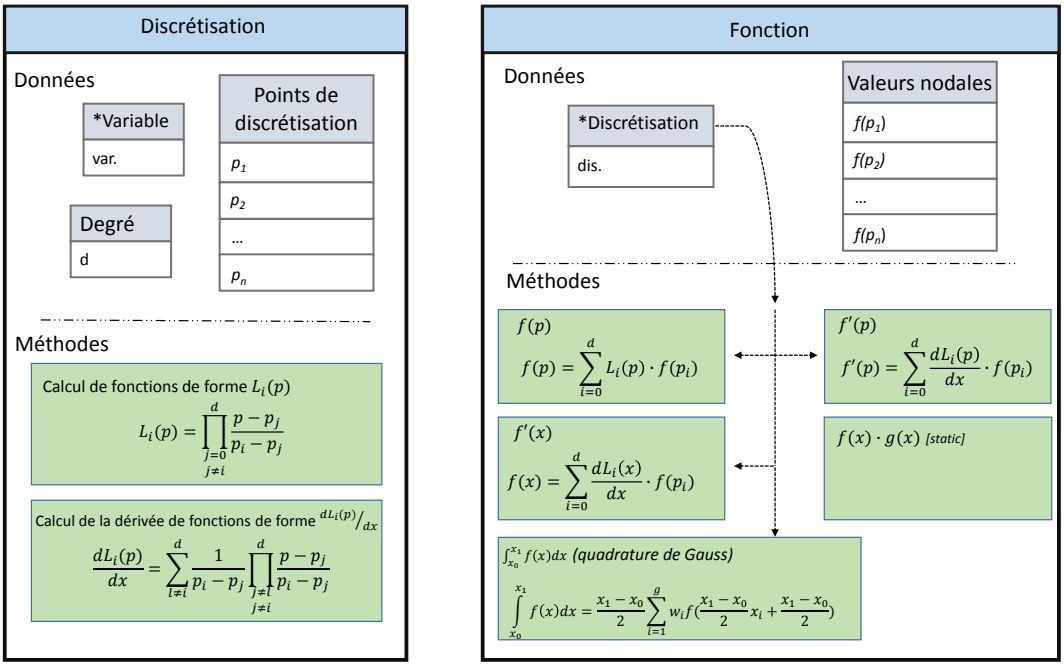


Fig 0.02 : *Schéma objets « discretisation » et « fonction »*

La solution est stockée à travers l'objet ***Inconnue***. Cet objet contient principalement son nom (par exemple « *O2* ») et la collection des modes qui composent la solution. Chaque mode est composé par un nombre de fonctions égal au nombre de variables du problème.

La définition du problème est confiée aux objets ***Equation*** et ***Termes***.

Afin de rendre le code le plus flexible possible, les équations sont définies par l'utilisateur du logiciel à travers une chaîne de caractères. Cette chaîne de caractères subit une opération d'analyse de la syntaxe qui a pour but celui de traduire les informations fournies par l'utilisateur en informations utiles à la résolution du problème.

On considère, à titre d'exemple, l'équation de diffusion Fickienne. Dans ce cas une chaine de caractères représentative de cette équation peut être : dO2/dt=D*d^2O2/dx^2. L'analyse de la syntaxe signalera la présence de deux termes qui sont ensuite initialisés à travers des objets ***terme***. Cet objet contient donc les informations sur la structure et les inconnues présentes dans le terme qui sont le degré et la variable de dérivation. L'objet ***équation*** contient donc simplement une liste de ***termes***. L'ordre d'écriture des termes dans la chaîne de caractères n'influence pas les informations stockées. L'opération d'analyse de syntaxe est aussi capable d'interpréter la présence éventuelle de paramètres, *D* dans l'exemple proposé.

0.6.2. Les objets de calcul

Dans la partie dédiée à l'application de la méthode PGD, les types de problèmes qui doivent être résolus pendant le déroulement de l'algorithme du point fixe, ont été présentés. Ces deux

problèmes sont classiquement résolus à travers des méthodes bien connues dans la littérature. Ces méthodes peuvent avoir des caractéristiques différentes entre elles mais elles ont toutes pour but de trouver une fonction *R* solution d'une équation différentielle. Sur ce principe, on peut garder un niveau de généralisation suffisant et construire un objet polyvalent qui permet de tracter une ou plusieurs équations (avec ses conditions aux bords et/ou initiales) afin d'obtenir sa solution.

L'objet ***méthodes d'intégration*** permet de concrétiser la possibilité d'utiliser la méthode la plus appropriée vis-à-vis des différents problèmes. Par exemple pour un problème raide, la méthode de Rosenbrock est a priori plus efficace que la méthode de Runge-Kutta.

Nous avons exploité la propriété d'héritage des objets qui permet d'implémenter un objet base qui a une structure des données et des méthodes qui peuvent être héritées par un autre objet. Les objets qui héritent de l'objet ***méthode d'intégration*** sont des implémentations de méthodes classiquement présentes dans la littérature.

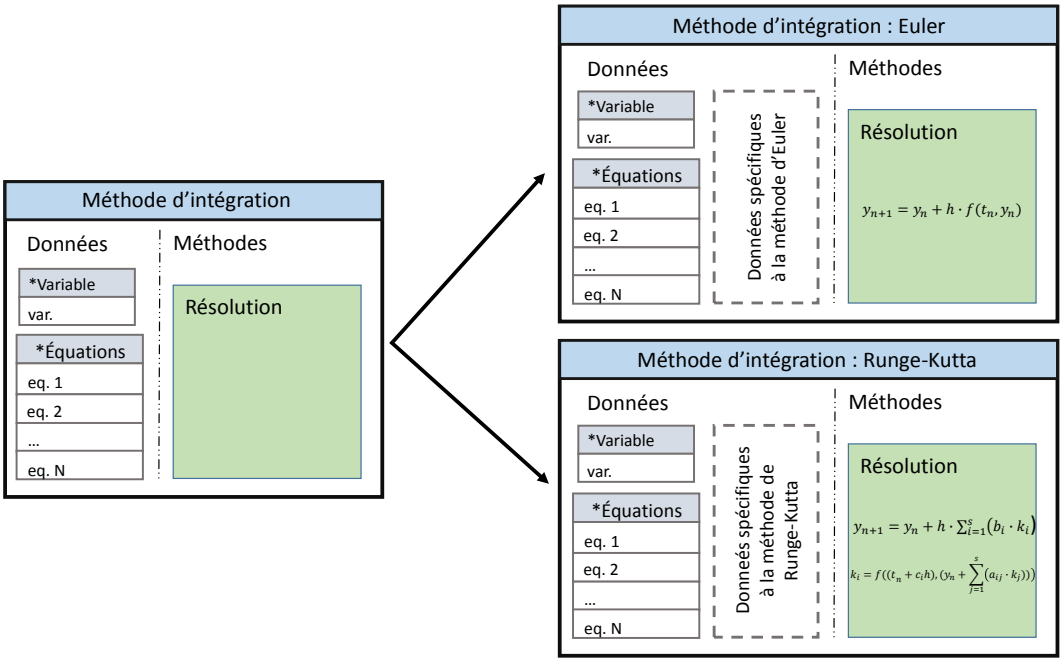


Fig 0.03 : Schéma objet « méthode d'intégration »

Dans la figure 0.03, deux méthodes (Euler et Runge-Kutta) qui héritent les propriétés de l'objet ***méthode d'intégration***. Une ***méthode d'intégration*** peut résoudre une ou plus équations à la fois selon la technique de couplage. Dans le chapitre C, dédié à la résolution des modèles couplés, ce point sera détaillé.

Le principe de l'algorithme du point fixe est de résoudre toutes les équations du problème pour toutes les variables. Un ensemble de ***méthodes d'intégration*** qui fournit toutes les fonctions *R*

à chaque itération du point fixe est donc nécessaire. Cet ensemble peut être défini par l'utilisateur qui a la possibilité d'associer une ou plusieurs équations à une méthode spécifique. La figure suivante montre un exemple d'itération du point fixe dans lequel un problème monodimensionnel non stationnaire est résolu. La définition des *méthodes d'intégration* permet de coupler certaines des équations de façon plus ou moins forte et de manière différente sur chaque variable.

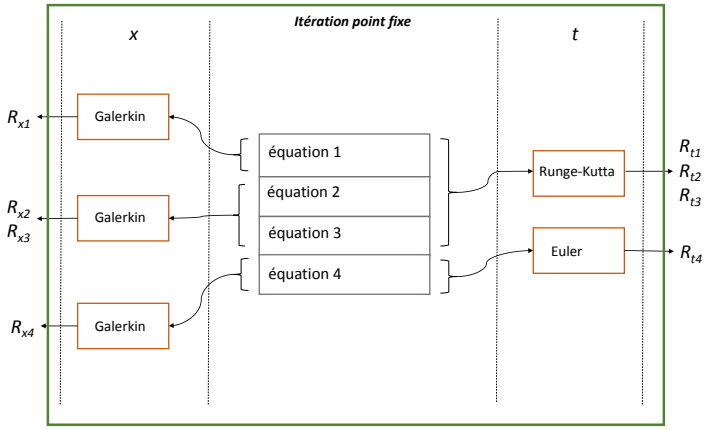


Fig 0.04 : *Exemple d'une itération du point fixe*

Le schéma suivant représente un schéma simplifié des relations possibles pendant la recherche de la solution complète du problème.

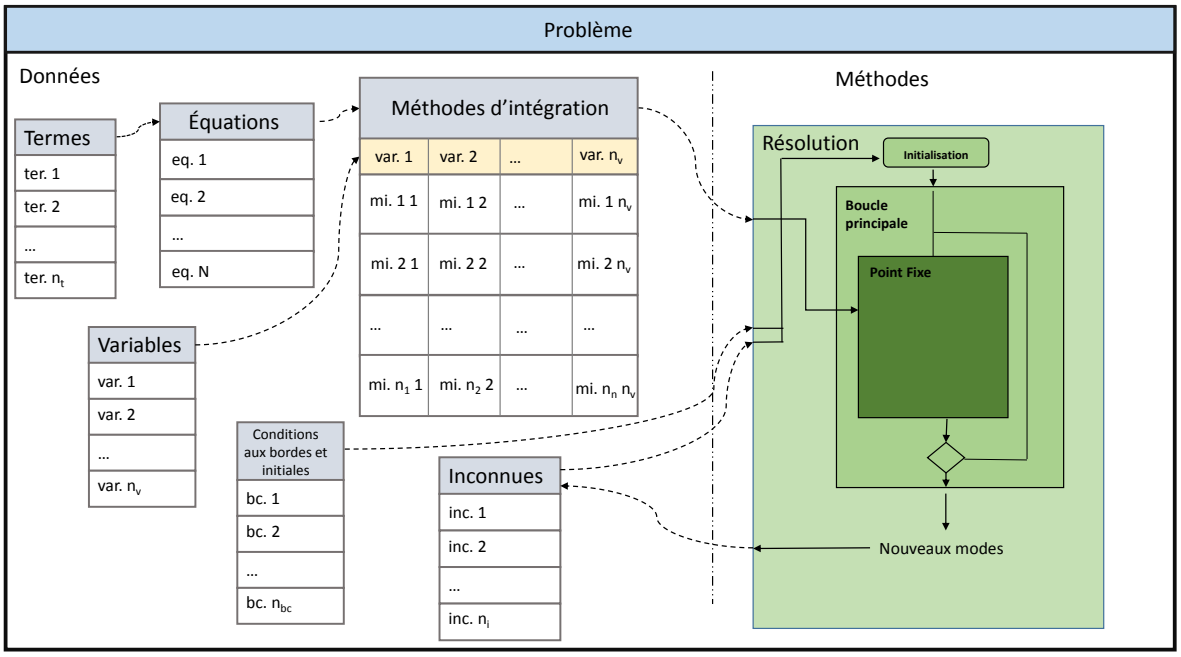


Fig 0.05 : *Schéma objet « problème »*

L'algorithme de résolution part d'une étape d'initialisation qui consiste à appliquer aux inconnues les conditions aux bords et initiales. L'application de ces conditions est faite en rajoutant des modes comme décrit en *0.4*. Une fois l'initialisation terminée, la recherche des modes se fait à l'aide d'une boucle principale qui rajoute des modes aux inconnues jusqu'à ce que le critère d'arrêt soit vérifié. L'algorithme du point fixe consiste en une boucle sur la liste des objets ***méthodes d'intégration*** défini dans le problème pour obtenir l'ensemble des fonctions *R*. Si cet ensemble respecte le critère de convergence du point fixe, il devient automatiquement un nouveau mode.

0.6.3. Implémentations des méthodes d'intégration

Dans ce travail, un nombre limité de méthodes de résolution a été implémenté. Certaines implémentations sont directement issues de la littérature. Il nous semble nécessaire de fournir une brève description des principales caractéristiques des méthodes utilisées pour obtenir les résultats présentés dans ce manuscrit.

Les méthodes utilisées pour résoudre les problèmes dépendants du temps (problèmes de Cauchy) sont :

Euler. L'implémentation de la méthode d'Euler est basée sur la construction d'un système d'équations linéaires construit en fonction de la discrétisation sur laquelle le problème doit être résolu. La façon de construire ce système dépend du problème à résoudre, elle sera mieux expliquée dans les chapitres suivants en fonction des cas traités.

En général le système a la forme suivante :

$$[A]\{R\} = \{B\} \tag{0.53}$$

Afin de résoudre ce système, la librairie de calcul LAPACK (Linear Algebra Package) est utilisée (46).

Runge-Kutta d'ordre 5. L'implémentation choisie pour les méthodes de Runge-Kutta est issue de l'ouvrage Numerical Recipes (42). Il s'agit de l'implémentation de la méthode du 5ème ordre de Dormand-Price. Le code a néanmoins été adapté afin d'être combiné à la PGD tout en conservant toutes les caractéristiques décrites dans l'ouvrage. En particulier, l'algorithme nécessite l'implémentation d'une routine, appelé « derivs », qui décrit les équations du système à résoudre. Le lien entre la méthode et le problème issu de la résolution des itérations du point fixe de la PGD est donc fait à ce niveau. Comme décrit dans le paragraphe 0.4.2 dédié à la méthode Runge-Kutta, la méthode de Runge-Kutta fournit un polynôme pour chaque incrément

temporel qui permet d'interpoler la solution sur l'incrément. Afin de garder intacte toutes les informations issues du calcul, nous avons implémenté une conversion du polynôme fourni par la méthode en élément de Lagrange. En d'autres mots, pour chaque incrément temporel, la fonction R s'enrichit d'un nouvel élément de degré cohérent avec le degré de la méthode. Chaque élément est découpé de façon uniforme par les nœuds et les valeurs nodales sont stockées et égales à la valeur de la fonction calculée par la méthode de Runge-Kutta en chaque point. Si le nombre de points et le degré de la discrétisation sont cohérents avec le degré du polynôme issu du calcul de Runge-Kutta, aucune perte d'informations n'a lieu. Cette conversion permet d'utiliser les objets développés dans ce travail.

Rosenbrock. De la même façon que pour la méthode de Runge-Kutta, pour la méthode de Rosenbrock nous avons choisi l'implémentation issue du même ouvrage (42). Les mêmes adaptations que pour l'implémentation de Runge-Kutta sont appliquées à la méthode de Rosenbrock. Remarquons que pour la méthode de Rosenbrock, l'implémentation du calcul de la matrice jacobienne complète est nécessaire. Pour cette raison, nous avons implémenté une routine capable de construire la matrice jacobienne à partir du problème à résoudre.

La méthode utilisée pour la résolution des problèmes qui dépendent de l'espace (problèmes aux limites) est une implémentation basée sur la méthode de Galerkin. Pour cette méthode comme pour la méthode d'Euler, cela mène à la construction d'un système d'équations linéaire à résoudre à chaque itération du point fixe.

0.7. Conclusion

Dans cette partie introductive nous nous sommes focalisés sur la définition des objectifs principaux de ce travail de thèse et sur l'identification des principales difficultés numériques liées aux applications visées, en particulier la diffusion d'oxygène qui peut avoir lieu dans les matrices des composites à matrice organique. Ce phénomène peut faire propager un autre phénomène, la thermo oxydation qui génère des changements dans la structure chimique du matériau avec une probable perte de performances des pièces fabriquées.

De la description des modèles qui décrivent les phénomènes de diffusion et de thermo oxydation, nous avons mis en avant trois particularités qui doivent être impérativement prises en compte pendant la résolution de ces modèles à travers des méthodes numériques adaptées :

le couplage, la non linéarité et la raideur. Chacune de ces particularités doit donc être analysée vis-à-vis de l'utilisation de la méthode PGD.
Une brève description de la méthode PGD nous permet ensuite d'avoir accès aux informations les plus importantes concernant l'algorithme à mettre en place. A travers une simple application de la méthode au problème de diffusion monodimensionnel, nous avons mis en évidence que la méthode PGD divise le problème à tracter en plusieurs problèmes plus simples. Les types de ces problèmes sont bien connus dans la littérature et leur résolution est classiquement faite à travers des méthodes spécifiques. Une discussion sur certaines de ces méthodes est structurée afin d'avoir les éléments essentiels concernant les problèmes numériques auxquels nous serons confrontés lors de la résolution PGD.
Des outils informatiques ont été développés dans ce travail pour aborder les problématiques numériques prises chacune individuellement puis regroupées. Ces outils forment un logiciel PGD implémenté et ensuite utilisé pour générer les résultats présentés dans ce document.
Une série d'exemples avec des difficultés numériques croissantes sont proposés dans le but de focaliser l'attention sur l'effet de chaque difficulté numérique isolée.

Le but de cette thèse est d'enrichir la compréhension des problématiques liées à l'utilisation de la méthode PGD dans le cas des équations de diffusion, diffusion-réaction, raides et non linéaires et de discuter les avantages et les verrous liés à l'utilisation de cette méthode.

Le manuscrit est organisé de la manière suivante :
Dans la **partie A**, la méthode PGD est détaillée pour l'équation de diffusion Fickienne 1D. Dans cette thèse, on considère que la nonlinéarité induite par l'écriture de la solution sous forme séparée est résolue avec la méthode du point fixe à directions alternées. L'influence du choix des modes pour décrire les conditions initiales et aux bords sur le déroulement de l'algorithme PGD est étudiée avec notamment son impact sur l'erreur et la convergence de la méthode. Ensuite les problèmes de stabilité lors de la recherche des fonctions temporelles sont discutés de façon précise. Il est montré que l'utilisation d'un schéma d'Euler explicite peut nécessiter des discrétisations très fines. Une étude plus rapide concernant les modes spatiaux est présentée. Enfin, une alternative au schéma d'Euler explicite est proposée et implémentée, il s'agit d'une méthode de Runge-Kutta à pas adaptif qui permet que la discrétisation temporelle soit adaptée automatiquement et mène ainsi à des temps de calcul moins élevés et une meilleure précision pour un nombre fixé de modes.

Dans la **partie B**, la résolution de nonlinéarités à travers la méthode PGD est étudiée à travers deux méthodes de linéarisation basées toutes les deux sur un algorithme de Newton-Raphson. Dans la première méthode, les itérations de la méthode de Newton-Raphson coïncident avec les itérations de la méthode de point fixe à directions alternées alors que dans la deuxième méthode, les itérations de Newton-Raphson sont à l'intérieur d'une itération de point fixe. La deuxième méthode permet de prendre en compte la nonlinéarité avec un nombre de modes plus faible et ne nécessite pas de ce fait un temps de calcul plus important pour une précision donnée.

Dans la **partie C**, les équations de diffusion-réaction sont étudiées. Tout d'abord, une première étude est menée sur la prise en compte du couplage. Deux stratégies sont discutées et consiste à considérer le couplage de la même façon que la nonlinéarité dans le chapitre précédent. Trois problèmes de diffusion réaction linéaires sont ensuite discutés enfin d'étudier des systèmes plus ou moins raides. Lorsque le système devient raide, l'algorithme de Runge-Kutta ne permet plus de calculer les fonctions temporelles nécessitant elles aussi un trop grand nombre de points de discrétisation. Une méthode alternative est donc proposée : la méthode de Rosenbrock. Elle permet de prédire la solution pour les systèmes raides avec un nombre de points de discrétisation réduit. Cette méthode est ensuite appliquée pour les équations de diffusion-réaction raides non linéaires et en particulier le modèle de thermo-oxydation de Colin.

Enfin, une dernière partie présentera un résumé de ce travail suivi des conclusions et des perspectives de recherche envisageables.

Partie A. Problèmes de diffusion, loi de Fick

Partie A. Problèmes de diffusion, loi de Fick 38.

A.1. Loi de Fick 1D ; définition du problème 39.

A.1.1. Solutions de référence 40.

A.1.2. Résolution PGD du problème diffusion 1D 45.

A.2. Application des conditions aux bords et initiales 48.

A.3. Stabilité et convergence 54.

A.3.1. Recherche des fonctions en temps 54.

A.3.2. Recherche des fonctions en espace 59.

A.4. Propagation de l'erreur 60.

A.5. Résolution des modes temporels avec la méthode de Runge-Kutta 64.

A.6. Conclusions de la partie A 71.

L'objectif de ce chapitre est d'analyser le comportement de la méthode PGD classique (7) pour la résolution d'un problème de diffusion Fickienne. Par souci de clarté, nous nous restreignons au cas monodimensionnel. Après avoir présenté le problème étudié, ainsi que les solutions de référence que nous utiliserons pour discuter la solution PGD, l'algorithme de résolution PGD est présenté. L'influence du choix de la représentation des conditions initiales et aux bords sur les modes PGD est ensuite étudiée. Les équations à résoudre pour déterminer les fonctions spatiales et les fonctions temporelles sont ensuite discutées d'un point de vue de la stabilité et de la convergence. L'influence du maillage sur les modes PGD est étudiée. Enfin une méthode alternative au schéma classique d'Euler explicite pour la détermination des fonctions temporelles, la méthode de Runge-Kutta est présentée et discutée.

A.1. Présentation du problème 1D

Dans cette partie, nous nous limitons à un problème de diffusion monodimensionnel décrit par la loi de Fick. Ce type de modèle est très utilisé dans le cadre du vieillissement des matériaux polymères utilisés dans la fabrication des composites à matrice organique CMO. Le problème de l'oxydation est ici simplifié au cas où l'on considère l'évolution de la concentration d'oxygène dans une éprouvette qui possède une des trois dimensions d'espace, notée x, beaucoup plus petite que les deux autres (hypothèse de plaque mince). De cette manière le problème devient monodimensionnel en espace et la concentration d'oxygène évolue selon l'équation A.01.

$$\frac{\partial O_2}{\partial t} = D \cdot \frac{\partial^2 O_2}{\partial x^2} \qquad \text{(A.01)}$$

où O_2 représente la concentration d'oxygène à l'intérieur du matériau et D est le coefficient de diffusion, propre au matériau.

Pour traiter ce problème, dans la suite du chapitre, on considère $t \in [0, 10]$, $x \in [0, 2]$, $D=0.1$, avec une condition initiale nulle ($O_2(x, t=0)=0$) et des conditions aux bords constantes et égales à 1 ($O_2(x=0, t) = O_2(x=2, t)=1$).

Remarque nous n'avons pas indiqué les unités de mesure car notre cas est purement illustratif et ne représente pas un problème physique.

Notons que les conclusions faites dans ce chapitre ne sont pas dépendantes de ces données et peuvent être rencontrées pour d'autres valeurs de conditions initiales et aux bords, d'autres domaines et une autre valeur du coefficient de diffusion.

A.1.1.Solutions de référence

Afin d'évaluer la qualité de la solution PGD, deux solutions dites de référence au problème A.01 sont calculées, une obtenue de manière analytique et, l'autre de manière numérique à travers un schéma de discrétisation aux différences finies.

Pour comparer les différentes solutions, l'écart est calculé sur une grille, ayant pour dimension *x* et *t*, régulière de 1500x1500 points à l'aide de la relation suivante :

$$e = \sqrt{\frac{\sum_i^{n_x}\sum_j^{n_t}(Sol(i,j) - Sol_{ref}(i,j))^2}{\sum_i^{n_x}\sum_j^{n_t}(Sol_{ref}(i,j))^2}} \qquad \text{(A.02)}$$

Où *Sol* représente la solution calculée et Sol_{ref} la solution de référence. L'indice *i* représente la discrétisation spatiale et l'indice j la discrétisation temporelle.

La solution analytique du problème de diffusion monodimensionnel non-stationnaire avec conditions aux bords fixes et condition initiale nulle s'écrit sous la forme suivante (20) :

$$O_2(x,t) = 1 - \frac{4}{\pi}\sum_{j=0}^{\infty}\left(\frac{1}{2j+1}\cdot \sin\frac{(2j+1)\pi x}{L}\cdot e^{-\frac{(2j+1)^2\pi^2 Dt}{L^2}}\right) \qquad \text{(A.03)}$$

La solution analytique calculée en considérant 500 termes dans la somme (cf. équation A.03) est représentée sur la figure A.01. La solution part d'une valeur nulle dans le domaine spatial *x* à l'instant *t=0* ; ensuite au fur et à mesure que le temps évolue, l'oxygène pénètre dans l'éprouvette et sa concentration augmente, c'est pour cette raison que la solution croit. Cette évolution est due au fait qu'aux bords du domaine spatial la concentration d'oxygène est fixée à 1, tandis qu'à l'intérieur pour *t=0* la concentration d'oxygène est égale à 0. La vitesse avec laquelle la concentration augmente dépend directement de la valeur du coefficient *D*. La concentration d'oxygène n'atteint pas ici la saturation, car nous avons voulu nous focaliser sur l'étude du régime transitoire, régime où l'erreur des méthodes numériques est généralement la plus élevée.

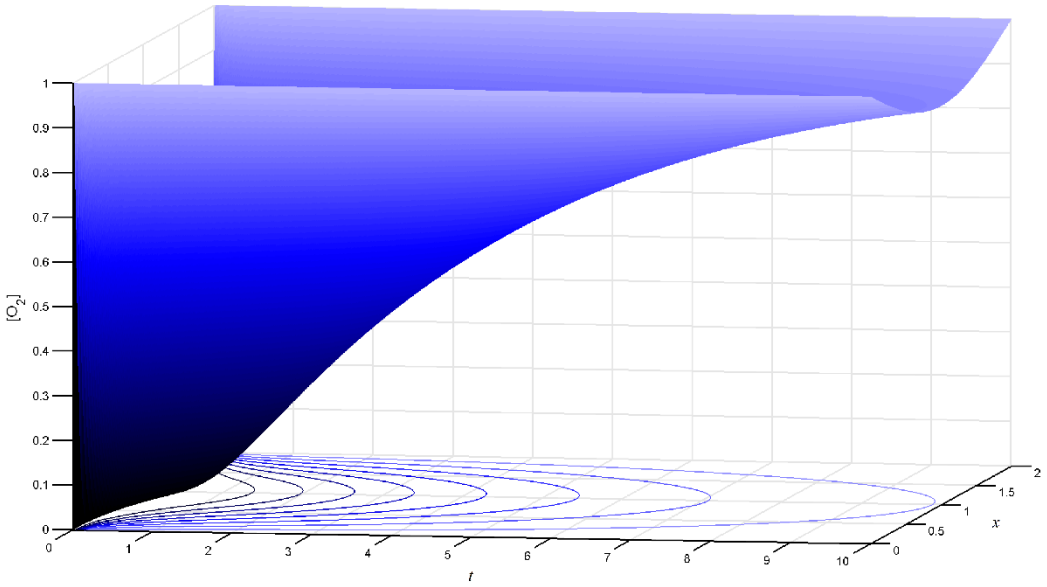


Fig.A.01 : *Représentation de la solution analytique du problème A.01*

La solution numérique de référence est obtenue en discrétisant l'équation de diffusion A.01 en *N* points équidistants pour le domaine spatial et en appliquant un schéma aux différences finies qui mène à la résolution d'un système d'équations différentielles ordinaires A.04. Chaque équation décrit l'évolution de la concentration d'oxygène dans un point de l'espace *i* (47). À travers des opérations d'interpolation linéaire, il est possible d'obtenir la solution sur la totalité du domaine.

$$\frac{dO_{2(i)}}{dt} = D \cdot \frac{O_{2(i-1)} - 2O_{2(i)} + O_{2(i+1)}}{\Delta x^2} \qquad \text{Avec} \quad i = 2, \dots, N-1 \qquad \text{(A.04)}$$

Où l'indice i correspond à la discrétisation spatiale du champ de la variable O_2 et $O_2(1)$ et $O_2(N)$ correspondent aux conditions aux bords.

Ce système est ensuite résolu par un des solveurs d'équations différentielles ordinaires disponibles dans le logiciel commercial MATLAB®. Ces solveurs utilisent des implémentations de la méthode Runge-Kutta. Chaque implémentation peut-être plus ou moins performante par rapport au problème à résoudre, en fournissant une solution plus ou moins précise en temps et plus ou moins rapide. Pour plus de détails concernant les différents solveurs de Matlab®, le lecteur pourra se référer à la documentation en ligne (48). Pour ce type de système, nous utilisons d'abord la méthode ODE45 implémentée dans Matlab®. Cette méthode, parmi toutes celles disponibles, représente un bon compromis entre le temps de calcul et la précision. C'est une méthode dite d'ordre 5 qui permet une estimation de l'erreur de troncature à travers la différence entre la solution et une solution intermédiaire calculée sur un polynôme de degré 4. L'estimation de l'erreur de troncature sert à calculer la dimension du pas de temps

au fur et à mesure de l'avancement du calcul. La taille du pas de temps entre un instant et le suivant est donc fonction de la méthode et du problème et doit garantir une bonne stabilité de la solution pendant le calcul.

Le nombre d'équations du système, égal dans ce cas au nombre de points de discrétisation en espace présents dans le système A.04, permet a priori d'avoir une solution globale plus ou moins précise. Une première étude est donc menée pour mettre en évidence l'influence de ce paramètre sur la qualité de la solution trouvée. L'évolution de l'erreur *e* entre la solution numérique obtenue par ODE45 et la solution analytique est donnée figure A.02 en fonction du nombre de points de discrétisation spatiale.

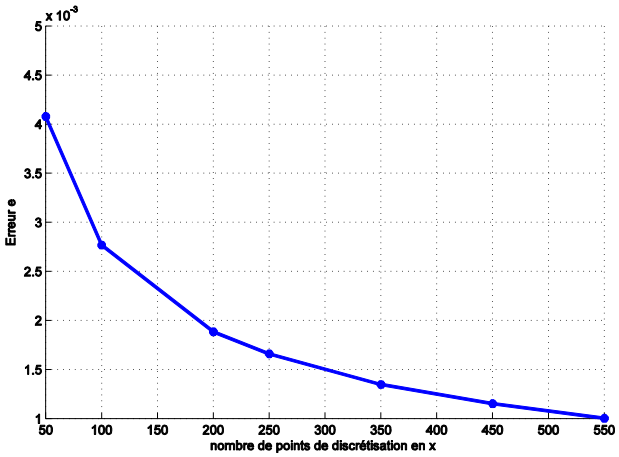


Fig.A.02 : *Représentation de l'erreur de la solution ODE45 par rapport à la solution analytique en fonction de la discrétisation spatiale*

L'utilisation de la méthode ODE45 permet d'avoir de manière automatique un pas de temps qui garantit la stabilité de la méthode à chaque incrément temporel quelle que soit la discrétisation spatiale considérée. Le nombre total de points de discrétisation temporelle utilisée par la méthode ODE45 est donné en fonction du nombre de points de discrétisation spatiale sur la figure A.03 de gauche. Le temps de calcul est représenté en fonction du nombre de points de discrétisation spatiale sur la figure A.03 de droite.

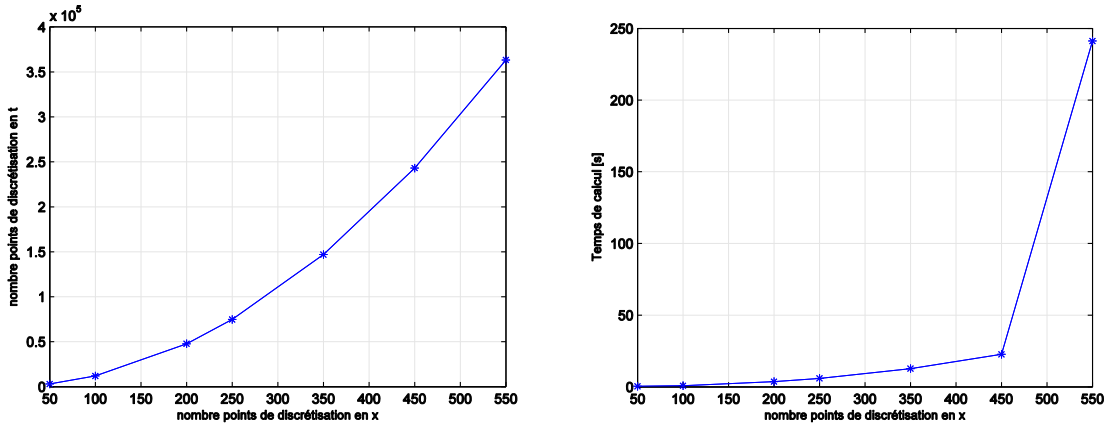


Fig.A.03 : *Représentation du nombre de points de discrétisation temporelle et du temps de calcul en fonction de la discrétisation spatiale*

L'utilisation de la méthode ODE45 nécessite de considérer un nombre de points de discrétisation temporelle qui augmente avec le nombre de points de la discrétisation spatiale. Le temps de calcul augmente donc de manière drastique notamment pour un nombre de points en espace supérieur à 450 comme illustré sur la figure A.03 de droite. Ce phénomène peut être associé à une saturation de la mémoire vive de la machine sur laquelle l'analyse a été effectuée, liée au grand nombre de données. Cette saturation amène une série de problèmes informatiques de gestion de données qui peut en ralentir la résolution. Nous n'analyserons pas plus en détails ce phénomène.

La nécessité d'un plus grand nombre de points de discrétisation temporelle, au fur et à mesure que le nombre de points en espace augmente, peut indiquer que les systèmes d'équations différentielles sont de plus en plus raides. En fait, l'utilisation d'un schéma de discrétisation spatiale dans une équation aux dérivées partielles peut induire, dans certains cas, un système d'équations différentielles ordinaires de type raide (36) (49).

Comme dit dans le chapitre précédent, la raideur d'un système est une caractéristique pour laquelle la résolution du système lui-même peut devenir plus difficile. Les méthodes de résolution doivent donc être capables, même dans un cas de systèmes raides, de choisir un pas de temps qui garantit à la fois la stabilité de la solution et une bonne approximation de la solution. Dans ce cadre, certaines méthodes sont particulièrement performantes. Dans la collection des méthodes implémentées dans MATLAB®, on trouve notamment la méthode ODE23tb (50). Même si cette méthode possède une précision plus petite que celle de la méthode ODE45, elle montre des performances plus élevées pour la résolution des problèmes raides comme illustré figure A.04.

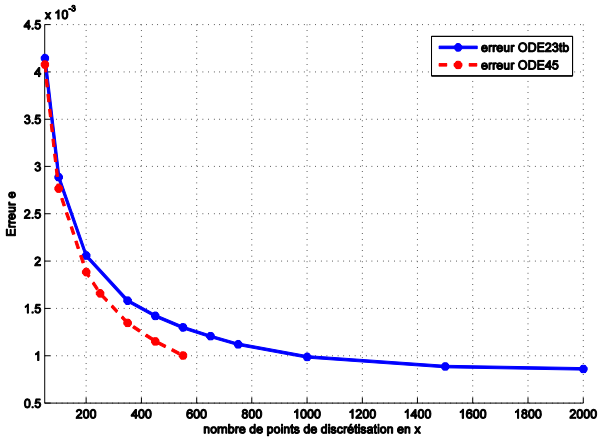


Fig.A.04 : *Représentation de l'erreur en fonction de la discrétisation spatiale pour deux méthodes de résolution des équations différentielles implémentées dans MATLAB® : ODE45 et ODE23tb.*

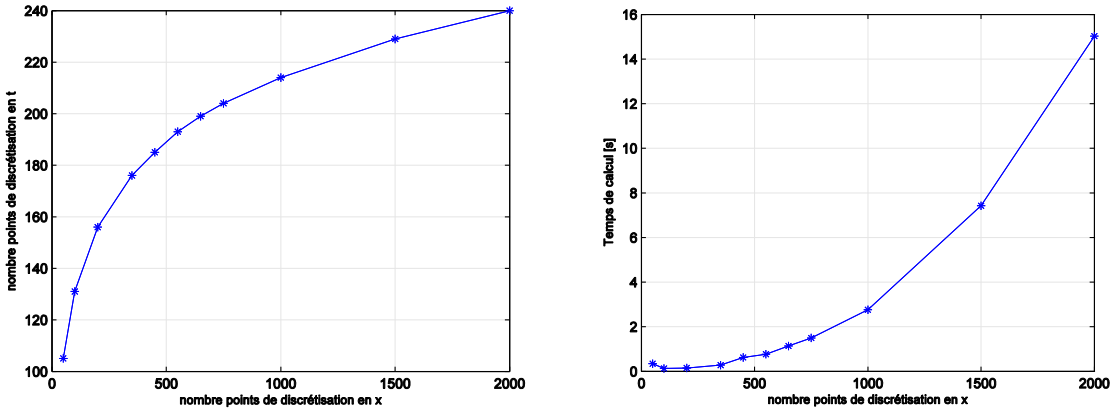


Fig.A.05 : *Représentation du nombre de points de discrétisation temporelle (à gauche) et du temps de calcul (à droite) en fonction de la discrétisation spatiale pour le solveur ODE23tb.*

La figure A.05 montre une diminution drastique des points de discrétisation temporelle en fonction de la discrétisation spatiale et par suite du temps de calcul en comparaison des résultats obtenus avec la méthode ODE45. L'erreur *e* en fonction de la discrétisation spatiale est inférieure avec la méthode ODE45 comparativement à la méthode ODE23tb comme illustré figure A.04. Ce résultat est cohérent avec la documentation concernant les méthodes ODE de MATLAB®. On peut remarquer que nous n'avons pas testé un maillage trop dense en espace pour la méthode ODE45 en raison des temps de calculs élevés de cette méthode (lié au nombre de points de discrétisation temporelle associé).

A.1.2.Résolution PGD du problème diffusion 1D

Comme déjà vu dans le chapitre précédent, l'application de la méthode PGD au problème de diffusion de Fick mène à l'équation suivante pour une itération de point fixe lors de la recherche de la fonction spatiale de l'enrichissement *n+1* :

$$\int_x \int_t (R^{x*}R^t)\,(R^x \frac{\partial R^t}{\partial t} - D\frac{\partial^2 R^x}{\partial x^2} R^t\,)dxdt = \int_x \int_t (R^{x*}R^t)\,(-\sum_{i=1}^{n}(F_i^x \frac{\partial F_i^t}{\partial t} - D\frac{\partial^2 F_i^x}{\partial x^2} F_i^t))\,dxdt \quad \text{(A.05)}$$

Le membre de droite représente le terme connu de l'équation. La seule fonction inconnue de l'équation A.05 est R^x. Cette fonction peut être trouvée sous forme discrète. Supposons pour l'instant que nous utilisons les algorithmes classiques : la méthode d'Euler pour le temps et la méthode de Galerkin pour l'espace.

La discrétisation de la fonction inconnue suivie de la double intégration (sur le domaine *x* et *t*) permet d'obtenir un système d'équations linéaires A.06 écrit sous forme matricielle et facilement résoluble par une méthode appropriée.

$$[A_x]\{R^x\} = \{B_x\} \quad \text{(A.06)}$$

Détaillons les passages pour obtenir le système A.06. La construction de ce système est faite à partir des contributions des termes présents dans l'équation A.01 soit dans notre exemple $\frac{\partial O_2}{\partial t}$ et $-D\frac{\partial^2 O_2}{\partial x^2}$.

De façon générale, on peut considérer que chaque terme de l'équation qu'on veut résoudre apporte une contribution dans la matrice *A* et dans le vecteur *B*.

$$[A_x]_{\frac{\partial O_2}{\partial t}}\{R^x\} - [A_x]_{\frac{\partial^2 O_2}{\partial x^2}}\{R^x\} = -\{B_x\}_{\frac{\partial O_2}{\partial t}} + \{B_x\}_{\frac{\partial^2 O_2}{\partial x^2}} \quad \text{(A.07)}$$

Les deux termes s'écrivent comme indiqué dans le tableau A.08.

Terme	Contribution
$\frac{\partial O_2}{\partial t}$	$\underbrace{\sum_{i=1}^{n}\left(\int_x R^{x*}F^{xi}dx \int_t R^t \frac{\partial F^{ti}}{\partial t}dt\right)}_{\{B_x\}_{\frac{\partial O_2}{\partial t}}} + \underbrace{\int_x R^{x*}R^x dx \int_t R^t \frac{\partial R^t}{\partial t}dt}_{[A_x]_{\frac{\partial O_2}{\partial t}}}$
$D\frac{\partial^2 O_2}{\partial x^2}$	$\underbrace{-D\sum_{i=1}^{n}\left(\int_x \frac{\partial R^{x*}}{\partial x}\frac{\partial F^{xi}}{\partial x}dx \int_t R^t F^{ti}dt\right)}_{\{B_x\}_{\frac{\partial^2 O_2}{\partial x^2}}} \underbrace{- D\int_x \frac{\partial R^{x*}}{\partial x}\frac{\partial R^x}{\partial x}dx \int_t R^t R^t dt}_{[A_x]_{\frac{\partial^2 O_2}{\partial x^2}}}$

Tab A.08 *: contributions à la construction du système (A.06) des termes de l'équation (A.01)*

Le deuxième terme de l'équation A.07, pour lequel une dérivée seconde est nécessaire, est écrit après une opération d'intégration par parties pour réduire le degré de dérivation des fonctions. Cette opération est nécessaire car on souhaite utiliser des fonctions d'interpolation linéaire dans l'étape de discrétisation. Cette écriture prend donc en compte l'application des conditions aux bords et des conditions initiales nulles lors de la recherche du mode (cf. paragraphe 0.3.1).

Il est maintenant utile d'organiser la construction des contributions au système A.06 des termes de l'équation avec une stratégie qui permette une contextualisation facile à l'intérieur de l'algorithme de résolution. Les opérations décrites ici sont exécutées par le logiciel développé dans ce travail à travers l'implémentation d'un objet spécifique.

Pour ce qui concerne les contributions de la matrice A, on remarque que les termes présents dans les modèles étudiés dans ce travail contiennent des dérivées de degré inférieur ou égal à 2. La construction de la matrice$[A]_T$, pour un terme générique *T*, se différencie donc selon trois cas :

Degré 0 : ce cas se produit soit si dans le terme *T* il n'y a pas de dérivées, soit si les dérivées présentes le sont par rapport à une variable différente de celle de la fonction *R* recherchée (comme par exemple dans le terme $\frac{\partial O_2}{\partial t}$ lors de la recherche de R_x).

Degré 1 : ce cas se produit si le terme *T* contient une dérivée première par rapport à la variable de la fonction *R* recherchée.

Degré 2 : ce cas se produit si le terme *T* contient une dérivée seconde par rapport à la variable de la fonction *R* recherchée. A noter que ce cas implique une opération d'intégration par parties comme présentée dans le tableau A.01.

L'écriture des fonctions *R* sous forme discrétisée mène à l'expression A.09

$$R^x = \{R^x\}\{N\} \qquad \text{(A.09)}$$

où $\{N\}$ représente les fonctions de forme et $\{R^x\}$ représente le vecteur des valeurs nodales. Le tableau A.10 illustre la construction de la matrice $[A]_T$.

Type	$[A]_T\{R^x\}$
Degré 0	$K \int_{\Omega_x} R^{x*}R^x dx = K\{R^{x*}\} \int_{\Omega_x} \{N^x\}\{N^x\}' dx \ \{R^x\} = K\{R^{x*}\}[A]\,\{R^x\}$
Degré 1	$K \int_{\Omega_x} R^{x*} \frac{\partial R^x}{\partial x} dx = K\{R^{x*}\} \int_{\Omega_x} \{N^x\}\{dN^x\}' dx \ \{R^x\} = K\{R^{x*}\}[A]\,\{R^x\}$
Degré 2	$K \int_{\Omega_x} \frac{\partial R^{x*}}{\partial x} \frac{\partial R^x}{\partial x} dx = K\{R^{x*}\} \int_{\Omega_x} \{dN^x\}\{dN^x\}' dx \ \{R^x\} = K\{R^{x*}\}[A]\,\{R^x\}$

Tab A.10 *: les différents types de contributions à la matrice* $[A]_T$

Les coefficients notés *K* dans le tableau A.10 représentent le produit des paramètres présents dans le terme considéré et des intégrales sur tous les domaines différents de celui de la fonction recherchée. Prenons par exemple le terme $\frac{\partial^2 O_2}{\partial x^2}$ et rappelons que nous avons pris ici l'exemple de la recherche de la fonction spatiale. Le coefficient *K* sera donc :

$$K = -D \int_{\Omega_t} R^t R^t dt \qquad \text{(A.11)}$$

Les intégrales présentes dans l'écriture du coefficient *K* sont calculées avec la méthode de quadrature de Gauss-Legendre. Les coefficients (poids et points) utilisés pour la méthode de quadrature sont issus de la littérature (51).

Les vecteurs $\{B\}_T$ sont calculés de manière analogue aux matrices $[A]_T$. Ces vecteurs représentent les contributions du système A.05 qui ne contiennent pas la fonction *R* recherchée (cf. tableau A.08).

Dans le cas où une méthode de type Runge-Kutta ou Rosenbrock est utilisée pour calculer les fonctions temporelles, le système (équivalent à A.05 pour la fonction temporelle) n'est pas écrit sous la forme d'un système linéaire $[A_t]\{R^t\} = \{B_t\}$ mais sous la forme d'un système d'équations différentielles du type $R_t' = f(R_t, t)$. Une routine spécifique « derivs » (cf. paragraphe 0.6.3) a été implémentée pour l'évaluation des termes du tableau A.08.

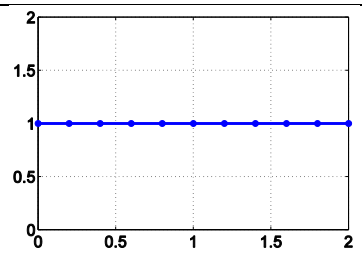
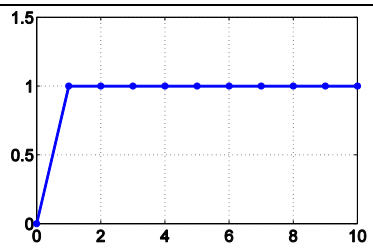
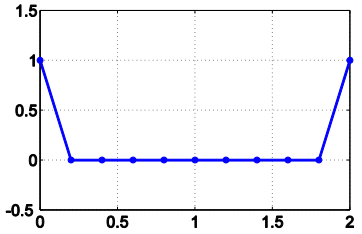
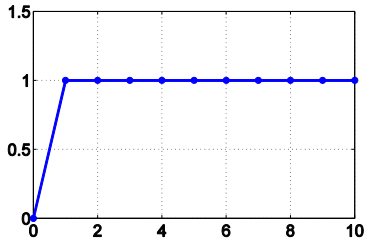
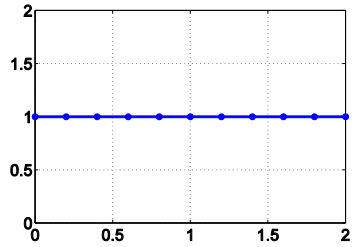
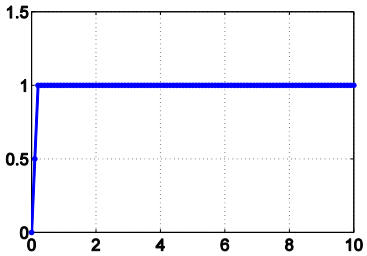
A.2. Application des conditions aux bords et initiales

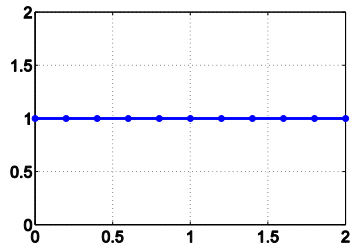
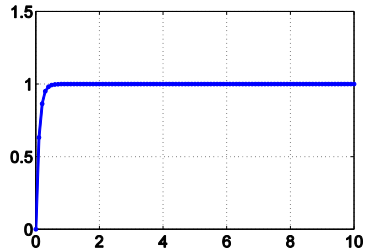
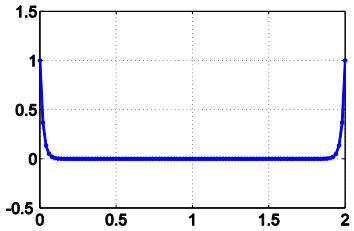
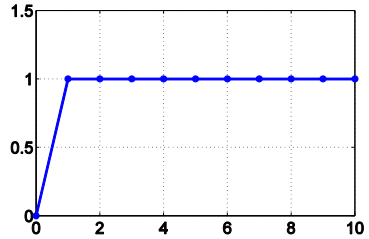
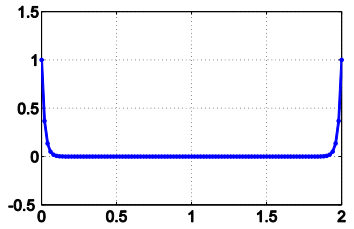
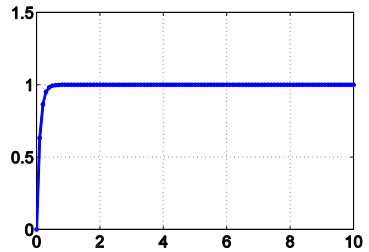
Dans le problème de diffusion monodimensionnelle que nous avons choisi de traiter (équation A.01), les conditions aux bords appliquées à l'inconnue O_2 sont constantes et égales à *1*. La stratégie utilisée pour l'application des conditions aux bords a été décrite dans le chapitre précédent 0.3.1. Cette technique est basée sur l'introduction dans la solution d'un mode artificiel qui respecte les conditions aux bords et initiales du problème.

Le choix du mode artificiel n'est pas unique. Dans l'exemple que nous avons choisi (conditions aux bords égales à 1 et condition initiale nulle), plusieurs modes peuvent être choisis. Nous allons maintenant étudier l'influence du choix de ces modes sur le déroulement de l'algorithme PGD.

Pour décrire les conditions aux bords et initiales, 6 types de modes différents ont été testés. Le tableau A.12 résume la forme des fonctions spatiales et temporelles utilisées pour créer notre ensemble de modes initiaux possibles pour le problème considéré.

Remarque. Par souci de visibilité, les maillages montrés pour les différentes fonctions ne représentent pas les maillages utilisés pour les simulations.

	$F_0^x(x)$	$F_0^t(t)$
Type 1		
Type 2		
Type 3		

Type 4		
Type 5		
Type 6		

Tab A.12 *: Types de modes pour l'application des conditions aux bords et initiales*

Pour le mode de type 1, la fonction en espace est constante sur tout le domaine, alors que pour le mode de type 2 la fonction en espace est égale à zéro sur tout le domaine sauf pour les nœuds aux bords. Dans ces deux premiers types de modes, la fonction en temps est la même et sa valeur est constante sur tout le domaine sauf pour l'instant initial. Comme seul le premier nœud de la fonction temporelle est fixé à zéro, la vitesse avec laquelle la concentration d'oxygène sur le bord atteint la valeur 1 dépend fortement de la discrétisation temporelle. En d'autres termes, pour ces deux types de modes, plus le maillage temporel est fin, plus le temps au bout duquel la valeur aux bords respecte les conditions aux bords est petit.

Pour le mode de type 3, une rampe est utilisée pour l'application des conditions aux bords, la vitesse avec laquelle la valeur 1 est atteinte sur les bords devient donc indépendante du maillage temporel.

Le mode de type 4 conserve la même logique que le précédent, mais au lieu d'appliquer une rampe, on applique une fonction spécifique (A.13) qui permet d'avoir une variation de la fonction plus régulière.

$$F_0^t(t) = 1 - e^{-t/\tau L} \qquad \text{(A.13)}$$

Les modes de type 5 et de type 6 différent des deux précédents par la fonction spatiale utilisée définie en A.14. Cela permet de limiter la dépendance du mode initial au maillage spatial (la dérivée au point initial et final étant fixée).

$$F_0^x(x) = e^{-x/\tau L} + e^{(x-L)/\tau L} \qquad \text{(A.14)}$$

L'erreur commise par la méthode PGD en fonction du nombre de modes est illustrée figure A.06 pour les différents types de conditions aux bords. Cette erreur est calculée comme décrit équation A.02 en utilisant la solution analytique comme solution de référence. Les simulations PGD ont été menées avec un maillage régulier de 500 éléments en temps et 400 éléments en espace.

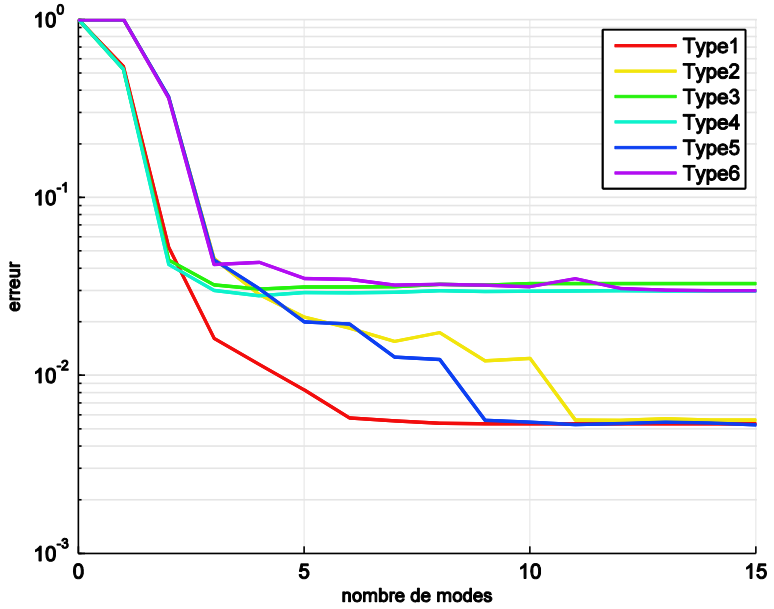


Fig.A.06 : *Erreur par rapport à la solution analytique en fonction de nombre de modes pour les différents types de modes testés pour prendre en compte les conditions initiales et aux bords*

La figure A.06 montre que l'erreur diminue au fur et à mesure que le nombre de modes augmente quel que soit le type de modes considéré. On obtient donc une meilleure approximation de la solution du problème au fur et à mesure que les modes sont rajoutés quelle que soit le choix fait pour représenter le premier mode. On peut noter cependant que selon le type de modes choisi, un même niveau d'erreur n'est pas atteint avec le même nombre de modes et pour une même discrétisation.

En ce qui concerne les modes de type 1 et 2, la valeur convergée de l'erreur est presque identique mais la convergence est plus lente pour le type 2. Rappelons que la différence entre ces deux modes est le mode spatial. Pour le mode de type 1, les modes trouvés tendent à soustraire, au mode 0, une certaine surface pour diminuer l'erreur contrairement au mode de

type 2 comme illustré sur la figure A.07 qui montre l'évolution de la solution lors de l'ajout du premier mode ainsi que la forme du premier mode.

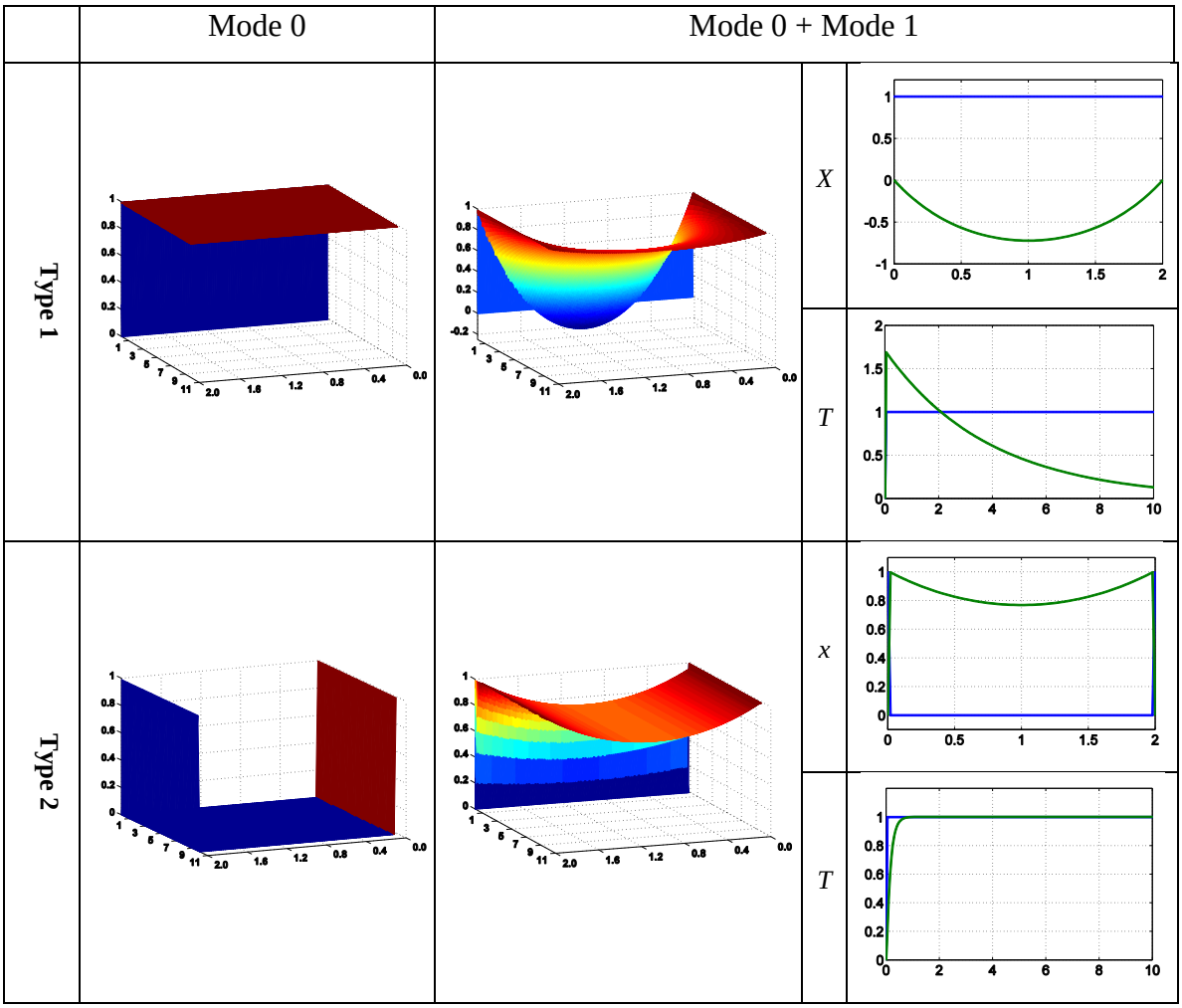


Fig.A.07 *construction de la solution pour les modes de type 1 et 2*

Revenons à la figure A.06. Le mode de type 5 a une convergence similaire au mode de type 2. Néanmoins comme la fonction en espace est plus régulière pour le mode de type 5 (cf. tableau A.12), la convergence est plus rapide.

Les modes de types 3 et 4 ont un comportement similaire, justifié du fait que la forme des fonctions choisies pour appliquer les conditions aux bords et initiale est très similaire. L'erreur pour ces deux types de modes est plus grande que pour les cas précédents (modes de type 1 et 2) car les conditions aux bords sont appliquées de manière retardée par rapport à celle du problème réel. En effet pour le calcul de la solution de référence, les conditions aux bords sont directement appliquées en t=0. Comme ici les simulations PGD pour les différents types de modes ont toute été menées sur un même maillage, la condition aux bords est prise en compte plus rapidement avec les modes de types 1 et 2 car elle est prise en compte dès le 2ème point de discrétisation temporelle alors que pour les modes de type 3 et 4, la condition aux bords est atteinte au bout d'un certain temps qui dépend du coefficient τ dans la fonction donnée équation

A.13. La convergence pour les modes de type 3 et 4 est plus rapide que celle pour les modes de type 1 et 2 car la valeur limite de l'erreur est atteinte au bout de seulement 4 modes. La même tendance est obtenue si l'on compare le mode de type 5 (au lieu de 1 et 2) avec le mode de type 6 (au lieu de 3 et 4), la convergence est quant à elle retardée.

Le temps de calcul de l'algorithme PGD dépend directement du nombre d'itérations de l'algorithme du point fixe. À iso maillage et à iso nombre total de modes, le nombre d'itérations cumulés de l'algorithme du point fixe est donné figure A.08 en fonction du nombre de modes pour les 6 types de conditions présentées tableau A.12. Le critère de convergence du point fixe est le même dans tous les cas. On retiendra que le nombre d'itérations du point fixe est influencé par le mode initial choisi pour la représentation des conditions aux bords et initiale.

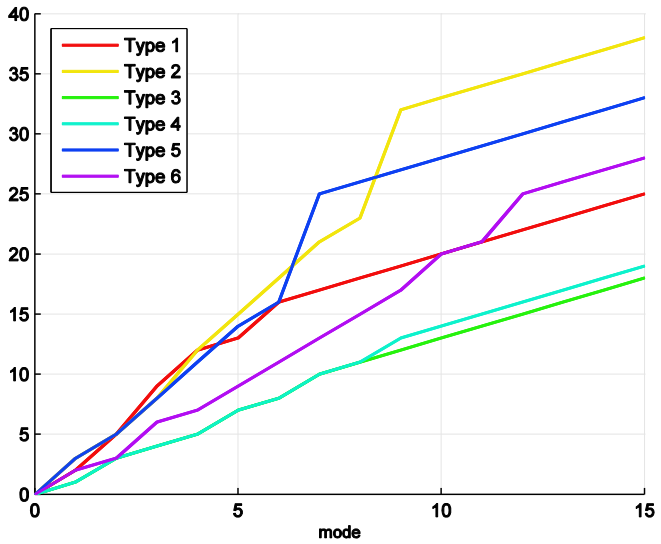
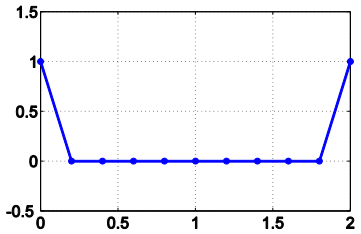
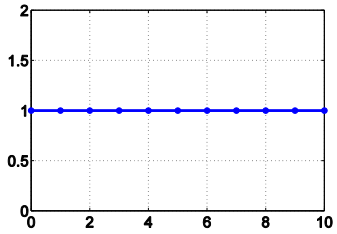
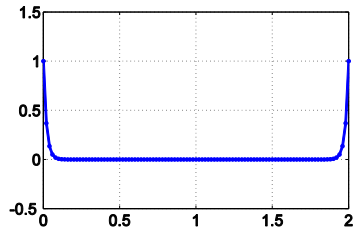
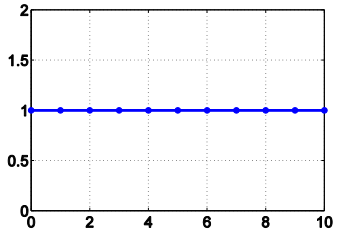


Fig.A.08 : *Nombre d'itérations cumulées du point fixe*

Pour enrichir l'analyse sur les types de modes utilisables pour appliquer les conditions aux bords, on rajoute à notre discussion deux autres types de mode qui permettent de vérifier que les conditions aux bords sont aussi vérifiées pour le temps initial. Ces modes sont représentés tableau A.15. Pour cela, les fonctions en temps sont choisies constantes et égales à 1 sur tout le domaine. Notons qu'avec les autres types de modes, un gradient est présent dans la fonction temporelle, gradient nécessaire au déroulement du calcul PGD. Pour ces deux types de mode (types 6 et 7), nous imposons donc un gradient dans la fonction spatiale.

	$F_0^x(x)$	$F_0^t(t)$
Type 7		
Type 8		

Tab A.15 *: types de modes pour l'application des conditions aux bords*

Pour ces deux types de modes, l'erreur par rapport à la solution analytique et le nombre d'itérations cumulées du point fixe en fonction du nombre de modes sont donnés figure A.08 (à gauche et à droite respectivement).

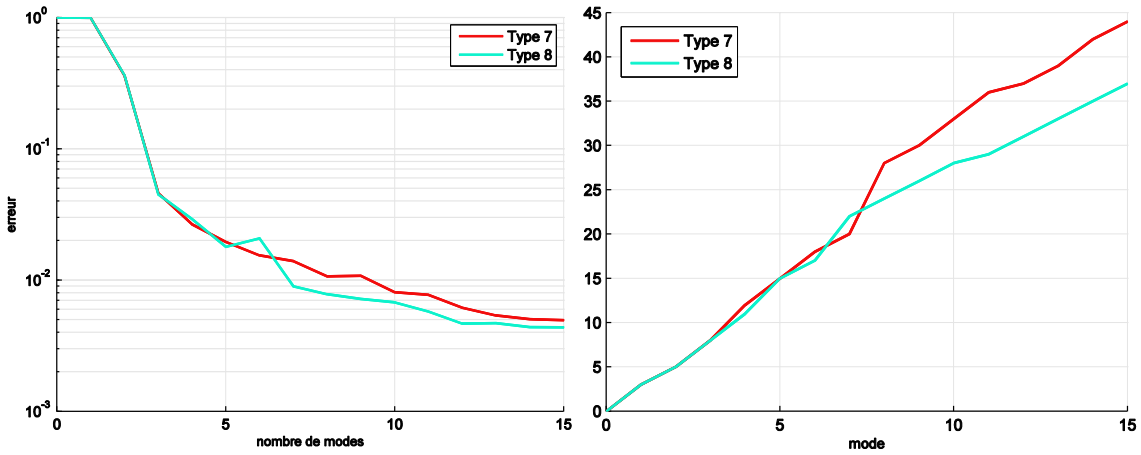


Fig.A.09 : *Erreur par rapport à la solution analytique (à gauche) et le nombre cumulés d'itérations du point fixe (à droite) en fonction de nombre de modes*

On peut donc affirmer que l'application des conditions aux bords par l'ajout d'un mode « artificiel » influence la recherche de la solution PGD. Le choix du mode artificiel représente donc un paramètre de la méthode qui peut influencer notablement la qualité de la solution et le nombre de modes nécessaire pour représenter la solution.

A.3. Stabilité et convergence

L'utilisation de la méthode du point fixe à directions alternées dans l'algorithme PGD mène à une série de problèmes intermédiaires monodimensionnels qui doivent être résolus pour obtenir les modes que ce soit en espace ou en temps. La recherche des fonctions qui composent les modes est faite à travers des méthodes classiques de la littérature choisies de manière cohérente avec le problème à résoudre. Le choix des méthodes est fortement lié à la nature des problèmes à résoudre mais aussi à la notion de stabilité et de convergence comme nous allons l'illustrer dans cette section où nous distinguerons la recherche des fonctions temporelles et la recherche des fonctions spatiales.

Remarque. La mono dimensionnalité des fonctions spatiales est liée au fait que nous nous restreignons ici au cas 1D.

A.3.1.Recherche des fonctions en temps

Dans un premier temps on se focalisera sur la recherche des modes temporels. Rappelons tout d'abord l'équation qui doit être résolue pour la recherche de ces modes et établie précédemment paragraphe 0.3.2 (cf. équations 0.23 et 0.24).

$$a \cdot \frac{dR^t(t)}{dt} + b \cdot R^t(t) = \sum_{i=0}^{n} (c_{1i} \cdot \frac{dF_i^t(t)}{dt} + c_{2i} \cdot F_i^t(t))$$
$$X(t) = \sum_{i=0}^{n} (c_{1i} \cdot \frac{dF_i^t(t)}{dt} + c_{2i} \cdot F_i^t(t)) \qquad \text{(A.16)}$$

La solution à l'équation (A.16) peut être trouvée de manière analytique (A.17) à travers une procédure classique de résolution des équations différentielles. En effet, la solution A.17 est obtenue comme la somme de la solution de l'équation homogène et une solution particulière.

$$R(t) = R(0) \cdot e^{-\frac{a}{b}t} + \int_{t_0}^{t} \frac{1}{a} \cdot X(t) \cdot e^{\frac{b}{a}t} dt \qquad \text{(A.17)}$$

Examinons la première itération de l'algorithme du point fixe. Dans ce cas, le seul mode présent dans l'écriture PGD de la concentration d'oxygène est le mode « artificiel » qui décrit les conditions aux bords et initiales. Considérons que ce mode artificiel est décrit par un mode de type 7 (cf. tableau A.15).

Dans ce cas, la fonction *X(t)* est constante et $F_0^t(t)$ est égale à 1. On est donc dans le cas où $\frac{dF_0^t(t)}{dt} = 0$. L'équation A.16 se réécrit :

$$a \cdot \frac{dR^t(t)}{dt} + b \cdot R^t(t) = c \qquad \text{(A.18)}$$

Comme la méthode PGD cherche les modes à conditions initiales nulles, soit $R^t(0)=0$, la solution analytique A.17 devient :

$$R^t(t) = \frac{c}{b}\left(1 - e^{-\frac{b}{a}t}\right) \qquad \text{(A.19)}$$

La solution $R^t(t)$ est représentée sur la figure A.10 où l'influence des paramètres *a*, *b* et *c* sur la valeur de saturation et la vitesse avec laquelle cette valeur est atteinte est notée.

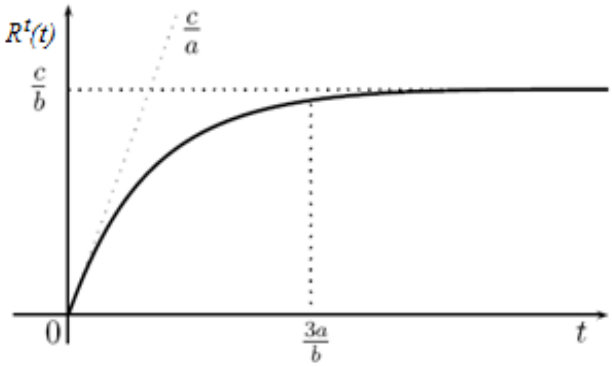


Fig.A.10 : *Solution générale de l'équation A.18*

Plus précisément, la valeur de $R^t(t)$ lorsque *t* tend vers l'infini (valeur de saturation) est égale à *c/b* et la pente initiale de $R^t(t)$ est égale à *c/a*. Il est aussi intéressant d'observer que pour *t=3a/b*, la fonction $R^t(t)$ atteint 95% de sa valeur à saturation. Le rapport *a/b* est donc une vitesse caractéristique qui pilote le temps au bout duquel la solution atteint la saturation.

Pour des maillages réguliers et linéaires de 500 éléments en temps et 100 éléments en espace, les coefficients *a*, *b* et *c* de l'équation A.18 prennent respectivement les valeurs 2.0, 10.0 et 10.0 à la première itération du point fixe, ce qui permet de calculer une solution analytique qui sera comparée à la solution numérique issue de la méthode PGD. Pour la méthode PGD, l'équation différentielle ordinaire est résolue avec la méthode d'Euler explicite. Les modes temporels obtenus analytiquement et numériquement sont représentés figure A.11. L'erreur quadratique moyenne obtenue entre ces deux solutions est d'environ $5 \cdot 10^{-6}$.

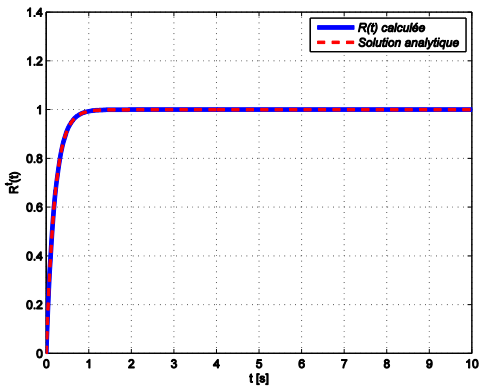


Fig.A.11 : *comparaison de la fonction temporelle obtenue à la première itération du point fixe avec la méthode PGD (Euler explicite) et la solution analytique (A.19)*

Analysons l'influence du maillage temporel sur la solution numérique. La figure A.12 montre la fonction temporelle de la première itération du point fixe obtenue pour différents maillages temporels (7, 10, 20 et 100 éléments) ainsi que la fonction analytique. Au fur et à mesure que le maillage devient moins raffiné, l'approximation de la solution devient moins précise et en plus, pour des maillages très grossiers la solution n'est plus monotone croissante et des oscillations apparaissent avec une amplitude de plus en plus marquée. La dégradation du maillage temporel met en évidence les problèmes d'instabilité qui peuvent apparaître lors de la recherche de la fonction temporelle avec un schéma d'Euler explicite.

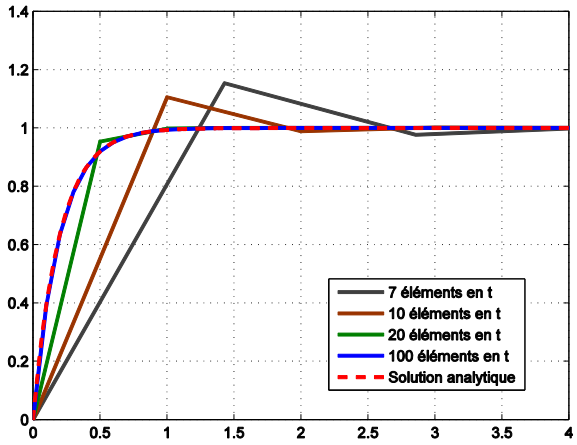


Fig.A.12 : *Effet de la dégradation du maillage sur la résolution de la première itération du point fixe*

Comme l'algorithme du point fixe à directions alternées cherche alternativement les fonctions $R^t(t)$ et $R^x(x)$ en supposant une des deux connues et en itérant jusqu'à convergence, la boucle de l'algorithme du point fixe rend donc $R^t(t)$ dépendant de $R^x(x)$ et vice versa. Cette dépendance

est étudiée ici en fonction des coefficients *a*, *b* et *c*. Dans l'exemple considéré, la recherche du premier mode nécessite trois itérations du point fixe. La figure A.13 résume les valeurs des coefficients *a*, *b* et *c* ainsi que la forme des fonctions $R^t(t)$ à chaque itération. Pour rendre plus visible la différence entre les courbes, ces dernières fonctions sont représentées pour un intervalle de temps restreint compris entre $0<t<1$.

	a	*b*	*c*
Itération 1	2.000	10.000	10.000
Itération 2	1.476	10.034	10.011
Itération 3	1.471	10.026	10.006

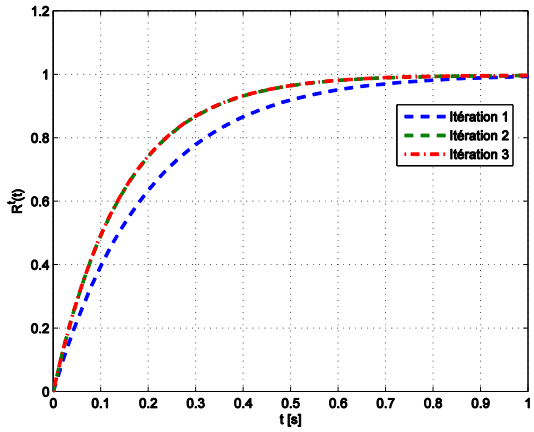


Fig.A.13 : *Evolution des fonctions temporelles calculées lors des 3 itérations du point fixe pour le calcul du 1er mode*

L'écart entres les solutions analytiques et les solutions calculées à chaque itération sont toutes de 'ordre de 10^{-6}. En comparant les courbes obtenues à chaque itération du point fixe, on remarque que, au fur et à mesure des itérations, la fonction $R^t(t)$ atteint sa valeur à saturation de manière plus rapide, ce qui est cohérent avec l'évolution du rapport *a*/*b*.

Dans le cas de l'exemple étudié (cf. équation A.01), les coefficients *a* et *b* de l'équation A.16 sont donnés par les relations suivantes :

$$a = \int_{\Omega_x} R_x dx$$
$$b = D \int_{\Omega_x} \frac{\partial^2 R_x}{\partial^2 x} dx \qquad \text{(A.20)}$$

On remarque donc que les coefficients de la k^ième^ itération de point fixe *k*, a^k et b^k dépendent donc directement de R_x^k. La stabilité de la recherche des modes temporels dépend donc des modes spatiaux et des maillages.

Précisons l'influence des maillages temporels en calculant les trois itérations du point fixe pour la recherche du 1er mode en utilisant un maillage grossier de 20 éléments en temps (au lieu de 100 éléments en temps). Les valeurs des coefficients *a*, *b* et *c* ainsi que la forme des fonctions $R^t(t)$ à chaque itération sont représentés sur la figure A.14. Comme dans le cas précédent (figure A.13), la vitesse caractéristique de la fonction $R^t(t)$ augmente au fur et à mesure que les itérations se succèdent. Avec ce maillage de 20 éléments, des instabilités apparaissent dès la

deuxième itération. Notons que les valeurs des coefficients *a*, *b* et *c* différent des précédents pour les itérations 2 et 3 liés au maillage grossier utilisé.

	A	*b*	*C*
Itération 1	2.000	10.000	10.000
Itération 2	1.187	9.800	9.884
Itération 3	1.099	9.462	9.709

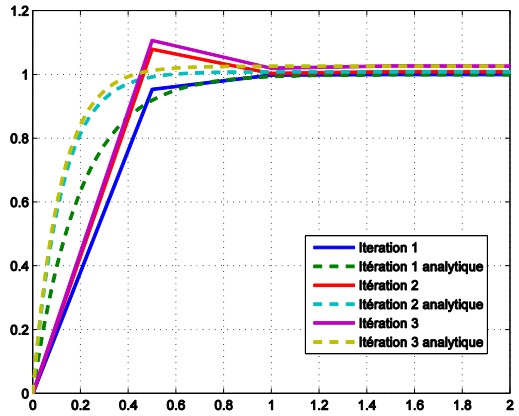


Fig.A.14 : *Effets de la dégradation du maillage sur les itérations du point fixe*

Il a été mis en évidence que plusieurs facteurs entrent en jeu et influencent la recherche de chaque mode.

Des changements dans les coefficients des équations résolues à chaque itération du point fixe en sont la première cause. Ils peuvent être liés à :

- l'influence de la résolution spatiale sur la résolution temporelle,
- une mauvaise représentation des fonctions *R* recherchées aux itérations précédentes.

De plus, ce changement de coefficients induit une évolution de la vitesse caractéristique de la fonction temporelle qui va nécessiter une évolution du pas de temps minimal qui doit être respecté pour garantir la stabilité de la méthode d'Euler explicite.

Dans le cas de notre problème, il est possible de calculer un pas de temps minimal pour avoir la stabilité de la méthode d'Euler explicite à l'aide de la formule donnée équation 0.41. Pour la première itération de point fixe, on obtient un pas de temps minimal de 0.2*s* et une valeur plus petite doit être considérée pour les autres itérations. Si ce pas de temps minimal n'est pas vérifié, des instabilités peuvent apparaitre et causer des oscillations dans les différents modes temporels et ainsi dégrader la qualité de la solution PGD.

Si l'on considère maintenant la recherche de la fonction temporelle d'un mode PGD à l'enrichissement *k* avec *k>1*, cela revient à considérer dans l'équation A.16 une fonction *X(t)* non plus constante mais dépendant des modes précédents. Dans le cas où la méthode d'Euler est instable, la fonction *X(t)* peut générer des oscillations dans la solution. Ces oscillations ne pourront pas être corrigées par les modes suivants, d'autant lorsque le maillage est inchangé.

A.3.2.Recherche des fonctions en espace

Etudions maintenant la recherche des modes spatiaux. Lors de la recherche de ces modes, l'équation à résoudre est une équation différentielle du second ordre à coefficients constants. Rappelons l'équation établie au paragraphe 0.3.2 (cf. équation 0.25).

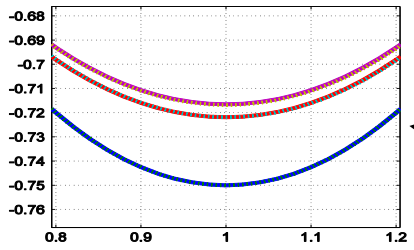
$$a \cdot \frac{d^2 R^x(x)}{dx^2} + b \cdot R^x(x) = X(x) = c \qquad \text{(A.21)}$$

sur le domaine noté [0, L] et où les conditions aux bords sont supposées nulles ($R^x(x=0)= R^x(x=L)=0$).

Considérons dans ce cas que le mode « artificiel » appliqué pour prendre en compte les conditions aux bords est du type 1 comme présenté tableau A.18. Cela revient donc, comme dans le cas de la recherche des fonctions temporelles, à considérer une fonction constante et égale à 1pour $X(x)$ que l'on pose égale à c.

Comme pour la recherche des modes temporels, nous analysons ici l'évolution de la fonction $R^x(x)$ lors des 3 itérations de point fixe pour le 1er mode. Le maillage spatio-temporel est constitué de 100 éléments en espace et 100 éléments en temps (maillage pour lequel il n'y avait pas d'instabilités pour la fonction temporelle). Les fonctions trouvées par l'algorithme PGD via la méthode de Galerkin et les solutions analytiques ainsi que les valeurs des paramètres a, b et c sont données figure A.15.

	a	*b*	*c*
Itération 1	1.000	0.000	-1.500
Itération 2	-0.552	1.370	-1.639
Itération 3	-0.559	1.428	-1.674



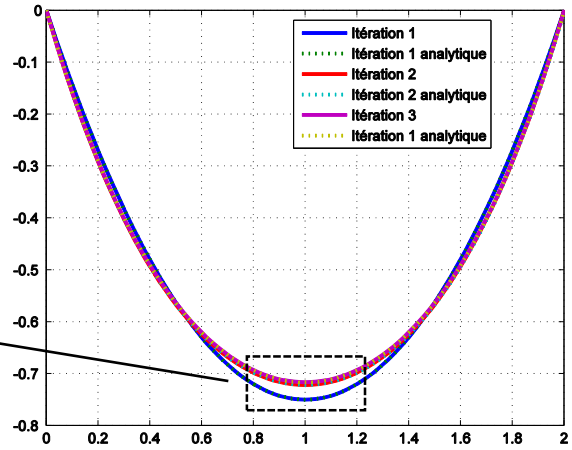


Fig.A.15 : *Evolution des fonctions spatiales calculées aux itérations du point fixe pour le 1er mode*

Les deux solutions (analytique et numérique) coïncident à chaque itération.

L'application de la méthode de Galerkin pour la recherche du mode spatial $R^x(x)$ mène à la résolution d'un système d'équations linéaires.

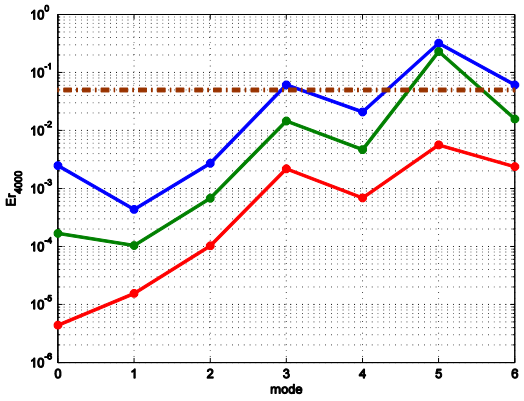
$$A \cdot R^x = X \qquad \text{(A.21)}$$

La stabilité et la convergence de la méthode de Galerkin ne font pas l'objet de cette thèse. Nous pouvons néanmoins évoquer que la méthode de Galerkin est stable sous certaines conditions et que sa convergence dépend notamment de la discrétisation utilisée.
Comme dans le cas de la recherche des fonctions temporelles, l'erreur commise sur la recherche des fonctions en espace influence le déroulement de l'algorithme PGD.

A.4. Propagation de l'erreur

Dans ce paragraphe, nous allons illustrer comment la propagation de l'erreur a lieu dans un calcul PGD lors de la recherche des fonctions spatiales et temporelles, cette propagation de l'erreur étant notamment liée aux maillages choisis comme nous l'avons vu en A.3.
Pour cela, les conditions aux bords et initiales sont représentées par les modes de type 7 (cf. tableau A.15) avec une valeur de τ égale à 0.01. Le maillage considéré est fixé à 500 éléments pour le domaine temporel et nous allons considérer différents maillages spatiaux de 200, 400, 1000 et 4000 éléments. Le maillage le plus raffiné est utilisé comme référence pour calculer les différences entre chaque mode fournies par chaque discrétisation.
On définit « un maillage de bonne qualité » comme une discrétisation (temporelle et spatiale), qui fait partie de l'ensemble de discrétisations qui donnent pour tous les modes calculés des solutions qui diffèrent entre elles de manière négligeable. En d'autres termes pour un mode *n*, tous les maillages de bonne qualité doivent fournir des fonctions en temps et en espace suffisamment proches pour être considérées en pratique égales. Pour quantifier la différence entre deux fonctions, une solution possible est de calculer l'erreur relative en norme L^2 des deux fonctions. On considère ici que deux fonctions sont égales si elles ont une forme similaire et si la différence entre leurs intégrales est inférieure à 5%.
L'évolution de l'erreur relative obtenue pour les 6 premiers modes pour les différents maillages est donnée sur la figure A.16 à gauche pour l'espace et à droite pour le temps.

Erreur relative pour les fonctions spatiales



Erreur relative pour les fonctions temporelles

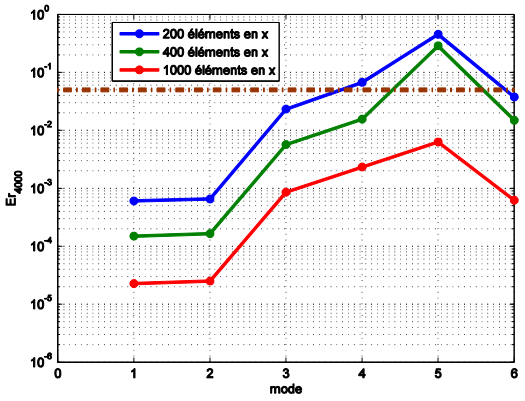
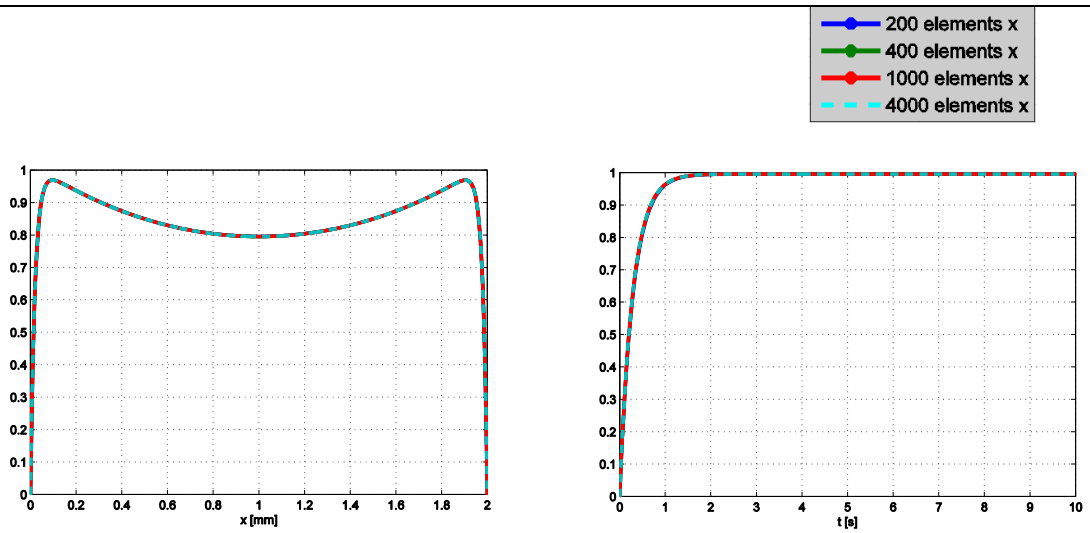
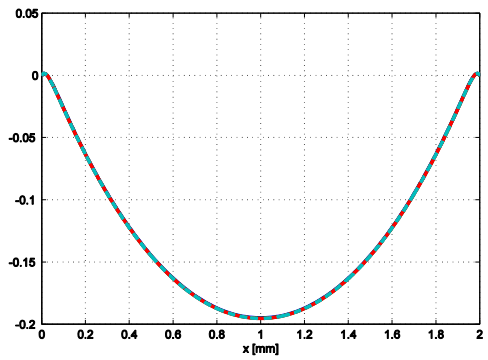
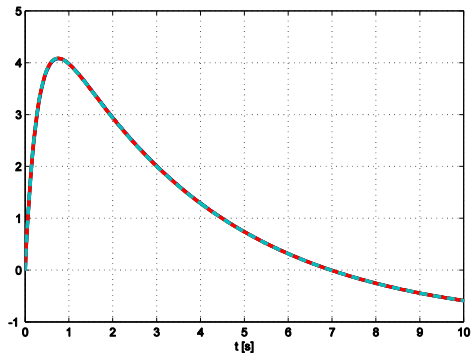
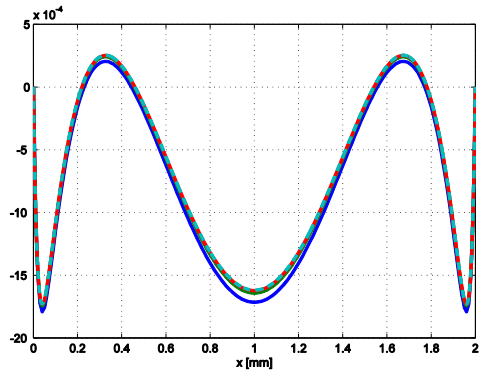
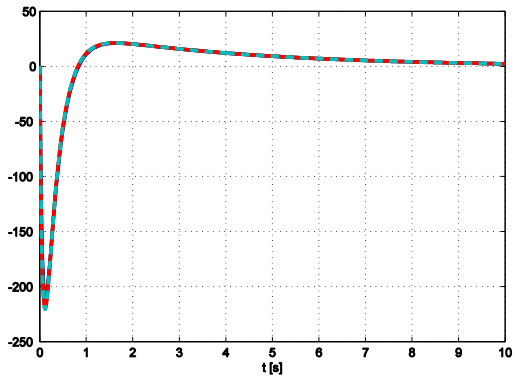
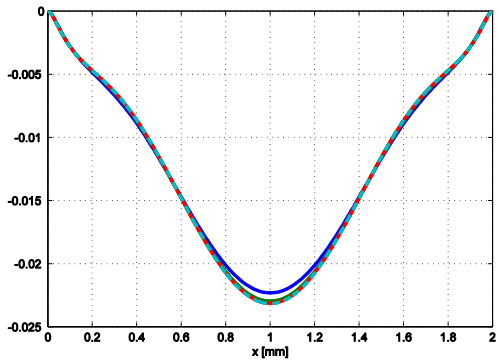
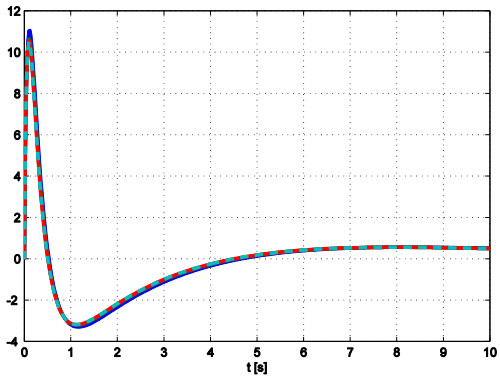
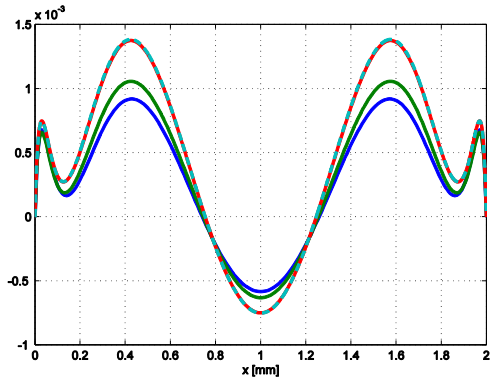
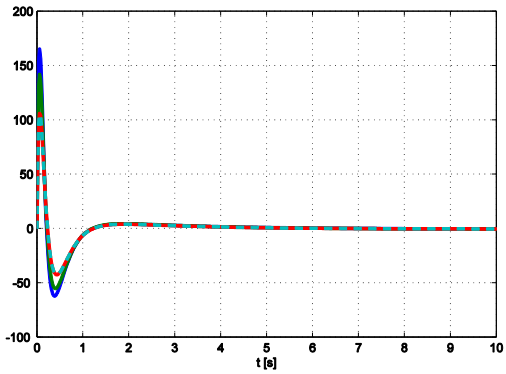
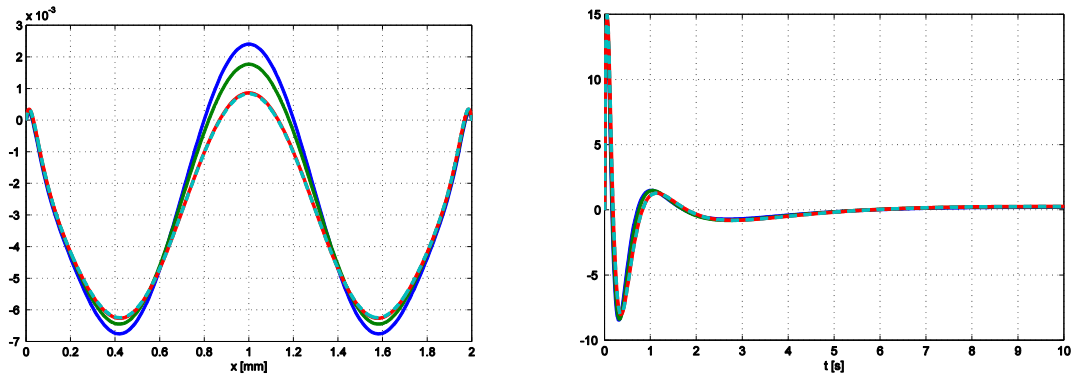


Fig.A.16 : *Evolution de l'erreur relative pour les 6 premiers modes spatiaux (à gauche) et temporels (à droite) pour différents maillages*

L'erreur relative entre les modes trouvés sur le maillage le plus dense et les autres maillages a tendance à augmenter lorsque les maillages sont plus grossiers. On peut remarquer, que plus le nombre de modes ajouté augmente, plus cette différence est importante. Afin de visualiser ce phénomène, les 6 premiers modes obtenus sont représentés sur le tableau A.22. Les premiers modes (modes 1 et 2) coïncident pour les différents maillages. A partir du mode 3, un écart entre les modes apparait de façon marquée en espace puis en temps aussi à partir du mode 5.

Mode 1	

Mode 2		
Mode 3		
Mode 4		
Mode 5		

Mode 6	

***Tab A.22** : comparaison des modes pour différents maillages*

L'évolution de l'erreur entre la solution numérique et la solution analytique est donnée sur la figure A.17 en fonction du nombre de modes. L'erreur est la même pour toutes les discrétisations jusqu'au troisième mode. A partir du mode 4, l'erreur est plus faible pour le maillage le plus dense comme le montre le zoom figure A.17 à droite.

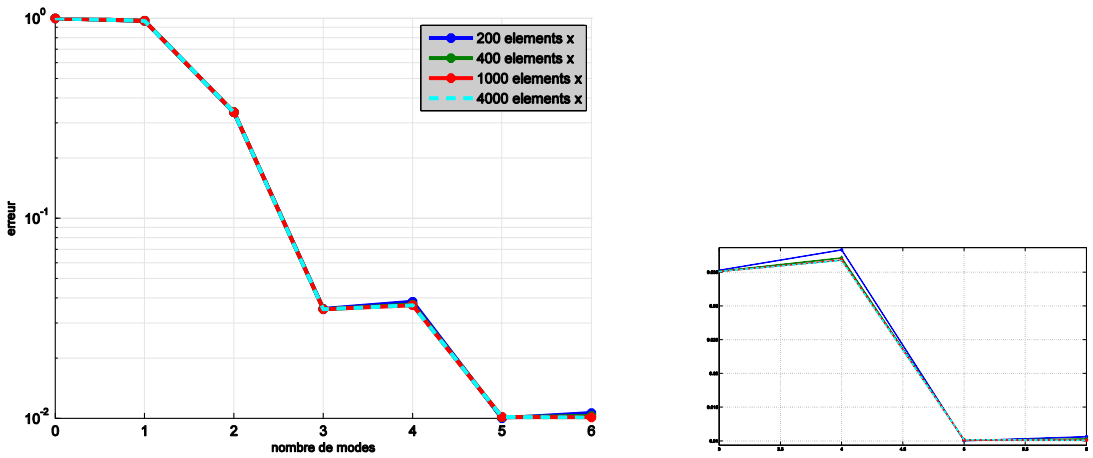


***Fig.A.17 :** Erreur par rapport à la solution analytique en fonction du nombre de modes pour différents maillages*

Si l'on regarde le nombre cumulés d'itérations du point fixe, on a le même nombre d'itérations pour les 4 premiers modes pour les différents maillages. La recherche du cinquième mode nécessite, pour les maillages les plus raffinés, une itération en moins. La différence obtenue pour le mode 5 pour la discrétisation la plus grossière est liée à cette itération en moins.

En résumé, comme la méthode PGD consiste à calculer les modes les uns après les autres, l'erreur commise à chaque itération de chaque recherche de modes se répercute sur la recherche du mode suivant. Ces erreurs sont dues à la méthode utilisée pour la résolution de chaque problème intermédiaire et à la discrétisation utilisée.

Dans la construction de la solution avec la méthode PGD, chaque mode rajoute au fur et à mesure des informations à la solution du problème. Si pendant la recherche d'un mode *n*, le maillage ne garantit pas une bonne convergence, les modes successifs seront obligés de rajouter les informations qui manquent ainsi que de corriger l'écart due à la mauvaise représentation du mode *n*. Même si ce phénomène n'a pas toujours d'impact sur la qualité de la solution finale, il peut générer des problèmes intermédiaires difficiles à résoudre et qui nécessitent des maillages plus raffinés.

De plus, les différents maillages ont une influence sur le respect du critère d'arrêt de l'algorithme du point fixe. Une sortie plus ou moins prématurée du point fixe peut changer le schéma que la méthode va suivre pendant la résolution du problème.

A.5. Résolution des modes temporels avec la méthode de Runge-Kutta

Les méthodes d'intégration classiquement utilisées dans la méthode PGD pour la recherche des modes sont : la méthode de Galerkin pour l'espace et le schéma d'Euler explicite pour le temps. Nous avons vu dans le paragraphe A.3.1 que l'utilisation du schéma d'Euler explicite était sensible à la discrétisation utilisée et que sa stabilité en dépendait. Nous proposons ici d'utiliser une méthode alternative au schéma d'Euler explicite qui est une méthode de Runge-Kutta à pas adaptatif. Les méthodes de Runge-Kutta (cf. 0.4.2) sont des méthodes incrémentales qui permettent d'optimiser, selon certains paramètres, la discrétisation au fur et à mesure de l'avancement en temps. L'adaptation de la discrétisation est fait par rapport à l'estimation de l'erreur commise par la méthode, c'est à dire qu'il est possible, en quelque sorte, de fixer une limite à l'erreur commise sur la résolution des fonctions.

Afin de mieux comparer les résultats, le problème étudié avec cette nouvelle méthode est le même que dans les paragraphes précédents (A.1). Pour les conditions aux bords, on utilise un mode de type 4 (cf. Tableau A.18). Rappelons que le mode de type 4 est composé par une fonction exponentielle en temps et une fonction constante en espace. Afin de limiter l'erreur liée à l'application des conditions initiales et aux bords, l'erreur relative de la méthode PGD sera calculée en fonction de la solution de référence obtenue avec la méthode des différences finies et décrite en A.1.1.

La question qui se pose maintenant est : Existe-il un lien entre la représentation des fonctions utilisées pour prendre en compte les conditions aux bords et initiales et la qualité de la solution ?

Cette question repose sur le fait que la méthode de Runge-Kutta est une méthode de type incrémentale avec un pas de temps qui s'adapte à l'erreur commise au fur et à mesure du calcul. Les valeurs des fonctions connues (modes déjà présents dans la solution ou modes calculés par la méthode PGD) doivent donc être disponibles dans tous les points du domaine temporel. Ceci nécessite des opérations d'interpolation qui introduisent une erreur dans la représentation des fonctions.

Considérons tout d'abord la recherche du premier mode. Cette recherche est menée pour les trois cas résumés tableau A.23, ces cas diffèrent selon le degré du polynôme d'interpolation pour décrire les fonctions temporelles. Notons que pour tous les cas, les fonctions sont définies avec un élément de type Lagrange.

	t			x		
	$F_0^t(t) = 1 - e^{(-10 \cdot t)}$			$F_0^x(x) = 1$		
	Degré	**N° nœuds**	**N° éléments**	**Degré**	**N° nœuds**	**N° éléments**
Cas 1	1	101	100	1	101	100
Cas 2	2	101	50	1	101	100
Cas 3	5	101	20	1	101	100

Tab A.23 *: Description des cas analysés*

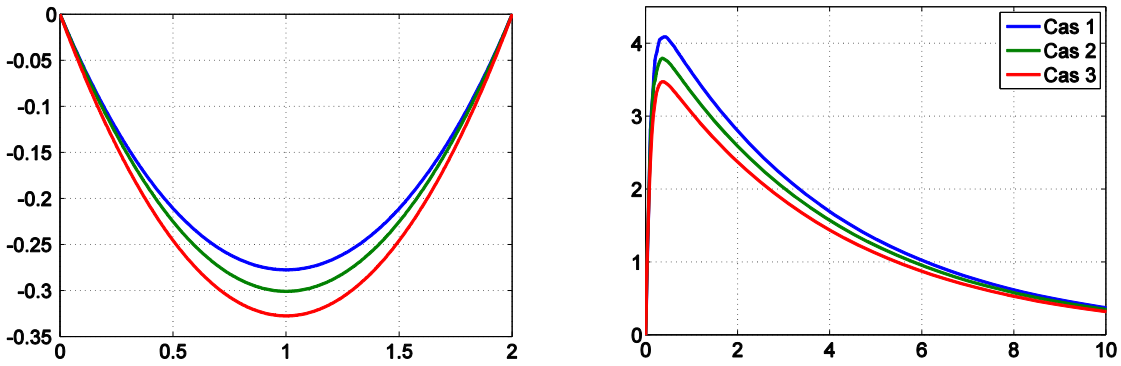


Fig.A.18 : *Premières fonctions calculées pour les trois cas : spatiales (à gauche) et temporelles (à droite) pour la 1ère itération de point fixe du 1er mode*

Le 1er mode obtenu à la 1ère itération de point fixe pour les différents cas est illustré figure A.18. Les fonctions spatiales présentent une forme similaire mais leurs valeurs sont différentes. Cette différence est liée au fait que la valeur des fonctions spatiales dépend directement de la valeur de l'intégrale des fonctions temporelles ; les fonctions ayant des représentations différentes, leurs intégrales ont des valeurs légèrement différentes. Pour avoir une estimation de cette différence, nous calculons l'intégrale de la fonction pour les différents cas. Les valeurs obtenues

sont reportées tableau A.24 où l'erreur en % est calculée par rapport à la valeur de l'intégrale pour la solution analytique qui est de *9.9*.

	$\int F_0^t dt$	$E_{r\%}$
Cas 1	*9.8918*	*0.082 %*
Cas 2	*9.8995*	*0.005 %*
Cas 3	*9.8998*	*0.002 %*

Tab A.24 *: Calcul des intégrales des fonctions spatiales en fonction des différents cas*

Comme les fonctions spatiales, les fonctions temporelles différent entre elles par leur valeur. Les trois modes (produit de la fonction spatiale par la fonction temporelle) ont une amplitude très similaire vu que la fonction en temps est plus grande en valeur absolue et est multipliée par la fonction en espace plus petite en valeur absolue et vice-versa.

Une autre remarque qui peut être faite est sur le nombre d'éléments dont la méthode de Runge-Kutta a besoin pour réaliser ce calcul. Les nombres de nœuds en temps nécessaires selon les trois cas sont respectivement 131, 96 et 66.

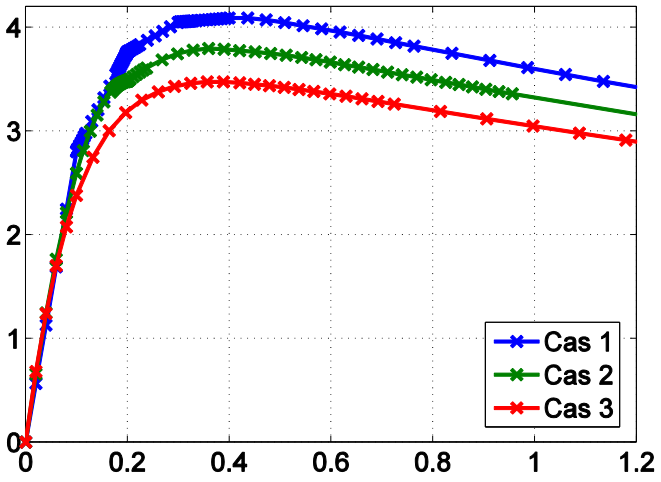


Fig.A.19 : *Maillage de la méthode de Runge-Kutta pour les trois cas*

La figure A.19 montre la distribution des nœuds pour les trois cas. Pour le premier cas, on peut remarquer qu'une densification du maillage a lieu en correspondance des points *t=0.1*, *t=0.2*, *t=0.3* et *t=0.4*. Ces points correspondent aux points où les nœuds de la fonction qui tiennent compte des conditions aux bords (mode de type 4) sont définis et où sa variation est plus importante. Comme pour le cas 1, le degré d'interpolation est de 1, la continuité de la dérivée n'est pas assurée. Cette discontinuité provoque une densification du maillage par la méthode de Runge-Kutta liée à la brusque variation de pente de la fonction connue. Lorsque le degré d'interpolation de la fonction connue augmente, les discontinuités diminuent et la méthode de

Runge-Kutta a besoin de moins de points pour trouver la solution. Ce phénomène est répandu dans la littérature (41) et peut être évité en utilisant une représentation des fonctions connues qui permet de limiter les sauts de la valeur de la dérivée tout au long de la fonction.

La régularisation de la fonction $F_0(t)$ dans le cas 1 (degré d'interpolation 1) et la limitation des discontinuités dans sa dérivée peuvent être obtenues par exemple en densifiant le maillage. Etudions l'influence de la discrétisation sur l'erreur. Les cas de discrétisation étudiés sont reportés tableau A.25. Seule la discrétisation temporelle est raffinée et est de : 501, 2001 et 8001 nœuds. Pour ces différentes discrétisations notées respectivement cas 4, cas 5 et cas 6, l'évolution de l'erreur en fonction du nombre de modes est représentée figure A.20.

	t			x		
	$F_0^t(t) = 1 - e^{(-10 \cdot t)}$			$F_0^x(x) = 1$		
	Degré	**N° nœuds**	**N° éléments**	**Degré**	**N° nœuds**	**N° éléments**
Cas 4	1	501	500	1	101	100
Cas 5	1	2001	2000	1	101	100
Cas 6	1	8001	8000	1	101	100

***Tab A.25** : Description des cas analysés*

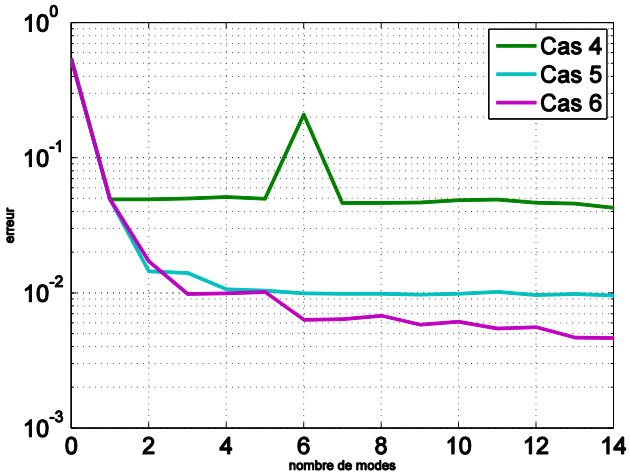
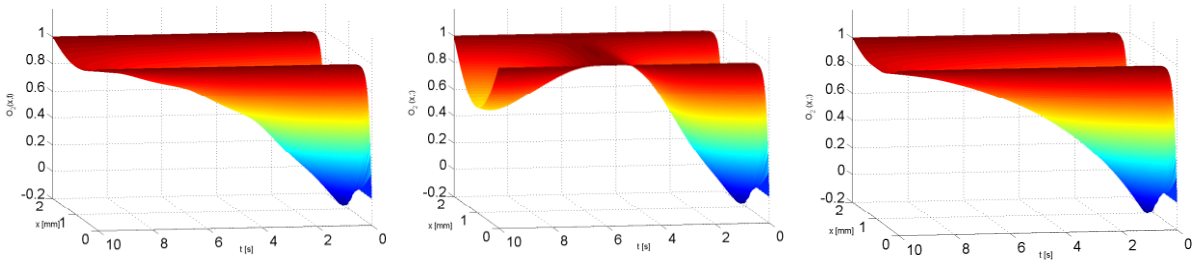


***Fig.A.20 :** Erreur par rapport à la solution de référence en fonction du nombre de modes cas où la discrétisation varie*

Le raffinement du maillage pour représenter le mode temporel initial induit une diminution de l'erreur. On peut noter que les cas 5 et 6 montrent une décroissance de l'erreur monotone en fonction du nombre de modes alors que dans le cas 4 il y a un pic dans l'erreur au niveau du mode 6. Pour le cas 4, la solution reconstruite est donnée figure A.21 pour 5, 6 et 14 modes. On observe bien que le mode 6 ajoute des aberrations à la solution. Les modes suivants ont la capacité de corriger en quelque manière cette aberration.



Solution avec 5 modes *Solution avec 6 modes* *Solution avec 14 modes*

Fig.A.21 : *Reconstruction de la solution obtenue dans le cas 4*

Il faut signaler qu'il peut y avoir des problèmes de convergence de l'algorithme du point fixe pour des maillages moins raffinés que celui du cas 4. La cause de ce manque de convergence peut être due à une erreur importante de la méthode de Runge-Kutta elle-même liée à une représentation du mode initial moins précise.

Pour le cas 6, la solution obtenue avec 50 modes est représentée figure A.22 ainsi que l'erreur en fonction du nombre de modes. On voit qu'au-delà de 35 modes, l'erreur atteint un palier.

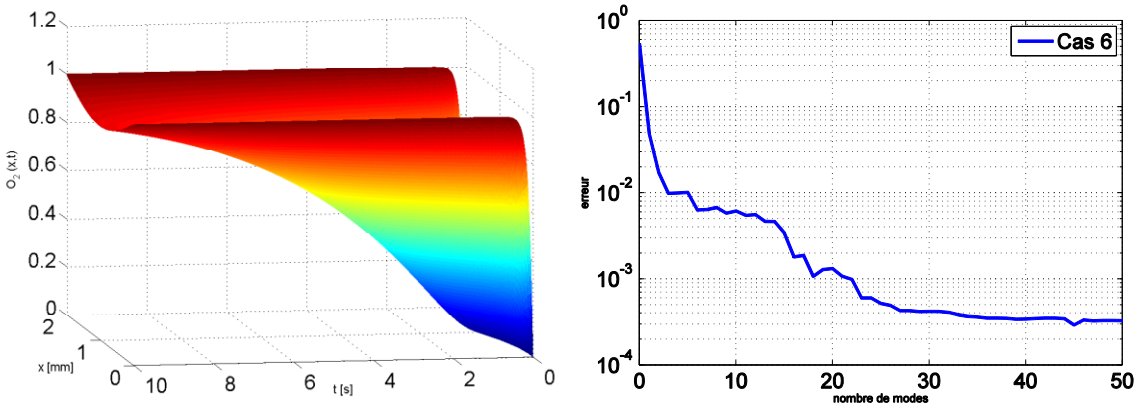
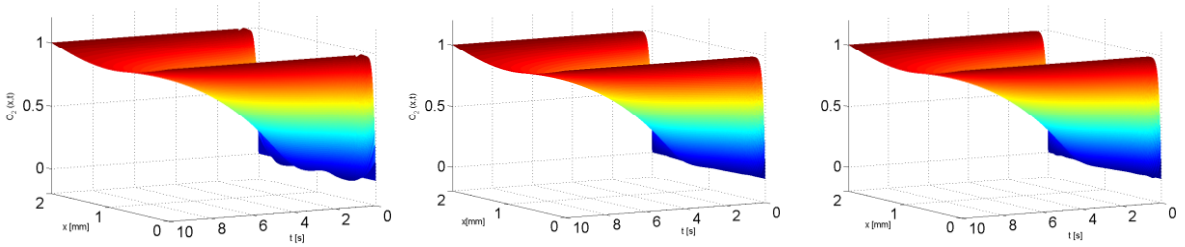


Fig.A.22 : *Reconstruction de la solution du cas 6 pour 50 et erreur par rapport à la solution de référence en fonction du nombre de modes*

Plaçons-nous maintenant dans le cas d'une interpolation avec un polynôme de degré 5 et étudions l'influence du maillage. Les différents maillages sont reportés tableau A.26. Pour l'étude de ces cas, 14 modes ont été calculés avec la méthode PGD et la solution reconstruite est représentée figure A.23.

	t			x		
	$F_0^t(t) = 1 - e^{(-10 \cdot t)}$			$F_0^x(x) = 1$		
	Degré	**N° nœuds**	**N° éléments**	**Degré**	**N° nœuds**	**N° éléments**
Cas 7	5	51	10	1	101	100
Cas 8	5	501	100	1	101	100
Cas 9	5	5001	1000	1	101	100

Tab A.26 *: Description des cas analysés*



Cas 7 *Cas 8* *Cas 9*

Fig.A.23 : *Reconstruction de la solution*

Pour le cas 7 (maillage le plus grossier de 51 points), des oscillations apparaissent sur la solution pour des temps proches du temps initial. Cette solution est donc moins précise que celles des cas 8 et 9.

L'évolution de l'erreur en fonction du nombre de modes est donnée figure A.24. On remarque là aussi que l'erreur est plus importante pour le cas 7.

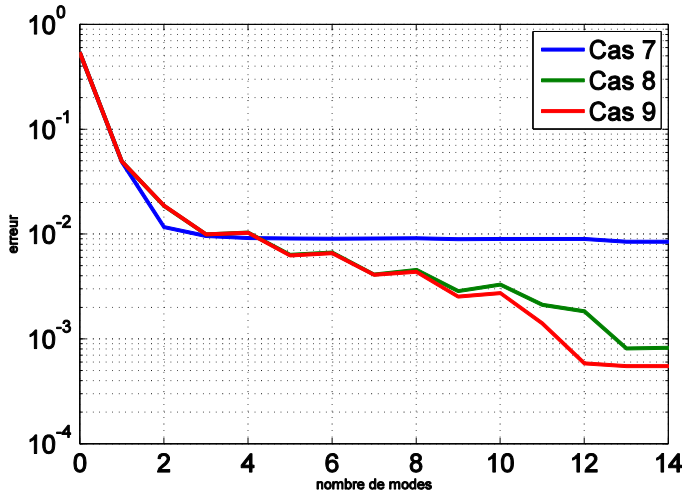


Fig.A.24 : *Erreur par rapport à la solution analytique en fonction du nombre de modes pour différents maillages*

Dans le cas 7, la valeur limite élevée de l'erreur est liée à la mauvaise représentation du mode artificiel pour ce maillage. La recherche des modes suivants s'en trouve affectée. La solution

reconstruite avec 50 modes est illustrée figure A.25. Les oscillations sont encore plus visibles que celles observées sur la figure A.23 où la solution contenait seulement 14 modes.

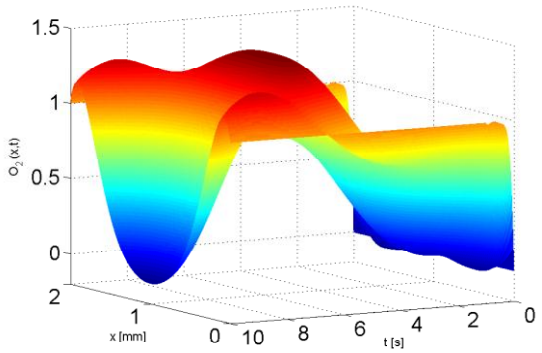


Fig.A.25 : *reconstruction de la solution avec 50 modes dans le cas 7*

Afin d'analyser les performances de Runge-Kutta par rapport à l'utilisation classique du schéma d'Euler explicite pour la résolution des modes temporels, nous considérons les cas d'étude suivants. Pour la simulation utilisant le schéma d'Euler, nous considérons un maillage de 100 éléments de degré pour l'espace et 1000 éléments de degré 1 pour le temps. Pour la PGD utilisant l'algorithme de Runge-Kutta le cas 9 est envisagé : un maillage de 100 éléments en espace et 5000 éléments en temps. Notons que pour la comparaison on ne prend pas en compte le cas où $F_0(t)$ est représentée par une fonction de degré 1 et le maillage le plus dense (8000 éléments) soit le cas 6 car dans ce cas les temps de calcul ne sont pas compétitifs : on obtient pour le calcul de 50 modes avec un même niveau d'erreur 11.2 fois le temps nécessaire pour le cas 9 lorsque l'on se place dans le cas 6.

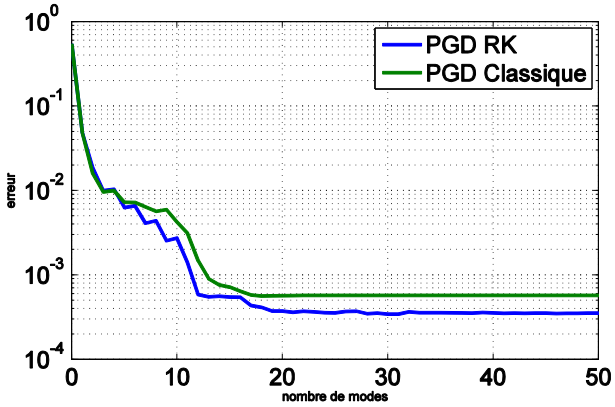


Fig.A.26 : *Comparaison de l'erreur par rapport à la solution analytique en fonction du nombre de modes*

L'évolution de l'erreur sur les 50 premiers modes, illustrée figure A.26, montre que la méthode de Runge-Kutta est plus précise. Néanmoins, la différence entre les erreurs des deux méthodes peut décroitre si l'on utilise un maillage plus fin en temps. Ce raffinement implique néanmoins

des temps de calcul plus importants. Pour avoir une idée du gain en temps de calcul, le rapport du temps de calcul entre la méthode PGD Runge-Kutta notée PGD-RK et la méthode PGD qui utilise Euler notée PGD est représentée sur la figure A.27 en fonction du nombre de modes. Le temps de calcul de la méthode PGD-RK est de 15% par rapport à la méthode PGD à partir de 30 modes. Pour un petit nombre de modes, la différence du temps de calcul entre les deux méthodes est plus importante, ceci étant lié au fait que la mise en place du problème influence de manière non négligeable le temps de calcul. La différence reste stable à environ 15% pour un nombre élevé de modes, ce résultat montre que dans cette configuration l'utilisation de la méthode PGD-RK diminue la complexité de la résolution.

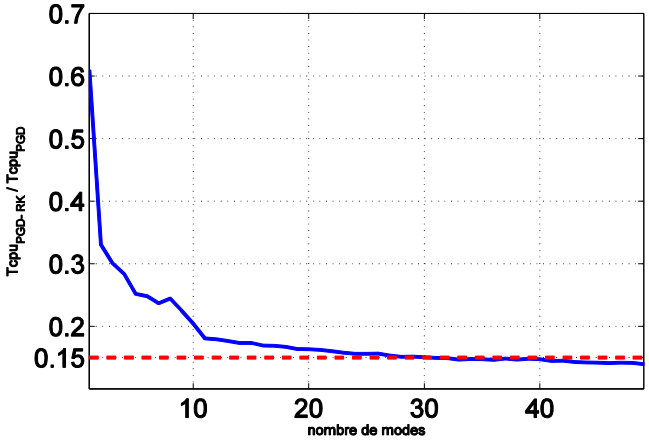


Fig.A.27 : *Rapport entre le temps de calcul de la méthode PGD classique (schéma d'Euler explicite) et la méthode PGD Runge-Kutta en fonction du nombre de modes*

En résumé, la méthode de Runge-Kutta pour la recherche des fonctions temporelles est plus efficace au niveau de la qualité de la solution et de la vitesse de calcul que la méthode d'Euler explicite à condition que le mode « artificiel » n'introduise pas des erreurs dues à une mauvaise représentation de la condition aux bords.

La fonction $F_0(t)$ peut aussi être représentée à travers le calcul, pour chaque élément de discrétisation, par des polynômes qui garantissent la continuité de la dérivée. Dans ce cas, les résultats obtenus sont similaires à ceux présentés dans ce paragraphe et les temps de calcul sont les mêmes que pour le cas 9.

A.6. Conclusions de la partie A

Dans la Partie A de ce manuscrit, nous nous sommes focalisés sur la résolution des problèmes modélisés par une équation de type diffusion de Fick qui est la base des modèles plus complexes de diffusion réaction.

Plus précisément un problème de diffusion transitoire monodimensionnelle a été traité, ce problème représente l'échelon le plus bas sur l'échelle de complexité des problèmes présents dans ce manuscrit. Grâce à ce problème il a été possible d'illustrer le déroulement de la méthode PGD sur un cas pratique de façon simple. Une première analyse a été consacrée à l'application des conditions aux bords du problème. L'application des conditions aux bords implique l'initiation de la procédure itérative de la méthode PGD. Différents choix ont été présentés et l'évolution de l'erreur vis-à-vis du nombre de modes a été discutée. Le choix du mode artificiel représentant les conditions initiales et aux bords semble influencer le déroulement de la méthode.

A travers ce problème, il est aussi possible de mettre en évidence que les problèmes intermédiaires à résoudre au cours de l'algorithme itératif évoluent. Plus précisément les équations sont toujours des EDO mais les paramètres qui les constituent changent de valeur tout au long des itérations. En conséquence le calcul des fonctions qui composent les modes peut être assujetti à des problèmes de stabilité et convergence suivant les valeurs des paramètres. Ces problèmes sont plus ou moins marqués suivant la méthode choisie pour le calcul temporel par exemple. En d'autre termes, une discrétisation qui garantit la stabilité et la convergence d'un mode ne garantit pas a priori stabilité et convergence pour tous les modes de la solution.

L'erreur commise dans l'évaluation de chaque fonction à chaque itération de l'algorithme du point fixe peut se répercuter sur l'évaluation des fonctions suivantes. Dans certains cas, l'erreur devient suffisamment importante pour influencer le nombre d'itérations du point fixe ainsi que la forme des modes successifs. Cette erreur est due à la discrétisation choisie pour la recherche des modes et à la méthode de résolution temporelle. La méthode PGD a tendance à corriger ces erreurs au fur et à mesure que les modes sont rajoutés. Toutefois si dans un mode on introduit une erreur, la recherche du mode successif peut devenir plus contraignante du point de vue de la stabilité et de la convergence.

Comme annoncé cette partie représente le premier pas pour la résolution de modèles de diffusion-réaction. Sur cette base le chapitre suivant est consacré à l'étude de la résolution des non-linéarités par la méthode PGD.

Partie B. Problèmes de diffusion non-linéaire

Partie B. Problèmes de diffusion non-linéaire 74.

B.1. Diffusion non-linéaire 75.

B.2. Solutions de référence 76.

B.3. Résolution PGD du problème de diffusion 1D non-linéaire 76.

B.3.1. La méthode Newton 1 79.

B.3.2. La méthode Newton 2 79.

B.4. Comparaison des deux méthodes 80.

B.5. Influence du maillage sur la solution PGD 83.

B.6. Utilisation de la méthode de Runge-Kutta pour le calcul des fonctions temporelles 83.

B.7. Conclusions Partie B 87.

L'objectif de ce chapitre est d'étendre l'étude des problèmes de diffusion Fickienne discutés au chapitre précédent à des problèmes non linéaires et de voir comment ces termes non linéaires doivent être traités dans l'algorithme PGD et leur influence sur la résolution PGD.
A travers un exemple particulier, plusieurs algorithmes sont examinés et deux d'entre eux sont comparés et discutés. L'étude réalisée dans ce chapitre ne constitue donc pas une étude exhaustive de la résolution des modèles non-linéaires par méthode PGD mais doit être contextualisé dans le but de créer des outils simples et efficaces qui peuvent être appliqués à la résolution de modèles de type non linéaires couplés et raides. Dans le contexte de la thermo oxydation, les termes non-linéaires présents dans les équations des modèles peuvent être nombreux et influencent beaucoup le déroulement de la résolution PGD.
Le modèle que nous avons choisi de traiter dans ce chapitre est un modèle simple qui a été déjà étudié dans la littérature (14) et qui permet d'observer les principales difficultés de la résolution des modèles non-linéaires avec la méthode PGD.

B.1. Diffusion non-linéaire

Le modèle étudié est un modèle de diffusion d'oxygène enrichi par un terme qui représente une consommation d'oxygène. Ce terme est proportionnel au carré de la concentration d'oxygène dans tous les points du domaine. En d'autres termes, l'oxygène présent dans le matériau est consommé par d'autres phénomènes qui introduisent une non-linéarité dans le modèle.
Le modèle considéré est décrit par l'équation B.01

$$\frac{\partial O_2}{\partial t} = D \cdot \frac{\partial^2 O_2}{\partial x^2} - O_2^2 + f(x,t) \qquad \text{(B.01)}$$

où O_2 représente la concentration d'oxygène à l'intérieur du matériau et D est le coefficient de diffusion du matériau. Dans l'exemple, on considère $t \in [0, 2]$, $x \in [0, 10]$, $D=1$.
Pour mieux se focaliser sur les phénomènes liés à l'introduction d'un terme non-linéaire dans l'équation à résoudre, les conditions aux bords et initiales sont dans cet exemple choisies nulles. La variation temporelle de la concentration d'oxygène dans chaque point de l'espace est fonction à la fois de la concentration d'oxygène autour du point et du carré de la concentration d'oxygène dans le même point. Un terme source ($f(x, t)$) assure une génération d'oxygène à l'intérieur du matériau et amorce la diffusion. Le terme source est choisi constant et égale à *2*.

B.2. Solutions de référence

Pour cet exemple, aucune solution analytique n'est disponible, donc l'évaluation des performances de la méthode PGD est faite par rapport à une solution de référence numérique calculée par le logiciel commercial MATLAB®. La méthode utilisée consiste à considérer un schéma de discrétisation différences finies en espace. La démarche est similaire à celle adoptée pour obtenir la solution de référence au modèle décrivant la loi de Fick monodimensionnelle de la partie A. Le système d'équations différentielles ordinaires obtenu est le suivant.

$$\frac{dO_{2(i)}}{dt} = D \cdot \frac{O_{2(i-1)} - 2O_{2(i)} + O_{2(i+1)}}{\Delta x^2} + O_{2(i)}^2 + 2 \quad \text{Avec} \quad i = 2, \dots, N-1 \qquad \text{(B.02)}$$

où l'indice i correspond à la discrétisation spatiale du champ de la variable O_2 et $O_2(1)$ et $O_2(N)$ correspondent aux conditions aux bords.

La non linéarité est évaluée à l'incrément de temps précédent. La méthode utilisée pour obtenir la solution est la méthode ODE23tb de MATLAB®.

La solution est calculée sur une discrétisation de 1000 éléments en espace de façon cohérente avec (14). La méthode ODE23tb génère automatiquement une discrétisation temporelle qui permet de garantir la stabilité et une bonne convergence du problème. La solution obtenue est représentée figure B.01.

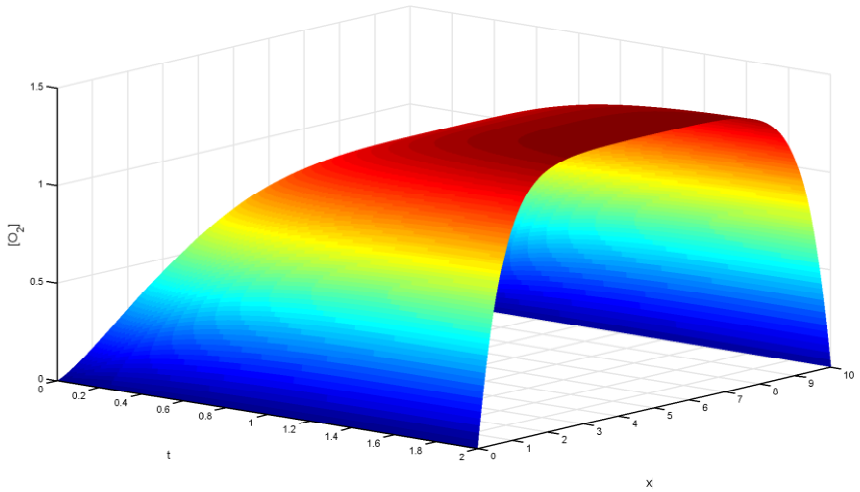


Fig.B.01 *Représentation de la solution MATLAB® ODE23tb du problème B.01*

B.3. Résolution PGD du problème de diffusion 1D non-linéaire

Les équations B.03 et la B.04 représentent respectivement la forme faible du problème B.01 et l'écriture PGD de l'inconnue O_2 et du champ virtuel O_2^*.

$$\int_{\Omega} O_2^* \cdot \frac{\partial O_2}{\partial t}\, d\Omega = \int_{\Omega} O_2^* \cdot \frac{\partial^2 O_2}{\partial x^2} d\Omega + \int_{\Omega} O_2^* \cdot (-O_2^2) d\Omega + \int_{\Omega} O_2^* \cdot 2\, d\Omega \qquad \text{(B.03)}$$

$$\begin{aligned} O_2(x,t) &= \sum_{i=1}^{n} F_i^x(x) \cdot F_i^t(t) + R^x(x) \cdot R^t(t) \\ O_2^* &= R^{x*} \cdot R^t + R^x \cdot R^{t*} \end{aligned} \qquad \text{(B.04)}$$

L'application de l'algorithme du point fixe et de la discrétisation des fonctions recherchées mène, comme dans la partie A, à la résolution de plusieurs systèmes d'équation linéaires.
L'équation B.05 représente le système linéaire à résoudre lors d'une itération du point fixe pour la recherche d'une nouvelle fonction spatiale.

$$[A_x]\{R^x\} = \{B_x\} \qquad \text{(B.05)}$$

La construction de ce système d'équations reste identique, par rapport à la partie A pour les termes linéaires de l'équation B.01. Pour ne pas alourdir la lecture du manuscrit, elle n'est pas rappelée ici (cf. tableau A.08 paragraphe A.1.2)
Nous nous focalisons ici sur les différences liées à l'introduction d'un terme non-linéaire dans la construction de la matrice A_x et du vecteur B_x.
En substituant B.04 dans B.03, le terme non linéaire s'écrit

$$-\int_{\Omega} O_2^* \cdot O_2^2\, d\Omega = -\int_{\Omega} (R^{x*} \cdot R^t) \cdot (\sum_{i=1}^{n} F_i^x(x) \cdot F_i^t(t) + R^x(x) \cdot R^t(t))^2 d\Omega \qquad \text{(B.06)}$$

On peut remarquer que le terme O_2^2 est, à travers l'écriture PGD, un carré de binôme. Le tableau B.07 montre l'ensemble des contributions à la matrice A et au vecteur B du système B.05 liées au développement du terme non-linéaire.

	Contribution
$\{B1_x\}$	$\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}(\int_x R^{x*} \cdot F_i^x \cdot F_j^x\, dx \int_t R^t \cdot F_i^t \cdot F_j^t\, dt\,)$
$[A1_x]$	$2 \cdot \sum_{i=1}^{n}(\int_x R^{x*} \cdot F_i^x \cdot R^x dx \int_t R^t \cdot F_i^t \cdot R^t dt\,)$
$[A2_x]$	$\int_x R^{x*} \cdot R^x \cdot R^x\, dx \int_t R^t \cdot R^t \cdot R^t\, dt$

Tab B.07 *: contributions à la construction du système (B.05) des termes non-linéaires B.06*

Considérons que nous recherchons la fonction spatiale R^x, le seul terme non linéaire se trouve à la troisième contribution du tableau *B.07* et est dû à la présence du produit entre R^x et R^x, les fonctions *F* étant des fonctions connues qui peuvent être intégrées comme dans le cas linéaire. La présence du terme $[A2_x]$ rend nécessaire l'application d'une stratégie de résolution spécifique, la matrice *A* du système *B.05* étant maintenant dépendante de *R*. Plusieurs stratégies dites de linéarisation sont possibles.

Comme la méthode PGD est une méthode itérative, la contribution des termes non-linéaires peut être évaluée de trois manières différentes :

- 1. en considérant seulement la contribution des modes précédemment calculés, en d'autres termes en rajoutant seulement la première contribution du tableau *B.07*. Cette méthode est connue sous le nom de linéarisation incrémentale.

$$-\int_{\Omega} O_2^* \cdot O_2^2 \, d\Omega \approx -\int_{\Omega} O_2^* \cdot \left(\sum_{i=1}^{n} F_i^x \cdot F_i^t\right)^2 d\Omega \tag{B.08}$$

- 2. en considérant la contribution des modes précédemment calculés ainsi que la variation de la solution à chaque enrichissement, en d'autres termes en considérant le premier et le deuxième terme du tableau *B.07*.

$$-\int_{\Omega} O_2^* \cdot O_2^2 \, d\Omega \approx -\int_{\Omega} O_2^* \cdot \left(\left(\sum_{i=1}^{n} F_i^x \cdot F_i^t\right)^2 + 2 \cdot \left(\sum_{i=1}^{n} F_i^x \cdot F_i^t\right) \cdot (R^x \cdot R^t)\right) d\Omega \tag{B.09}$$

- 3. en considérant la contribution complète du terme non-linéaire à travers une procédure itérative qui permet d'approximer le dernier terme du tableau *B.07*.

$$-\int_{\Omega} O_2^* \cdot O_2^2 \, d\Omega \approx -\int_{\Omega} O_2^* \cdot \left(\left(\sum_{i=1}^{n} F_i^x \cdot F_i^t\right)^2 + 2 \cdot \left(\sum_{i=1}^{n} F_i^x \cdot F_i^t\right) \cdot (R^x \cdot R^t) + (R^x \cdot R^t)^2\right) d\Omega \tag{B.10}$$

Les deux dernières approches peuvent être considérées comme une application de l'algorithme de Newton-Raphson qui a été rappelé au paragraphe 0.5. Cet algorithme itératif est basé sur l'écriture suivante.

$$R^{i+1} = R^i - \left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)^{-1} \cdot f(R^i) \tag{B.11}$$

Dans la suite du chapitre, ces deux méthodes seront appelées respectivement *Newton 1* et *Newton 2*.

B.3.1. La méthode Newton 1

La stratégie *Newton 1* consiste à intégrer l'algorithme de Newton-Raphson à l'écriture PGD de la solution. L'écriture de la solution approchée PGD de la concentration d'oxygène à une itération *i+1* de l'algorithme de Newton-Raphson s'écrit :

$$O_{2i+1} = O_{2i} + \Delta O_{2i} = \sum_{j=1}^{i} F_{xj}(x) \cdot F_{tj}(t) + \Delta O_{2i} \tag{B.12}$$

L'itération *i* coïncide dans cette méthode à l'itération *i* du point fixe. La recherche de ΔO_{2i} coïncide donc avec la recherche du couple $R_x R_t$.

La méthode de Newton-Raphson nécessite l'écriture de la matrice tangente. Pour la recherche des fonctions spatiales, la matrice tangente s'écrit pour chaque itération du point fixe:

$$\begin{gathered} [A_T(O_{2i})] = [A(O_{2i})] + \frac{\partial [A(O_{2i})]}{\partial O_{2i}} \{O_{2i}\} \\ \int_\Omega O_2^* (2(\sum_{j=0}^{i} F_{xj}(x) \cdot F_{tj}(t)) + (R_x \cdot R_t))\, d\Omega \quad \rightarrow \quad \frac{\partial [A(O_{2i})]}{\partial O_{2i}} \{O_{2i}\} \end{gathered} \tag{B.13}$$

Avec cette méthode *Newton 1*, le terme non-linéaire est pris en compte dans la solution au fur et à mesure que les modes sont rajoutés.

B.3.2. La méthode Newton 2

Contrairement à la stratégie de *Newton 1*, la stratégie *Newton 2* consiste à considérer une itération de l'algorithme de Newton-Raphson à l'intérieur d'une itération de l'algorithme du point fixe. Cela revient donc à prendre en compte la contribution complète du terme non linéaire pour chaque fonction calculée pendant l'algorithme PGD.

$$O_2 = \sum_{j=1}^{n} F_{xj}(x) \cdot F_{tj}(t) + (R_{xi} \cdot R_{ti} + \Delta R_{xi} \cdot \Delta R_{ti}) \tag{B.14}$$

Dans ce cas, la recherche des fonctions *R* devient un problème non-linéaire et un certain nombre d'itérations de Newton-Raphson sont donc faites.

$$\begin{gathered} [A_T(R_x)] = [A(R_x)] + \frac{\partial [A(R_x)]}{\partial R_x} \{R_x\} \\ \int_\Omega O_2^* \, (2(R_x \cdot R_t) + (\Delta R_x \cdot \Delta R_t) d\Omega \quad \rightarrow \quad \frac{\partial [A(R_x)]}{\partial R_x} \{O_{2i}\} \end{gathered} \tag{B.15}$$

Chaque fonction *R* calculée tient compte du terme non linéaire.

B.4. Comparaison des deux méthodes

Dans ce paragraphe, les résultats obtenus avec les méthodes *Newton 1* et *Newton 2* sont présentés et discutés. La méthode de linéarisation incrémentale n'est pas étudiée ici en raison de ses performances reconnues comme moins efficaces lorsque les problèmes sont fortement non linéaires.

Pour les simulations, un maillage régulier de 1000 éléments en espace et de 1000 éléments en temps est considéré. L'évolution de l'erreur obtenue pour les deux méthodes par rapport à la solution de référence (cf. paragraphe B.0.1) est donnée sur la figure B.0.2 en fonction du nombre de modes.

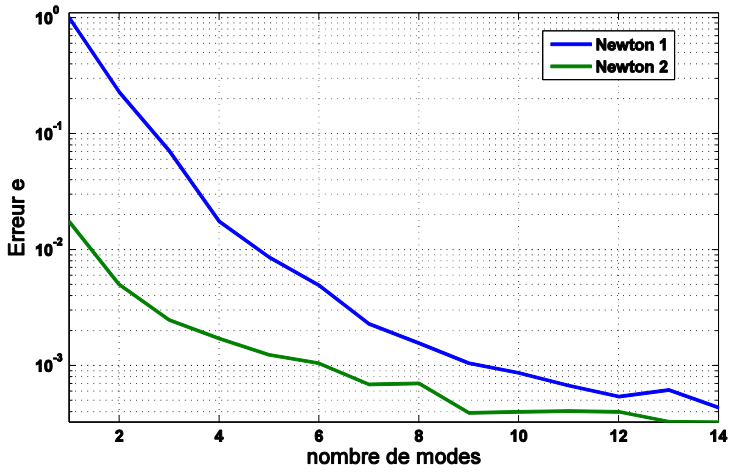


Fig.B.02 *Erreur par rapport à la solution de référence en fonction de nombre de modes pour les méthodes Newton 1 et Newton 2*

L'écart entre la solution de référence et la solution PGD diffère selon la méthode de linéarisation utilisée. La méthode *Newton 2* permet d'avoir une erreur beaucoup plus petite que celle obtenue avec la méthode *Newton 1* pour des faibles nombres de modes. Ceci est dû au fait que chaque mode calculé tient compte du terme non-linéaire de façon plus forte.

Afin de mieux mettre en avant la différence entre les deux méthodes, considérons les équations résolues par chacune au niveau d'une itération de point fixe.

Dans le cas de la méthode *Newton 1*, l'équation résolue est :

$$a \cdot \frac{dR^t(t)}{dt} = b \cdot R^t(t) + 2 \qquad \text{(B.16)}$$

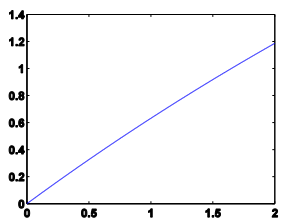
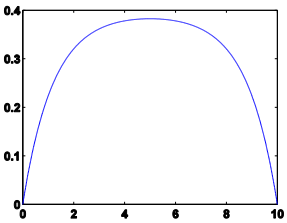
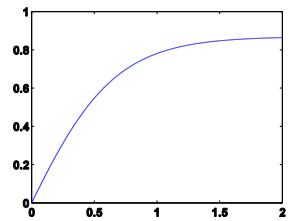
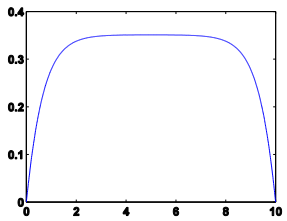
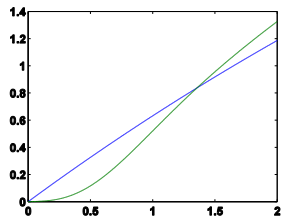
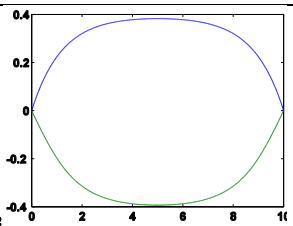
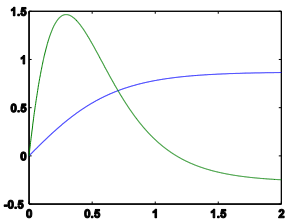
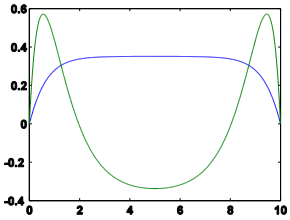
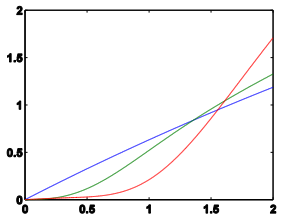
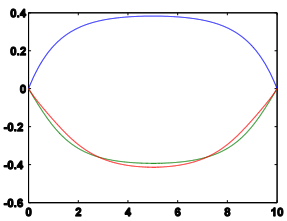
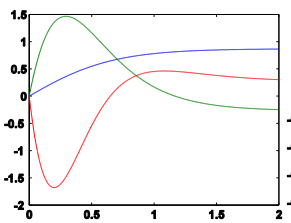
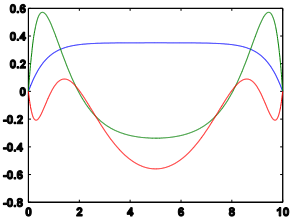
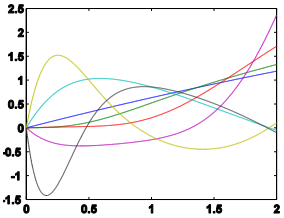
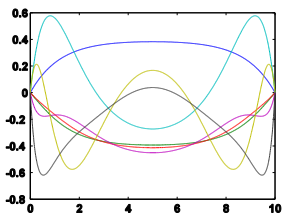
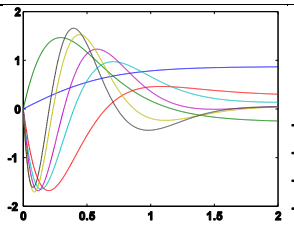
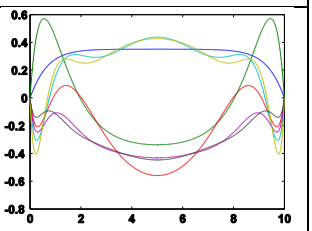
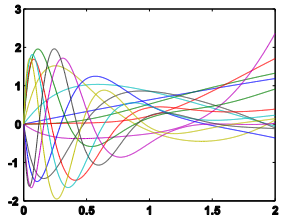
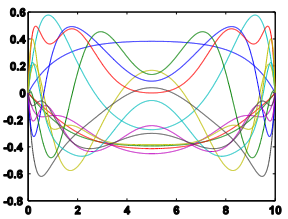
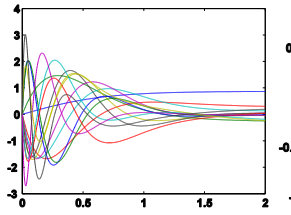
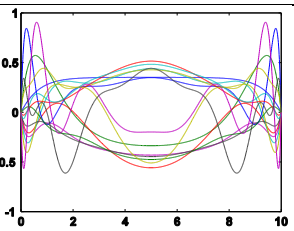
Les influences du terme non-linéaire sont uniquement dues aux modes précédents.

Dans le cas de la méthode *Newton 2*, l'équation résolue est :

$$a \cdot \frac{dR^t(t)}{dt} = b \cdot R^t(t) + c \cdot (R^t(t))^2 + 2 \qquad \text{(B.17)}$$

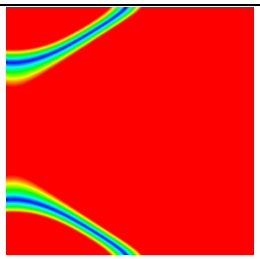
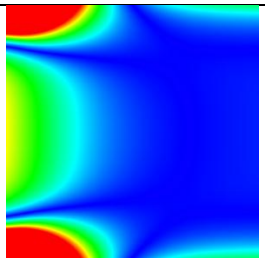
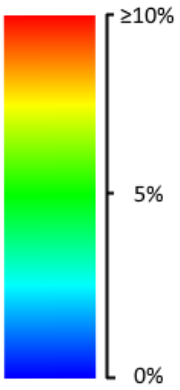
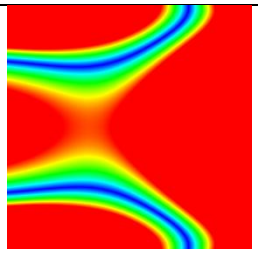
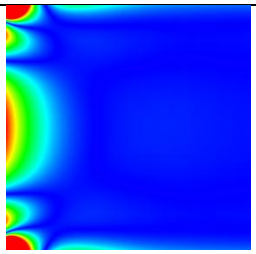
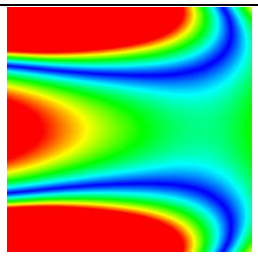
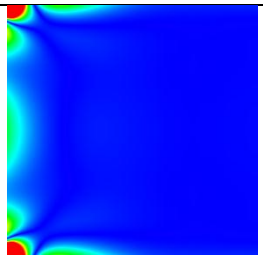
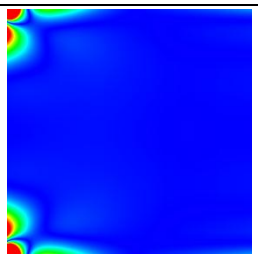
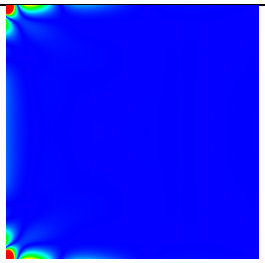
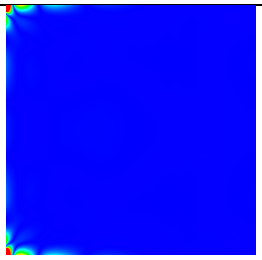
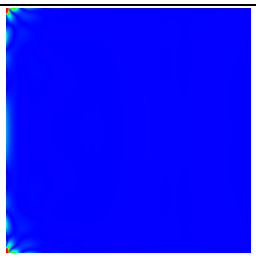
car la fonction en temps du premier mode tient compte de l'influence du terme non-linéaire.

Les modes calculés par chacune des méthodes sont représentés sur le tableau B.18.

N modes	Newton 1		Newton 2	
	t	*X*	*t*	*x*
1				
2				
3				
7				
14				

Tab B.18 *: Représentation des modes calculés avec les deux méthodes*

La distribution de l'erreur par rapport à la solution analytique sur le domaine spatio-temporel est illustrée pour les deux méthodes en fonction du nombre de modes sur le tableau B.19.

N modes	Newton 1	Newton 2	
1			
2			
3			
7			
14			

Tab B.19 *: Représentation de l'erreur en fonction du nombre de modes pour les deux méthodes de linéarisation*

Pour un niveau d'erreur atteint avec 3 modes par la méthode *Newton 2*, la méthode *Newton 1* nécessite 7 modes. La méthode de *Newton 2* est plus précise que la méthode Newton pour un nombre de modes donné. Le calcul des 14 modes requiert pour la méthode de *Newton 2* 12 % de temps en plus que la méthode *Newton 1*. Ce temps en plus est dû au fait que pour chaque fonction R recherchée (à chaque itération de point fixe) plusieurs itérations sont nécessaires. Le temps n'augmente pas néanmoins de manière trop importante car les itérations exécutées

nécessitent une mise à jour partielle du système linéaire (réactualisation uniquement du terme non linéaire).

Pour un niveau d'erreur fixé de 0.001, la méthode *Newton 1* doit calculer 9 modes et la méthode *Newton 2* seulement 6 modes. Dans ce cas, le gain en temps est évident avec la méthode *Newton 2* qui nécessite environ 38% de temps en moins pour atteindre ce niveau d'erreur.

B.5. Influence du maillage sur la solution PGD

Nous étudions ici l'influence du maillage sur la solution PGD en fonction de la méthode de linéarisation. L'évolution de l'erreur par rapport à la solution de référence (cf. paragraphe B.2) est représentée en fonction du nombre de modes pour chacune des méthodes de linéarisation pour :

- sur la figure de gauche, un maillage spatial fixé à 1000 éléments et 2 maillages temporels différents de 100 et 1000 éléments ;
- sur la figure de droite, un maillage temporel fixé à 1000 éléments et un maillage spatial de 100 et 1000 éléments.

Les deux méthodes de linéarisation présente quasiment la sensibilité au maillage.

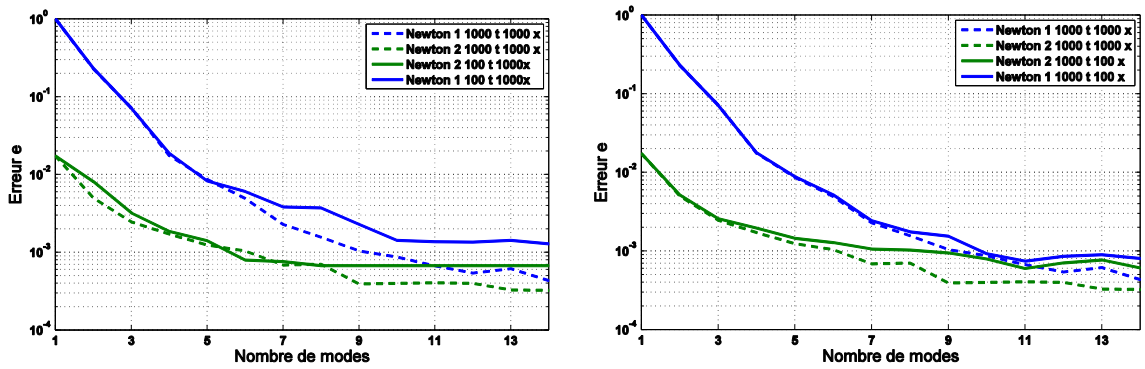


Fig.B.03 : *Comparaison de l'erreur par rapport à la solution de référence pour différents maillages temporels (à gauche) et spatiaux (à droite) en fonction du nombre de modes pour les 2 méthodes*

B.6. Utilisation de la méthode de Runge-Kutta pour le calcul des fonctions temporelles

Pour la recherche des fonctions temporelles, la méthode de Runge-Kutta est discutée ici. Rappelons que la méthode de Runge-Kutta présentée paragraphe 0.4.2 est implémentée de manière à prendre en compte des non-linéarités présentes dans les équations du modèle. Les méthodes de Runge-Kutta résolvent donc les problèmes non linéaires avec la stratégie *Newton*

2. Les performances de la méthode de Runge-Kutta peuvent donc être comparées avec les résultats obtenus dans le paragraphe précédent. L'évolution de l'erreur par rapport à la solution de référence en fonction du nombre de modes est représentée sur la figure B.04 pour les méthodes de Newton 1, de Newton 2 (avec un schéma d'Euler explicite) et avec la méthode PGD Runge-Kutta présentée au chapitre précédent (cf. A.5.).

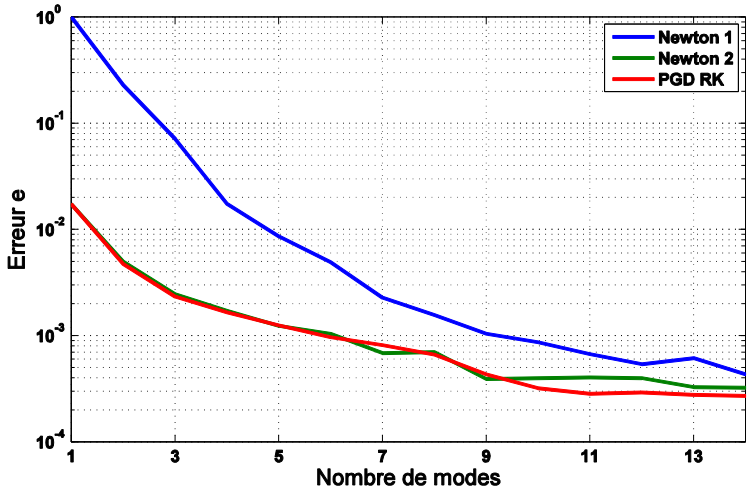


Fig.B.04 : *Erreur par rapport à la solution de référence en fonction de nombre de modes pour les différentes méthodes*

Comme attendu, les méthodes de *Newton 2* et de PGD Runge-Kutta donnent quasiment les mêmes évolutions. Des différences sont néanmoins visibles entre la méthode d'Euler *Newton 2* et la méthode de Runge-Kutta. Elles sont dues au fait que dans la méthode de Runge-Kutta les fonctions sont représentées sur des polynômes de degré 5 et sont recherchées sur une discrétisation adaptée. Cette discrétisation permet donc de garantir une erreur locale petite come vu dans le chapitre introductif. Les fonctions temporelles dans le cas de la méthode de Runge-Kutta ont donc des discrétisations a priori différentes, plus ou moins raffinées selon les exigences de la méthode. Les maillages obtenus sont donnés sur la figure B.05 où les différentes fonctions temporelles obtenues pour chaque mode sont représentées (à gauche) ainsi que plus précisément (à droite) le nombre de points de discrétisation temporelle selon le mode.

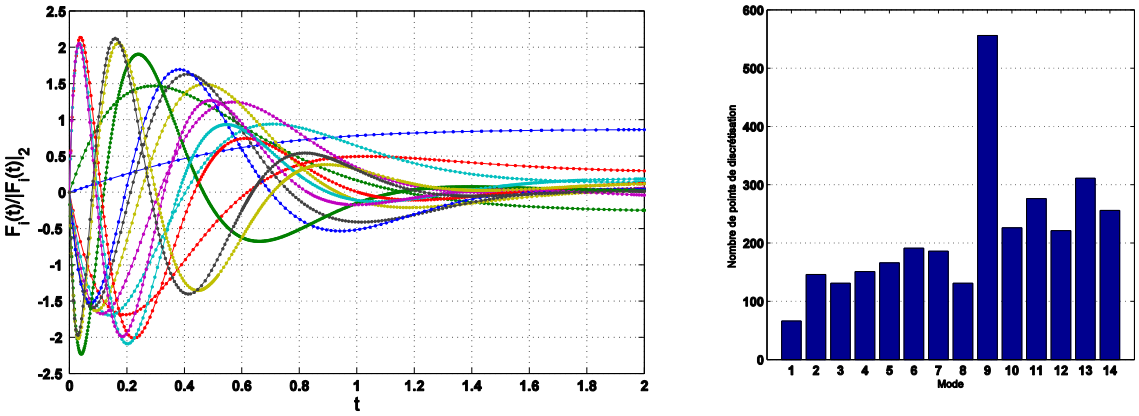
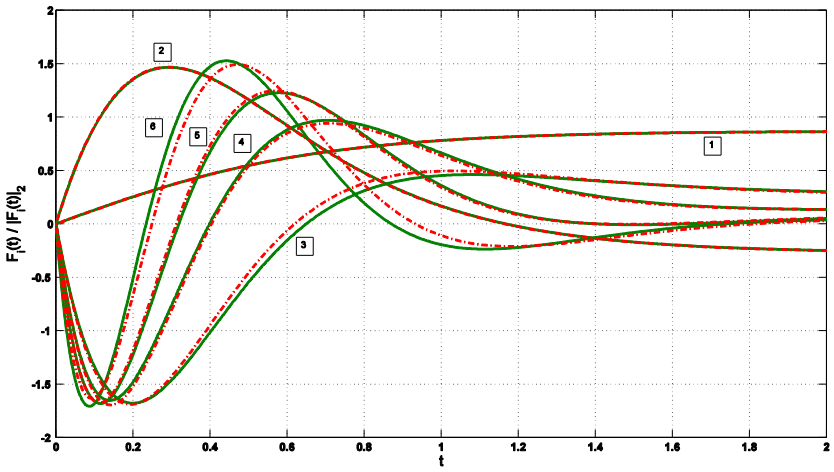


Fig.B.05 : *Fonctions temporelles calculées à travers la méthode de Runge-Kutta (à gauche) et nombre de points de discrétisation temporelles pour chaque mode (à droite)*

Le nombre de points de discrétisation en temps reste plutôt petit pour chaque mode et notamment inférieur à celui utilisé avec les deux autres méthodes qui est de 1001. Dans cet exemple, la méthode de Runge-Kutta nécessite 42% de temps en moins pour le calcul des 14 modes. Si maintenant on considère un niveau d'erreur de 0.001, le gain en temps de calcul est beaucoup plus marqué car la méthode de Runge-Kutta nécessite 70% de temps en moins que la méthode d'Euler.

Les erreurs de la méthode d'Euler *Newton 2* et de Runge-Kutta décroissent avec la même tendance jusqu' au mode 5. Après le mode 5, l'erreur décroit de façon plus importante pour la méthode de Runge-Kutta. Pour mieux analyser ce phénomène, nous allons comparer les modes trouvés par la méthode *Newton 2* et la méthode de Runge-Kutta. Les modes obtenus sont représentés sur la figure B.06 avec en vert les modes obtenus pour la méthode de *Newton 2* Euler et en rouge les modes obtenus avec la méthode de Runge-Kutta.



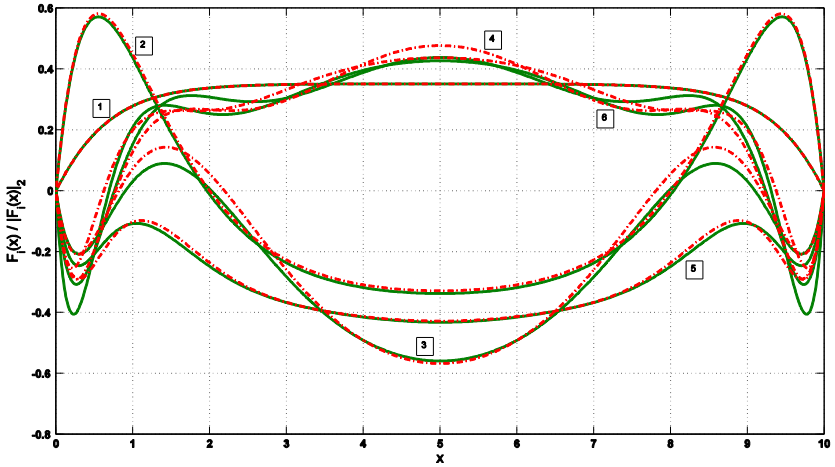


Fig.B.06 : *comparaison des 6 premiers modes entre la PGD classique (méthode Newton 2 Euler) en vert et la PGD Runge-Kutta en rouge*

Les 6 premiers modes ont des fonctions temporelles très similaires entre elles. Les deux premiers modes sont pratiquement identiques et, au fur et à mesure du calcul, les différences deviennent de plus en plus marquées. Ceci est dû, comme expliqué dans la partie A du manuscrit, à la propagation de l'erreur commise sur chaque évaluation de chaque fonction à l'intérieur de l'algorithme PGD. Cette erreur d'évaluation est a priori différente pour chaque méthode. Le nombre d'itérations de l'algorithme du point fixe est le même pour ces deux méthodes comme illustré figure B.07.

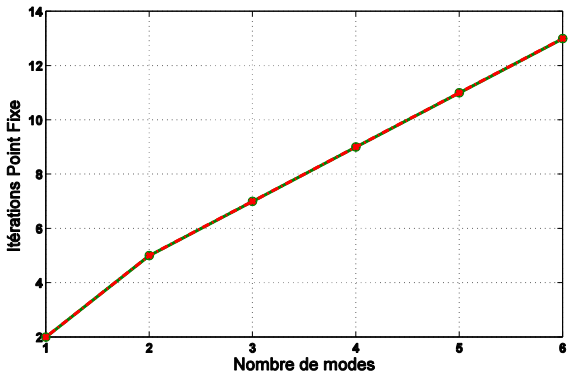


Fig.B.07 : *Comparaison itérations cumules du point fixe entre la PGD classique e la PGD Runge-Kutta*

Les modes de 7 à 12 obtenues avec les deux méthodes sont représentés sur la figure B.08 avec le même code couleur que précédemment. Les modes obtenus en espace et en temps sont cette fois très différents.

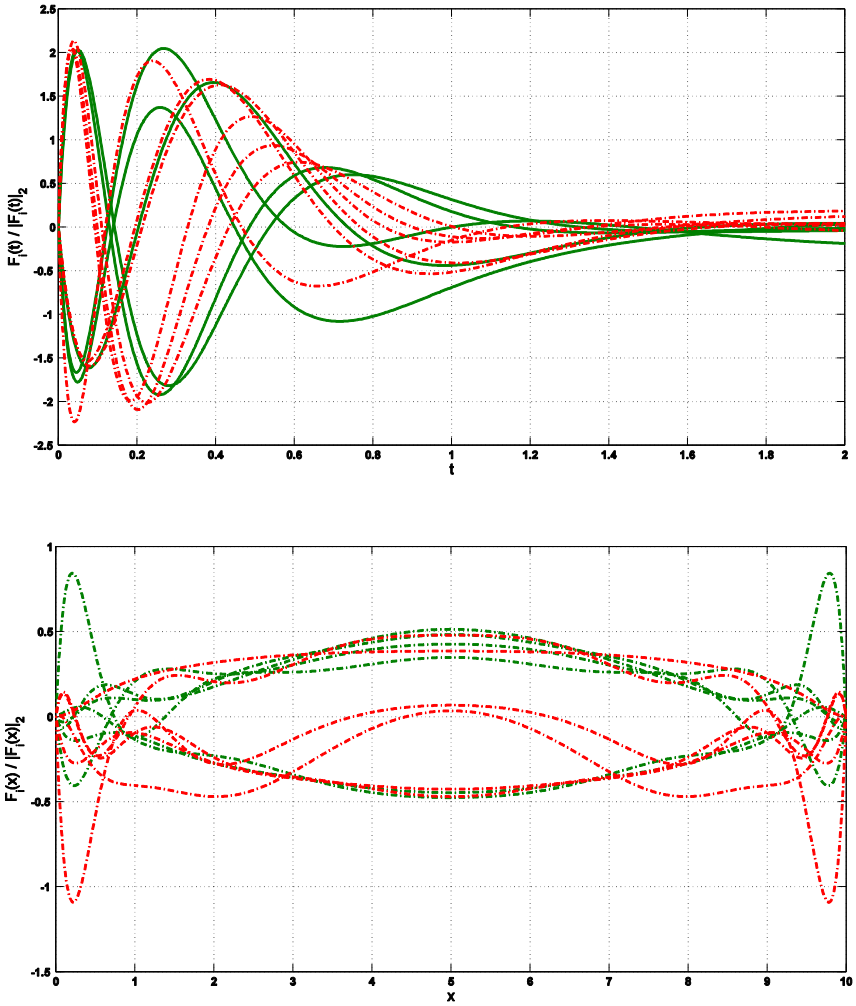


Fig.B.08 : *Comparaison des deuxièmes 6 modes entre la PGD classique e la PGD Runge-Kutta*

B.7. Conclusions Partie B

On peut conclure à travers le problème non linéaire étudié que l'application de la stratégie *Newton 2* permet une meilleure évaluation des termes non-linéaires présents dans l'équation. Ainsi, les modes contiennent plus d'informations sur le terme non-linéaire et un nombre réduit de modes permet d'avoir une représentation correcte de la solution. De plus, la méthode *Newton 2* est plus performante en termes de temps de calcul par rapport à la méthode *Newton 1* même si elle évalue les non-linéarités à chaque évaluation des fonctions R. L'utilisation de la méthode de Runge-Kutta permet une évaluation plus précise des fonctions R grâce à la représentation du résultat à travers des polynômes de degré 5 et une discrétisation temporelle adaptée. Cette évaluation plus précise confirme la tendance observée dans la Partie A. L'utilisation de la méthode Runge-Kutta permet un gain en terme de temps de calcul par rapport à la méthode d'Euler du fait que les maillages générés par la méthode de Runge-Kutta possèdent un nombre

d’éléments beaucoup plus petit par rapport au nombre nécessaire à la méthode d’Euler pour atteindre le même niveau d’erreur.

Dans la prochaine partie une étude des modèles couplés et raides est abordée de façon à pouvoir avoir tous les instruments nécessaires pour résoudre le modèle de thermo oxydation présenté dans la partie introductive du manuscrit.

Partie C. Problèmes de diffusion-réaction : couplage et raideur

Partie C. Problèmes de diffusion-réaction : couplage et raideur *91.*

C.1. Résolution PGD des problèmes couplés *91.*

C.2. Modèle de diffusion-réaction 1D *94.*

C.2.1. Solution de référence *94.*

C.2.2. Résolution PGD *95.*

C.3. Systèmes couplés non-linéaires *97.*

C.3.1. Solution de référence *98.*

C.3.2. Résolution PGD *98.*

C.4. Systèmes raides *100.*

C.4.1. Solution de référence *102.*

C.4.2. Résolution PGD *103.*

C.5. Systèmes raides non-linéaires *113.*

C.5.1. Solution de Référence *116.*

C.5.2. Résolution PGD *117.*

C.5.3. Premier mode PGD *119.*

C.5.4. Deuxième mode PGD *126.*

C.6. Conclusions Partie C *128.*

Dans ce chapitre, le modèle de diffuso-oxydation dans toute sa complexité est traitée en abordant plus spécifiquement le lien couplage non linéarité et raideur du système. Le premier paragraphe de ce chapitre est consacré à la description de deux stratégies qui sont utilisées pour la résolution des problèmes couplés. Une analyse sur les équations à résoudre est réalisée afin de mieux comprendre les difficultés rencontrées. Deux exemples simples décrivent ensuite les différences entre les stratégies de résolution concernant le couplage et la non linéarité. Une discussion sur la résolution d'un système raide linéaire est ensuite abordée. Au travers de plusieurs cas à raideurs variables, des difficultés liées aux méthodes de résolution des équations qui dépendent de la variable temporelle sont illustrées. Dans la partie finale de ce chapitre, nous abordons la résolution du problème de diffuso-oxydation des matériaux polymères décrit dans la partie introductive de ce manuscrit.

C.1. Résolution PGD des problèmes couplés

Comme dans le cas de la résolution des problèmes non linéaires, la résolution des problèmes couplés nécessite l'utilisation d'une stratégie adaptée à combiner aux itérations du point fixe pour la recherche des fonctions R génériques. Pour trouver ces fonctions, nous avons vu dans les chapitres précédents que nous devions résoudre un système algébrique du type C.01.

$$[A_x]\{R^x\} = \{B_x\} \qquad \text{(C.01)}$$

La formulation et ou la construction de ce système varient selon la stratégie de couplage. Dans ce travail, deux stratégies de couplage sont envisagées : le couplage fort analogue au cas Newton 2 vu en B.3.2 et la stratégie de couplage faible analogue au cas Newton 1 vu en B.3.1. Afin d'illustrer plus en détail l'écriture du système C.01 selon les stratégies de couplage envisagées, nous considérons un cas de système couplé restreint à deux équations et deux inconnues notées Y_1 et Y_2. On recherche les solutions Y_1 et Y_2 sous la forme de représentation séparée espace-temps. Une fois cette écriture prise en compte, pour l'exemple, la formulation faible restreinte à la recherche du mode spatial à travers une itération du point fixe (équivalente à C.01) s'écrit sous la forme suivante :

- dans le cas du couplage faible

$$\begin{aligned}&[A_{Y_1x}]\{R_{Y_1}^x\} = \{B_{Y_1x}\}\\&[A_{Y_2x}]\{R_{Y_2}^x\} = \{B_{Y_2x}\}\end{aligned} \qquad \text{(C.02)}$$

- dans le cas du couplage fort

$$\begin{bmatrix} A_{Y_1Y_1} & A_{Y_1Y_2} \\ A_{Y_2Y_1} & A_{Y_2Y_2} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} R_{Y_1}^x \\ R_{Y_2}^x \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} B_{Y_1x} \\ B_{Y_2x} \end{Bmatrix} \qquad \text{(C.03)}$$

Dans le cas du couplage faible, les dimensions de la matrice A et des vecteurs B et R sont égales au nombre de points de la discrétisation sur laquelle on cherche la solution. A travers les itérations de point fixe, les informations sur l'évolution de la première inconnue dans le deuxième système sont prises en compte et vice versa.

Dans le cas du couplage fort, les dimensions de A, B et R sont le double de celles dans le cas du couplage faible, chaque inconnue ayant le même nombre de points de discrétisation, et le couplage est pris en compte à chaque itération du point fixe.

Détaillons les contributions de chaque terme du problème à la matrice A et au vecteur B.

De façon cohérente avec le modèle de thermo oxydation, on considère ici uniquement des équations qui contiennent des termes de degré inférieur ou égal à deux, c'est-à-dire si on note Y_i toutes les inconnues du problème, les termes présents dans les équations du modèle à résoudre peuvent être soit de type linéaire (Y), soit sous forme de produit de deux inconnues ($Y_1 \cdot Y_2$).

A titre d'exemple, la 5ème équation de l'évolution de l'espèce [PH] du modèle de thermo oxydation, présente dans le système complet (équation 0.05) est reportée ici dans l'équation C.04.

$$\frac{\partial[PH]}{\partial t} = -k_3[PH][PO_2] - \gamma k_1[POOH] \qquad \text{(C.04)}$$

Trois termes sont présents dans cette équation. Leur développement PGD est schématisé dans le tableau *C.05*.

Type	Terme	Développement PGD
Y	$\frac{\partial[PH]}{\partial t}$	$\sum_{i=1}^{n}\left(F_i^{[PH]x}\frac{dF_i^{[PH]t}}{dt}\right)+R^{[PH]x}\frac{dR^{[PH]t}}{dt}$
	$\gamma k_1[POOH]$	$\gamma k_1\cdot(\sum_{i=1}^{n}\left(F_i^{[POOH]x}F_i^{[POOH]t}\right)+R^{[POOH]x}R^{[POOH]t})$
$Y_1\cdot Y_2$	$k_3[PH][PO_2]$	$k_3\cdot(\sum_{i=1}^{n}\left(F_i^{[PH]x}F_i^{[PH]t}\right)+R^{[PH]x}R^{[PH]t})\cdot(\sum_{i=1}^{n}\left(F_i^{[PO_2]x}F_i^{[PO_2]t}\right)+R^{[PO_2]x}R^{[PO_2]t})$

Tab C.05 *: exemple de développement PGD des termes des équations*

Après l'étape d'intégration, les contributions au système décrit par l'équation C.01 sont résumées dans le tableau suivant. Pour ne pas alourdir le tableau, les termes où une dérivée est présente ne sont pas détaillés mais ils suivent la même structure que les termes qui ne contiennent pas de dérivées.

	Y	$Y_1\cdot Y_2$
$\{B1_x\}$	$\sum_{i=1}^{n}(\int_x R^{x*}\cdot F_i^x dx\int_t R^t\cdot F_i^t dt)$	$\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}(\int_x R^{x*}\cdot F_i^{(1)x}\cdot F_j^{(2)x}dx\int_t R^t\cdot F_i^{(1)t}\cdot F_j^{(2)t}dt)$
$\{B2_x\}$ $[A11_x]$	-	$\sum_{i=1}^{n}(\int_x R^{x*}\cdot F_i^{(1)x}\cdot R^{(2)x}dx\int_t R^t\cdot F_i^{(1)t}\cdot R^{(2)t}dt)$
$\{B3_x\}$ $[A12_x]$	-	$\sum_{j=1}^{n}(\int_x R^{x*}\cdot R^{(1)x}\cdot F_j^{(2)x}dx\int_t R^t\cdot R^{(1)t}\cdot F_j^{(2)t}dt)$
$\{B4_x\}$ $[A2_x]$	$\int_x R^{x*}\cdot R^x dx\int_t R^t\cdot R^t dt$	$\int_x R^{x*}\cdot R^{(1)x}\cdot R^{(2)x}dx\int_t R^t\cdot R^{(1)t}\cdot R^{(2)t}dt$

Tab C.06 *: contributions à la construction du système (C.01)*

Le tableau C.06 résume de manière exhaustive toutes les contributions discutées dans les chapitres précédents. En particulier, dans le chapitre A, les contributions de la première colonne

(terme linéaire Y) sont présentes, et dans le chapitre B ceux de la deuxième colonne du tableau dans le cas particulier où $Y_1=Y_2$.

La flexibilité du code développé pendant cette thèse permet, dans le cas des problèmes avec au moins trois inconnues, une résolution hybride. En effet, il est possible de choisir de coupler certaines équations avec un couplage fort et d'autres équations avec un couplage faible. Par exemple, si on considère un problème avec trois inconnues Y_1, Y_2 et Y_3, il est possible de coupler de manière forte Y_1 et Y_2 et de manière faible Y_3.

C.2. Modèle de diffusion-réaction 1D

Considérons maintenant un modèle de diffusion-réaction comme celui proposé équation C.07.

$$\begin{cases} \dfrac{\partial Y_1}{\partial t} = D \cdot \dfrac{\partial^2 Y_1}{\partial x^2} + a \cdot Y_2 \\ \dfrac{\partial Y_2}{\partial t} = b \cdot Y_1 + c \cdot Y_2 \end{cases} \tag{C.07}$$

avec $D=0.5$, $a=-100$, $b=1$ et $c=-100$. Ce problème est défini sur le domaine : $t \in [0, 1]$, $x \in [0, 1]$. Les conditions initiales sont nulles pour les deux inconnues soit $Y_1(x, t=0)=0$ et $Y_2(x, t=0)=0$ et les conditions aux bords sont constantes et égales à 1 pour l'inconnue Y_1 soit $Y_1(x=0, t) = Y_1(x=1, t)=1$.

Il s'agit d'un système linéaire de deux équations à deux inconnues. Notons que l'équation pour l'inconnue Y_1 est une équation globale qui dépend de x et t alors que l'équation pour la deuxième inconnue Y_2 est une équation locale (équation différentielle) qui devient globale par le terme de couplage. Dans le cadre de cette thèse, nous considérons pour les deux inconnues une résolution séparée espace-temps pour les deux inconnues, soit une globalisation de l'inconnue Y_2 comme dans les travaux de Chinesta et al. (40).

C.2.1. Solution de référence

Afin de calculer une solution de référence au problème C.07, le système a été discrétisé spatialement avec un schéma aux différences finies décrit équation A.08. Le système d'équations différentielles obtenu est ensuite résolu avec le code commercial MATLAB® avec la méthode ODE23tb.

$$\frac{dY_{(i)}}{dt} = D \cdot \frac{Y_{(i-2)} - 2Y_{(i)} + Y_{(i+2)}}{\Delta x^2} + aY_{(i+1)}$$

$$\frac{dY_{(i+1)}}{dt} = bY_{(i)} + cY_{(i+1)}$$

Avec $i = 1,2,4 \ldots ,2N$ (C.08)

où l'indice i avec i impair (respectivement pair) correspond à la discrétisation spatiale du champ de la variable Y_1 (respectivement Y_2) et $Y_1(1) = Y_1\ (2N-1)=1$. Dans le calcul de Y_1, le terme de couplage contenant la variable Y_2 est évaluée à l'incrément de temps précédent.

La solution ce problème est représentée sur la figure C.01.

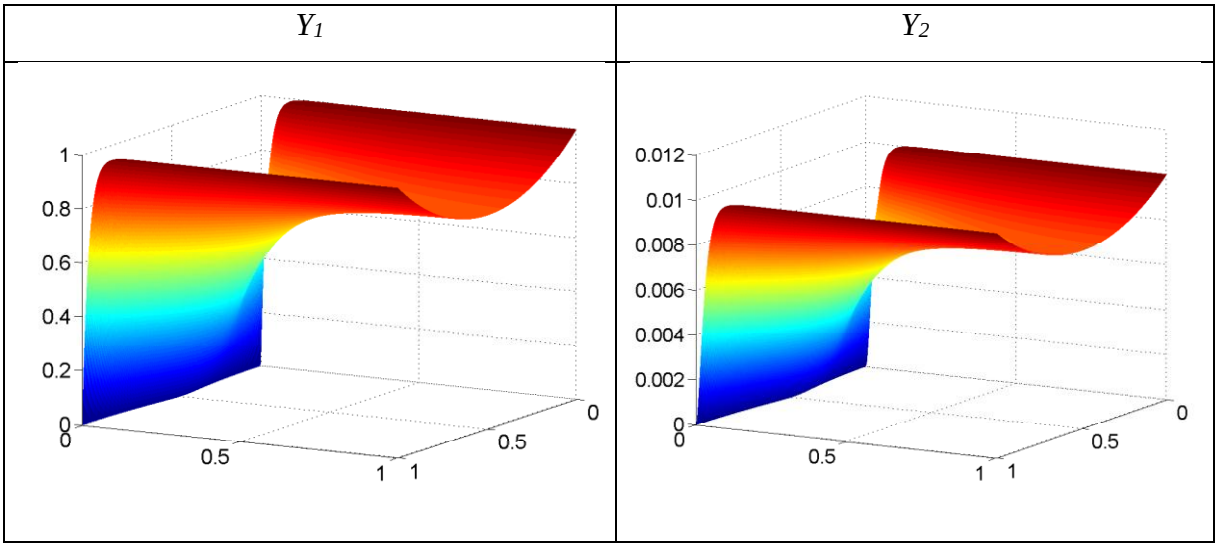


Fig C.01 *: Solution de référence du problème couplé linéaire C.07*

C.2.2.Résolution PGD

L'écriture des systèmes C.02 et C.04 lors de l'application de la PGD est donnée dans le tableau C.09 pour chacune des équations dans le cas du couplage faible et du couplage fort. On peut remarquer par exemple pour la 1ère équation que le dernier terme est considéré comme un B dans le cadre du couplage faible et un A dans le cadre du couplage fort.

Première équation	$\underbrace{\sum_{i_1=0}^{n_1} F_{i_1}^{(1)x}\frac{\partial F_{i_1}^{(1)t}}{\partial t}}$	$\underbrace{+R^{(1)x}\frac{\partial R^{(1)t}}{\partial t}}$	$\underbrace{=D\cdot\sum_{i_1=0}^{n_1}\frac{\partial^2 F_{i_1}^{(1)x}}{\partial x^2}F_{i_1}^{(1)t}}$	$\underbrace{+\frac{\partial^2 R^{(1)x}}{\partial x^2}R^{(1)t}}$	$\underbrace{+a\cdot\sum_{i_2=0}^{n_2} F_{i_2}^{(2)x}F_{i_2}^{(2)t}}$	$\underbrace{+R^{(2)x}R^{(2)t}}$
Faible	$\{B1\}_{\frac{\partial Y_1}{\partial t}} \to \{B_{y_1}\}$	$[A2]_{\frac{\partial Y_1}{\partial t}} \to [A_{Y_1}]$	$\{B1\}_{D\frac{\partial^2 Y_1}{\partial x^2}} \to \{B_{y_1}\}$	$[A2]_{D\frac{\partial^2 Y_1}{\partial x^2}} \to [A_{Y_1}]$	$\{B1\}_{aY_2} \to \{B_{y_1}\}$	$\{B4\}_{aY_2} \to \{B_{y_1}\}$
Forte	$\{B1\}_{\frac{\partial Y_1}{\partial t}} \to \{B_{y_1}\}$	$[A2]_{\frac{\partial Y_1}{\partial t}} \to [A_{Y_1Y_1}]$	$\{B1\}_{D\frac{\partial^2 Y_1}{\partial x^2}} \to \{B_{y_1}\}$	$[A2]_{D\frac{\partial^2 Y_1}{\partial x^2}} \to [A_{Y_1Y_1}]$	$\{B1\}_{aY_2} \to \{B_{y_1}\}$	$[A2]_{aY_2} \to [A_{Y_1Y_2}]$
Deuxième équation	$\underbrace{\sum_{i_1=0}^{n_1} F_{i_1}^{(2)x}\frac{\partial F_{i_1}^{(2)t}}{\partial t}}$	$\underbrace{+R^{(2)x}\frac{\partial R^{(2)t}}{\partial t}}$	$\underbrace{=b\cdot\sum_{i_2=0}^{n_2} F_{i_2}^{(1)x}F_{i_2}^{(1)t}}$	$\underbrace{+R^{(1)x}R^{(1)t}}$	$\underbrace{+c\cdot\sum_{i_2=0}^{n_2} F_{i_2}^{(2)x}F_{i_2}^{(2)t}}$	$\underbrace{+R^{(2)x}R^{(2)t}}$
Faible	$\{B1\}_{\frac{\partial Y_2}{\partial t}} \to \{B_{y_2}\}$	$[A2]_{\frac{\partial Y_2}{\partial t}} \to [A_{Y_2}]$	$\{B1\}_{bY_1} \to \{B_{y_2}\}$	$\{B4\}_{bY_1} \to \{B_{y_2}\}$	$\{B1\}_{cY_2} \to \{B_{y_2}\}$	$[A2]_{aY_2} \to [A_{Y_2Y_2}]$
Fort	$\{B1\}_{\frac{\partial Y_2}{\partial t}} \to \{B_{y_2}\}$	$[A2]_{\frac{\partial Y_2}{\partial t}} \to [A_{Y_2Y_2}]$	$\{B1\}_{bY_1} \to \{B_{y_2}\}$	$[A2]_{bY_1} \to [A_{Y_2Y_1}]$	$\{B1\}_{cY_2} \to \{B_{y_2}\}$	$[A2]_{aY_2} \to [A_{Y_2Y_2}]$

Tab C.09 *: Construction du système décrit par l'équation C.02 (couplage faible) et C.03 (couplage fort)*

Les simulations PGD pour les deux types de couplage ont été menées en utilisant la méthode de Runge-Kutta pour déterminer les fonctions temporelles. L'évolution de l'erreur en fonction de la solution de référence pour les deux types de couplage est donnée en fonction du nombre de modes figure C.02.

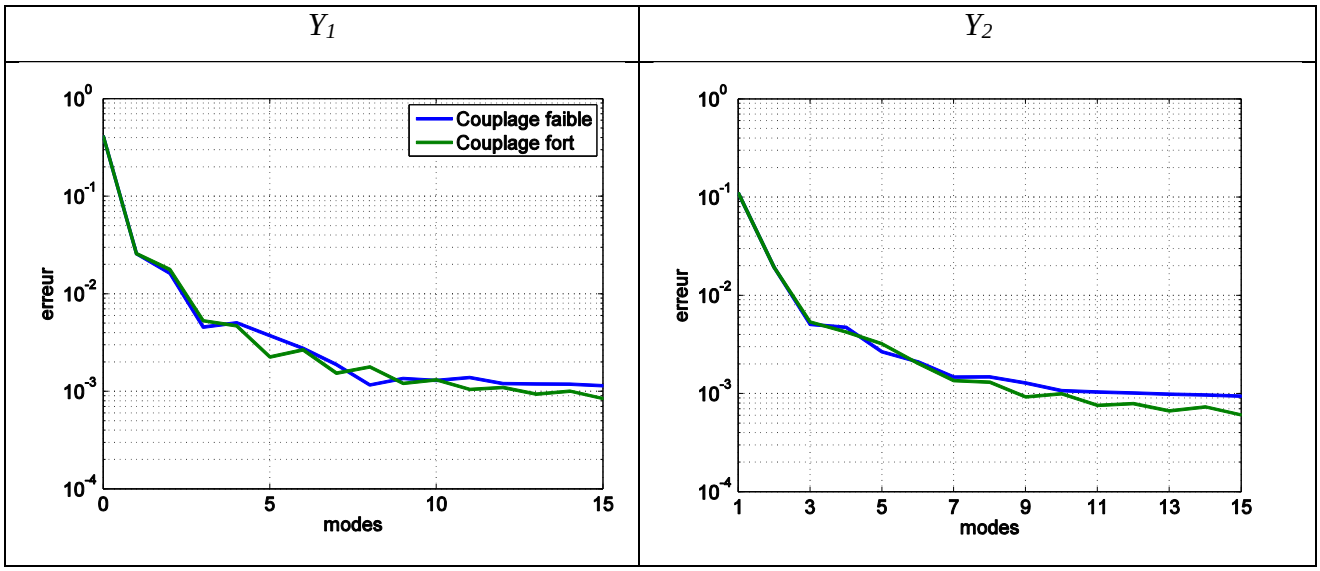


Fig C.02 *: Comparaison de l'évolution de l'erreur en fonction du nombre de modes pour les stratégies de couplage*

La stratégie de couplage fort montre des meilleures performances autant du point de vue de l'erreur que du point de vue du temps de calcul (environ 10% en moins). Le gain en temps de calcul est dû à un nombre d'itérations cumulées de point fixe moins grand dans le cas de la stratégie de couplage fort par rapport à celle de couplage faible comme le montre la figure C.03.

Bien que les problèmes à résoudre dans le cas de la stratégie de couplage fort sont de plus grande taille, dans cet exemple, le nombre d'itérations limité permet le gain de temps observé.

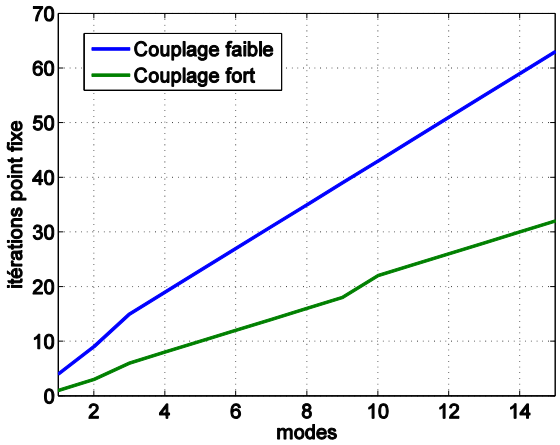


Fig C.03 *: Comparaison du nombre d'itérations cumulées de l'algorithme du point fixe en fonction du nombre de modes pour les stratégies de couplage*

C.3. Systèmes couplés non-linéaires

Considérons maintenant un système couplé non linéaire. Dans ce cas, la stratégie de couplage fort ou faible, présentée précédemment, doit être combinée à une stratégie de linéarisation comme présenté chapitre B.

La stratégie de couplage impacte directement les termes qui 'restent' non-linéaires à l'intérieur du point fixe. Afin d'illustrer les 4 stratégies de résolution (couplage faible-fort, non linéarité Newton 1 et Newton 2), nous considérons à titre d'exemple le système couplé non linéaire ci-dessous (équation C.10). Ce problème est composé de deux équations : une équation de diffusion et une équation de réaction qui présente un terme non linéaire.

$$\begin{cases} \dfrac{\partial Y_1}{\partial t} = D \cdot \dfrac{\partial^2 Y_1}{\partial x^2} + a \cdot Y_2 \\ \dfrac{\partial Y_2}{\partial t} = b \cdot Y_1 + c \cdot Y_2 + d \cdot Y_2^2 \end{cases} \tag{C.10}$$

avec $D=0.5$, $a=-100$, $b=1$, $c=-100$ et $d=-10000$. On considère $t \in [0, 1]$, $x \in [0, 1]$, une condition initiale nulle est appliquée à toutes les inconnues ($Y_1(x, t=0)=0$, $Y_2(x, t=0)=0$). Pour l'inconnue Y_1 une condition aux bords constante et égale à 1 est appliquée ($Y_1(x=0, t) = Y_1(x=1, t)=1$). Remarquons que par rapport au système C.07, seul le terme non linéaire dans la deuxième équation diffère.

C.3.1.Solution de référence

La solution de référence à ce problème est calculée comme dans le cas précédent (système C.07) avec le logiciel MATLAB®. Le schéma de discrétisation aux différences finies est appliqué en espace et mène au système d'équations différentielles A.11 qui est résolu avec la méthode ODE23tb.

$$\begin{aligned} \frac{dY_{(i)}}{dt} &= D \cdot \frac{Y_{(i-2)} - 2Y_{(i)} + Y_{(i+2)}}{\Delta x^2} + aY_{(i+1)} \\ \frac{dY_{(i+1)}}{dt} &= bY_{(i)} + cY_{(i+1)} + dY_{(i+1)}Y_{(i+1)} \end{aligned} \qquad \text{Avec} \quad i = 1,2,4 \dots ,2N \qquad \text{(C.11)}$$

où l'indice i impair (respectivement pair) correspond à la discrétisation spatiale du champ de la variable Y_1 (respectivement Y_2) et $Y_1(1) = Y_1(2N-1)=1$.

Notons que la non linéarité est comme dans le chapitre B, évaluée à l'incrément de temps précédent. L'évolution des inconnues Y_1 et Y_2 par rapport aux variables spatiale et temporelle est donnée sur la figure C.04. L'effet de la non linéarité est visible sur l'amplitude de Y_2 qui est plus faible que celle obtenue dans le cas linéaire ($d=0$) figure C.01.

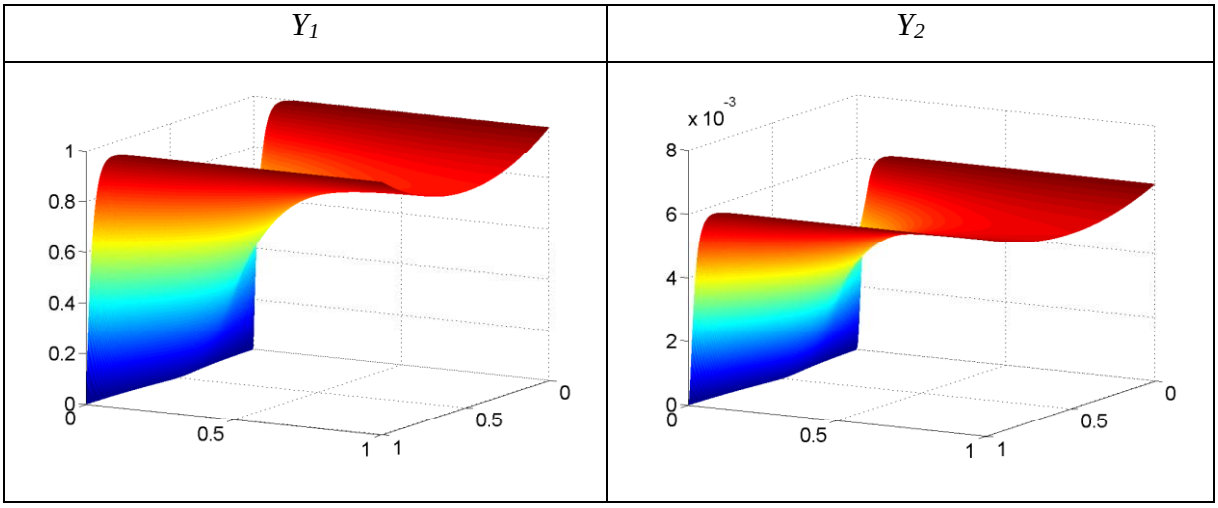


***Fig C.04** : Solution de référence du problème couplé non-linéaire C.10*

C.3.2.Résolution PGD

A travers cet exemple, les stratégies combinées à la méthode PGD sont analysées et discutées dans le cas où les fonctions temporelles sont résolues avec la méthode de Runge-Kutta. Celle-ci permet de limiter l'erreur commise lors de la recherche de la fonction temporelle. L'évolution de l'erreur par rapport à la solution de référence pour les 4 stratégies possibles est donnée en fonction du nombre de modes figure C.05.

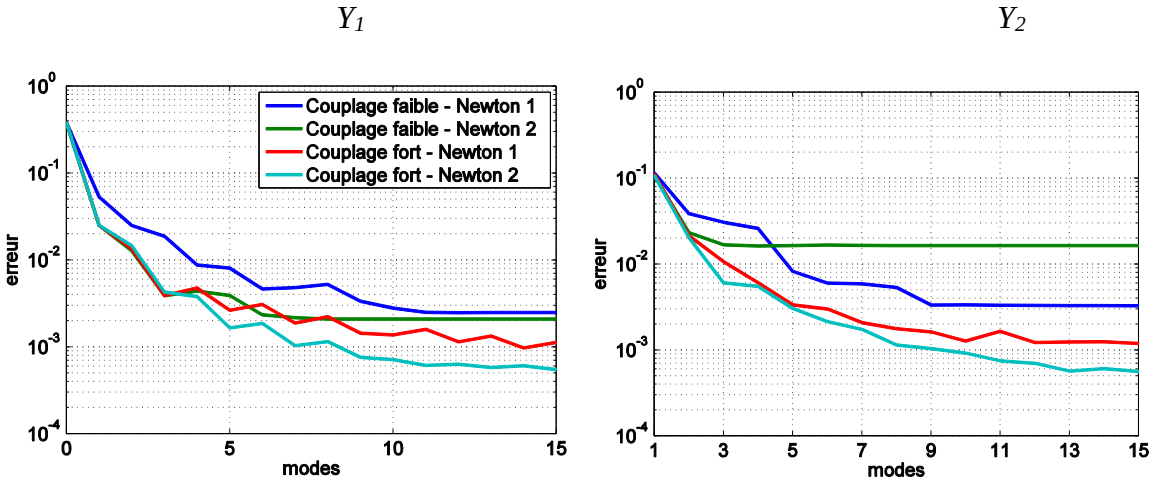


Fig C.05 *: Comparaison de l'évolution de l'erreur pour les différentes stratégies de résolution*

L'erreur décroit de façon plus rapide pour la stratégie « couplage fort Newton 2 », suivie par la stratégie « couplage faible Newton 2 ». La stratégie « couplage faible Newton 1 » semble avoir une plus faible convergence due au fait que le point fixe sert à la fois pour assurer le couplage entre les inconnues et pour la résolution de la non linéarité. Le nombre d'itérations cumulées du point fixe semble être lié au type de stratégie utilisée comme le montre la figure C.06. Si la résolution de chaque fonction *R* tient compte des non-linéarités et du couplage (couplage fort – Newton 2), moins d'itérations sont nécessaires pour obtenir la convergence et vice versa.

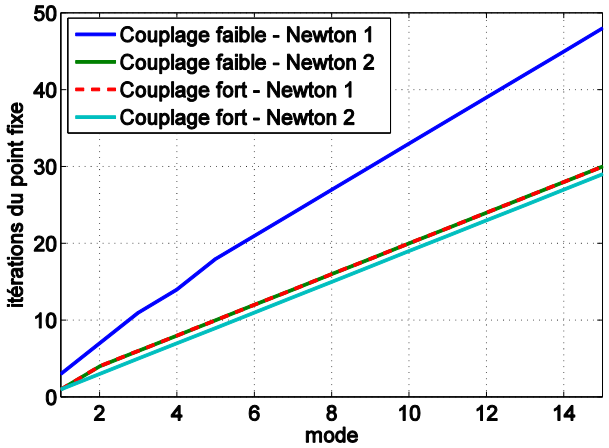


Fig C.06 *: Comparaison du nombre d'itérations cumulées de l'algorithme du point fixe en fonction du nombre de modes pour les différentes stratégies de résolution*

Pour la stratégie de résolution « couplage faible Newton 2 », l'ordre de résolution des équations, à l'intérieur du point fixe, a une certaine importance. L'algorithme peut ne pas converger si la résolution est faite dans l'ordre suivant : équation 1 puis équation 2.

La présence des non-linéarités implique l'utilisation de la deuxième colonne du tableau C.06. Pour illustrer le fait que la méthode de traitement des couplages engendre des modifications des

non linéarités dans les équations à résoudre, détaillons le cas du terme générique Y_k^2. Ce type de terme introduit, comme vu dans le tableau C.06, deux contributions qui sont les produits entre les modes déjà calculés et les fonctions *R*. Ces termes sont nommés B2, B3, A11 et A12 selon leur nature.

$$Y_k^2 = \left(\sum_{i=1}^{n} F_x F_t + R_x R_t\right)^2 = \left(\sum_{i=1}^{n} F_x F_t\right)^2 + 2\left(\sum_{i=1}^{n} F_x F_t\right)(R_x R_t) + (R_x R_t)^2 \quad \text{(C.12)}$$

Dans l'hypothèse où Y_k est une des inconnues cherchées pendant l'itération du point fixe considérée, la contribution de ce terme sera de type A11, A12 et l'équation qui doit être résolue devient une équation différentielle à coefficients variables.

$$a \cdot \frac{dR_t}{dt} = b_1 \cdot (t) R_t + b_2 \cdot R_t + c \cdot X(t) \quad \text{(C.13)}$$

L'introduction d'un coefficient variable peut dans certain cas générer des difficultés numériques. Des détails sur ce sujet sont donnés dans la suite de ce travail.

C.4. Systèmes raides

La résolution du modèle de thermo oxydation des polymères visé dans cette thèse nécessite de résoudre les problèmes numériques liés à la raideur du système d'équations différentielles à considérer. Nous avons choisi ici de construire un premier problème linéaire ad hoc servant de première analyse. Le système est composé par une équation de diffusion couplée avec cette fois deux équations de réaction.

$$\begin{cases} \dfrac{dY_1}{dt} = -Y_2 + D \cdot \dfrac{d^2 Y_1}{dx^2} \\ a_2 \cdot \dfrac{dY_2}{dt} = b_2 \cdot Y_2 - Y_3 + f(x) \\ a_3 \dfrac{dY_3}{dt} = b_3 \cdot Y_3 + a_3 \cdot Y_1 \end{cases} \quad \text{(C.14)}$$

Le domaine du problème est $t \in [0, 1]$, $x \in [0, 1]$. Les conditions aux bords pour Y_1 sont constantes et égales à 1 ($Y_1(x=0, t) = Y_1(x=1, t)=1$). La valeur de *D* est de 0.5 et la fonction $f(x)$ est constante et égale à *1*. Les conditions initiales sont nulles pour chaque inconnue ($Y_1(x, t=0)=0$, $Y_2(x, t=0)=0$, $Y_3(x, t=0)=0$).

On peut définir les coefficients suivants :

$$\tau_1 = \frac{a_2}{b_2} \; ; \; \tau_2 = \frac{a_3}{b_3} \qquad \text{(C.15)}$$

qui permettent selon leurs valeurs d'obtenir un système plus ou moins raide. La raideur du système est lié au fait que la solution présente dans ce modèle deux vitesses caractéristiques. L'évolution de la deuxième inconnue (Y_2) dépend à la fois de $1/\tau_2$ (la vitesse caractéristique de Y_3) et de $1/\tau_1$.

Pour mieux mettre en évidence l'effet des deux vitesses sur la solution, la figure C.07 représente l'évolution de l'inconnue Y_2 en fonction du temps pour un point au milieu du domaine spatial.

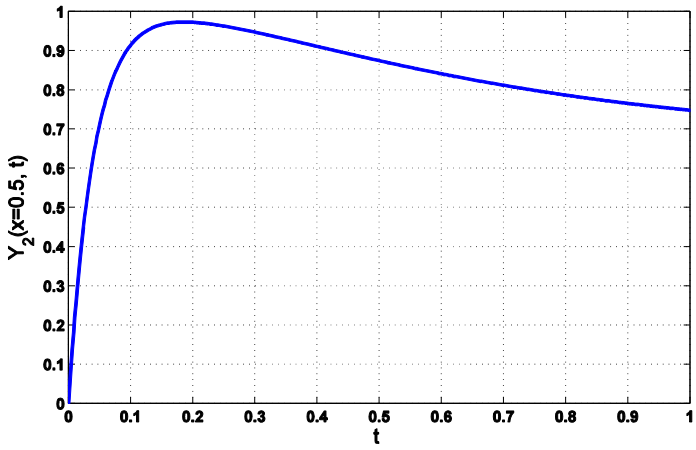


Fig C.07 *: évolution temporelle de la solution $Y_2(x=0.5, t)$*

On peut observer que la solution est composée par deux comportements différents : un qui intervient aux temps courts et un autre qui intervient aux temps longs. Ces deux comportements sont fonction des valeurs de τ_1 et de τ_2 comme illustré dans la figure C.08. La figure C.08 en haut (respectivement en bas) montre l'influence de l'augmentation de τ_1 (respectivement τ_2) pour une valeur de τ_2 (respectivement τ_1) fixée est égale à 2.5 (respectivement 250). L'augmentation de τ_1 modifie le comportement aux temps courts (plus τ_1 augmente plus le système est raide) alors que l'augmentation de τ_2 modifie le comportement aux temps longs.

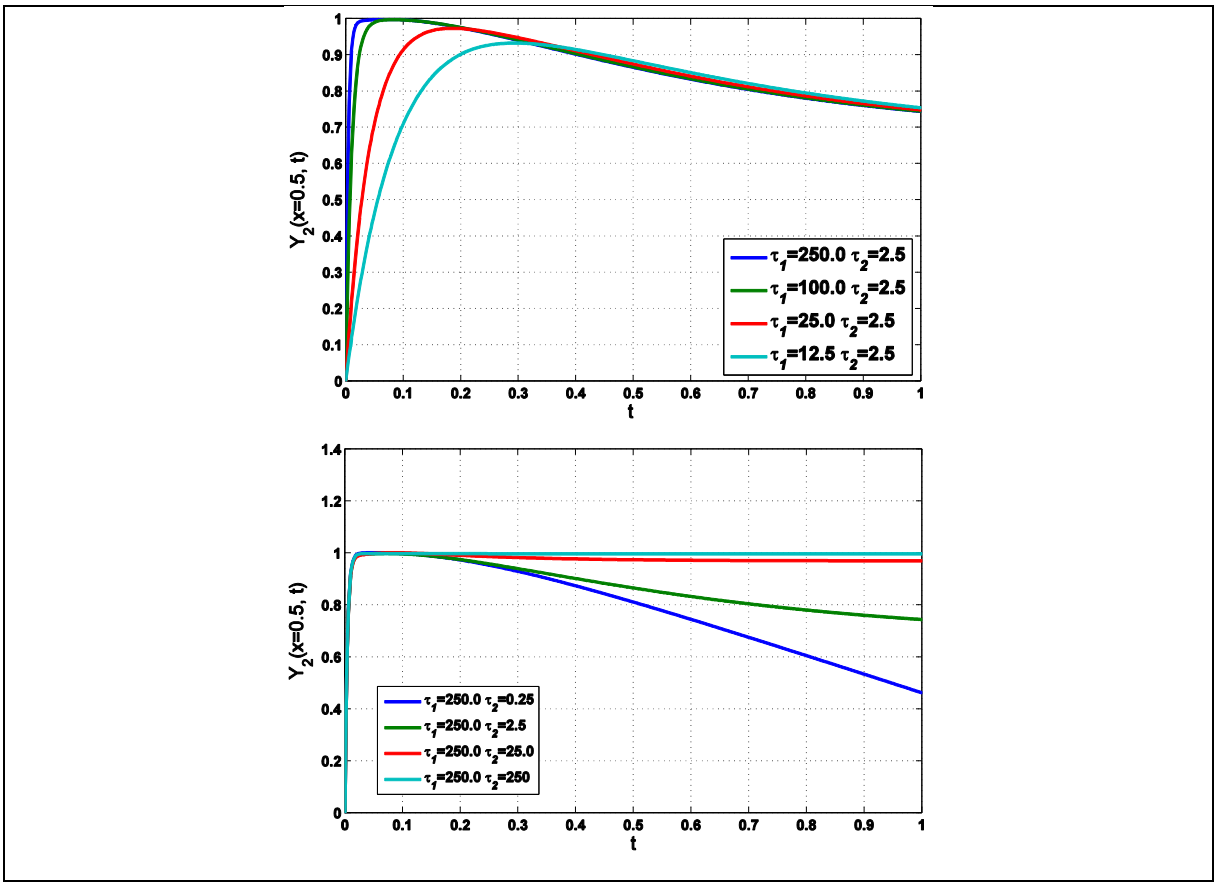


Fig C.08 *: évolution temporelle de la solution $Y_2(x=0.5, t)$ pour différentes valeurs de $\tau 1$ et de $\tau 2$*

Comme vu dans le paragraphe 0.2.3, le système devient raide lorsque la différence entre les deux vitesses caractéristiques est très grande et nécessite une méthode de résolution particulière. En effet, la présence des deux vitesses caractéristiques dans la représentation de la solution impose l'adoption d'un maillage extrêmement raffiné dans certains intervalles de temps et grossier dans d'autres.

C.4.1.Solution de référence

La solution de référence du problème C.14 est calculée avec le logiciel MATLAB® en utilisant un schéma de aux différences finies pour la discrétisation spatiale, qui mène au système d'équations différentielles A.16 qui est ensuite résolue avec la méthode ODE23tb.

$$\frac{dY_{(i)}}{dt} = D \cdot \frac{Y_{(i-3)} - 2Y_{(i)} + Y_{(i+3)}}{\Delta x^2} - Y_{(i+1)}$$

$$\frac{dY_{(i+1)}}{dt} = \frac{b_1}{a_1} Y_{(i+1)} + \frac{b_1}{a_1} Y_{(i+2)} + \frac{1}{a_1} \qquad \text{Avec} \quad i = 1,3,6 \ldots ,3N \qquad \text{(C.16)}$$

$$\frac{dY_{(i+2)}}{dt} = \frac{b_2}{a_2} Y_{(i)} + \frac{b_2}{a_2} Y_{(i+2)}$$

où l'indice i égal 1 modulo 3 correspond à la discrétisation spatiale du champ de la variable Y_1 avec $Y_1(1) = Y_1(3N-2)=1$; l'indice i égal 2 modulo 3 correspond à la discrétisation spatiale du champ de la variable Y_2 ; et l'indice i est un multiple de 3 correspond à la discrétisation spatiale du champ de la variable Y_3.

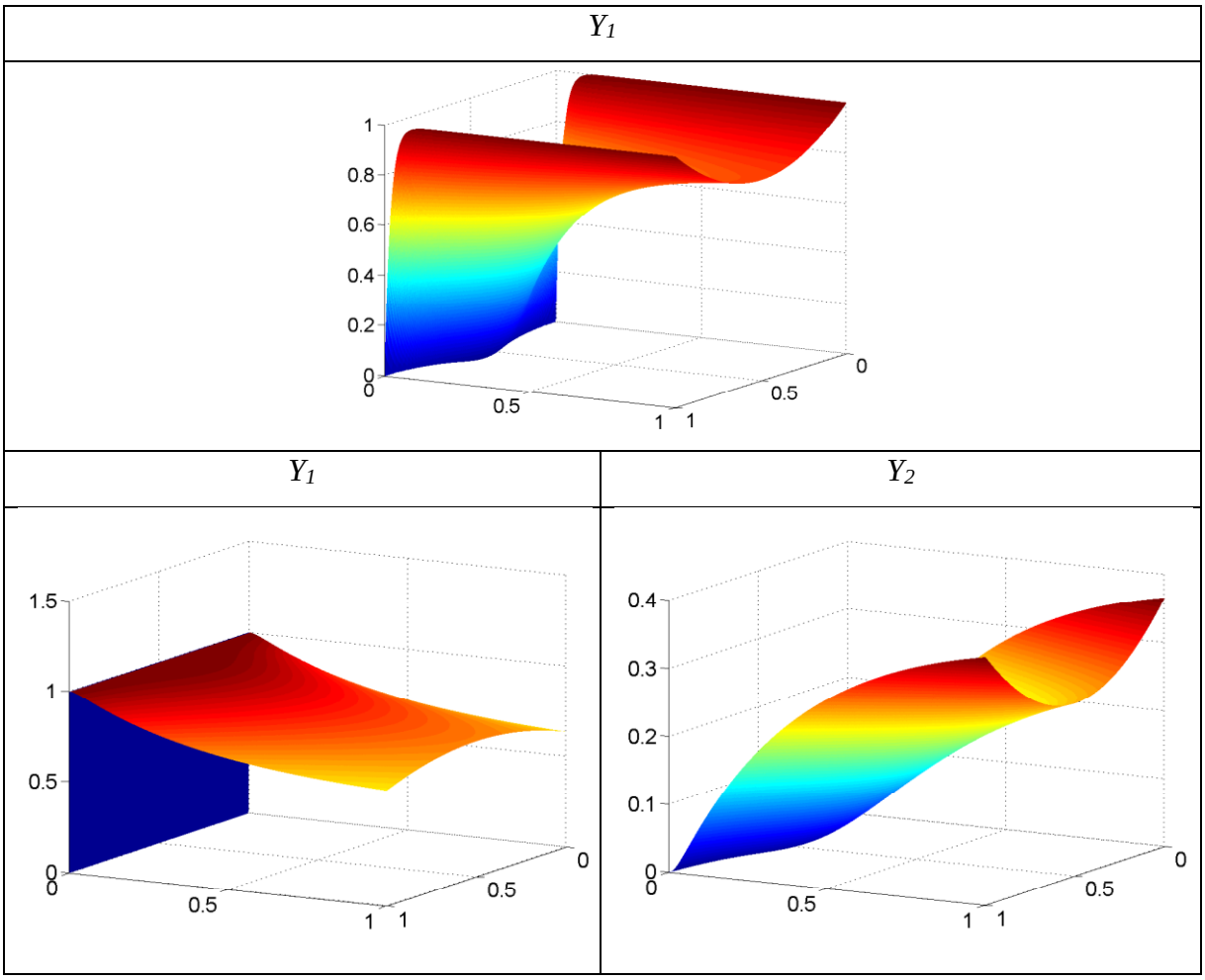


***Fig C.09** : Solution de référence du problème raide où τ_1=25000.0 et τ_2=2.5*

La figure C.09 montre l'évolution des inconnues Y_1, Y_2 et Y_3 par rapport aux variables spatiale et temporelle dans le cas d'un système raide non linéaire (cf. cas 3 tableau C.17).

C.4.2.Résolution PGD

Afin d'étudier ce système raide, il est nécessaire d'utiliser une méthode spécifique pour la recherche des fonctions temporelles : la méthode de Rosenbrock. Comme souligné précédemment, la flexibilité du code développé permet d'implémenter différentes méthodes de résolution pour la recherche des fonctions temporelles.

Pour la recherche des fonctions temporelles, nous avons implémenté trois méthodes : la méthode d'Euler explicite, une méthode de Runge-Kutta d'ordre 5 et une méthode de

Rosenbrock. Parmi ces trois techniques, il est reconnu que la méthode de Rosenbrock permet de traiter les systèmes d'équations différentielles raides. Les difficultés des deux autres méthodes dans le cas de la résolution des systèmes sont liées au fait qu'elles nécessitent un nombre d'éléments de discrétisation temporelle trop élevé.

Afin d'illustrer ce phénomène, nous considérons trois cas : un premier cas qui ne présente pas de raideur, un deuxième cas qu'on considère faiblement raide et un troisième cas raide. Les équations de ces trois problèmes sont celles reportées équations la C.16. Les coefficients τ_1 et τ_2 sont reportés tableau C.17 pour les trois cas.

	τ_1	τ_2
Cas 1	*25.0*	*2.5*
Cas 2	*2500.0*	*2.5*
Cas 3	*25000.0*	*2.5*

Tab C.17 : *Valeurs des coefficients τ_1 et τ_2 pour les cas examinés*

Tout d'abord, les deux stratégies de couplage sont discutées afin de choisir la plus appropriée pour ce problème. Les résultats obtenus avec le cas 2 sont reportés figure C.09.

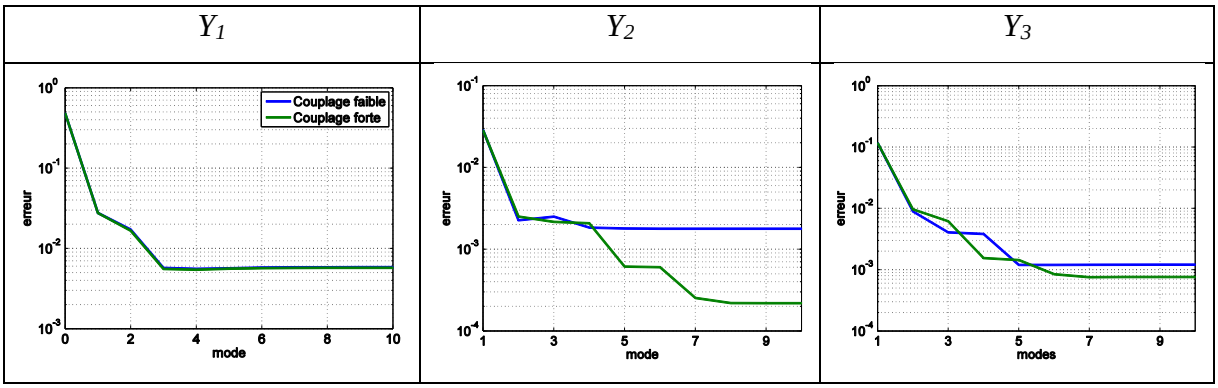


Fig C.09 *: Evolution de l'erreur en fonction du nombre de modes pour les deux stratégies de couplage - cas 2 défini tableau C.17*

L'inconnue Y_1 ne subit pas de variations importantes par rapport à la stratégie de couplage utilisée. Les inconnues Y_2 et Y_3 sont beaucoup plus précises avec la stratégie de couplage fort. Ce résultat est dû au fait que le couplage le plus marqué de ce système se situe entre les inconnues Y_2 et Y_3. Ce couplage est aussi à la source de la raideur du système. L'application de la stratégie de couplage fort impacte aussi le temps de calcul. En particulier, pour le calcul de 10 modes, la stratégie de couplage faible nécessite environ du 140% de temps en plus par rapport à la stratégie de couplage fort. Ce résultat s'explique avec la figure C.10 où le nombre d'itérations cumulées du point fixe est représenté en fonction du nombre de modes.

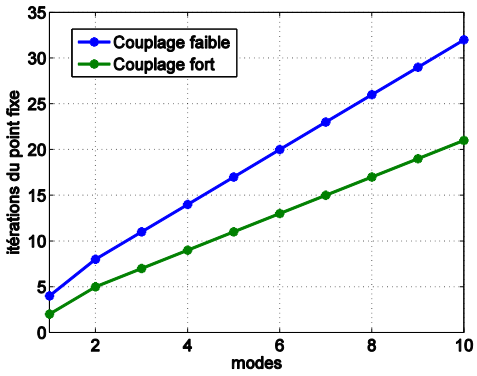


Fig C.10 *: Nombre d'itérations cumulées de l'algorithme du point fixe en fonction du nombre de modes pour les deux stratégies de couplage*

Le couplage faible nécessite globalement plus d'itérations de point fixe.

Dans la suite de ce paragraphe, nous allons donc utiliser pour les différentes simulations la stratégie de couplage fort.

Le tableau suivant illustre le premier mode PGD ainsi que sa discrétisation calculé avec la méthode de Runge-Kutta d'ordre 5 pour les différents cas.

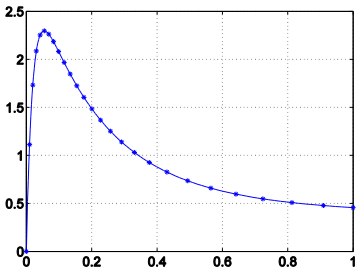
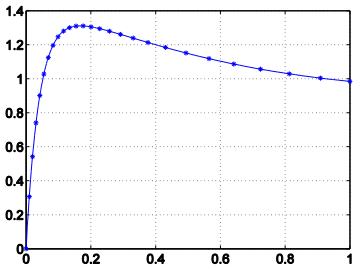
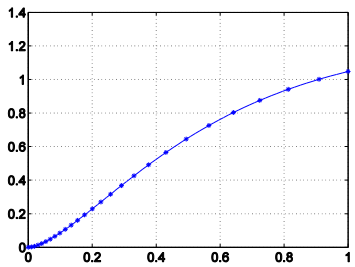
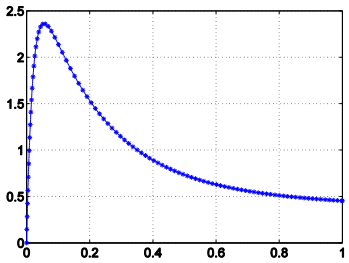
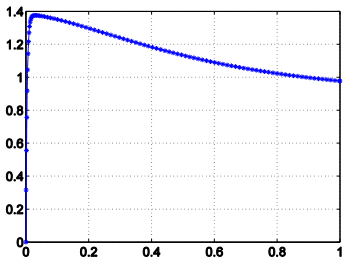
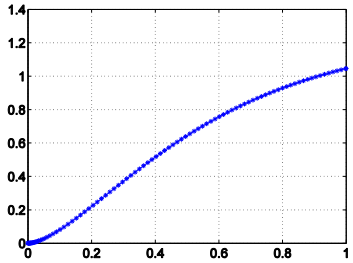
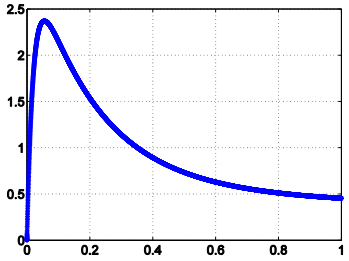
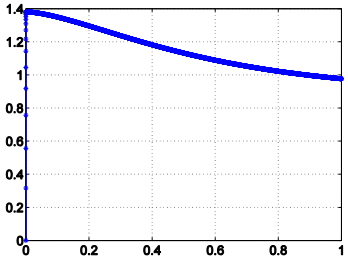
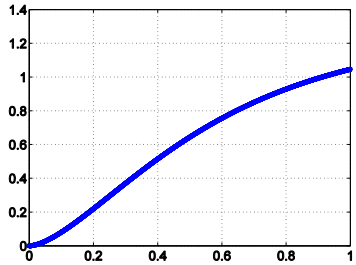
	Y_1	Y_2	Y_3
Cas 1			
Cas 2			
Cas 3			

Fig C.11 *: Fonctions temporelles du premier mode avec la méthode PGD Runge-Kutta*

Dans le premier cas, qui n'est pas un système raide, le nombre de points de discrétisation temporelle reste plutôt petit contrairement au troisième cas qui est raide. Dans le troisième cas, on peut de plus observer que la méthode d'adaptation de maillage associée à la méthode de Runge-Kutta ajoute beaucoup d'éléments dans les intervalles de temps où les fonctions recherchées ne présentent pas de variations importantes (par exemple aux temps longs). Le nombre d'éléments temporels est de 26 pour le cas 1, 94 pour le cas 2 et 7568 pour le cas 3. La méthode de Runge-Kutta présente donc un point faible, vis-à-vis de la résolution des systèmes raides, qui se traduit dans la nécessité d'utiliser un nombre important d'éléments de discrétisation et par conséquent un temps de calcul très élevé.

Nous considérons maintenant le même système avec cette fois la méthode de Rosenbrock pour calculer le premier mode temporel. Le résultat obtenu pour les trois cas est représenté figure C.12.

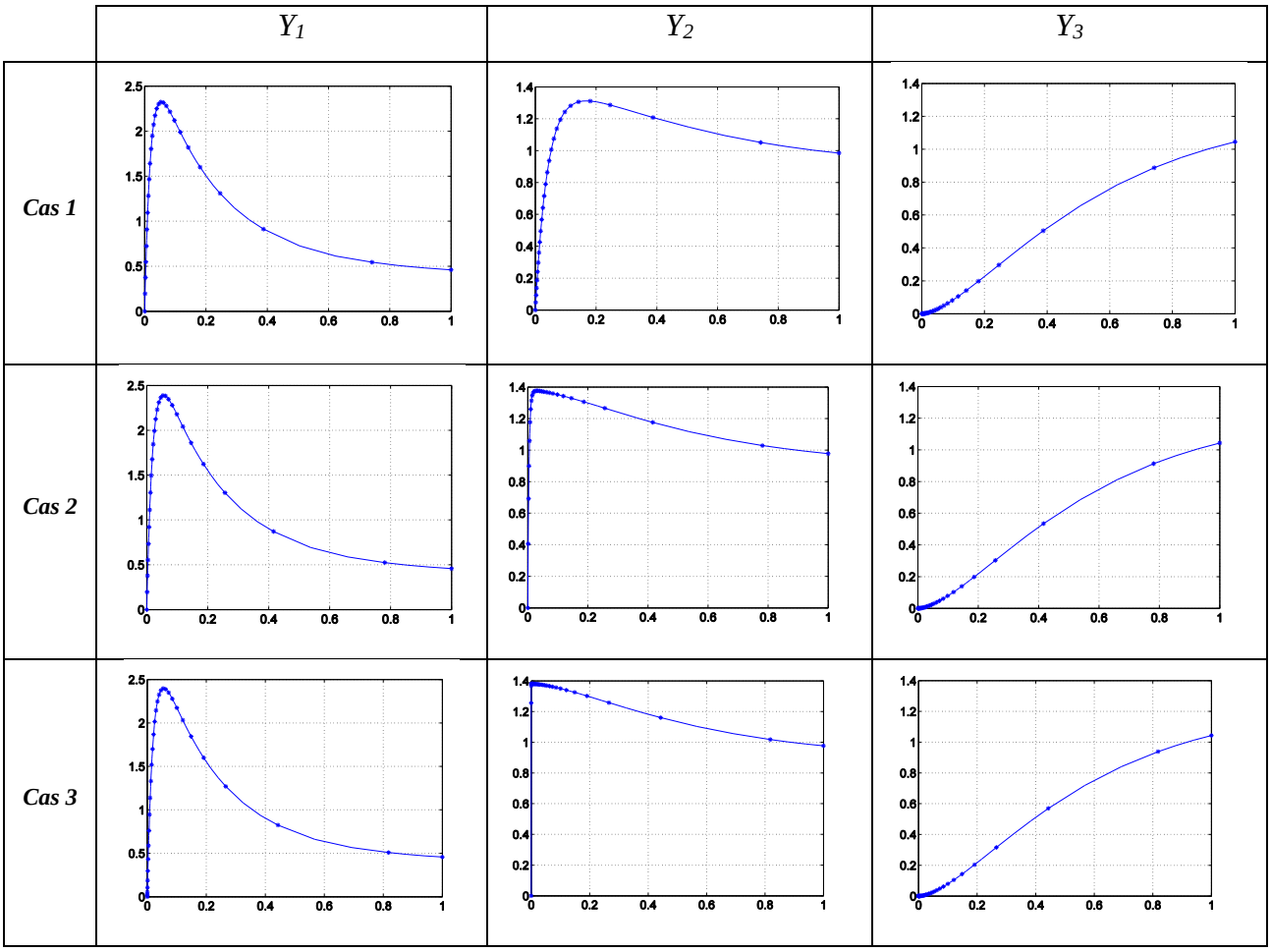


***Fig C.12** : Fonctions temporelles du premier mode calculé avec la méthode PGD Rosenbrock*

En comparaison avec la méthode de Runge-Kutta figure C.11, la méthode de Rosenbrock place les éléments de discrétisation temporelle d'une façon plus efficace. La densité d'éléments est

en effet beaucoup plus élevée aux temps courts (où les fonctions ont des fortes variations) et moins élevée aux temps longs. Le nombre d'éléments est pour les trois cas égal à 27, 27 et 32, ce qui permet d'obtenir des temps de calcul beaucoup plus raisonnables qu'avec la méthode de Runge-Kutta d'autant plus que le système est raide (cas 1 et 2).

Les fonctions temporelles du deuxième mode sont représentées figure C.13.

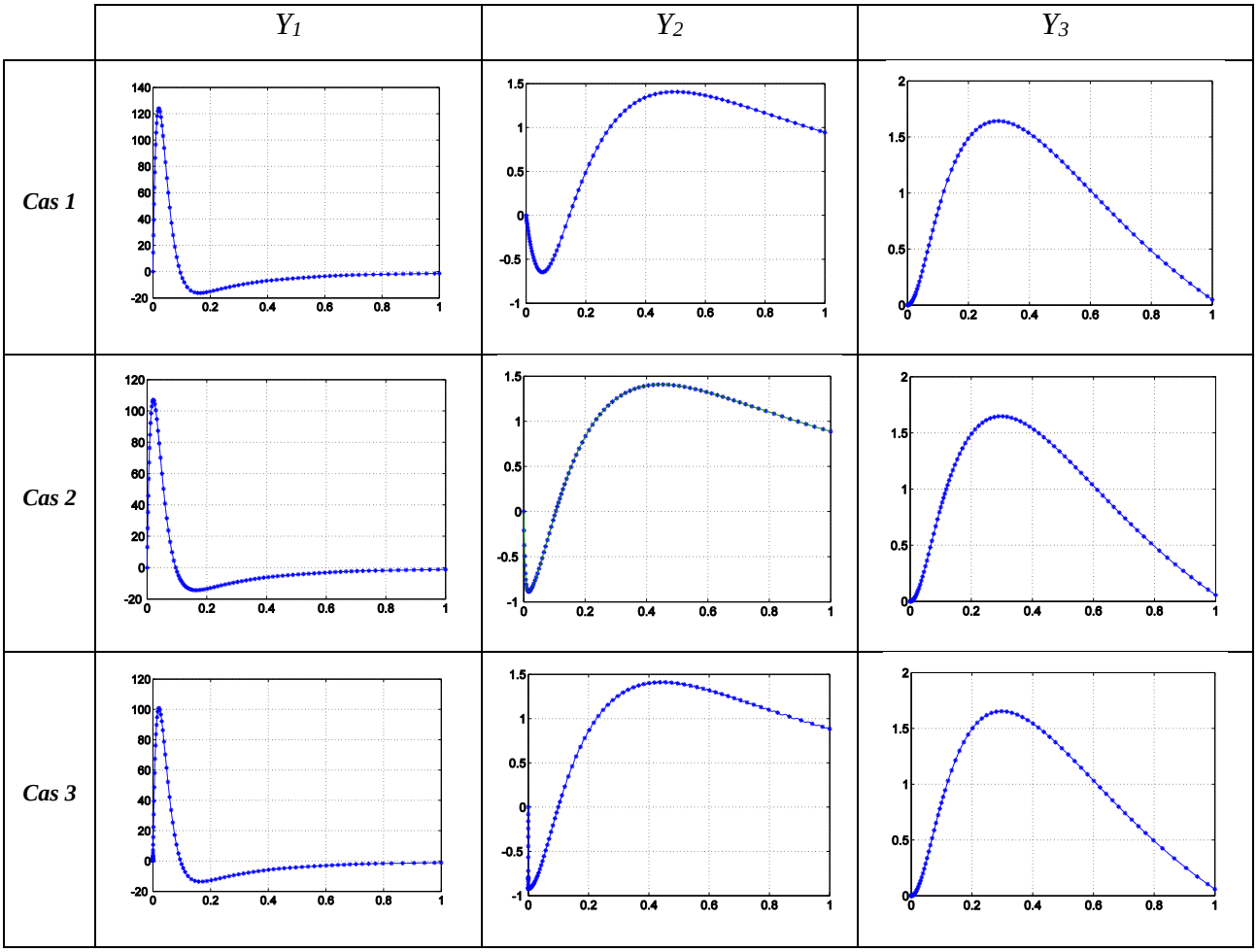


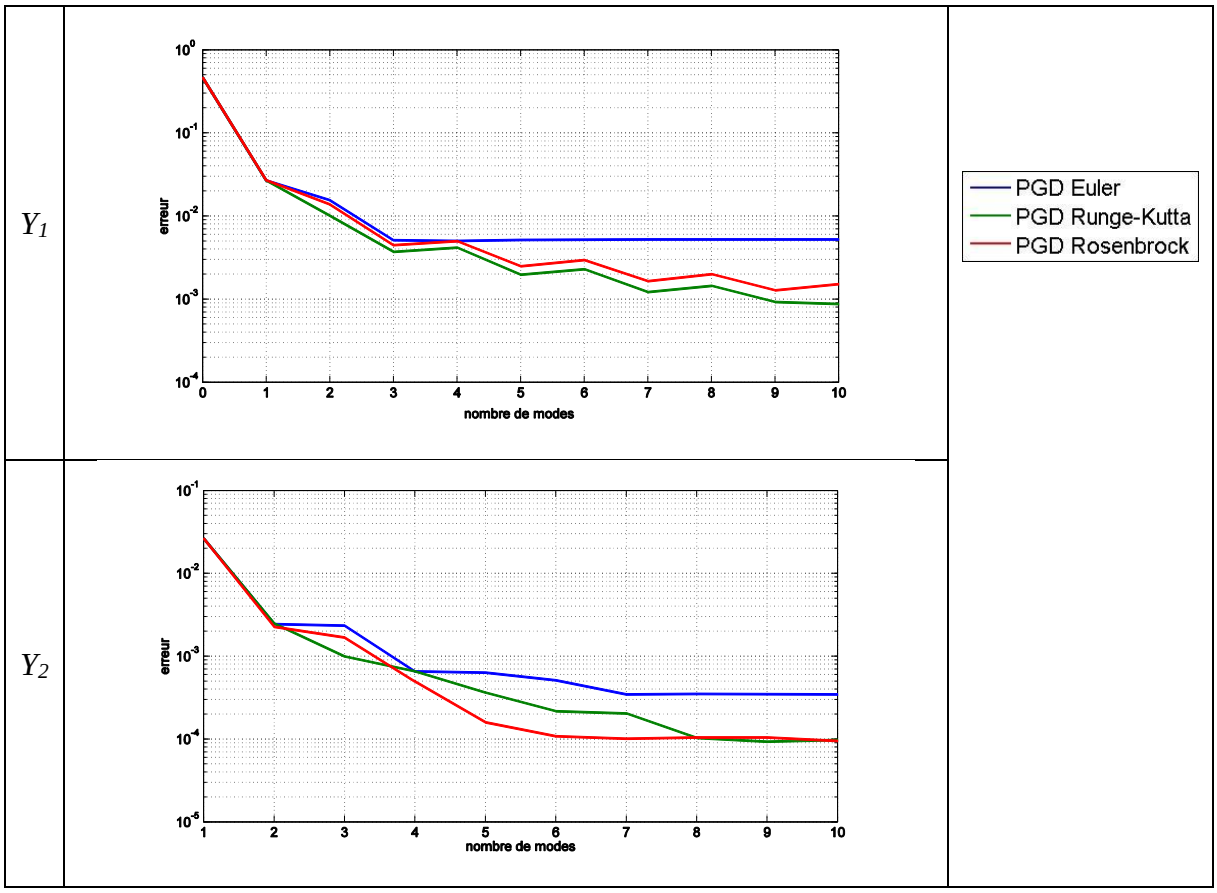
***Fig C.13** : Fonctions temporelles du deuxième mode calculé avec la méthode PGD Runge-Kutta*

Des oscillations dans les modes peuvent apparaître sur les modes de la solution. Ces oscillations sont dues probablement au fait que le polynôme choisi pour l'interpolation à l'intérieur de l'élément n'approxime pas bien la fonction. Rappelons que les méthodes de Runge-Kutta et de Rosenbrock calculent la solution pour chaque incrément temporel. Cette solution est ensuite interpolée à travers un polynôme dont l'expression est établie à partir des informations intermédiaires obtenues pendant le calcul. En d'autres termes, des informations supplémentaires sont collectées au cours du calcul de chaque incrément temporel afin d'avoir une bonne représentation de la solution au point de discrétisation ainsi qu'à l'intérieur de chaque

élément. La quantité des informations d'une méthode est cohérente avec son ordre, c'est-à-dire que, plus la méthode est d'ordre élevé et plus il sera possible d'obtenir des polynômes qui approchent la solution de façon précise. Parmi ces informations, on garde classiquement la valeur de la fonction et de sa dérivée à chaque incrément temporel. Les phénomènes d'oscillation de la solution seront mieux décrits dans le paragraphe suivant.

La recherche de 10 modes PGD permet d'observer l'évolution de l'erreur par rapport à la solution de référence comme montré figure C.14 dans le cas non raide (cas 1 tableau C.17).

Pour ce cas non raide, les trois méthodes Euler explicite, Runge-Kutta et Rosenbrock sont envisagées et discutées. Les fonctions temporelles calculées à travers la méthode d'Euler explicite sont calculées sur un maillage de 2500 éléments. Les fonctions qui dépendent de la variable spatiale sont calculées à travers la méthode de Galerkin sur un maillage de 500 éléments pour les trois méthodes. L'erreur commise pour chacune des méthodes en fonction du nombre de modes est donnée figure C.14.



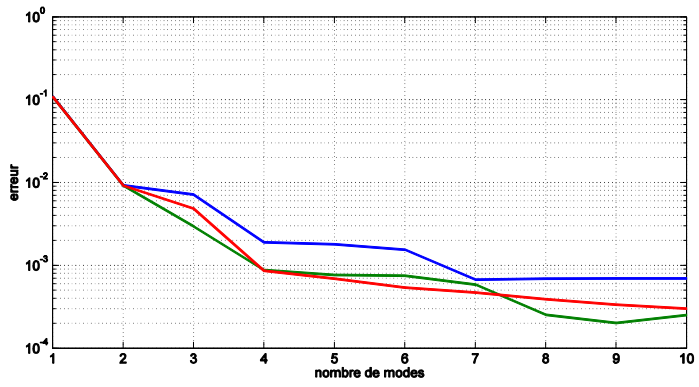
Y_3		

Fig C.14 *: Evolution de l'erreur en fonction du nombre de modes pour les trois méthodes (PGD Euler – PGD Runge-Kutta – PGD Rosenbrock) dans le cas 1 défini tableau C.17*

L'évolution de l'erreur des trois méthodes est une fonction monotone décroissante. Les méthodes de Runge-Kutta et de Rosenbrock semblent être plus performantes en termes d'erreur. Néanmoins, une densification du maillage sur lequel la méthode d'Euler a été utilisée peut sûrement rendre cette méthode plus précise. Cette densification n'est pas illustrée ici car le temps de calcul obtenu pour les trois méthodes montre des performances beaucoup plus élevées pour les méthodes de Runge-Kutta et de Rosenbrock. Plus particulièrement, la méthode de Runge-Kutta nécessite, dans cette configuration, 8% du temps nécessaire à la méthode d'Euler explicite et la méthode de Rosenbrock nécessite elle 34%. L'écart entre la méthode de Runge-Kutta et la méthode de Rosenbrock est en partie justifié par des étapes de calcul plus lourdes dans le cas de la méthode de Rosenbrock. On rappelle que pour chaque incrément temporel, la méthode de Rosenbrock est une méthode semi-implicite et donc elle exécute une itération de l'algorithme de Newton. Cette étape nécessite le calcul de la matrice jacobienne et la résolution de plusieurs systèmes d'équations linéaires comme rappelé en 0.5.

Le nombre d'éléments temporels pour chaque mode est donné figure C.15 pour les méthodes de Runge-Kutta et de Rosenbock.

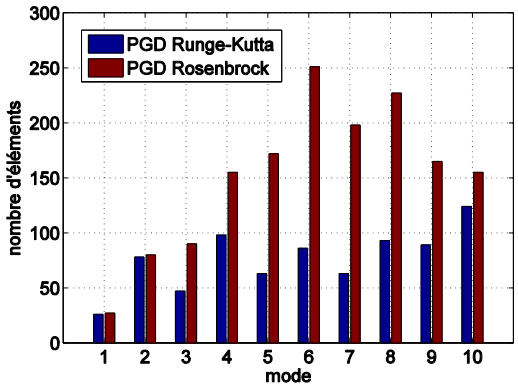


Fig C.15 *: Nombre d'éléments en temps en fonction du nombre de modes pour les méthodes PGD Runge-Kutta et PGD Rosenbrock dans le cas 1 défini tableau C.17*

La méthode de Rosenbrock nécessite globalement un plus grand nombre d'éléments à chaque mode. Cette tendance apparaît nettement à partir du troisième mode et explique le temps de calcul plus élevé pour cette méthode.

Notons que les trois méthodes donnent un nombre d'itérations cumulées du point fixe très similaire. La seule différence concerne la recherche du deuxième mode où la méthode d'Euler nécessite l'utilisation d'une itération en plus.

Pour le cas 2, qui présente un certain degré de raideur, les trois méthodes fournissent une évolution de l'erreur comme illustré figure C.16.

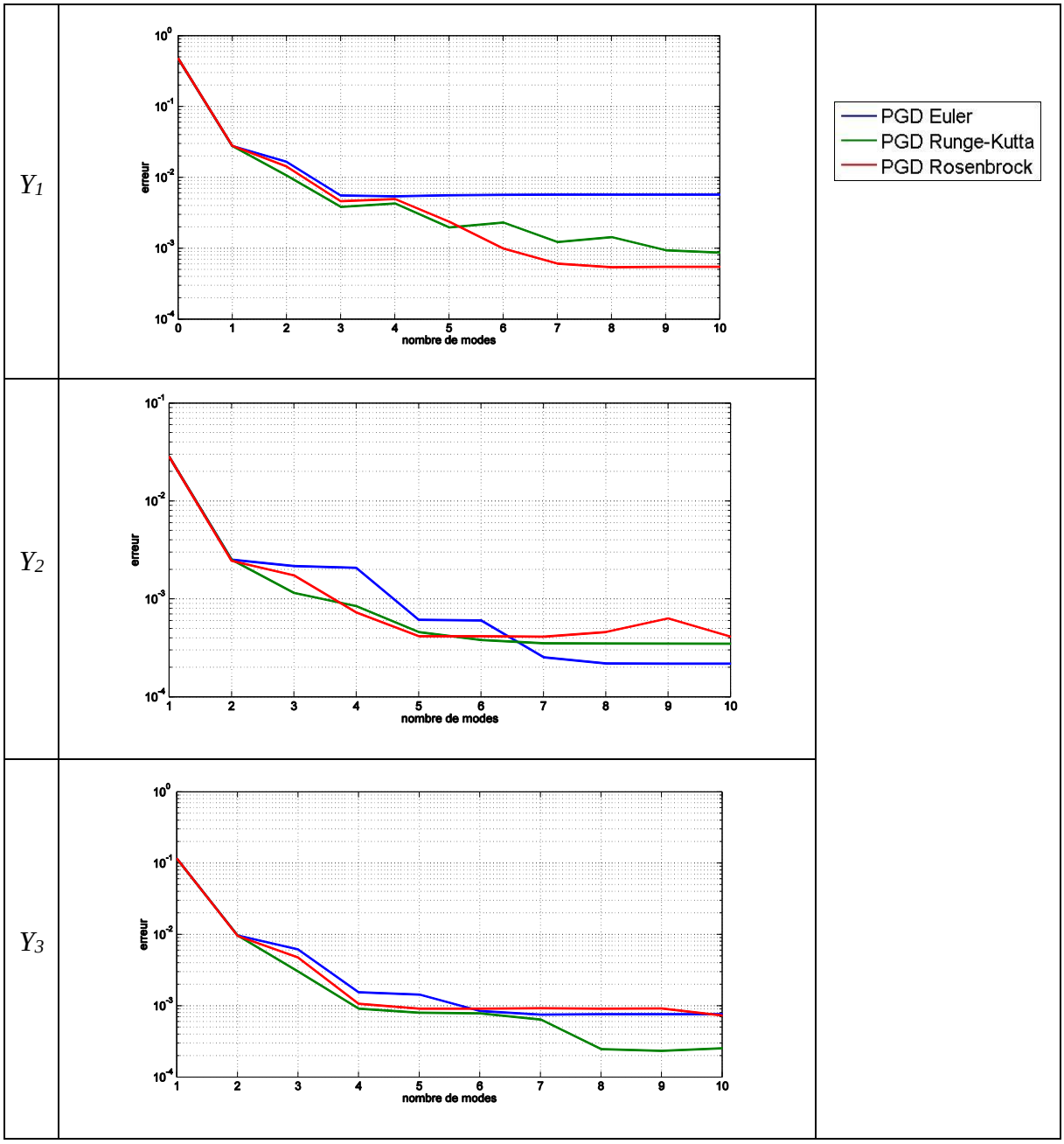


Fig C.16 *: Evolution de l'erreur en fonction du nombre de modes pour les méthodes PGD Euler – PGD Runge-Kutta – PGD Rosenbrock dans le cas 2 défini tableau C.17*

L'évolution de l'erreur est là encore décroissante monotone pour les trois méthodes. Les méthodes de Runge-Kutta et de Rosenbrock montrent une perte de performances vis-à-vis de la méthode d'Euler. La méthode de Runge-Kutta nécessite dans ce cas un nombre très élevé d'éléments pour la recherche des fonctions temporelles de chaque mode.

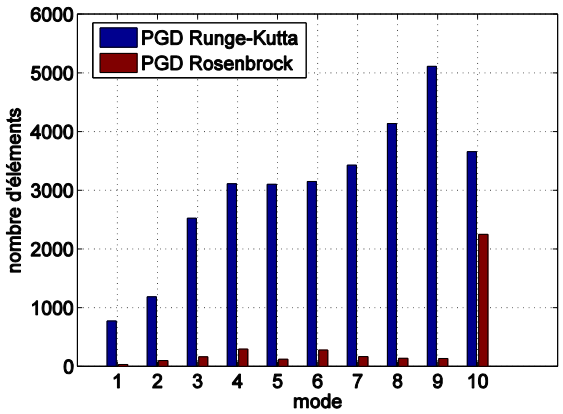
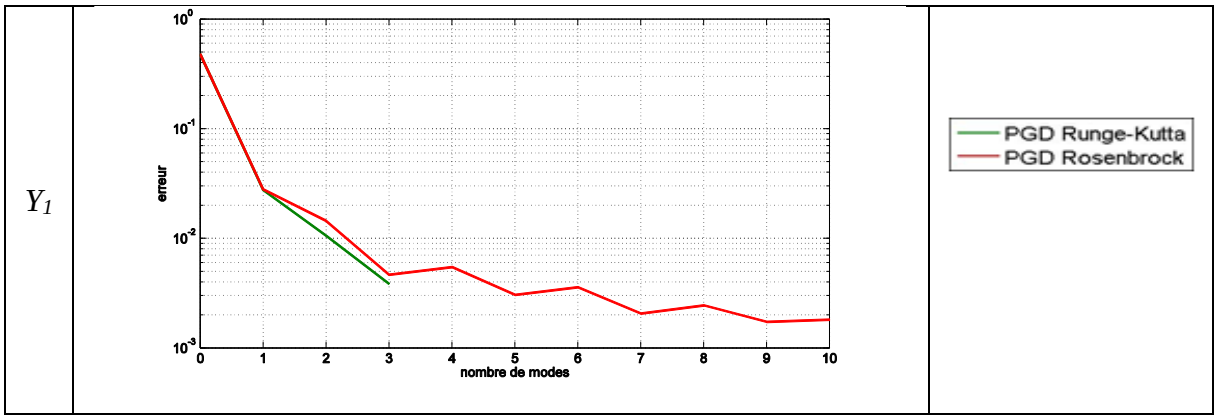


Fig C.17 *: Nombre d'éléments en temps en fonction du nombre de modes dans le cas 2 défini au tableau C.17*

Considérons maintenant le cas 3 qui est, parmi les cas étudié, le cas le plus raide. Dans ce cas la méthode d'Euler n'est pas appliquée car, pour en garantir la stabilité on a besoin d'un nombre beaucoup trop important d'éléments.

Pendant le calcul avec la méthode de Runge-Kutta, nous nous sommes rendu compte que le maillage adaptatif généré était très dense. Par conséquent il a été décidé de limiter l'algorithme à la recherche de trois modes. Comme pour les cas précédents, l'erreur par rapport à la solution de référence et le nombre d'éléments nécessaires à la recherche des fonctions temporelles sont donnés figure C.18 et figure C.19.



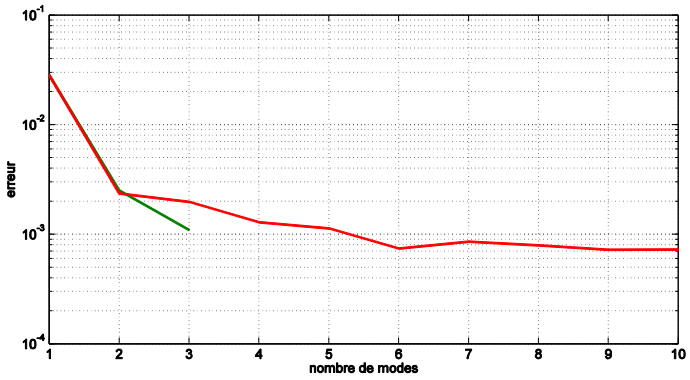
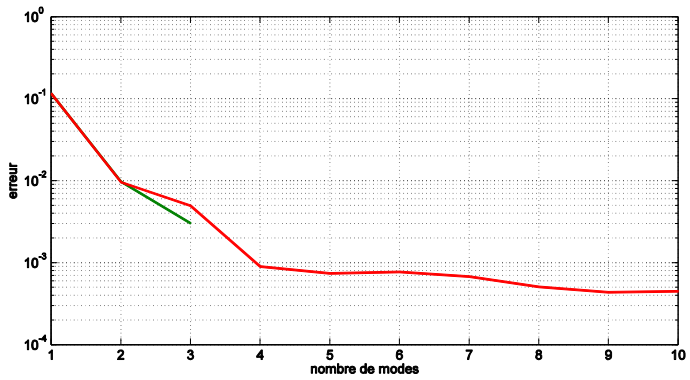
Y_2		
Y_3		

Fig C.18 *: Evolution de l'erreur en fonction du nombre de modes pour les méthodes PGD Runge-Kutta – PGD Rosenbrock dans le cas 3 défini tableau C.17*

L'évolution de l'erreur montre une bonne convergence de la méthode de Rosenbrock. L'erreur décroît de façon similaire aux deux autres cas. Nous avons aussi remarqué que le temps de calcul de la méthode de Rosenbrock reste proche pour les trois cas. En d'autres mots, la raideur ne semble pas influencer de façon importante les temps de calcul de la méthode de Rosenbrock.

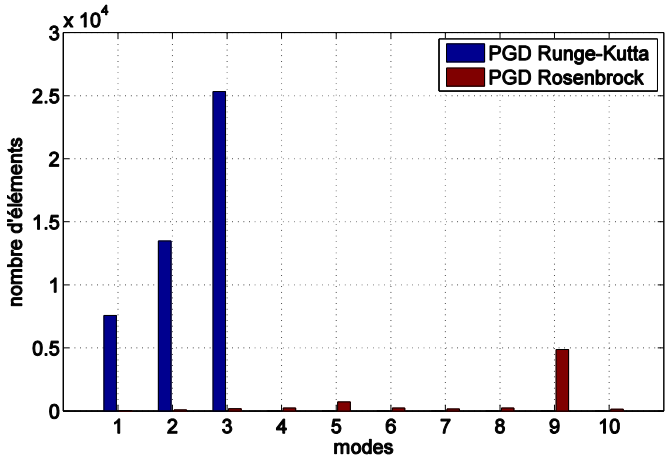


Fig C.19 *: Nombre d'éléments en temps en fonction du nombre de modes dans le cas 3 défini tableau C.17*

Dans ce paragraphe, nous avons montré l'influence de la raideur sur la résolution PGD d'un problème. Le problème choisi dans cette partie est un problème linéaire composé par trois équations. Les coefficients des deux dernières équations déterminent la raideur du problème.

Les trois cas analysés sont : un premier cas qui ne présente pas de raideur, un deuxième cas modérément raide et un troisième correspondant à un cas raide. Il a été montré, à travers ces trois cas, que des problèmes liés à la discrétisation temporelle apparaissent dans les cas raides. Ces problèmes sont confirmés par la littérature et illustre la nécessité d'implémenter une méthode spécialement conçue pour le traitement des problèmes raides, soit ici la méthode de Rosenbrock. *Les résultats semblent montrer que la méthode PGD permet d'aborder des problèmes raides à condition que la méthode d'intégration des sous problèmes en temps soit robuste vis-à-vis de la raideur*.

C.5. Systèmes raides non-linéaires

Le problème de thermo-oxydation visé dans ce travail est composé par un système de 5 équations différentielles non-linéaires comme montré paragraphe 0.1.2. L'équation de diffusion (loi de Fick) est couplée avec un modèle qui décrit l'évolution de quatre espèces chimiques. Ce dernier modèle consiste en un problème local qui, comme dans les exemples précédents, sera globalisé dans l'espace afin de pouvoir appliquer l'algorithme PGD telle que nous l'avons décrit dans les parties précédentes de ce manuscrit. On considère donc une éprouvette monodimensionnelle sur laquelle les inconnues du problème évoluent dans le temps pour chaque point de l'espace.

$$\begin{cases} \dfrac{\partial[P°]}{\partial t} = 2k_1[POOH] - k_2[O_2][P°] + k_3[PH][PO_2] - 2k_4[P°]^2 - k_5[P°][PO_2\,] \\ \dfrac{\partial[PO_2]}{\partial t} = k_2[O_2][P°] - k_3[PH][PO_2] - k_5[P°][PO_2] - 2k_6[PO_2]^2 \\ \dfrac{\partial[POOH]}{\partial t} = -k_1[POOH] + k_3[PH][PO_2] \\ \dfrac{\partial[PH]}{\partial t} = -k_3[PH][PO_2] - 2k_1[POOH] \\ \dfrac{\partial[O_2]}{\partial t} = (-k_2[O_2][P°] + k_6[PO_2]^2) + D\dfrac{\partial^2[O_2]}{\partial x^2} \end{cases} \tag{C.18}$$

Les coefficients de k_1 à k_6 sont calculés à partir de la bibliographie (32). Le tableau C.19 résume les informations disponibles, informations qui dépendent de la température.

T [°C]	120	150	180	200
PH₀	17	17	17	17
POOH₀	10^{-4}	10^{-4}	10^{-4}	10^{-4}
Dens₀	$1.32x10^{3}$	$1.32x10^{3}$	$1.32x10^{3}$	$1.32x10^{3}$
Volat	45	65	90	97
C_s [mol/L]	$3.3x10^{-3}$	$3.3x10^{-3}$	$3.3x10^{-3}$	$3.3x10^{-3}$
D [m²/s]	$8x10^{-13}$	$1.3x10^{-12}$	$1.8x10^{-12}$	$2.2x10^{-12}$
Cte_1 [s^{-1}] [a]	$1.84x10^{-6}$	$3.09x10^{-5}$	$3.58x10^{-4}$	$1.54x10^{-3}$
Cte_2 [$L/mol^{-1}s^{-1}$] [b]	10^{8}	10^{8}	10^{8}	10^{8}
2β [c]	$1.13x10^{2}$	$3.00x10^{2}$	$6.99x10^{2}$	$1.16x10^{3}$
Cte_3 [$L/mol^{-1}s^{-1}$] [d]	$7.22x10^{-1}$	2.96	10.1	20.9
ψ [e]	0.1	0.1	0.1	0.1
R_0 [f]	$1.03x10^{-6}$	$5.03x10^{-6}$	$1.99\ x10^{-5}$	$4.51\ x10^{-5}$

[a] $Cte_1 = k_1$

[b] $Cte_2 = k_2$

[c] $2\beta = \frac{k_2 k_6}{k_5 k_3 PH_0}$

[d] $Cte_3 = k_3 PH_0$

[e] $\psi = \frac{k_4 k_6}{k_5^2}$

[f] $R_0 = \frac{k_3^2 PH_0^2}{k_6}$

Tab C.19 : *Valeurs des paramètres du schéma mécanistique en fonction de la température* (32)

On obtient donc les valeurs suivantes pour les coefficients des équations C.18 à 120°C qui est la température du cas étudié dans cette partie :

	120°
$k_1 = Cte_1$	1,92E-06
$k_2 = Cte_2$	1,00E+08
$k_3 = \frac{Cte_3}{PH_0}$	4,34E-02
$k_4 = \frac{\psi \cdot Cte_2^2}{(2\beta)^2 \cdot R_0}$	7,25E+16
$k_5 = \frac{Cte_2 \cdot Cte_3}{2\beta \cdot R_0}$	6,13E+11
$K_6 = \frac{Cte_3^2}{R_0}$	5,18E+05

Tab C.20 : *Valeurs des coefficients k_i à 120°C*

Le domaine du problème est $t \in [0, 5000]$ *s*, $x \in [0, 1]$ *mm*. Les conditions aux bords sont constantes et égales à C_s soit $O_2(x=0, t) = O_2(x=1, t) = C_s$ et les conditions initiales sont nulles. Pour représenter les conditions aux bords et initiales, le mode artificiel rajouté à la solution d'O_2 est composé par les fonctions données figure C.20.

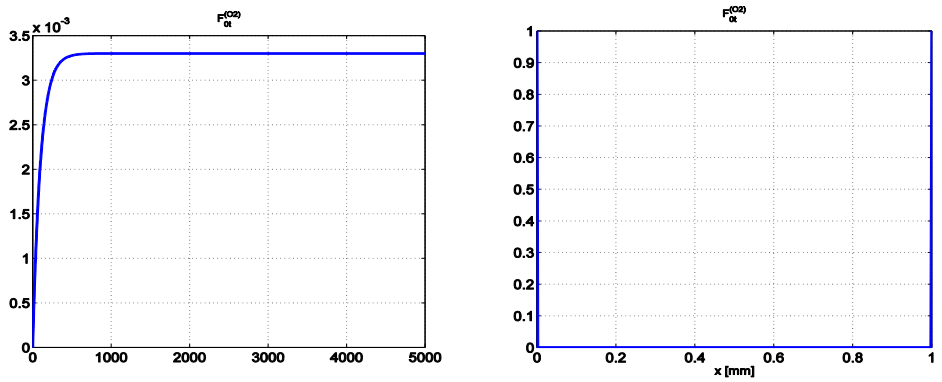


Fig C.20 : *Mode artificiel utilisé pour la représentation des conditions aux bords et initiales d'O_2*

Les conditions initiales pour les autres espèces chimiques sont : *POOH(x, t=0)=POOH₀, PH(x, t=0)=PH₀*.

Dans ce cas le système à résoudre devient :

$$\begin{cases} \frac{\partial[P°]}{\partial t} = 5{,}84 \cdot 10^{-6}[POOH] - 1{,}00 \cdot 10^{8}[O_2][P°] + 4{,}34 \cdot 10^{-2}[PH][PO_2] - 14{,}50 \cdot 10^{16}[P°]^2 - 6{,}13 \cdot 10^{11}[P°][PO_2] \\ \frac{\partial[PO_2]}{\partial t} = 1{,}00 \cdot 10^{8}[O_2][P°] - 4{,}34 \cdot 10^{-2}[PH][PO_2] - 6{,}13 \cdot 10^{11}[P°][PO_2] - 10{,}36 \cdot 10^{5}[PO_2]^2 \\ \frac{\partial[POOH]}{\partial t} = -1{,}92 \cdot 10^{-6}[POOH] + 4{,}34 \cdot 10^{-2}[PH][PO_2] \\ \frac{\partial[PH]}{\partial t} = -4{,}34 \cdot 10^{-2}[PH][PO_2] - 3{,}84 \cdot 10^{-6}[POOH] \\ \frac{\partial[O_2]}{\partial t} = (-1{,}00 \cdot 10^{8}[O_2][P°] + 6{,}13 \cdot 10^{11}[PO_2]^2) + 8{,}00 \cdot 10^{-7}\ \frac{\partial^2[O_2]}{\partial x^2} \end{cases} \quad \text{(C.21)}$$

Dans la pratique, la résolution de modèles chimiques est faite à travers la définition d'un modèle équivalent dit modèle « réduit » qui rend plus facile la résolution du problème d'un point de vue numérique. Le problème réduit est défini par les relations suivantes :

$$\begin{aligned} [P°] &= \frac{R_0}{Cte_2}[P°]_r \\ [PO_2] &= \frac{R_0}{Cte_3}[PO_2]_r \\ [POOH] &= \frac{R_0}{Cte_1}[POOH]_r \\ [PH] &= PH_0[PH]_r \end{aligned} \quad \text{(C.22)}$$

On obtient donc :

$$\begin{cases} \frac{\partial[P°]_r}{\partial t} = 2k_2[POOH]_r - k_2[O_2][P°]_r + k_2[PH]_r[PO_2]_r - \frac{2\psi k_2}{(2\beta)^2}[P°]_r{}^2 - \frac{k_2}{2\beta}[P°]_r[PO_2]_r \\ \frac{\partial[PO_2]_r}{\partial t} = Cte_3[O_2][P°]_r - Cte_3[PH]_r[PO_2]_r - \frac{Cte_3}{2\beta}[P°]_r[PO_2]_r - 2Cte_3[PO_2]_r{}^2 \\ \frac{\partial[POOH]_r}{\partial t} = -k_1[POOH]_r + k_1[PH]_r[PO_2]_r \\ \frac{\partial[PH]_r}{\partial t} = -\frac{R_0}{PH_0}[PH]_r[PO_2]_r - \frac{2R_0}{PH_0}[POOH]_r \\ \frac{\partial[O_2]}{\partial t} = (-R_0[O_2][P°]_r + R_0[PO_2]_r{}^2) + D\frac{\partial^2[O_2]}{\partial x^2} \end{cases} \quad \text{(C.23)}$$

De cette façon, pour chaque équation, les coefficients en facteur de chaque terme sont moins différents entre eux. Pour une température de 120°C, on obtient le système C.24.

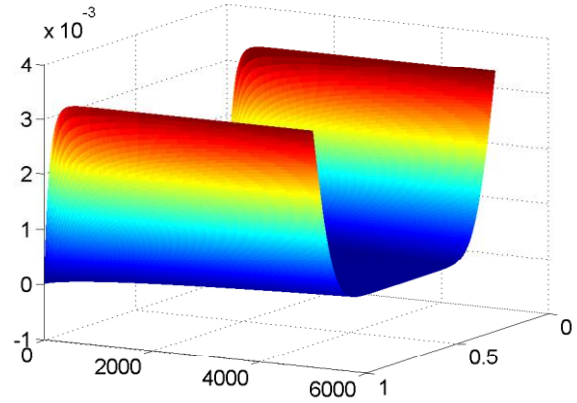
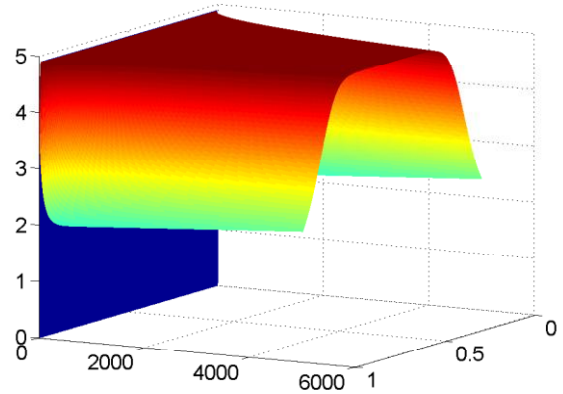
$$\begin{cases} \frac{\partial[P^\circ]_r}{\partial t} = 2{,}00 \cdot 10^8[POOH]_r - 1{,}00 \cdot 10^8[O_2][P^\circ]_r + 1{,}00 \cdot 10^8[PH]_r[PO_2]_r - 1{,}53 \cdot 10^3[P^\circ]_r{}^2 - 8{,}74 \cdot 10^5[P^\circ]_r[PO_2]_r \\ \frac{\partial[PO_2]_r}{\partial t} = 7{,}38 \cdot 10^{-1}[O_2][P^\circ]_r - 7{,}38 \cdot 10^{-1}[PH]_r[PO_2]_r - 6{,}45 \cdot 10^{-3}[P^\circ]_r[PO_2]_r - 1{,}48[PO_2]_r{}^2 \\ \frac{\partial[POOH]_r}{\partial t} = -1{,}92 \cdot 10^{-6}[POOH]_r + 1{,}92 \cdot 10^{-6}[PH]_r[PO_2]_r \\ \frac{\partial[PH]_r}{\partial t} = -6{,}19 \cdot 10^{-8}[PH]_r[PO_2]_r - 1{,}24 \cdot 10^{-7}[POOH]_r \\ \frac{\partial[O_2]}{\partial t} = (-1{,}05 \cdot 10^{-6}[O_2][P^\circ]_r + 1{,}05 \cdot 10^{-6}[PO_2]_r{}^2) + 8{,}00 \cdot 10^{-7}\frac{\partial^2[O_2]}{\partial x^2} \end{cases} \quad \text{(C.24)}$$

Les conditions initiales sont dans ce cas $POOH_r(x, t=0)=POOH_{r0}$, $PH_r(x, t=0)=PH_{r0}$.

C.5.1.Solution de Référence

La solution de référence est calculée avec le logiciel commercial MATLAB© en utilisant un schéma aux différences finies en espace, ce qui permet d'obtenir un système d'équations différentielles résolu ensuite avec la méthode ODE23tb.

La représentation des évolutions de chaque inconnue est donnée figure C.21.

O_2	
P_r	

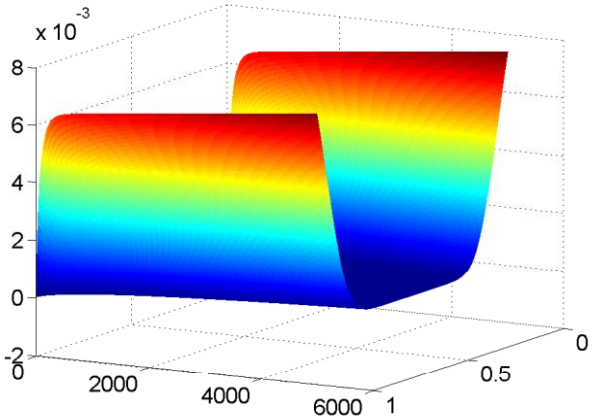
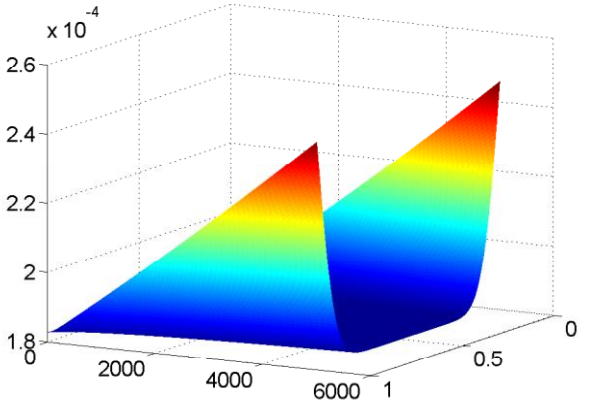
PO_{2r}	
$POOH_r$	

Fig C.21 *: Solution de référence du problème en mol/L de thermo oxydation défini équation C.24.*

La solution de l'espèce PH_r n'est pas montré car l'amplitude de son évolution est très petite, elle reste très proche de 10^{-6}.

C.5.2.Résolution PGD

Dans ce paragraphe, nous avons résumé une série d'informations concernant l'application de la méthode PGD au problème de thermo-oxydation décrit précédemment.

On considère la recherche des fonctions temporelles. La raideur du système nous impose l'utilisation de la méthode de Rosenbrock. Quelques remarques peuvent être faites avant d'aborder la résolution du problème.

Il est rappelé que la recherche des fonctions temporelles génère un problème de Cauchy qui peut être décrit sous la forme suivante :

$$R_t' = f\big(t, R_t(t)\big) \qquad ; \qquad R_t(t_0) = R_{t0} \qquad \text{(C.25)}$$

L'application de la méthode de Rosenbrock implique la nécessité de devoir évaluer la matrice jacobienne (df/dR) et le vecteur df/dt.

La fonction $f\big(t, R_t(t)\big)$ est composée par une somme de termes qui est le résultat de la substitution de la formulation PGD dans le problème de départ. Ces termes peuvent être de type linéaire ou quadratique. Les tableaux suivant résument la contribution des termes (notés T) qui forment la fonction $f\big(t, R_t(t)\big)$ dans l'expression des termes de df/dR et df/dt.

Termes du type : Y_1 (ex. $2k_2[POOH]_r$)	
$T(t)$	$k \int_{\Omega_x} R_x^{(vf)} (\sum_{i=1}^{n_1} F_{ix}^{(1)} F_{it}^{(1)}(t) + R_x^{(1)} R_t^{(1)}(t)) dx$
$\frac{\partial T(t)}{\partial R_t^1}$	$k \int_{\Omega_x} R_x^{(vf)} R_x^{(1)} dx \cdot R_t^{(1)}(t)$
$\frac{\partial T(t)}{\partial t}$	$k \sum_{i=1}^{n_1} (\int_{\Omega_x} R_x^{(vf)} F_{ix}^{(1)} dx \cdot \frac{\partial F_{it}^{(1)}(t)}{\partial t})$

Tab C.26 *: Composantes des termes linéaires à calculer pour la résolution avec la méthode de Rosenbrock*

Termes du type : Y_1Y_2 (ex. $-k_2[O_2][P°]_r$)	
$T(t)$	$k \int_{\Omega_x} R_x^{(vf)} (\sum_{i=1}^{n_1} F_{ix}^{(1)} F_{it}^{(1)}(t) + R_x^{(1)} R_t^{(1)}(t)) (\sum_{j=1}^{n_2} F_{jx}^{(2)} F_{jt}^{(2)}(t) + R_x^{(2)} R_t^{(2)}(t))$
$\frac{\partial T(t)}{\partial R_t^1}$	$k \sum_{j=1}^{n_2} (\int_{\Omega_x} R_x^{(vf)} F_{jx}^{(2)} dx \cdot F_{jt}^{(2)}(t)) \cdot R_t^{(1)}(t) + k \int_{\Omega_x} R_x^{(vf)} R_x^{(2)} R_x^{(1)} dx \cdot R_t^{(1)}(t)$
$\frac{\partial T(t)}{\partial t}$	$k \left(\sum_{i=1}^{n_1} \left(\int_{\Omega_x} R_x^{(vf)} F_{ix}^{(1)} dx \cdot \frac{\partial F_{it}^{(1)}(t)}{\partial t} \right) \cdot \sum_{j=1}^{n_2} \left(\int_{\Omega_x} R_x^{(vf)} F_{jx}^{(2)} dx \cdot F_{jt}^{(2)}(t) \right) + \sum_{i=1}^{n_1} \left(\int_{\Omega_x} R_x^{(vf)} F_{ix}^{(1)} dx \cdot F_{it}^{(1)}(t) \right) \cdot \sum_{j=1}^{n_2} \left(\int_{\Omega_x} R_x^{(vf)} F_{jx}^{(2)} dx \cdot \frac{\partial F_{jt}^{(2)}(t)}{\partial t} \right) \right) + k \sum_{i=1}^{n_1} \left(\int_{\Omega_x} R_x^{(vf)} F_{ix}^{(1)} R_x^{(2)} dx \cdot \frac{\partial F_{it}^{(1)}(t)}{\partial t} \right) \cdot R_t^{(2)}(t) + k \sum_{i=1}^{n_1} \left(\int_{\Omega_x} R_x^{(vf)} F_{ix}^{(2)} R_x^{(1)} dx \cdot \frac{\partial F_{it}^{(2)}(t)}{\partial t} \right) \cdot R_t^{(1)}(t)$

Tab C.27 *: Composantes des termes non-linéaires à calculer pour la résolution avec la méthode de Rosenbrock*

Termes du type : Y_1^2 (ex. $-\frac{2\psi k_2}{(2\beta)^2}[P°]_r{}^2$)	
$T(t)$	$k\int_{\Omega_x} R_x^{(vf)}\left(\sum_{i=1}^{n_1} F_{ix}^{(1)}F_{it}^{(1)} + R_x^{(1)}R_t^{(1)}\right)^2 dx$
$\frac{\partial T(t)}{\partial R_t^1}$	$2k\sum_{i=1}^{n_1}(\int_{\Omega_x} R_x^{(vf)}F_{ix}^{(1)}dx \cdot F_{it}^{(1)}(t)) \cdot R_t^{(1)}(t) + 2k\int_{\Omega_x} R_x^{(vf)}R_x^{(1)2}dx \cdot R_t^{(1)}(t)$
$\frac{\partial T(t)}{\partial t}$	$2k\sum_{i=1}^{n_1}\left(\int_{\Omega_x} R_x^{(vf)}F_{ix}^{(1)}dx \cdot \frac{\partial F_{it}^{(1)}(t)}{\partial t}\right) \cdot \sum_{i=1}^{n_1}\left(\int_{\Omega_x} R_x^{(vf)}F_{jx}^{(1)}dx \cdot F_{jt}^{(1)}(t)\right) + 2k\sum_{i=1}^{n_1}\left(\int_{\Omega_x} R_x^{(vf)}F_{ix}^{(1)}R_x^{(1)}dx \cdot \frac{\partial F_{it}^{(1)}(t)}{\partial t}\right) \cdot R_t^{(1)}(t)$

Tab C.28 *: Composantes des termes non-linéaires (cas particulier des termes quadratiques) à calculer pour la résolution avec la méthode de Rosenbrock*

Les termes illustrés dans les tableaux C.26, C.27 et C.28 contribuent à la bonne convergence du calcul. Plus précisément, les termes non-linéaires entraînent que les équations résolues pour la recherche des fonctions temporelles deviennent des équations différentielles à coefficients variables.

$$a \cdot R' = b_1(t)R + b_2R + X(t) \qquad \text{(C.29)}$$

La présence des coefficients variables est évidente dans les tableaux C.27 et C.28 à la fois dans le terme générique *T(t)* et dans les termes df/dR et de df/dt. Pour ce type de problème, la présence des termes non-linéaires influence l'algorithme à travers plusieurs étapes du calcul.

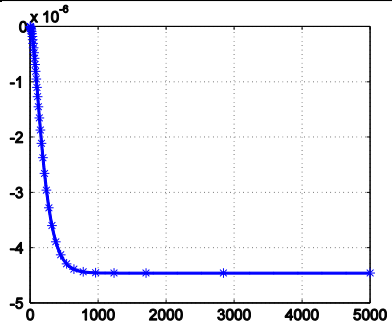
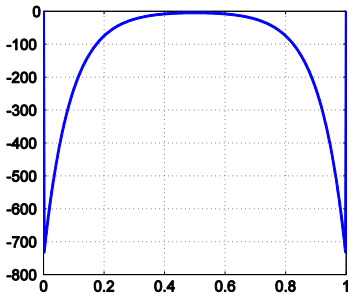
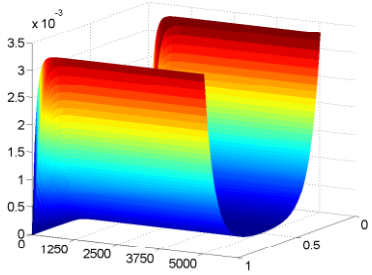
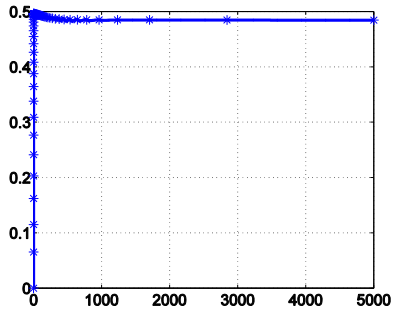
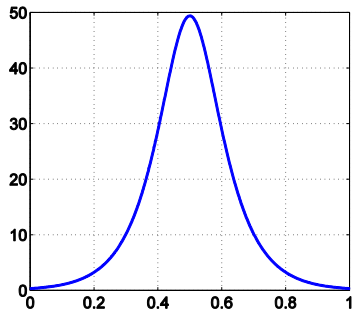
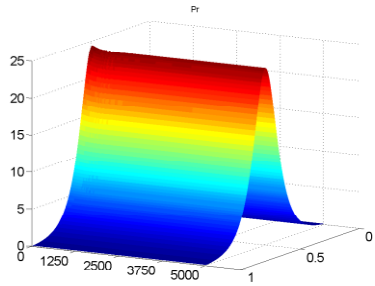
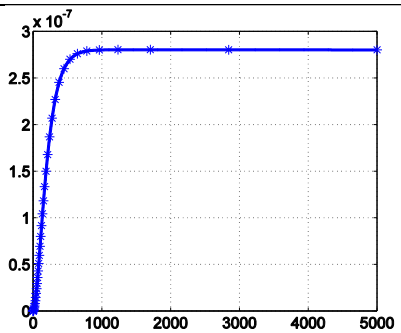
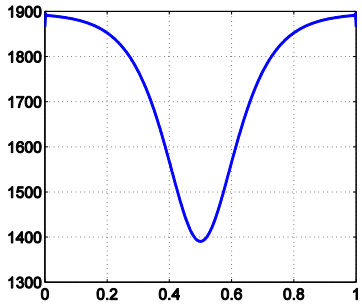
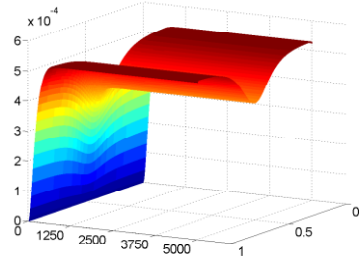
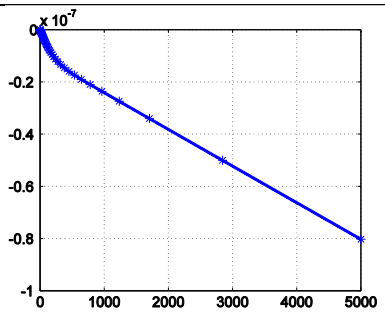
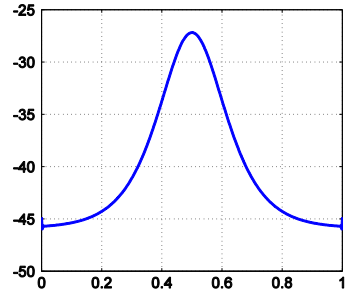
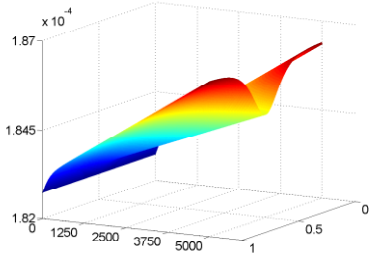
C.5.3.Premier mode PGD

Dans la résolution des équations de thermo oxydation, des problèmes de convergence ont été rencontrés. Dans cette partie sont présentés les seuls résultats obtenus dans des combinaisons très particulières de stratégie de résolution.

Pour la recherche du premier mode, les fonctions spatiales sont cherchées avec une stratégie de couplage faible, alors que les fonctions temporelles sont recherchées avec une stratégie de couplage fort. Il a été observé que la convergence de la méthode de Galerkin était plus aisée dans cette configuration. Une étude plus approfondie pourrait être envisagée afin de comprendre les causes qui rendent difficiles, dans ce cas, la recherche des fonctions en espace de façon couplée mais elle ne sera pas abordée ici.

Deux situations ont permis d'obtenir des résultats exploitables. Elles diffèrent de par la technique de linéarisation utilisée pour la recherche des fonctions spatiales.

La première situation notée cas 1 est faite en considérant la résolution des fonctions temporelles avec une stratégie de type *Couplage fort*, *Newton 2*. Les fonctions en espace sont-elles cherchées avec une stratégie de résolution *Couplage faible*, *Newton 1* sur un maillage de 500 éléments. Dans cette configuration, l'algorithme fournit un premier mode pour toutes les espèces. Les fonctions spatiales et temporelles ainsi que le mode obtenu pour chaque espèce sont données figure C.22.

	t [s]	*x [mm]*	*Solution reconstruite au mode 1*
O_2			
P_r			
PO_{2r}			
$POOH_r$			

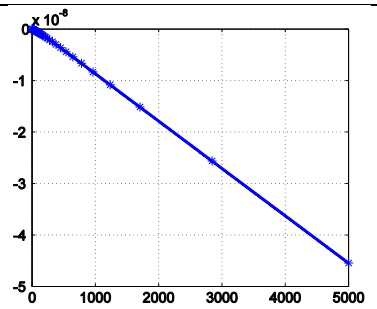
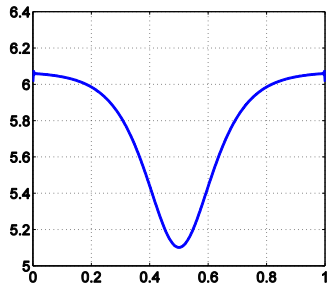
PH_r			

Fig C.22 *: Premier mode dans le cas 1*

On peut tout d'abord remarquer que l'algorithme de Rosenbrock positionne la majorité des éléments de discrétisation aux temps courts. La solution du premier mode est obtenue avec 71 éléments en total.

Si on focalise notre attention sur le premier mode de l'inconnue P_r, on peut remarquer que la fonction temporelle présente des oscillations qui ne sont pas visibles sur les autres espèces. La figure C.23 montre le détail de ces oscillations.

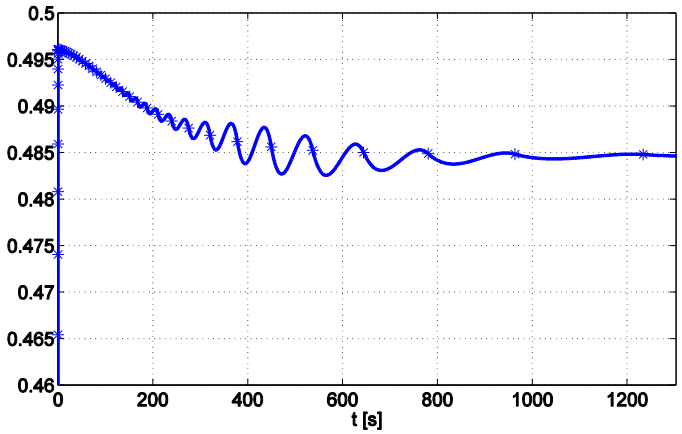


Fig C.23 *: oscillations sur la fonction temporelle de l'espèce P_r*

Les oscillations semblent avoir lieu sur chaque élément de discrétisation (repéré par une étoile). On rappelle que l'interpolation des fonctions, sur chaque élément de discrétisation, est faite à travers un polynôme qui satisfait des contraintes issues du calcul de la méthode de Rosenbrock. Parmi ces contraintes, il y a la valeur de la fonction et de sa dérivée sur les points de frontière de l'élément. La figure C.24 qui est un zoom sur un élément particulier, illustre ce propos.

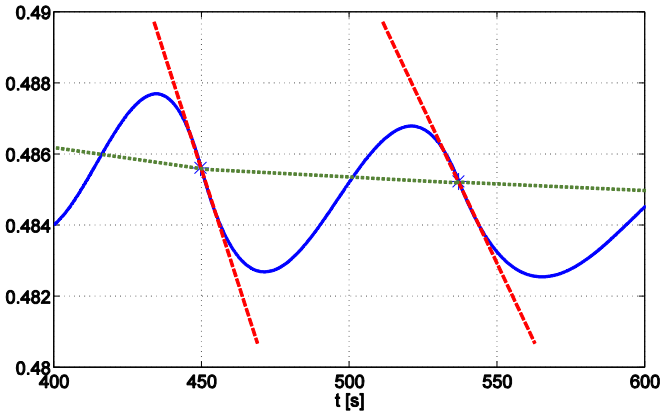
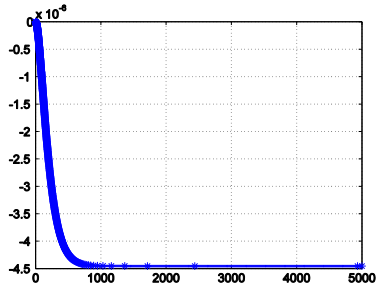
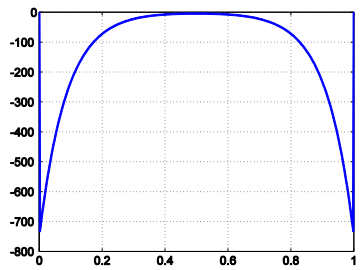
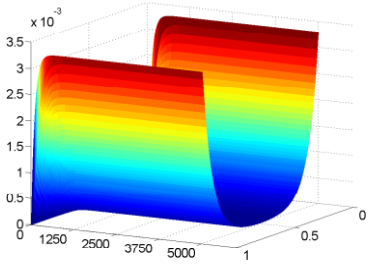
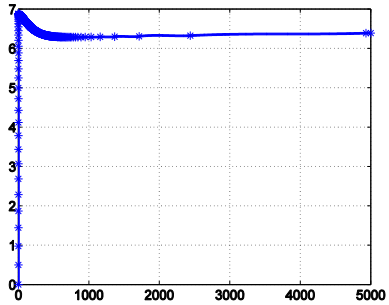
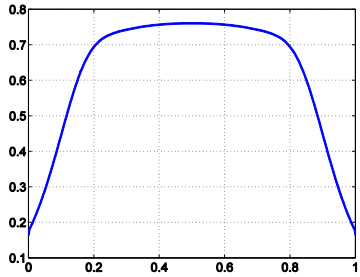
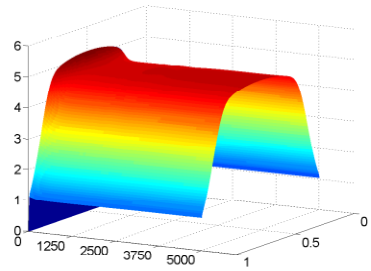


Fig C.24 *: détail des oscillations sur la fonction temporelle de l'espèce* P_r

En vert, une interpolation de type linéaire entre les points de frontière des éléments est calculée. En rouge la tangente de la fonction montre que la méthode de Rosenbrock, dans ce cas, fournit une valeur de la dérivée excessivement grande. Le seul polynôme de degré 3 qui peut satisfaire à la fois la valeur de la fonction et à la fois la valeur de sa dérivée doit impérativement avoir un changement de concavité.

Lorsque que l'on compare avec la solution de référence les écarts sont très importants et démontrent la défaillance de cette combinaison.

La seconde situation notée cas 2 est maintenant présentée. Les fonctions spatiales sont maintenant cherchées avec une stratégie de type *Couplage faible*, *Newton 2* au lieu de *Couplage faible*, *Newton 1* comme dans le cas précédent. Dans ce cas, nous avons obtenu un premier mode PGD proche de la solution de référence.

	t [s]	*x [mm]*	*Solution reconstruite au mode 1*
O_2			
P_r			

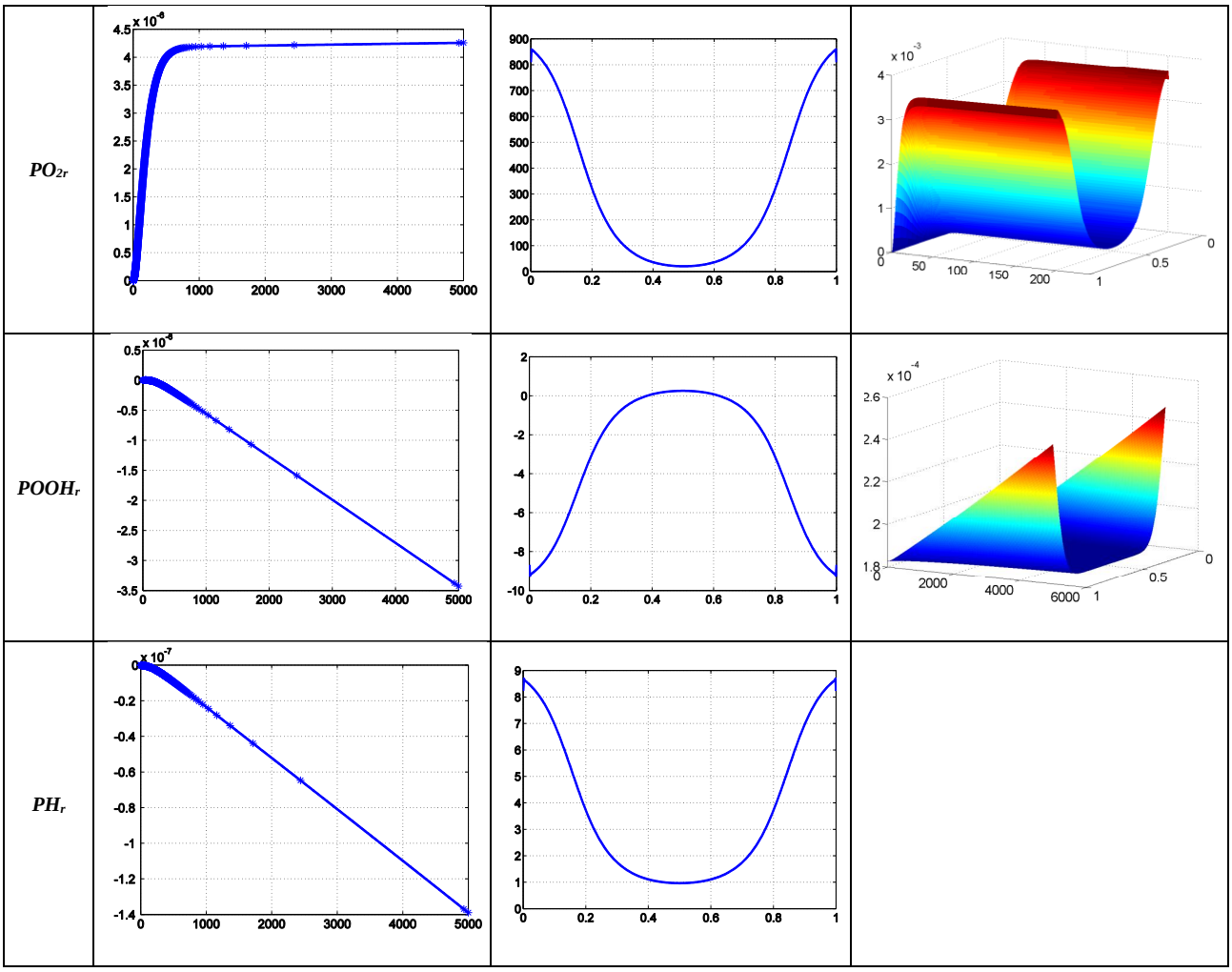


Fig C.25 *: Premier mode dans le cas 2*

Plus précisément, la comparaison entre la solution de référence et la reconstruction de ce premier mode montre que les deux ont globalement la même forme et les mêmes ordres de grandeurs. Ce résultat nous montre que l'algorithme PGD, dans cette configuration, est capable d'aborder ce type de problème. L'erreur commise par rapport à la solution de référence est montrée pour toutes les inconnues dans le tableau C.30.

Inconnue	*Erreur*
O_2	0.49
P_r	0.18
PO_{2r}	0.60
$POOH_r$	0.03
PH_r	0.00

Tab C.30 *: Erreur par rapport à la solution de référence pour les différentes espèces*

Le nombre d'éléments de discrétisation temporelle dans ce cas est de 873. Les éléments de discrétisation des fonctions temporelles sont distribués de façon plus dense pour les temps

courts. Dans cette situation, des oscillations apparaissent aussi sur la fonction temporelle de l'inconnue P_r mais elles sont moins marquées. Leur amplitude est très petite et leur fréquence est plus élevée come montré dans la figure C.26.

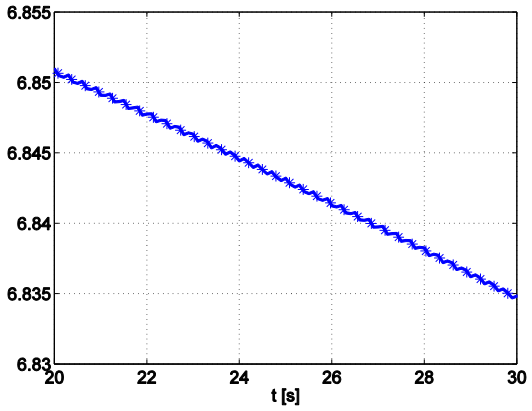


Fig C.26 *: oscillations sur la fonction temporelle de l'espèce P_r*

Il semble que le fait d'avoir un plus grand nombre d'éléments par rapport à la solution du cas précédent soit en lien avec la fréquence de ces oscillations. L'origine de ces oscillations reste pour nous un aspect qui mériterait une étude plus approfondie et constitue un verrou majeur. Une hypothèse qui peut fournir des nouvelles pistes de réflexion est liée au fait que les équations qui sont résolues afin de trouver les fonctions en temps sont des équations différentielles à coefficients variables.

Nous avons remarqué que les oscillations sont en correspondance des zones temporelles où il y a une variation de la fonction $F_{0x}^{(O_2)}$ (fonction temporelle du mode artificiel qui décrit les conditions aux bords). Cette fonction peut influencer deux aspects du système d'équations résolu : en premier lieu elle influence les termes connus *X(t)* (voir équation C.30) des équations, et en plus elle influence le terme $b_1(t)$.

Pour compléter la discussion, il est investigué de façon plus précise les systèmes d'équations qui sont résolus pour la recherche des fonctions temporelles. Comme montré dans les parties précédentes, l'écriture PGD génère des équations différentielles ordinaires avec des coefficients qui changent à chaque itération de l'algorithme du point fixe. Vu la complexité du système et les évidentes difficultés à reporter sur ce document tous les coefficients du problème pour chaque itération du point fixe nous avons choisi de reporter seulement les coefficients qui concernent la dernière itération du point fixe pour les deux cas examinés dans le paragraphe précédent. On remarque que le cas 1 exécute 8 itérations du point fixe tandis que le cas 2 en exécute seulement 3. Ces coefficients sont reportés dans les tableaux C.31 à C.35.

$\frac{\partial[P°]_r}{\partial t} = 2,00 \cdot 10^8[POOH]_r - 1,00 \cdot 10^8[O_2][P°]_r + 1,00 \cdot 10^8[PH]_r[PO_2]_r - 1,53 \cdot 10^3[P°]_r{}^2 - 8,74 \cdot 10^5[P°]_r[PO_2]_r$		
Termes	*Cas 1*	*Cas 2*
$\frac{\partial[P°]_r}{\partial t}$	$2.64\frac{dR_t^{(P_r)}}{dt}$	$4.43 * 10^{-1}\frac{dR_t^{(P_r)}}{dt}$
$2,00 \cdot 10^8[POOH]_r$	$-1.80 * 10^8 R_t^{(POOH_r)} + POOH_{r0} * 2.11 * 10^8$	$-2.61 * 10^8 R_t^{(POOH_r)} + POOH_{r0} * 1.27 * 10^8$
$-1,00 \cdot 10^8[O_2][P°]_r$	$1.83 * 10^9 R_t^{(O_2)} R_t^{(P_r)} - 8.10 * 10^1(1 - e^{-\tau t})R_t^{(P_r)}$	$2.22 * 10^9 R_t^{(O_2)} R_t^{(P_r)} - 3.55 * 10^3(1 - e^{-\tau t})R_t^{(P_r)}$
$1,00 \cdot 10^8[PH]_r[PO_2]_r$	$2.61 * 10^{10} R_t^{(PH_r)} R_t^{(PO_{2r})} + 1.35 * 10^{10} PH_{r0} R_t^{(PO_{2r})}$	$7.26 * 10^{10} R_t^{(PH_r)} R_t^{(PO_{2r})} + 1.44 * 10^{10} PH_{r0} R_t^{(PO_{2r})}$
$-1,53 \cdot 10^3[P°]_r{}^2$	$-1.24 * 10^4 R_t^{(P_r)2}$	$-4.92 * 10^2 R_t^{(P_r)2}$
$-8,74 \cdot 10^5[P°]_r[PO_2]_r$	$2.90 * 10^8 R_t^{(P_r)} R_t^{(PO_{2r})}$	$7.01 * 10^7 R_t^{(P_r)} R_t^{(PO_{2r})}$

Tab C.31 *: coefficients de l'équation 1 à la dernière itération du point fixe pour les cas 1 et 2*

$\frac{\partial[PO_2]_r}{\partial t} = 7,38 \cdot 10^{-1}[O_2][P°]_r - 7,38 \cdot 10^{-1}[PH]_r[PO_2]_r - 6,45 \cdot 10^{-3}[P°]_r[PO_2]_r - 1,48[PO_2]_r{}^2$		
Termes	*Cas 1*	*Cas 2*
$\frac{\partial[PO_2]_r}{\partial t}$	$1.85 * 10^4\frac{dR_t^{(PO_{2r})}}{dt}$	$1.73 * 10^5\frac{dR_t^{(PO_{2r})}}{dt}$
$7,38 \cdot 10^{-1}[O_2][P°]_r$	$-1.74 * 10^3 R_t^{(O_2)} R_t^{(P_r)} + 3.65 * 10^{-3}(1 - e^{-\tau t})R_t^{(P_r)}$	$-1.95 * 10^4 R_t^{(O_2)} R_t^{(P_r)} + 1.29 * 10^{-1}(1 - e^{-\tau t})R_t^{(P_r)}$
$-7,38 \cdot 10^{-1}[PH]_r[PO_2]_r$	$-2.72 * 10^4 R_t^{(PH_r)} R_t^{(PO_{2r})} - 1.37 * 10^4 PH_{r0} R_t^{(P_r)}$	$-2.72 * 10^4 R_t^{(PH_r)} R_t^{(PO_{2r})} - 1.37 * 10^4 PH_{r0} R_t^{(P_r)}$
$-6,45 \cdot 10^{-3}[P°]_r[PO_2]_r$	$-1.12 * 10^2 R_t^{(P_r)} R_t^{(PO_{2r})}$	$-4.32 * 10^2 R_t^{(P_r)} R_t^{(PO_{2r})}$
$-1,48[PO_2]_r{}^2$	$-3.74 * 10^6 R_t^{(PO_{2r})2}$	$-1.66 * 10^8 R_t^{(PO_{2r})2}$

Tab C.32 *: coefficients de l'équation 2 à la dernière itération du point fixe pour les cas 1 et 2*

$\frac{\partial[POOH]_r}{\partial t} = -1,92 \cdot 10^{-6}[POOH]_r + 1,92 \cdot 10^{-6}[PH]_r[PO_2]_r$		
Termes	*Cas 1*	*Cas 2*
$\frac{\partial[POOH]_r}{\partial t}$	$9.37 * 10^{-1}\frac{dR_t^{(POOH_r)}}{dt}$	$1.88 * 10^1\frac{dR_t^{(POOH_r)}}{dt}$
$-1,92 \cdot 10^{-6}[POOH]_r$	$-1.80 * 10^{-6} R_t^{(POOH_r)} + 1.85 * 10^{-6} POOH_{r0}$	$-3.61 * 10^{-5} R_t^{(POOH_r)} + 5.72 * 10^{-6} POOH_{r0}$
$1,92 \cdot 10^{-6}[PH]_r[PO_2]_r$	$-5.03 * 10^{-4} R_t^{(PH_r)} R_t^{(PO_{2r})} - 2.53 * 10^{-4} PH_{r0} R_t^{(P_r)}$	$-2.35 * 10^{-2} R_t^{(PH_r)} R_t^{(PO_{2r})} - 3.45 * 10^{-3} PH_{r0} R_t^{(P_r)}$

Tab C.33 *: coefficients de l'équation 3 à la dernière itération du point fixe pour les cas 1 et 2*

$\frac{\partial[PH]_r}{\partial t} = -6,19 \cdot 10^{-8}[PH]_r[PO_2]_r - 1,24 \cdot 10^{-7}[POOH]_r$		
Termes	*Cas 1*	*Cas 2*
$\frac{\partial[PH]_r}{\partial t}$	$3.92\frac{dR_t^{(PH_r)}}{dt}$	$3.92 * 10^1\frac{dR_t^{(PH_r)}}{dt}$
$-6,19 \cdot 10^{-8}[PH]_r[PO_2]_r$	$-3.31 * 10^{-5}R_t^{(PH_r)}R_t^{(PO_{2r})} - 1.67 * 10^{-5}PH_{r0}R_t^{(P_r)}$	$-7.48 * 10^{-4}R_t^{(PH_r)}R_t^{(PO_{2r})} - 1.13 * 10^{-4}PH_{r0}R_t^{(P_r)}$
$-1,24 \cdot 10^{-7}[POOH]_r$	$2.37 * 10^{-7}R_t^{(POOH_r)} - 2.45 * 10^{-7}POOH_{r0}$	$2.32 * 10^{-6}R_t^{(POOH_r)} + 4.46 * 10^{-7}POOH_{r0}$

Tab C.34 *: coefficients de l'équation 4 à la dernière itération du point fixe pour les cas 1 et 2*

$\frac{\partial[O_2]}{\partial t} = (-1,05 \cdot 10^{-6}[O_2][P°]_r + 1,05 \cdot 10^{-6}[PO_2]_r{}^2) + 8,00 \cdot 10^{-7}\frac{\partial^2[O_2]}{\partial x^2}$		
Termes	*Cas 1*	*Cas 2*
$\frac{\partial[O_2]}{\partial t}$	$4.74 * 10^4\frac{dR_t^{(O_2)}}{dt}$	$4.75 * 10^4\frac{dR_t^{(O_2)}}{dt}$
$-1,05 \cdot 10^{-6}[O_2][P°]_r$	$2.33 * 10^{-3}R_t^{(O_2)}R_t^{(P_r)} + 1.64 * 10^{-10}(1 - e^{-\tau t})R_t^{(P_r)}$	$1.33 * 10^{-2}R_t^{(O_2)}R_t^{(P_r)} + 1.14 * 10^{-9}(1 - e^{-\tau t})R_t^{(P_r)}$
$1,05 \cdot 10^{-6}[PO_2]_r{}^2$	$-2.67R_t^{(P_r)2}$	$-6.16 * 10^1R_t^{(P_r)2}$
$8,00 \cdot 10^{-7}\frac{\partial^2[O_2]}{\partial x^2}$	$-4.33 * 10^2R_t^{(O_2)} + 5.85 * 10^{-1}(1 - e^{-\tau t})$	$-4.34 * 10^2R_t^{(O_2)} + 5.86 * 10^{-1}(1 - e^{-\tau t})$

Tab C.35 *: coefficients de l'équation 5 à la dernière itération du point fixe pour les cas 1 et 2*

Le tableau C.31 qui concerne uniquement la première équation permet probablement une réflexion vis-à-vis de l'origine des oscillations montrées dans le paragraphe précédent. Nous avons mis dans ce tableau en rouge la valeur en facteur de la fonction temporelle qui rend notre système un système d'équations différentielles à coefficients variables ($b_1(t)$). Nous pouvons juste remarquer que la contribution à la variation de P_r de ce terme est beaucoup plus importante pour le cas 2. Aussi dans la deuxième équation il existe un terme qui génère un coefficient variable mais son influence est beaucoup moins importante.

C.5.4.Deuxième mode PGD

Sur la base des résultats obtenus dans le paragraphe précédent, la recherche d'un deuxième mode met en évidence des difficultés. En particulier, le cas 1 ne fournit pas de solution, la méthode de Rosenbrock semble nécessiter un pas de temps extrêmement petit aux temps courts pour le calcul de ce deuxième mode, les oscillations en sont la cause. En revanche avec la méthode de résolution du cas 2 dont le premier mode est proche de la solution, la première itération du point fixe fournit une solution uniquement pour les fonctions temporelles de toutes les espèces.

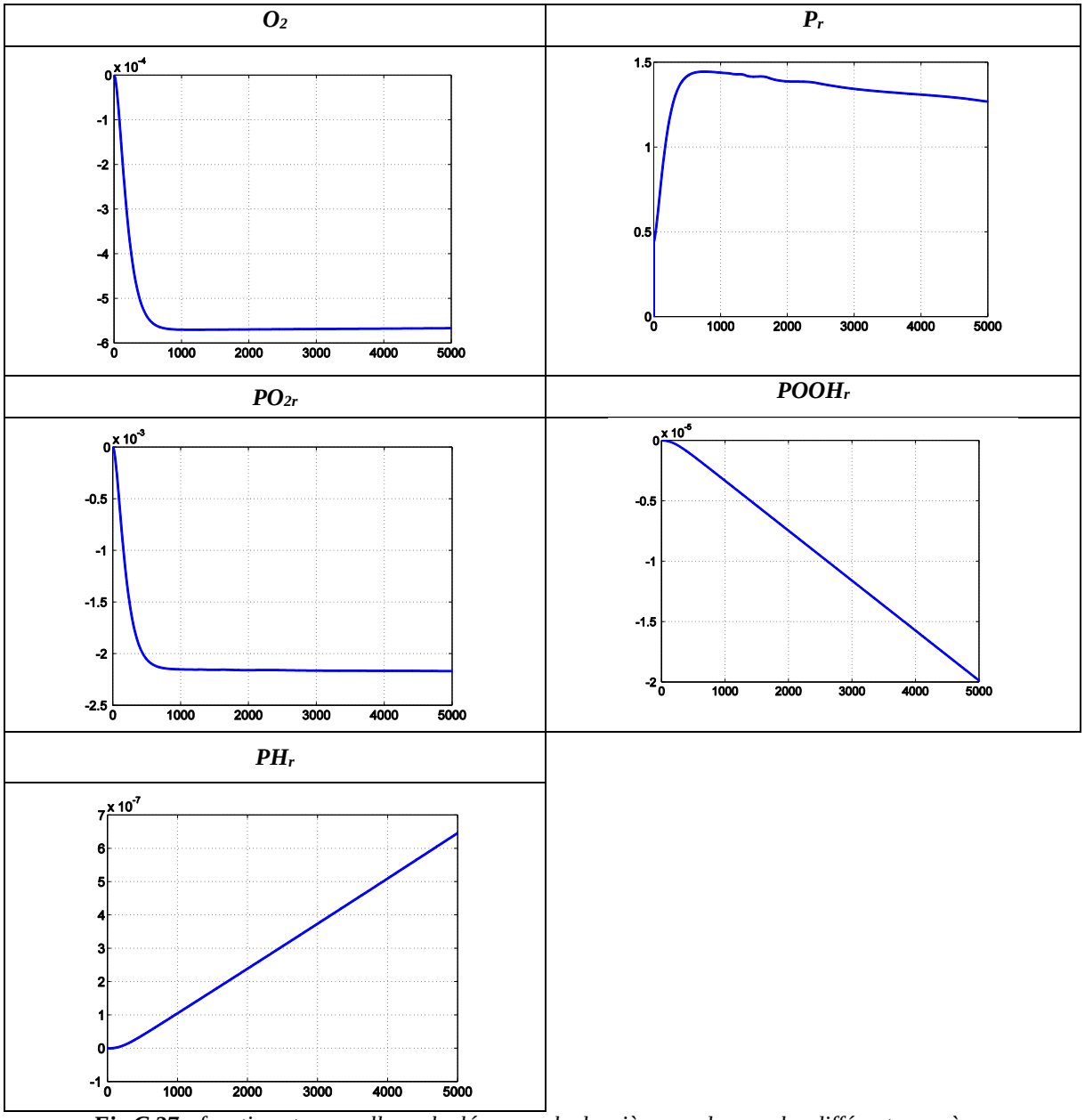


***Fig C.27** : fonctions temporelles calculées pour le deuxième mode pour les différentes espèces*

Ces fonctions temporelles sont reportées figure C.27. L'analyse des fonctions temporelles du deuxième mode montre que la méthode de Rosenbrock nécessite 19892 éléments de discrétisation temporelle. Les fonctions temporelles sont affectées par le même type d'oscillations que celles observées sur les fonctions temporelles du premier mode. Les oscillations dans ce cas sont présentes sur tout le domaine temporel. Il faut signaler que pour le calcul des fonctions temporelles du deuxième mode, le coefficient $b_1(t)$ de l'équation C.30 devient dépendant des fonctions qui composent le premier mode. Leur variation et leur amplitude changent de façon très importante au long du domaine temporel. La complexité des

équations résolues pour la recherche du deuxième mode ne nous permet pas une représentation claire et synthétique sur ce document.

Des difficultés ont été rencontrées dans la recherche des fonctions spatiales. En particulier, il n'a pas été obtenu de convergence pour les espèces chimiques de réaction. Ces difficultés doivent être étudiées en analysant les équations en espace de façon plus précise. Cette étude est à poursuivre.

C.6. Conclusions Partie C

Dans cette partie, nous nous sommes concentrés sur la résolution de problèmes couplés de diffusion-réaction. Les équations qui décrivent les réactions ont été résolues de façon globale, c'est-à-dire que chaque inconnue qui représente les espèces de réaction a été résolue dans le domaine spatial et temporel et non de façon locale. Deux stratégies de couplage ont été utilisées : la première nommée couplage faible, et la deuxième nommée couplage fort. La combinaison entre la stratégie numérique sur les couplages et l'algorithme du point fixe génère des problèmes à résoudre de complexités distinctes. Dans un cas chaque équation est résolue séparément et le point fixe se charge à la fois de résoudre le système non-linéaire généré par l'écriture PGD, dans l'autre cas les équations sont résolues simultanément et le point fixe concrétise seulement le lien entre les problèmes en espace et en temps. Quatre exemples sont envisagés : un problème couplé linéaire, un problème couplé non-linéaire, un problème raide et le modèle de thermo oxydation. Le problème linéaire nous permet de tester les deux stratégies de couplage et montre une meilleure performance pour le couplage fort. Dans le cas des problèmes non-linéaires quatre combinaisons de stratégies sont possibles. Une comparaison entre les différentes stratégies est faite en considérant un problème couplé non-linéaire paragraphe C.2. Le paragraphe C.3 est consacré ensuite à l'étude de l'influence de la raideur des systèmes d'équations de réaction sur la résolution PGD. Un exemple de problème linéaire raide est construit afin d'illustrer les phénomènes associés. Cet exemple montre que la méthode de Rosenbrock peut être utilisée dans l'algorithme PGD afin de traiter la raideur des équations en temps. Dans le même paragraphe il est mis en évidence les difficultés que la méthode d'Euler et la méthode de Runge-Kutta ont pour la résolution de systèmes raides. Le paragraphe 4 illustre un problème de diffuso-oxydation. Dans ce cas la seule méthode appliquée pour la recherche des fonctions temporelles est la méthode de Rosenbrock. Des difficultés apparaissent dans la recherche du premier mode pour lequel certaines des fonctions temporelles présentent des oscillations. Même si les causes de ces oscillations ne sont pas clairement identifiées, il a été

avancé l'hypothèse qu'elles peuvent être liées aux coefficients variables générés par l'écriture PGD. La recherche du deuxième mode montre des fonctions temporelles qui sont d'autant plus affectés par ces oscillations. Par conséquent la présence de ce phénomène impose une discrétisation extrêmement raffinée. La recherche des fonctions spatiales montre une difficulté majeure : l'algorithme diverge et ne fournit pas une solution. Des investigations plus approfondies sur la recherche des fonctions spatiales doivent être faites afin de rendre plus claire les limites de convergence.

• Conclusion

Ce travail de thèse a pour objectif d'enrichir la compréhension des problèmes liés à l'application de la méthode PGD aux problèmes de vieillissement des matériaux composites. En particulier, nous nous sommes focalisés sur la résolution de problèmes de diffusion d'espèces chimiques à l'intérieur des matrices polymères des matériaux composites. Pour certaines températures, l'oxygène présente dans l'environnement pénètre à l'intérieur de ces matériaux et déclenche une série de réactions chimiques qui participent à son vieillissement. Le modèle de thermo-oxydation décrit dans la partie introductive du manuscrit permet le calcul de la concentration des espèces chimiques responsables de ce phénomène. La description de ce modèle nous a permis de mettre en avant trois difficultés numériques qui doivent être prises en compte afin de pouvoir aborder sa résolution : le modèle est couplé, non-linéaire et raide. A ces trois difficultés sont adossés trois objectifs à atteindre :

- le développement proposé dans ce travail doit être suffisamment flexible afin de permettre la gestion de problèmes couplés de la manière la plus efficace possible,
- le développement proposé dans ce travail doit permettre le traitement des modèles non-linéaires à travers plusieurs stratégies de linéarisation,
- le développement proposé dans ce travail doit permettre de choisir le schéma temporel de résolution spécifique aux types d'équations traitées. Par exemple, dans le cas du problème de thermo oxydation, des méthodes spécifiques pour la résolution des systèmes raides doivent être combinées à la méthode PGD.

Dans le contexte du laboratoire d'autres travaux sur la méthode PGD ont été réalisés, notamment sur la résolution de systèmes multiphysiques couplés et des systèmes non-linéaires. Toutefois vu la complexité du modèle de thermo-oxydation, un nouvel outil informatique a été développé. Le code développé permet l'implémentation de plusieurs types de méthodes d'intégration des équations différentielles. Vis-à-vis des types de problèmes traités dans ce travail, l'écriture sous forme séparée PGD génère deux types de problèmes intermédiaires : le problème de Cauchy pour les fonctions temporelles et le problème aux bords pour les équations qui dépendent de l'espace. En ce qui concerne la résolution des problèmes temporels, trois méthodes ont été implémentées : la méthode d'Euler explicite, une méthode de Runge-Kutta d'ordre 5 et une méthode de Rosenbrock d'ordre 4.

Une série de problèmes tests d'une difficulté numérique croissante est proposée et résolu dans chaque partie du manuscrit.

Dans la partie A, le problème de diffusion monodimensionnel gouverné par la loi de Fick a été traité. La relative simplicité de ce modèle a permis d'illustrer au plus simple la méthode PGD. A travers ce problème, il est aussi possible d'analyser le comportement de la méthode PGD à l'échelle de chaque itération de l'algorithme du point fixe afin de décrire finement l'évolution des systèmes intermédiaires générés par l'écriture sous forme séparée. Il a été mis en évidence que des problèmes de convergence et

de stabilité peuvent apparaître pendant le calcul de chaque fonction intermédiaire. Du fait de la nature itérative de l'algorithme PGD, l'erreur commise sur chaque évaluation de fonction se répercute sur la recherche de la fonction suivante. Pour cette raison, la méthode de Runge-Kutta a été introduite dans cette même partie pour la recherche des fonctions temporelles. Cette méthode montre que les performances de l'algorithme PGD peuvent être influencées par l'efficacité des méthodes choisies pour la résolution des problèmes intermédiaires. La méthode de Runge-Kutta appliquée dans un cas courant, donne de bons résultats du fait de l'adaptation automatique du maillage en fonction des transitoires.

La partie B est consacrée à la résolution des problèmes non linéaires. Il a été constaté que les performances de l'algorithme PGD sont directement liées à la quantité d'informations concernant les termes non-linéaires, contenues dans chaque fonction intermédiaire calculée. Pour prendre en compte les non linéarités, deux stratégies ont été utilisées. La première (Newton 1) pend en compte les termes non linéaires au niveau des enrichissements de la solution, c'est-à-dire que l'influence de la non-linéarité est prise en compte au fur et à mesure que les modes sont ajoutés à la solution. La deuxième (Newton 2) pend en compte l'influence de la non-linéarité à chaque itération du point fixe. Le modèle testé montre que la deuxième stratégie a de meilleures performances. Comme précédemment, dans le cas non-linéaire, la méthode de Runge-Kutta permet d'améliorer la précision des résultats obtenus ainsi que le temps de calcul.

La partie C se focalise sur le couplage de plusieurs équations. Le but de ce chapitre est celui d'aborder la résolution du modelé de thermo-oxydation décrit dans la partie initiale du manuscrit. Pour concrétiser cela, un problème de diffusion-réaction linéaire a été étudié, il permet d'illustrer les deux stratégies de couplage nommées couplage faible et couplage fort. La stratégie de couplage faible concrétise le couplage entre les différentes équations à travers l'algorithme du point fixe, tandis que le couplage fort considère, sur chaque variable, un système d'équations qui génère directement toutes les fonctions recherchées. Dans le cas de problèmes non-linéaires, la stratégie de couplage fort implique un nombre plus élevé de termes non-linéaires. Une comparaison entre les stratégies est présentée à travers un cas test non-linéaire. La raideur des systèmes est ensuite discutée sur la base d'un modèle de diffusion-réaction linéaire de trois équations. Il a été montré comment un système couplé peut devenir plus ou moins raide en fonctions des temps caractéristiques de la solution. L'analyse du cas raide montre que la recherche des fonctions temporelles nécessite l'utilisation d'une méthode spécifique pour pouvoir être déterminées (dans notre cas la méthode de Rosenbrock).

La résolution du modèle de thermo-oxydation vu dans la partie introductive a finalement été discutée. L'écriture sous forme séparée des variables de ce problème génère des équations différentielles à coefficients variables pour lesquelles les coefficients dépendent des modes qui composent la solution (précédemment déterminés). La résolution de ce modèle a permis d'obtenir un seul mode pour une configuration particulière de stratégies. Les fonctions temporelles de ce mode sont affectées par des oscillations qui perturbent leur évolution. Nous pouvons donc penser sans pour autant le démontrer que ces oscillations peuvent être liées à la présence des coefficients variables. Pour ce qui concerne le

deuxième mode, nous avons pu calculer que les fonctions temporelles car la recherche des fonctions spatiales est affectée par des problèmes de convergence.

• Perspectives

Le travail mené est une petite contribution supplémentaire à la résolution des problèmes couplés, non linéaires et en particulier raides. Il a été créé des outils flexibles pour aborder ce type de problème. L'implémentation de ces outils a été conçue afin de pouvoir être élargie et améliorée. La programmation de méthodes d'intégration différentes peut probablement résoudre les difficultés qui ont été rencontrées pendant la résolution du modèle de thermo-oxydation. Par exemple, pour la recherche des fonctions temporelles, l'implémentation d'une méthode à pas multiple ou d'une méthode de Runge-Kutta implicite peut probablement palier la présence d'oscillations.

L'outil développé permet, de façon simple, de tester d'autres types de modèles afin de collecter des nouvelles connaissances concernant la méthode PGD.

Dans ce travail, l'étude des problèmes en espace n'a quasiment pas été abordée. Une étude plus précise peut être envisagée afin d'améliorer la recherche de la solution.

Même si le logiciel développé permet de traiter des cas 2D et 3D isotrope et anisotropes en espace, nous n'avons pas suffisamment testé les performances dans ces cas. Ceci est lié au fait que nous avons préféré focaliser toutes nos ressources sur la résolution du modèle de thermo diffusion. Une étude de validation peut être envisagée dans les cas 2D et 3D.

Un des points forts de la méthode PGD est la possibilité d'aborder la résolution de problèmes paramétriques, c'est-à-dire des problèmes où les coefficients des équations des problèmes sont pris comme variables et considérées comme des extra-coordonnées. L'implémentation de cette possibilité dans le code issue de ce travail peut représenter un développement intéressant.

Dans ce cadre, une fois l'efficacité de la méthode PGD vérifiée ou démontrée, à long terme il sera possible d'envisager la possibilité de coupler la méthode PGD avec des codes commerciaux de calcul numérique. La complexité réduite de la recherche de la solution à travers la méthode PGD pourrait faire envisager des réductions de temps de calcul notables.

Bibliographie

1. **United States Government Accountability Office.** *Status of the FAA's actions to oversee the safety of composite airplanes.* s.l. : Aviation Safety, 2011.

2. **B. Mortaigne.** *Vieillissement des composites - Mécaniscmes et méthodologie d'étude.* s.l. : Techniques de l'ingénieur, 2005. cor112.

3. **B. Fayolle, J. Verdu.** *Vieillissement physique des matériaux polymèrs.* s.l. : Techniques de l'ingénieur, 2005. am3150.

4. **J. Verdu.** *Vieillissement chimique des plastiques : aspects généraux.* s.l. : Technique de l'ingénieur, 2005. am3151.

5. —. *Vieillissement chimique: modélisation cinétique.* s.l. : Technique de l'ingénieur, 2005. am3152.

6. **L. Audouin, X. Colin, B. Fayolle, J. Verdu.** *Modélisation cinétique d'un mécanisme d'oxydation.* s.l. : Technique de l'ingénieur , 2005. am3154.

7. **A. Ammar, B. Mokdad, F. Chinesta, R. Keunings.** *A new family of solvers for some classes of multidimensional partial differential equations encountered in kinetic theory modeling of complex fluid.* s.l. : Journal of Non-Newton FLuid Mechanics, 2006. 139 153-176.

8. **F. Chinesta, P. Ladavèze, E. Cueto.** *A Short Review on Model Order Reduction Based on Proper Generalized Decomposition.* s.l. : Archives of Computational Methods in Engineering, 2011. 18 (2011) 395-404.

9. **L. Olivier.** *Prévision du vieillissement thermo-oxydant de composites à matrice organique dédiés à l'aéronautique: Prise en compte des couplages multiphysiques.* Poitiers : Thèse de doctorat ENSMA , 2008.

10. **S. Rouquie.** *Vieillissement de structures composites à matrice organique soumises à des chargements thermomécaniques répétés.* Poitiers : ENSMA, 2003.

11. **N.Q. HO.** *Endommagements de composites carbone/époxy induit par la thermo-oxydation de la matrice en présence de contraintes mécaniques.* Poitiers : Thèse de doctorat ENSMA, 2006.

12. **M. Minervino.** *Effets de la thermo oxydation sur le comportement mécanique de matériaux composites pour applications aéronautiques.* Poitiers : Thèse de doctorat ENSMA, 2013.

13. **G. Rambert.** *Modélisation des couplages thermo-diffuso-mécaniques dans les matériaux polymères. Application numérique à la décompression explosive.* Poitiers : thèse de doctorat ENSMA, 2002.

14. **L.T. Nguyen.** *La Décomposition Propre Généralisée pour la résolution de problèmes multiphysiques transitoires couplés dédiés à la mécanique des matériaux - Maillage adaptatif et couplage avec la MAN.* Poitiers : thèse de doctorat ISAE-ENSMA, 2012.

15. **M. Beringhier, M. Gueguen, J.C. Grandidier.** *Solution of strongly coupled multiphysics problems using space-time separed representation - Application to thermoviscoelasticity.* s.l. : Archives of Computational Methods in Engineering, 2010. 17 393-401.

16. **M. Beringhier, M. Gigliotti.** *A novel methodology for the rapid identification of the water diffusion coefficients of composite materials.* s.l. : In Composites, 2015. January 2015 68:212-218.

17. **M. Beringhier, A. Simar, M. Gigliotti, J.C. Grandidier, I. Ammar-Khodja.** *Identification of the orthotropic diffusion properties of RTM textile composites for aircraft applications.* s.l. : Composite Structures, 2016. 137:33-43.

18. **A. Fick.** *On liquid diffusion.* s.l. : Philos. Mag. J. Sci., 1855. Vols. 10, 31-39. 10, 31-39.

19. **T. N. Narasimhan.** *Fourier's heat conduction equation: history, influence, and connections.* s.l. : Reviews of Geophysics, 1999. 37:151-172.

20. **J. Crank.** *The Mathematics of diffusion.* s.l. : Oxford University Press, 1975.

21. **G.P. Tandon, K.V. Pochiraju, G.A. Schoeppner.** *Modeling of oxidative development in PMR-15 resin.* s.l. : Polymer Degradation and Stability, 2006. 91:1861-1869.

22. **K.V. Pochiraju, G.P. Tandon.** *Modeling Thermo-Oxidative Layer Growth in High-Temperature Resins.* s.l. : Journal of Engineering Materials and Technology, 2006. 128:107-116.

23. —. *Interaction of oxidation and damage in high temperature polymeric matrix composites.* s.l. : Composites Part a-Applied Science and Manufacturing, 2009. 40:1931-1940.

24. **G.P.Tandon, K.V. Pochiraju, G.A. Schoeppner.** *Thermo-oxidative behavior of high-temperature PMR-15 resin and composites.* s.l. : Materials Science and Engineering a-Structural Materials Properties Microstructure and Processing, 2008. 498:150-161.

25. —. *Long-Term Durability of Polymeric Matrix Composites.* s.l. : Springer US, 2012.

26. **S. Verdu, J. Verdu.** *A new kinetic model for polypropylene thermal oxidation at moderate temperatures.* s.l. : Macromolecules, 1997. 30:2262-2267.

27. **X. Colin.** *Modélisation cinétique de la thermo-oxydation de matériaux polymères et composites à hautes performances thermomécaniques.* Paris : École Nationale Supérieure d'Arts et Métiers, 2000.

28. **X. Colin, C. Marais, J. Verdu.** *A new method for predicting the thermal oxidation of thermoset matrices - Application to an amine crosslinked epoxy.* s.l. : Polymer Testing, 2001. 20:795-803.

29. —. *Kinetic modelling of the stabilizing effect of carbon fibres on thermal ageing of thermoset matrix composites.* s.l. : Composites Science and Technology, 2005. 65:117-127.

30. **M. Lafarie-Frenot, J. Grandidier, M. Gigliotti, et al.** *Thermo-oxidation behaviour of composite materials at high temperatures: A review of research activities carried out within the COMEDI program.* s.l. : Polymer Degradation and Stability, 2010. 95:965-974.

31. **X. Colin, C. Marais, J. Verdu.** *A new method for predicting the thermal oxidation of thermoset matrices: Application to an amine crosslinked epoxy.* s.l. : Polymer Testing, 2001. 20(7) 795-803.

32. **J. Decelle, N. Huet, V. Bellenger.** *Oxidation induced shrinkage for thermally aged epoxy networks.* s.l. : Polymer degradation and stability, 2003.

33. **P. Ladevèze.** *Nonlinear computational structural mechanics - New approaches and non-incremental methods of calculation.* Verlag : Springer, 1999.

34. **P. Ladevèze, J.C. Passieux, D. Néron.** *The LATIN multiscale computational method and the Proper Generalized Decomposition.* s.l. : Computational Method in Applied Mechanics and Engineering, 2010. 199:1287-1296.

35. **D. Néron, P. Ladevéze.** *Proper Generalized Decomposition for Multiscale and Multiphysics Problems.* s.l. : Archives of Computational Methods in Engineering, 2010. 17:351-372.

36. **E. Hairer, G. Wanner.** *Solving Ordinary Differential Equations II : Stiff and differential-algebraic problems.* s.l. : Springer, 1996.

37. **K. Dekker, J.G. Venwer.** *Stability of Runge-Kutta methods for stiff nonlinear differential equations.* s.l. : North-Holland, 1984.

38. **M. E. Davis.** *Numerical Methods & Modeling for Chemical Engineers.* s.l. : California Institute of Technology, 1984. ISBN 0-471-88761-7.

39. **J. Stoer, R. Bulirsch.** *Introduction to Numerical Analysis.* s.l. : Springer, 2003. ISBN-10: 038795452X.

40. **F. Chinesta, R. Keunings, A. Leygue.** *The Proper Generalised Decomposition for Advanced Numerical Simulations: A Primer.* s.l. : Springer, 2014.

41. **E. Hairer, G. Wanner, S. P. Nørsett.** *Solving Ordinary Differential Equations I : Nonstiff problems.* s.l. : Springer, 1993.

42. **William H. Press, Saul A.Teukolsky, William T. Vetterling, Brian P. Flannery.** *Numerical Recipis The art of Scientific Computing third edition.* s.l. : Cambridge University press, 2007.

43. **H.H. Rosenbrock.** *Some general implicit processes for the numerical solution of differential equations.* s.l. : The Computer Journal, 1963. 5(4): 329-330.

44. **E. Pruliere, F. Chinesta, A. Ammar.** *On the deterministic solution of multidimensional parametric.* s.l. : Mathematics and Computers in Simulation, 2010. 81:791-810.

45. **F. chinesta, A. Leygue, M. Beringhier, L. T. Nguyen, J. Grandidier, B. Schrefler, F. Pesavento.** *Towards a framework for non-linear thermal models in shell domains.* s.l. : International Journal of Numerical Methods for Heat & Fluid Flow, 2013. 23 (1):55-73.

46. **LAPACK.** *Documentation LAPACK.* http://www.netlib.org/lapack/.

47. **I.S. Berezin, N.P. Zhidkov.** *Computational methods volume 2.* s.l. : Fizmatgiz Moscow, Eng.transl: Pergamon Press, 1965. 464&679pp [I.1].

48. **Mathworks.** *http://fr.mathworks.com/help/matlab/?requestedDomain=www.mathworks.com.*

49. **Aiken, R.C.** *Stiff Computation.* s.l. : Oxford University Press, 1985.

50. **L.F. Shampine, M.E. Hosea.** *Analysis and implementetion of TR-BDF2.* s.l. : AppliedNumerical Mathematics, 1996. 20.

51. **M. Abramowitz, I. Stegun.** *Handbook of Mathematical Functions.* s.l. : USA National Bureau of Standards, 1964.

Résumé

Ce travail de recherche est une contribution au développement de la méthode Décomposition Propre Généralisée (PGD) à la résolution de problèmes de diffusion-réaction raides dédiés à la mécanique des matériaux. Ce type d'équations est notamment rencontré lors de l'oxydation des matériaux polymères et il est donc nécessaire de mettre en place un outil pour simuler ce phénomène afin de prédire numériquement le vieillissement de certains matériaux composites à matrice organique utilisés dans l'aéronautique. La méthode PGD a été choisie dans cette thèse car elle permet un gain en temps de calcul notable par rapport à la méthode des éléments finis. Néanmoins cette famille d'équations n'a jamais été traitée avec cette méthode. Cette dernière se résume à la recherche de solutions d'Equations aux Dérivées Partielles sous forme séparée. Dans le cas d'un problème 1D transitoire, cela revient à chercher la solution sous la forme d'une représentation séparée espace-temps. Dans le cadre de cette thèse, un outil numérique a été mis en place permettant une flexibilité telle que différents algorithmes peuvent être testés. La diffusion Fickienne 1D est tout d'abord évaluée avec en particulier une discussion sur l'utilisation d'un schéma de type Euler ou Runge-Kutta à pas adaptatif pour la détermination des fonctions temporelles. Le schéma de Runge-Kutta permet de réduire notablement le temps de calcul des simulations. Ensuite, la mise en place de l'outil pour les systèmes d'équation de type diffusion-réaction nécessite des algorithmes de résolution de systèmes non linéaires, couplés et raides. Pour cela, différents algorithmes ont été implémentés et discutés. Dans le cas d'un système non linéaire, l'utilisation de la méthode de Newton-Raphson dans les itérations pour la recherche du nouveau mode permet de réduire le temps de calcul en limitant le nombre de modes à considérer pour une erreur donnée. En ce qui concerne les couplages, deux stratégies de résolution ont été évaluées. Le couplage fort mène aux mêmes conclusions que dans le cas non linéaire. Les systèmes raides mais linéaires ont ensuite été traités en implémentant l'algorithme de Rosenbrock pour la détermination des fonctions temporelles. Cet algorithme permet contrairement à Euler et à Runge-Kutta de construire une solution avec un temps de calcul raisonnable liée à l'adaptation du maillage temporel sous-jacent à l'utilisation de cette méthode. La résolution d'un système d'équations de diffusion-réaction raides non linéaires utilisée pour la prédiction de l'oxydation d'un composite issu de la littérature a été testée en utilisant les différents algorithmes mis en place. Néanmoins, les non linéarités et la raideur du système génèrent des équations différentielles intermédiaires à coefficients variables pour lesquelles la méthode de Rosenbrock montre ses limites. Il sera donc nécessaire de tester ou développer d'autres algorithmes pour lever ce verrou.

Mots clés : Proper Generalized Decomposition (PGD), réduction de modèles, séparation de variables, mécanique des matériaux, Diffusion-réaction, systèmes raides, Nonlinéarité, Problèmes couplés.

Abstract:

This work presents the development of the Proper Generalized Decomposition (PGD) method for solving stiff reaction-diffusion equations in the framework of mechanics of materials. These equations are particularly encountered in the oxidation of polymers and it is therefore necessary to develop a tool to simulate this phenomenon for example for the ageing of organic matrix composites in aircraft application. The PGD method has been chosen in this work since it allows a large time saving compared to the finite element method. However this family of equations has never been dealt with this method. The PGD method consists in approximating a solution of a Partial Differential Equation with a separated representation. The solution is sought under a space-time separated representation for a 1D transient equation. In this work, a numerical tool has been developed allowing a flexibility to test different algorithms. The 1D Fickian diffusion is first evaluated and two numerical schemes, Euler and Runge-Kutta adaptive methods, are discussed for the determination of the time modes. The Runge-Kutta method allows a large time saving. The implementation of the numerical tool for reaction-diffusion equations requires the use of specific algorithms dedicated to nonlinearity, coupling and stiffness. For this reason, different algorithms have been implemented and discussed. For nonlinear systems, the use of the Newton-Raphson algorithm at the level of the iterations to compute the new mode allows time saving by decreasing the number of modes required for a given precision. Concerning the couplings, two strategies have been evaluated. The strong coupling leads to the same conclusions as the nonlinear case. The linear stiff systems are then studied by considering a dedicated method, the Rosenbrock method, for the determination of the time modes. This algorithm allows time saving compared to the Runge-Kutta method. The solution of a realistic nonlinear stiff reaction-diffusion system used for the prediction of the oxidation of a composite obtained from the literature has been tested by using the various implemented algorithms. However, the nonlinearities and the stiffness of the system generate differential equations with variable coefficients for which the Rosenbrock method is limited. It will be necessary to test or develop other algorithms to overcome this barrier.

Keywords: Proper Generalized Decomposition (PGD), Model reduction, Separation of variables, Mechanics of materials, Reaction-diffusion equations, Stiff system, Nonlinearity, Coupled problems.