

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

RÉSOLUTION NUMÉRIQUE
DE SYSTÈMES D'ÉQUATIONS PARABOLIQUES
PAR LES MÉTHODES DE DÉCENTRAGE (UPWIND)

JEAN DOBE OUREGA
DÉPARTEMENT DE GÉNIE CHIMIQUE
ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

MÉMOIRE PRÉSENTÉ EN VUE DE L'OBTENTION
DU DIPLÔME DE MAÎTRISE ÈS SCIENCES APPLIQUÉES
(GÉNIE CHIMIQUE)

AOÛT 2002



National Library
of Canada

Bibliothèque nationale
du Canada

Acquisitions and
Bibliographic Services

Acquisitions et
services bibliographiques

395 Wellington Street
Ottawa ON K1A 0N4
Canada

395, rue Wellington
Ottawa ON K1A 0N4
Canada

Your file Votre référence

ISBN: 0-612-90851-8

Our file Notre référence

ISBN: 0-612-90851-8

The author has granted a non-exclusive licence allowing the National Library of Canada to reproduce, loan, distribute or sell copies of this thesis in microform, paper or electronic formats.

L'auteur a accordé une licence non exclusive permettant à la Bibliothèque nationale du Canada de reproduire, prêter, distribuer ou vendre des copies de cette thèse sous la forme de microfiche/film, de reproduction sur papier ou sur format électronique.

The author retains ownership of the copyright in this thesis. Neither the thesis nor substantial extracts from it may be printed or otherwise reproduced without the author's permission.

L'auteur conserve la propriété du droit d'auteur qui protège cette thèse. Ni la thèse ni des extraits substantiels de celle-ci ne doivent être imprimés ou autrement reproduits sans son autorisation.

In compliance with the Canadian Privacy Act some supporting forms may have been removed from this dissertation.

Conformément à la loi canadienne sur la protection de la vie privée, quelques formulaires secondaires ont été enlevés de ce manuscrit.

While these forms may be included in the document page count, their removal does not represent any loss of content from the dissertation.

Bien que ces formulaires aient inclus dans la pagination, il n'y aura aucun contenu manquant.

Canada

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

Ce mémoire intitulé :

RÉSOLUTION NUMÉRIQUE
DE SYSTÈMES D'ÉQUATIONS PARABOLIQUES
PAR LES MÉTHODES DE DÉCENTRAGE (UPWIND)

présenté par: OUREGA Dobe Jean

en vue de l'obtention du diplôme de Maîtrise ès sciences appliquées

a été dûment accepté par le jury d'examen constitué de:

M. BERTRAND François, Ph.D., président

M. PERRIER Michel, Ph.D., membre et directeur de recherche

M. DOCHAIN Denis, Ph.D., membre

DÉDICACE

À ma fille Naomi-Fiona Dobey.

REMERCIEMENTS

Un grand remerciement à mon directeur de recherche, Michel Perrier, pour sa patience et sa supervision tout au long de la rédaction de ce mémoire. Grâce au Boss, j'ai apprécié fréquenter les cours à l'École Polytechnique, malgré les nuits blanches trop souvent récompensées par des mauvaises notes. Je tiens aussi à le remercier pour son aide tant à l'École Polytechnique qu'avec l'immigration canadienne.

Merci à Stéphane Renou, pour avoir accepté de me superviser dans mes recherches alors qu'il en arrachait pour sa thèse. Un grand remerciement à toute l'équipe de l'URC-PC. Particulièrement, je tiens à remercier Antoine, Jean-François, David, Nancy et Maria pour leur amitié.

Enfin, un sincère remerciement à ma 'blonde' Joséphine Pepin-Roy pour avoir enduré mes sauts d'humeurs durant ces dernières années de vie commune—sans oublier le travail remarquable et la patience dont elle a fait preuve lors de la mise en forme de ce rapport.

RÉSUMÉ

La solution numérique du problème de convection-diffusion (avec ou sans terme de réaction) peut être difficile à obtenir, dans le cas d'un écoulement dominé par la convection et dont les couches frontières en amont présentent des variations brusques. En effet, des oscillations apparaissent dans la solution numérique aux voisinages des discontinuités. Ces oscillations ne sont pas d'origine physique; elles sont introduites par la méthode numérique de résolution utilisée. Par ailleurs, certaines méthodes de résolution dégradent la caractéristique physique de la solution exacte du problème en induisant une diffusion numérique excessive dans le système. La recherche d'une alternative efficace face à cette problématique, dans le cas des équations de convection-diffusion-réaction (CDR), fait l'objet de ce mémoire. Les résultats de cette investigation montrent que les méthodes de décentrage SU « Streamline Upwind » et SUPG « Streamline Upwind Petrov/Galerkin » sont des algorithmes de résolution capables d'éliminer les oscillations numériques qui apparaissent dans la solution d'approximation des problèmes CDR dans le cas d'un écoulement dominé par la convection. Cependant, la méthode SU induit une diffusion numérique excessive dans la solution du système fortement convectif. Quant à la méthode SUPG, elle représente bien le comportement réel d'un écoulement piston (système convectif). Malheureusement, comme d'autres méthodes variationnelles, la méthode SUPG est très lente à simuler lorsque le problème CDR présente un terme de réaction fortement non-linéaire. En effet, plus la cinétique de

la réaction devient non-linéaire, plus les temps de simulation du problème deviennent importants. Une alternative efficace consiste alors à utiliser la méthode par alternance (Renou et al., 1999) qui est un algorithme rapide. Malheureusement, la méthode par alternance (MA) ne peut pas être appliquée dans tous les cas des problèmes CDR. En effet, MA conduit à une solution erronée à l'entrée du réacteur lorsqu'elle est utilisée dans l'analyse des systèmes faiblement dispersifs. Par conséquent, un nouvel algorithme de résolution est proposé: la "Méthode de Découplage de Phénomènes" (MDP)—ou encore la "Méthode Mixte" (MX). La méthode mixte est une variante des méthodes de résolution variationnelles utilisées dans l'analyse du problème de convection-diffusion. Elle est un algorithme de résolution rapide et permet une formulation découplée du problème CDR en sous-problèmes « hydrodynamique + chimique ». En effet, à l'inverse des méthodes variationnelles, la méthode mixte est très rapide quant à la simulation du problème CDR dont le terme de réaction est fortement non-linéaire. Dans ce travail, cette méthode est utilisée dans l'analyse du problème CDR avec des termes cinétiques chimiques linéaires, ou non-linéaire—tel que le réacteur de blanchiment Lignine-Chlore.

ABSTRACT

Accurate numerical solution of the convection-diffusion equations (with or without a reaction term) can be very difficult to obtain in the case of convection-dominated problem with downstream sharp boundary layers. Indeed, the numerical solution of the problem is often corrupted by spurious oscillations, especially, in the vicinity of discontinuities. These oscillations have no physical explanation; they are introduced by the numerical method used to solve the problem. Furthermore, some numerical methods spoil the physical characteristic of the exact solution of convection-dominated problems by inducing an excessive amount of numerical diffusion in the solution of the system. Research for new alternatives to improve the accuracy of the numerical solution of convection-diffusion-reaction (CDR) problems is the goal of this work. The results of this investigation show that upwind methods—such as SU (Streamline Upwind) and SUPG (Streamline Upwind Petrov/Galerkin)—yield an oscillations-free numerical solution. However, SU method induces an excessive numerical diffusion in the solution of convection-dominated problems. In the other hand, SUPG method represents the exact behavior of convection-dominated flow phenomenon by inducing an insignificant amount of numerical diffusion. Unfortunately, like other variational methods, SUPG method is very time-consuming when it is used to simulate CDR problems with a stiff nonlinear reaction term. Indeed, the simulation time increase with the stiffness of the reaction term. An alternative to this shortcoming of the SUPG method is to use a

Sequencing Method (Renou et al., 1999)—since it is a fast algorithm that also yields an oscillations-free solution (without numerical diffusion) of the convection-dominated problems. Unfortunately, the Sequencing Method (MA) cannot be applied to all type of CDR equations. Indeed, MA produces an erroneous inlet-boundary solution of CDR problems when the effects of convection and diffusion are nearly equivalents. These shortcomings of SUPG and MA methods have provided motivation for development of a new finite element formulation for CDR problems called “Phenomenon Decoupling Method” (PDM)—also known as “Mixed Method” (MX). This new algorithm—presented herein, splits the formulation of the CDR problem into two sub-problems (hydrodynamic + chemical), followed by a solution of each sub-problem for each time step. The mixed method represents a significant improvement over the standard variational methods. Indeed, MX method is a fast algorithm and allows a simple formulation of CDR problems. In this work, the effectiveness of DPM method is demonstrated for various Péclet Number, on CDR problems with linear chemical kinetics, as well as stiff nonlinear kinetics—such as a chlorine dioxide bleaching reactor.

TABLE DES MATIÈRES

DÉDICACE	iv
REMERCIEMENTS	v
RÉSUMÉ	vi
ABSTRACT	viii
TABLE DES MATIÈRES	viii
LISTE DES TABLEAUX.....	xiii
LISTE DES FIGURES.....	xiv
LISTE DES SIGLES ET ABRÉVIATIONS	xvi
LISTE DES ANNEXES.....	xviii
INTRODUCTION	1
CHAPITRE 1 LES OSCILLATIONS NUMÉRIQUES	6
1.1 Rappel sur les équations différentielles.....	6
1.1.1 Équations différentielles paraboliques	8
1.1.2 Équations d'écoulement (convection-diffusion)	9
1.1.3 Équations de convection-diffusion-réaction (CDR).....	11
1.2 Les oscillations numériques	14
1.3 Procédures et méthodes alternatives	16
1.3.1 Raffinement du maillage	16
1.3.2 Les méthodes de stabilisation.....	18
1.3.3 La méthode par alternance	19
CHAPITRE 2 ÉLÉMENTS FINIS: CAS D'UN RÉACTEUR ISOTHERME	20
2.1 Discrétisation du domaine	21
2.2 Formulation variationnelle	23
2.2.1 Cas d'une cinétique de réaction linéaire	29
2.2.2 Cas d'une cinétique de réaction non-linéaire	31

2.3	Assemblage des éléments.....	32
2.4	Imposition des conditions frontières	34
2.5	Résolution du modèle global.....	35
2.6	Analyse par la méthode des éléments finis	35
2.6.1	Modèle mathématique linéaire.....	35
2.6.2	Résultats de simulation	37
CHAPITRE 3 LES MÉTHODES DE DÉCENTRAGE		43
3.1	Classification.....	44
3.2	La différence finie par décentrage arrière	48
3.3	La diffusion artificielle.....	51
3.4	La méthode SU—Streamline Upwind.....	53
3.5	La méthode SUPG—Streamline Upwind / Petrov-Galerkin	55
3.6	La méthode (SU+C)/PG	60
3.7	Application des méthodes de décentrage	63
3.7.1	La méthode SU.....	64
3.7.2	La méthode SUPG	66
3.7.3	Temps de simulation et cinétique de réaction	74
CHAPITRE 4 LA MÉTHODE DE RÉOLUTION MIXTE		81
4.1	Motivations.....	81
4.1.1	Nécessité d'un algorithme rapide et précis	81
4.1.2	Formulation adéquate du problème CDR	82
4.2	Faisabilité	84
4.3	Description et mise en œuvre	87
4.3.1	Schéma de résolution	87
4.3.2	Mise en oeuvre	91
4.3.3	Autres cas d'applications	93
4.3.4	Cas de la méthode par alternance.....	95
4.4	Application.....	98

4.4.1	Méthode mixte MEF-MX	98
4.4.2	Méthode mixte SU-MX.....	99
4.4.3	Méthode mixte SUPG-MX	100
4.4.4	Sensibilité des méthodes mixte	101
4.4.5	Temps de simulation des méthodes mixtes.....	113
4.4.6	Séquence de résolution par la méthode mixte.....	114
CHAPITRE 5 APPLICATION À UN RÉACTEUR DE BLANCHIMENT.....		125
5.1	Modèles mathématiques.....	125
5.1.1	Description	125
5.1.2	Temps de simulation	127
5.1.3	Approximation du terme de réaction.....	129
5.2	Résolution du système Lignine-Chlore	129
5.2.1	Les méthodes mixtes	131
5.2.2	Cas des méthodes variationnelles.....	132
CONCLUSION		151
RÉFÉRENCES.....		154
ANNEXES		1549

LISTE DES TABLEAUX

Tableau 2.1	Systèmes analysés dans le cas du modèle linéaire.	37
Tableau 5.1	Paramètres et modèles du système Lignine-Chlore	127
Tableau 6	Critères de comparaison des méthodes.	152

LISTE DES FIGURES

Figure 2.1	Discrétisation de domaine : cas du réacteur tubulaire	22
Figure 2.2	Analyse par MEF de l'équation CDR avec $ND = 2 \cdot 10^{-7}$	38
Figure 2.3	Analyse par MEF de l'équation CDR avec $ND = 1$	39
Figure 2.4	Analyse par MEF de l'équation CDR avec $ND = 2 \cdot 10^{+5}$	40
Figure 2.5	Méthode MEF : Influence du maillage réaction	42
Figure 3.1	Validation de la méthode SU	69
Figure 3.2	Méthode SU : Influence du maillage	70
Figure 3.3	Validation de la méthode SUPG	72
Figure 3.4	Méthode SUPG : Influence du maillage	73
Figure 3.5	Influence de l'ordre de la réaction sur le temps de résolution	79
Figure 3.6	Temps de simulation : agrandissement de la zone de cinétique linéaire	80
Figure 4.1	Temps de simulation : cas de l'équation convection-diffusion	86
Figure 4.2	Schéma de résolution de la méthode mixte	88
Figure 4.3	Schéma de résolution de la méthode par alternance	95
Figure 4.4	Méthode mixte MEF-MX: Influence du maillage	105
Figure 4.5	Validation de la méthode mixte MEF-MX	106
Figure 4.6	Méthode mixte SU-MX: Influence du maillage	108
Figure 4.7	Validation de la méthode mixte SU-MX	109
Figure 4.8	Méthode mixte SUPG-MX: Influence du maillage	111
Figure 4.9	Validation de la méthode mixte SUPG-MX	112
Figure 4.10	Temps de simulation de la méthode mixte FEM-MX	117
Figure 4.11	Temps de simulation de la méthode mixte SU-MX	118
Figure 4.12	Temps de simulation de la méthode mixte SUPG-MX	119
Figure 4.13	Comparaison des temps de simulation des méthodes mixtes	120
Figure 4.14	Méthode FEM-MX : Influence de la séquence de résolution	122
Figure 4.15	Méthode SU-MX : Influence de la séquence de résolution	123

Figure 4.16 Méthode SUPG-MX : Influence de la séquence de résolution.....	124
Figure 5.1 Méthode FEM-MX : Analyse du modèle M3, $ND = 10^{-8}$	136
Figure 5.2 Méthode SU-MX : Analyse du modèle M3, $ND = 10^{-8}$	137
Figure 5.3 Méthode SUPG-MX : Analyse du modèle M3, $ND = 10^{-8}$	138
Figure 5.4 Méthode FEM-MX : Analyse du modèle M3, $ND = 1$	140
Figure 5.5 Méthode SU-MX : Analyse du modèle M3, $ND = 1$	141
Figure 5.6 Méthode SUPG-MX : Analyse du modèle M3, $ND = 1$	142
Figure 5.7 Méthode FEM-MX : Analyse du modèle M3, $ND = 10^{+4}$	144
Figure 5.8 Méthode SU-MX : Analyse du modèle M3, $ND = 10^{+4}$	145
Figure 5.9 Méthode SUPG-MX : Analyse du modèle M3, $ND = 10^{+4}$	146
Figure 5.10 Comparaison des méthode mixtes : cas du modèle M3, $ND = 10^{-8}$	148
Figure 5.11 Comparaison des méthode mixtes : cas du modèle M3, $ND = 1$	149
Figure 5.12 Comparaison des méthode mixtes : cas du modèle M3, $ND = 10^{+4}$	150
Figure I.1 Structure du logiciel de simulation.....	159
Figure IV.1 Analyse FEM et FEM-MX du modèle M3, $ND = 10^{-8}$	177
Figure IV.2 Analyse SU et SU-MX du modèle M3, $ND = 10^{-8}$	178
Figure IV.3 Analyse SUPG et SUPG-MX du modèle M3, $ND = 10^{-8}$	179
Figure IV.4 Analyse FEM et FEM-MX du modèle M3, $ND = 1$	181
Figure IV.5 Analyse SU et SU-MX du modèle M3, $ND = 1$	182
Figure IV.6 Analyse SU et SUPG-MX du modèle M3, $ND = 1$	183
Figure IV.7 Analyse FEM et FEM-MX du modèle M3, $ND = 10^{+4}$	185
Figure IV.8 Analyse SU et SU-MX du modèle M3, $ND = 10^{+4}$	186
Figure IV.9 Analyse SUPG et SUPG-MX du modèle M3, $ND = 10^{+4}$	187

LISTE DES SIGLES ET ABRÉVIATIONS

Sigles

SUPG	Streamline Upwind Petrov-Galerkin
SU	Streamline Upwind
SU+C/PG	Streamline Upwind + Centered/Petrov-Galerkin
GLS	Galerkin Least Squares
DWFF	Douglas-Wang-Franca-Frey
UD	Upwind Difference
MX	Méthode Mixte « Phenomenon Decoupling Method »
MDF	Méthode des Différences Finies
MEF	Méthode des Éléments Finis (ou Méthode de Galerkin)
MA	Méthode par Alternance
MCO	Méthode de Collocation Orthogonale
DFD	Différence Finie Décentrée
DFC	Différence Finie Centrée
EDP	Équation(s) aux Dérivés Partielles
EDPP	Équation(s) aux Dérivés Partielles Paraboliques
CDR	Convection-Diffusion-Réaction
1-D	Espace de dimension 1

Symboles

D	[m ² /s]	Coefficient de diffusion
A	[m/s]	Coefficient de convection
k	[1/s ⁿ]	Constante cinétique de réaction (n étant l'ordre de la réaction)
Pe		Nombre de Péclet du maillage
ND		Nombre de diffusion
NR		Nombre de réaction
E		Nombre d'éléments du maillage
N_G		Nombre de nœuds globaux du maillage
N_C		Nombre de nœuds d'interpolation
N_L		Nombre de nœuds locaux dans un maillage
h_e	[m]	Taille d'un élément du maillage
α, β		Ordre cinétique de la réaction
ψ_n, ϕ_n		Fonction d'interpolation
Wn		Fonction test
U		Variable dépendante
∇		Gradient
L_2		Espace des fonctions réelles de carrés sommables
$\ \cdot \ $		Norme dans l'espace L_2
z	[m]	Position
t	[min]	Temps

LISTE DES ANNEXES

ANNEXE I	LOGICIEL DE SIMULATION	159
I.1	Structure et fonctionnement	159
I.2	Utilisation et limites	160
I.3	Description des routines	161
I.4	La fonction ODE15S de Matlab.....	163
I.5	CD-ROM du logiciel	164
ANNEXE II	LA FORMULATION VARIATIONNELLE DE GALERKIN.....	165
II.1	Les méthodes de résidus pondérés	165
II.2	Formulation variationnelle de Galerkin	166
II.3	Analyse d'erreur.....	167
ANNEXE III	IMPOSITION DES CONDITIONS FRONTIÈRES	170
III.1	Règles d'imposition des conditions frontières	170
III.2	Conditions de Danckwerts	171
ANNEXE IV	SIMULATION DU MODÈLE LIGNINE-CHLORE	175
ANNEXE V	UNITÉS DE MÉSURE SI.....	188

INTRODUCTION

L'objectif en contrôle de procédés est le design d'un système de contrôleurs performants capable de maintenir les valeurs des variables contrôlées d'un procédé physique dans des intervalles prédéfinis appelés conditions d'opération. Le design de la stratégie de contrôle est facilité par la compréhension de la dynamique du procédé. Cette dynamique apparaît, pour la plupart des procédés chimiques, sous forme d'équations différentielles appelées modèle mathématique. Ce modèle mathématique est une collection de relations mathématiques entre les grandeurs physiques qui décrivent le procédé. Lorsque les variables du procédé varient dans le temps et dans l'espace, le modèle mathématique porte le nom d'équations différentielles partielles (EDP) et les procédés sont appelés systèmes à paramètres répartis.

La plupart des procédés chimiques sont décrits par des équations différentielles non-linéaires. Même si la formulation des lois physiques de ces phénomènes est chose aisée, la solution exacte à ces équations demeure une tâche parfois ardue. Alors qu'il existe une solution analytique pour les modèles linéaires, il est souvent impossible d'obtenir une solution analytique dans le cas des modèles mathématiques des procédés non-linéaires. Cependant, plusieurs approches permettent de faire l'approximation des solutions de ces modèles non-linéaires. Les approches les plus utilisées sont la linéarisation de modèle et la résolution numérique. Le choix de l'approche utilisée dépend de la précision de la solution recherchée. Dans le cas où la simplicité de la

solution est recherchée, comme en analyse de comportement de procédés, la linéarisation de modèle est un bon choix. Cette alternative consiste à rendre linéaire les termes non-linéaires du modèle afin d'obtenir un modèle linéaire équivalent. Dans le cas où la précision de la solution est cruciale, comme en contrôle de procédés, l'approche numérique est le choix le plus approprié. Dans la plupart des cas, les méthodes de résolution numériques donnent une bonne approximation de la solution exacte du modèle mathématique—mais la précision de la solution numérique dépend de la méthode de résolution utilisée.

La résolution des EDP fait appel à plusieurs méthodes numériques, à savoir la méthode des différences finies (MDF), la méthode des volumes finis (MVF), la méthode de collocation orthogonale (MCO) et la méthode des éléments finis (MEF). Dans le cas de la résolution basée sur la formulation variationnelle, on aboutit à des systèmes d'équations matricielles différentielles ordinaires (ODE) sous forme matricielle. Les systèmes d'équations ainsi obtenus sont programmés puis résolus à l'aide d'un ordinateur. Cette démarche de résolution du modèle mathématique est appelée simulation numérique du comportement du procédé. Parmi les méthodes variationnelles, la méthode de Galerkin (MEF) est la plus utilisée car elle est mieux adaptée à la résolution des problèmes de géométrie complexe. Dans le cas des problèmes de structures, la méthode de Galerkin (MEF) donne une très bonne approximation de la solution exacte. Mais contrairement aux problèmes de structure, la

méthode MEF ne donne pas toujours de bons résultats dans la résolution des problèmes d'écoulement et de transfert de chaleur.

En effet, il existe plusieurs problèmes reliés à l'utilisation de certaines méthodes numériques (MDF, MCO, MEF) dans la résolution des EDP. Ces cas problématiques sont surtout rencontrés lors de l'analyse des écoulements dominés par les effets de convection (nombre de Péclet ou de Reynolds élevé) et dont la solution présente des variations brusques sur les couches frontières (Brooks et Hughes, 1982; Hughes, Mallet et Mizukami, 1996). Dans ces conditions, la solution numérique obtenue par les méthodes conventionnelles (MEF, MDF, MCO) présente des oscillations qui se manifestent plus précisément dans les voisinages où la solution présente des discontinuités. Ces oscillations n'ont aucune signification physique car elles ne sont pas observées dans la solution exacte du problème. Elles sont introduites par la méthode numérique utilisée; donc d'origine purement numériques. Cependant, d'autres chercheurs (Idelsohn et al., 1996; Tezduyar et Park, 1986) ont aussi montré que, dans le cas de l'analyse du problème de convection-diffusion-réaction (CDR), l'importance de l'effet du terme de réaction peut être une autre cause des oscillations numériques dans la solution d'approximation du problème. Tout comme dans le cas des problèmes d'écoulements dominés par les effets de convection (système fortement convectifs), ces oscillations apparaissent dans la solution numérique aux voisinages des discontinuités, même si le terme de convection est nul. Par ailleurs, certaines méthodes dégradent la caractéristique physique de la solution exacte du problème. Ainsi, dans le cas d'un phénomène d'écoulement piston (fortement convectif), les méthodes numériques basées

sur une approximation par différences finies centrées (DFC) se comportent comme des filtres passe-bas : elles atténuent tous les bruits de haute fréquence dans la solution numérique. Cet effet d'atténuation numérique se traduit par une diffusion numérique excessive dans la solution d'approximation du problème. Ainsi, le comportement de l'écoulement piston apparaît alors avec une diffusion numérique (non réelle); ce qui n'est évidemment pas désirable. Tous ces problèmes, reliés à l'utilisation des méthodes numériques, ont fait l'objet de plusieurs publications. En effet, Brooks et Hughes (1982) expliquent ces déviations dans la solution d'approximation et proposent des nouvelles méthodes de résolution dans le but d'améliorer la solution d'approximations: ces méthodes sont dénommées *les méthodes de décentrage*.

Ce mémoire a pour objectif d'introduire les méthodes de décentrage comme une alternative possible aux désavantages des méthodes conventionnelles afin d'améliorer la précision de la solution d'approximation des EDP. Dans cette perspective, on s'intéresse principalement à l'analyse des équations de type convection-diffusion-réaction (CDR) et les cas élaborés se limitent aux problèmes en 1-D. Par ailleurs, les méthodes de décentrage discutées dans le cadre de cette étude sont la méthode SU « Streamline Upwind » ainsi que la méthode SUPG « Streamline Upwind Petrov-Galerkin ». Par ailleurs, une nouvelle méthode de résolution adaptée à l'analyse du problème CDR est présentée; à savoir : *la méthode de découplage de phénomènes mixtes*—ou *méthode mixte*. La méthode de Galerkin (MEF) est utilisée dans le but de montrer les oscillations dans les solutions d'approximation. Toutefois, la méthode par

alternance (Renou, 2000) est aussi considérée dans ces analyses afin de la confronter aux autres méthodes numériques.

Ce travail est divisé en cinq chapitres. Le premier chapitre présente les différentes formes d'équations différentielles partielles (EDP). Par ailleurs, une investigation des cas problématiques liés à la résolution des EDP est élaborée. Pour ce faire, l'origine des oscillations numériques et les alternatives existantes sont présentées. Le deuxième chapitre se consacre à la formulation variationnelle du problème de type convection-diffusion-réaction (CDR), par la méthode des éléments finis (MEF). Le troisième chapitre introduit les méthodes de décentrage. À cet effet, la formulation variationnelle détaillée de certaines méthodes de décentrage est élaborée. Le quatrième chapitre présente les étapes de développement de la méthode mixte (MX). Enfin, le cinquième chapitre est consacré à l'application des méthodes de décentrage et de la méthode mixte dans l'analyse du modèle mathématique du réacteur de blanchiment Lignine-Chlore.

CHAPITRE 1

LES OSCILLATIONS NUMÉRIQUES

Ce chapitre se divise en trois sections. La première section fait un rappel sur les formes des équations différentielles partielles (EDP) et quelques grandeurs caractéristiques de ces systèmes. La section subséquente présente les cas problématiques reliés à la résolution numérique des EDP par les méthodes traditionnelles. De plus, une explication des oscillations numériques est donnée à partir d'une analyse de l'erreur d'approximation par la formulation variationnelle de Galerkin. Enfin, la troisième section traite des différentes alternatives proposées pour palier aux oscillations numériques.

1.1 Rappel sur les équations différentielles

La plupart des phénomènes naturels sont régis par des lois physiques. Ces lois permettent de relier les grandeurs physiques qui décrivent ces phénomènes. Les chercheurs doivent alors résoudre ces équations différentielles, afin de comprendre et expliquer ces phénomènes physiques. Les modèles mathématiques de systèmes physiques sont très avantageux car ils permettent de faire l'analyse du comportement des procédés sans avoir à manipuler les grandeurs physiques qui les décrivent. Parmi les

modèles mathématiques, on distingue les modèles des procédés dits linéaires et ceux des procédés dits non-linéaires. Les équations des modèles linéaires ne contiennent que des termes linéaires. Quant aux équations des modèles non-linéaires, elles font intervenir des termes linéaires et/ou des termes non-linéaires. Ces modèles sont des lois de conservations de matière et parfois d'énergie. Ces lois sont obtenues à partir de bilans sur les flux des grandeurs physiques (appelées variables dépendantes) entrant dans un volume de contrôle choisi sur le domaine dans lequel a lieu le phénomène. Il faut toutefois mentionner que l'établissement de tels modèles mathématiques ne fait pas l'objet de ce mémoire. Néanmoins, une analyse détaillée par des méthodes de résolution numériques de ces modèles est élaborée. La forme générale de ces modèles mathématiques est donnée par l'équation (1.1).

$$\mathbf{M}_1 \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \mathbf{M}_2 \frac{\partial^2 \mathbf{U}}{\partial t^2} + \mathbf{A} \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial z} - \mathbf{D} \frac{\partial^2 \mathbf{U}}{\partial z^2} + \mathbf{G}(\mathbf{U}) = \mathbf{F} \quad (1.1)$$

Dans ces équations, $\mathbf{U}$ est le vecteur de variables, $\mathbf{G}$ une fonction vectorielle de $\mathbf{U}$, et $\mathbf{F}$ le terme source. Par ailleurs, les grandeurs $\mathbf{M}_1$ et $\mathbf{M}_2$ sont des matrices; alors que $\mathbf{A}$ et $\mathbf{D}$ représentent des grandeurs vectorielles dont les significations dépendent du phénomène physique étudié. Lorsque la matrice $\mathbf{M}_1$ est nulle, on dit que la forme de l'équation (1.1) est hyperbolique. Dans le cas où $\mathbf{M}_1$ est non nulle mais que $\mathbf{M}_2$ est nulle, la forme de l'équation (1.1) est dit de type parabolique (Reddy, 1993, p. 227). La forme la plus simple de l'équation (1.1) est le cas où $\mathbf{U}$ est un scalaire. Dans ce cas, les grandeurs $\mathbf{A}$ et $\mathbf{D}$ sont des coefficients scalaires, $\mathbf{F}$ et $\mathbf{G}$ représentent alors des fonctions

scalaires de $\mathbf{U}$. Dans le cadre de cette étude, on s'intéresse aux phénomènes d'écoulement en 1-D de type convection-diffusion-réaction (CDR). Dans ce cas, $\mathbf{A}$ et $\mathbf{D}$ représentent respectivement les vecteurs de coefficients de convection et de diffusion du système. Quant à la fonction vectorielle $\mathbf{G}$, elle identifie le terme de réaction. Enfin, le symbole z représente la coordonnée cartésienne selon la direction de l'écoulement $(0, z)$.

Remarque : Les formes scalaires et vectorielles de l'équation générale donnée par (1.1) sont identiques. Ainsi, dans le cadre de ce mémoire, tous les symboles en gras identifient des grandeurs vectorielles ou matricielles. Ceux en écriture normale représentent des grandeurs scalaires. Toutefois, ces règles de notation des grandeurs seront rappelées au besoin pour éviter toute confusion.

1.1.1 *Équations différentielles paraboliques*

Les équations aux dérivées partielles paraboliques (EDPP) se présentent souvent sous la forme générale donnée par l'équation (1.2).

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{A}u - \mathbf{D}\nabla u) + G(u) = f \quad (1.2)$$

Dans cette équation, u représente la variable dépendante, f est le terme source et t désigne le temps. Par ailleurs, la signification des coefficients $\mathbf{A}$ et $\mathbf{D}$ ainsi que la fonction G dépendent du problème à résoudre. Le symbole ∇ est l'opérateur

différentiel—aussi appelé *gradient*. Dans le cas des coordonnées cartésiennes, ∇ est donné par l'équation (1.3).

$$\nabla = \frac{\partial}{\partial x} \vec{i} + \frac{\partial}{\partial y} \vec{j} + \frac{\partial}{\partial z} \vec{k} \quad (1.3)$$

Dans le cas d'un problème 1-D selon la direction z , ∇ est donné par (1.4).

$$\nabla = \frac{\partial}{\partial z} \vec{k} \quad (1.4)$$

Il existe plusieurs formes de l'équation (1.2). Cette forme dépend du phénomène physique étudié: soit un écoulement (avec ou sans réaction chimique), un problème de structure ou encore, un phénomène de transfert de chaleur. Les équations aux dérivées partielles se rapportant aux phénomènes d'écoulement (avec ou sans réaction chimique) sont discutées dans les sections suivantes.

1.1.2 Équations d'écoulement (convection-diffusion)

Dans le cas d'un écoulement simple (i.e. sans réaction chimique), l'équation aux dérivées partielles est donnée par (1.5).

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \nabla \cdot (Au - D\nabla u) = f \quad (1.5)$$

où A et D représentent respectivement le coefficient de convection et de diffusion.

Dans le cas des phénomènes d'écoulement, on définit des grandeurs physiques qui permettent de mesurer les différents effets hydrodynamiques au sein de l'écoulement. Ainsi, le nombre de Péclet P_e^G —défini par l'équation (1.6a), mesure l'importance de l'effet de convection par rapport à celui de la diffusion.

$$P_e^G = \frac{A L}{2 D} \quad (1.6a)$$

Dans cette expression, la grandeur L représente la longueur du domaine dans lequel a lieu l'écoulement. Dans le cas des méthodes des éléments finis—discutées au chapitre 2, on définit un nombre de Péclet local—ou du maillage, Pe donné par l'équation (1.6b) :

$$P_e = \frac{A h_e}{2 D} \quad (1.6b)$$

Dans cette expression, h_e représente la taille d'un élément du maillage. Une autre grandeur utilisée pour mesurer l'effet de la diffusion dans un phénomène d'écoulement est le nombre de dispersion— ND par (1.7).

$$N_D = \frac{D}{A} \quad (1.7)$$

Contrairement au nombre de Péclet Pe du maillage, le nombre de dispersion mesure l'importance de l'effet de diffusion par rapport à celui de la convection. Ainsi, un nombre de Péclet élevé correspond à un nombre de dispersion faible, d'où un phénomène d'écoulement dominé par la convection. Par contre un nombre de Péclet faible correspond à un écoulement dominé par un effet de diffusion.

Remarque : La plupart des problèmes de structure ou de transfert de chaleur se retrouvent aussi sous la forme donnée par (1.5). Toutefois, les grandeurs A et D qui apparaissent dans les équations de ce type de problèmes n'ont pas la même signification physique que dans le cas des problèmes d'écoulement—où ils représentent respectivement les coefficients de convection et de diffusion.

1.1.3 Équations de convection-diffusion-réaction (CDR)

La forme générale d'un phénomène d'écoulement accompagnée d'une réaction chimique est donnée par (1.8).

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \nabla \cdot (Au - D\nabla u) + R(u) = f \quad (1.8)$$

Dans cette expression, A représente le coefficient de convection, D est le coefficient de diffusion et f désigne les forces volumétriques. De plus, l'équation (1.8) fait intervenir un autre terme $R(u)$ appelé terme de réaction. Ce terme $R(u)$ —qui décrit le phénomène chimique qui accompagne l'écoulement—dépend des conditions d'opération du réacteur où a lieu la réaction chimique. Le problème décrit par l'équation (1.8) est aussi connu comme une “*convection (ou transport) de matière chimique en réaction*”. Dans le cas où le terme de réaction $R(u)$ est nul, on retrouve l'équation (1.5) qui est celle d'un écoulement simple (i.e. sans réaction chimique).

Dans le cas d'un écoulement avec réaction chimique, Valentin et Franca (1997) ont défini une autre grandeur appelée nombre de réaction— NR donnée par (1.9). Le

nombre de réaction permet d'estimer l'effet de la réaction par rapport à celui de la diffusion.

$$N_R = \frac{k h_e^2}{D} \quad (1.9)$$

Dans cette équation, k représente la constante cinétique de la réaction chimique, D est le coefficient de diffusion et h_e désigne la taille d'un élément du maillage (voir chapitre 2 de ce rapport). Ainsi, un nombre de réaction N_R élevé correspond à un phénomène dont l'effet de diffusion est faible par rapport à l'effet de réaction. Cependant, cet effet de réaction peut aussi être couplé avec un effet de convection lorsque le nombre de Péclet est élevé ($Pe \gg 1$). Dans ce cas le phénomène est simultanément dominé par les effets couplés de la convection et de la réaction.

Il existe plusieurs formes du terme de réaction $R(u)$. Ces formes dépendent du nombre de réactifs impliqués dans la réaction et des conditions d'opération du réacteur. Pour une réaction faisant intervenir un seul réactif, le terme de réaction est donné par l'équation (1.10).

$$R(u) = ku^\alpha \quad (1.10)$$

Dans le cas où la réaction fait intervenir un nombre M de réactifs, le terme de réaction s'exprime selon l'équation (1.11).

$$R(u) = k \prod_{m=1}^M u_m^{\alpha_m} \quad (1.11)$$

Dans les équations, k est la constante cinétique de la réaction; α et α_m désignent respectivement les ordres de réaction par rapport aux réactifs de concentration u et u_m . On notera toutefois que, si la concentration d'un des réactifs est en très faible par rapport aux autres, l'équation (1.11) peut se mettre sous la forme donnée par (1.10). Dans un tel cas, k représente alors une pseudo-constante cinétique de la réaction—et non pas la constante cinétique réelle de la réaction. Par ailleurs, le terme de la réaction peut prendre des formes très différentes de celles données par les équations (1.10) et (1.11). C'est souvent le cas des réactions catalytiques ou des réactions élémentaires. Dans ces cas, il peut être difficile de définir la constante de vitesse de la réaction et les ordres de réaction par rapport aux différents réactifs sans passer par un processus de simplification du terme de réaction.

L'approche adoptée dans la résolution des équations de convection-diffusion-réaction, dépend de la linéarité du terme de réaction. En effet, lorsque le terme de réaction est linéaire, on doit faire appel à une stratégie de résolution linéaire du problème. Par contre, si le terme de la réaction est non-linéaire, l'approche linéaire n'est plus possible. Très souvent, il faut procéder à la linéarisation du terme de la réaction afin d'obtenir une solution analytique de l'équation. Cette deuxième approche ne présente pas de

difficultés apparentes. Cependant, elle conduit à la perte de précision dans la solution exacte du problème.

Remarque : Dans les sections suivantes, on dira que le terme de la réaction est *linéaire* s'il s'écrit sous la forme de l'équation (1.10) et que l'ordre global de la réaction α est égal à 0 ou 1.

1.2 Les oscillations numériques

La formulation variationnelle par la méthode de Galerkin (MEF), du problème de l'écoulement dominé par les effets convection, aboutit à un système matriciel mal conditionné. Cette situation entraîne une perte de la précision de la méthode de résolution, qui se traduit par l'apparition d'oscillations dans la solution d'approximation du problème. Les oscillations qui apparaissent dans l'approximation des solutions numériques par les méthodes traditionnelles peuvent aussi s'expliquer par une analyse d'erreur de la méthode utilisée. Dans le cas des méthodes de résolution basées sur la formulation variationnelle de Galerkin, Hughes (1987) a montré (voir annexe II) que la norme dans l'espace L^2 de l'erreur d'approximation est donnée par (1.12).

$$\|\nabla e\| = o((1 + Pe)h_e^n) \quad (1.12)$$

où Pe est le nombre de Péclet du maillage, h_e représente la taille de l'élément du maillage et n identifie le degré des fonctions tests. Cette expression fournit de très bons

indices sur l'explication de l'apparition des oscillations dans la solution numérique de ces méthodes. Dans le cas des phénomènes d'écoulement dominés par la diffusion, le nombre de Péclet Pe est très faible ($Pe \ll 1$). L'équation (1.12) peut alors s'écrire sous la forme de l'équation (1.13) qui représente l'estimation optimale de l'erreur.

$$\|\nabla e_{optimal}\| = o(h_e^n) \quad (1.13)$$

Dans le cas d'un phénomène d'écoulement dominé par la convection ($Pe \gg 1$), l'apparition du nombre de Péclet Pe dans l'expression de l'erreur d'approximation donnée par (1.12), a des conséquences néfastes sur la précision de la solution numérique. Autrement dit, plus le nombre de Péclet Pe est élevé, plus l'erreur d'estimation de la solution exacte est significative. Dans la pratique, cela peut expliquer les oscillations numériques dans la solution d'approximation. De plus, il est bien connu dans la littérature (Brooks et Hughes, 1982) que la formulation variationnelle de Galerkin conduit à l'approximation par différences finies centrée des termes de dérivées qui apparaissent dans les EDP. Ce constat confirme les travaux de Roache (1976) qui montrent l'apparition d'oscillations numériques dans les solutions d'approximation par différences finies centrées (DFC). De ce fait, la mauvaise performance dont souffrent les méthodes basées sur la variationnelle de Galerkin peut aussi être justifiée par l'approximation des termes de dérivées avec une différence finie centrée.

1.3 Procédures et méthodes alternatives

Il existe plusieurs alternatives pour atténuer les oscillations numériques. Ces différentes approches dépendent des caractéristiques du problème à résoudre; à savoir un problème d'écoulement ou de structure, la dimension spatiale de résolution, etc. À cause de la diversité des EDP à résoudre, les alternatives considérées dans le cadre de ce rapport se limitent au cas des problèmes d'écoulement en 1-D avec ou sans réactions chimiques. Ainsi, les problèmes multidimensionnels ne sont pas abordés. Toutefois, l'utilisation de certaines de ces techniques et méthodes, peut aussi améliorer la précision des solutions numériques des problèmes multidimensionnels. Ces alternatives—qui font l'objet des sections suivantes—éliminent les oscillations dans les cas problématiques. Par contre, certaines d'entre elles y arrivent au détriment de la caractéristique physique et/ou de la précision de la solution réelle ou de la rapidité de simulation du problème.

1.3.1 *Raffinement du maillage*

Dans le cas des méthodes variationnelles, la solution numérique peut être améliorée avec un raffinement du maillage. En effet, d'après l'expression (1.12), on constate que l'erreur d'approximation dépend de la taille h_e de l'élément du maillage. De plus, d'après la définition du nombre de Péclet Pe du maillage donnée par (1.6), on constate que plus h_e diminue, plus Pe est faible—d'où une réduction de l'erreur d'approximation donnée par (1.12). En raffinant le maillage dans les régions où se manifestent les

oscillations, on capture les fortes variations présentes dans la solution numérique. Une solution de rechange pour réduire l'erreur d'approximation consiste donc à raffiner le maillage afin de diminuer la taille h_e des mailles. Plusieurs chercheurs favorisent cette approche car pour eux, la seule façon d'obtenir une solution d'approximation précise et sans oscillations réside dans l'utilisation de la formulation de Galerkin couplée avec un raffinement du maillage. Ce raffinement du maillage doit être fait de telle sorte que l'effet de convection ne domine plus sur l'effet de diffusion au niveau de l'élément situé dans les zones où se manifestent les oscillations. Cette approche peut conduire à un maillage uniforme ou hétérogène selon qu'on choisit de raffiner tout le domaine, ou que le raffinement est fait uniquement dans les régions où ces oscillations se manifestent. La stratégie à adopter a une conséquence sur la résolution du problème. Dans la première approche qui consiste à faire un raffinement de tout le domaine, la formulation du problème est simple mais le nombre d'équations matricielles qui en résultent est très grand. Ceci a pour effet d'augmenter le temps de résolution du problème et requiert un espace mémoire CPU important. Par contre, dans le cas du raffinement hétérogène, la formulation du problème est la difficulté principale. Il est évident que ce choix augmente la taille du problème—et donc le temps de résolution (comme la première stratégie), mais dans une proportion moindre. Malheureusement, dans le cas des équations purement *hyperboliques* ($D=0$) avec des conditions aux limites possédant des discontinuités, le niveau de raffinement du maillage ne suffit plus pour faire disparaître les oscillations numériques dans la solution d'approximation. Le raffinement

du maillage est donc une alternative dans certains cas d'écoulement mais elle reste limitée.

1.3.2 Les méthodes de stabilisation

Plusieurs études ont montré que l'utilisation des méthodes de stabilisation peuvent éliminer les oscillations numériques qui apparaissent dans les solutions d'approximation du problème d'écoulement dominé par la convection (Brooks et Hughes, 1982; Douglas et Wang, 1989; Franca et Hughes, 1988; Hughes, 1987; Hughes et Franca, 1987; Hughes, Franca et Hubert, 1989). Les techniques de stabilisation consistent à ajouter à la formulation variationnelle de Galerkin des termes de stabilisation dépendant du maillage, sans toutefois affecter la consistance de la formulation. De ce fait, elles sont des méthodes résiduelles qui sont des méthodes de type Petrov/Galerkin. La méthode de Petrov/Galerkin est une variante de la méthode de Galerkin (MEF), qui consiste à utiliser des fonctions tests différentes des fonctions d'interpolation pour réaliser le décentrage. Ces modifications apportées aux fonctions tests permettent ainsi une formulation variationnelle qui aboutit à des systèmes matriciels plus stables—contrairement au cas de la méthode de Galerkin. Ce qui se traduit par une solution d'approximation de l'oscillation numérique. Toutes ces méthodes de stabilisation—aussi dénommées *méthode de décentrage*, sont discutée plus en détails au chapitre 3.

1.3.3 La méthode par alternance

La méthode par alternance (MA) a été récemment utilisée dans l'analyse des problèmes de type convection-diffusion-réaction (Renou, Perrier, Dochain et Gendron, 1999; Renou, 2000). En plus d'être un algorithme rapide, la méthode MA s'est montrée très efficace dans l'élimination des oscillations numériques. Par ailleurs, elle n'induit pas de diffusion numérique dans la solution des systèmes fortement convectifs. Cependant, la méthode MA manque de précision important quant au traitement des conditions frontières des EDP de systèmes faiblement dispersifs ($ND \cong 1$). Une explication possible de ce désavantage de la méthode MA, est discutée au chapitre 4 de ce rapport.

CHAPITRE 2

ÉLÉMENTS FINIS: CAS D'UN RÉACTEUR ISOTHERME

La méthode des éléments finis est un outil de résolution très utilisé dans l'analyse de plusieurs problèmes en ingénierie. Dans le cas des problèmes dont les modèles mathématiques sont connus mais dont la géométrie du problème est complexe ou que les conditions frontières qui y sont associées rendent la solution analytique difficile, voir impossible à obtenir, on a souvent recours à la résolution par la MEF pour obtenir une approximation de la solution exacte du problème. La MEF utilise une discrétisation spatiale et une formulation résiduelle de Galerkin pour obtenir un système d'équations différentielles ordinaires—sous une forme matricielle. La résolution de ce système d'équations matricielles aboutit alors à une approximation de la solution du problème original. La particularité de la formulation de Galerkin est qu'elle utilise des fonctions tests et des fonctions d'interpolation issues de la même classe de fonctions. Le succès de la méthode de Galerkin vient de sa bonne approximation des solutions dans les problèmes de structure.

Ce chapitre présente la formulation détaillée de la MEF dans le cas des équations de type convection-diffusion-réaction (cas d'un réacteur isotherme). La raison de cette démarche vient principalement du fait que la résolution par les méthodes de décentrage

(discutées au chapitre 3) utilise aussi cette formulation variationnelle. De plus, certains schémas de résolution par la méthode de décentrage sont des extensions directes de la formulation de la MEF. La résolution des EDP par la méthode des éléments finis suit une démarche bien connue dans la littérature (Reddy, 1993). Toutefois, l'approche adoptée dans le cadre de ce mémoire ne traite que de quelques unes de ces étapes, à savoir: la discrétisation du domaine, la formulation variationnelle élémentaire et l'assemblage. L'étape d'imposition de conditions frontières est développée à l'annexe III. Par ailleurs, la résolution numérique des systèmes d'équations d'assemblage est faite dans les chapitres subséquents. Les différentes étapes de résolution de la MEF sont illustrées dans le cadre de la résolution d'un problème de type convection-diffusion-réaction; c'est-à-dire un écoulement accompagné d'une réaction chimique—le milieu réactionnel étant un réacteur tubulaire.

2.1 Discrétisation du domaine

Le réacteur tubulaire—isotherme, qui constitue le domaine de résolution peut être assimilé à un segment de droite de longueur ℓ . Le problème peut donc être rapporté à un écoulement selon l'axe des coordonnées z . L'espace de la résolution est donc de type 1-D. Ainsi, la partition du domaine peut se faire sur un intervalle $[0, \ell]$. Ce segment de droite peut être divisé en sous-segments appelés *éléments finis*. Afin de simplifier la formulation du problème, les éléments sont choisis avec une taille

identique. Dans ce cas, le maillage est dit *uniforme*—contrairement à un maillage dit *hétérogène* lorsque les éléments sont de tailles différentes.

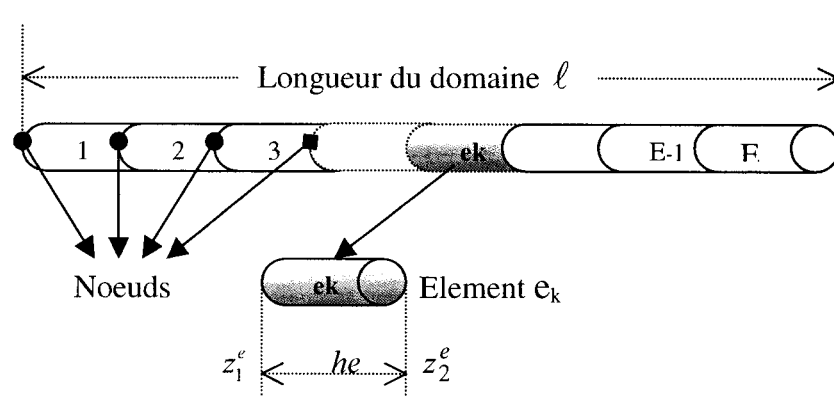


Figure 2.1 Discrétisation de domaine : cas du réacteur tubulaire

Pour un maillage uniforme constitué d'un nombre E d'éléments, la taille h_e de chaque élément du maillage uniforme est :

$$h_e = \frac{L}{E} \quad (2.1)$$

La disposition des éléments au sein du maillage est illustrée à la figure 2.1. Les éléments sont reliés entre eux par des bornes appelées nœuds géométriques locaux. Étant donné la géométrie linéaire du domaine d'étude (segment de droite), si le maillage est constitué d'un nombre E d'éléments, le nombre de nœuds globaux noté N_G est donnée par l'équation (2.2) :

$$N_G = (N_C - 1) \times E + 1 \quad (2.2)$$

Dans cette équation, N_C représente le nombre de nœuds par éléments appelés *nœuds d'interpolation* ou *nœuds de calcul*. Dans cette étude, on considère des éléments finis linéaires (deux nœuds de calcul par élément). L'interpolation est donc dite de type linéaire. Dans ce cas, le nombre de nœuds globaux N_G est égal à $E+1$. Dans le cas d'un domaine linéaire, chaque élément est représenté par un sous-segment $[z_1^e, z_2^e]$ dont les deux bornes forment les nœuds locaux. Le choix du maillage est très important dans l'analyse par la méthode des éléments finis car il est étroitement lié à la précision de la solution d'approximation. En effet, plus le nombre d'éléments E dans le maillage est élevé—maillage raffiné, plus la solution d'approximation par la résolution MEF se rapproche de la solution exacte du problème.

2.2 Formulation variationnelle

Cette étape consiste à obtenir une formulation variationnelle d'un système d'équations différentielles partielles (EDP) sur un élément quelconque du maillage, permettant ainsi d'aboutir à un système d'équations matricielles élémentaires. La démarche adoptée pour l'obtention de ce modèle élémentaire est illustrée pour le modèle mathématique de l'écoulement en 1-D, de type convection-diffusion-réaction décrit par (2.3) :

$$\frac{\partial u(z, t)}{\partial t} + A \frac{\partial u(z, t)}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial z} \left(-D \frac{\partial u(z, t)}{\partial z} \right) + R(u) - f = 0 \quad (2.3)$$

En multipliant les deux membres de l'équation (2.3) par une fonction test W_i suivi d'une intégration sur le domaine entier $[0, \ell]$, on obtient les deux équations suivantes :

$$\int_0^\ell W_i(z) \left(\frac{\partial u(z, t)}{\partial t} + A \frac{\partial u(z, t)}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial z} \left(-D \frac{\partial u(z, t)}{\partial z} \right) + R(u) - f \right) dz = 0 \quad (2.4a)$$

$$\int_0^\ell W_i(z) \left(\frac{\partial u(z, t)}{\partial t} + A \frac{\partial u(z, t)}{\partial z} + R(u) - f \right) dz + \int_0^\ell W_i(z) \frac{\partial}{\partial z} \left(-D \frac{\partial u(z, t)}{\partial z} \right) dz = 0 \quad (2.4b)$$

Dans le cas où la diffusion est constante, (2.4) on peut réécrire l'équation comme suit :

$$\int_0^\ell W_i(z) \left(\frac{\partial u(z, t)}{\partial t} + A \frac{\partial u(z, t)}{\partial z} + R(u) - f \right) dz - \int_0^\ell D W_i(z) \frac{\partial^2 u(z, t)}{\partial z^2} dz = 0 \quad (2.5)$$

On entreprend alors l'affaiblissement de terme de diffusion qui est de second ordre. Pour ce faire, on applique le théorème de Green (intégration par parties) au dernier terme de l'équation (2.5). On obtient alors l'équation (2.6) :

$$-\int_0^\ell D W_i(z) \frac{\partial^2 u(z, t)}{\partial z^2} dz = \int_0^\ell D \frac{\partial W_i(z)}{\partial z} \frac{\partial u(z, t)}{\partial z} dz - \left(D W_i(z) \frac{\partial u(z, t)}{\partial z} \right) \Big|_0^\ell \quad (2.6)$$

Après substitution de l'équation (2.6) dans (2.5) et en réarrangeant, on aboutit à (2.7) :

$$\int_0^\ell W_i(z) \left(\frac{\partial u(z, t)}{\partial t} + A \frac{\partial u(z, t)}{\partial z} + R(u) - f \right) dz + \int_0^\ell \left(D \frac{\partial W_i(z)}{\partial z} \frac{\partial u(z, t)}{\partial z} \right) dz - \left(D W_i(z) \frac{\partial u(z, t)}{\partial z} \right) \Big|_0^\ell = 0 \quad (2.7)$$

Dans l'expression de (2.7), on voit aussi apparaître de façon explicite les conditions frontières naturelles. Étant donné que les équations précédentes sont valides sur tout le domaine $[0, \ell]$, on peut donc écrire la formulation faible du problème donnée par (2.7) sur chaque élément $[z_1^e, z_2^e]$ du maillage (avec $e \in [1, E]$) :

$$\begin{aligned} & \sum_{e=1}^E \int_{z_1^e}^{z_2^e} W_i(z) \left(\frac{\partial u(z, t)}{\partial t} + A \frac{\partial u(z, t)}{\partial z} + R(u) - f \right) dz \\ & + \sum_{e=1}^E \int_{z_1^e}^{z_2^e} \left(D \frac{\partial W_i(z)}{\partial z} \frac{\partial u(z, t)}{\partial z} \right) dz - \sum_{e=1}^E \left(D W_i(z) \frac{\partial u(z, t)}{\partial z} \right) \Big|_{z_1^e}^{z_2^e} = 0 \end{aligned} \quad (2.8a)$$

ou encore :

$$\begin{aligned} & \sum_{e=1}^E \int_{z_1^e}^{z_2^e} W_i(z) \left(\frac{\partial u(z, t)}{\partial t} + A \frac{\partial u(z, t)}{\partial z} + R(u) - f \right) dz \\ & + \sum_{e=1}^E \int_{z_1^e}^{z_2^e} \left(D \frac{\partial W_i(z)}{\partial z} \frac{\partial u(z, t)}{\partial z} \right) dz - \sum_{e=1}^E [W_i(z_2^e) Q_e^2 - W_i(z_1^e) Q_e^1] = 0 \end{aligned} \quad (2.8b)$$

Dans cette expression, Q_e^1 et Q_e^2 représentent les conditions frontières naturelles aux extrémités de l'élément e considéré. Pour cet élément donné du maillage, les conditions frontières naturelles sont définies par l'équation (2.9) :

$$\begin{cases} Q_e^1 = -D \frac{\partial u(z, t)}{\partial z} \Big|_{z=z_e^1} \\ Q_e^2 = +D \frac{\partial u(z, t)}{\partial z} \Big|_{z=z_e^2} \end{cases} \quad (2.9)$$

Par la suite, on suppose que la variable dépendante $u(z, t)$ dans le temps et dans l'espace est séparable. Ceci permet de faire l'approximation de la variable $u(z, t)$ comme suit :

$$u(z, t) = \sum_{j=1}^{Nc} u_j^e(t) \psi_j(z) \quad (2.10)$$

Dans l'équation (2.10), $u_j^e(t)$ représente la valeur d'approximation de la variable dépendante $u(z, t)$ à un nœud de calcul j situé sur l'élément $[z_1^e, z_2^e]$ au temps t . Par ailleurs ψ_j est la fonction d'interpolation de cette variable dépendante sur l'élément considéré. On rappelle une fois de plus que l'indice Nc représente le nombre de nœuds d'interpolation sur l'élément considéré. Si on choisit deux nœuds d'interpolation sur chaque élément, c'est-à-dire les deux bornes, on dit alors qu'on fait une approximation linéaire sur chaque élément $[z_1^e, z_2^e]$ du maillage.

Dans la formulation de la méthode de Galerkin, les fonctions tests W_i et les fonctions d'interpolations ψ_j , utilisées sont issues de la famille des fonctions de Lagrange. Ces fonctions vérifient les propriétés des polynômes orthogonaux suivantes:

$$\begin{cases} \Psi_i(z) \Big|_{z=z_j} = \delta_{ij} \\ \sum_{j=1}^{N_c} \Psi_j(z) \equiv 1 \Rightarrow \sum_{j=1}^{N_c} \frac{d\Psi_j(z)}{dz} = 0 \end{cases} \quad (2.11)$$

D'après ces propriétés, on déduit donc les égalités données par (2.12):

$$\begin{cases} \Psi_i(z_i) = 1 \\ \Psi_i(z_{i+1}) = 0 \end{cases} \quad \text{d'où} \quad \begin{cases} Q_1^e \Psi_i(z_i) = 1 \times Q_1^e = Q_1^e \\ Q_2^e \Psi_i(z_{i+1}) = 0 \times Q_2^e = 0 \end{cases} \quad (2.12)$$

En substituant l'équation (2.10) dans (2.8), (1.10) et (1.11), on obtient les expressions suivantes:

$$\begin{aligned} & \sum_{e=1}^E \int_{z_1^e}^{z_2^e} W_i(z) \left(\sum_{j=1}^{N_c} \left(\psi_j(z) \frac{\partial u_j^e(t)}{\partial t} \right) + A \sum_{j=1}^{N_c} \left(u_j^e(t) \frac{\partial \psi_j(z)}{\partial z} \right) + R(u) - f \right) dz \\ & + \sum_{e=1}^E \int_{z_1^e}^{z_2^e} \left(D \frac{\partial W_i(z)}{\partial z} \sum_{j=1}^{N_c} \left(u_j^e(t) \frac{\partial \psi_j(z)}{\partial z} \right) \right) dz - \sum_{e=1}^E [W_i(z_1^e) Q_e^1 - W_i(z_2^e) Q_e^2] = 0 \end{aligned} \quad (2.13)$$

$$R(u) = k \left(\sum_{j=1}^{N_c} u_j^e(z, t) \psi_j(z) \right)^\alpha \quad (2.14a)$$

$$R(u) = k \prod_{m=1}^M \left(\sum_{j=1}^{N_c} u_{jm}^e(z, t) \psi_j(z) \right)^{\alpha_m} \quad (2.14b)$$

L'équation (2.14a) est l'approximation du terme $R(u)$ dans le cas d'une réaction avec un seul réactif, tandis que (2.14b) est l'approximation de $R(u)$ dans le cas d'une réaction faisant intervenir plusieurs réactifs. L'équation (2.13) peut être décomposée en plusieurs termes, à savoir : le terme transitoire, le terme de convection, le terme de diffusion, le terme de réaction, de terme source volumétrique (ou terme force), et enfin les conditions frontières naturelles. Ces termes sont respectivement donnés par les équations (2.15) à (2.20).

$$\text{Transitoire} \quad \mathbf{T}(w, u^e, \psi) = \int_{z_1^e}^{z_2^e} W_i(z) \left(\sum_{j=1}^{N_c} \frac{\partial u_j^e(t)}{\partial t} \psi_j(z) \right) dz \quad (2.15)$$

$$\text{Convection} \quad \mathbf{A}(w, u^e, \psi) = \int_{z_1^e}^{z_2^e} A W_i(z) \left(\sum_{j=1}^{N_c} u_j^e(t) \frac{\partial \psi_j(z)}{\partial z} \right) dz \quad (2.16)$$

$$\text{Diffusion} \quad \mathbf{D}(w, u^e, \psi) = \int_{z_1^e}^{z_2^e} D \frac{\partial W_i(z)}{\partial z} \left(\sum_{j=1}^{N_c} u_j^e(t) \frac{\partial \psi_j(z)}{\partial z} \right) dz \quad (2.17)$$

$$\text{Réaction} \quad \mathbf{R}(w, u^e, \psi) = \int_{z_1^e}^{z_2^e} W_i(z) \mathbf{R}(u_j^e, \psi_j) dz \quad (2.18)$$

$$\text{Frontières} \quad \mathbf{B}(w) = -Q_1^e W_i(z) \Big|_{z=z_1^e} + Q_2^e W_i(z) \Big|_{z=z_2^e} \quad (2.19)$$

$$\text{Force} \quad \mathbf{F}(w) = \int_{z_1^e}^{z_2^e} [W_i(z) f] dz \quad (2.20)$$

À partir de cette décomposition, l'équation (2.13) peut s'écrire sous la forme suivante :

$$\sum_{e=1}^E [\mathbf{T}(z, t) + \mathbf{A}(z, t) + \mathbf{D}(z, t) + \mathbf{R}(z, t) + \mathbf{B}(z) - \mathbf{F}(z)] = 0 \quad (2.21)$$

La résolution de l'équation (2.21) est très influencée par la caractéristique de la cinétique de la réaction. En effet, si la cinétique de réaction est non linéaire (section 1.2), le terme de réaction donnée par l'équation (2.18) est aussi non-linéaire et vice-versa. On adopte alors une résolution linéaire ou non-linéaire selon la linéarité de la cinétique de réaction.

2.2.1 Cas d'une cinétique de réaction linéaire

Lorsque la cinétique de réaction est linéaire (section 1.2), le terme de réaction (2.18) s'écrit sous la forme suivante :

$$\mathbf{R}(w, u^e, \psi) = \int_{z_1^e}^{z_2^e} \left[W_i(z) k \left(\sum_{j=1}^{N_c} u_j^e(z, t) \psi_j(z) \right) \right] dz \quad (2.22)$$

L'équation (2.22) peut alors s'écrire sous forme d'une d'équation matricielle donnée par les équations (2.23) à (2.25) :

$$\sum_{e=1}^E \left(\left[\mathbf{M}^e \right] \frac{\partial}{\partial t} \langle \mathbf{u}^e \rangle + \left[\mathbf{A}^e + \mathbf{D}^e + \mathbf{R}^e \right] \langle \mathbf{u}^e \rangle - \langle \mathbf{F}^e \rangle + \langle \mathbf{B}^e \rangle \right) = 0 \quad (2.23)$$

$$\sum_{e=1}^E \left(\left[\mathbf{M}^e \right] \frac{\partial}{\partial t} \langle \mathbf{u}^e \rangle + \left[\mathbf{A}^e + \mathbf{D}^e + \mathbf{R}^e \right] \langle \mathbf{u}^e \rangle - \langle \mathbf{S}^e \rangle \right) = 0 \quad (2.24)$$

$$\text{avec } \mathbf{S}^e = \mathbf{F}^e - \mathbf{B}^e \quad (2.25)$$

où les expressions des matrices $\mathbf{M}^e$, $\mathbf{A}^e$, $\mathbf{D}^e$, $\mathbf{R}^e$, et des vecteurs $\mathbf{S}^e$ et $\mathbf{u}^e$ sont données par les équations (2.26) à (2.28).

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{M}_{ij}^e = \int_{z_1^e}^{z_2^e} \left[W_i(z) \psi_j(z) \right] dz \\ \mathbf{A}_{ij}^e = \int_{z_1^e}^{z_2^e} A \left[W_i(z) \frac{\partial \psi_j(z)}{\partial z} \right] dz \\ \mathbf{D}_{ij}^e = \int_{z_1^e}^{z_2^e} D \left[\frac{\partial W_i(z)}{\partial z} \frac{\partial \psi_j(z)}{\partial z} \right] dz \\ \mathbf{R}_{ij}^e = \int_{z_1^e}^{z_2^e} k \left[W_i(z) \psi_j(z) \right] dz \\ \mathbf{F}_i^e = \int_{z_1^e}^{z_2^e} f W_i(z) dz \end{array} \right. \quad (2.26)$$

$$\mathbf{S}_i^e = \mathbf{F}_i^e + Q_1^e W_i(z) \big|_{z=z_1} - Q_2^e W_i(z) \big|_{z=z_1} \quad (2.27)$$

L'équation (2.23) représente la formulation du modèle élémentaire. Dans cette équation $\mathbf{u}^e$ représente le vecteur des variables primaires élémentaires alors que $\mathbf{S}^e$ désigne le vecteur des variables secondaires (Reddy, 1993). Ces deux vecteurs sont définis comme suit :

$$\langle \mathbf{u}^e \rangle = \begin{Bmatrix} u_1^e \\ u_2^e \\ \vdots \\ u_{N_c}^e \end{Bmatrix} \quad \text{et} \quad \langle \mathbf{S}^e \rangle = \begin{Bmatrix} S_2^e \\ S_2^e \\ \vdots \\ S_{N_c}^e \end{Bmatrix} \quad (2.28)$$

2.2.2 Cas d'une cinétique de réaction non-linéaire

Dans le cas d'une cinétique de réaction non-linéaire, il est impossible d'écrire l'équation (2.21) sous la forme matricielle donnée par (2.23). Néanmoins, mis à part le terme de la réaction, tous les autres termes de (2.21) sont identiques à ceux obtenus dans le cas linéaire. Dans le cas non-linéaire le terme de réaction (2.18) s'écrit sous les formes suivantes :

$$\mathbf{R}_{i,j}^e(w, \mathbf{u}^e, \boldsymbol{\psi}) = \int_{z_1^e}^{z_2^e} \left[W_i(z) k \left(\sum_{j=1}^{N_c} u_j^e(z, t) \psi_j(z) \right)^\alpha \right] dz \quad (2.29)$$

$$\mathbf{R}_{i,j}^e(w, \mathbf{u}^e, \boldsymbol{\psi}) = \int_{z_1^e}^{z_2^e} \left[W_i(z) k \prod_{m=1}^M \left(\sum_{j=1}^{N_c} u_{j_m}^e(z, t) \psi_j(z) \right)^{\alpha_m} \right] dz \quad (2.30)$$

La forme (2.29) correspond au cas d'une réaction faisant intervenir un seul réactif. Quant à la forme (2.30), elle est utilisée dans le cas d'une réaction faisant intervenir un nombre M de réactifs. Par ailleurs, l'équation (2.21) peut se mettre sous la forme (2.31).

$$\sum_{e=1}^E \left(\left[\mathbf{M}^e \right] \frac{\partial}{\partial t} \langle \mathbf{u}^e \rangle + \langle \mathbf{G}^e(\mathbf{u}^e) \rangle - \langle \mathbf{S}^e \rangle \right) = 0 \quad (2.31)$$

où $\mathbf{G}^e$ est une fonction du vecteur de la variable primaire $\mathbf{u}^e$ définie par la sommation des fonctions vectorielles des termes de convection, de diffusion et de réaction :

$$\langle \mathbf{G}^e \rangle = \langle \mathbf{A}^e \rangle + \langle \mathbf{D}^e \rangle + \langle \mathbf{R}^e \rangle \quad (2.32)$$

L'équation (2.32) est la formulation élémentaire dans le cas d'une cinétique de réaction non-linéaire. Le problème peut alors être résolu, après l'étape d'assemblage, en utilisant une méthode d'analyse appropriée.

2.3 Assemblage des éléments

À partir des systèmes de matrices et/ou de vecteurs définis sur un élément quelconque du maillage, on reconstruit le système global par la réunion des nœuds des éléments. On utilise alors la continuité de la variable primaire u^e et un bilan sur les variables secondaires aux nœuds reliant deux éléments du maillage. Cette démarche aboutit aux relations suivantes :

- ✓ Continuité de la variable primaire au nœud k situé entre les éléments e_k et e_{k+1}
où U_k désigne la variable primaire globale au nœud k .

$$u_2^e = u_1^{e+1} = U_k \quad (2.33)$$

- ✓ Bilan sur les variables secondaires au nœud k situé entre les éléments e_k et e_{k+1}

$$Q_2^e + Q_1^{e+1} = Q_k \quad (2.34a)$$

Dans le cas où une charge externe C_o^k est appliquée au nœud global k situé entre les deux éléments du maillage, la somme Q_k des variables secondaires est égale à la valeur algébrique de cette charge. Dans le cas où aucune charge ne s'applique à ce nœud, la somme de variables secondaires est nulle. Dans le cadre cette formulation, on suppose qu'il n'y a pas de charges externes appliquées aux nœuds internes du maillage. Ainsi pour les nœuds internes du maillage, le bilan des variables secondaires Q_k donné par (2.34a) sera toujours nul. Par ailleurs, dans la suite du présent travail, la variable primaire (u_2^e ou u_1^{e+1}) à un nœud géométrique k est identifiée par U_k et sera appelée variable globale primaire.

Après l'assemblage des éléments du maillage, on obtient un système d'équations d'assemblage appelé *modèle global*. Dans les cas de cinétiques de réaction linéaire et non-linéaire, les expressions du modèle global sont données respectivement par les équations (2.34b) et (2.35).

$$\begin{bmatrix} \mathbf{M}_{ij} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial U_1}{\partial t} \\ \dots \\ \frac{\partial U_{Nc}}{\partial t} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \mathbf{G}_{ij} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U_1 \\ \dots \\ U_{Nc} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -DW_i \frac{\partial U_1(t)}{\partial z} \\ 0 \\ DW_i \frac{\partial U_{Nc}(t)}{\partial z} \end{bmatrix} \quad (2.34b)$$

$$\begin{bmatrix} \mathbf{M}_{ij} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial U_1}{\partial t} \\ \dots \\ \frac{\partial U_{Nc}}{\partial t} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \mathbf{G}_i \left(\mathbf{U}_j \right) \\ \dots \\ \mathbf{G}_{Nc} \left(\mathbf{U}_j \right) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -DW_i \frac{\partial U_1(t)}{\partial z} \\ 0 \\ DW_i \frac{\partial U_{Nc}(t)}{\partial z} \end{bmatrix} \quad (2.35)$$

Dans l'équation (2.34) $\mathbf{G}_{ij}$ est une matrice alors que dans l'équation (2.35), $\mathbf{G}_i$ désigne une fonction vectorielle des variables primaires globales U_k . Dans ces deux équations, $\mathbf{M}$ est la matrice globale obtenue à partir de l'assemblage des matrices élémentaires $\mathbf{M}^e$.

2.4 Imposition des conditions frontières

L'étape d'imposition des conditions frontières est développée à l'annexe III de ce mémoire. Les conditions frontières utilisées sont celles de Danckwerts (1953). L'application de ces conditions frontières aboutit à une légère transformation de l'équation du modèle global donné par (2.34b) et (2.35).

2.5 Résolution du modèle global

Après les étapes d'assemblage et d'imposition des conditions frontières, on procède à la résolution du modèle global—donnée par les équations matricielles (2.34) ou (2.35). Dans la pratique, cette étape est élaborée à l'aide d'un programme de simulation par ordinateur. Dans le cadre de ce mémoire, un logiciel de simulation—développé sur Matlab, permet de résoudre les systèmes d'équations de type convection-diffusion et convection-diffusion-réaction. Ce logiciel de simulation est présenté à l'annexe I. Par ailleurs, toutes les simulations de ce rapport ont été réalisées sur un ordinateur IBM doté d'un processeur *Pentium III 750 MHz* avec une mémoire vive de *250 MHz*.

2.6 Analyse par la méthode des éléments finis

2.6.1 Modèle mathématique linéaire

Le modèle mathématique utilisé dans cette étude pour la validation des méthodes numériques est celui de l'équation de convection-diffusion-réaction (CDR) faisant intervenir un terme de réaction linéaire. Ce modèle est décrit par l'équation (2.36).

$$\frac{\partial u}{\partial t} + A \frac{\partial u}{\partial z} - D \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} + ku = 0 \quad (2.36)$$

Dans cette équation A , D et k désignent respectivement les coefficients de convection et de diffusion ainsi que la constante cinétique de la réaction. La réaction chimique ainsi

considérée fait intervenir un seul réactif dont l'ordre de réaction ∞ est égal à 1—cas d'une cinétique de réaction linéaire. Par ailleurs, on utilise les conditions frontières de Danckwerts (1953) données par les expressions (2.37) et (2.38). Ces conditions supposent que le réactif quitte le milieu réactionnel avec un profil plat, d'où la dérivée nulle à la sortie du réacteur (i.e. $z = 1$).

$$D \frac{\partial u(0, t)}{\partial z} = A \left(u(0, t) - u_{in}(z, t) \right) \quad (2.37)$$

$$D \frac{\partial u(1, t)}{\partial z} = 0 \quad (2.38)$$

La condition initiale utilisée est donnée par (2.39)

$$u(z, 0) = u_o(z) \quad (2.39)$$

Dans ces dernières équations, u_{in} et u_o représentent respectivement la concentration du réactif dans le courant d'alimentation du réacteur et la concentration initial dans le réacteur. Afin d'illustrer l'analyse du problème CDR, on fait un choix arbitraire des grandeurs k , u_o et u définis par (2.40).

$$\begin{aligned} A &= 0.05 \text{ m/min} & k &= 0.057 \text{ min}^{-1} \\ u_{in} &= 1 \text{ g/L} & u_0 &= 0 \text{ g/L} \end{aligned} \quad (2.40)$$

L'analyse du problème est faite pour différentes plages du nombre de dispersion ND . Plus précisément, on s'intéresse aux cas d'un système convectif ($ND = 2 \cdot 10^{-7}$), d'un système intermédiaire ($ND = 1$) et enfin d'un système dispersif ($ND = 2 \cdot 10^{+5}$).

Tableau 2.1 Systèmes analysés dans le cas du modèle linéaire.

Système	Convectif	Intermédiaire	Dispersif
ND	$2 \cdot 10^{-7}$	1	$2 \cdot 10^{+5}$

Par ailleurs, la résolution de ces trois systèmes est faite avec la méthode MEF et la méthode par alternance MA (Renou 2000) pour un maillage constitué de 100 éléments. La formulation variationnelle du problème suit la démarche discutée dans ce chapitre. Par ailleurs, on utilise des types d'éléments linéaires. Quant à la résolution du modèle global obtenu, elle est élaborée avec le logiciel présenté à l'annexe I de ce rapport. L'intégration par rapport au temps des ODE est faite avec la fonction *ODE15S* de Matlab (Annexe I). Les résultats de simulation sont présentés dans la section suivante.

2.6.2 Résultats de simulation

La figure 2.2 illustre le cas d'un système fortement convectif (écoulement dominé par la convection). On constate l'apparition d'oscillations numériques dans la solution du problème avec l'analyse par la méthode de Galerkin (MEF)—ce qui n'est pas le cas de la méthode par alternance (MA).

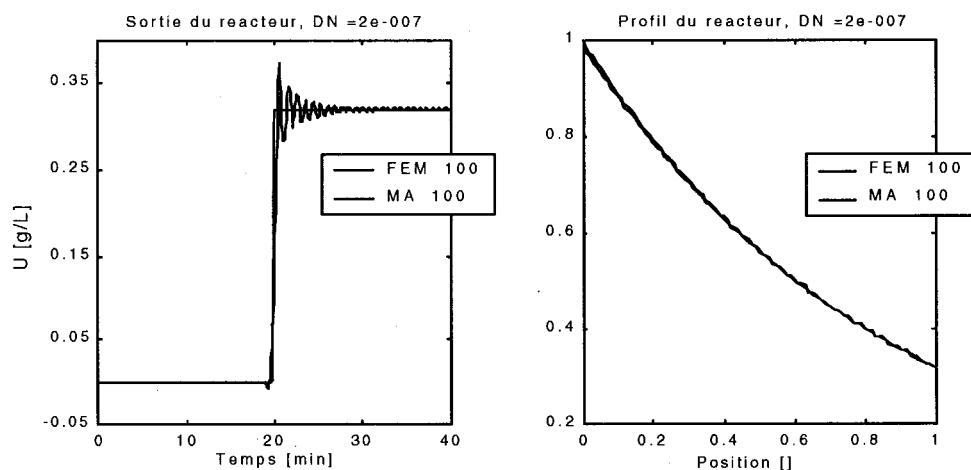


Figure 2.2 Analyse par MEF de l'équation CDR avec $ND = 2 \cdot 10^{-7}$

On note aussi que la concentration en régime permanent atteint une valeur de 0.32 g/L plus faible que celle dans le courant d'alimentation (qui est de 1 g/L). Cette différence dans la valeur de la concentration s'explique par la réaction chimique qui a lieu lors de l'écoulement. En effet, la réaction chimique consomme une partie du réactif dans le réacteur; ce qui se traduit alors par une plus faible concentration du réactif à la sortie du réacteur. On note aussi que la concentration à l'entrée du réacteur est plus proche de celle initiale. Ceci s'explique par le fait qu'avec une forte convection, le temps de séjour dans le réacteur est faible. Autrement dit, le réactif traverse rapidement le réacteur—et chaque élément du maillage. En conséquence, une plus faible partie du réactif est consommé dans les mailles situées à proximité de l'entrée du réacteur.

Dans le cas du système faiblement dispersif (les effets de diffusion et de convection sont du même ordre de grandeur) illustré à la figure 2.3, on n'observe plus d'oscillations dans

la solution numérique du problème avec une analyse par MEF. Le profil de concentration ne présente pas non plus une allure oscillatoire.

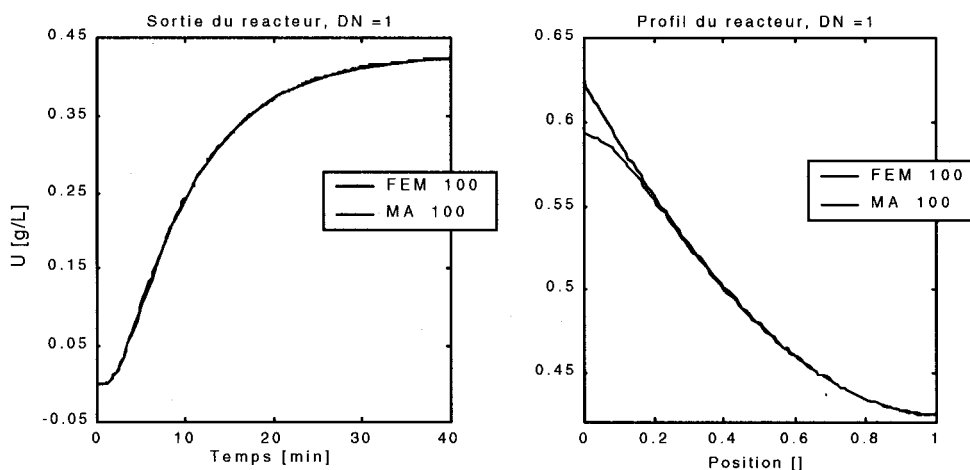


Figure 2.3 Analyse par MEF de l'équation CDR avec ND = 1

Mais contrairement au système fortement convectif, le système intermédiaire entraîne un temps de séjour plus long dans le réacteur (donc dans chaque élément du maillage). Ceci se traduit par un profil de concentration plus faible (0.625 g/L) à l'entrée du réacteur avec la MEF—comparativement au cas du système fortement convectif qui donne un profil de concentration d'environ 1g/L. Par ailleurs, on constate que le profil de concentration à l'entrée du réacteur obtenu par la méthode MA (environ 0.575g/L) s'écarte significativement de celui de la MEF qui est d'environ 0.625 g/L. Ce constat confirme les travaux de Renou (2000) quant au mauvais traitement des conditions frontières à l'entrée du réacteur par la méthode MA.

La figure 2.4 montre les résultats de l'analyse du système fortement dispersif (écoulement dominé par la diffusion). Le type de système n'est pas d'un grand intérêt

dans le cadre de cette étude car il ne constitue pas un cas de résolution problématique. Néanmoins, les résultats de l'analyse du système fortement dispersif sont présentés dans ce rapport à titre d'illustration.

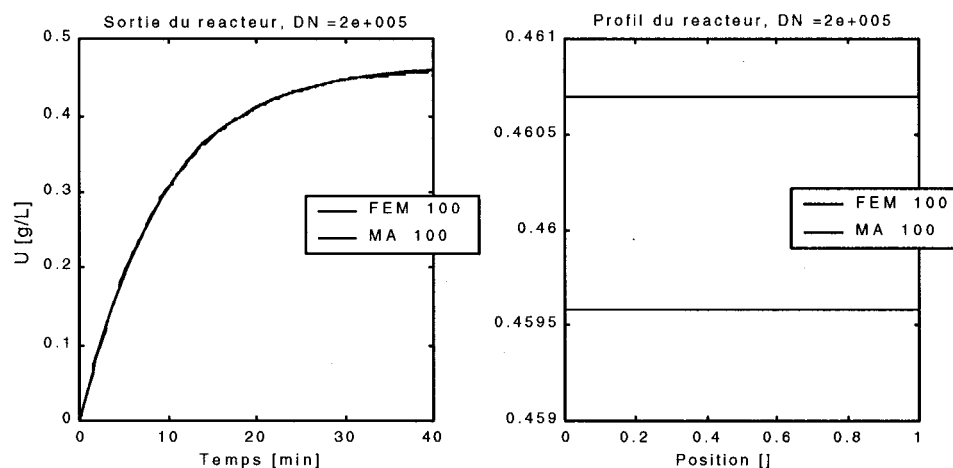


Figure 2.4 Analyse par MEF de l'équation CDR avec $ND = 2 \cdot 10^5$

On constate que la variation de la concentration dans le temps ne présente pas d'oscillations. Par ailleurs, les profils de concentration dans le réacteur sont constants et se situent respectivement autour de 0.457 g/L pour la MA et 0.450 g/L pour la méthode MEF. L'allure constante de ces profils de concentration caractérise bien le comportement d'un réacteur en continu parfaitement mélangé—la concentration est identique en tout point du réacteur.

Cette étude inclut une analyse de l'influence du raffinement du maillage sur la précision de la solution. En effet, on sait que la méthode MEF est sensible au raffinement du maillage. Afin d'analyser la sensibilité de la méthode de Galerkin, une résolution du

modèle linéaire est faite avec différents maillages (10, 50 et 100 mailles). Les résultats de simulation dans le cas des systèmes convectif, intermédiaire et dispersif, sont illustrés à la figure 2.5. D'après ces résultats, on constate que la précision de la méthode de Galerkin est plus sensible à la variation du maillage dans le cas du système convectif. En effet, lorsque que le nombre de maillage augmente, on voit une nette séparation des courbes de variation dans le temps du système convectif. Ces écarts ne sont pas observés dans le cas des systèmes intermédiaire et dispersif. Par ailleurs, le raffinement du maillage a une influence moins marquée sur le profil de concentration dans le réacteur—dans le cas des trois systèmes. Ceci s'explique par le fait que la concentration en régime permanent—en un point donné du réacteur, convergent vers la même valeur pour les différents niveaux de raffinement considérés.

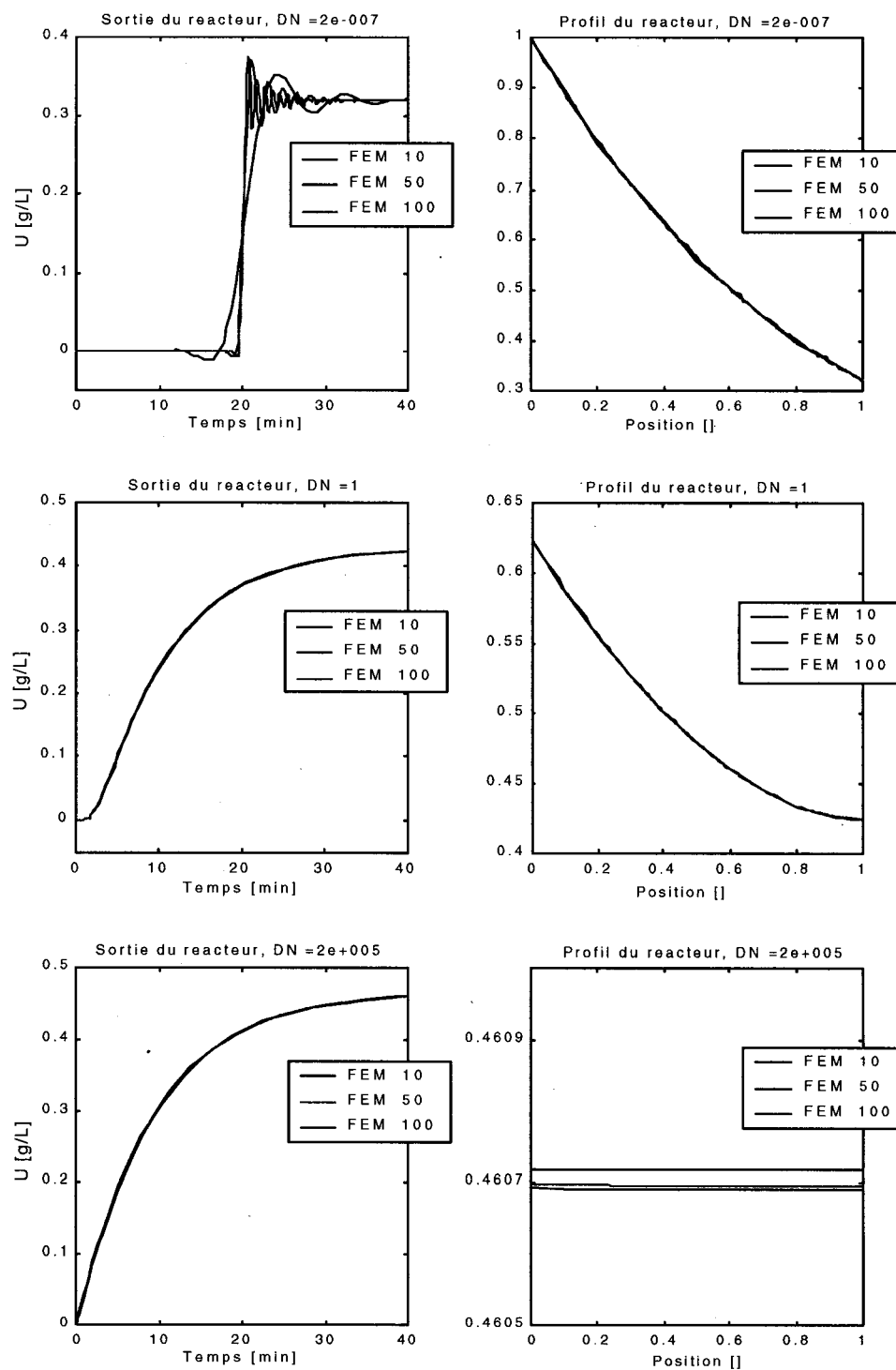


Figure 2.5 Méthode MEF : Influence du maillage réaction

CHAPITRE 3

LES MÉTHODES DE DÉCENTRAGE

La diversité présente dans la nature des EDP fait que les méthodes de résolution numérique traditionnelles n'aboutissent pas toujours à des solutions précises du problème de convection-diffusion (avec ou sans réaction chimique). Comme il a été mentionné au chapitre 2, les méthodes traditionnelles (MEF, MDF, etc.) sont limitées face au problème des oscillations numériques. Par ailleurs, on a montré, dans la section 2.6 du dit chapitre, que l'analyse du problème de convection-diffusion-réaction par la méthode MEF conduit à une solution numérique qui présente des oscillations dans le cas d'un système fortement convectif (nombre de Péclet élevé). Ces oscillations présentes dans la solution numérique, ne sont pas d'origine physique. Ce cas est bien connu dans la littérature—problème d'écoulement dominé par l'effet de convection. Devant les limites des méthodes traditionnelles, plusieurs chercheurs ont proposé de nouvelles stratégies pour éliminer ces oscillations numériques. Parmi ces stratégies, on compte les méthodes de décentrage (ou méthodes de stabilisation).

Ce chapitre introduit les méthodes de décentrage. Dans un premier temps, l'historique de ces méthodes est présenté, suivi d'une classification. Cette classification comprend une brève description suivie de la formulation de la méthode. Dans certains cas, les applications de ces méthodes ainsi que les avantages et les limites sont présentés. Par

ailleurs, quelques unes de ces méthodes sont appliquées dans l'analyse d'un problème d'écoulement de type convection-diffusion-réaction.

3.1 Classification

À l'origine, il y avait une méthode de résolution très efficace dans l'élimination des oscillations numériques : la méthode de la différence finie décentrée arrière (DFDA)—ou simplement différence arrière. Ce schéma de résolution est connu dans la littérature anglo-saxonne sous les appellations de «*Upwind difference*», «*Backward difference*», «*Upstream-difference*», ou «*Donor-cell method*». La DFDA fut introduite pour la première fois par Courant, Isaacson et Rees (1952). Elle a été par la suite modifiée par Gentry, Martin, et Daly (1966); Barakat et Clark (1966); Runchal et Wolfstein (1969). Plus tard, il a été montré que l'utilisation de la DFDA dans la formulation de Galerkin permet d'obtenir des valeurs nodales exactes de la solution d'approximation sans oscillations numériques. Devant la performance de la DFDA et la popularité de la méthode des éléments finis, une question se pose alors:

- ✓ *Comment peut-on introduire les différences finies décentrées arrière dans le schéma de résolution de la méthode des éléments finis?*

Plusieurs recherches ont été menées afin de trouver une réponse à cette question (Brooks et Hughes, 1982; Douglas et Wang, 1989; Franca et Hughes, 1988; Hughes, 1987;

Hughes et Franca, 1987; Hughes, Franca et Hubert, 1989). Les résultats de toutes ces recherches ont plus tard abouti à la naissance d'une nouvelle génération de méthodes de résolution numérique efficace face aux oscillations numériques : les méthodes de décentrage (ou méthodes de stabilisation).

En effet, les récentes améliorations de la méthode de Christie et collègues (1976), on conduit aux méthodes de décentrage telles que la méthode SUPG «Streamline Upwind/Petrov-Galerkin» (Brooks et Hughes, 1982), la méthode GLS «Galerkin Least Square » (Hughes et al., 1989) et la méthode DWFF «Douglas-Wang-Franca-Frey» (Douglas et Wang, 1989). La méthode SUPG a été initialement introduite pour les équations de type convection-diffusion et ensuite généralisée, avec succès, aux équations de Stokes et de Navier-Stokes (Brooks et Hughes, 1982; Hughes, 1987). Cette généralisation a aussi touché les équations de type convection-diffusion-réaction avec une certaine modification du terme de stabilisation pour tenir compte de l'effet de déstabilisation du terme de réaction (Tezduyar et Park 1986). Ceci a conduit à une variante de la méthode SUPG dénommée SU+C/PG «Streamline Upwind + Centered/Petrov-Galerkin ». La méthode SUPG permet de stabiliser la méthode de Galerkin en ajoutant à la fonction test de celle-ci un terme de stabilisation. La méthode GLS, quant à elle, consiste à ajouter à la formulation résiduelle de Galerkin un résidu provenant de la minimisation d'une fonctionnelle par la méthode des moindres carrés. Elle est plus générale que la méthode SUPG puisqu'elle permet l'utilisation d'interpolants d'ordre plus élevé. Dans le cas où les interpolants utilisées sont linéaires,

la méthode GLS correspond à la méthode SUPG. Cette méthode est présentée par Hughes et Franca (1987; 1988) ainsi que Hughes et collègues (1989) dans l'analyse de l'équation de type convection-diffusion et des équations de Stokes. Quant à Behr et collègues (1993); Franca et collègues (1993); Franca et Madureira (1993), ils utilisent la méthode GLS dans le cas des équations de Navier-Stokes. La méthode DWFF a été présentée par Douglas et Wang (1989), Franca et collègues (1993) et enfin Franca et Frey (1992). Bien qu'elle est soit une variante de la méthode GLS, la méthode DWFF a l'avantage d'être moins sensible aux paramètres de stabilisation.

Une autre méthode aussi bien connue, mais très contestée, dans l'analyse des problèmes de convection-diffusion est la méthode SU «Streamline Upwind»—aussi connue dans la littérature anglo-saxonne comme «Artificial Diffusion». Lorsqu'elle est appliquée dans le cas d'un problème 1-D, la méthode SU est très efficace à éliminer les oscillations numériques dans le cas problématique ($Pe \gg 1$). Cette méthode a fait l'objet de nombreuses critiques de la part de plusieurs chercheurs (De Vahl Davis et Mallison, 1976; Gresho et Lee, 1979; Leonard, 1979) car elle introduit une diffusion artificielle (qui n'a aucune signification physique) dans la formulation variationnelle de la méthode de Galerkin. De plus, la méthode SU n'est pas une méthode résiduelle. Dans le cas particulier des problèmes d'écoulement en 1-D (avec ou sans réaction chimique), l'application des méthodes de décentrage revient à ajouter de la diffusion dans le sens de l'écoulement. La quantité de cette diffusion est contrôlée par un paramètre de stabilisation qui doit être choisi de façon appropriée afin d'obtenir une solution stable.

Plusieurs chercheurs ont proposé une quantification de cette diffusion aussi bien dans le cas des problèmes de convection-diffusion (Brooks et Hughes, 1982; Hughes, 1987) que dans le cas des problèmes de type convection-diffusion-réaction (Tezduyar et Park 1986). Cependant, l'absence d'un algorithme général conduisant à la construction du paramètre optimal constitue un inconvénient majeur quant à l'utilisation de ce type de problème.

Les méthodes de décentrage sont pour la plupart une extension de la méthode des éléments finis (MEF). Elles consistent généralement à modifier les fonctions tests utilisées dans la formulation de Galerkin (MEF) afin d'introduire le schéma de la DFDA. En effet, les méthodes de décentrage diffèrent de la MEF dans le choix des fonctions tests utilisées dans la formulation de Galerkin. Cette approche introduit une approximation par différences finies décentrée arrière des termes de dérivées des EDP en modifiant la fonction test standard de Galerkin. À cause de cette similarité entre les méthodes de décentrage et la MEF, on utilisera les résultats de la formulation variationnelle MEF (voir chapitre 2) pour faire la formulation variationnelle par décentrage. Ainsi, les équations de la forme faible obtenues au chapitre 2, sont appliquées directement dans cette formulation puisque la seule différence se trouve dans le choix de la forme des fonctions test utilisées.

3.2 La différence finie par décentrage arrière

Il est bien connu que la formulation en 1-D par la méthode de Galerkin (Brooks et Hughes, 1982) conduit à l'approximation des opérateurs différentiels de convection et de diffusion avec une différence finie centrée selon les équations données par (3.1) et (3.2)

$$\left. \frac{\partial \phi(z)}{\partial z} \right|_{z_k} \approx \frac{1}{2h_e} \left(-\phi_{k-1}(z) + \phi_{k+1}(z) \right) \quad (3.1)$$

$$\left. \frac{\partial^2 \phi(z)}{\partial z^2} \right|_{z_k} \approx \frac{1}{h_e^2} \left(\phi_{k-1}(z) - 2\phi_k(z) + \phi_{k+1}(z) \right) \quad (3.2)$$

Ces équations peuvent aussi s'écrire sous les formes :

$$\left. \frac{\partial}{\partial z} \right|_{z_k} \approx \frac{1}{2h_e} \begin{pmatrix} -1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (3.3)$$

$$\left. \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right|_{z_k} \approx \frac{1}{h_e^2} \begin{pmatrix} 1 & -2 & 1 \end{pmatrix} \quad (3.4)$$

où $\phi_{k-1}(z)$, $\phi_k(z)$ et $\phi_{k+1}(z)$ sont les valeurs des coefficients entre les parenthèses. Les équations (3.1) et (3.2) désignent respectivement la différence centrée de premier et de second ordre.

Contrairement à la différence centrée qui utilise l'information en amont et en aval en un point de l'écoulement pour faire l'approximation du terme de convection, la DFDA utilise uniquement l'information en amont de ce point. Partant du fait que les oscillations dans les solutions d'approximation des méthodes de Galerkin sont en partie causées par

les conditions frontières en aval de l'écoulement, le schéma de la DFDA propose une meilleure approche pour corriger cette situation. Pour ce faire, cette procédure consiste à faire l'approximation de l'opérateur différentiel de diffusion avec une différence finie centrée de second ordre selon (3.2). Quant à l'opérateur différentiel de la convection, il est modifié avec une différence finie décentrée arrière selon (3.5) :

$$\left. \frac{\partial \phi(z)}{\partial z} \right|_{z_k} \approx \frac{1}{h_e} \left(-\phi_{k-1}(z) + \phi(z) \right) \quad (3.5)$$

ou encore sous la forme :

$$\left. \frac{\partial}{\partial z} \right|_{z_k} \approx \frac{1}{h_e} \begin{pmatrix} -1 & 1 & 0 \end{pmatrix} \text{ quand } A > 0 \quad (3.6)$$

$$\left. \frac{\partial}{\partial z} \right|_{z_k} \approx \frac{1}{h_e} \begin{pmatrix} 0 & 1 & -1 \end{pmatrix} \text{ quand } A < 0 \quad (3.7)$$

La DFDA permet de faire l'approximation du terme de convection qui apparaît dans les EDP en utilisant uniquement l'information de convection en amont du courant. Le choix du décentrage arrière dans l'approximation du terme de convection est justifié d'autant plus que dans le cas d'un écoulement purement convectif, l'information se propage dans le sens de l'écoulement. Cette transformation permet ainsi de réduire l'influence des conditions frontières difficiles situées en aval de l'écoulement sur le terme de convection. À cet effet, plusieurs travaux ont montré qu'on peut obtenir une solution nodale exacte sans oscillations pour toutes les plages du nombre de Péclet ($Pe \ 0 \rightarrow \infty$) en utilisant ce type d'approximation.

Dans ses travaux, Patankar (1980) fait référence à plusieurs recherches qui soutiennent que le principal désavantage de la DFDA est qu'elle a une précision d'ordre 1—contrairement à la différence centrée qui a une précision de second ordre, tandis que d'autres affirment que ce schéma de résolution cause une diffusion excessive de la solution. Partant de ces constatations, ces recherches concluent que la différence centrée donne de meilleurs résultats que le schéma de la DFDA. De plus, cette perte de l'information (termes d'ordres supérieurs à 1) entraîne une surestimation de la solution d'approximation. En d'autres mots, la DFDA élimine les oscillations numériques mais dégrade la précision de la solution d'approximation.

Patankar (1980) reconnaît que la DFDA a une erreur de troncation d'ordre 1, alors que la différence centrée fait une erreur de troncation d'ordre 2. Mais à cause de la nature des fonctions test utilisées dans la formulation des problèmes de convection-diffusion, il soutient que l'erreur de troncation de la série de Taylor est minimisée dans le cas du schéma de la DFDA comparée à celle commise par la différence centrée. De ce fait, il admet que la différence centrée est plus précise que le schéma de la DFDA lorsque le nombre de Péclet est faible (système dispersif). Mais dans ce cas, étant donné que la diffusion réelle du système est plus importante que celle induite (diffusion numérique), le problème ne se pose pas. Par contre, dans le cas d'un système fortement convectif, la différence centrée n'est pas plus précise que la DFDA.

3.3 La diffusion artificielle

Cette approche consiste à ajouter une *diffusion artificielle* $\overline{D}$ à la diffusion physique D du problème à résoudre. L'ajout d'une telle diffusion contribue alors à stabiliser la matrice de diffusion obtenue dans la formulation des problèmes d'écoulement dominés par la convection. Considérons l'équation (3.8) :

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \nabla \cdot (Au - D \nabla u) + R(u) = f, \quad (3.8)$$

L'ajout de la diffusion artificielle $\overline{D}$ conduit à une pseudo-diffusion D' du problème donnée par (3.9) :

$$D' = D + \overline{D} \quad (3.9)$$

Le pseudo-problème ainsi obtenu, est défini par les équations (3.10) et (3.11) :

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \nabla \cdot (Au - D' \nabla u) + R(u) = f \quad (3.10)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \nabla \cdot (Au - (D + \overline{D}) \nabla u) + R(u) = f \quad (3.11)$$

L'équation (3.1) peut alors être résolue en utilisant la formulation standard de Galerkin. Cette approche permet d'atténuer les oscillations numériques présentes dans la solution d'approximation. Cela peut s'expliquer en partie en se rapportant à l'expression de l'erreur d'approximation donnée par (1.12) dans le cas de la formulation variationnelle de Galerkin. En effet, on constate que l'erreur est une fonction croissante du nombre de Péclet Pe . Ainsi, avec l'ajout d'une diffusion artificielle à la diffusion physique du

problème, on contribue indirectement à diminuer la valeur du nombre de Péclet Pe —donnée par l'équation (1.6). Ceci se traduit par une diminution de l'erreur d'approximation, d'où une réduction des oscillations numériques dans la solution d'approximation. Même si cette approche s'avère efficace dans la réduction des oscillations numériques, la solution du problème modifié ne satisfait pas le modèle initial. De plus, elle fait aussi disparaître les fortes variations présentes dans la solution exacte, avec une surestimation de la solution d'approximation. Par ailleurs, lorsque des termes sources f sont considérés, des problèmes de diffusion excessive se manifestent. Cette méthode a été très critiquée par certains chercheurs, notamment par Leonard (1979), Gresho et Lee (1979) ainsi que De Vahl Davis et Mallison (1976) à cause de l'impossibilité d'interprétation "physique" de la diffusion artificielle. L'ajout d'une diffusion artificielle contribue certes à éliminer les oscillations numériques dans la solution d'approximation, mais, tout comme les oscillations numériques (qui ne sont pas d'origine physique), l'ajout de la diffusion artificielle dans l'approximation de la solution d'un problème n'a pas d'explication physique, d'où les critiques.

Dans le but de donner une explication à la diffusion artificielle, Brooks et Hughes (1982) ont montré que la DFDA peut être interprétée comme une différence centrée plus une diffusion artificielle $\bar{D} = \frac{Ah}{2}$. Ceci est montré par l'expression donnée par (3.12) :

$$\begin{array}{rcl}
\text{Difference centrée d'ordre 1} & A \frac{1}{2h_e} \begin{pmatrix} -1 & 0 & +1 \end{pmatrix} & \\
\text{Difference centrée d'ordre 2} & + \frac{Ah_e}{2} \frac{1}{h_e^2} \begin{pmatrix} -1 & 2 & -1 \end{pmatrix} & (3.12) \\
\hline
\text{Difference décentrée arrière} & A \frac{1}{h_e} \begin{pmatrix} -1 & 1 & 0 \end{pmatrix} &
\end{array}$$

Par ailleurs, l'approximation par la DFDA permet d'éliminer les oscillations numériques dans la solution d'approximation. Par contre, la solution d'approximation numérique obtenue est surévaluée (*overdiffuse*) alors que la DFC aboutit à une sous-évaluation de la solution d'approximation (*underdiffuse*). En se basant sur ces conclusions des solutions, Brooks et Hughes (1982) ont proposé une solution d'approximation optimale en ajoutant la quantité de diffusion artificielle nécessaire à une approximation par DFC afin d'obtenir la meilleure solution (solution optimale) de la méthode DFDA. Ils ont aussi montré que l'utilisation d'une diffusion artificielle $\overline{D}$ donnée par l'expression (3.13) conduit à une solution d'approximation exacte aux nœuds de calcul.

$$\overline{D}_{\text{optimal}} = \frac{Ah_e}{2} \left(\coth(Pe) - \frac{1}{Pe} \right) \quad (3.13)$$

3.4 La méthode SU—Streamline Upwind

Devant les améliorations dans la solution d'approximation obtenues par l'addition d'une diffusion artificielle à la diffusion réelle du problème, certains chercheurs se sont intéressés à introduire un terme de diffusion qui agit uniquement dans le sens des lignes

de courant (Brooks et Hughes, 1982; Hughes, Franca et Balestra, 1986; Hughes et al., 1996). Pour ce faire, la fonction test du terme de convection qui apparaît dans la forme faible de Galerkin (2.5) est modifiée selon (3.14).

$$\int_{\Omega} \Psi \frac{\partial \varphi}{\partial t} d\Omega + \int_{\Omega} (\hat{\mathbf{A}} \cdot \nabla \varphi) \bar{\Psi} d\Omega - \int_{\Omega} D \nabla \varphi \nabla \Psi d\Omega + \int_{\Omega} R(u) \Psi d\Omega = \int_{\Omega} f \Psi d\Omega \quad (3.14)$$

$$\text{avec } \bar{\Psi} = \Psi + \tau \hat{\mathbf{A}} \cdot \nabla \Psi \quad (3.15)$$

On peut alors écrire l'équation (3.14) sous la forme (3.16)

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \Psi \frac{\partial \varphi}{\partial t} d\Omega + \int_{\Omega} (\hat{\mathbf{A}} \nabla \varphi) \Psi d\Omega + \int_{\Omega} \tau \hat{\mathbf{A}} \hat{\mathbf{A}}^T \nabla \varphi \nabla \Psi d\Omega \\ - \int_{\Omega} D \nabla \varphi \nabla \Psi d\Omega + \int_{\Omega} R(u) \Psi d\Omega = \int_{\Omega} f \Psi d\Omega \end{aligned} \quad (3.16)$$

ou encore,

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \Psi \frac{\partial \varphi}{\partial t} d\Omega + \int_{\Omega} (\hat{\mathbf{A}} \cdot \nabla \varphi) \Psi d\Omega - \int_{\Omega} (D - \tau \hat{\mathbf{A}} \hat{\mathbf{A}}^T) \nabla \varphi \nabla \Psi d\Omega \\ + \int_{\Omega} R(u) \Psi d\Omega = \int_{\Omega} f \Psi d\Omega \end{aligned} \quad (3.17)$$

Le terme additionnel qui apparaît dans la forme (3.16) et (3.17) représente le terme de stabilisation, ou, terme de la diffusion artificielle. La diffusion artificielle est alors donnée par l'équation (3.18) :

$$\bar{\mathbf{D}} = \tau \hat{\mathbf{A}} \hat{\mathbf{A}}^T \quad (3.18)$$

Cette diffusion artificielle, obtenue par la modification de la fonction test de la forme faible de Galerkin, agit uniquement dans le sens des lignes de courant. Cette façon

d'introduire la diffusion artificielle n'affecte pas les discontinuités perpendiculaires pouvant être présentes dans la solution exacte. Cette caractéristique est très importante dans le cas de résolution de problèmes à plusieurs dimensions. Dans le cas des problèmes d'écoulements 1-D traités dans ce mémoire, la résolution par la méthode SU et la méthode de diffusion artificielle n'est pas différente.

Tout comme dans le cas de la méthode de la diffusion artificielle, la méthode SU arrive à éliminer les oscillations présentes dans la solution d'approximation. De plus, les variations brusques dans la solution exacte ne sont plus éliminées avec l'introduction d'une diffusion qui agit uniquement dans le sens des lignes du courant. Par contre, cette méthode souffre d'un désavantage majeur : elle n'est pas une méthode résiduelle. Par ailleurs, elle est sujette aux diffusions excessives dont souffre la méthode de la diffusion artificielle lorsque les équations présentent un terme source f .

3.5 La méthode SUPG—Streamline Upwind / Petrov-Galerkin

La méthode SUPG est actuellement l'une des méthodes les plus utilisées dans la résolution des EDP. Cette popularité vient de son efficacité à éliminer les oscillations numériques, en plus d'être consistante avec la formulation variationnelle de Galerkin. La méthode SUPG généralise les travaux de Dendy (1974), Wahlbin (1974) et Raymond et Gardner (1976).

La méthode SUPG utilise la formulation de Petrov/Galerkin. De ce fait, elle diffère de la méthode des éléments finis classique MEF (formulation de Galerkin) dans le choix des fonctions tests. En effet, alors que les fonctions tests utilisées dans la MEF sont toutes issues de la même classe de fonctions, la formulation SUPG utilise des fonctions poids de classes différentes. En fait, les fonctions tests utilisées dans la formulation de la méthode SUPG sont construites en ajoutant à la fonction standard de Galerkin, une perturbation p (ou terme de stabilisation) agissant dans la direction des lignes de courants. La forme de la fonction poids modifiée est donnée par (3.19) :

$$\overline{W} = W + p \quad (3.19)$$

$$\text{avec } p = \frac{\overline{D} \hat{\mathbf{A}}}{\|\hat{\mathbf{A}}\|} \frac{\partial W}{\partial z} \quad (3.20)$$

où $\overline{D}$ représente la diffusion artificielle (discutée dans la section 3.3). L'équation (3.20) montre que le terme de stabilisation est proportionnel au gradient de la fonction standard d'interpolation W . La fonction test modifiée obtenue est alors appliquée à tous les termes de la forme faible de l'équation originale. Ainsi, si on considère la forme faible de l'équation (2.5) donnée par l'expression suivante

$$\int_{\Omega} W \frac{\partial \psi}{\partial t} d\Omega + \int_{\Omega} W (A \nabla \psi) d\Omega - \int_{\Omega} D \nabla \psi \nabla W d\Omega + \int_{\Omega} R(u) W d\Omega = \int_{\Omega} f W d\Omega \quad (3.21)$$

la forme faible associée à la méthode SUPG est donnée par (3.22) :

$$\begin{aligned}
& \int_{\Omega} W \frac{\partial \psi}{\partial t} d\Omega + \int_{\Omega} W (A \nabla \psi) d\Omega - \int_{\Omega} D \nabla \psi \nabla W d\Omega + \int_{\Omega} R(u) W d\Omega \\
& + \sum_e \int_e p \left(\frac{\partial \psi}{\partial t} + A \nabla \psi - D \nabla \psi + R(u) \right) d\Omega = \int_{\Omega} f W d\Omega + \sum_e \int_e f p d\Omega
\end{aligned} \tag{3.22}$$

On constate ainsi que la méthode SUPG est résiduelle (contrairement à la méthode SU). De plus, elle contient tous les termes de diffusion artificielle de la méthode SU. Les fonctions d'interpolation Ψ et la fonction test W sont continues sur chaque élément du maillage. Cependant, elles ne sont différentiables qu'une seule fois (dérivée seconde nulle) dans le cas d'une interpolation linéaire. L'intégration de la forme faible doit donc se faire sur chaque élément et non pas sur le domaine entier. Par ailleurs, constate que lorsque la diffusion artificielle est égale à zéro, le terme de perturbation p s'annule et on retrouve la forme faible de la méthode de Galerkin donnée par l'équation (2.5).

Dans le cas de la résolution de problèmes, le choix de la diffusion artificielle doit être fait de sorte à maximiser la précision proche des couches frontières. Dans cette perspective Raymond et Gardner (1976) ont montré dans leurs travaux que dans le cas des problèmes de convection pure (i.e. $A = 0$) en 1-D, l'erreur peut être minimisée si la diffusion artificielle est donnée par (3.23) :

$$\overline{D} = \frac{A h_e}{\sqrt{15}} \text{ (cas stationnaire) } \text{ et } \overline{D} = \sqrt{15} \text{ (cas transitoire)} \tag{3.23}$$

Dans les cas des problèmes en transitoire 1-D, la méthode SUPG est capable d'une bonne précision comparée à la MEF (méthode de Galerkin). Par ailleurs, Hughes et collègues (1996) ont montré qu'en ajoutant un terme additionnel (*discontinuity capturing term*), on peut faire disparaître les sauts (*overshoot, undershoot*) qui persistent dans la solution aux voisinages de discontinuités. Cette méthode a été améliorée afin de traiter le cas des écoulements complexes multidimensionnels. De plus, plusieurs chercheurs (Brooks et Hughes, 1982; Hughes, 1987) l'ont utilisé dans le cadre de la résolution des équations de *Navier-Stokes*. L'application multidimensionnelle de la méthode SUPG sort du cadre de cette étude. Ainsi, on se limitera seulement à l'analyse des problèmes en 1-D.

Dans l'expression (3.22), lorsque $\bar{D} = 0$, on obtient l'approximation par la méthode standard de Galerkin ($\bar{W} = \psi$). Par contre, lorsque $\bar{D} \neq 0$, la discrétisation par la méthode de décentrage est obtenue. Dans les deux cas, la résolution donne des valeurs nodales exactes de la solution d'un système purement dispersif $Pe = 0$ ou purement convectif ($Pe \rightarrow \infty$). Pour obtenir une valeur nodale exacte de la solution du système pour toutes les plages du nombre de Péclet, Brooks et Hughes (1982) ont montré qu'il faut choisir une valeur optimale de $\bar{D}$ donnée par (3.24)

$$\bar{D}_{\text{optimal}} = \coth(Pe) - \frac{1}{Pe} \quad (3.24)$$

De plus, si $\overline{D}$ est au-dessus de la valeur critique donnée par (3.25), la solution ne présente jamais d'oscillation numérique.

$$\overline{D}_{\text{critical}} = 1 - \frac{1}{P_e} \quad (3.25)$$

D'autres études ont montré que l'effet de la valeur $\overline{D}$ n'est pas important sur la solution d'approximation lorsque le terme source f de l'équation gouvernant est une constante. Par contre, lorsque f est fonction de z , l'influence du nombre de Péclet Pe devient très importante. Ainsi, dans le cas d'un problème 1-D fortement convectif avec un terme de source variable, la méthode SUPG donne des valeurs nodales exactes, contrairement à la différence finie décentrée (DFD) qui elle donne des résultats erronés. Ce constat est très intéressant quand on considère les procédés chimiques. Dans les problèmes de type convection-diffusion-réaction, le terme de la réaction peut provoquer le même effet que le terme f . En effet, la cinétique de la réaction fait intervenir une variable dépendante, laquelle variable est fonction de z . Ceci va donc induire un effet identique sur $\overline{D}$ même si f est constant.

Dans le cas transitoire, le choix de la diffusion artificielle doit se faire de façon à augmenter la précision autour des couches frontières. Toutefois, Brooks et Hughes (1982) soutiennent que dans le cas des problèmes transitoires, le choix de la fonction poids est plus important que la précision de la diffusion artificielle. Ainsi dans

l'utilisation de la méthode SUPG, la diffusion artificielle $\overline{D}$ peut être déterminée par l'une ou l'autre des deux expressions (3.23) et (3.24).

3.6 La méthode (SU+C)/PG

La méthode SUPG est très utilisée dans la résolution des équations de convection-diffusion et de Stokes (Franca et Hughes, 1988; Hughes et Franca, 1987, 1988; Hughes et al., 1989). Cette popularité est due à sa consistance avec la formulation variationnelle de Galerkin et à son efficacité à éliminer les oscillations numériques présentes dans les solutions d'approximations obtenues avec les méthodes traditionnelles de Galerkin. Cependant, un autre problème existe dans le cas des équations de type convection-diffusion-réaction. En effet, dans le cas des problèmes avec un terme de réaction dominant, des oscillations peuvent apparaître dans la solution numérique aux voisinages des discontinuités, même avec un terme de convection nul.

Afin de palier à cette situation, Tezduyar et Park (1986) ont introduit une nouvelle fonction de perturbation proportionnelle au gradient de la fonction d'interpolation standard mais avec une constante de proportionnalité différente de celle utilisée dans le cas de la méthode SUPG. Cette méthode appelée DRD a pour but de conduire à des solutions nodales exactes dans le cas des problèmes en 1-D, quand le terme de la réaction est plus important par rapport aux termes de diffusion et/ou de convection.

$$\overline{W} = W + p_{\text{DRD}} \quad (3.26)$$

$$p_{\text{DRD}} = \lambda_{\text{DRD}} \left(\frac{N_R}{4\text{Pe}} \right) h_e \frac{\partial W}{\partial z} \quad (3.27)$$

où $\lambda_{\text{DRD}}(\chi)$ est une fonction du nombre de Péclet Pe et du nombre de réaction N_R , dont l'expression est donnée par (3.28)

$$\lambda_{\text{DRD}}(\chi) = \frac{1}{2} \frac{\left(-\coth(\chi) + \chi \left[\frac{1}{\sinh(\chi)^2} + \frac{4}{6} \right] \right)}{1 - \chi \coth(\chi)} \quad (3.28)$$

La nouvelle perturbation ainsi introduite dans la résolution des équations de convection-diffusion-réaction participe non seulement à stabiliser le terme de convection (si présent) mais aussi celui de la réaction. La principale critique de cette approche réside dans le choix de la quantité de perturbation à ajouter pour satisfaire le cas où la convection et la réaction sont simultanément présentes.

Basé sur ces conclusions, Idelsohn et collègues (1996) ont introduit la méthode (SU+C)/PG qui est une combinaison de la méthode SUPG et d'une autre méthode appelée CPG (Centered Petrov-Galerkin). La méthode (SU+C)/PG est applicable dans tous les cas des problèmes de convection-diffusion-réaction (toutes les plages du nombre de Péclet et du nombre de réaction). Cette méthode consiste à utiliser une fonction de

perturbation $p_{(SU+C)/PG}$ qui permet de compenser l'effet potentiel de déstabilisation du terme de la réaction. La fonction test modifiée s'écrit alors :

$$\overline{W} = W + p_{(SU+C)PG} \quad (3.29)$$

$$\text{avec } p_{(SU+C)PG} = \lambda h_e \frac{\partial W}{\partial z} + \gamma P_2 \quad (3.30)$$

Dans cette équation, P_2 est un polynôme donné par l'équation (3.31). Les grandeurs λ et γ sont des constantes de proportionnalités ($0 \leq \lambda \leq \frac{1}{2}$ et $0 \leq \gamma \leq 2$) dont les valeurs dépendent de Pe et NR . Les expressions de ces constantes de proportionnalités et fonctions sont données par (3.32) à (3.35).

$$P_2(\xi) = -\frac{1}{4} \left(1 - \xi^2 \right) \text{ avec } \xi \leq 1 \quad (3.31)$$

où ξ désigne la coordonnée sur l'élément du maillage. Lorsque le nombre de Péclet Pe et le nombre de réaction NR sont faibles, les constantes λ et γ s'expriment comme

$$\lambda \approx \frac{Pe}{6} \left(1 - \frac{2}{15} NR \right) \quad (3.32)$$

$$\gamma \approx \frac{NR}{4} \left(1 - \frac{7}{60} NR \right) \quad (3.33)$$

Dans le cas où la réaction est nulle ($NR = 0$), les constantes λ et γ sont données par les expressions (3.34) et (3.35)

$$\text{pour } N_R = 0 \quad \begin{cases} \lambda \approx \frac{1}{2} \left(\coth(Pe) - \frac{1}{Pe} \right) \\ \gamma \approx 0 \end{cases} \quad (3.34)$$

$$\text{pour } Pe = 0 \quad \begin{cases} \lambda \approx 0 \\ \gamma \approx 12 \frac{\cosh(\sqrt{NR}) (NR/6 - 1) + (1 + NR/3)}{NR (1 + \cosh(\sqrt{NR}))} \end{cases} \quad (3.35)$$

À partir des conclusions précédentes, on peut alors montrer que l'équation (3.29) peut s'interpréter comme la formulation généralisée de la fonction test des méthodes de Galerkin, SUPG, DRD et (SU+C)/PG. Ceci se justifie dans les expressions suivantes :

$\lambda = 0$	$\gamma = 0$	Galerkin	
$\lambda = \coth(Pe) - \frac{1}{Pe}$	$\gamma = 0$	SUPG	
$\lambda = \lambda_{\text{DRD}}(NR/4Pe)$	$\gamma = 0$	DRD	
$\lambda = \lambda_{\text{SU+C/PG}}(Pe, NR)$	$\gamma = \gamma_{\text{SU+C/PG}}(Pe, NR)$	SU + C/PG	(3.36)

3.7 Application des méthodes de décentrage

Cette section présente l'utilisation des méthodes de résolution par décentrage dans l'analyse du problème de convection-diffusion-réaction. Le modèle mathématique utilisé est celui introduit à la section 2.6.1 de ce rapport. Les méthodes de décentrage SU et SUPG sont considérées à cet effet. Tout comme dans le cas de la méthode de Galerkin (MEF), on s'intéresse aux caractéristiques de la solution d'approximation des méthodes SU et SUPG pour différentes plages du nombre de dispersion. Ainsi, on analyse un

système convectif ($ND = 2 \cdot 10^{-7}$), un système intermédiaire ($ND = 1$) et un système dispersif ($ND = 2 \cdot 10^{+5}$)—le système dispersif n'étant toutefois pas un cas problématique. Par ailleurs, ces méthodes de décentrage sont confrontées à la méthode par alternance (MA). Toutes les simulations numériques sont faites avec le logiciel de résolution présenté à l'annexe I. Les résultats de ces différentes simulations sont présentés et discutés dans les sections suivantes.

3.7.1 La méthode SU

D'après les résultats de simulation illustrés à la figure 3.1, on constate que dans le cas du système convectif ($ND = 2 \cdot 10^{-7}$), la méthode SU élimine complètement les oscillations dans la solution numérique du problème. Par contre, elle induit une diffusion numérique excessive. Cette caractéristique de la méthode SU ne représente pas le comportement d'un réacteur piston (système fortement convectif) dans lequel la diffusion réelle est négligeable ($ND \ll 1$). Par ailleurs, dans le cas du système intermédiaire ($ND = 1$) on constate que la méthode SU ne commet pas d'erreur sur les conditions frontières à l'entrée du réacteur—ce qui n'est pas le cas de la méthode par alternance (MA) qui a le désavantage de mal traiter ces conditions frontières à l'entrée du système (faiblement dispersif). Cette caractéristique de la méthode MA est bien montrée sur le profil de la concentration dans le réacteur (courbe de droite) du système intermédiaire ($ND = 1$). On observe ainsi un important écart entre les valeurs de la concentration obtenu par SU et

MA à l'entrée du système ($z = 0$). Toutefois, les concentrations à la sortie du réacteur—obtenues par ces deux méthodes—convergent vers la même valeur.

Par ailleurs, la figure 3.2 illustre les résultats de simulation de l'influence du raffinement du maillage sur la précision de la solution numérique obtenue par la méthode SU. D'après cette figure, on voit que l'importance de la diffusion numérique induite par la méthode SU diminue avec le raffinement du maillage dans le cas du système convectif ($ND = 2 * 10^{-7}$). Ces observations confirment bien les conclusions avancées dans la section 1.2; le raffinement du maillage a pour effet de diminuer l'erreur d'approximation de la méthode variationnelle. Par ailleurs, on constate que la concentration en régime permanent—obtenue à la sortie du réacteur—converge vers des valeurs différentes en fonction du niveau de raffinement du maillage utilisé. Ceci se traduit par un écart entre les profils de concentration dans le réacteur. Dans le cas du système intermédiaire ($ND = 1$) ou dispersif ($ND = 2 * 10^{+5}$), la méthode SU semble être moins sensible à la variation du maillage. En effet, on constate que dans le cas de ces deux systèmes, les courbes de variations des concentrations dans le réacteur convergent vers la même valeur en régime permanent, indépendamment du niveau de raffinement de maillage utilisé. Ce constat se reflète aussi sur les courbes de profils de concentration dans le réacteur qui sont quasiment similaires malgré le raffinement du maillage.

3.7.2 La méthode SUPG

D'après la figure 3.3, on constate que la méthode SUPG élimine toutes les oscillations dans la solution numérique dans le cas du système convectif ($ND = 2 \times 10^{-7}$). Cependant, elle présente deux sauts autour des discontinuités : un saut avant la discontinuité (*undershoot*) et un autre après (*overshoot*). Cette caractéristique de la solution numérique d'approximation obtenue par la méthode SUPG est bien connue dans la littérature (Brooks, 1987; Brooks et al., 1986). En effet, Brooks et collègues (1986) proposent l'ajout d'un autre terme supplémentaire (*discontinuity capturing term*) dans la fonction de stabilisation de la méthode SUPG (donnée par 3.20) afin d'éliminer ces sauts qui apparaissent dans la solution d'approximation. Par ailleurs, on constate que la méthode SUPG induit une très faible (négligeable) diffusion numérique dans la solution d'approximation dans le cas du système convectif ($ND = 2 \times 10^{-7}$). De ce fait, elle représente mieux le comportement d'un réacteur piston—contrairement à la méthode SU qui introduit une diffusion numérique très importante dans la solution d'approximation du système convectif. D'après le profil de concentration dans le réacteur dans le cas du système intermédiaire ($ND = 1$), on constate que la méthode SUPG traite mieux les conditions frontières à l'entrée du réacteur que la méthode MA. Ceci se traduit une fois de plus dans le profil de concentration dans le réacteur des méthodes SUPG et MA par un important écart entre les valeurs des concentrations à l'entrée du système ($z = 0$).

L'influence du raffinement du maillage sur la précision de la solution d'approximation par la SUPG, est illustrée à la figure 3.3. Les résultats de cette étude permettent de conclure que la précision solution numérique avec l'analyse SUPG est améliorée avec le raffinement du maillage. De plus, l'influence du raffinement du maillage semble être plus marqué dans le cas du système convectif ($ND = 2 * 10^{-7}$) que dans les deux autres systèmes (intermédiaire et dispersif). Dans le cas du système convectif, on constate que un mauvais raffinement du maillage (10 mailles) induit une forte diffusion numérique dans la solution d'approximation du système. Par ailleurs, le saut avant les discontinuités prend plutôt une allure oscillatoire. Avec un raffinement du maillage de 50 à 100 éléments, la diffusion numérique induite par la méthode SUPG perd en importance et devient négligeable. De plus, les oscillations avant les discontinuités se transforment un simple saut d'amplitude plus faible.

Résultats de simulation par la méthode SU

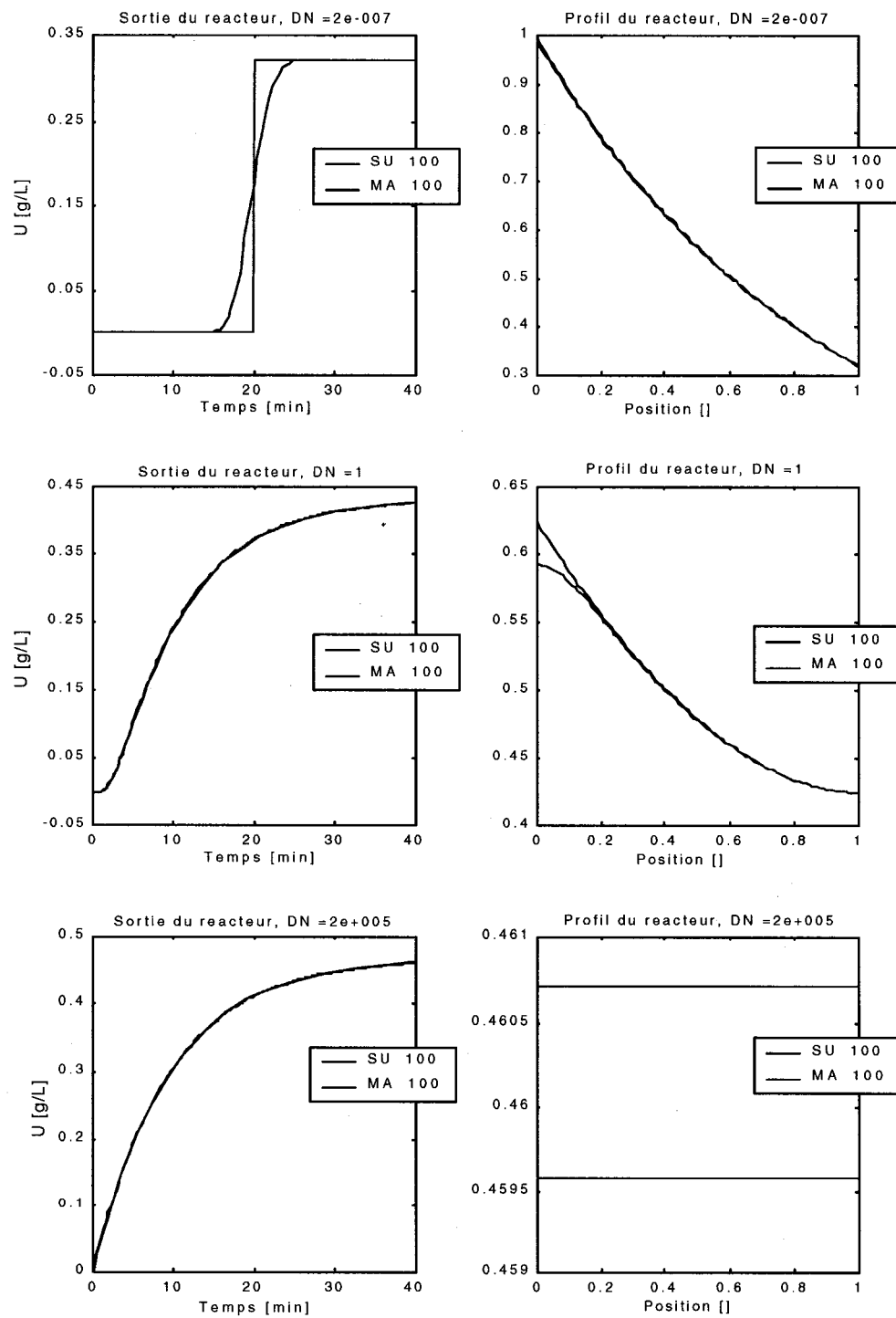


Figure 3.1 Validation de la méthode SU

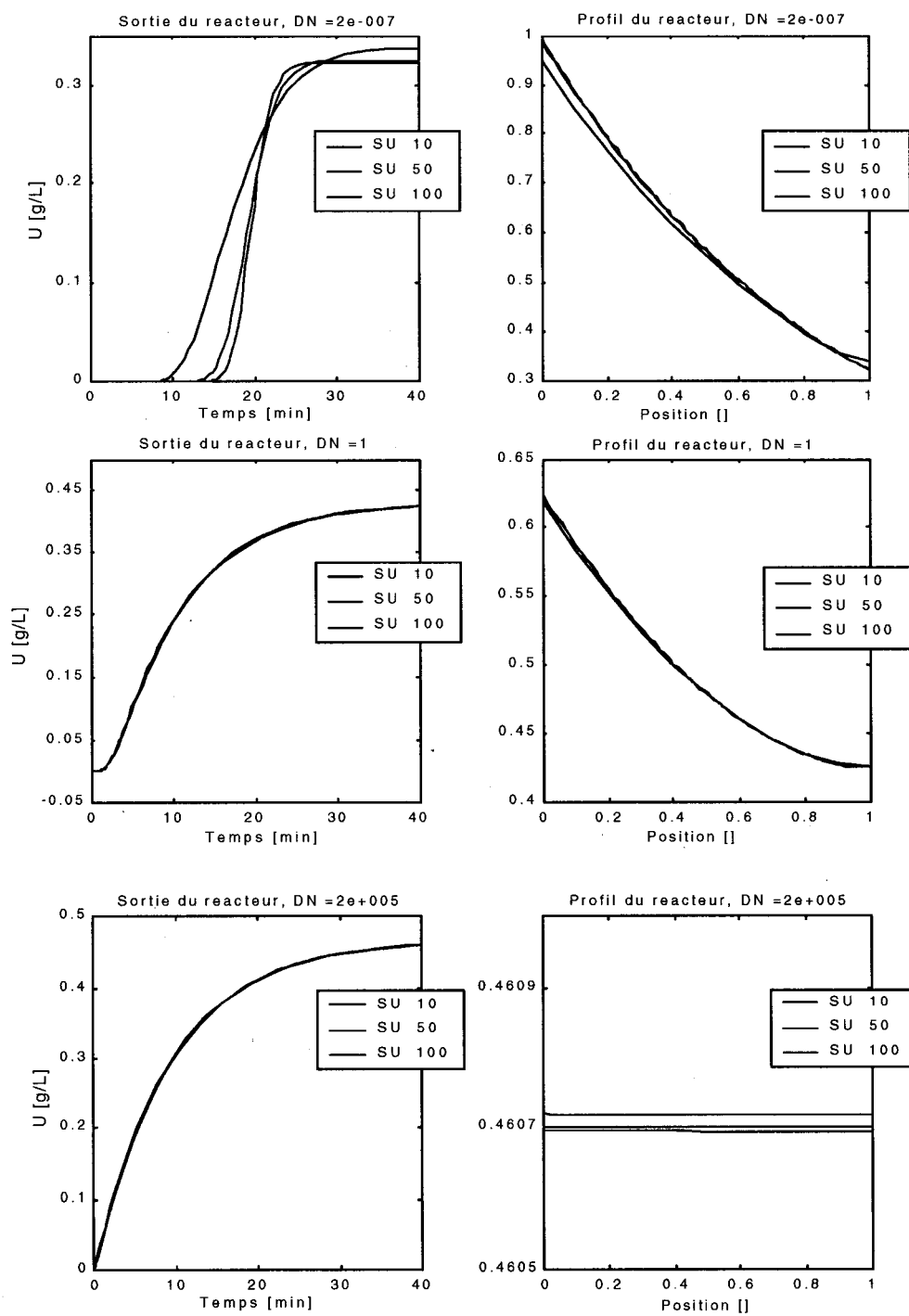


Figure 3.2 Méthode SU : Influence du maillage

Résultats de simulation par la méthode SUPG

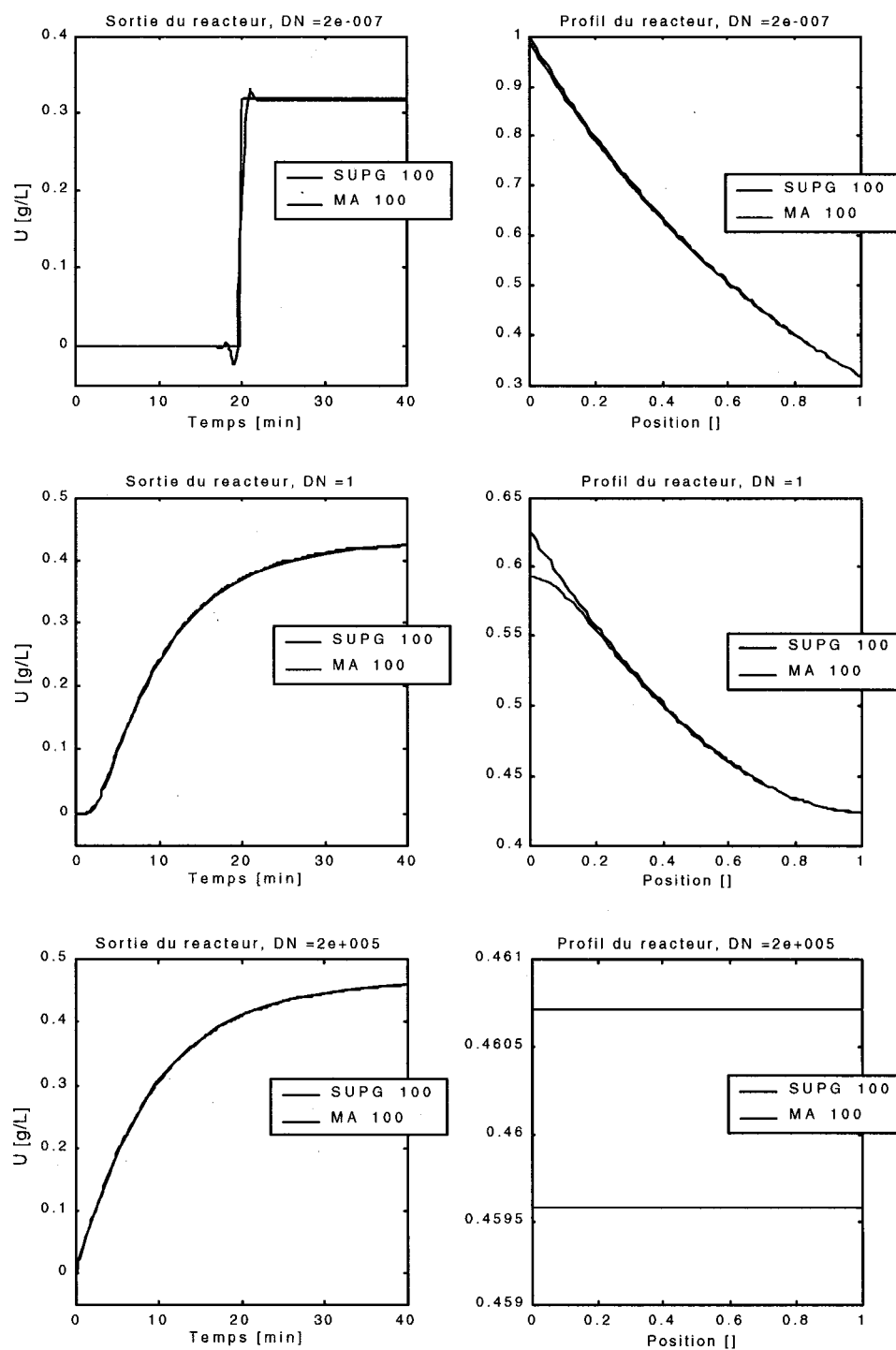


Figure 3.3 Validation de la méthode SUPG

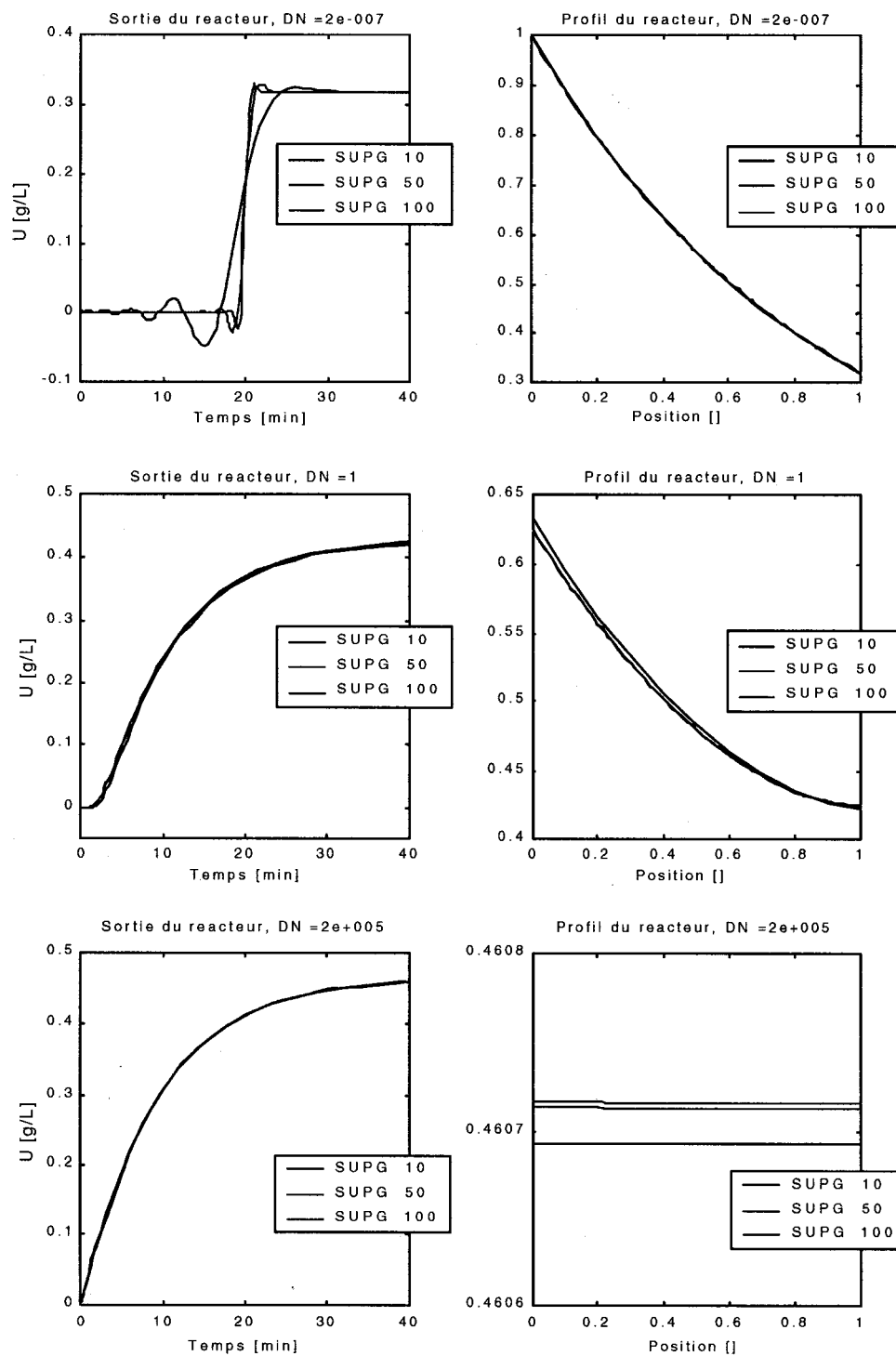


Figure 3.4 Méthode SUPG : Influence du maillage

3.7.3 Temps de simulation et cinétique de réaction

La rapidité d'un algorithme de résolution est un critère très important dans l'analyse numérique des systèmes. Outre la précision de solution d'approximation, la rapidité de la méthode de résolution est une caractéristique très recherchée. Cette rapidité se mesure par la durée—le temps de simulation—de la méthode à déterminer la solution d'approximation du problème considéré. Dans le cas des systèmes dont le terme cinétique est non-linéaire, la formulation du problème par les méthodes variationnelles (MEF, SU, SUPG) conduit à des matrices dont la grosseur des expressions est importante. Ceci se traduit, lors de la résolution du problème non linéaire, par des temps de résolution important. Afin d'évaluer le temps de simulation des méthodes variationnelles (MEF, SU, SUPG), on se propose de résoudre le problème CDR donnée par l'équation (3.37).

$$\frac{\partial u}{\partial t} + A \frac{\partial u}{\partial z} - D \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} + ku^\alpha = 0 \quad (3.37)$$

Pour ce faire, on considère différentes cinétiques chimiques du terme de réaction en faisant varier l'ordre de la réaction α entre 0 et 4. Par ailleurs, on utilise les valeurs des constantes A , D , k ainsi que les conditions frontières et initiales du modèle linéaire défini à la section 2.1.6 de ce présent rapport. De plus, cette analyse est faite pour un système convectif ($ND = 2 \cdot 10^{-7}$), un système intermédiaire ($ND = 1$) et un système dispersif ($ND = 2 \cdot 10^{+5}$). Le niveau de raffinement du maillage considéré est de 50 éléments. Les résultats de cette analyse sont illustrés à la figure 3.5.

Dans le cas d'une cinétique de réaction linéaire— $\alpha \in \{0, 1\}$, on constate que les temps de simulation de la méthode (MA) et des méthodes variationnelles (MEF, SU, SUPG) ne changent quasiment pas lorsque l'ordre de la réaction passe de 0 à 1. Cette constante du temps de simulation s'explique par le fait que, la formulation variationnelle (MEF, SU et SUPG) du problème CDR dans le cas d'une cinétique de réaction linéaire, aboutit à un système d'ODEs sous forme matricielle et dont les éléments des matrices sont numériques. La taille du modèle global à résoudre reste donc fixe car la dimension des matrices—résultantes de la formulation variationnelle—ne change pas lorsque l'ordre de la réaction passe de 0 à 1. La résolution du problème dans le cas d'une cinétique linéaire aboutit donc à un temps de simulation constante pour les méthodes variationnelles. Cependant, l'agrandissement de la zone de cinétique linéaire—illustré à la figure 3.6—montre que les méthodes variationnelles (MEF, SU, SUPG) donnent des temps de simulation plus faibles que la méthode par alternance MA. Ce dernier constat s'explique par le fait que la méthode MA utilise une résolution en séquence du problème CDR (convection + diffusion + réaction) à chaque $\frac{1}{2}$ pas de temps—donc une boucle d'instruction plus longue, alors que les méthodes MEF, SU et SUPG aboutissent à la solution du problème CDR linéaire par une simple inversion de matrice.

Dans le cas d'une cinétique de réaction non-linéaire— $\alpha \in \{2, 3, 4\}$, le temps de simulation des méthodes variationnelles (MEF, SU, SUPG) augmente avec l'ordre de la réaction—le terme de réaction devient de plus en plus fortement non-linéaire. Cette augmentation des temps de simulation des méthodes variationnelles s'explique par une

croissance des expressions algébriques du système d'ODEs lorsque l'ordre de la réaction passe de 2 à 4. En effet, la formulation du problème CDR n'aboutit pas toujours à un système d'ODEs (modèle global) pouvant s'écrire sous forme matricielle. Lorsque la cinétique de la réaction est non-linéaire, on ne peut pas écrire le modèle global sous forme matricielle, mais plutôt comme une fonctionnelle des variables primaires. Le modèle global à résoudre n'est donc pas sous une forme compact. La résolution du problème est donc plus demandant au niveau de la mémoire CPU de l'ordinateur, d'où un temps de simulation plus long. Par ailleurs, la formulation des méthodes SUPG et SU consiste à modifier la fonction test standard de la méthode de Galerkin (MEF) avec l'addition d'un terme de stabilisation. L'ajout de ces termes de stabilisation dans les fonctions tests contribue à augmenter les termes de l'expression algébrique de la forme faible; ce qui se traduit aussi par une augmentation des termes des expressions algébriques du système d'ODEs. Ainsi, SUPG génère un modèle global dont les expressions algébriques contiennent plus de termes que la méthode SU car elle ajoute un terme de stabilisation plus complexe dans la fonction test standard—alors que la formulation SU ne se limite qu'à l'ajout d'une simple constante. Ceci se traduit très bien à la figure 3.5 : la méthode SUPG donne des temps de simulation plus élevé que la méthode SU.

Par ailleurs, le temps de simulation par la MA reste constant et sensiblement identique dans le cas linéaire— $\alpha \in \{0, 1\}$ et dans le cas non-linéaire— $\alpha \in \{2, 3, 4\}$. Ceci s'explique par le fait que la méthode par alternance (MA) résout le problème en divisant

les étapes de résolution en trois sous-problèmes (convection + diffusion + réaction)—contrairement à l’analyse avec les méthodes variationnelles (MEF, SU, SUPG) qui font une résolution du problème en une seule étape. Ainsi, un changement de l’ordre de la réaction n’affecte que l’étape de résolution du sous-problème de la réaction qui est réalisé avec une intégration directe du terme de la réaction. Par conséquent, l’utilisation d’un intégrateur peu sensible à la non-linéarité (tel que la fonction ODE15S utilisé par MA) dans l’analyse du terme de la réaction se traduit par des temps de résolution constants pour toutes les cinétiques de réaction considérées dans cette étude.

Par ailleurs, on constate que pour une cinétique de réaction donné, les temps de simulation de toutes les méthodes diminuent en importance au fur et à mesure qu’on passe du système convectif ($ND = 2 \cdot 10^{-7}$) au système dispersif ($ND = 2 \cdot 10^{+5}$). Cette diminution peut s’expliquer par le fait que plus le nombre de dispersion ND augmente, plus la solution du problème CDR est stable—car on s’éloigne du cas problématique qui correspond à $Pe \gg 1$. Ainsi, on peut déduire que le temps de simulation du problème CDR est aussi fonction de la stabilité de la solution. Autrement dit, le temps de simulation de chaque méthode utilisée, est fortement influencé par la capacité de cette méthode à stabiliser la solution du problème (ou à réduire les oscillations dans la solution dans le cas $ND \ll 1$). Toutefois, on note que les temps de simulation des méthodes considérées sont plus dépendants de l’importance des expressions algébriques dans le modèle global (ODEs) du problème CDR.

Temps de simulation des méthodes FEM, SU, SUPG et MA

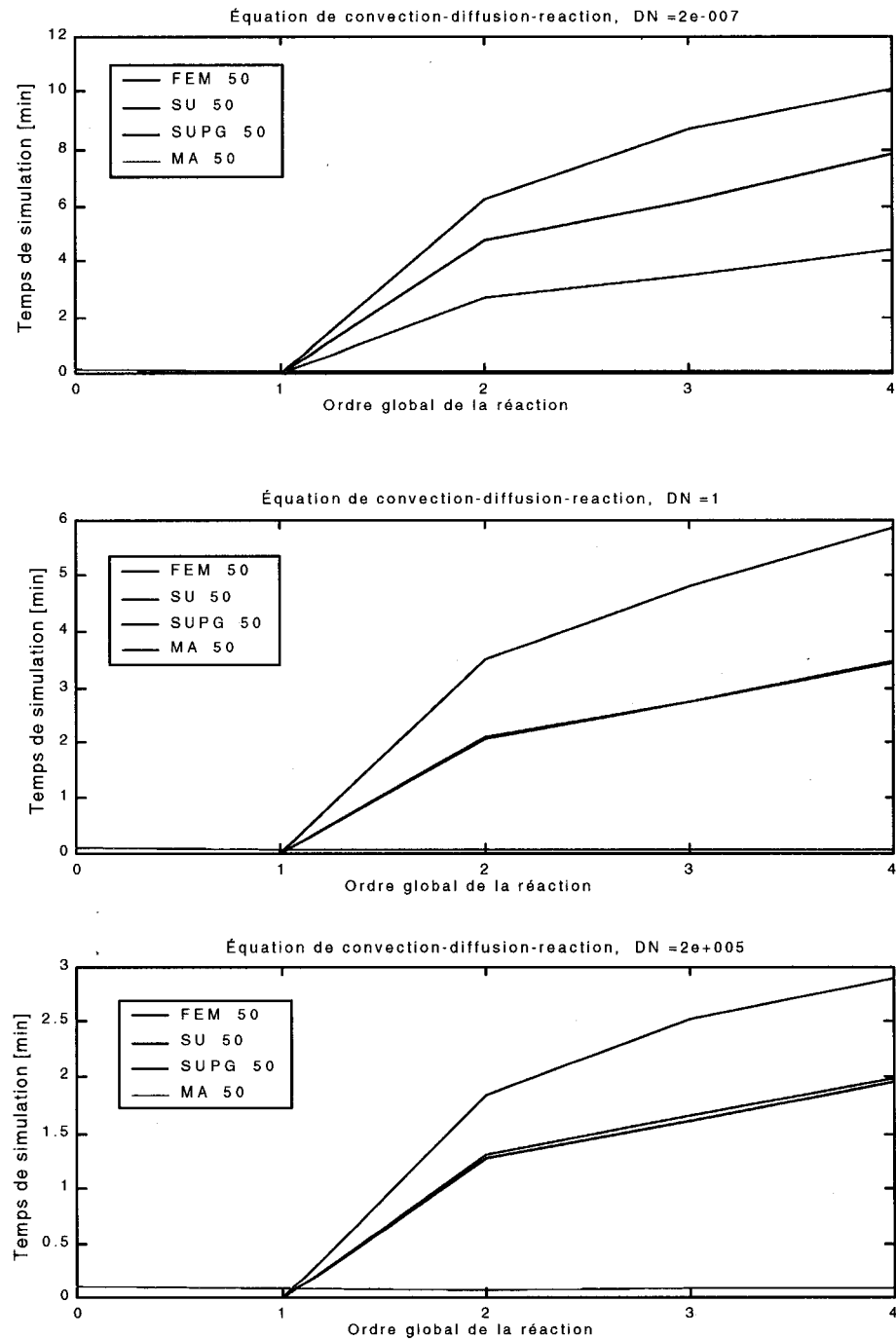


Figure 3.5 Influence de l'ordre de la réaction sur le temps de résolution

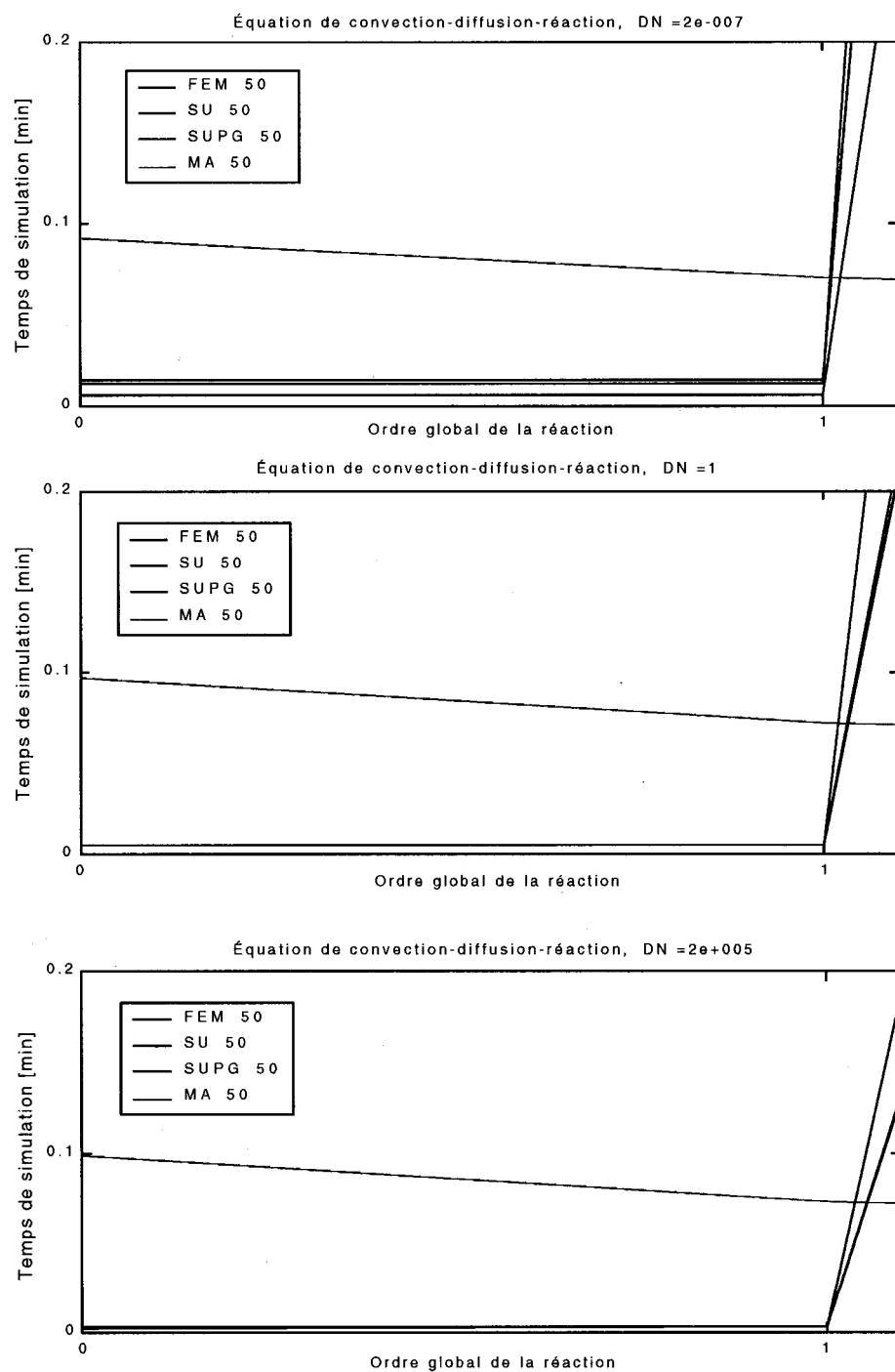


Figure 3.6 Temps de simulation : agrandissement de la zone de cinétique linéaire

CHAPITRE 4

LA MÉTHODE DE RÉOLUTION MIXTE

La *méthode mixte* (MX)—ou ‘*méthode de découplage de phénomènes mixtes*’—est une technique de résolution utilisée dans l’analyse des problèmes de convection-diffusion-réaction (CDR). Cette stratégie permettant de combiner les caractéristiques de plusieurs méthodes dans la formulation et la résolution des EDP de type CDR. D’une part, ce chapitre introduit les motivations qui ont été à la base du développement d’un tel algorithme. Par la suite, une description détaillée ainsi que les différentes étapes de la mise en œuvre de la méthode mixte sont présentées. Le chapitre conclut avec une application de l’algorithme de résolution mixte dans l’analyse du problème CDR.

4.1 Motivations

4.1.1 Nécessité d’un algorithme rapide et précis

Les chapitres précédents ont permis de montrer que la résolution du problème de convection-diffusion-réaction peut être problématique dans le cas des systèmes convectifs ($Pe \gg 1$). En effet, la solution d’approximation obtenue avec une analyse par avec la méthode de MEF présente des oscillations numériques—alors que celle obtenue avec la méthode SU est sujette à une diffusion numérique excessive (même si le système

est fortement convectif). Cependant, la méthode SUPG élimine les oscillations dans la solution d'approximation. De plus, elle n'induit pas de diffusion numérique dans les systèmes fortement convectifs. Malheureusement, la méthode SUPG (tout comme les méthodes FEM et SU) est très lente à simuler le problème CDR lorsque la cinétique de réaction est fortement non-linéaire. Une alternative serait donc la méthode par alternance (MA) qui est un algorithme rapide et aussi capable d'éliminer les oscillations numériques dans le cas du système convectif—en plus de ne pas introduire de diffusion numérique dans la solution d'approximation. Mais comme il a été montré dans les résultats de simulation de ce rapport—et dans les travaux de Renou (2000)—la méthode MA manque de précision quant au traitement des conditions frontières dans le cas du système faiblement dispersif ($DN \cong 1$).

En somme, aucune des méthodes FEM, SU, SUPG et MA ne répond *complètement* à l'analyse efficace des équations de type CDR (différentes plages du nombre de Péclet, cinétique de réaction quelconque). Par conséquent, le développement d'un nouvel algorithme de résolution, capable de permettre une analyse *précise* et *rapide* du problème CDR, est donc justifié.

4.1.2 Formulation adéquate du problème CDR

La résolution du problème d'écoulement simple—donnée par (4.1)—est bien couverte dans la littérature.

$$\frac{\partial u(z,t)}{\partial t} + A \frac{\partial u(z,t)}{\partial z} - D \frac{\partial^2 u(z,t)}{\partial z^2} - f = 0 \quad (4.1)$$

En effet, il existe plusieurs méthodes de résolutions (MEF, MCO, MMC, MVF, MA, SUPG, SU, etc.) adaptées à l'approximation de la solution du problème de convection-diffusion. La formulation du problème par ces méthodes peut dans certains cas être chose aisée. Mais la résolution du système final en est autrement. Dans le cas des méthodes variationnelles, la formulation du problème aboutit à des systèmes d'équations différentielles ordinaires (ODE) qui doivent alors être résolus de façon numérique. La difficulté principale réside alors dans la résolution numérique des systèmes d'ODEs. En effet, on doit alors faire appel à des logiciels de simulation pour faire l'approximation de la solution du problème. Dans le cas où un tel logiciel de simulation n'est pas disponible, la programmation d'un nouveau logiciel adapté à la résolution du système d'ODEs est nécessaire. De nos jours, il existe différentes méthodes de simulation préprogrammées et adaptées à la résolution du problème défini par (4.1).

Dans l'industrie chimique, les modèles mathématiques des procédés sont décrits par des EDP de type convection-diffusion-réaction. Ce type de modèle représente un écoulement avec une réaction chimique. Dans le cas d'une réaction faisant intervenir un seul réactif, le modèle mathématique est décrit par (4.2) :

$$\frac{\partial u(z,t)}{\partial t} + A \frac{\partial u(z,t)}{\partial z} - D \frac{\partial^2 u(z,t)}{\partial z^2} - ku^a = f \quad (4.2)$$

Afin de résoudre le problème CDR, les logiciels et algorithmes de résolution—adaptés à l'analyse du problème convection-diffusion (i.e. sans terme de réaction)—doivent être reformulés et/ou reprogrammés pour tenir compte de l'ajout du terme de réaction. Malgré la diversité des cinétiques de réaction que l'on trouve dans l'industrie chimique, une formulation différente du problème (4.2) qui tient compte de chaque type de cinétique chimique serait une tâche possible—mais plutôt inefficace. On peut alors se poser la question suivante :

- ✓ Peut-on trouver une formulation adéquate du problème CDR défini par (4.2) de façon à ne pas toujours avoir à reformuler et/ou reprogrammer le sous-problème convection-diffusion à chaque fois que le terme de la réaction change?

La recherche d'une solution à cette question est à la base du développement d'un nouvel algorithme de résolution capable de permettre une telle formulation du problème CDR.

4.2 Faisabilité

Les exigences de ce nouvel algorithme de résolution—mentionnées à la section motivations, impliquent une séparation naturelle du problème CDR en deux sous-problèmes : un « sous-problème hydrodynamique » composé des termes de convection et de diffusion; et un « sous problème chimique » ne comptant que le terme de réaction. Cette séparation est d'autant plus justifiée que lors de l'analyse de l'équation CDR non-linéaire, la lenteur de la méthode SUPG—et des méthodes variationnelles en général—

est causée par la présence du terme de réaction qui participe à l'augmentation des expressions algébriques dans le modèle global (ODEs) du problème CDR non-linéaire. En se basant sur ces deux constats, une nouvelle formulation efficace du problème CDR consiste à une séparation du problème global en deux sous-problème : sous-problème hydrodynamique—source des oscillations numériques—et un sous-problème chimique—source de l'augmentation des expressions algébriques dans le modèle global, donc du temps de simulation des méthodes variationnelles.

Par ailleurs, la figure (4.1) illustre les résultats de simulation du problème de type convection-diffusion (sans terme de réaction). Ainsi, on constate que les méthodes variationnelles SUPG, SU et FEM sont des algorithmes de résolution très rapide pour simuler le problème de convection-diffusion. En effet, les méthodes variationnelles donnent un temps de simulation moyen de ½ seconde—donc plus rapide que la méthode MA qui a un temps de simulation d'environ 5 secondes—pour un maillage de 50 éléments. De plus, il a été aussi montré à la section (3.7.2) que la méthode SUPG élimine les oscillations numériques et n'induit pas de diffusion numérique dans la solution d'approximation du système fortement dispersif ($ND = 2 * 10^{-7}$).

En ce basant sur ces conclusions, on peut donc envisager une résolution séparée du sous-problème hydrodynamique par la méthode SUPG qui conduirait non seulement à une solution dépourvue d'oscillations et de diffusion numérique, mais aussi à réduire les temps de simulation.

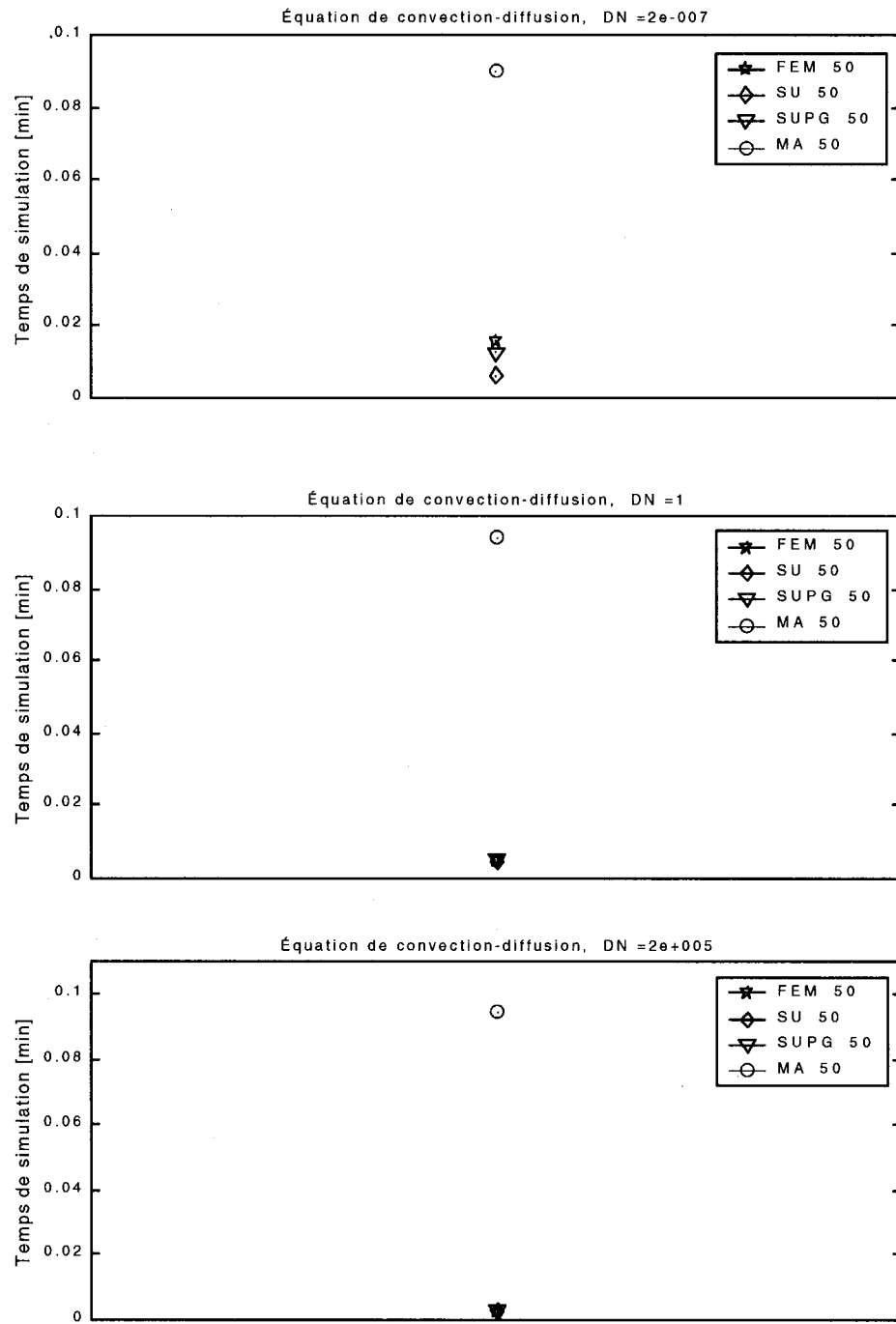


Figure 4.1 Temps de simulation : cas de l'équation convection-diffusion

Il faut alors trouver une méthode de résolution du sous-problème chimique rapide—peu importe la cinétique de la réaction. Une alternative consiste à utiliser un intégrateur—tel que la fonction ODE15S (Shampine et Reichelt, 1997) de Matlab—décrite à l'annexe I. Par ailleurs, en séparant la résolution du problème CDR en deux sous-problèmes (hydrodynamique et chimique), on peut formuler le sous-problème hydrodynamique indépendamment du sous-problème chimique. Ainsi, un changement dans le sous-problème chimique ne nécessiterait pas forcément une reformulation du sous-problème hydrodynamique—et vice-versa.

En somme, on peut donc dire qu'il est possible de mettre en œuvre un nouvel algorithme de résolution basé sur un découplage du problème global en deux sous-problèmes hydrodynamique et chimique. Cette analyse par découplage permettrait non seulement une simulation plus rapide des modèles non-linéaire (faible temps de simulation), mais également d'aboutir à une bonne approximation de la solution.

4.3 Description et mise en œuvre

4.3.1 Schéma de résolution

La méthode résolution mixte (ou méthode de résolution de phénomènes mixtes) est introduite pour la première fois dans ce rapport. Cette approche sépare les phénomènes de nature différente qui se retrouvent dans un même problème afin de les analyser avec des algorithmes numériques spécialisés. Dans le cas du problème CDR, la méthode de

résolution mixte consiste à découpler la formulation du problème en sous-problèmes hydrodynamique « convection+diffusion » et chimique « réaction ». Le découplage du problème CDR en sous-problèmes repose sur le fait que dans un écoulement accompagné d'une réaction chimique, on distingue des effets d'origine hydrodynamique (convection et diffusion) et chimique (réaction). Ainsi, le problème global peut être vu comme un problème hydrodynamique couplé à un problème chimique. Le schéma de résolution de l'algorithme mixte dans le cas du problème CDR est illustré à la figure 4.2.

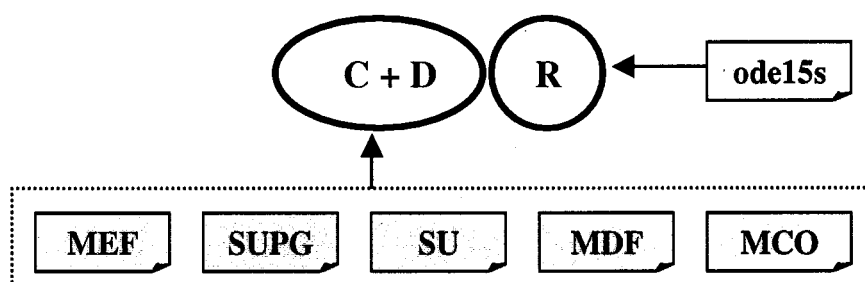


Figure 4.2 Schéma de résolution de la méthode mixte

Ce schéma de résolution préconise une formulation découplée du problème CDR. Ainsi, le sous-problème hydrodynamique peut être formulé et analysé avec une méthode au choix—telle que la méthode MEF, SUPG, SU, MDF, MCO ou tout autre méthode. Le choix de la méthode d'analyse du sous-problème chimique dépend de la forme du terme de la réaction. Dans le cas d'une cinétique chimique ordinaire (fonction simple ou une constante), toute technique d'intégration peut être utilisée. Mais lorsque la forme du terme cinétique est plus complexe (une intégrale, des données de laboratoires, une progression ou série mathématique, etc.), le choix de la méthode d'analyse du sous-problème chimique doit tenir compte de cette éventualité. Dans le cas des cinétiques

chimiques considérées dans le cadre de ce rapport—(fonction simple ou constante), l'analyse du sous-problème chimique peut-être élaborée avec un intégrateur comme la fonction ODE15S de Matlab (Shampine et Reichelt, 1997). La résolution du problème global est alors faite en analysant chaque sous-problème sur un $\frac{1}{2}$ pas de temps.

L'algorithme mixte ne favorise pas une séquence de résolution des sous-problèmes hydrodynamique et chimique. En effet, d'après les résultats des simulations présentées plus loin dans ce chapitre (voir section 4.4.6), on sait que les séquences de résolution « Hydrodynamique-Chimique » ou « Chimique-Hydrodynamique » conduisent toutes deux à la même solution d'approximation du problème CDR. Par conséquent, on peut choisir de façon arbitraire de résoudre en premier l'un ou l'autre des deux sous-problèmes. Dans le cadre de ce rapport, la séquence « Hydrodynamique-Chimique » est utilisée. Ainsi, on analyse d'abord le sous-problème hydrodynamique avec une méthode spécialisée (méthodes variationnelles). En suite, on résout le sous-problème chimique avec un autre algorithme adapté; la solution du sous-problème hydrodynamique étant utilisée comme condition initiale dans le sous-problème chimique à chaque $\frac{1}{2}$ pas de temps.

Par ailleurs, la discrétisation du domaine de résolution par la méthode des éléments finis conduit à une subdivision du système—en de mini-systèmes de taille *he* (taille d'un élément de maille). Dans le cas d'un écoulement accompagné d'une réaction, le système s'identifie à un réacteur—et chaque élément de maille se comporte comme un mini-

réacteur dont le temps de séjour est donné par l'équation (4.4)—où A désigne le coefficient de convection du système.

$$t_{\text{séjour}} = \frac{he}{A} \quad (4.4)$$

Ainsi, le $\frac{1}{2}$ pas de temps de résolution est pris égal au temps de séjour—ce qui correspond au laps de temps que met le flux pour traverser chaque élément du maillage (ou mini-réacteur). Le choix de ce $\frac{1}{2}$ pas de temps s'appuie sur le fait que dans le schéma de résolution mixte, on suppose que les phénomènes (hydrodynamique et chimique) se déroulent pendant tout le temps que le flux réactif traverse chaque mini-réacteur. Il est donc judicieux de choisir une valeur du $\frac{1}{2}$ pas de temps de résolution égale au temps de séjour dans chaque mini-réacteur.

On peut donc développer une méthode qui prend avantage de la précision de la méthode SUPG (ou d'autres méthodes variationnelles) dans l'analyse du sous-problème de convection-diffusion—et de la rapidité de l'intégrateur ODE15S (Shampine et Reichelt, 1997) pour la résolution du sous-problème chimique. Cette manière de faire une formulation découplage du phénomène hydrodynamique et chimiques suivie d'une résolution récursive des deux sous-problèmes—avec des méthodes différentes—vaut à cet algorithme l'appellation de *méthode mixte* ou *algorithme de résolution de phénomènes mixtes*.

4.3.2 Mise en oeuvre

Le schéma de résolution mixte (discuté dans la section précédente) consiste à une formulation indépendante des sous-problèmes hydrodynamiques et chimiques—suivie d'une résolution par point fixe de ces sous-problèmes. L'analyse de chaque sous-problème peut ainsi être élaborée avec la méthode de résolution appropriée. Dans le cas du problème CDR défini par (4.2), la séparation en sous-problèmes hydrodynamique et chimique revient à réécrire l'équation (4.2) sous la forme d'un système d'équations donnée par (4.3)—où les indices H et X désignent respectivement la variable du sous-problème hydrodynamique et chimique.

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial u_H(z,t)}{\partial t} + A \frac{\partial u_H(z,t)}{\partial z} - D \frac{\partial^2 u_H(z,t)}{\partial z^2} - f = 0 \\ \frac{\partial u_X(z,t)}{\partial t} = -k u_X^a \end{array} \right. \quad (4.3a) \quad (4.3b)$$

Le sous-problème hydrodynamique (4.3.a) est bien connu dans le domaine de la mécanique des fluides. Quant au sous-problème chimique (4.3.b), il constitue la base des procédés chimiques. Pour les raisons qui ont été énoncées dans la section (4.3.1), on peut choisir une séquence de résolution arbitraire '*Hydrodynamique-Chimique*'. Ainsi, on formule d'abord le sous-problème hydrodynamique—en utilisant les conditions frontières et initiales appliquées au problème global (4.2). Cette formulation peut être faite avec toute méthode de résolution adaptée à l'analyse du problème de convection-diffusion. Dans le cadre de cette étude, seules les méthodes variationnelles FEM, SU et SUPG ont été considérées à cet effet. Dans ce cas, la formulation variationnelle du sous-

problème hydrodynamique par ces méthodes conduisent à un model global définit par un système d'ODEs sous forme matricielle (voir chapitre 2 et 3).

La résolution du problème global peut alors se faire par point fixe—sur chaque $\frac{1}{2}$ pas de temps équivalant au temps de séjour *d'un volume élémentaire* du fluide en écoulement dans chaque mini-réacteur (ou élément du maillage). Chaque étape (ou cycle) de résolution débute par l'analyse du sous-problème hydrodynamique. La solution $u_H^{t_{\text{sejour}}}$ obtenue lors de la résolution du sous-problème hydrodynamique, est alors utilisée comme condition initiale dans le sous-problème chimique. Le sous-problème chimique est alors résolu sur le même $\frac{1}{2}$ pas de temps suivant (temps de séjour dans le mini-réacteur). Dans le cas présent de cette étude, la résolution du sous-problème chimique peut être élaborée avec un intégrateur à cause de la forme de la cinétique de réaction. Un choix consiste ainsi à l'utilisation de la fonction ODE15S (Shampine et Reichelt, 1997). Cette analyse permet d'aboutir à la solution $u_X^{t_{\text{sejour}}}$ du sous-problème chimique—qui est aussi la solution finale du problème global à l'étape de résolution considérée. Ceci conclut *un cycle de résolution* du problème global.

Le passage d'une étape à une autre est réalisé avec une simple translation—dans le sens d'écoulement—des volumes élémentaires entre deux mini-réacteurs contigus. Cette translation de volume élémentaire se justifie par le fait même de la caractéristique physique d'un phénomène d'écoulement. Cependant, la translation des volumes entre deux mini-réacteurs se fait par saut—et non de façon continue. Au niveau de la

résolution, cette procédure consiste à utiliser la solution du sous-problème chimique $u_X^{f_{\text{sejour}}}$ obtenue à une étape donnée, comme condition initiale du sous-problème hydrodynamique dans l'étape (ou cycle) de résolution suivante.

La programmation du logiciel de simulation de la méthode mixte peut être conduite de deux façons. La première approche consiste à utiliser un logiciel déjà existant préprogrammé pour l'analyse du problème convection-diffusion—donc du sous problème hydrodynamique. En effet, s'il existe un tel programme, la mise en oeuvre de l'algorithme mixte consiste à inter-relier ce logiciel (préprogrammé) et la méthode d'analyse du sous-problème chimique au sein de la méthode mixte. Si un tel programme n'existe pas, il faut alors le développer. Dans le cadre de ce rapport, un nouveau logiciel de simulation par l'algorithme mixte a été programmé pour des raisons de commodité.

4.3.3 Autres cas d'applications

En plus de l'analyse du problème CDR dans le cas d'un réacteur isotherme—étudié jusqu'à ce point, la méthode mixte peut être très utile dans la formulation et la résolution du problème CDR dans le cas d'un réacteur non-isotherme. En effet, contrairement au cas du réacteur isotherme, la constante cinétique de réaction est reliée à la température dans le réacteur selon la loi d'Arrhenius—donnée par l'équation (4.4).

$$k(T) = A_o e^{-Ea/RT} \quad (4.4)$$

où A_o , Ea , R et T désignent respectivement le facteur de fréquence, l'énergie d'activation de la réaction, la constante des gaz parfaits et la température absolue (exprimée en degré *Kelvin*). Le changement de la température dans le réacteur non-isotherme peut être volontaire ou provoqué par la chaleur dégagée lors d'une réaction exothermique. Ainsi, dans le cas d'un réacteur non-isotherme, la constante cinétique (donc du terme de la réaction) varie en fonction du temps. Cette dépendance du terme de la réaction complique la formulation du problème CDR par les méthodes variationnelles. Par ailleurs, tous les phénomènes chimiques ne suivent pas toujours une loi de variation définie sous forme d'une fonction mathématique (exemple d'une loi chimique sous forme d'une intégrale, d'une série/progression mathématique ou de données numériques). Dans de tels cas, une formulation variationnelle du problème global n'est pas possible. Le schéma de résolution mixte—qui consiste à une formulation découplée du problème CDR—peut alors être une méthode alternative d'analyse de ces types de problèmes.

L'application de la méthode mixte ne se limite pas à la résolution des équations CDR. En effet, elle peut être généralisée, avec succès, à tous les problèmes de type convection-diffusion- Φ , où Φ est un phénomène quelconque (électrochimique, magnétique, électrique, mécanique, etc.). L'analyse de ce problème par la méthode mixte reste identique à celle mise en oeuvre dans le cas particulier du problème CDR—mais avec une légère différence: le choix d'une méthode adaptée à l'analyse du phénomène Φ .

4.3.4 Cas de la méthode par alternance

Le schéma de résolution de la méthode par alternance (figure 4.3) consiste à séparer la résolution du problème général en sous-problèmes. Ainsi, la résolution du problème de type convection-diffusion-réaction est faite en trois étapes, à savoir: la résolution des sous-problèmes de convection, de diffusion et de réaction. La résolution du problème global consiste alors à résoudre chaque sous-problème indépendamment sur un intervalle de temps de résolution. La séquence de résolution des trois sous-problèmes est très importante car elle influence la précision de la solution numérique du problème. Toutefois, Renou (2000) a montré que la séquence de résolution qui donne les meilleurs résultats consiste à une analyse des sous-problèmes dans l'ordre «convection, diffusion, réaction».

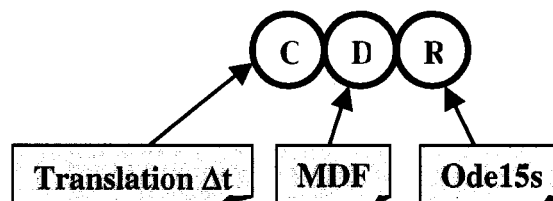


Figure 4.3 Schéma de résolution de la méthode par alternance

Il n'existe pas une variante mixte de la méthode par alternance (MA) pour la simple raison que, par construction, MA est une méthode totalement découplée—contrairement à la formulation mixte qui propose une résolution simultanée du sous-problème hydrodynamique « convection-diffusion ». Ce qui rend impossible une formulation mixte du problème CDR par la méthode par alternance.

La formulation par la méthode mixte ne découple pas la résolution du sous-problème hydrodynamique « convection-diffusion » pour les raisons suivantes. Alors que l'on peut facilement envisager une analyse de deux phénomènes de nature différente—telle que chimique et hydrodynamique—dans un même système, une étude distincte des effets d'un même phénomène au sein d'un système peut parfois causer problème. On sait que dans un système fortement convectif ($DN \ll 1$), l'effet de la convection domine sur celui de la diffusion—alors que l'effet de diffusion l'emporte sur la convection dans un système fortement dispersif ($DN \gg 1$). Mais lorsque ces deux effets de nature hydrodynamique sont sensiblement équivalents—comme dans le cas d'un système faiblement dispersif ($DN \cong 1$), on ne peut pas favoriser la convection ou la diffusion lors de l'analyse du système. Certes, des effets équivalents de convection et de diffusion affectent toujours un système de façon distincte. Cependant, ils ne sont pas nécessairement différenciables sur un laps de temps Δt quelconque. Pour cette raison, une analyse séparée des effets implique donc une détermination au préalable du '*laps de temps critique*' sur lequel on peut discriminer l'effet de la convection de celui de la diffusion dans le système—ce qui n'est pas une tâche facile. Un choix arbitraire de ce laps de temps Δt peut conduire à des résultats erronés.

La méthode par alternance utilise un $\frac{1}{2}$ pas de temps fixe de résolution Δt —peu importe l'importance des effets de convection et de diffusion au sein du système.

$$\Delta t = \frac{he}{A} \quad (4.5)$$

où A est le coefficient de diffusion et h_e représente la taille d'une maille. Le $\frac{1}{2}$ pas de temps de résolution de la méthode équivaut au '*temps de séjour*' dans un élément de maille du domaine de discrétisation. Il est donc évident que ce choix du '*laps de temps critique*' ne tient pas compte du fait que les effets de convection et de diffusion ne sont pas nécessairement dissociables dans le cas d'un système faiblement dispersif ($DN \cong 1$). Ainsi, une analyse de ce type de système par alternance peut effectivement aboutir à des mauvais résultats—sans nécessairement être le cas pour un système fortement convectif ou dispersif à cause de la différence entre les effets de convection et de diffusion. Ceci explique « peut-être » la mauvaise performance de la méthode MA dans le cas du système faiblement dispersif ($ND \cong 1$). Afin de contourner toutes ces difficultés, la méthode de résolution mixte préconise une analyse *couplée* des effets de la convection et de la diffusion—et non pas par *alternance* comme le dicte la méthode MA.

Remarque : La méthode par alternance (MA) et les méthodes mixtes (MX) sont deux algorithmes de résolution différente. Plus précisément, la méthode MA est plus proche que les méthodes de 'splitting-up' (Grygiel et Tanguy, 1991) car elles séparent toutes deux le problème CD en sous problème (Convection + Diffusion), alors que la méthode mixte fait une mise en garde quant à l'utilisation de cette approche de résolution. En effet, la similarité entre les méthodes de 'splitting-up', la méthode MA et les méthodes mixtes, réside uniquement dans la séparation/découpage du problème global en sous problèmes—sous problèmes « convection + diffusion » pour les méthodes de 'splitting-up', sous problèmes « convection + diffusion + réaction » pour MA et sous-problèmes

« hydrodynamique + chimique » pour les méthodes mixtes. Une de ces méthodes ne peut donc pas être considérée comme un cas particulier des autres—car leurs approches de découpage du problème ainsi les types de problèmes analysés sont différents.

4.4 Application

On utilise une fois de plus le modèle mathématique linéaire (voir section 2.6.1) pour illustrer les méthodes mixtes MEF-MX, SU-MX et SUPG-MX. Pour se faire, la formulation du sous-problème hydrodynamique est faite avec les méthodes SU, SUPG et MEF alors que le sous-problème chimique a été intégré la routine *ODE15S* de *Matlab* (Shampine et Reichelt, 1997). La résolution de ces modèles a été faite avec le logiciel de simulation présenté à l'annexe I. Les résultats de simulation sont discutés dans les sections qui suivent.

4.4.1 Méthode mixte MEF-MX

La figure 4.4 illustre les résultats de l'influence du maillage sur la précision de la solution d'approximation par la méthode mixte MEF-MX. D'après ces résultats, on constate qu'un raffinement du maillage permet d'améliorer la précision de la solution. De plus, dans la zone de raffinement entre 50 à 100 mailles, cette influence semble être de moindre importance que dans la zone de 10 à 50 mailles. Pour ces raisons, un raffinement de 100 mailles est utilisé pour la validation de la méthode mixte MEF-MX.

Les résultats de comparaison de la méthode mixte MEF-MX aux méthodes MEF et MA sont illustrés à la figure 4.5.

D'après la figure 4.5, on constate que dans le cas du système convectif ($DN = 2 \cdot 10^{-7}$), la méthode mixte MEF-MX n'arrive pas à éliminer les oscillations numériques dans la solution d'approximation du problème. Cependant, MEF-MX représente bien le comportement d'un réacteur convectif, car elle n'introduit pas de diffusion numérique dans la solution du problème. Par ailleurs, la méthode MEF-MX conduit à une solution dont les oscillations d'amplitudes moins importantes—comparativement à la méthode MEF. Dans le cas du système intermédiaire—i.e. $DN = 1$ (figure 4.5), on remarque que la méthode MEF-MX traite aussi bien les conditions frontières à l'entrée du réacteur. Par ailleurs, les résultats de simulation du système dispersif ($DN = 2 \cdot 10^{+5}$) montrent que les solutions d'approximation des MEF-MX et MEF sont quasi-identiques.

4.4.2 Méthode mixte SU-MX

Les résultats de simulation de l'influence du maillage (illustrés à la figure 4.6) montrent que la précision de la solution d'approximation est améliorée avec le raffinement du maillage. De plus on constate que cette influence du maillage est plus marquée dans l'intervalle de raffinement de 10 à 50 mailles—alors qu'un raffinement de maille de 50 à 100 mailles conduit à des écarts moins importants. Pour se faire on utilise un maillage

de 100 éléments lors de la comparaison des méthodes MEF-MX, MEF et MA (voir figure 4.7).

D'après la figure 4.7, on constate que la méthode SU et sa variante mixte SU-MX, conduisent à des solutions sensiblement identiques dans le cas du système convectif ($DN = 2 \cdot 10^{-7}$) et du système intermédiaire ($DN = 1$). Ainsi, la méthode SU-MX permet d'éliminer les oscillations numériques, et elle induit une diffusion numérique excessive dans la solution d'approximation du système convectif—tout comme la méthode originale SU. Par ailleurs, SU-MX traite bien les conditions frontières à l'entrée du système intermédiaire. Par ailleurs, les résultats de simulations du système dispersif ($DN = 2 \cdot 10^{+5}$) révèlent que les SU-MX et SU donnent des solutions numériques quasi-identiques.

4.4.3 Méthode mixte SUPG-MX

D'après la figure 4.8, on constate qu'un raffinement du maillage permet d'améliorer la précision de la solution d'approximation du problème CDR par la méthode SUPG-MX. Cependant, on note que l'influence du maillage sur la précision de la solution, est moins marquée dans la zone de raffinement de 50 à 100 mailles—contrairement à celle de 10 à 50 mailles. Ces constats permettent ainsi de choisir un raffinement de maillage composé de 100 mailles pour faire la validation de la méthode SUPG-MX (voir figure 4.9).

Les résultats de simulation de cette validation sont illustrés à la figure 4.9. D'après ces résultats, on constate que SUPG et SUPG-MX donnent des solutions numériques quasi-identiques dans le cas du système convectif ($DN = 2 * 10^{-7}$) et du système intermédiaire ($DN = 1$). Autrement dit, la méthode SUPG-MX élimine les oscillations numériques dans la solution d'approximation problème. De plus, elle n'induit pas une diffusion numérique importante dans le du système convectif ($DN = 2 * 10^{-7}$). Par ailleurs, la méthode SUPG-MX donne une bonne approximation des conditions frontières à l'entrée du système intermédiaire ($DN = 1$). Par ailleurs, les résultats de simulation du système dispersif ($DN = 2 * 10^{+5}$) montrent que les méthodes SUPG-MX et SUPG conduisent à des solutions d'approximation quasi-identiques.

4.4.4 Sensibilité des méthodes mixte

D'après les résultats de l'influence du maillage sur la précision des méthodes originales MEF, SU et SUPG (illustrés respectivement aux figures 2.5, 3.2 et 3.4), on constate que le passage d'un raffinement de 10 à 50 mailles, a un impact moins marquée sur la précision de la solution d'approximation—contrairement au cas des méthodes mixtes équivalentes (FEM-MX, SU-MX, SUPG-MX). Cette situation peut s'expliquer par le fait que, les méthodes mixtes préconisent une résolution du problème global en sous-problèmes (Hydrodynamique + Chimique) sur des intervalles de $\frac{1}{2}$ pas de temps successifs.

En effet, on sait que le $\frac{1}{2}$ pas de temps de résolution utilisé dans le schéma de résolution mixte, est égal au temps de séjour du fluide dans chaque élément de maille (ou mini-réacteur). Il est donc évident qu'un changement du maillage entraîne un changement de la valeur du temps de séjour dans chaque mini-réacteur—et donc du $\frac{1}{2}$ pas de temps de résolution dans le cas des méthodes mixtes. Par conséquent, un mauvais raffinement du maillage (10 mailles) équivaut à un $\frac{1}{2}$ pas de temps de résolution plus élevé—et donc à un temps de séjour plus long dans chaque mini-réacteur. De ce fait, dans le cas de l'analyse des problèmes CDR par l'algorithme mixte, la conséquence directe d'un mauvais raffinement du maillage se traduit par réaction chimique plus marquée dans chaque mini-réacteur. Cette situation peut entraîner des écarts importants entre les solutions d'approximations obtenues pour différents niveaux de raffinement de maillage—surtout dans le cas d'une réaction chimique à très rapide.

On peut alors se demander pourquoi cette situation n'est pas observée dans le cas des méthodes originales (MEF, SU, SUPG). En fait, on sait que la formulation variationnelle du problème CDR aboutit à un système d'ODEs, qui est par la suite résolu avec un intégrateur de temps. Dans le cadre de cette étude, on utilise la fonction ODE15S de Matlab qui a un $\frac{1}{2}$ pas de temps de résolution fixe—peu importe le niveau de raffinement de maillage utilisé. Par conséquent, l'*avancement de la réaction chimique* est identique dans chaque mini-réacteur. Ainsi, on n'observera pas des écarts très important comme ceux des méthodes mixtes. On peut donc conclure que les méthodes

mixtes sont plus sensibles au raffinement du maillage comparativement aux méthodes variationnelles.

Résultats de simulation par la méthode MEF-MX

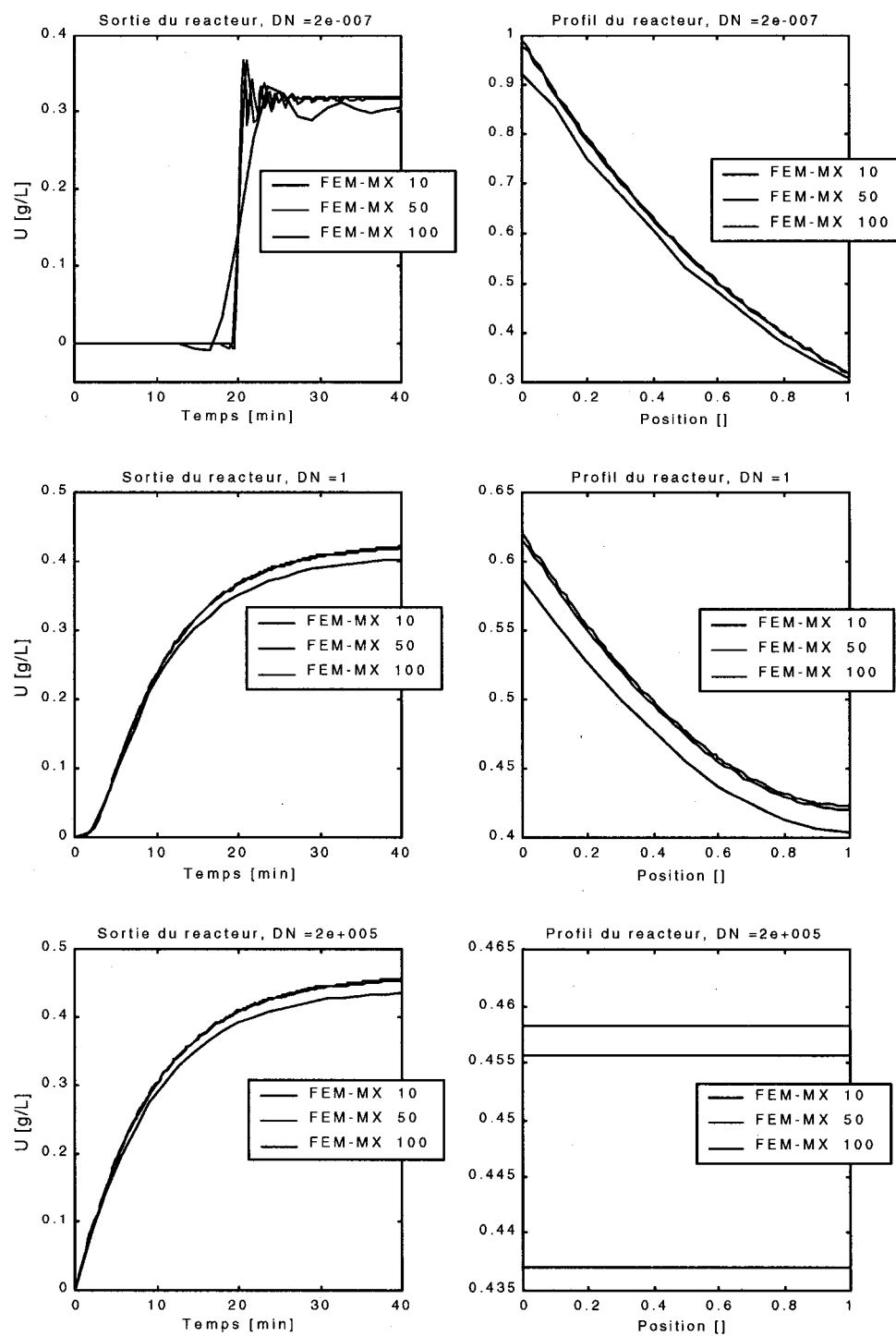


Figure 4.4 Méthode mixte MEF-MX: Influence du maillage

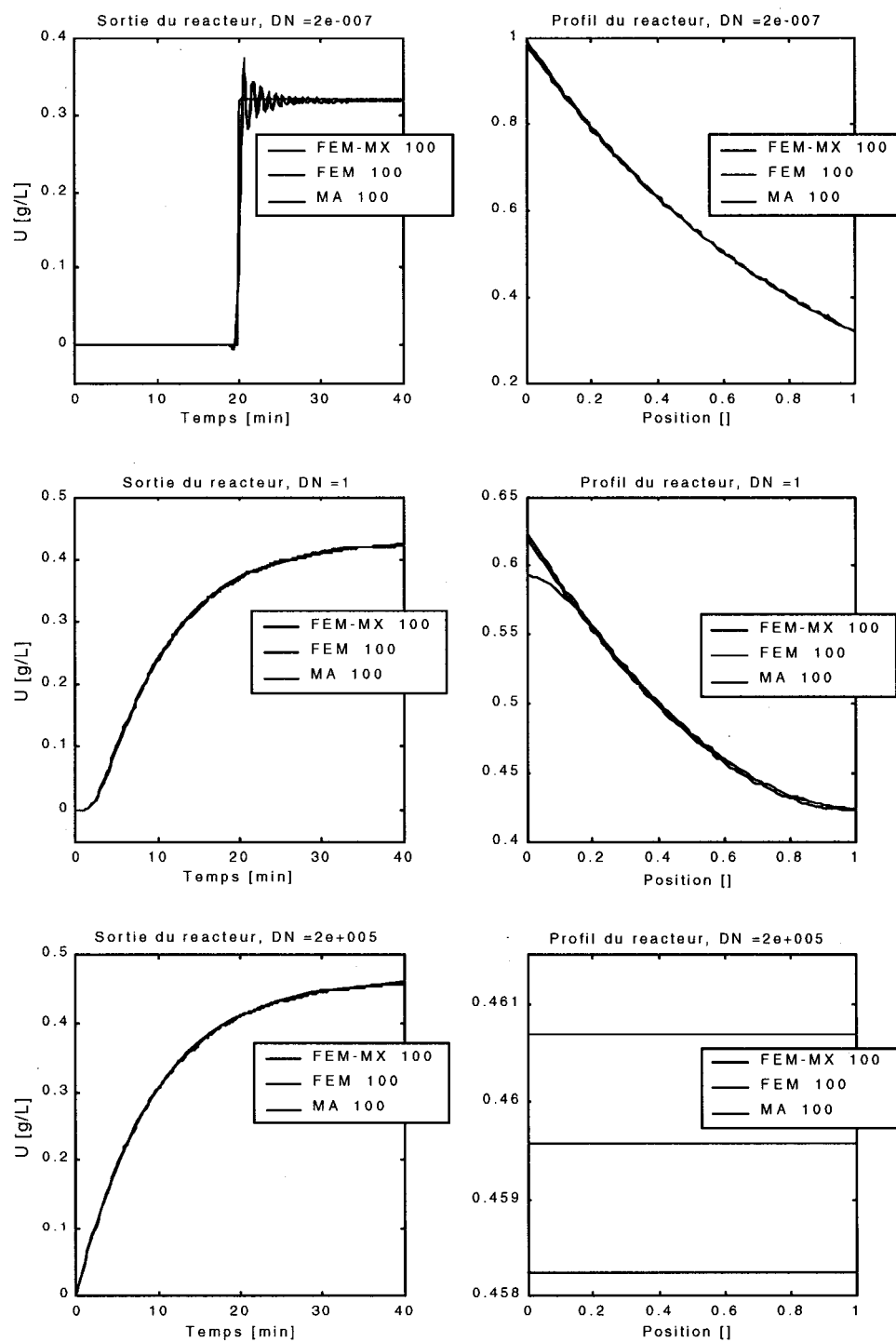


Figure 4.5 Validation de la méthode mixte MEF-MX

Résultats de simulation par la méthode SU-MX

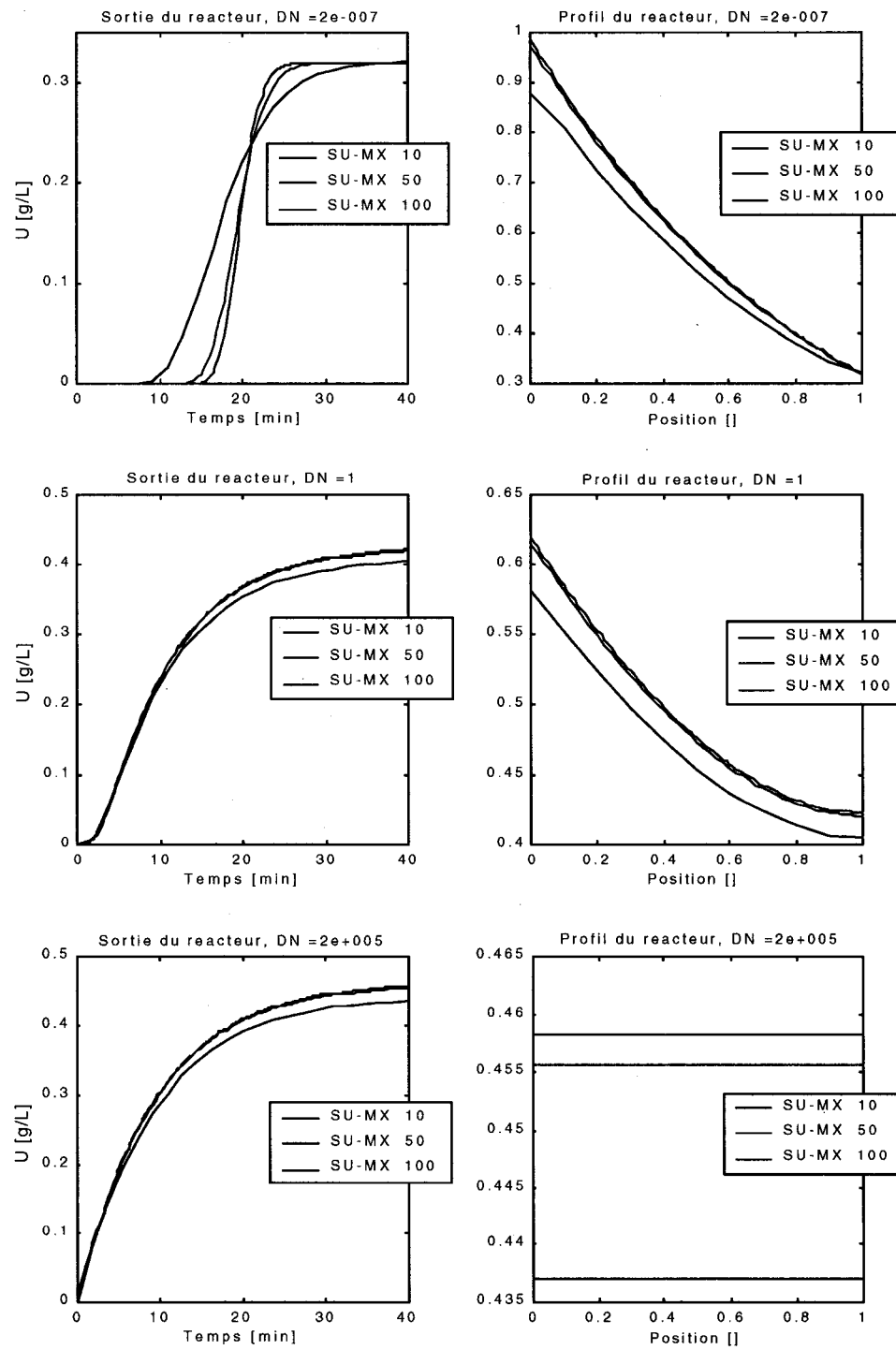


Figure 4.6 Méthode mixte SU-MX: Influence du maillage

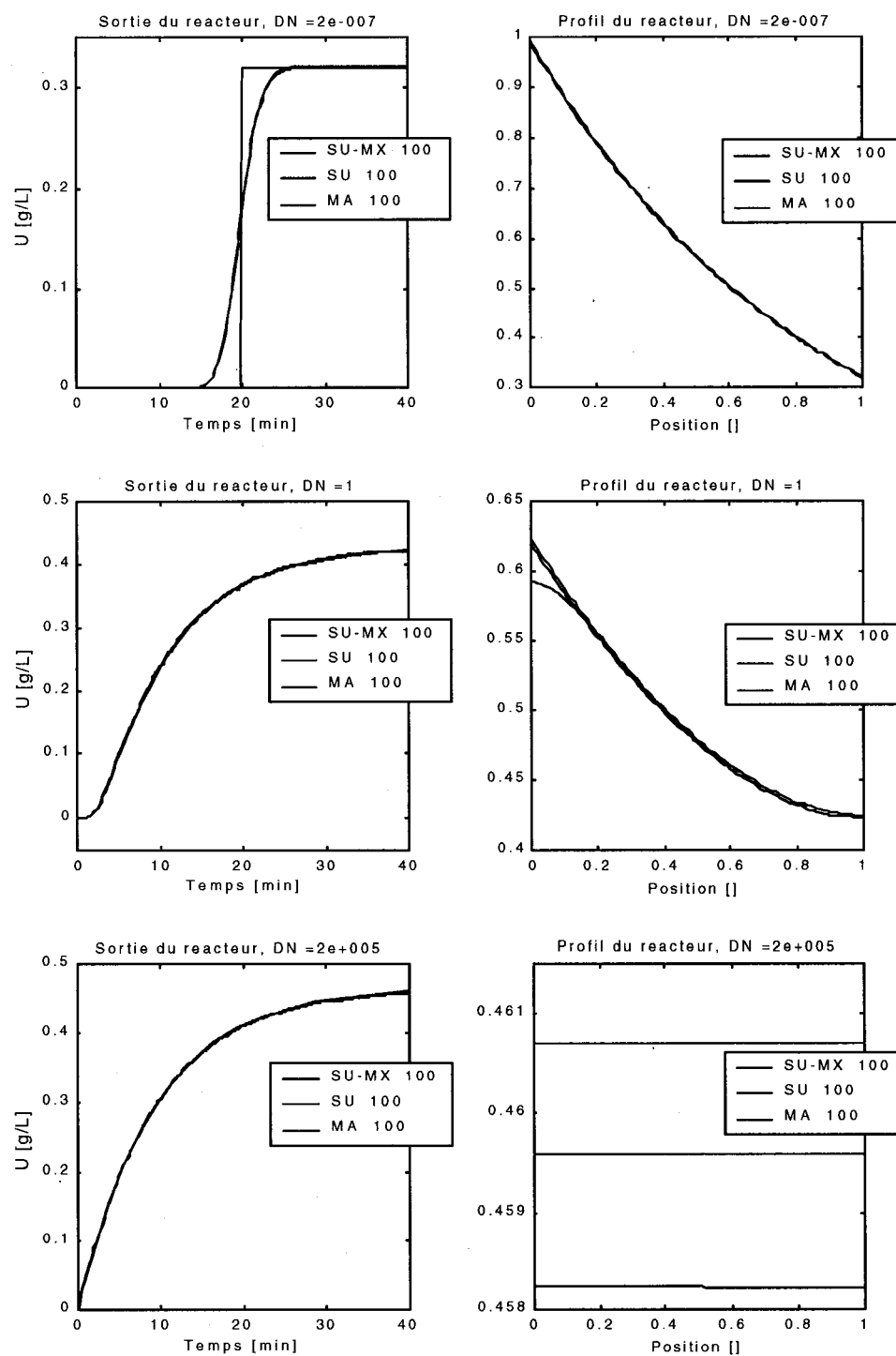


Figure 4.7 Validation de la méthode mixte SU-MX

Résultats de simulation par la méthode SUPG-MX

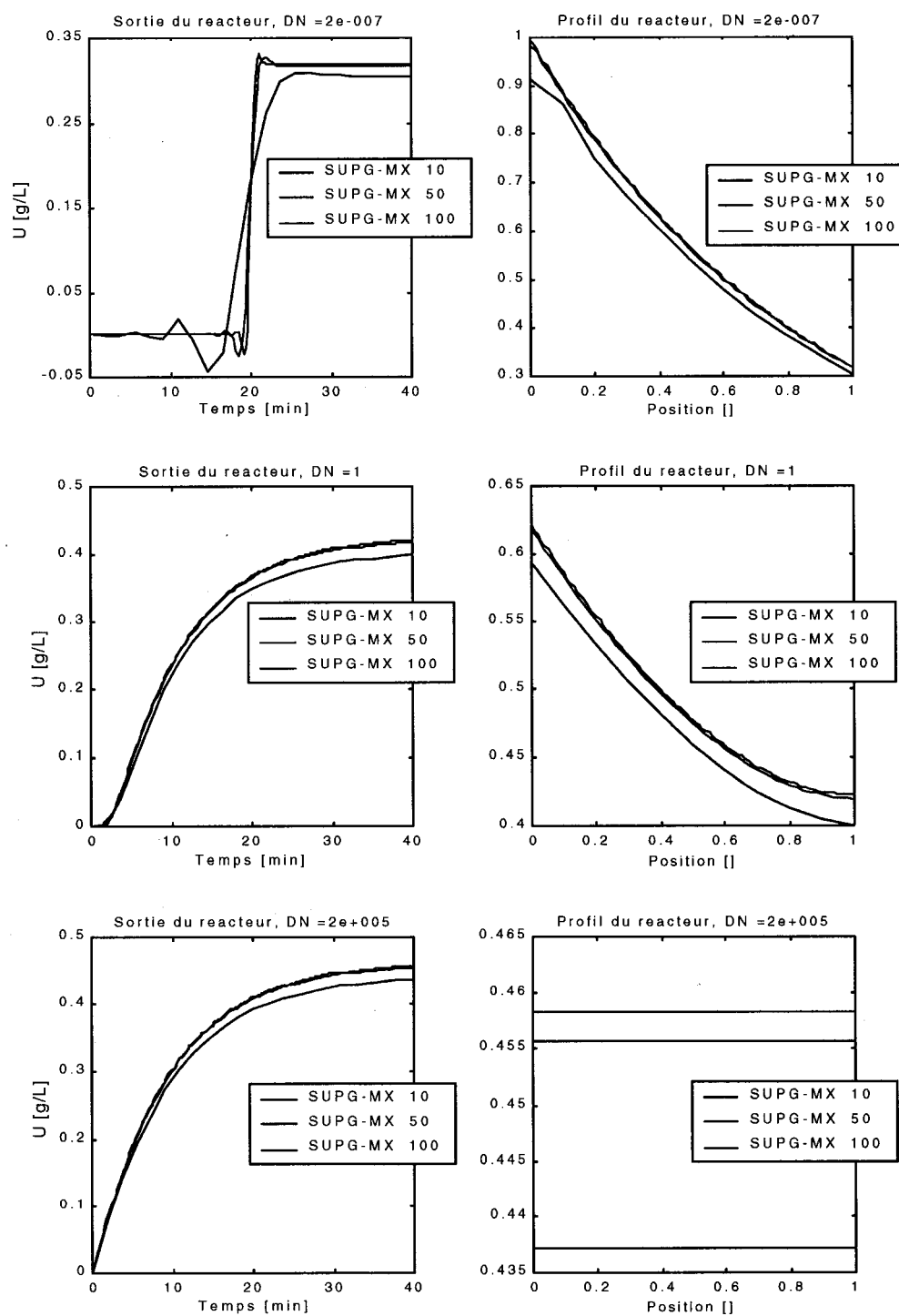


Figure 4.8 Méthode mixte SUPG-MX: Influence du maillage

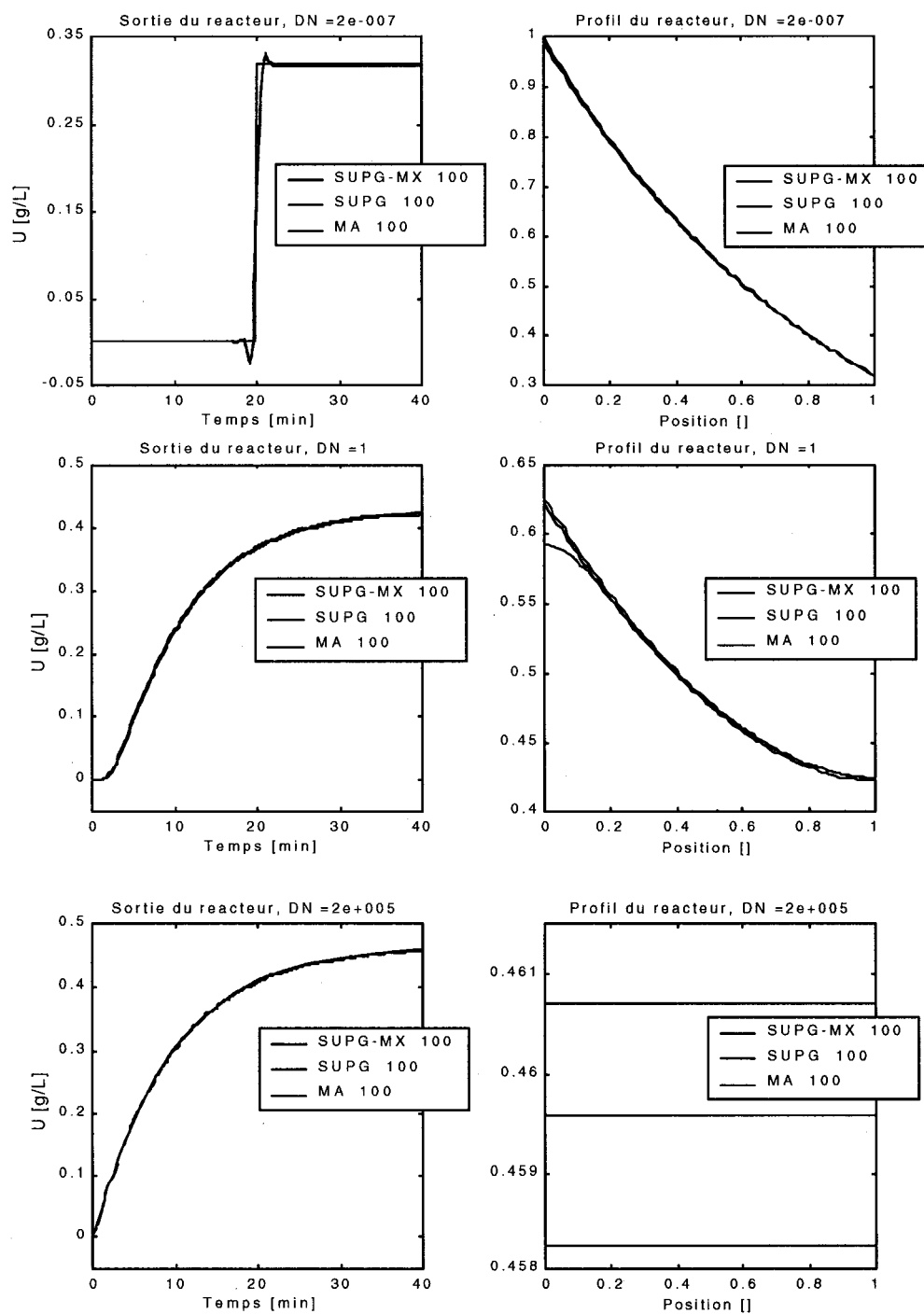


Figure 4.9 Validation de la méthode mixte SUPG-MX

4.4.5 Temps de simulation des méthodes mixtes

D'après les conclusions des sections précédentes, on sait que les méthodes variationnelles (FEM, SU, SUPG) et leurs variantes mixtes (FEM-MX, SU-MX, SUPG-MX) aboutissent à une solution d'approximation quasi-identique du problème CDR. Cependant, une des motivations à la base du développement de l'algorithme mixte, est la lenteur des méthodes variationnelles à simuler le problème CDR non-linéaire. Ainsi, on s'est intéressé à la résolution d'un problème CDR non-linéaire par l'algorithme mixte afin d'évaluer l'influence de la cinétique de la réaction sur le temps de simulation. À cet effet, le modèle CDR présenté à la section 3.7.3, a été analysé dans le cas d'un système convectif ($DN = 2 \cdot 10^{-7}$), un système intermédiaire ($DN = 1$) et un système dispersif ($DN = 2 \cdot 10^{+5}$). Les résultats de simulation de ces analyses sont illustrés aux figures 4.10 à 4.13.

Dans un premier temps, les résultats de simulation illustrés aux figures 4.10—4.12, montrent que les méthodes mixtes (FEM-MX, SU-MX, SUPG-MX) sont des algorithmes de résolution très rapide lors de l'analyse du problème CDR non-linéaire—contrairement aux méthodes variationnelles (FEM, SU, SUPG). De plus, on constate que pour tous les systèmes considérés (convectif, intermédiaire, dispersif), les temps de simulation de toutes les méthodes mixtes restent quasiment constants et sensiblement identiques. Ce constat s'explique par le fait que, l'analyse découplée du problème global préconisée dans le schéma de résolution mixte, permet d'avoir un sous-problème

hydrodynamique (convection-diffusion) linéaire—dont la formulation variationnelle aboutit à un système matricielle composé de coefficients numériques. De plus, étant donnée que le sous-problème chimique est analysé avec l'intégrateur ODE15S de Matlab—qui est très rapide et peu sensible à la non-linéarité, le temps de résolution de ce sous-problème reste aussi sensiblement constant lorsque l'ordre de la réaction varie de 0 à 4. Par conséquent, toutes les méthodes mixtes vont donner des temps de simulations quasi-constants et sensiblement identiques. Cependant, la comparaison des temps de simulation des méthodes mixtes (voir figure 4.13) montre que la méthode SUPG-MX est légèrement plus lente que FEM-MX et SU-MX—ces deux dernières méthodes conduisant à des temps de simulation quasi-identiques.

4.4.6 Séquence de résolution par la méthode mixte

Les travaux de Renou (Renou et al., 1999), on montré que la résolution du problème CDR par la méthode MA, aboutit à une solutions dont la précision dépend de l'ordre des étapes résolutions. Autrement dit, la séquence de résolution «CDR» ne donne pas nécessairement à la même précision (pour un même $\frac{1}{2}$ pas de temps) de la solution du problème que les séquences «DCR», «CRD», «RCD», etc.

Étant donnée la similarité entre les schémas de résolution de la méthode MA et de l'algorithme mixte, on s'est intéressé à étudier l'influence des séquences de résolution «Hydrodynamique-Chimique (H-X)» et «Chimique-Hydrodynamique (X-H)» sur la

précision de la solution d'approximation du problème CDR par des méthodes mixtes. Les résultats de simulation du modèle linéaire (voir section 2.6.1) pour les séquences de résolution «H-X» et «X-H» sont illustrés aux figures 4.14 à 4.16. D'après ces résultats, on constate que les courbes des solutions d'approximation des séquences de résolution «H-X» et «X-H», se superposent parfaitement pour chaque méthode mixte considérée; à savoir FEM-MX, SU-MX et SUPG-MX. Par conséquence, la séquence de résolution des sous-problèmes hydrodynamique et chimique par l'algorithme mixte, n'influence pas la précision de la solution d'approximation du problème global.

Temps de simulation des méthodes mixtes

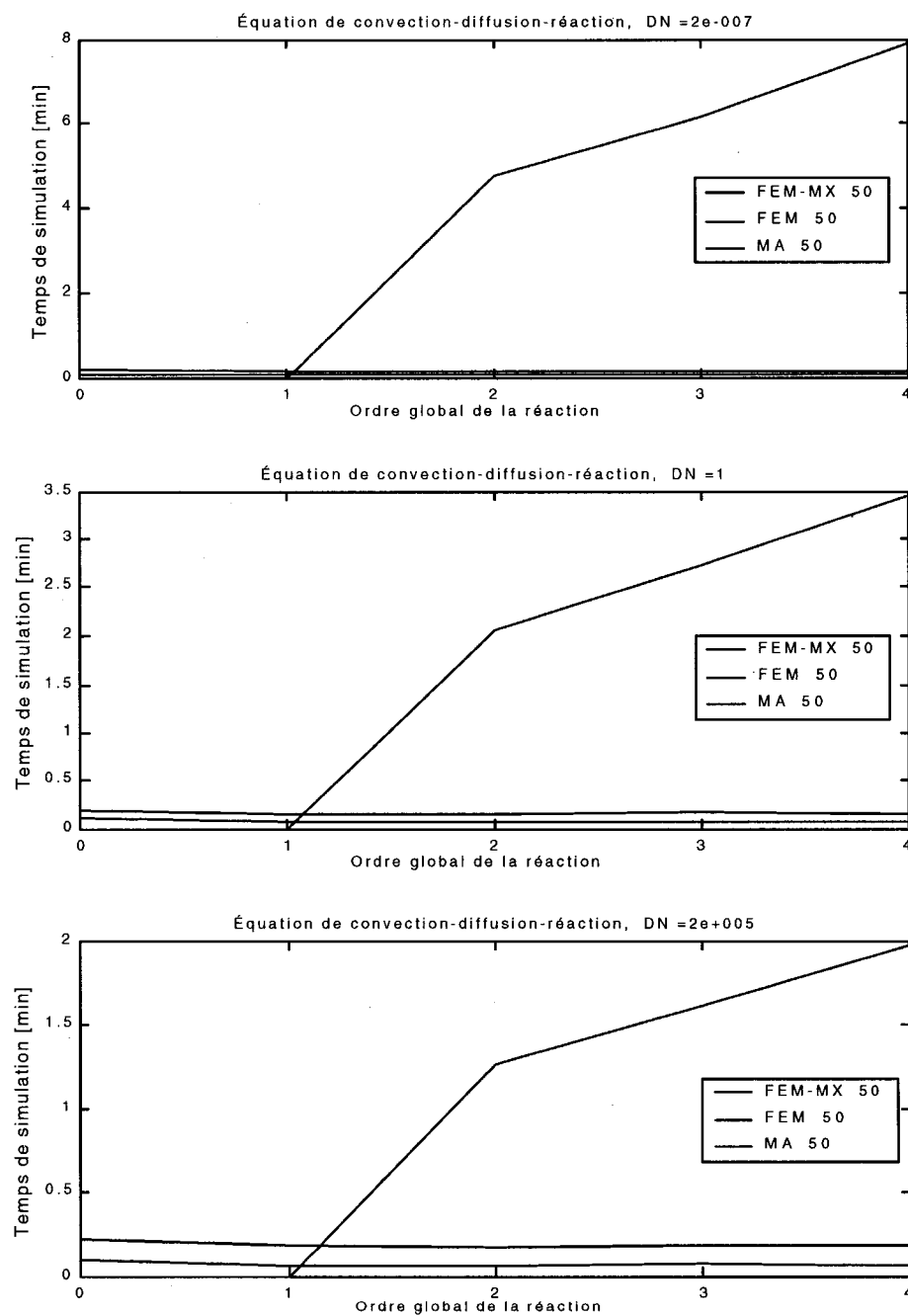


Figure 4.10 Temps de simulation de la méthode mixte FEM-MX

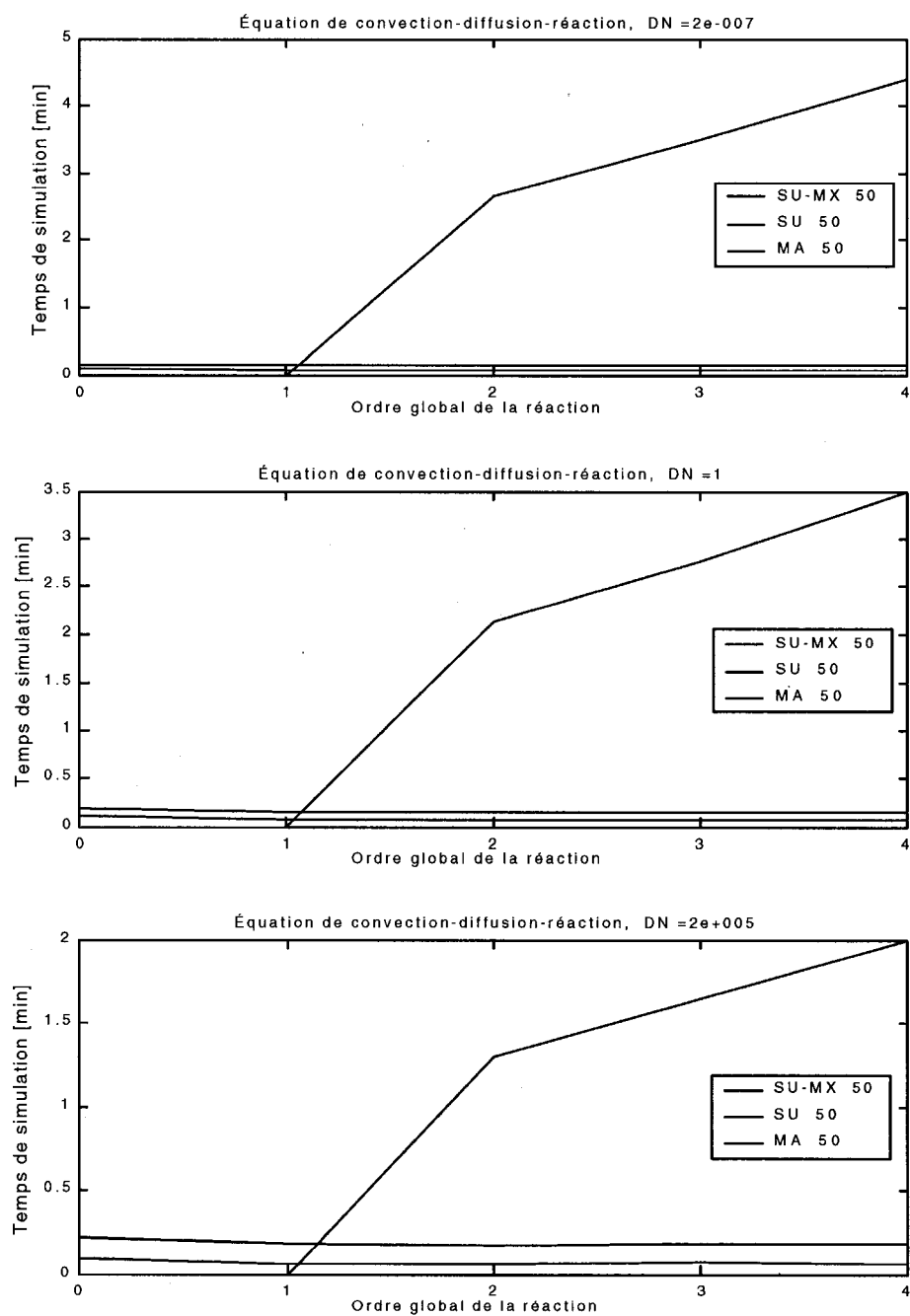


Figure 4.11 Temps de simulation de la méthode mixte SU-MX

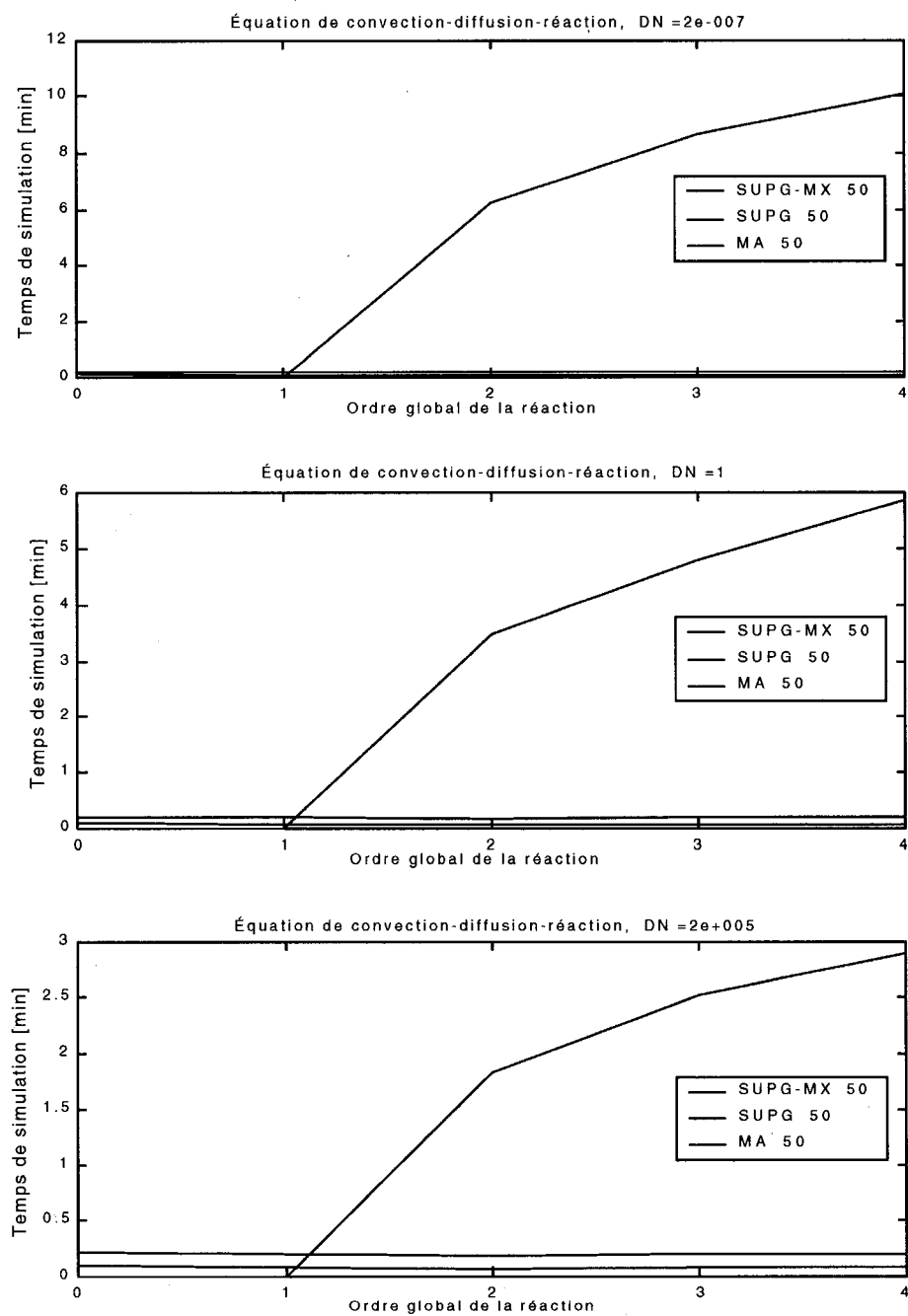


Figure 4.12 Temps de simulation de la méthode mixte SUPG-MX

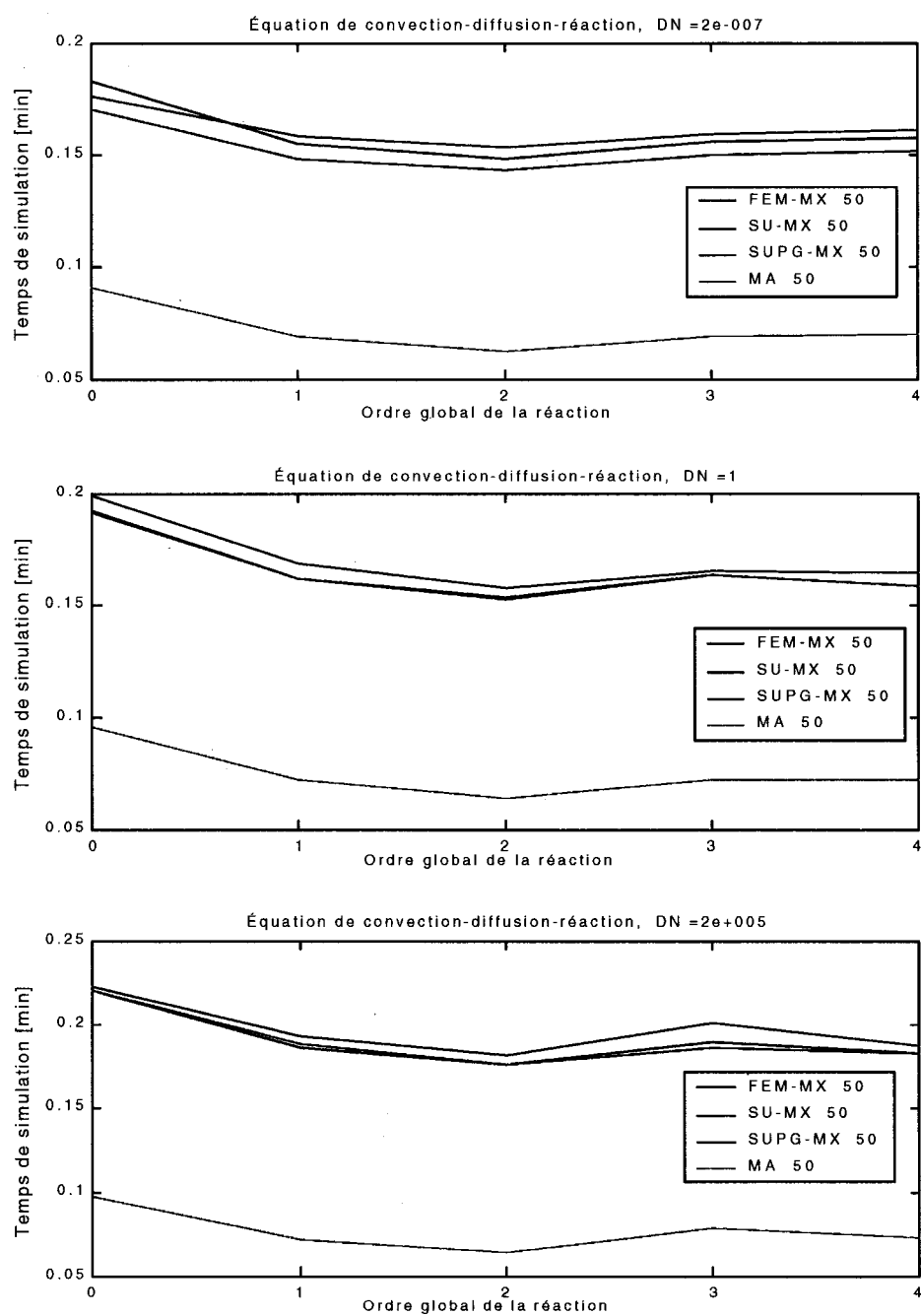


Figure 4.13 Comparaison des temps de simulation des méthodes mixtes

Influence de la séquence de résolution par les méthodes mixte

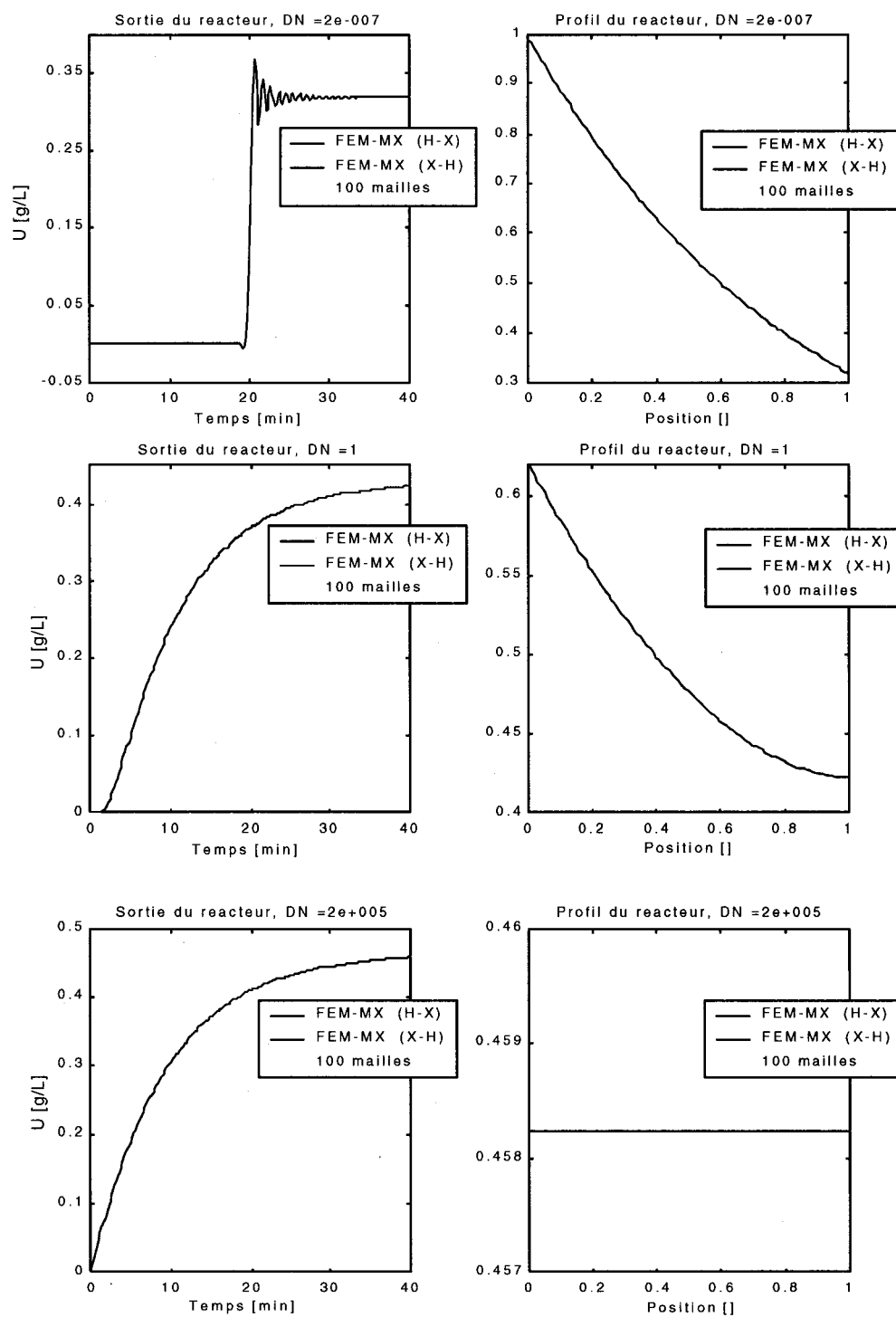


Figure 4.14 Méthode FEM-MX : Influence de la séquence de résolution

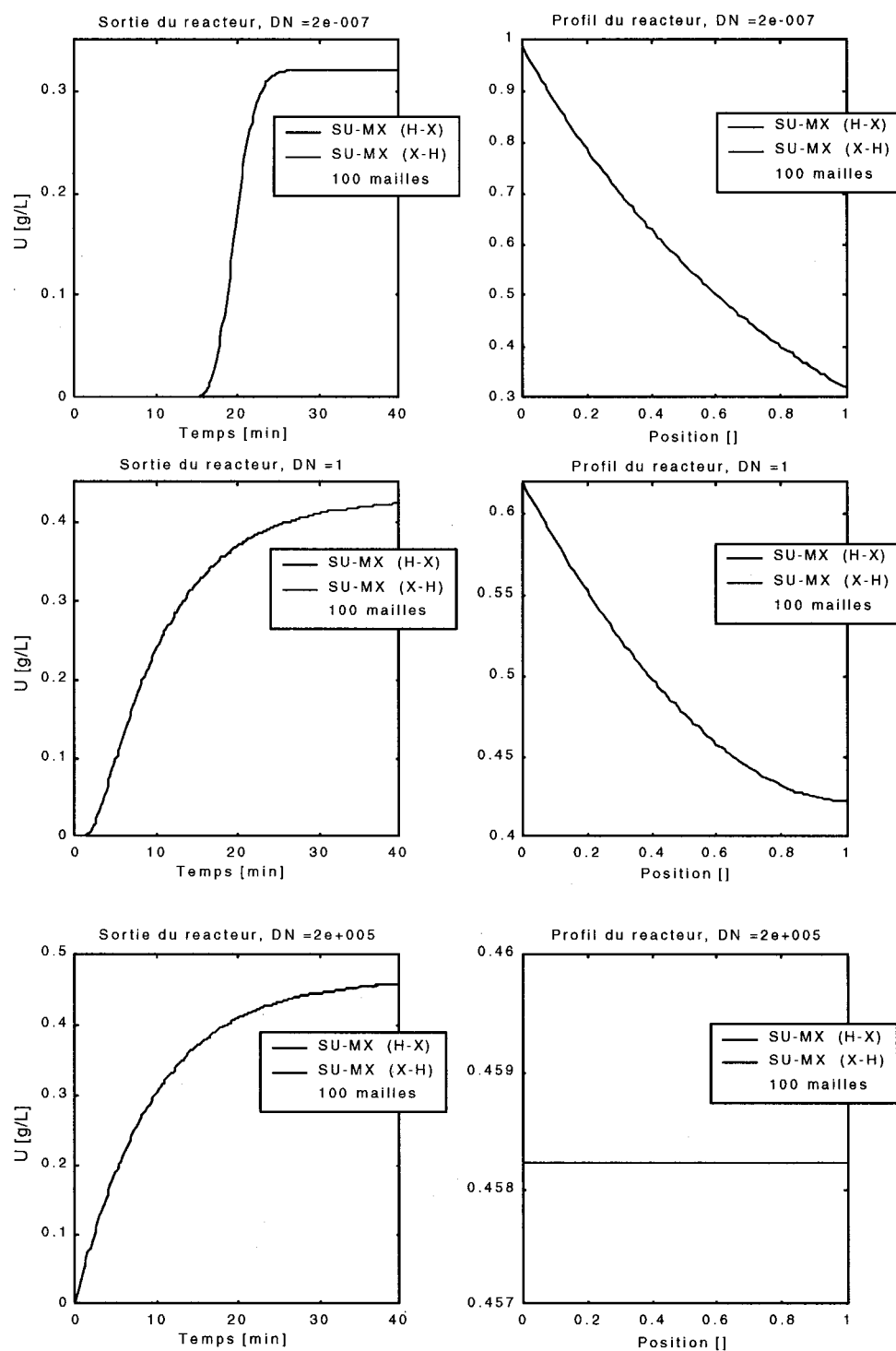


Figure 4.15 Méthode SU-MX : Influence de la séquence de résolution

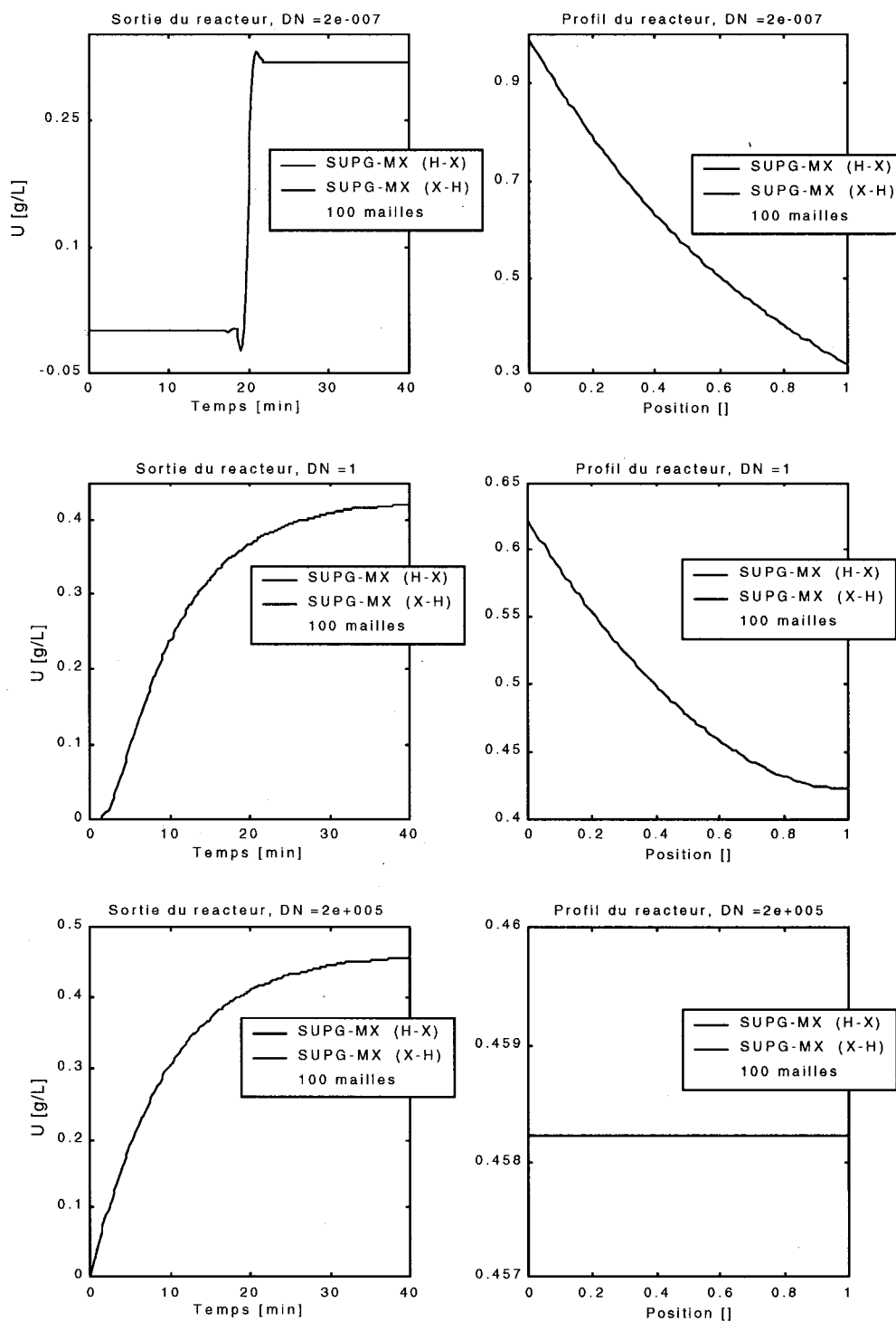


Figure 4.16 Méthode SUPG-MX : Influence de la séquence de résolution

CHAPITRE 5

APPLICATION À UN RÉACTEUR DE BLANCHIMENT

Les chapitres précédents ont introduit l'utilisation des méthodes de décentrage ainsi que les méthodes mixtes dans l'analyse du problème CDR dont le terme de réaction présente une cinétique linéaire. Cependant, le cas du problème CDR non-linéaire a été considéré dans le cadre de l'étude du temps de simulation desdites méthodes, sans toutefois discuter de la précision de ces méthodes. Ainsi, dans ce chapitre, on s'intéresse à l'analyse du problème CDR dont le terme de réaction présente une cinétique fortement non-linéaire. Le modèle du réacteur de blanchiment Lignine-Chlore est considéré à cet effet et sa résolution fait l'objet de ce chapitre.

5.1 Modèles mathématiques

5.1.1 Description

Le modèle mathématique du réacteur de blanchiment Lignine-Chlore est décrit par le système d'équations différentielles (5.1).

$$\begin{cases} \frac{\partial C(z, t)}{\partial t} + A \frac{\partial C(z, t)}{\partial z} - D \frac{\partial^2 C(z, t)}{\partial z^2} = -k_c C^\alpha L^\beta \\ \frac{\partial L(z, t)}{\partial t} + A \frac{\partial L(z, t)}{\partial z} - D \frac{\partial^2 L(z, t)}{\partial z^2} = -k_L C^\alpha L^\beta \end{cases} \quad (5.1)$$

Les conditions initiales de ce modèle sont données par (5.2.a).

$$\begin{cases} C(z,0) = C_o = 0 \\ L(z,0) = L_o = 0 \end{cases} \quad (5.2.a)$$

Par ailleurs, les conditions frontières utilisées sont ceux de Danckwerts définies par l'équation (5.2.b).

$$\begin{cases} D \frac{\partial C(0,t)}{\partial z} = -A (C(0,t) - C_{in}(t)) \\ D \frac{\partial L(0,t)}{\partial z} = -A (L(0,t) - L_{in}(t)) \\ D \frac{\partial C(\ell,t)}{\partial z} = 0 \\ D \frac{\partial L(\ell,t)}{\partial z} = 0 \end{cases} \quad (5.2.b)$$

Dans ces équations, A est le coefficient de convection et D est la diffusion. Par ailleurs, C et L représentent respectivement la concentration de Chlore (exprimée en g/L) et la teneur en lignine de la pâte de papier (exprimé en $Kappa$)— C_{in} et L_{in} étant leurs valeurs dans le courant d'alimentation du réacteur. Il existe plusieurs cinétiques de réaction associées au réacteur de blanchiment Lignine-Chlore—dont le modèle cinétique de Gendron (1997) présenté dans ses travaux à PAPRICAN.

Le but de ce mémoire n'est pas la validation de ces modèles cinétiques. Ils y sont utilisés dans le cadre de l'analyse d'un problème industriel par les méthodes de

décentrage et des méthodes mixtes. Les paramètres des différents modèles utilisés sont présentés au tableau 5.1, où *MG* désigne le modèle cinétique de Gendron (1997).

Tableau 5.1 Paramètres et modèles du système Lignine-Chlore

Modèles	Paramètres cinétiques			Concentration	
	k_C	k_L	α, β	Cin [g/L]	Lin[Kappa]
<i>M1</i>	0.006	0.035	1	1.3	9
<i>M2</i>	0.001	0.0065	2	1.3	9
<i>M3</i>	5.0e-5	3.0e-4	3	1.3	9
<i>MG</i>	4.5e-5	4.7e-7	3	1.3	9

5.1.2 Temps de simulation

Il a été montré, à la section 3.7.3 de ce rapport, que la résolution du problème CDR non-linéaire—par les méthodes variationnelles (FEM, SU, SUPG)—conduit à des temps de simulation considérables et que ces temps augmentent avec la non-linéarité de la cinétique de réaction. Il est donc prévisible que l'analyse du modèle du réacteur de blanchiment (*deux termes cinétiques fortement non-linéaires*) par ces méthodes variationnelles peut poser des problèmes de performance (temps de simulation élevés).

Par ailleurs, on sait que la mauvaise performance de ces méthodes variationnelles est due à la présence du terme de la réaction, qui contribue à augmenter la grosseur des expressions algébriques du système d'ODEs obtenu lors de la formulation du problème CDR. Ainsi, une réduction du nombre d'équations (ou taille du système) dans le modèle—donc des termes de réaction, devrait réduire indirectement de l'importance des

expressions algébriques dans le modèle global (ODEs), et donc du temps de simulation du problème. Pour se faire, on effectue les changements de variables données par l'équation (5.3).

$$\begin{cases} C = C_o (1 - X) \\ L = C_o (m - pX) \end{cases} \quad (5.3)$$

où X désigne la conversion par rapport au Chlore et m et p sont des constantes. Les équations (5.1) et (5.2) peuvent alors se mettre sous la forme d'une seule équation donnée par l'expression (5.4).

$$\frac{\partial X}{\partial t} + A \frac{\partial X}{\partial z} - D \frac{\partial^2 X}{\partial z^2} = k_c C_o^{\alpha+\beta-1} (1-X)^\alpha \left(\frac{L_o}{C_o} - \frac{k_c}{k_L} X \right)^\beta \quad (5.4)$$

$$\text{où } m = \frac{L_o}{C_o} \text{ et } p = \frac{k_c}{k_L} \quad (5.5)$$

Par la suite, l'équation (5.4) peut être résolue pour la variable X —après l'évaluation des conditions frontières équivalentes, et les valeurs des concentrations C et L peuvent être calculées à partir de la variable X —en utilisant les expressions données par (5.3). Cette transformation est uniquement élaborée dans le but de réduire la taille du problème. Cependant, la réduction des temps de simulation par les méthodes variationnelles (FEM, SU, SUPG) du modèle transformé (5.4) n'est pas assurée. En effet, même si on arrive à réduire le nombre d'équations dans le modèle original (5.1) à une seule équation, le terme de la réaction dans le modèle transformé (5.4) est encore plus *non-linéaire*—ordre

de $(\alpha + \beta)$ comparativement au cas du modèle original (i.e. α ou β). Ainsi, dans la suite de cette analyse, on s'en tiendra à l'utilisation des équations du modèle original (5.1).

5.1.3 Approximation du terme de réaction

Dans la section 2.2.2, on a montré que, dans le cas de la formulation variationnelle, l'approximation du terme de réaction pouvait être faite selon le nombre de réactifs en jeux et leurs ordres respectifs en utilisant les équations (2.14a) et (2.14b). Ainsi, dans le cas du réacteur Lignine-Chlore qui fait intervenir plus d'un réactif, les approximations des termes cinétiques de l'équation (5.1) sont respectivement données par les expressions générales suivantes:

$$R_C (C, L) = k_C \left(\sum_{j=1}^{N_c} C_j^e (z, t) \psi_j (z) \right)^\alpha \left(\sum_{j=1}^{N_c} L_j^e (z, t) \psi_j (z) \right)^\beta \quad (5.6a)$$

$$R_L (C, L) = k_L \left(\sum_{j=1}^{N_c} C_j^e (z, t) \psi_j (z) \right)^\alpha \left(\sum_{j=1}^{N_c} L_j^e (z, t) \psi_j (z) \right)^\beta \quad (5.6b)$$

Ces deux équations seront donc utilisées dans la formulation variationnelle des différentes méthodes pour faire l'approximation des termes cinétiques des modèles cinétiques M1, M2, M3 et MG—en utilisant les ordres de réaction α et β du tableau 5.1.

5.2 Résolution du système Lignine-Chlore

La résolution du modèle mathématique du réacteur de blanchiment Lignine-Chlore est réalisée à partir du logiciel de simulation présenté à l'annexe I. Dans cette analyse, seul

le modèle cinétique M3 est considéré. Les simulations sont faites pour différentes plages du nombre de dispersion, soient: $DN = 10^{-8}$ pour un système convectif, $DN = 10^{+4}$ pour un système dispersif et $DN = 1$ pour un système intermédiaire. Cependant, les simulations du modèle M3 par les méthodes mixtes (FEM-MX, SU-MX, SUPG-MX) ont été réalisées en utilisant un maillage de 100 éléments. Par contre, l'analyse par les méthodes variationnelles (FEM, SU, SUPG) n'a pas été possible pour le niveau de raffinement de 100 mailles. Les échecs des simulations du modèle M3 par les méthodes (FEM, SU, SUPG) pour un raffinement de 100 mailles, sont causés par la grosseur des expressions dans le modèle global (ODEs) résultant de la formulation variationnelle par ces dites méthodes. En fait, ce problème est relié à l'allocation de mémoire lors de la résolution du système d'ODEs dans l'environnement de programmation symbolique de Matlab—bibliothèque Maple. Une alternative consiste à reprogrammer le logiciel de simulation dans un autre langage—tel que C, C++, Java, etc—ou simplement utiliser un ordinateur avec une mémoire CPU plus importante, comparativement à celui utilisé dans le cadre de ce travail (*250 MHz RAM, Processeur 750 MHz*). Ainsi, une tentative de résolution avec 100 mailles a été faite sur un ordinateur plus puissant (*Dual 250 MHz RAM, Pentium III 933 MHz*)—mais sans succès. Par conséquent, les simulations du modèle M3 par les méthodes (FEM, SU, SUPG), ont été réalisées pour un raffinement composé de 20 mailles, afin d'aboutir à des simulations concluantes. Les résultats de simulations du modèle M3 par les méthodes mixtes et les méthodes variationnelles sont discutés aux sous-sections suivantes.

5.2.1 Les méthodes mixtes

Les résultats de simulation des méthodes mixtes (MEF-MX, SU-MX, SUPG-MX) sont illustrés aux figures 5.1 à 5.3 pour le système convectif ($DN = 10^{-8}$), 5.4 à 5.6 pour le système intermédiaire ($DN = 1$), et 5.7 à 5.8 pour le système dispersif ($DN = 10^{+5}$).

D'après les résultats de simulation du système convectif ($DN = 10^{-8}$), on constate que la solution obtenue par la méthode SU-MX induit une diffusion numérique excessive dans la solution du problème (figure 5.2), tandis que la méthode SUPG-MX élimine les oscillations et n'introduit pas de diffusion numérique dans le système (figure 5.3). Quant à la méthode FEM-MX, elle conduit à des oscillations numériques dans la solution d'approximation (figure 5.1). Par ailleurs, un constat très important concerne l'allure des courbes de profil de concentration de lignine et de chlore dans le réacteur. En effet, on note que dans le cas du système dispersif, les méthodes mixtes conduisent au même profil de concentration de lignine et de chlore, que la méthode par alternance (MA).

Contrairement au cas du système convectif, les résultats du système intermédiaire ($DN = 1$)—illustrés aux figures 5.4 à 5.6, révèlent que les courbes de variation de concentration de chlore et de lignine dans le temps, obtenues par les méthodes mixtes et la méthode MA, sont toutes identiques. Ce qui n'est pas le cas pour les courbes de profil de concentration dans le réacteur. En effet, comme il a été montré dans le cas du problème CDR linéaire, la méthode MA ne traite pas bien les conditions frontières à

l'entrée du système intermédiaire ($DN = 1$). Ce même constat est également observé dans le cas du problème CDR fortement non-linéaire (figures 5.4—5.6).

Par ailleurs, les résultats de simulation du système dispersif ($DN = 10^{+4}$) montrent que les méthodes mixtes et la méthode MA aboutissent à la même solution d'approximation du problème CDR non-linéaire. Cependant, on note que les méthodes mixtes sous-estiment légèrement le profil de concentration de lignine dans le réacteur—comparativement à la méthode MA.

Enfin, toutes les méthodes mixtes ont été confrontées entre elles, pour toutes les plages du nombre de dispersion considérées. Les résultats des simulations de cette étude comparative sont présentés aux figures 5.10 à 5.12. D'après ces résultats, on constate que toutes les méthodes mixtes aboutissent aux mêmes profils de concentration de lignine et de chlore dans le réacteur—peu importe la plage du nombre de dispersion.

5.2.2 Cas des méthodes variationnelles

Pour les raisons mentionnées à la section 5.2, les simulations du modèle M3 par les méthodes variationnelles ont été réalisées pour un niveau de raffinement de 20 mailles. Cependant, malgré le succès des simulations du modèle M3 par les méthodes mixtes pour un raffinement de 100 mailles et plus, d'autres simulations de ce modèle par lesdites méthodes ont été réalisées avec un maillage de 20 éléments, afin de les

confronter aux méthodes variationnelles—pour un même *niveau de raffinement*. Toutefois, cette étude comparative est compromise d'avance dans le cas des méthodes mixtes, à cause du niveau de raffinement de maillage utilisé. En effet, il a été montré au chapitre 4 que les méthodes mixtes sont plus *sensibles au raffinement du maillage*—comparativement aux méthodes variationnelles. Autrement dit, les méthodes mixtes sont moins précises que les méthodes variationnelles dans le cas d'un raffinement médiocre (exemple, 20 mailles). Les explications du comportement des méthodes mixtes dans le cas d'un mauvais raffinement du maillage ont été déjà données à la sous-section 4.4.4 du chapitre précédent.

Les résultats des simulations du modèle M3 par les méthodes variationnelles et mixtes sont présentés à l'annexe IV pour toutes les plages du nombre de dispersion considéré. D'après ces résultats, on constate que les méthodes variationnelles (MEF, SU, SUP) et leurs variantes mixtes, donnent la même variation de la concentration de lignine et de chlore dans le temps, dans tous les cas du nombre de dispersion. Cependant, il en est autrement pour les profils de concentration dans le réacteur.

En effet, on constate que dans le cas du système convectif ($DN = 10^{-8}$), alors que la méthode de Galerkin (MEF) donne des profils oscillatoires des concentrations de lignine et de chlore, la méthode mixte FEM-MX conduit à des profils de concentration dépourvus d'oscillations (figure IV.1). Quant à la méthode SU-MX, elle sous-estime légèrement la solution du problème—comparativement à la méthode SU (figure IV.2).

Il en est de même pour la méthode SUPG-MX qui sous-estime aussi la solution par rapport à SUPG (figure IV.3). Cependant, dans le cas du système intermédiaire ($DN=1$), on constate des légers écarts entre les courbes de profils de concentration obtenues par les méthodes mixtes et celles des méthodes variationnelles. Ces observations sont illustrées aux figures IV.4 à IV.6. Dans le cas des simulations du système dispersif ($DN=10^{+4}$)—voir figure IV.7 à IV.9, on enregistre aussi des écarts entre les courbes de profils de concentration des méthodes mixtes et des méthodes variationnelles, mais dans une proportion peu significative.

Remarque: Les simulations du modèle M3 avec un niveau de raffinement de 20 mailles ont été élaborées dans un but illustratif. Pour faire une telle étude comparative, il est nécessaire de réaliser ces simulations pour des niveaux de raffinement de maillage plus élevés, afin d’obtenir des solutions d’approximation du problème plus précises—pour chaque méthode considérée. Il ne faudra donc pas se baser sur les résultats de simulations du modèle M3, présentés à l’annexe IV, pour juger de la performance des méthodes considérées. Cependant, étant donnée que les méthodes (FEM, SU, SUPG) et leurs variantes mixtes (FEM-MX, SU-MX, SUPG-MX) donnent pratiquement les même solutions d’approximation des problèmes, on peut utiliser les solutions des méthodes mixtes obtenues pour des niveau de raffinements plus élevés, en lieu et place de celles des méthodes variationnelles originales (FEM, SU, SUPG).

Résultats de simulation du système convectif ($DN=10^{-8}$)

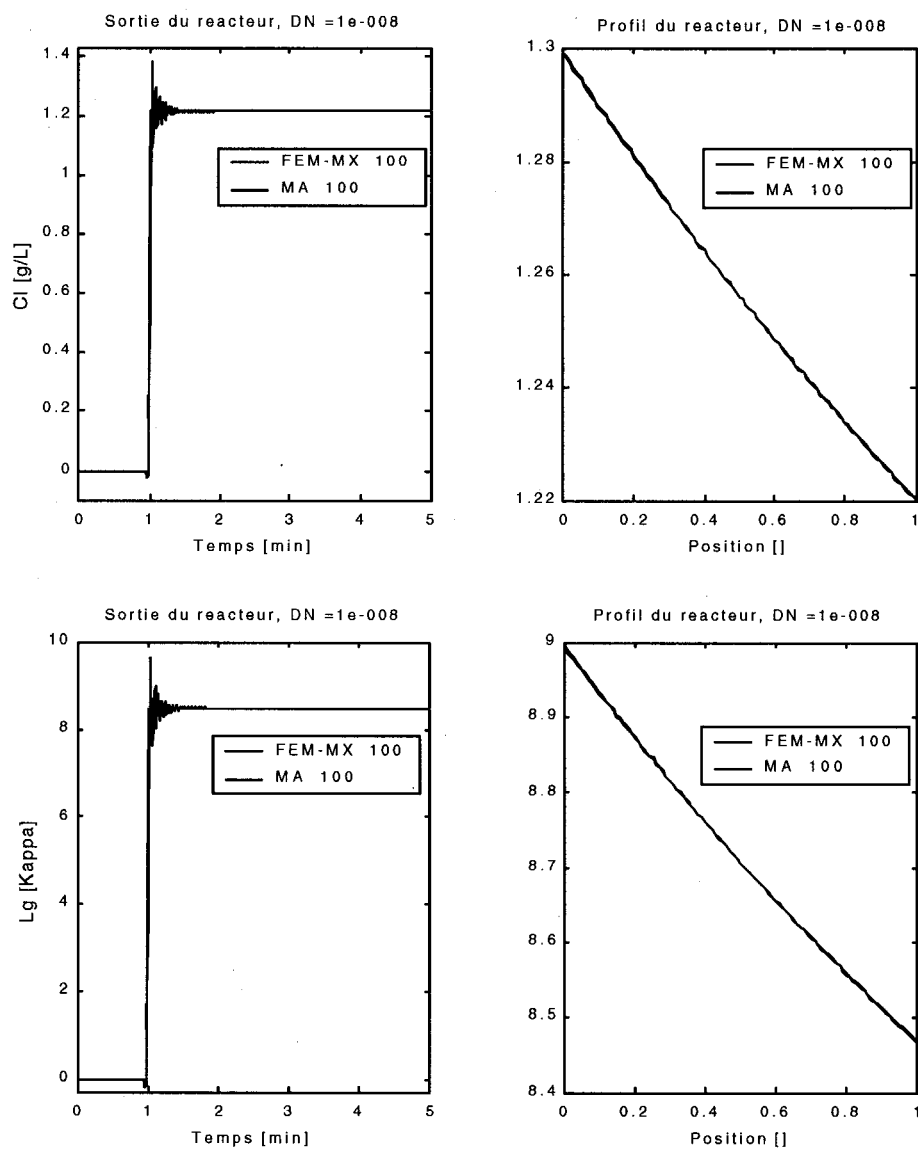


Figure 5.1 Méthode FEM-MX : Analyse du modèle M3, $ND = 10^{-8}$

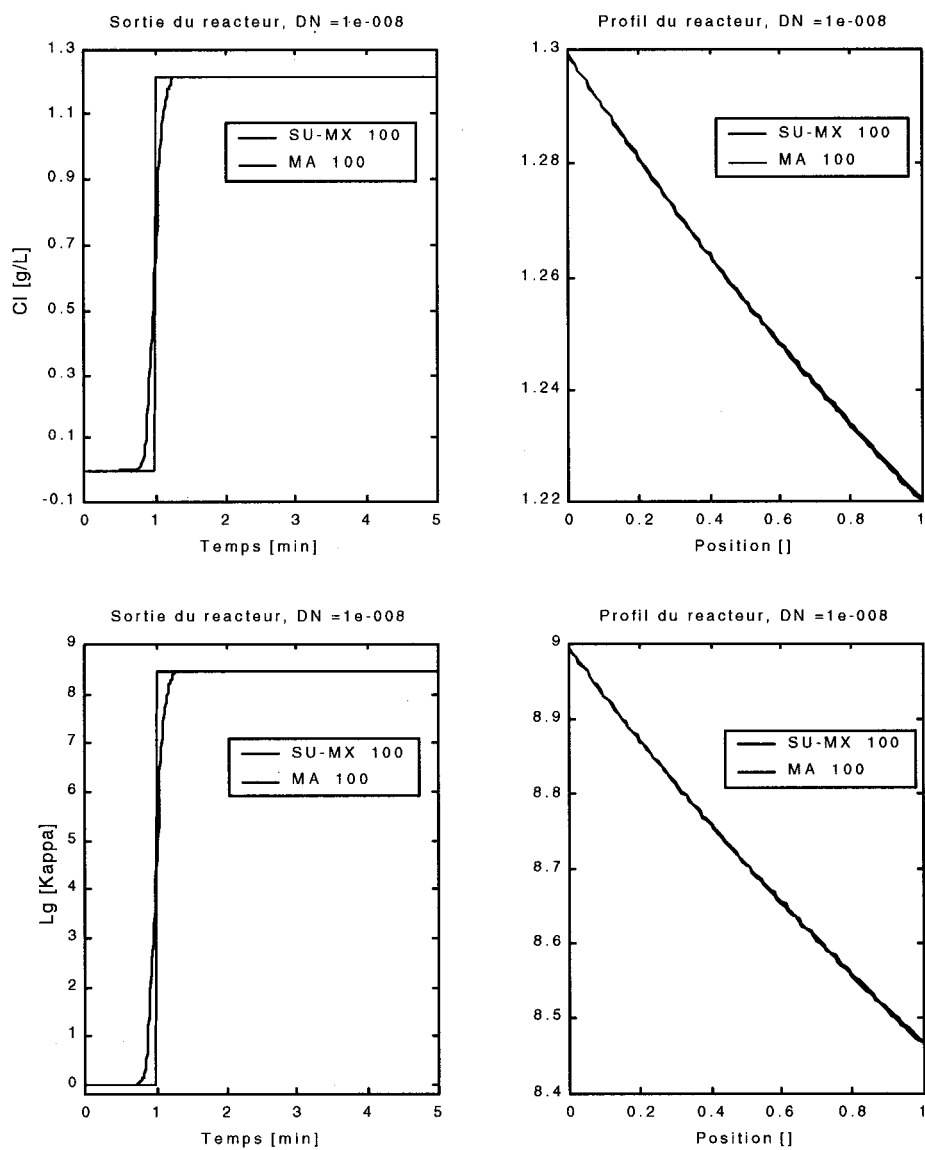


Figure 5.2 Méthode SU-MX : Analyse du modèle M3, $ND = 10^{-8}$

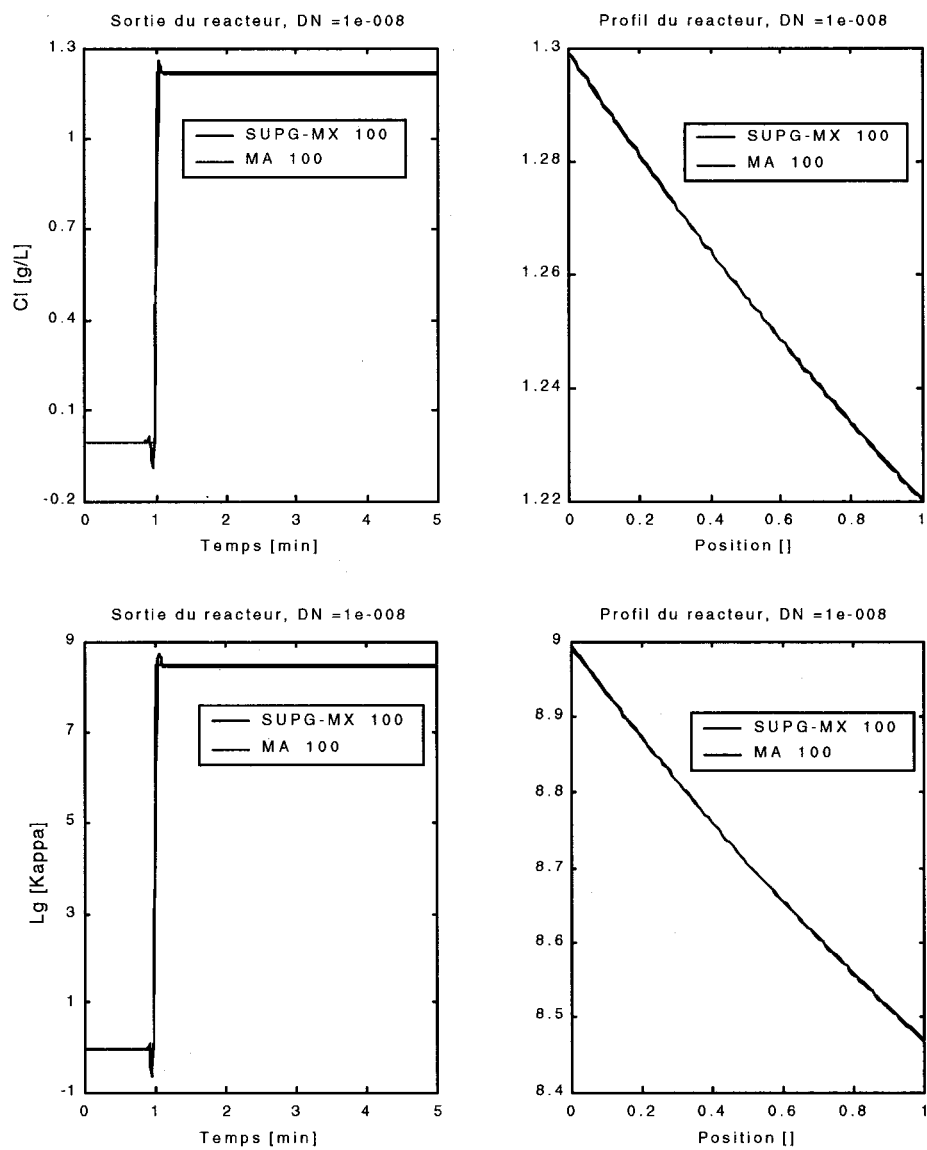


Figure 5.3 Méthode SUPG-MX : Analyse du modèle M3, $ND = 10^{-8}$

Résultats de simulation du système intermédiaire (DN=1)

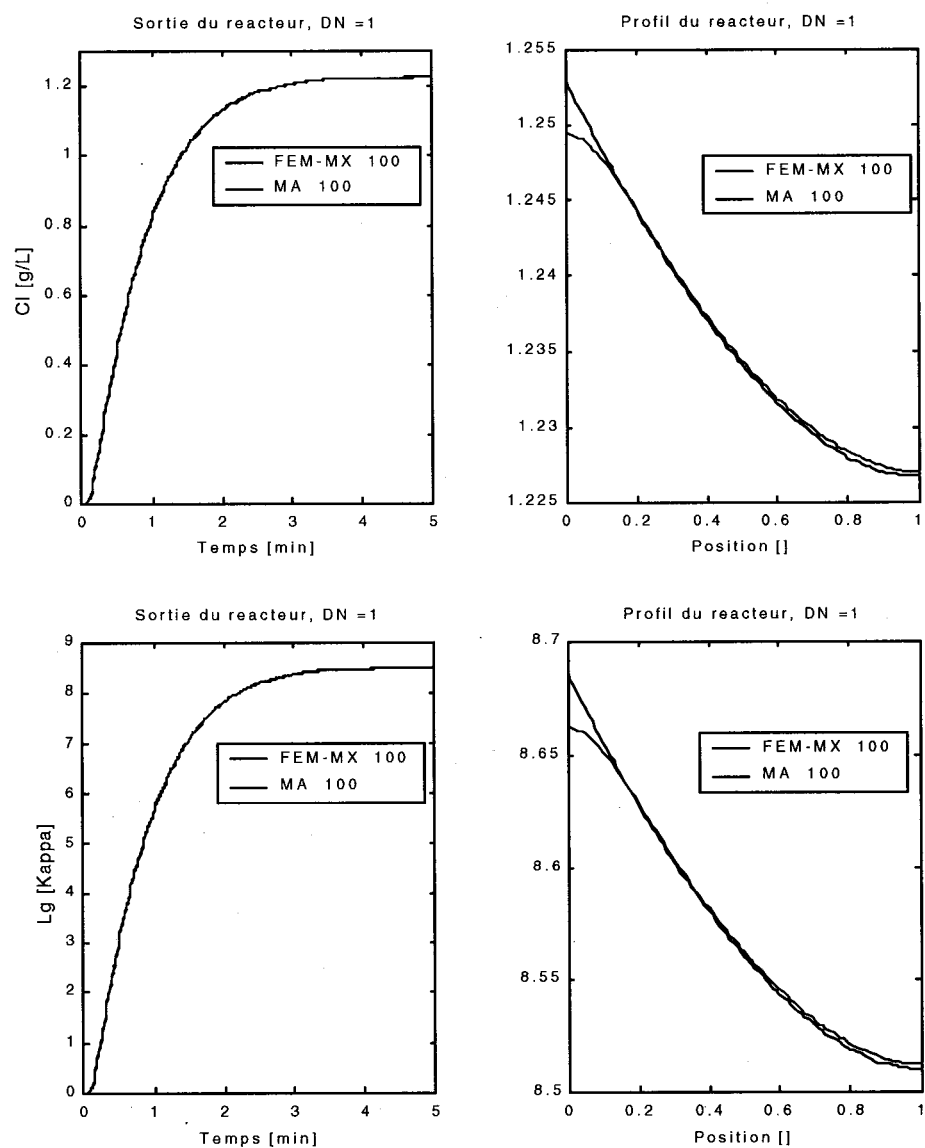


Figure 5.4 Méthode FEM-MX : Analyse du modèle M3, ND = 1

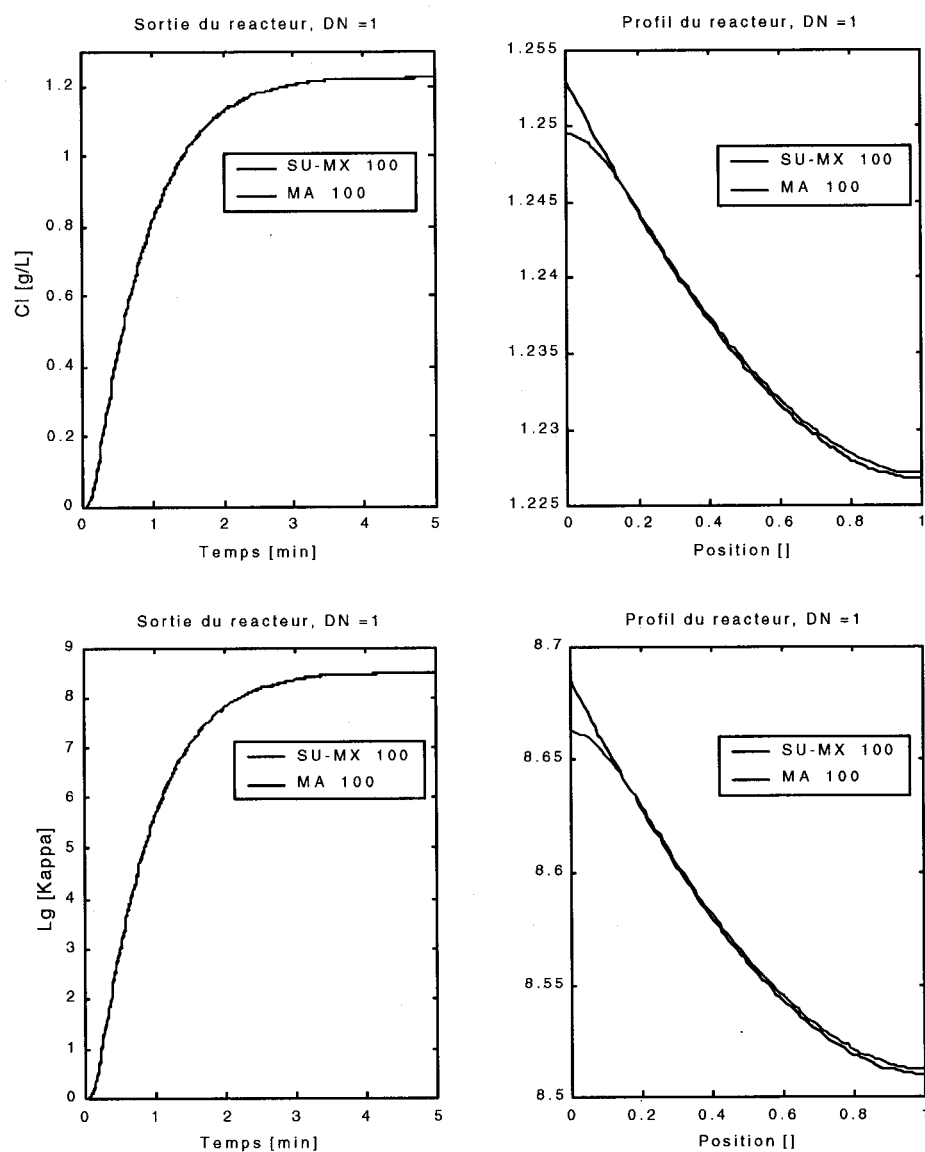


Figure 5.5 Méthode SU-MX : Analyse du modèle M3, ND = 1

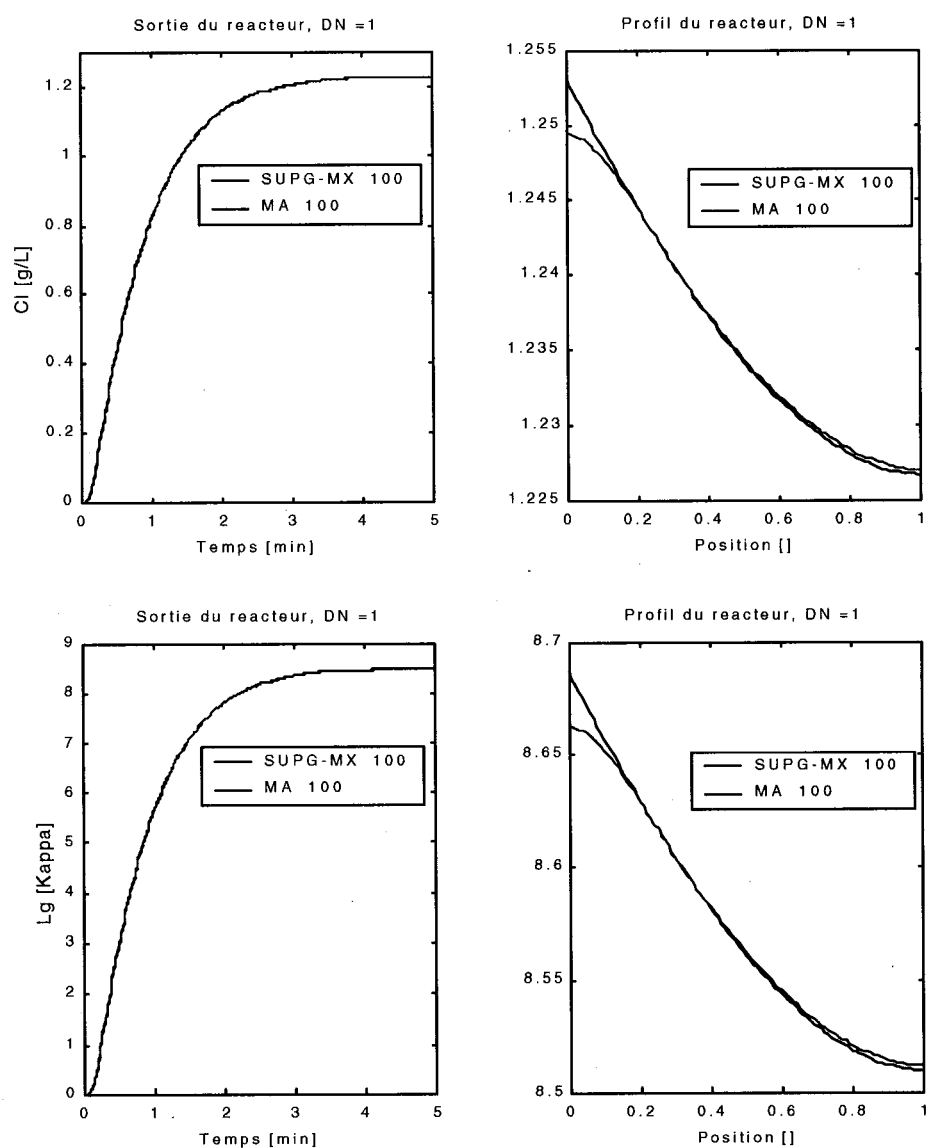


Figure 5.6 Méthode SUPG-MX : Analyse du modèle M3, ND = 1

Résultats de simulation du système dispersif ($DN=10^4$)

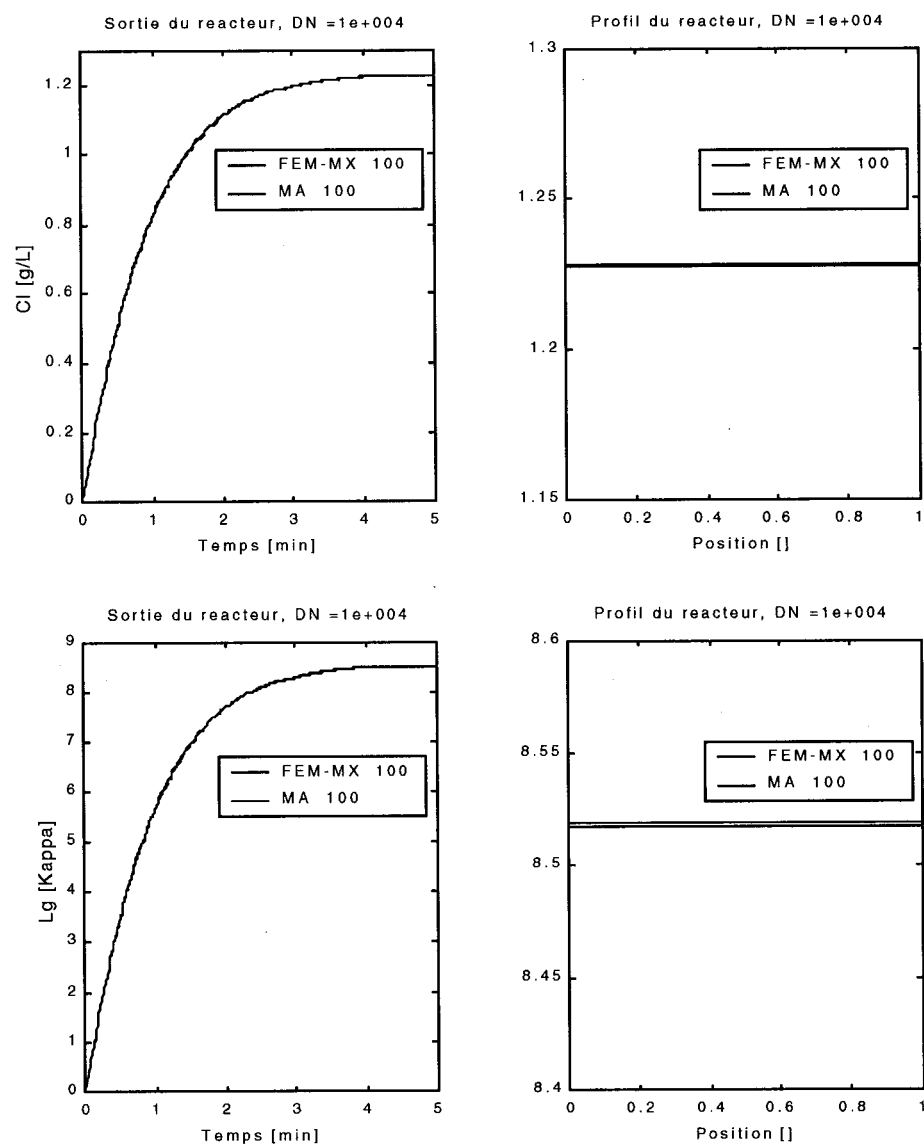


Figure 5.7 Méthode FEM-MX : Analyse du modèle M3, $ND = 10^4$

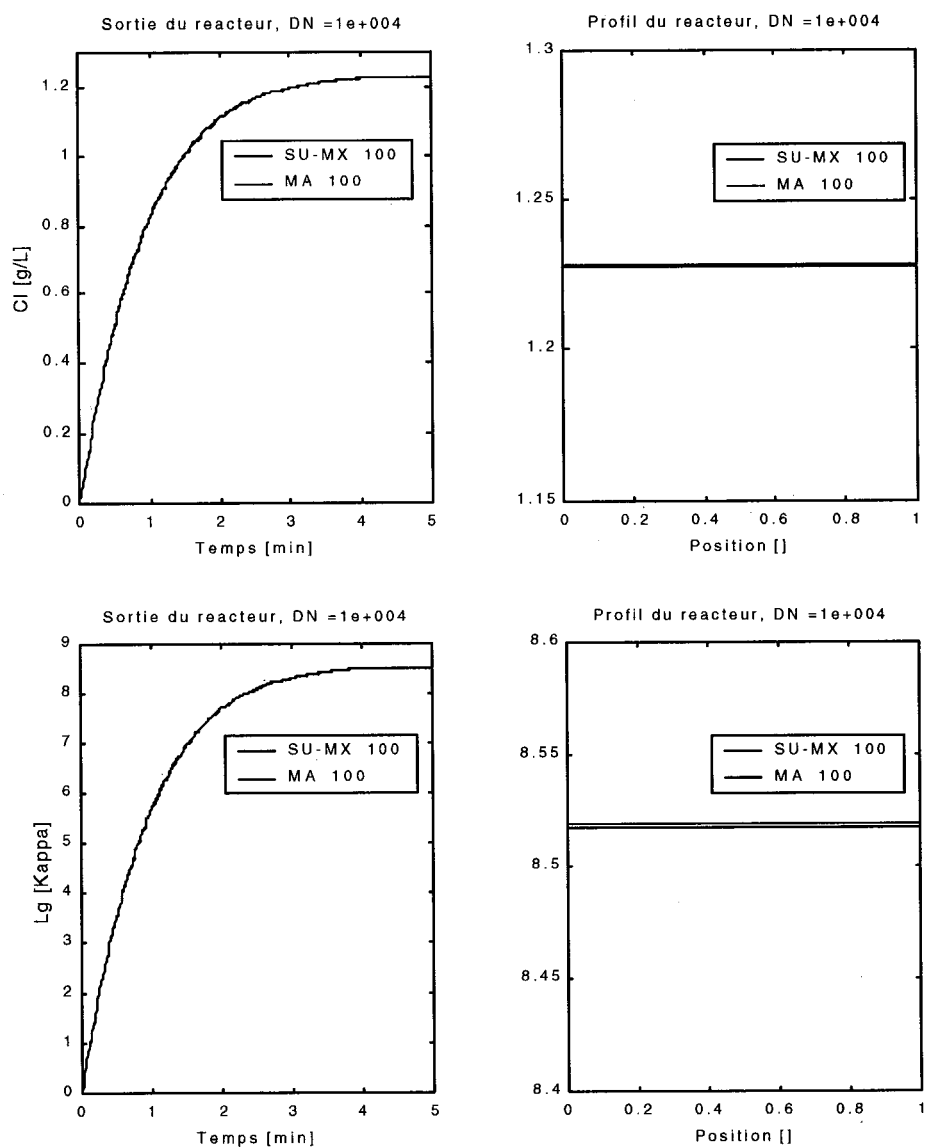


Figure 5.8 Méthode SU-MX : Analyse du modèle M3, $ND = 10^{+4}$

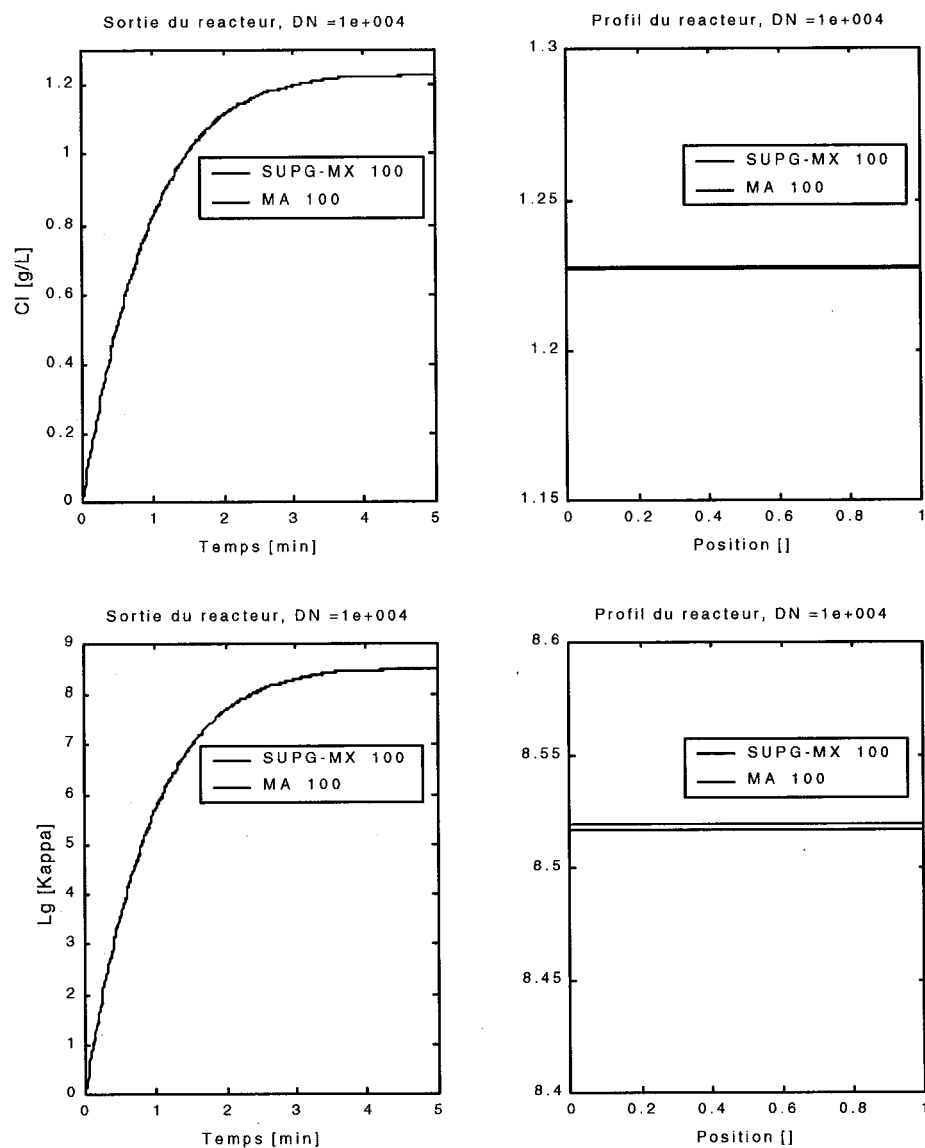


Figure 5.9 Méthode SUPG-MX : Analyse du modèle M3, $ND = 10^{+4}$

Comparaison des méthodes mixtes

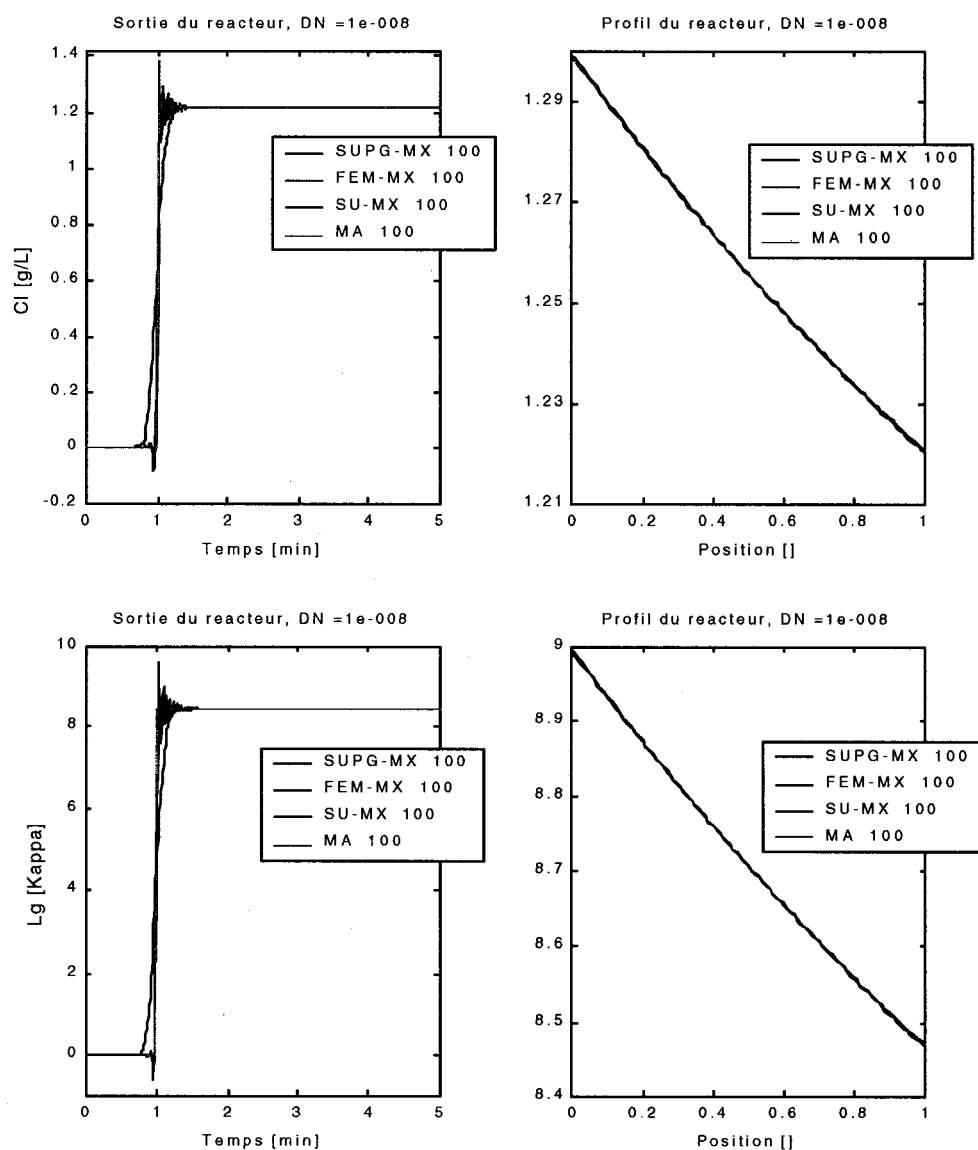


Figure 5.10 Comparaison des méthode mixtes : cas du modèle M3, $ND = 10^{-8}$

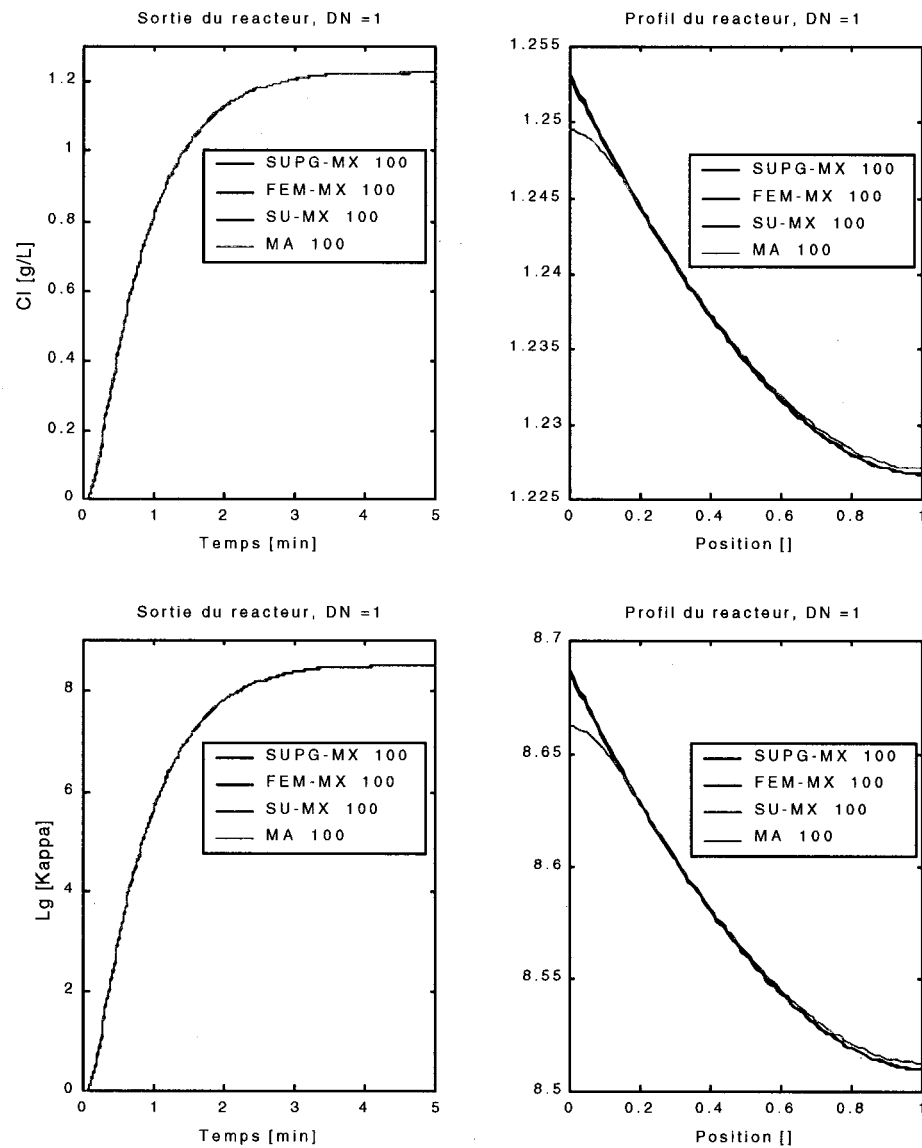


Figure 5.11 Comparaison des méthode mixtes : cas du modèle M3, ND = 1

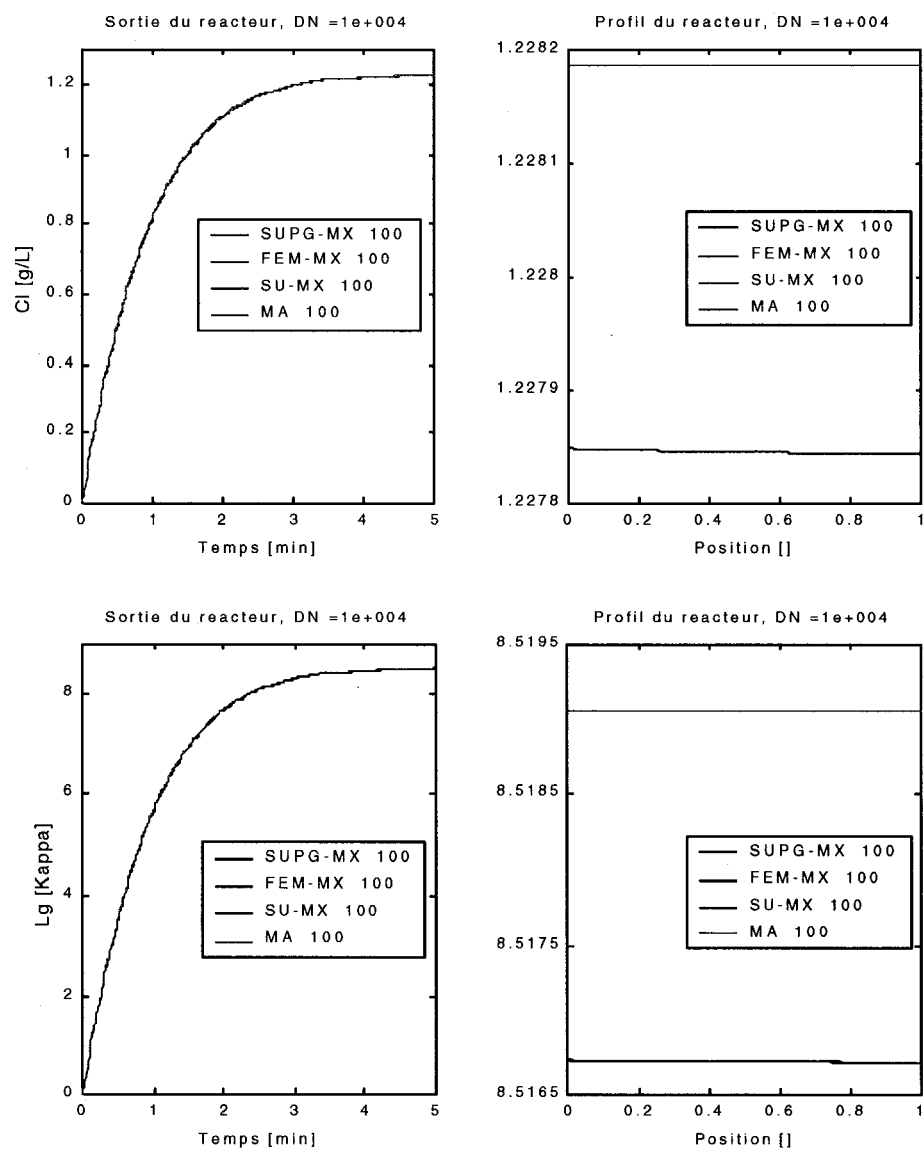


Figure 5.12 Comparaison des méthode mixtes : cas du modèle M3, $ND = 10^{+4}$

CONCLUSION

Ce mémoire a introduit l'utilisation des méthodes de décentrage (SU, SUPG) dans l'analyse des problèmes de type convection-diffusion-réaction (CDR). Pour ce faire, différentes cinétiques chimiques du terme de réaction ont été considérées; à savoir un terme de réaction de cinétique linéaire ou fortement non-linéaire—comme dans cas du réacteur de blanchiment Lignine-Chlore. Par ailleurs, une nouvelle méthode adaptée à l'analyse du problème CDR, a été développée: *la méthode mixte*. Afin de juger de leur performance, ces méthodes ont été confrontées à la méthode par alternance (MA).

Ces analyses ont permis de montrer que les méthodes de décentrage (SU, SUPG) et leurs variantes mixtes (SUPG-MX, SU-MX), éliminent les oscillations numériques qui polluent la solution d'approximation de la méthode de Galerkin (MEF)—dans le cas du problème CDR convectif ($DN \ll 1$). Cependant, les méthodes SU et SU-MX induisent une diffusion numérique excessive dans la solution du système convectif ($DN \ll 1$); ce qui n'est pas le cas des méthodes SUPG et SUPG-MX, qui préservent la caractéristique physique de la solution exacte du problème (diffusion numérique insignifiante). Par ailleurs, contrairement à la méthode MA, les méthodes SUPG et SU ainsi que leurs variantes mixtes (SU-MX, SUPG-MX), donnent une bonne approximation de la solution numérique quant au traitement des conditions frontières à l'entrée d'un système faiblement dispersif ($DN \cong 1$).

Cette étude s'est aussi intéressée à l'influence de la linéarité du terme de réaction sur le temps de simulation du problème CDR. Ainsi, dans le cas d'un terme de réaction de cinétique linéaire, les méthodes variationnelles (MEF, SU, SUPG) sont des algorithmes plus rapides que les méthodes mixtes (MEF-MX, SU-MX, SUPG-MX) et la méthode MA. Par contre, dans le cas d'une cinétique de réaction non-linéaire, la méthode MA et les méthodes mixtes donnent des temps de simulation plus faibles—comparativement aux méthodes variationnelles. De plus, les temps de simulation des méthodes mixtes sont quasi-constants, alors que ceux des méthodes variationnelles augmentent de façon significative avec la non-linéarité de la cinétique chimique. Autrement dit, le temps de simulation doit être pris en compte dans le choix d'une méthode d'analyse des problèmes CDR. Tous ces constats sont résumés au tableau 6.

Tableau 6 Critères de comparaison des méthodes.

	Oscillation Numérique	Diffusion Numérique	Simulation Non-linéaire	Conditions Frontières	Formulation CDR
FEM	Oui	Non	Lente	Exactes	-
SU	Non	Excessive	Lente	Exactes	-
SUPG	Non	Non	Lente	Exactes	-
MA	Non	Non	Rapide	Erronées	Adaptée
FEM-MX	Oui	Non	Rapide	Exactes	Adaptée
SU-MX	Non	Excessive	Rapide	Exactes	Adaptée
SUPG-MX	Non	Non	Rapide	Exactes	Adaptée

D'après ce tableau de comparaison, on retient que seule la méthode mixte SUPG-MX présente toutes les qualités pour l'analyse adéquate du problème CDR. En effet, la méthode SUPG-MX est un algorithme rapide et adapté pour la formulation des problèmes CDR. Par ailleurs, cette méthode permet non seulement d'éliminer les oscillations dans la solution numérique, mais elle préserve également la caractéristique physique de la solution exacte du système fortement convectif—en n'introduisant pas de diffusion numérique. De plus, elle traite avec précision les conditions frontières dans le d'un système faiblement dispersif. En somme, la méthode mixte SUPG-MX est un outil numérique de choix pour la formulation et l'analyse des problèmes de Génie Chimique.

RÉFÉRENCES

- [1]. BEHR, M.A., FRANCA, L.P. et TEZDUYAR, T.E. (1993). Stabilized finite element methods for the velocity-pressure-stress formulation of incompressible flows. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 104, 31-48.
- [2]. BROOKS, A.N. et HUGHES, T.J.R. (1982). Streamline Upwind/Petrov—Galerkin formulations for convection dominated flows with particular emphasis on the incompressible Navier-Stokes equations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 32, 199-259.
- [3]. CHRISTIE, I., GRIFFITHS, D.F. et MITCHELL, A.R. (1976). Finite element methods for second order differential equations with significant first derivatives. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 10, 1389-1396.
- [4]. COURANT, R., ISAACSON, E. et REES, M. (1952). On the solution of non-linear hyperbolic differential equations by finite differences. *Comm. Pure and Applied Math*, V, 243-255.
- [5]. DANCKWERTS, P.V. (1953). Continuous flow systems: Distribution of Residence Times. *Chemical Engineering Science, Genie Chimique*, 1, 1-18.
- [6]. DENDY, J.E. (1974). Two methods of Galerkin type achieving optimum L_2 rates of convergence for first order hyperbolics, SIAM, *Journal for Numerical Analysis*, 11, 637-653.

- [7]. DE VAHL DAVIS, G. et MALLISON, G. (1976). An evaluation of upwind and central difference approximation by a study of recirculating flow. *Computers and Fluids*, 4, 29-43.
- [8]. DOUGLAS, J.JR. et WANG, J. (1989). An Absolutely Stabilized Finite Element Method for the Stokes Problem. *Mathematics of Computation*, 52(186), 495-508.
- [9]. FRANCA, L. P. et FREY, S.L. (1992). Stabilized finite element methods: II. The incompressible Navier-Stokes equations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 99, 209-233.
- [10]. FRANCA, L.P. et HUGHES, T.J.R. (1988). Two classes of mixed finite element methods. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 69, 89-129.
- [11]. FRANCA, L.P., HUGHES, T. et STENBERG, R. (1993). *Stabilized finite element method, in incompressible computational fluids dynamics*. Rapport technique, Cambridge University Press.
- [12]. FRANCA, L.P. et MADUREIRA, A.L. (1993). Element diameter free stability parameters for stabilized methods applied to fluids. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 105, 395-403.
- [13]. GENDRON, S. (1997). *Dynamic model of a chlorine dioxide tower – reaction kinetics and tower dynamics*. Project Log Book CL02001, Paprican.
- [14]. GRESHO, P.M. et LEE, R.L. (1979). Don't suppress the wiggles—They are telling you something!. In: T.J.R. Hughes (ed.), *Finite Element Method for Convection Dominated Flows*, AMD vol. 34 (ASME, New York).

- [15]. Grygiel et Tanguy (1991). Finite Element Solution for Advection-Dominated Thermal Flows. *Comp. Meth. Appl. Mech. Eng.*, 93, 277-289.
- [16]. HUGHES, T.J.R. (1987). Recent progress in the development and understanding of SUPG methods with special reference to the compressible Euler and Navier-Stokes equations. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 7, 1261-1275.
- [17]. HUGHES, T.J.R. et FRANCA, L.P. (1987). A new finite element formulation for computational fluid dynamics: VII. The Stokes problem with various well-posed boundary conditions: symmetric formulations that converge for all velocity/pressure spaces. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 65, 85-96.
- [18]. HUGHES, T.J.R., FRANCA, L.P. et BALESTRA, M. (1986). A new finite element formulation for computational fluid dynamics: V. Circumventing the Babuska-Brezzi condition: A stable Petrov-Galerkin formulation of the Stokes problem accommodating equal-order interpolations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 59, 85-99.
- [19]. HUGHES, T.J.R., FRANCA, L.P. et HUBERT, G. (1989). A new finite element formulation for computational fluid mechanics: VIII. The Galerkin/Least-Squares method for advective-diffusive equations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 73, 173-189.
- [20]. HUGHES, T.J.R., MALLET, M. et MIZUKAMI, A. (1996). A new finite element formulation for computational fluid dynamics: II. Beyond SUPG. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 54, 341-355.

- [21]. IDELSOHN, S., NIGRO, N., STORTI, M. et BUSCAGLIA, G. (1996). A Petrov—Galerkin formulation for advection-reaction diffusion problems. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 136, 27-46.
- [22]. LEONARD, B.P. (1979). A survey of finite differences of opinions on numerical muddling of incompressible defective convection equation. In: T. J. R. Hughes, ed., *Finite Element Method for Convection Dominated Flows*, AMD vol. 34 (ASME, New York).
- [23]. PATANKAR, S.V. (1980). Numerical Heat Transfer and Fluid Flow. *Series in Computational Methods in Mechanics and Thermal Sciences*.
- [24]. RAYMOND, W.H. et GARDER, A. (1976). Selective damping in a Galerkin method for solving wave problems with variable grids. *Monthly Weather Rev.* 104, 1583-1590.
- [25]. REDDY, J.N. (1993). *An Introduction to Finite Element Method (Second edition)*. McGraw-Hill: New-York.
- [26]. RENOU, S. (1999). *Solution of convection-dispersion-reaction equation by a sequencing method*. École Polytechnique de Montréal, Canada.
- [27]. RENOU, S. (2000). *Commande non-linéaire d'un système décrit par des équations paraboliques : application au procédé de blanchiment*. Thèse de doctorat, École Polytechnique de Montréal, Canada.
- [28]. RENOU, S., PERRIER, M., DOCHAIN, D. et GENDRON, S. (2000) *Nonlinear control design for pulp bleaching*. École Polytechnique de Montréal, Canada.
- [29]. ROACHE, P.J. (1976). *Computational Fluid Dynamic*. Hermosa, Albuquerque: NM.

- [30]. RUNCHAL, A.K. et WOLFSTEIN, M. (1969). Numerical integration procedure for the steady state Navier-Stokes equations. *J. Mech. Eng. Sci.*, 11, 445-453.
- [31]. SHAMPINE, L.F et REICHEL, M.W. (1997). The MATLAB ODE Suite. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 18-19.
- [32]. TEZDUYAR, T. et PARK, Y. (1986). Discontinuity capturing finite element formulation for nonlinear convection-diffusion-reaction equations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 59, 329-336.
- [33]. VALENTIN, F.G.C. et FRANCA, L.P. (1997). *Combining stabilized finite element methods*.
- [34]. WAHLBIN, L.B. (1974). A dissipative Galerkin method for the numerical solution of first order hyperbolic equations. In C. de Boor, (ed.). *Mathematical Aspects of Finite Elements in Partial Differential Equations*, Academic Press: New-York, 147-169.

ANNEXE I

LOGICIEL DE SIMULATION

I.1 Structure et fonctionnement

La structure de ce logiciel de résolution est présentée à la figure I.1.

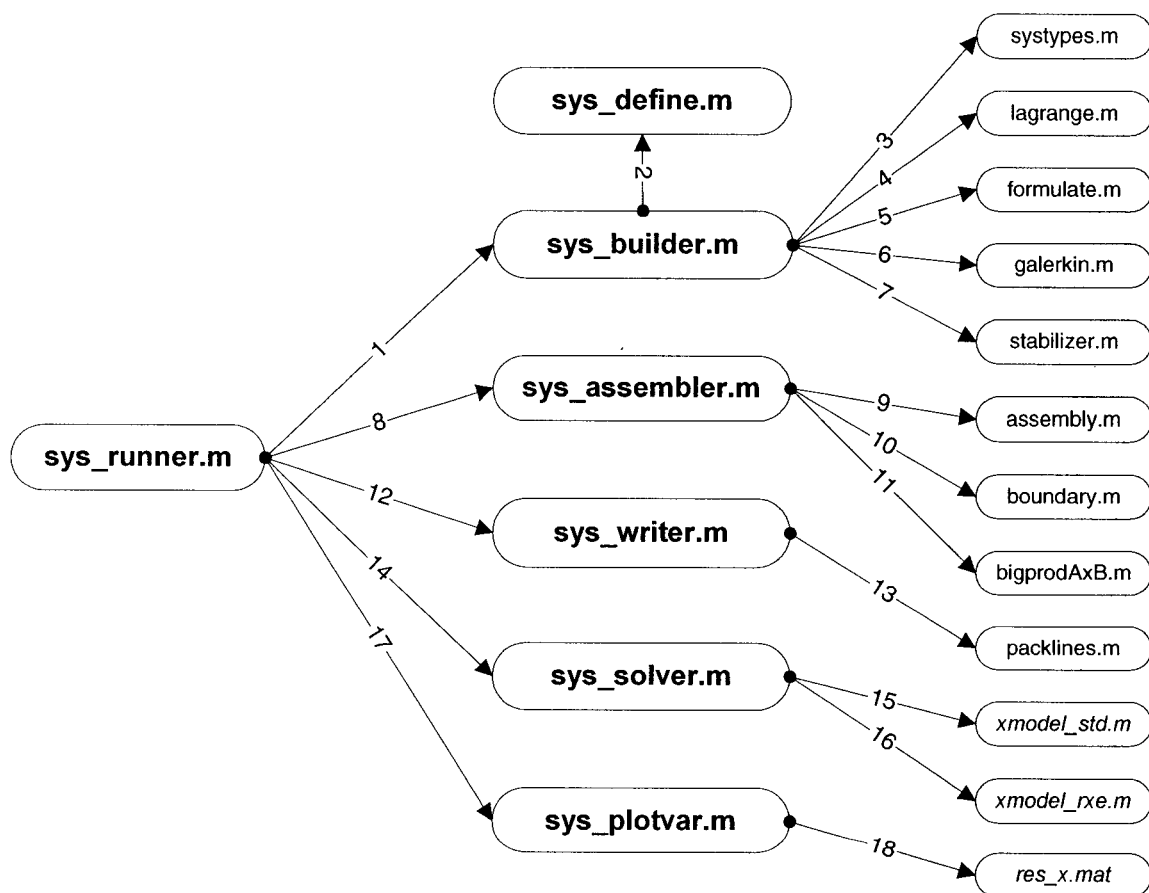


Figure I.1 Structure du logiciel de simulation

Cette figure présente les principaux modules ainsi que quelques fonctions utilitaires du logiciel de simulation. Une brève description des principaux modules (identifiés en gras) est faite dans la section I.2. De plus, les codes sources de toutes ces fonctions sont fournis à la section III.4 de cette annexe.

Remarque : Ce logiciel de simulation permet aussi de faire des analyses en fréquences des systèmes d'EDP. Cependant, cette fonctionnalité n'a pas été utilisée dans le cadre de ce mémoire.

I.2 Utilisation et limites

Ce logiciel est destiné à la simulation des EDP de variables multiples en 1-Dimension. Il permet de simuler plusieurs méthodes de résolution, à la méthode de Galerkin (MEF), les méthodes de décentrage (SU, SUPG) et leurs variantes mixtes (SU-MX, SUPG-MX, MEF-MX) ainsi que la méthode par alternance (MA). Tous les problèmes de type convection-diffusion-réaction peuvent être simulés avec ce logiciel. Par contre, les coefficients de convection, de diffusion de vitesse de réaction doivent être des constantes. Toutefois, une légère modification du logiciel pourrait permettre de prendre en compte le cas où ces coefficients sont variables.

Ce logiciel utilise uniquement les fonctions d'interpolation de Lagrange. Ces fonctions sont construites dans le module *LAGRANGE.M*. Ainsi, on peut faire usage d'autres types de fonction d'interpolation en appelant le module approprié au lieu de la fonction

LAGRANGE.M. Par ailleurs, puisque la méthode SUPG n'utilise que des fonctions poids linéaires, dans le cas de l'analyse avec cette méthode, il faudra éviter de prendre des fonctions d'interpolation non-linéaires.

1.3 Description des routines

✓ **SYS_DEFINE.M**

Ce module permet de définir une série de systèmes d'équations différentielles partielles à résoudre. Chaque équation d'un système d'EDP est définie par les coefficients de diffusion, de convection et l'expression du terme de la réaction—si l'écoulement est accompagnée d'une réaction chimique. De plus, ce module permet de définir d'autres constantes reliées au système d'EDP.

✓ **SYS_RUNNER.M**

Cette routine est le point d'entrée du logiciel de résolution. Elle appelle toutes les autres routines—à savoir *SYS_BUILDER.M*, *SYS_ASSEMBLER.M*, *SYS_WRITER.M*, *SYS_SOLVER.M* et *SYS_PLOTVAR.M*. Ce module permet d'identifier la liste des systèmes d'EDP à inclure dans la simulation ainsi que les paramètres de résolution de chaque système (intervalle de temps, conditions frontières, méthodes de résolution, maillages, ordre des éléments du maillage, etc.). En appelant la routine *SYS_PLOTVAR.M*, ce module permet de tracer les courbes de variations temporelles et spatiales des grandeurs physiques des systèmes d'EDP.

✓ **SYS_BUILDER.M**

Cette routine fait la formulation variationnelle du système d'EDP sur un élément du maillage. Cette étape permet d'obtenir le modèle élémentaire (vecteurs et matrices élémentaires).

✓ **SYS_ASSEMBLER.M**

Cette routine fait l'assemblage des vecteurs et matrices élémentaires (modèle élémentaire) construits dans la routine *SYS_BUILDER.M*. Cette étape aboutit à l'obtention du modèle global (matrices et vecteurs d'assemblage) après l'imposition des conditions frontières.

✓ **SYS_WRITER.M**

Cette routine génère deux fichiers dynamiques *XMODEL_STD.M* et *XMODEL_RXE.M* pour chaque méthode de simulation utilisée dans l'analyse d'un système d'EDP donné. Ces fichiers contiennent les équations différentielles du modèle global construit dans le module *SYS_ASSEMBLER.M*.

✓ **SYS_SOLVER.M**

Ce module résout le système d'équations différentielles ordinaires (ODE) défini dans les fichiers *XMODEL_STD.M* et *XMODEL_RXE.M*. La séquence d'appel de ces fichiers dépend de la méthode de résolution utilisée. Les résultats de simulation de chaque système (pour une méthode de résolution donnée) sont sauvegardés dans un fichier *RES.MAT*.

✓ **SYS_PLOTVAR.M**

Ce module utilise les résultats de simulation sauvegardés dans un fichier *RES.MAT* pour tracer les profils et les variations dans le temps des grandeurs du système analysé.

I.4 La fonction ODE15S de Matlab

ODE15S Solve stiff differential equations and DAEs, variable order method.

$[T,Y] = \text{ODE15S}('F',TSPAN,Y0)$ with $TSPAN = [T0 \ TFINAL]$ integrates the system of differential equations $y' = F(t,y)$ from time $T0$ to $TFINAL$ with initial conditions $Y0$. 'F' is a string containing the name of an ODE file. Function $F(T,Y)$ must return a column vector. Each row in solution array Y corresponds to a time returned in column vector T . To obtain solutions at specific times $T0, T1, \dots, TFINAL$ (all increasing or all decreasing), use $TSPAN = [T0 \ T1 \ \dots \ TFINAL]$.

$[T,Y] = \text{ODE15S}('F',TSPAN,Y0,OPTIONS)$ solves as above with default integration parameters replaced by values in $OPTIONS$, an argument created with the $ODESET$ function. See $ODESET$ for details. Commonly used options are scalar relative error tolerance 'RelTol' ($1e-3$ by default) and vector of absolute error tolerances 'AbsTol' (all components $1e-6$ by default).

ODE15S can solve problems $M(t,y)*y' = F(t,y)$ with a mass matrix M that is nonsingular. Use $ODESET$ to set Mass to 'M', 'M(t)', or 'M(t,y)' if the ODE file is coded

so that $F(T,Y,'mass')$ returns a constant, time-dependent, or time- and state-dependent mass matrix, respectively. The default value of Mass is 'none'. See FEM1ODE, FEM2ODE, or BATONODE.

If M is singular, $M(t)*y' = F(t,y)$ is a differential-algebraic equation (DAE). DAEs have solutions only when y_0 is consistent, i.e. there is a vector yp_0 such that $M(t_0)*yp_0 = f(t_0,y_0)$. ODE15S can solve DAEs of index 1 provided that M is not state dependent and y_0 is sufficiently close to being consistent. You can use ODESET to set MassSingular to 'yes', 'no', or 'maybe'. The default of 'maybe' causes ODE15S to test whether the problem is a DAE. If it is, ODE15S treats y_0 as a guess, attempts to compute consistent initial conditions that are close to y_0 , and goes on to solve the problem. When solving DAEs, it is very advantageous to formulate the problem so that M is diagonal (a semi-explicit DAE).

1.5 CD-ROM du logiciel

Disponible sur demande.

ANNEXE II

LA FORMULATION VARIATIONNELLE DE GALERKIN

II.1 Les méthodes de résidus pondérés

Dans le schéma de la résolution des EDP par les méthodes variationnelles, les équations sont mises sous la forme intégrale. La solution d'approximation est considérée comme étant une combinaison linéaire de fonctions d'approximation dont les coefficients sont inconnus. Une approximation de la variable U peut être exprimée par (II.1) :

$$U = \sum_{k=1}^{N_G} U_k \varphi_k \quad (\text{II.1})$$

Dans cette approximation, φ_k sont des fonctions de base et U_k représentent un ensemble de paramètres ou coefficients inconnus. Dans la plupart des méthodes d'approximation, ces paramètres sont les valeurs nodales de la solution U . Les coefficients U_k des fonctions d'approximation φ sont alors déterminés de sorte que la formulation intégrale équivalente aux équations différentielles originales soit satisfaite. La différence entre les méthodes variationnelles utilisées réside alors dans le choix des fonctions d'approximation—aussi appelées fonctions d'interpolation, utilisées dans la forme résiduelle intégrale. La difficulté de l'analyse par les méthodes variationnelles réside principalement dans le choix des fonctions poids sur un domaine de solution.

La principale caractéristique de la méthode des éléments finis est qu'elle permet de diviser le domaine de résolution du problème en plusieurs sous-domaines appelés éléments finis. De plus, contrairement aux autres méthodes traditionnelles variationnelles qui présentent une difficulté quant au choix des fonctions d'approximation, la MEF permet de remédier à ce désavantage. En effet, la MEF donne une démarche systématique à suivre pour construire les fonctions d'approximation sur chaque sous-région du domaine. Ces fonctions d'approximation sont construites en se basant sur le fait que toute fonction continue peut être représentée comme une combinaison linéaire de fonctions polynomiales. Les équations algébriques reliant les différents coefficients des fonctions poids sont alors obtenues en satisfaisant aux équations originales mises sous la forme intégrale équivalente sur chaque élément fini. Ainsi, les fonctions d'approximation sont prises comme des fonctions polynômes algébriques et les coefficients indéterminés représentent les valeurs de la solution aux points sélectionnés appelés nœuds de résolution. Ces points sont choisis sur les frontières et à l'intérieur de l'élément. Ces fonctions d'approximation sont aussi appelées fonctions d'interpolations car elles sont dérivées du concept de la théorie d'interpolation.

II.2 Formulation variationnelle de Galerkin

Pour définir la formulation variationnelle de Galerkin, on utilise une famille de fonctions test (ou d'interpolation) S^h et de fonctions poids V^h . Dans le cas de la méthode de

Galerkin, S^h et V^h sont composés de la même classe de fonctions. La formulation variationnelle de Galerkin dans le cas de l'équation convection-diffusion-réaction consiste alors à trouver une fonction poids $\phi^h \in S^h$ de sorte que pour toute fonction test $W^h \in V^h$, on peut écrire la forme bilinéaire:

$$B(W^h, \phi^h) = L(W^h) \quad (\text{II.2})$$

où

$$B(W^h, \phi^h) = \int_{\Omega} \left(W^h \mathbf{A} \cdot \nabla \phi^h + \nabla W^h \mathbf{D} \cdot \nabla \phi^h + R(\phi^h) \right) d\Omega \quad (\text{II.3a})$$

$$L(W^h) = \int_{\Omega} W^h f d\Omega + \int_{\Gamma_h} W^h h d\Gamma \quad (\text{II.3b})$$

Dans ces équations, les fonctions test W^h doivent satisfaire les conditions frontières (Dirichlet ou Danckwerts). Une analyse d'erreur de la formulation Galerkin permet aussi de montrer que l'erreur d'approximation dépend directement du nombre de Péclet Pe et que le coefficient de convection agit comme une constante de stabilisation (II.3a-b).

II.3 Analyse d'erreur

Les oscillations numériques qui apparaissent dans les solutions des équations d'écoulement peuvent s'expliquer par une analyse d'erreur. En effet, pour avoir la stabilité de la forme de l'équation (II.2), il faut que respecter l'inégalité donnée par l'expression (II.4) :

$$B(W^h, \phi^h) \geq c \|W^h\|^2 \quad (\text{II.4})$$

où c est une constante et $\|\cdot\|$ une norme. Il faut aussi être consistant, i.e

$$B(W^h, e) = 0 \quad (\text{II.5})$$

où e désigne l'erreur et est défini par (II.6)

$$e = \phi^h - \phi \quad (\text{II.6})$$

Brooks & Hughes (1982) ont montré que la stabilité, la consistance et la continuité entre éléments dans la forme bilinéaire $B(\cdot, \cdot)$ sont suffisantes pour prouver la convergence dans la norme $\|\cdot\|$.

$$\|e\| \leq c (\phi^h) h^r \quad (\text{II.7})$$

où r augmente avec le coefficient de convection A , on peut alors écrire :

$$B(W^h, w^h) = A \|\nabla W^h\|^2 \quad (\text{II.8})$$

où $\|\cdot\|$ désigne la norme dans $L_2(\Omega)$.

Ceci permet de déduire une estimation de l'erreur sous la forme de l'équation (II.9)

$$\|\nabla e\| = \theta ((1 + \text{Pe}) h_e^n) \quad (\text{II.10})$$

où Pe est le nombre de Péclet du maillage, h_e représente la taille d'une maillage et n identifie le degré des fonctions tests. L'apparition du nombre de Péclet Pe dans l'expression de l'erreur est due au fait que le coefficient de convection A est la constante de stabilisation dans l'équation (II.10).

ANNEXE III

IMPOSITION DES CONDITIONS FRONTIÈRES

III.1 Règles d'imposition des conditions frontières

Les règles d'imposition des conditions frontières dictent que lorsqu'une variable essentielle U_K est imposée à une extrémité ($k=1, N$)—donc connue, la variable naturelle Q_K à ce même point est inconnue et vice-versa. On peut ainsi identifier cinq cas d'imposition des conditions frontières. Ces différents cas sont présentés ci-dessous.

1. U_1 et U_N sont connues : 2 conditions essentielles
2. Q_1 et Q_N sont connues : 2 conditions naturelles –ou conditions de Danckwerts
3. U_1 et Q_N sont connues : 1 condition essentielle + 1 condition naturelle
4. Q_1 et U_N sont connues : 1 condition naturelle + 1 condition essentielle

Partition de l'équation d'assemblage

Dans les quatre premiers cas, une partition de l'équation matricielle globale (2.34, 2.35) est parfois nécessaire. En effet, si l'on connaît une variable primaire U_K ($k=1, N$), alors il va de soit qu'il n'y a plus lieu de calculer cette valeur mais plutôt la valeur de la variable secondaire Q_K ($k=1, N$) correspondante, et vice versa. De ce fait, une partition du système global s'impose afin de séparer les variables inconnues U_I et Q_I des paramètres connus U_C et Q_C . Ainsi, l'équation (2.34) se réécrit sous la forme suivante :

$$\begin{bmatrix} M_{11}^p & M_{12}^p \\ M_{21}^p & M_{22}^p \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \dot{U}_I \\ \dot{U}_C \end{Bmatrix} + \begin{bmatrix} K_{11}^p & K_{12}^p \\ K_{21}^p & K_{22}^p \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} U_I \\ U_C \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} S_C \\ S_I \end{Bmatrix} \quad (\text{III.1})$$

Dans cette expression, dans le cas où les vecteurs U_C et S_C sont connus et que les vecteurs U_I et S_I , sont inconnus, on peut donc calculer U_I par l'équation (III.2). Une fois U_I déterminé, on peut calculer S_I avec l'équation (III.3).

$$M_{11}^p \dot{U}_I + K_{11}^p U_I = S_C - M_{12}^p \dot{U}_C - K_{12}^p U_C \quad (\text{III.2})$$

$$S_I = M_{21}^p \dot{U}_I + M_{22}^p \dot{U}_C + K_{21}^p U_I + K_{22}^p U_C \quad (\text{III.3})$$

III.2 Conditions de Danckwerts

Les conditions de Danckwerts (Danckwerts, 1953) aux extrémités du domaine s'écrivent comme suit :

$$\begin{cases} \left. \frac{\partial u(z,t)}{\partial t} \right|_{z=0} = \frac{C}{D} (u(0,t) - u_{in}) & (a) \\ \left. \frac{\partial u(z,t)}{\partial t} \right|_{z=L} = 0 & (b) \end{cases} \quad (\text{III.4})$$

Si l'on choisit d'utiliser les conditions de Danckwerts, on doit tenir compte de cette condition dans la résolution du système global. Il faut donc transformer l'équation du

système global (III.1) afin d'inclure les conditions frontières de Danckwerts (III.4a-b).

Pour ce faire, on peut réécrire la condition (III.4a) comme suit :

$$\left. \frac{\partial u(z,t)}{\partial t} \right|_{z=0} = \frac{C}{D} (U_1 - U_{in}) \quad (III.5)$$

Où U_1 est la variable globale primaire au nœud 1 (i.e., $z=0$) et la grandeur C_0 identifie la concentration à l'entrée du réacteur. Par ailleurs, on sait qu'à l'entrée du réacteur, S_1 est donné par l'équation (III.6).

$$S_1 = Q_1^1 = \left[D \left. \frac{du(z,t)}{dz} \right|_{z=0} \right] \quad (III.6)$$

À partir de (III.5), on peut se réécrire l'équation (III.6) sous la forme

$$S_1 = C (U_1 - C_0) \quad (III.7)$$

ou encore

$$U_1 = \frac{1}{C} (S_1 + C_0) \quad (III.8)$$

Ainsi, les équations (III.7, III.8) relient les variables S_1 et U_1 . L'insertion des conditions de Danckwerts peut alors se faire de deux façons :

1. Remplacer l'expression de S_1 donnée par l'équation (III.7), dans l'équation globale d'assemblage (III.1) puis réarranger cette dernière.
2. Remplacer l'expression de U_1 donnée par l'équation (III.8), dans l'équation globale d'assemblage (III.1) puis réarranger cette dernière.

La première est plus avantageuse car elle ne modifie que la première ligne du système d'équation matricielle (III.1). Quant à la deuxième façon de procéder, elle a le fâcheux désavantage de modifier toutes les lignes du système d'équation (III.1), donc de tous les éléments du vecteur S et ceux de la première colonne A_{1k} des matrices K et M . La résolution du problème dans le cas des conditions de Danckwerts est donc faite avec la transformation (1). Les différentes étapes de cette transformation sont développées ci-dessous. La première ligne du système d'équation matricielle (III.1) s'écrit :

$$M_{11} \dot{U}_1 + K_{11} U_1 = S_1 \quad (\text{III.9})$$

$$\text{avec } S_1 = C (U_1 - C_o) \quad (\text{III.10})$$

d'où

$$M_{11} \dot{U}_1 + K_{11} U_1 = C (U_1 - C_o) \quad (\text{III.11})$$

En réarrangeant l'équation (III.11), on obtient :

$$M_{11} \dot{U}_1 + (K_{11} - C) U_1 = -C C_o \quad (\text{III.12})$$

Si on pose

$$\begin{cases} K'_{11} = K_{11} - C \\ S'_1 = -C C_o \end{cases} \quad (\text{III.13})$$

alors l'équation (III.12) devient :

$$M_{11} \dot{U}_1 + K'_{11} U_1 = S'_1 \quad (\text{III.14})$$

L'équation (III.14) est le résultat de l'intégration de la condition frontière (III.4a) de Danckwerts dans la première ligne de l'équation matricielle (III.1) lorsqu'on utilise la transformation (1). Les équations (III.9 et III.14) sont similaires à la seule exception que les éléments K_{11} et S_1 sont remplacés respectivement par K'_{11} et S'_1 . Après l'imposition des conditions de Danckwerts, la forme de l'équation matricielle (III.1) reste inchangée. Seuls les éléments K_{11} de la matrice K et S_1 du vecteur S sont affectés. Tous les autres éléments des matrices M , K et du vecteur S restent inchangés.

ANNEXE IV

SIMULATION DU MODÈLE LIGNINE-CHLORE

Ce annexe présente les résultats de simulation du modèle cinétique M3, du réacteur de blanchiment Lignine-Chlore décrit au chapitre 5 de ce rapport.

Résultats de simulation du système convectif ($DN=10^{-8}$)

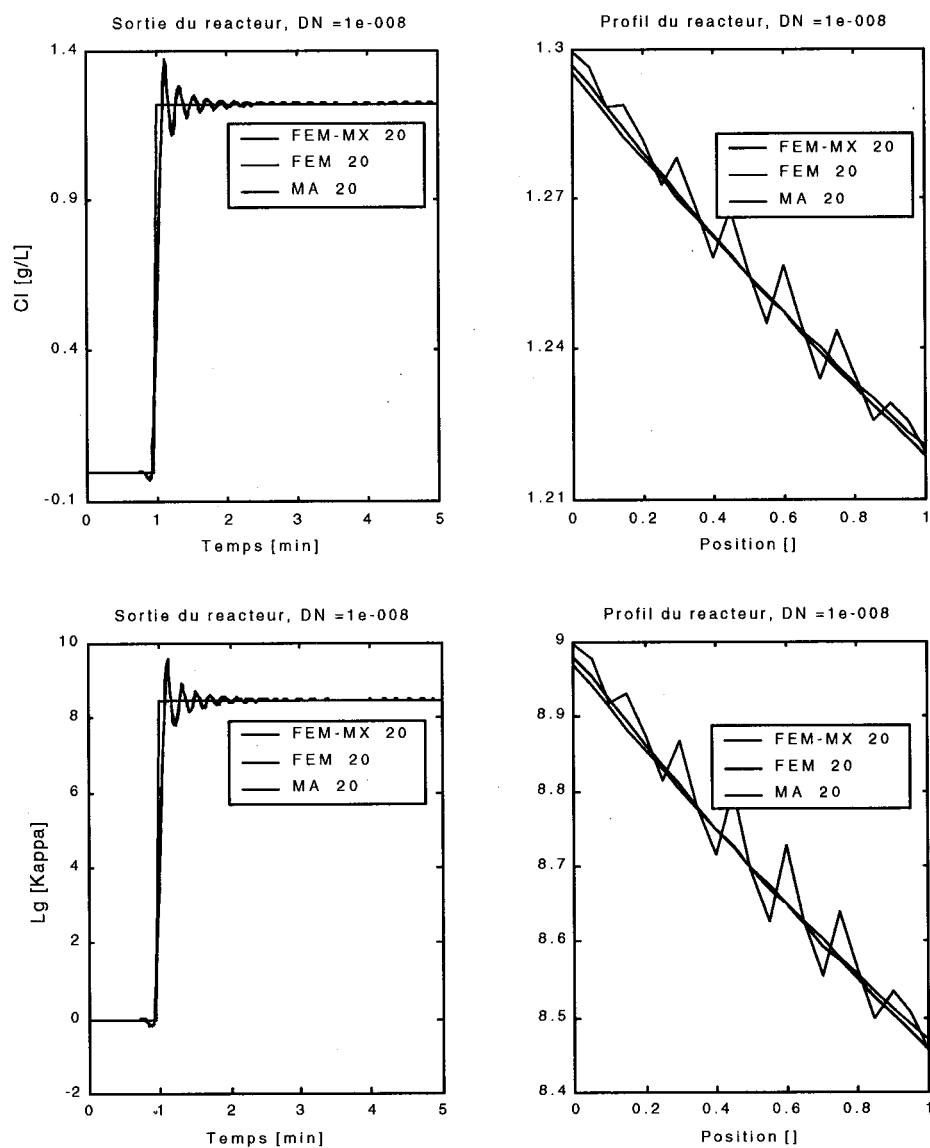


Figure IV.1 Analyse FEM et FEM-MX du modèle M3, $ND = 10^{-8}$

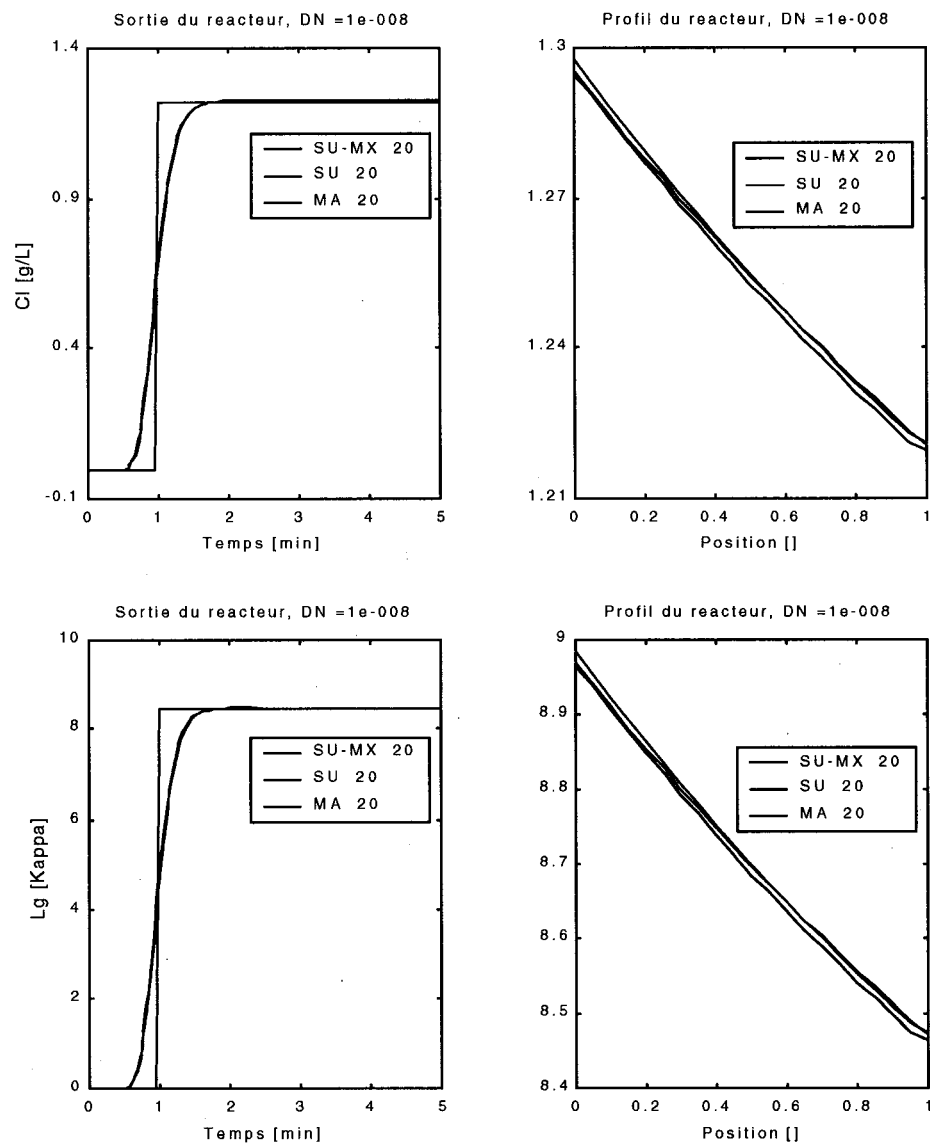


Figure IV.2 Analyse SU et SU-MX du modèle M3, $ND = 10^{-8}$

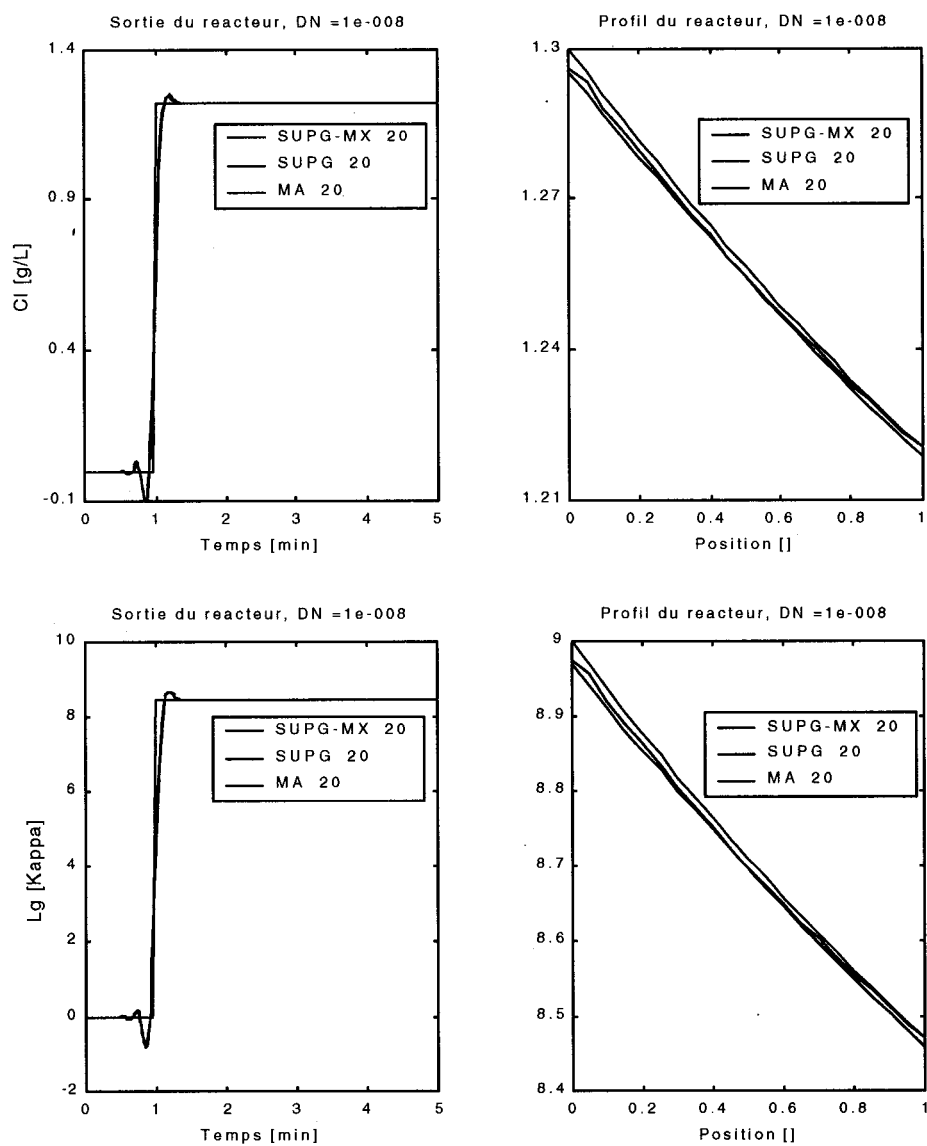


Figure IV.3 Analyse SUPG et SUPG-MX du modèle M3, $ND = 10^{-8}$

Résultats de simulation du système intermédiaire (DN=1)

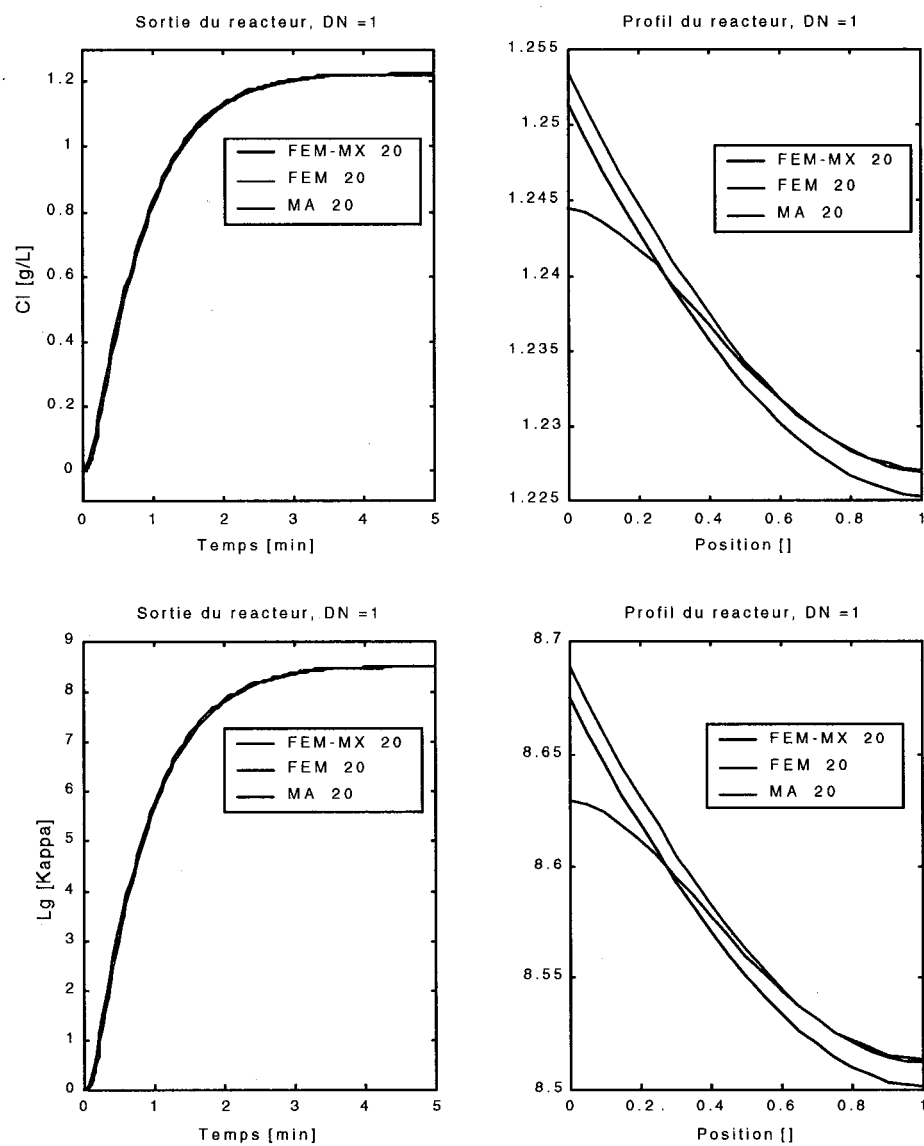


Figure IV.4 Analyse FEM et FEM-MX du modèle M3, ND = 1

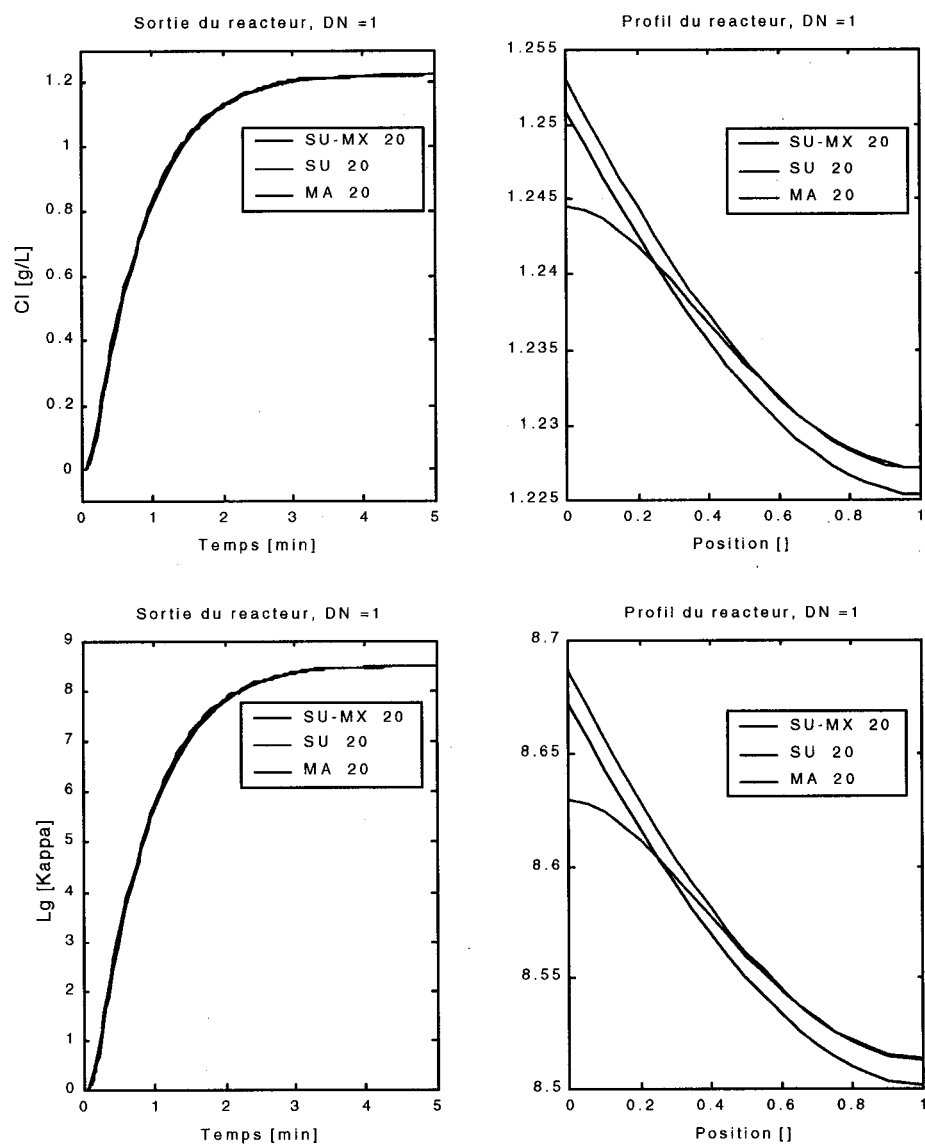


Figure IV.5 Analyse SU et SU-MX du modèle M3, ND = 1

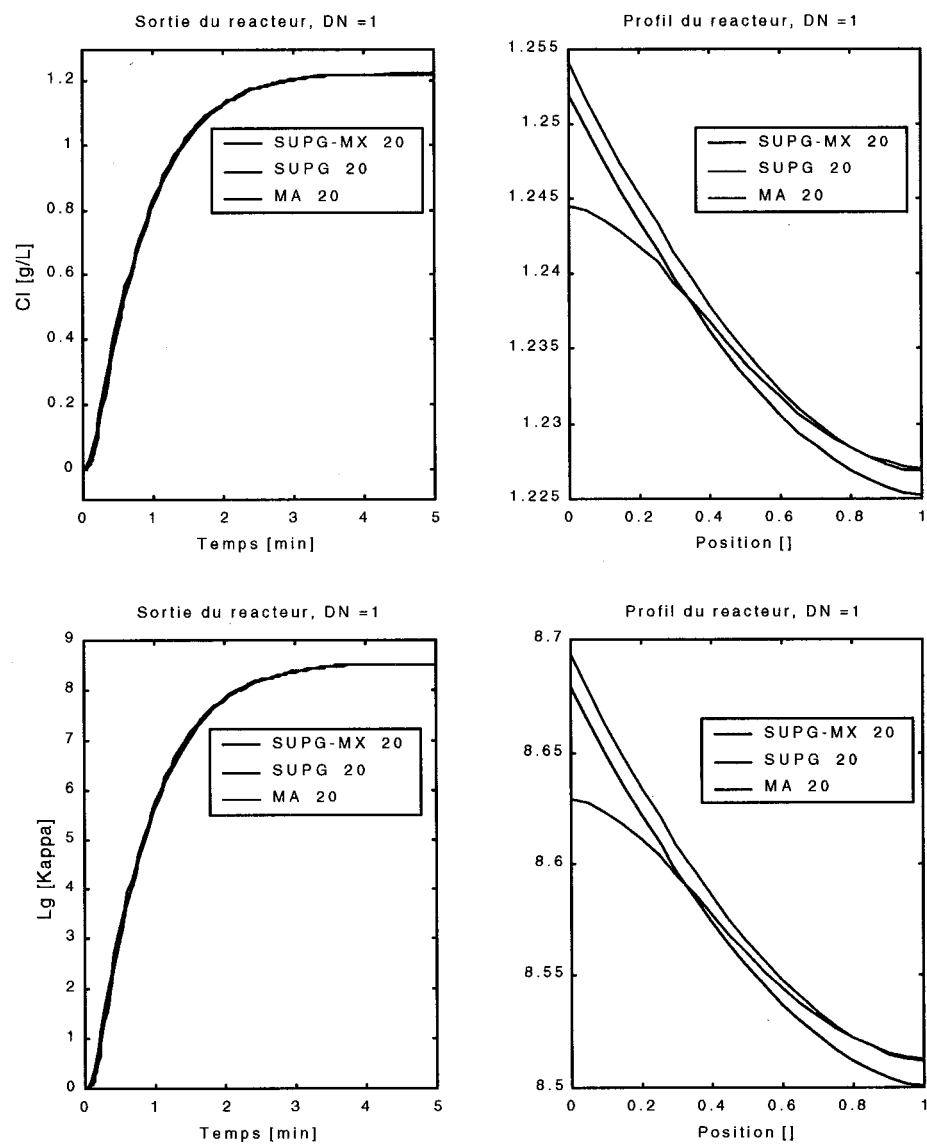


Figure IV.6 Analyse SU et SUPG-MX du modèle M3, ND = 1

Résultats de simulation du système dispersif ($DN=10^{+4}$)

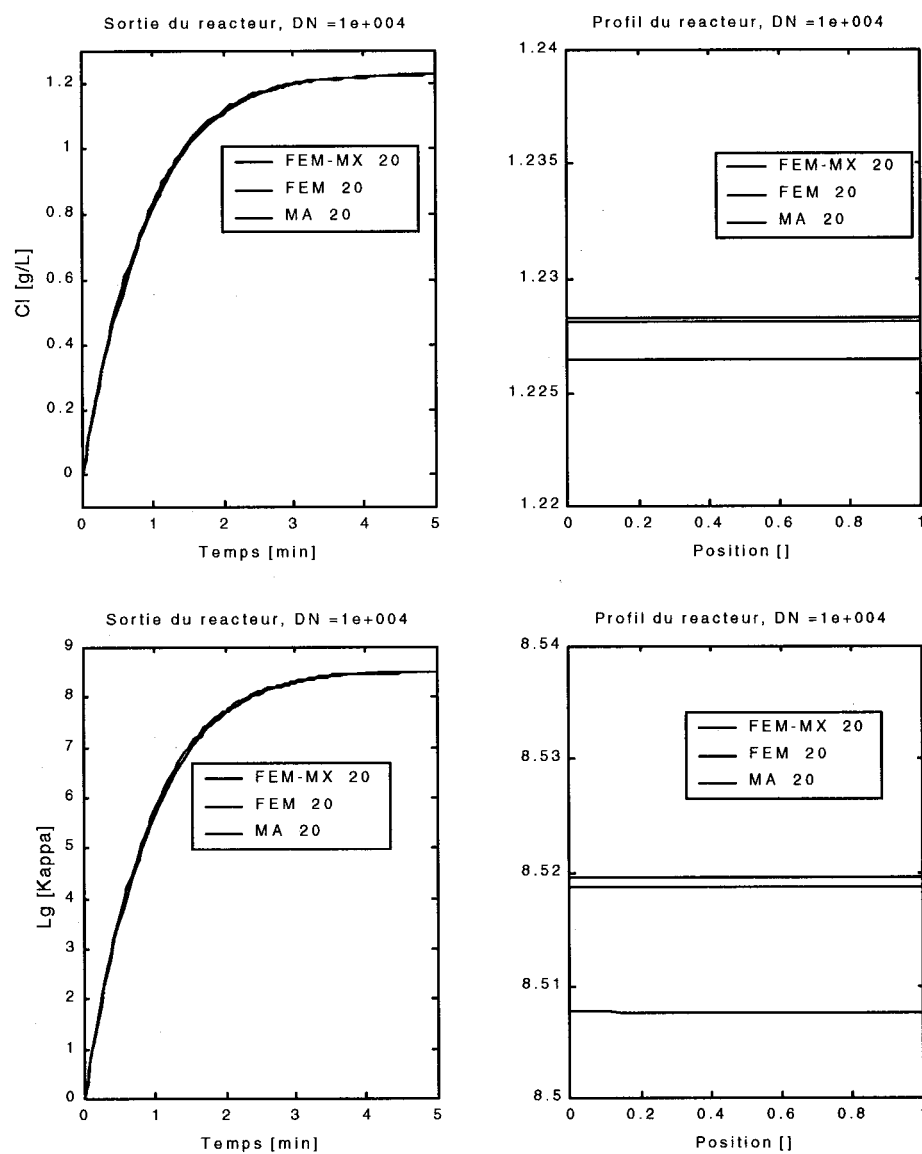


Figure IV.7 Analyse FEM et FEM-MX du modèle M3, $ND = 10^{+4}$

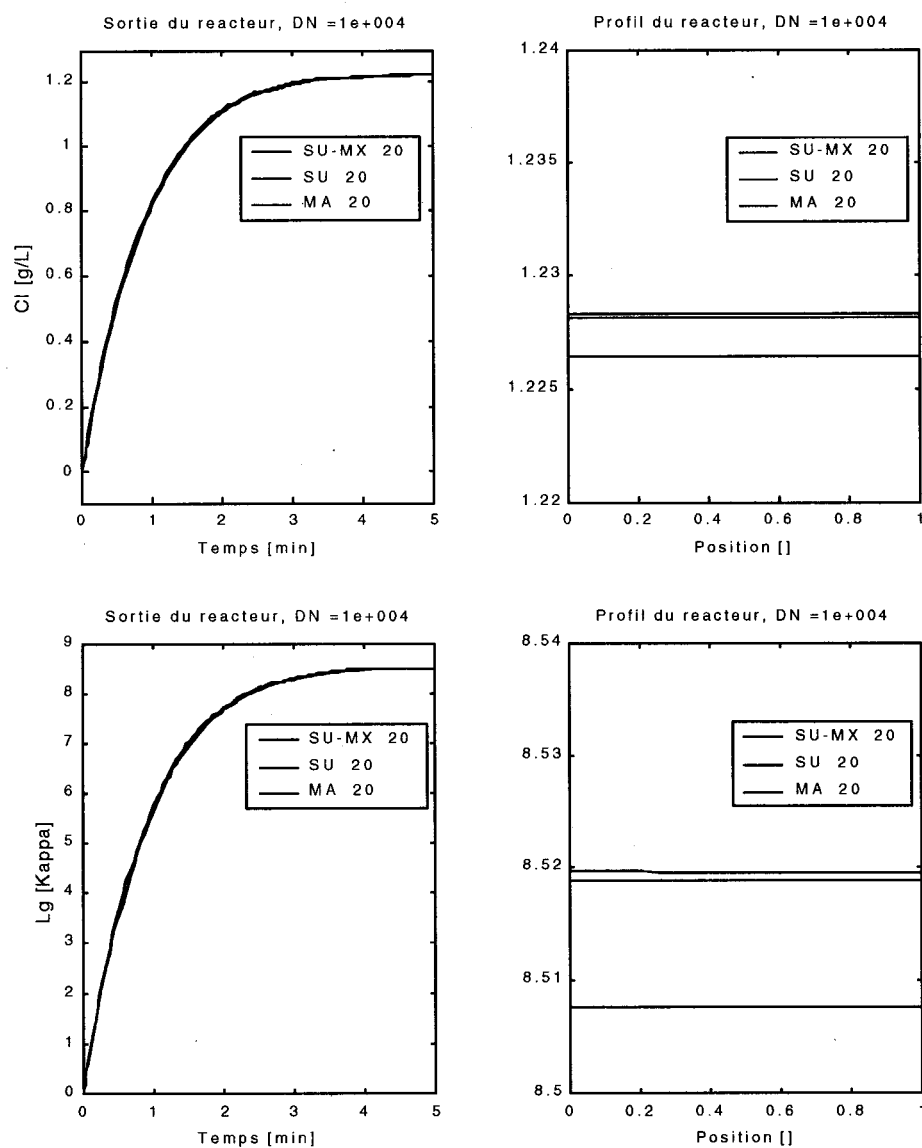


Figure IV.8 Analyse SU et SU-MX du modèle M3, $ND = 10^4$

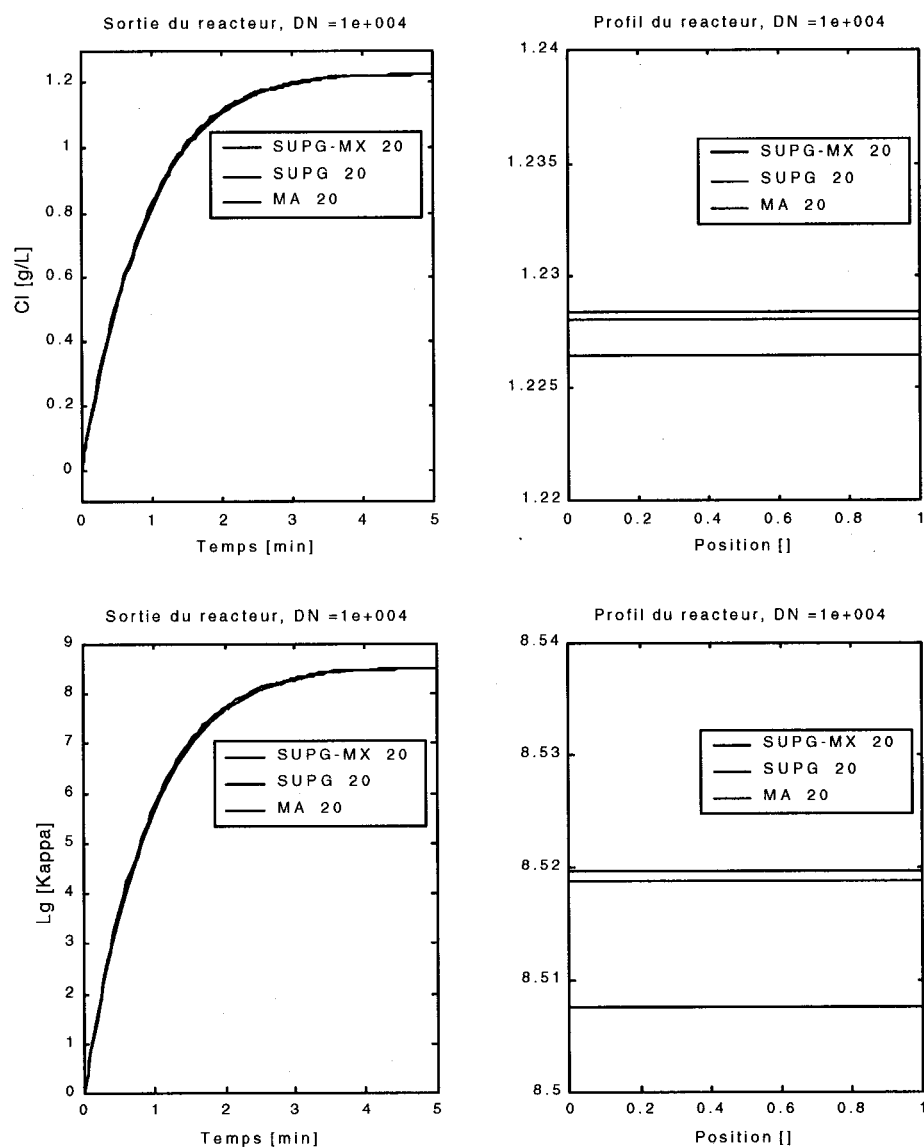


Figure IV.9 Analyse SUPG et SUPG-MX du modèle M3, $ND = 10^4$

ANNEXE V

UNITÉS DE MÉSURE SI

1. Longueurs et distances

mètre = m

centimètre = cm

millimètre = mm

2. Aires

mètre carré ou mètre cube = m² ou m³

centimètre carré ou centimètre cube = cm² ou cm³

millimètre carré ou millimètre cube = mm² ou mm³

3. Durées

milliseconde = ms

centiseconde = cs

seconde = s

minute = min

heure = h

jour = d

année = a

4. Masses

gramme = g

kilogramme = kg

5. Températures

degré Celsius = C

6. **Angles**

degré = d

minute = '

seconde = "

7. **Vitesse**

centimètre par seconde = cm/s

kilomètre par heure = Km/h

tour par minute = tr/min

cycle par seconde = c/s