

**République Algérienne Démocratique et Populaire**  
**Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique**  
**Université Mouloud MAMMERI, Tizi-Ouzou**



**Faculté de Génie Electrique et d'Informatique**  
**Département d'Automatique**

**Mémoire de Fin d'Etudes**

En vue de l'obtention du diplôme

*D'Ingénieur d'Etat en Automatique*

# *Thème*

*Simulation d'un Système à Paramètres  
Distribués par la Méthode de Séparation  
d'Opérateurs*

Proposé par :

**M<sup>r</sup> . R. HADDOUCHE**

Dirigé par :

**M<sup>r</sup> . MAIDI. A**

Présenté par :

**M<sup>r</sup> .OUADOURI Samir**

**M<sup>r</sup> .IZIROUEL Ahmed**

Soutenu le : 08 / 06 /2010

*Promotion 2010*

Ce travail a été préparé à : l'Université Mouloud MAMMERI, Tizi-Ouzou

## **Remerciements**

*Nous tenons à exprimer nos profondes reconnaissances à notre promoteur M<sup>r</sup>. A.MAIDI. Nous le remercions chaleureusement de nous avoir encadrés durant ce travail ; pour ses qualités humaines et ses qualités scientifiques qui nous ont permis de réaliser ce mémoire dans les meilleures conditions possibles. Qu'il trouve ici toute notre gratitude.*

*Notre gratitude va également à M<sup>r</sup> R.HADOUCHE de nous avoir proposé ce thème.*

*Nous saluons chaleureusement les enseignants qui ont contribué à nos études avec leurs conseils et leurs encouragements ainsi que tous les étudiants que nous avons côtoyé durant notre cursus.*

*Nous remercions également les membres de jury, devant qui nous avons l'honneur d'exposer notre travail et qui ont pris la peine de lire avec soin ce mémoire pour jurer son contenu.*

# ***Dédicaces***

*Qu'il me soit permis de saisir cette occasion pour exprimer ma gratitude à l'égard de tous ceux qui m'ont soutenu et participé à la production de ce mémoire :*

*Je pense particulièrement à:*

- ü** *Mes parents pour leur amour, et leur confiance.*
- ü** *Mes frères et mes sœurs pour leurs sacrifices.*
- ü** *Mes nièces et mes neveux.*
- ü** *Mes amis (es) pour leur soutien inconditionnel.*
- ü** *Tous ceux qu'ils font partie de ma vie.*

**IZIROUEL AHMED**

Je dédie ce travail

- Ø** A la mémoire de mon grand-père et ma grand-mère (paternel)
- Ø** A mes chers parents pour leurs sacrifices
- Ø** A mon unique sœur et mes frères
- Ø** A mes oncles et tantes
- Ø** A mes amis (es) et à toute la famille automatique
- Ø** A tous les gents que je connais

**OUADOURI SAMIR**

### Résumé :

La résolution numérique de la classique équation aux dérivées partielles de type diffusion- convection -réaction par les méthodes classiques comme la méthode des lignes a mis en évidence des limites à leur application ; c'est ainsi qu'une nouvelle approche de résolution numérique a été proposée : la méthode de séparation d'opérateurs, cette technique est basée sur la résolution successive à chaque pas de temps des phénomènes de diffusion, convection, réaction. Une analyse comparative est faite entre les résultats de simulation obtenus par la méthode de séparation d'opérateurs et ceux obtenus par la méthode des lignes.

### Mots clés

Systèmes à paramètres distribués, Systèmes à paramètres localisés, équation différentielle partielle, équation différentielle ordinaire, simulation, convection, diffusion, réaction, méthode des lignes, méthode de séparation d'opérateurs.



# Sommaire

# Sommaire

|                                                                                   |           |
|-----------------------------------------------------------------------------------|-----------|
| <b>Introduction générale.....</b>                                                 | <b>1</b>  |
| <b>Chapitre I : Généralités sur les systèmes de diffusion-convection-réaction</b> |           |
| <b>I.1 Introduction .....</b>                                                     | <b>3</b>  |
| <b>I.2 Systèmes à paramètres distribués .....</b>                                 | <b>3</b>  |
| <b>I.3 Description mathématique d'un SPD .....</b>                                | <b>4</b>  |
| <b>I.3.1 Equation d'état (équation d'évolution) .....</b>                         | <b>4</b>  |
| <b>I.3.2 Exemple de système distribué .....</b>                                   | <b>5</b>  |
| <b>I.3.3 Différents types de conditions aux limites .....</b>                     | <b>6</b>  |
| <b>I.3.3.1 Condition de Dirichlet.....</b>                                        | <b>6</b>  |
| <b>I.3.3.2 Condition de Neumann .....</b>                                         | <b>6</b>  |
| <b>I.3.3.3 Condition de Fourier .....</b>                                         | <b>7</b>  |
| <b>I.4. Classification des SPD .....</b>                                          | <b>7</b>  |
| <b>1.5 Définition des phénomènes.....</b>                                         | <b>8</b>  |
| <b>1.5.1 Définition de la convection .....</b>                                    | <b>8</b>  |
| <b>1.5.2 Définition de la diffusion .....</b>                                     | <b>8</b>  |
| <b>1.5.3 Définition de la réaction.....</b>                                       | <b>9</b>  |
| <b>1.6 Système diffusion-convection-réaction .....</b>                            | <b>9</b>  |
| <b>I.7 Equation d'écoulement (convection-diffusion) .....</b>                     | <b>10</b> |
| <b>I.8 Quelques définitions .....</b>                                             | <b>10</b> |
| <b>I.8.1 Nombre de Péclet .....</b>                                               | <b>10</b> |
| <b>I.8.2 Nombre de dispersion.....</b>                                            | <b>11</b> |

|                                                             |    |
|-------------------------------------------------------------|----|
| <b>I.8.3</b> Nombre de réaction .....                       | 12 |
| <b>1.9</b> Equations de diffusion-convection-réaction ..... | 12 |
| <b>1.10</b> Conclusion .....                                | 14 |

## **Chapitre II : Méthode des lignes**

|                                                                                              |    |
|----------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| <b>II.1</b> Introduction .....                                                               | 15 |
| <b>II.2</b> Définition de la méthode des différences finies .....                            | 15 |
| <b>II.3</b> Description de la méthode des lignes .....                                       | 16 |
| <b>II.4</b> Mise en œuvre .....                                                              | 17 |
| <b>II.4.1</b> Application à un système de Diffusion-Convection-Réaction .....                | 17 |
| <b>II.4.2</b> Application au cas de l'équation de la diffusion $\beta = \gamma = 0$ .....    | 19 |
| <b>II.4.3</b> Application au cas de l'équation de convection ( $\alpha = \gamma = 0$ ) ..... | 21 |
| <b>II.4.4</b> résolution de l'équation de la réaction $\alpha = \beta = 0$ .....             | 22 |
| <b>II.5</b> Synthèse des caractéristiques de la méthode des lignes .....                     | 23 |
| <b>II.6</b> Conclusion .....                                                                 | 24 |

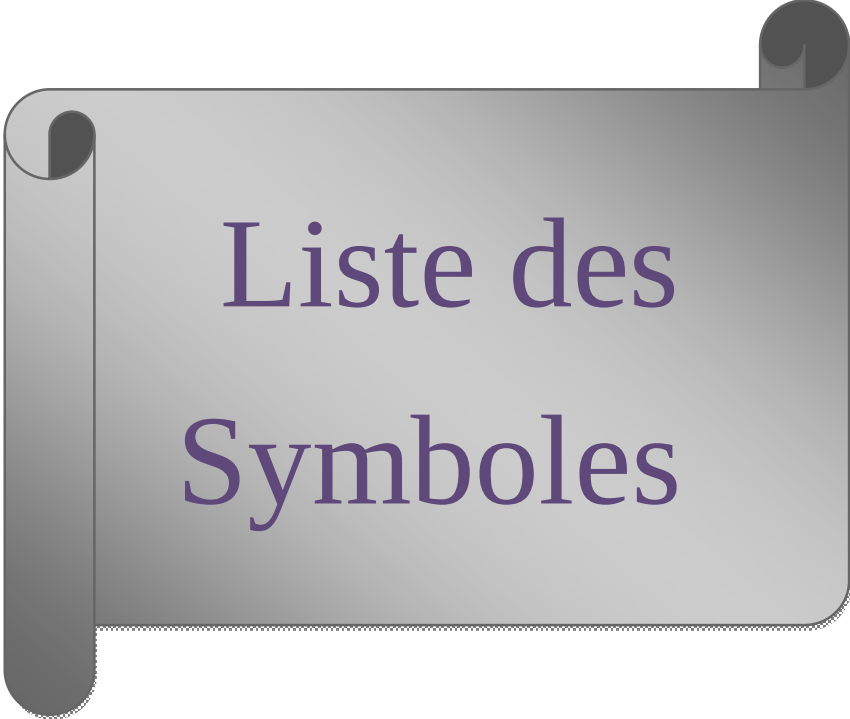
## **Chapitre III : Méthode de séparation d'opérateurs**

|                                                                         |    |
|-------------------------------------------------------------------------|----|
| <b>III.1</b> Introduction .....                                         | 25 |
| <b>III.2</b> Définition de la méthode de séparation d'opérateurs .....  | 25 |
| <b>III.3</b> Technique de séparation d'opérateurs .....                 | 26 |
| <b>III.4</b> Combinaisons des méthodes .....                            | 27 |
| <b>III.5</b> Description de la méthode de séparation d'opérateurs ..... | 27 |
| <b>III.6</b> Résolution des sous-problèmes .....                        | 29 |

|                                                                            |               |
|----------------------------------------------------------------------------|---------------|
| <b>III.7 Simulation .....</b>                                              | <b>33</b>     |
| <b>III.7.1 Simulation du système global par la méthode des lignes.....</b> | <b>33</b>     |
| <b>III.7.2 Simulation par la méthode de séparation d'opérateurs .....</b>  | <b>34</b>     |
| <b>III.7.3 Interprétation des résultats.....</b>                           | <b>38</b>     |
| <b>III.8 Avantages de la méthode de séparation d'opérateurs .....</b>      | <b>39</b>     |
| <b>III.9 Comparaison des deux méthodes .....</b>                           | <b>39</b>     |
| <b>III.9.1 Résultats de la comparaison.....</b>                            | <b>40</b>     |
| <b>III.10 Conclusion .....</b>                                             | <b>41</b>     |
| <br>Conclusion général.....                                                | <br><b>42</b> |

## **Bibliographie**





# Liste des Symboles

---

|                                        |                                                               |
|----------------------------------------|---------------------------------------------------------------|
| $t$                                    | : Variable temps.                                             |
| $z$                                    | : Variable géométrique.                                       |
| $T$                                    | : Intervalle de temps.                                        |
| $\Omega$                               | : Domaine géométrique (spatial).                              |
| $F_r\Omega$                            | : Ensemble de frontières d'un système                         |
| $z'$                                   | : Élément de $F_r\Omega$                                      |
| $R$                                    | : Ensemble des nombres réels                                  |
| $t_f$                                  | : Domaine temporel                                            |
| $\mathbf{M}, \mathbf{H} et \mathbf{L}$ | : Des operateurs matriciels                                   |
| $x(z, t)$                              | : Variable d'état                                             |
| $T(z, t)$                              | : Variable température                                        |
| $x_0(z)$                               | : Condition initial                                           |
| $x_0(t) et x_l(t)$                     | : Conditions aux limites                                      |
| $g_0(t) et g_1(t)$                     | : Gradient aux bords                                          |
| $C$                                    | : Coefficient de convection                                   |
| $D$                                    | : Coefficient de diffusion                                    |
| $R$                                    | : Coefficient de réaction                                     |
| $\alpha$                               | : Coefficient de la diffusion                                 |
| $\beta$                                | : Coefficient de la convection                                |
| $\gamma$                               | : Coefficient de la réaction                                  |
| $N$                                    | : Nombre de discrétisation                                    |
| $T_c$                                  | : Température constante                                       |
| $K$                                    | : Constante cinétique de réaction                             |
| $L$                                    | : Longueur de l'échangeur thermique                           |
| $l$                                    | : Longueur de la barre                                        |
| $q$                                    | : L'ordre de réaction par rapport au réactif de concentration |
| $R(x(z, t))$                           | : Réaction chimique                                           |

|            |                                      |
|------------|--------------------------------------|
| $P_e^G$    | : Nombre de Peclet                   |
| $P_e$      | : Nombre de Peclet local             |
| $h_e$      | : La taille d'un élément de maillage |
| $N_D$      | : Nombre de dispersion               |
| $N_R$      | : Nombre de réaction                 |
| $u(z, t)$  | : La commande du système             |
| $T_{ex}$   | : Température extérieure             |
| $\Delta z$ | : Pas de l'espace                    |
| $\Delta t$ | : Pas de temps                       |
| $D(x)$     | : Représente le terme de diffusion   |
| $C(x)$     | : Représente le terme de convection  |
| $R(x)$     | : Représente le terme de réaction    |



# Liste des Abréviations

SPD : Système à paramètres distribués

EDP : Equations aux dérivées partielles

EDO : Equations différentielles ordinaires

SPL : Système à paramètres localisés

MDF : Méthode des différences finies

MVF : Méthode des volumes finis

MEF : Méthode des éléments finis

EFM : Eléments finis mixtes

EFD : Eléments finis discontinus

EFMH : Eléments finis mixtes hybrides

CDR : Convection-Diffusion-Réaction

CRD : Convection-Réaction-Diffusion

DCR : Diffusion- Convection-Réaction

DRC : Diffusion-Réaction-Convection

RCD : Réaction-Convection-Diffusion

RDC : Réaction-Diffusion-Convection



# Liste des Figures

## Liste des figures

|                                                                  |           |
|------------------------------------------------------------------|-----------|
| <b>Figure III.1:</b> Profil du système global .....              | <b>34</b> |
| <b>Figure III.2:</b> Profil dans le cas de la séquence CDR ..... | <b>35</b> |
| <b>Figure III.3:</b> Profil dans le cas de la séquence CRD ..... | <b>35</b> |
| <b>Figure III.4:</b> Profil dans le cas de la séquence DCR ..... | <b>36</b> |
| <b>Figure III.5:</b> Profil dans le cas de la séquence DRC ..... | <b>36</b> |
| <b>Figure III.6:</b> Profil dans le cas de la séquence RCD ..... | <b>37</b> |
| <b>Figure III.7:</b> Profil dans le cas de la séquence RDC ..... | <b>37</b> |

## LISTE DES TABLEAUX

|                                                                                                               |           |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------|
| <b>Tableau III.1 :</b> Comparaison entre la méthode des lignes et la méthode de séparation d'opérateurs ..... | <b>40</b> |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------|

# Introduction Générale

Le travail est l'unique moyen de gagner de l'argent, mais le travail c'est une punition, c'est de l'esclavage et ceux qui insistent à dire le contraire sont ceux qui ne font rien et gagnent à la sueur du front des autres.

L'automatique fait partie des sciences de l'ingénieur, cette discipline vise la compréhension fine des phénomènes physiques en termes de modélisation, d'identification et de simulation. En se basant sur les logiciels de simulation, on peut étudier les résultats du comportement des systèmes complexes, et celui des phénomènes physiques sans recourir à des expériences qui sont trop chères et parfois irréalisables.

Parmi les systèmes complexes, on retrouve les systèmes à paramètres distribués de type convection-diffusion-réaction dont le comportement dynamique est régi par des équations aux dérivées partielles (EDP), ces équations mettent en jeu des variables d'espace et de temps, ce qui rend la simulation un peu délicate, contrairement aux systèmes décrits par des équations aux dérivées ordinaires (EDO) dont la simulation est simple et facile. Ainsi, une approche de simulation des systèmes à paramètres distribués consiste à les approximer par des EDO qui sont obtenues par une approximation du modèle EDP en utilisant des techniques appropriées. (Méthodes numériques).

Ces méthodes numériques ont été développées dans le but de pouvoir calculer des solutions approchées. Parmi ces méthodes, on retrouve la méthode des différences finies, la méthode des volumes finis, et la méthode des éléments finis qui sont, en général, des méthodes simples à mettre en œuvre mais présentent certains inconvénients car elles introduisent souvent une instabilité et une diffusion numérique ; pour remédier à ces problèmes propres aux méthodes numériques d'autres méthodes ont été proposées. La méthode de séparation d'opérateurs constitue une des méthodes intéressantes pour la simulation des systèmes à paramètres distribués.

Ce mémoire a pour objectif d'étudier la méthode de séparation d'opérateurs appliquée à la simulation des systèmes de type diffusion-convection-réaction et de faire une analyse comparative entre les résultats obtenus par cette méthode et ceux obtenus par la méthode des lignes (semi-discrétisation).

Ainsi, le travail présenté dans ce mémoire qui s'inscrit d'un point de vue théorique dans le domaine de simulation des systèmes décrits par des EDP est divisé en trois chapitres :

Le premier chapitre représente des notions de base relatives aux SPD, à savoir la définition, la représentation mathématique et la classification de ces SPD, cette partie est

suivie des généralités sur les systèmes de convection-diffusion-réaction qui constituent l'une des classes les plus importantes des SPD.

Le deuxième chapitre est consacré à la méthode des lignes appliquée à la simulation du problème de type convection-diffusion-réaction.

Le troisième chapitre introduit la méthode de séparation d'opérateurs. Il commence par la présentation du principe de la méthode, suivi de son application à la simulation des systèmes de type diffusion-convection-réaction.

La fin du mémoire est réservée à la conclusion générale sur l'ensemble du travail réalisé tout en proposant des perspectives de continuité.

# Chapitre I

---

Généralités sur les  
systèmes de  
diffusion convection ? ?  
réaction ?

---

Nous pensons dans les généralités,  
mais nous vivons dans les détails.  
Nord Whitehead d'Alfred

---

## I.1 Introduction

Un 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 est décrit par des équations aux dérivées partielles (EDP) et le procédé est appelé système à paramètres distribués (SPD). Ces systèmes constituent un domaine important dans l'automatique moderne.

L'intérêt de recherche que suscite un tel domaine n'a cessé d'augmenter durant ces dernières décennies, et maintenant les SPD ont considérablement changé amenant à des nouveaux problèmes et la nécessité de placer ces systèmes dans les meilleures conditions opératoires incite à prendre en compte leurs caractères distribués afin d'améliorer leur efficacité.

En effet, plusieurs systèmes réels sont décrits par un modèle à paramètres distribués de nature hyperbolique ou parabolique. Une classe importante de ces modèles est formée par les systèmes de type diffusion-convection-réaction qui fera l'objet d'étude de ce chapitre.

## I.2 Systèmes à paramètres distribués

Les systèmes à paramètres distribués sont des systèmes décrits essentiellement par des EDP linéaires ou non linéaires, éventuellement couplés avec des équations différentielles ordinaires (EDO), des équations intégrales ou intégral-différentielles et des équations algébriques. Des systèmes d'EDP sont représentés dans des espaces fonctionnels de dimension infinie. Les variables indépendantes sont le temps et l'espace, les variables spatiales pouvant être mono- ou multidimensionnelles.

Des systèmes complexes décrivant une grande finesse d'échelle microscopique sont souvent gouvernés par des EDP car cela permet de tenir compte des phénomènes répartis dans des variables d'état. Ces dernières années, beaucoup de classes d'EDP étudiées concernent ce genre de problèmes. Parmi ces systèmes, on peut citer les réacteurs chimiques ou biochimiques, laminoirs, réacteurs thermiques, échangeurs de chaleur. De ce fait, leur espace d'état est de dimension infinie et les outils habituels de

l'automaticien, utilisés pour les systèmes à paramètres localisés (SPL), c'est-à-dire des systèmes décrits par des EDO, ne sont donc plus utilisables pour des systèmes physiques à variables caractéristiques non homogènes spatialement. [7]

### I.3 Description mathématique d'un SPD

Les équations aux dérivées partielles sont des équations différentielles mettant en jeux des variables d'espace et de temps lorsque l'équation traduit un phénomène d'évolution. Ces équations peuvent être de type parabolique, hyperbolique ou elliptique qui fait apparaitre des propriétés différentes. [4]

En effet, la modélisation de nombreuses classes de systèmes physiques conduit à des EDP. Ceux ci sont appelées SPD, ce type de systèmes est de dimension infinie, c'est-à-dire que le nombre de variables caractérisant l'état du système est infini, par opposition aux SPL, décrits par des EDO qui sont de dimension finie.

#### I.3.1 Equation d'état (équation d'évolution)

On considère donc la classe de systèmes définie par l'équation d'état suivante :

$$\frac{\partial x(z, t)}{\partial z} = \mathbf{M}x(z, t) + \mathbf{H}(z)u(z, t) \quad (\text{I.1})$$

Sur un domaine spatiale  $\Omega$  tel que :

$$z \in \Omega \subset \mathbb{R}$$

Et un domaine temporel :

$$t \in T \subset \mathbb{R}$$

Avec la condition initiale :

$$x(z, t_0) = x_0 \quad (\text{I.2})$$

Et la condition aux limites établissant les relations entre l'état et la commande aux limites (si elle existe)

$$\mathbf{L}(x(z', t)) = u_1(z', t) \quad (\text{I.3})$$

$$z' \in F_r \Omega$$

$(F_r \Omega : \text{Frontière de } \Omega)$

$\mathbf{M}$  et  $\mathbf{L}$  sont des opérateurs matriciels différentiels ne comportant que des dérivées par rapport à  $z$ . [1]

L'état  $x$  du système est représenté par la fonction vectorielle :

$$x(z, t) = \begin{bmatrix} x_1(z, t) \\ x_2(z, t) \\ \vdots \\ x_n(z, t) \end{bmatrix}$$

### I.3.2 Exemple de système distribué

L'un des phénomènes physiques distribués (non représentable par une équation différentielle) les plus fréquents est celui de la diffusion, qui se rencontre dans les échanges thermiques, dans les processus chimiques et dans bien d'autres applications.

Les équations décrivant de tels phénomènes sont des équations aux dérivées partielles du type équation de chaleur.

Un des problèmes fréquent, il s'agit d'amener la température  $T(z, t)$  d'une barre métallique de longueur  $l$ , par exemple, à une température constante  $T_c$  (point de consigne), par la commande du flux de chaleur entre l'extérieur et la barre.

L'évolution de la température  $T(z, t)$  en un point  $z \in ]0, 1[$  est décrite par l'équation de chaleur suivante :

$$\frac{\partial x(z, t)}{\partial t} - C \frac{\partial^2 x(z, t)}{\partial z^2} = 0 \quad (\text{I.4})$$

Avec  $C$  caractérise la diffusion de chaleur (conductivité thermique) à l'intérieur du solide ( $C$  est supposée constante, autrement dit le matériau est supposé parfaitement homogène)

Pour décrire complètement le phénomène, il faut encore préciser:

La condition initiale :

$$x(z, 0) = x_0(z) \quad (I.5)$$

Et les conditions aux limites, c'est-à-dire en  $z = 0$  et  $z = 1$  plusieurs cas peuvent se présenter.

### I.3.3 Différents types de conditions aux limites

Les conditions aux limites peuvent être de type : Dirichlet, Neumann, Fourier ou autres.

#### I.3.3.1 Condition de Dirichlet

Si l'on suppose que les extrémités de la barre sont maintenues à des températures données  $T_0(t)$ ,  $T_1(t)$ , on aura évidemment :

$$T(0, t) = T_0(t) \quad , \quad T(1, t) = T_1(t) \quad (I.6)$$

#### I.3.3.2 Condition de Neumann

Si le dispositif est tel que le flux de chaleur est donné au bord, c'est le gradient de la température qui est ainsi fixé et les conditions aux limites sont alors :

$$\begin{aligned} -C \frac{\partial T}{\partial z} \Big|_{z=0} &= g_0(t) \\ -C \frac{\partial T}{\partial z} \Big|_{z=1} &= g_1(t) \end{aligned} \quad (I.7)$$

### I.3.3.3 Condition de Fourier

Si maintenant la donnée est la température extérieure  $T_{ex}(t)$ . On sait que le gradient de température au bord (flux de chaleur) sera proportionnel à la différence

$T - T_{ex}$  et donc :

$$-C \left. \frac{\partial T}{\partial z} \right|_{z=0} = -k(T - T_{ex}) \quad (I.8)$$

En  $z = 0$  et  $z = 1$ .

### I.4 Classification des SPD

Un grand nombre d'équations aux dérivées partielles rencontrées en physique, comme les équations de Laplace, de chaleur sont linéaires et du deuxième ordre et la fonction inconnu  $x$  dépend de deux variables indépendantes  $z, t$ . Dans ce cas le modèle mathématique s'écrit :

$$\alpha \frac{\partial^2 x(z, t)}{\partial t^2} + 2\beta \frac{\partial^2 x(z, t)}{\partial t \partial z} + \gamma \frac{\partial^2 x(z, t)}{\partial z^2} + [\dots] = 0 \quad (I.9)$$

Où le terme entre crochets dépend de  $x(z, t), t, z$  et des dérivées premières de  $x(z, t)$ , et les coefficients  $\alpha, \beta, \gamma$  sont supposés constants et indépendants de la variable d'espace  $z$ .

Cette équation est dite :

- ü Elliptique, si  $\beta^2 - \alpha\gamma < 0$ ,
- ü Parabolique, si  $\beta^2 - \alpha\gamma = 0$ ,
- ü Hyperbolique, si  $\beta^2 - \alpha\gamma > 0$ .

Le choix d'une technique analytique dépend fortement de la nature des EDP. Si les équations ne comportent pas de dérivées partielles du deuxième ordre, le système est dit hyperbolique. Sinon les équations sont classifiées selon la forme caractéristique de

l'équation. Dans le cas des systèmes de type convection-diffusion-réaction, les équations sont dites de type parabolique.

En général, les problèmes stationnaires (indépendant du temps) sont modélisés par des EDP de nature elliptique, tandis que les problèmes d'évolution (dynamique) sont modélisés par des EDP de nature parabolique ou hyperbolique.

### **1.5 Définition des phénomènes**

Dans cette section, on définira les trois phénomènes à savoir la diffusion, la convection, et la réaction.

#### **1.5.1 Définition de la convection**

La convection est un mode de transfert d'énergie qui implique un déplacement de matière dans le milieu, par opposition à la conduction thermique ou diffusion de la matière. La matière est advectée (transportée-conduite, mais ces termes sont en fait impropres) par au moins un fluide.

Ainsi durant la cuisson des pâtes, l'eau se met en mouvement spontanément : les groupes de particules de fluide proches du fond de la casserole sont chauffés, se dilatent donc deviennent moins denses (masse volumique) et montent ; ceux de la surface de la casserole sont refroidis par le contact de la surface avec un milieu moins chaud, se contractent donc gagnent en densité et plongent. Le transfert thermique est alors plus efficace que dans le cas de la conduction thermique ou du transfert radiatif, qui sont les deux autres modes de transfert thermique.

Ce phénomène physique très commun se produit dans de nombreux systèmes (casserole, atmosphère, manteau terrestre, étoile, ...) sous des formes diverses.

#### **1.5.2 Définition de la diffusion**

La diffusion désigne la tendance naturelle d'un système à rendre homogènes les concentrations des espèces chimiques en son sein. C'est un phénomène de transport irréversible qui se traduit par la migration d'espèces chimiques dans un milieu. Sous

l'effet de l'agitation thermique on observe un déplacement des constituants des zones de forte concentration vers celles de faible concentration.

### **I.5.3 Définition de la réaction**

Une réaction chimique est une transformation de la matière au cours de laquelle les espèces chimiques (atomiques, ioniques ou moléculaires) qui constituent la matière sont modifiées : les espèces qui sont consommées sont appelées réactifs. Les espèces formées au cours de la réaction sont appelées produits (de réaction). Depuis les travaux de Lavoisier (1777), les scientifiques savent que la réaction chimique se fait sans variation mesurable de la masse : « Rien ne se perd, rien ne se crée, tout se transforme » qui traduit la conservation de la masse.

Les réactions chimiques provoquent un changement de la nature chimique de la matière, sont donc exclues les transformations purement physiques, comme les changements d'état (fusion, solidification, évaporation, ébullition...), l'usure et l'érosion, la rupture. Une réaction peut dégager de l'énergie (en général sous forme de chaleur, mais aussi de la lumière), elle est alors dite « exothermique ». Elle peut nécessiter un apport d'énergie, sous forme de chaleur (donc « produire du froid ») ou de lumière, elle est alors dite « endothermique ». D'une manière générale, une réaction ne peut avoir lieu que si certaines conditions sont réunies (présence de tous les réactifs, conditions de température, de pression, de lumière).

### **I.6 Système diffusion-convection-réaction**

C'est l'un des modèles le plus fréquemment rencontré dans les sciences et l'ingénierie. Il décrit comment la concentration d'un ou de plusieurs substances (par exemple, les polluants) dans un milieu (la rivière) change sous l'influence de trois processus, à savoir, la convection, la diffusion et de réaction.

Il s'agit d'une équation aux dérivées partielles qui peut être résolue en utilisant plusieurs méthodes à savoir les méthodes de résolutions numériques classiques comme la méthode des différences finies ou méthode des éléments finies.

La convection se réfère à la circulation d'une substance dans un milieu (par exemple dans l'air). La diffusion est le mouvement de la substance à partir d'une zone de forte concentration à une zone de faible concentration, résultat de la distribution

uniforme de la substance. Une réaction chimique est un processus qui aboutit à l'inter-conversion des substances chimiques.

La convection-diffusion-réaction (CDR) comme modèle est un modèle mathématique décrivant la manière dont la concentration de la substance répartie dans les changements à moyen sous l'influence de ces trois processus.

### I.7 Equation d'écoulement (convection-diffusion)

Dans le cas d'un écoulement simple c'est-à-dire sans réaction chimique, l'équation aux dérivées partielles est donné par :

$$\frac{\partial x(z, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 x(z, t)}{\partial z^2} - C \frac{\partial x(z, t)}{\partial z} \quad (\text{I.10})$$

Où  $C$  et  $D$  représentent respectivement le coefficient de convection et de diffusion.

La plus part des problèmes de structure ou de transfert de chaleur se retrouvent aussi sous la forme donnée par l'équation (I.10). Toutefois, les grandeurs  $D$  et  $C$  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 diffusion et de convection.

### I.8 Quelques définitions

On définit quelques notions de bases (formules mathématiques) qui décrivent les phénomènes physiques étudiés dans ce mémoire.

#### I.8.1 Nombre de Péclet

Le nombre de Péclet permet d'apprécier l'importance de l'effet de convection par rapport à celui de diffusion dans le cas d'un phénomène d'écoulement, ce nombre est décrit par la formule suivante :

$$P_e^G = \frac{CL}{2D} \quad (\text{I.11})$$

Dans cette expression, la grandeur  $L$  représente la longueur du domaine dans lequel se manifeste l'écoulement. On peut le définir aussi comme un nombre de Péclet local ou du maillage écrit comme suit :

$$P_e = \frac{Ch_e}{2D} \quad (\text{I.12})$$

Dans cette équation,  $h_e$  représente la taille d'un élément du maillage.

Le nombre de Péclet détermine la validité du modèle à retenir. Si le nombre de Péclet est très petit, alors les phénomènes de diffusion dominent ceux de la convection qui peuvent être alors négligés, et on parle d'un système de diffusion-réaction (EDP du deuxième ordre en espace). Dans le cas où les phénomènes de convection sont prédominant, c'est-à-dire le nombre de Péclet est très grand, le système est de type convection-réaction (EDP du premier ordre en espace), et les phénomènes diffusifs sont ignorés. Si le nombre de Péclet est ni petit ni grand ( $P_e \approx 1$ ), c'est-à-dire on ne peut pas négliger aucun des phénomènes de transport à savoir la convection ou la diffusion, dans ce cas le système est de type diffusion-convection-réaction (EDP du deuxième ordre en espace).

### I.8.2 Nombre de dispersion

C'est une grandeur utilisée pour mesurer l'importance de l'effet de la diffusion dans un phénomène d'écoulement, elle est décrite par la formule suivante :

$$N_D = \frac{D}{C} \quad (\text{I.13})$$

Contrairement au nombre de Péclet du maillage le nombre de dispersion mesure l'importance de l'effet de diffusion par rapport à celui de la convection.

### I.8.3 Nombre de réaction

Le nombre de réaction permet d'estimer l'effet de la réaction par rapport à celui de la diffusion dans un phénomène écoulement avec réaction chimique est donné par la formule suivante :

$$N_R = \frac{kh_e^2}{D} \quad (\text{I.14})$$

Dans cette formule  $k$  représente la constante cinétique de la réaction chimique,  $D$  est le coefficient de diffusion, et  $h_e$  désigne la taille d'un élément de maillage.

### I.9 Equations de diffusion-convection-réaction

L'EDP qui combine les trois phénomènes de diffusion, de convection, et de réaction est donné par :

$$\frac{\partial x(z, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 x(z, t)}{\partial z^2} - C \frac{\partial x(z, t)}{\partial z} + R(x(z, t)) \quad (\text{I.15})$$

Dans cette expression,  $D$  représente le coefficient de diffusion,  $C$  est le coefficient de convection et le terme  $R(x(z, t))$  décrit la réaction chimique qui accompagne le phénomène convection-diffusion appelé écoulement simple. Le problème décrit par l'équation précédente est aussi connu comme une convection (ou transport) de matière chimique en réaction.

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 ( $P_e \gg 1$ ). Dans ce cas le phénomène est simultanément dominé par les effets couplés de la convection et la réaction.

Il existe plusieurs formes du terme de réaction  $R(x(z, t))$ . Ces formes dépendent du nombre de réactifs impliqués dans la réaction et des conditions d'opérations du

réacteur. Pour une réaction faisant intervenir un seul réactif, le terme de réaction est donné par l'équation suivante :

$$R(x(z, t)) = kx^q \quad (I.16)$$

$k$  : représente la constante cinétique de la réaction

$q$  : désigne l'ordre de réaction par rapport au réactif de concentration  $x$ .

Par ailleurs, le terme de la réaction peut prendre des formes très différentes de celle donnée par l'équation précédente.

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. [4]

On dit que le terme de la réaction est linéaire s'il s'écrit sous la forme de l'équation et que l'ordre global de la réaction  $q$  est égal à 0 ou 1, et non-linéaire si l'ordre global de la réaction est supérieur ou égal à deux ( $q \geq 2$ .)

La prise en considération des phénomènes de diffusion et de convection conduit à un SPD. Par contre, si ces deux phénomènes sont négligés lors du processus de simulation, ce qui revient à avoir  $D=C=0$  dans l'équation d'état (I.15), alors le modèle prend la forme d'un SPL comprenant seulement le terme de réaction [4].

**I.10 Conclusion**

On a présenté dans ce chapitre, des généralités, et des notions de bases relatives aux systèmes de type diffusion-convection-réaction qui est une classe très importante des SPD. Ces systèmes sont décrits par des équations aux dérivées partielles. Les modèles de type Diffusion-convection-réaction requièrent des méthodes de résolutions adaptées aux systèmes à paramètres distribués. Parmi les méthodes qui sont utilisées pour étudier analytiquement les problèmes couplant les phénomènes étudiés on trouve la méthode des lignes et celle de séparation d'opérateurs qui seront traitées dans les chapitres suivants.

---

# Chapitre II

---

Méthode des lignes  
(semi-discrétisation) ? ?

---

*Pour répéter ce que d'autres  
ont indiqué, exige de  
l'éducation ; pour les défier,  
exige des cerveaux.*  
Mary PETTIBONE Poole

---

## II.1 Introduction

La plus part des phénomènes naturels sont régis par des lois physiques. Ces lois permettent de relier les grandeurs physiques qui décrivent ces phénomènes, et une résolution de ces équations différentielles devient nécessaire afin de comprendre et d'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.

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 des éléments finis (MEF). Dans le cas de la résolution basée sur la formulation variationnelle, on aboutit à des systèmes d'équations aux dérivées ordinaires (EDO). Les systèmes d'équations obtenues peuvent être 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, les plus utilisées on trouve la méthode des différences finies.

## II.2 Définition de la méthode des différences finies

L'approche des différences finies est basée sur l'utilisation des séries de Taylor pour obtenir des approximations par différences finies des dérivées partielles spatiales. Ces approximations peuvent être arriérées, centrées ou avants selon la position des points utilisés pour réaliser l'approximation. Dans le cas d'un réacteur tubulaire, des différences arriérées seront utilisées pour les termes de convection alors que des différences centrées sont utilisées pour les termes de diffusion. Ce choix est justifié par la nature même des phénomènes. [4]

En effet, l'évolution d'une variable lors de la convection est influencée par l'information qui précède le point alors que l'évolution causée par la diffusion dépend de l'information de chaque côté du point une différence finie arrière du premier ordre est donc utilisée pour le terme convectif alors qu'une différence centrée du deuxième ordre est utilisée pour le terme diffusif.

Lorsque le phénomène posé consiste à une simple simulation du système considéré, on peut utiliser l'une des méthodes d'approximations aux différences finies ou méthode de

discrétisation. Ces méthodes permettent d'approximer le modèle initial tout en conservant au mieux les propriétés essentielles du système initial.

On distingue globalement deux types de discrétisation :

1. Discrétisation totale
2. La semi-discrétisation

Cette dernière appelée aussi méthode des lignes fera l'objet d'étude de ce chapitre.

### II.3 Description de la méthode des lignes

Dite aussi méthode de la semi-discrétisation (par rapport à la variable d'espace  $z$ ), elle est basée sur les différences finies, c'est une méthode simple à mettre en œuvre qui échappe à la complexité des calculs rencontrés en adoptant d'autres approches (méthode des fonctions propres, méthode des résidus pondérés ...).

De plus elle est bien adaptée pour tout type de systèmes hyperboliques ou paraboliques, et permet de valider le modèle approximé obtenu par d'autres techniques d'approximation des SPD. [7]

Le principe de la méthode des lignes consiste à discrétiser le domaine spatiale  $\Omega$  en introduisant un pas d'espace  $\Delta z = L / (N + 1) > 0$ , où  $N$  est un entier positif représentant le nombre de point de discrétisation.

On propose de l'appliquer à une équation parabolique de convection-réaction-diffusion assez générale, qui peut dégénérer pour certaines valeurs de la fonction inconnue. Une telle équation modélise par exemple le transport de contaminants en milieux poreux.

Décomposant le domaine d'espace  $[0,1]$  en  $N$  intervalles égaux, correspondant à un pas de discrétisation  $\Delta z = 1/N$  ;

L'approximation de la dérivée première de  $x$  est donné par :

$$\left. \frac{\partial x}{\partial z} \right|_i \approx \frac{x_i - x_{i-1}}{\Delta z} \quad (\text{II.1})$$

L'approximation de la dérivée seconde de  $x$  est donnée par :

$$\left. \frac{\partial^2 x}{\partial z^2} \right|_i \approx \frac{x_{i+1} - 2x_i + x_{i-1}}{(\Delta z)^2} \quad (\text{II.2})$$

## II.4 Mise en œuvre

Pour illustrer la méthode des lignes, on va l'appliquer premièrement au système global de diffusion-convection-réaction, puis on prend chaque phénomène tout seul c'est-à-dire on l'applique à la diffusion en annulant la convection et réaction, puis à la convection en annulant la diffusion et la réaction, et enfin on résout le terme de réaction.

### II.4.1 Application à un système de Diffusion-Convection-Réaction :

Considérant l'équation du système de Diffusion-Convection-Réaction suivante :

$$\frac{\partial x(z, t)}{\partial t} = \underbrace{\alpha \frac{\partial^2 x(z, t)}{\partial z^2}}_{\text{Diffusion}} + \underbrace{\beta \frac{\partial x(z, t)}{\partial z}}_{\text{Convection}} + \underbrace{\gamma x^2(z, t)}_{\text{Réaction}} \quad (\text{II.3})$$

Où  $\alpha$ ,  $\beta$  et  $\gamma$  sont respectivement les coefficients de la diffusion, convection et réaction.

Avec les conditions aux limites:

$$x(0, t) = 25^{\circ}\text{C} \quad (\text{II.4})$$

$$x(1, t) = 0^{\circ}\text{C} \quad (\text{II.5})$$

Et la condition initiale:

$$x(z, 0) = 0 \quad (\text{II.6})$$

On remplace (II.1) et (II.2) dans (II.3)

On obtient :

$$\frac{\partial x(z, t)}{\partial t} = \frac{\alpha}{\Delta z^2} [x_{i+1}(t) - 2x_i(t) + x_{i-1}(t)] + \frac{\beta}{\Delta z} [x_i(t) - x_{i-1}(t)] + \gamma x^2(z, t) \quad (\text{II.7})$$

$$\frac{\partial x(z, t)}{\partial t} = \frac{\alpha}{\Delta z^2} x_{i+1} - \frac{2\alpha}{\Delta z^2} x_i + \frac{\alpha}{\Delta z^2} x_{i-1} + \frac{\beta}{\Delta z} x_i - \frac{\beta}{\Delta z} x_{i-1} + \gamma x_i^2 \quad (\text{II.8})$$

D'où l'équation différentielle :

$$\dot{x}_i = \frac{\alpha}{\Delta z^2} x_{i+1} + \left( \frac{\beta}{\Delta z} - \frac{\alpha}{\Delta z^2} \right) x_i + \left( \frac{\alpha}{\Delta z^2} - \frac{\beta}{\Delta z} \right) x_{i-1} + \gamma x_i^2 \quad (\text{II.9})$$

pour  $i = 1, 2, 3 \dots n - 1$

On aura :

$$\begin{aligned}
\dot{x}_1 &= \frac{\alpha}{\Delta z^2} x_2 + \left( \frac{\beta}{\Delta z} - \frac{2\alpha}{\Delta z^2} \right) x_1 + \left( \frac{\alpha}{\Delta z^2} - \frac{\beta}{\Delta z} \right) x_0 + \gamma x_1^2 \\
\dot{x}_2 &= \frac{\alpha}{\Delta z^2} x_3 + \left( \frac{\beta}{\Delta z} - \frac{2\alpha}{\Delta z^2} \right) x_2 + \left( \frac{\alpha}{\Delta z^2} - \frac{\beta}{\Delta z} \right) x_1 + \gamma x_2^2 \\
&\vdots \\
\dot{x}_{n-1} &= \frac{\alpha}{\Delta z^2} x_n + \left( \frac{\beta}{\Delta z} - \frac{2\alpha}{\Delta z^2} \right) x_{n-1} + \left( \frac{\alpha}{\Delta z^2} - \frac{\beta}{\Delta z} \right) x_{n-2} + \gamma x_{n-1}^2
\end{aligned} \tag{II.10}$$

Sous forme matricielle :

$$\begin{aligned}
\begin{bmatrix} \dot{x}_1 \\ \dot{x}_2 \\ \vdots \\ \dot{x}_{n-1} \end{bmatrix} &= \left( \frac{\beta}{\Delta z} - \frac{2\alpha}{\Delta z^2} \right) \begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \cdot & \cdot & 0 \\ \cdot & 0 & 1 & 0 & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ x_{n-1} \end{bmatrix} + \left( \frac{\alpha}{\Delta z^2} - \frac{\beta}{\Delta z} \right) \begin{bmatrix} 0 & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & 0 \\ 1 & 0 & 0 & \cdot & \cdot & 0 \\ \cdot & 1 & 0 & 0 & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & \cdot & \cdot & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ x_{n-2} \end{bmatrix} \\
&+ \frac{\alpha}{\Delta z^2} \begin{bmatrix} 0 & 1 & \cdot & \cdot & \cdot & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \cdot & \cdot & 0 \\ \cdot & 0 & 0 & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & 1 \\ 0 & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ x_n \end{bmatrix} + \left( \frac{\alpha}{\Delta z^2} - \frac{\beta}{\Delta z} \right) \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ 0 \end{bmatrix} x_0 + \gamma \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ x_{n-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ x_{n-1} \end{bmatrix}
\end{aligned}$$

#### II.4.2 Application au cas de l'équation de la diffusion $\beta = \gamma = 0$

Considérant l'équation de diffusion suivante :(même conditions que le système CDR)

$$\frac{\partial x(z, t)}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 x(z, t)}{\partial z^2} \tag{II.11}$$

Résolution par la méthode de la semi-discrétisation :

On remplace (II.2) dans (II.11)

On obtient :

$$\frac{\partial x(z, t)}{\partial t} = \frac{\alpha}{\Delta z^2} [x_{i+1}(t) - 2x_i(t) + x_{i-1}(t)] \quad (\text{II.12})$$

D'où l'équation différentielle :

$$\dot{x}_i = \frac{\alpha}{\Delta z^2} x_{i+1} - \frac{2\alpha}{\Delta z^2} x_i + \frac{\alpha}{\Delta z^2} x_{i-1} \quad (\text{II.13})$$

pour  $i = 1, 2, 3 \dots n-1$

On aura :

$$\begin{aligned} \dot{x}_1 &= \frac{\alpha}{\Delta z^2} x_2 - \frac{2\alpha}{\Delta z^2} x_1 + \frac{\alpha}{\Delta z^2} x_0 \\ \dot{x}_2 &= \frac{\alpha}{\Delta z^2} x_3 - \frac{2\alpha}{\Delta z^2} x_2 + \frac{\alpha}{\Delta z^2} x_1 \\ &\vdots \\ \dot{x}_{n-1} &= \frac{\alpha}{\Delta z^2} x_n - \frac{2\alpha}{\Delta z^2} x_{n-1} + \frac{\alpha}{\Delta z^2} x_{n-2} \end{aligned} \quad (\text{II.14})$$

Sous forme matricielle on obtient :

$$\begin{bmatrix} \dot{x}_1 \\ \dot{x}_2 \\ \vdots \\ \dot{x}_{n-1} \end{bmatrix} = \frac{\alpha}{\Delta z^2} \begin{bmatrix} -2 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 1 & -2 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & 1 \\ 0 & 0 & \vdots & \vdots & -2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} + \frac{\alpha}{\Delta z^2} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} x_0$$

### II.4.3 Application au cas de l'équation de convection ( $\alpha = \gamma = 0$ )

Considérant l'équation de convection suivante : (même conditions que le système CDR)

$$\frac{\partial x(z, t)}{\partial t} = \beta \frac{\partial x(z, t)}{\partial z} \quad (\text{II.15})$$

Résolution par la méthode de la semi-discrétisation

On remplace (II.1) dans (II.15)

On obtient :

$$\frac{\partial x(z, t)}{\partial t} = \frac{\beta}{\Delta z} (x_i(t) - x_{i-1}(t)) \quad (\text{II.16})$$

D'où l'équation différentielle :

$$\dot{x}_i = \frac{\beta}{\Delta z} x_i - \frac{\beta}{\Delta z} x_{i-1} \quad (\text{II.17})$$

pour  $i = 1, 2, 3 \dots n$

On aura :

$$\begin{aligned} \dot{x}_1 &= \frac{\beta}{\Delta z} x_1 - \frac{\beta}{\Delta z} x_0 \\ \dot{x}_2 &= \frac{\beta}{\Delta z} x_2 - \frac{\beta}{\Delta z} x_1 \\ &\vdots \\ \dot{x}_n &= \frac{\beta}{\Delta z} x_n - \frac{\beta}{\Delta z} x_{n-1} \end{aligned} \quad (\text{II.18})$$

Sous forme matricielle on obtient :

$$\begin{bmatrix} \dot{x}_1 \\ \dot{x}_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \dot{x}_n \end{bmatrix} = \frac{\beta}{\Delta z} \begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & 0 \\ -1 & 1 & 0 & \cdot & \cdot & 0 \\ \cdot & -1 & 1 & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & 0 \\ 0 & 0 & \cdot & \cdot & -1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ x_n \end{bmatrix} + \frac{\beta}{\Delta z} \begin{bmatrix} -1 \\ 0 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ 0 \end{bmatrix} x_0$$

#### II.4.4 Résolution de l'équation de la réaction $\alpha = \beta = 0$

Considérant l'équation de réaction suivante : (même conditions que le système CDR)

$$\frac{\partial x(z, t)}{\partial t} = \gamma x^2(z, t) \quad (\text{II.19})$$

$$\dot{x}_i = \gamma x_i^2 \quad (\text{II.120})$$

Pour  $i = 1, 2, 3 \dots n - 1$

On aura :

$$\dot{x}_1 = \gamma x_1^2$$

$$\dot{x}_2 = \gamma x_2^2$$

$\cdot$   
 $\cdot$   
 $\cdot$

$$\dot{x}_{n-1} = \gamma x_{n-1}^2$$

(II.21)

Sous forme matricielle on obtient :

$$\begin{bmatrix} \dot{x}_1 \\ \dot{x}_2 \\ \vdots \\ \dot{x}_n \end{bmatrix} = \gamma \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}$$

## II.5 Synthèse des caractéristiques de la méthode des lignes :

La méthode des lignes est une méthode de résolution classique. En plus d'être une méthode simple à mettre en œuvre, elle est utilisée pour analyser les systèmes à paramètres distribués de type diffusion-convection-réaction. Mais elle n'échappe pas aux plusieurs problèmes reliés à son utilisation dans la résolution des EDP. Ces cas problématiques sont surtout rencontrés lors de l'analyse des écoulements dominés par les effets de convection et dans la solution présente des variations brusques sur les frontières. Dans ces conditions, la solution numérique obtenue 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 (méthode des lignes) ; donc d'origine purement numériques.

Cependant d'autres études ont aussi montré que, dans notre cas (analyse du problème de diffusion-convection-réaction), 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'écoulement dominés par les effets de convection (système fortement convectif), ces oscillations apparaissent dans la solution numérique aux voisinages des discontinuités même si le terme de convection est nul. Par ailleurs cette méthode dégrade la caractéristique physique de la solution exacte du problème. [4]

## II.6 Conclusion

Le principe de la méthode des lignes consiste à discrétiser les EDP qui représentent un système de dimension infinie (décomposition du domaine d'espace seulement). Cette semi-discrétisation conduit à des équations différentielles ordinaires qui décrivent un système de dimension qui peut être élevée mais reste finie. La simulation des systèmes de type diffusion-convection-réaction par la méthode des lignes en utilisant les différences finies permet d'avoir une très bonne précision si le nombre de points de discrétisation est grand, mais peut introduire une diffusion numérique ou des oscillations ce qui peut dégrader la caractéristique physique du phénomène étudié. Pour surmonter ces difficultés d'autres méthodes sont proposées parmi lesquelles on retrouve la méthode de séparation d'opérateurs qui fera l'objet d'étude du prochain chapitre.

# Chapitre III

---

## Méthode de séparation d'opérateurs

---

*L'homme sage est celui qui pense à  
ses discours et à sa conduite, il ne  
dit pas tous ce qu'il pense mais il  
pense à tous ce qu'il dit, il ne dit  
jamais qu'il est sage car il sait que  
la bougie s'use de sa mèche.*

---

### III.1 Introduction

En absence de solution analytique, les méthodes d'approximation sont indispensables pour la résolution des problèmes de type convection-diffusion-réaction. Par ailleurs un bon nombre de méthodes numériques classiques (par exemple la semi-discrétisation vue au chapitre précédant) créent des oscillations non physiques dues à la prédominance du terme convectif, ou du non linéarité du terme réactif, d'autre part, les méthodes classiques ne sont pas adaptées à la résolution de l'équation de convection-diffusion-réaction, elles créent des diffusions numériques.

C'est ainsi qu'au début des années 90, Karlsen et Risebro, vont élaborer une nouvelle technique pour la résolution des EDP appelée technique de séparation d'opérateurs, et pendant la même période le professeur Stéphane Descombes de l'Ecole Normale Supérieure de Lyon utilisera la même technique pour résoudre les EDP du type réaction-diffusion et plus récemment, c'est à- dire en 2000, le Professeur Randall Levecque de l'université de Washington l'utilise pour la résolution des EDP du type convection-diffusion-réaction.

L'intention dans ce travail n'est pas de montrer la supériorité de cette nouvelle méthode par rapport aux méthodes classiques. Mais cette technique présente des avantages liés à la simplicité d'application en temps réel. Ce chapitre est consacré à la résolution des systèmes de type diffusion-convection-réaction.

### III .2 Définition de la méthode de séparation d'opérateurs

La méthode de séparation d'opérateurs 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 séquentiellement sur une période de temps bien déterminée. La résolution du problème global consiste alors à résoudre chaque sous-problème indépendamment sur un intervalle de temps. La solution à l'instant final de chaque sous-système constitue la condition initiale du sous-système suivant. Cette méthode permet de résoudre facilement les équations paraboliques et hyperboliques.

La séquence de résolution des trois sous problèmes est très importante car elle influence la précision de la solution numérique du problème. L'exactitude de la solution dépend de l'importance relative de la convection, diffusion et le terme de la réaction. La méthode proposée a été développée dans le contexte d'une application en ligne, c'est-à-dire la simulation numérique d'un modèle EDP dans un plan de contrôle pour une application industrielle.

### III.3 Technique de séparation d'opérateurs

L'intérêt de cette technique est de séparer l'équation de convection-diffusion-réaction en différentes sous équations indépendantes qui sont traitées chacune de manière spécifique, cette technique permet ainsi de traiter ces différents processus à savoir la convection, la diffusion, et la réaction ; avec des méthodes appropriées pour chaque type d'équation aux dérivées partielles.

Dans le problème physique tous ces processus physiques ont lieu simultanément alors qu'avec la séparation d'opérateurs ces processus sont résolus de manière séquentielle, cette approche peut donc créer une erreur due à la séparation.

D'autre part l'équation de convection-diffusion-réaction peut s'écrire sous la forme :

$$x_t = D(x) + C(x) + R(x) \quad (1)$$

Où  $x$  est l'inconnue,  $D(x)$  représente le terme de diffusion dans l'équation ;  $C(x)$  le terme de convection et  $R(x)$  le terme de réaction.

Si  $x^n$  est la solution de l'équation de convection-diffusion-réaction (1) à l'instant  $t_n$  alors la méthode de séparation d'opérateurs consiste à mettre à jour  $q^n$  pour obtenir  $x^{n+1}$  à l'instant  $t_{n+1} = t_n + \Delta t$  à la suite des trois étapes suivantes :

1- On résout  $x_t = C(x)$  sur le temps  $\Delta t$  avec  $x^n$  comme condition initial et on obtient la solution  $x^*$ ,

2- Puis on résout  $x_t = D(x)$  sur le temps  $\Delta t$  avec  $x^*$  condition initial et on obtient la solution  $x^{**}$ .

3- Enfin on résout  $x_t = R(x)$  sur le temps  $\Delta t$  avec  $x^{**}$  condition initial et on obtient la solution  $x^{***}$

### III.4 Combinaisons des méthodes

La construction des méthodes de séparation d'opérateurs n'est pas unique, ni en ce qui concerne le choix de la séparation, ni le choix des méthodes numériques utilisées, pour résoudre les sous-problèmes obtenus. Par exemple Arbogast a résolu l'équation de transport (convection-diffusion) en combinant la méthode des caractéristiques pour approcher le terme convectif et la méthode des éléments finis mixtes (EFM) pour approcher le terme de la diffusion, alors que Hotei a utilisé la méthode des éléments finis discontinus de Galerkin (EFD) pour approcher le terme convectif et la méthode des éléments finis mixtes hybrides (EFMH) pour approcher le terme de la diffusion.

### III.5 Description de la méthode de séparation d'opérateurs

Soit le modèle d'EDP général qui décrit un système de diffusion-convection-réaction suivant :

$$\frac{\partial x(z, t)}{\partial t} = \alpha \frac{\partial x(z, t)}{\partial z} + \beta \frac{\partial^2 x(z, t)}{\partial^2 z} + \gamma(x^2(z, t)) \quad (\text{III.1})$$

Avec les conditions aux limites :

$$x(0, t) = 25^\circ\text{C} \quad (\text{III.2})$$

$$x(1, t) = 0^\circ\text{C} \quad (\text{III.3})$$

Et la condition initiale :

$$x(z, 0) = 0 \quad (\text{III.4})$$

Les méthodes numériques classiques approchent la résolution de cette équation en utilisant des approximations dans l'espace ce qui permet d'obtenir des équations différentielles qui

seront, par la suite, résolues. La méthode de résolution par séparation d'opérateurs utilise plutôt le comportement dans le temps du système comme cadre de travail. Dans un système décrit par des équations paraboliques, trois phénomènes se produisent à chaque pas de temps: la convection, la diffusion et la réaction. Si le pas de temps est suffisamment petit, il est possible de considérer que chacun des phénomènes est indépendant et qu'ils se produisent successivement. De cette façon, il est possible de formuler simplement les équations et les conditions frontières de chacun des sous-systèmes et de les résoudre indépendamment. Cette vision est à la base de l'algorithme de la méthode de séparation d'opérateurs qui consiste donc à passer la solution du pas de temps précédant à travers des sous-systèmes de convection, de diffusion et de réaction afin d'obtenir la réponse au pas de temps actuel, la solution d'un sous-système devenant la condition initiale du prochain sous-système à chaque transition.

Mathématiquement, cet algorithme peut être décrit de la façon suivante:

1. Soit  $x(z, 0)$  le profil initial du système :
2. Le profil initial est utilisé comme condition initiale du sous-système de convection suivant:

$$\frac{\partial x^*(z, t)}{\partial t} = \beta \left( \frac{\partial x^*(z, t)}{\partial z} \right) \quad (\text{III.5})$$

$$x^*(z, 0) = x(z, 0) \quad (\text{III.6})$$

Ce sous-système est résolu pour un pas de temps  $\Delta t$ .

3. Le profil obtenu après la résolution de l'étape de convection soit  $x^*_{\Delta t}(z) = x^*(z, \Delta t)$  devient la condition initiale du sous système de diffusion suivant:

$$\frac{\partial x^{**}(z, t)}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 x^{**}(z, t)}{\partial^2 z} \quad (\text{III.7})$$

$$x^{**}(z, 0) = x_{\Delta t}^*(z, 0) \quad (\text{III.8})$$

Ce sous-système est résolu pour un pas de temps  $\Delta t$ .

4. Le profil obtenu après la résolution de l'étape de diffusion soit  $x_{\Delta t}^{**} = x^{**}(z, \Delta t)$  devient la condition initiale du sous système de réaction suivant:

$$\frac{\partial x(z, t)}{\partial t} = \gamma(x^2(z, t)) \quad (\text{III.9})$$

$$x(z, 0) = x_{\Delta t}^{**}(z) \quad (\text{III.10})$$

Ce sous-système est résolu pour un pas de temps  $\Delta t$ .

### Remarque III.1

Cet algorithme permet donc d'obtenir la solution du problème de base pour un pas de temps  $\Delta t$ . Ce processus peut être répété pour toute la durée de la simulation.

Cette approche peut être utilisée aussi bien sur les équations hyperboliques que paraboliques sans modification de la définition des conditions frontières et sans modifier un paramètre de réglage quelconque en fonction du nombre de Péclet.

### III.6 Résolution des sous-problèmes

Pour un pas de temps  $\Delta t$ ,  $N$  éléments de dimension  $\Delta z$  sont utilisés pour définir le maillage. Les discrétisations suivantes sont donc utilisées:

$$\Delta z = \frac{l}{N} \quad (\text{III.11})$$

$$\Delta t = \frac{\Delta z}{\beta} \quad (\text{III.12})$$

Selon ce choix, la précision du maillage détermine le raffinement de la solution dans l'espace et le temps. Cette approche impose l'utilisation d'un maillage régulier mais l'utilisation d'un maillage asymétrique peut aussi être envisagée. De plus, le pas de temps peut être modifié directement le long de la simulation.

La résolution du sous-système de convection est la partie la plus simple de l'algorithme car il s'agit d'un simple système avec délai, pour la résoudre on considère l'équation suivante :

$$\frac{\partial x^*(z, t)}{\partial t} = \beta \frac{\partial x^*(z, t)}{\partial z} \quad (\text{III.13})$$

Avec condition initiale

$$x^*(z, 0) = x(z, 0) \quad (\text{III.14})$$

La résolution de la convection par la méthode de la semi-discrétisation conduit à l'équation différentielle suivante:[chapitre II]

$$\frac{\partial x^*(z, t)}{\partial t} = \frac{\beta}{\Delta z} (x_i^*(t) - x_{i-1}^*(t)) \quad (\text{III.15})$$

Sous forme matricielle on obtient :

$$\begin{bmatrix} \dot{x}_1^* \\ \dot{x}_2^* \\ \vdots \\ \dot{x}_n^* \end{bmatrix} = \frac{\beta}{\Delta z} \begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & 0 \\ -1 & 1 & 0 & \cdot & \cdot & 0 \\ \cdot & -1 & 1 & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & 0 \\ 0 & 0 & \cdot & \cdot & -1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1^* \\ x_2^* \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ x_n^* \end{bmatrix} + \frac{\beta}{\Delta z} \begin{bmatrix} -1 \\ 0 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ 0 \end{bmatrix} x_0^*$$

Le sous-système de diffusion peut être résolu de différentes façons. En effet, la méthode des différences finies et celle des éléments finis sont toutes les deux efficaces et stables pour résoudre ce type d'équation. Les différences finies ont l'avantage d'une formulation plus simple alors que les éléments finis traitent plus efficacement les conditions frontières de Neumann. Dans le cas de ces deux approches, le problème de diffusion se ramène à:

$$\frac{\partial x^{**}(z, t)}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 x^{**}(z, t)}{\partial z^2} \quad (\text{III.16})$$

Avec condition initiale

$$x^{**}(z, 0) = x_{\Delta t}^*(z) \quad (\text{III.17})$$

La résolution de la diffusion par la méthode de la semi-discrétisation donne l'équation différentielle suivante:

$$\dot{x}_i^{**} = \frac{\alpha}{\Delta z^2} x_{i+1}^{**} - \frac{2\alpha}{\Delta z^2} x_i^{**} + \frac{\alpha}{\Delta z^2} x_{i-1}^{**} \quad (\text{III.18})$$

Sous forme matricielle on obtient :

$$\begin{bmatrix} \dot{x}_1^{**} \\ \dot{x}_2^{**} \\ \vdots \\ \dot{x}_{n-1}^{**} \end{bmatrix} = \frac{\alpha}{\Delta z^2} \begin{bmatrix} -2 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 1 & -2 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & 1 \\ 0 & 0 & \vdots & \vdots & -2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1^{**} \\ x_2^{**} \\ \vdots \\ x_n^{**} \end{bmatrix} + \frac{\alpha}{\Delta z^2} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} x_0^{**}$$

La résolution du sous-système de réaction est généralement la portion la plus lente de l'algorithme de résolution par séparation d'opérateur. En effet, l'équation de réaction doit être résolue à chaque point du maillage ce qui génère un nombre important d'EDO indépendantes. Considérant l'équation suivante :

$$\frac{dx(t)}{dt} = \gamma x^2(t) \quad (\text{III.19})$$

Avec condition initiale

$$x(0) = x_{\Delta t}^{**}(z) \quad (\text{III.20})$$

Qu'on peut résoudre par une méthode d'intégration numérique.

### Remarques III .2

- Si la réaction implique plusieurs réactifs et des cinétiques non linéaires, cette approche risque de mener à une relation transcendante insoluble analytiquement. Dans ce cas, deux approches sont possibles : résoudre numériquement cette relation ou résoudre directement les équations différentielles.

- L'algorithme de résolution par séparation d'opérateurs est donc simple à mettre en œuvre et plusieurs variations peuvent être mises en place pour raffiner la solution selon le type de problème. La résolution ne nécessite pas une attention particulière au nombre de Péclet. Ainsi cette approche est bien adaptée aux procédés pour lesquels les conditions d'opération sont variables. Par exemple, il est possible de simuler en utilisant cette approche un système dans lequel le terme de diffusion est négligeable ou non selon les conditions d'opération.

### III.7 Simulation

La simulation numérique permet de valider certains résultats théoriques. Elle permet aussi d'étudier des différences entre des résultats théoriques et numériques. Surtout dans ce travail où on traite des systèmes d'EDP.

#### III.7.1 Simulation du système global par la méthode des lignes

Dans cette partie on considère la simulation du système de diffusion-convection-réaction par la méthode des lignes pour pouvoir la comparer avec la méthode de séparation d'opérateurs. Ainsi, on considère des valeurs constantes pour les coefficients de diffusion ( $\alpha$ ), convection ( $\beta$ ) et réaction ( $\gamma$ ). On prend :  $\alpha = 1$  ;  $\beta = -2$  et  $\gamma = 1$

Pour la simulation, on considère un nombre de points de discrétisation  $N=50$ , on obtient la figure (III.1).

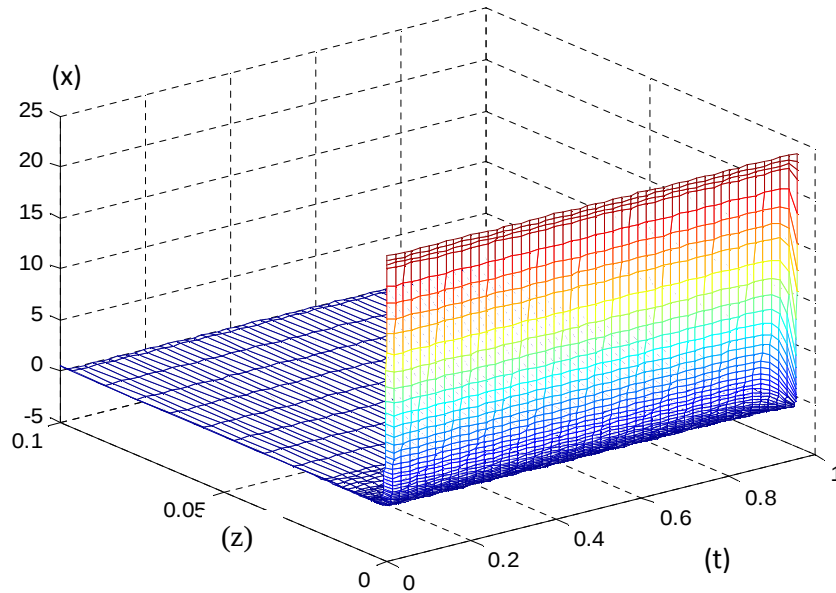


Figure III.1 : profil du système global

### III.7.2 Simulation par la méthode de séparation d'opérateurs

La combinaison des trois phénomènes : diffusion, réaction, et convection donne six séquences possibles à savoir : CDR, CRD, DCR, DRC, RDC et RCD, chaque séquence sera simulée séparément en considérant un intervalle de temps supposé constant pour les trois phénomènes.

Le but de la simulation de ces six combinaisons est de trouver une séquence qui donne le résultat le plus proche de celui du système global, c'est-à-dire le modèle complet (en considérant les trois phénomènes au même temps) simulé par la méthode des lignes dans le chapitre 2.

Le même nombre de points de discrétisation est considéré. Les différents résultats obtenus sont données par les Figures III.2, III.3, III.4, III.5, III.6 et III.7.

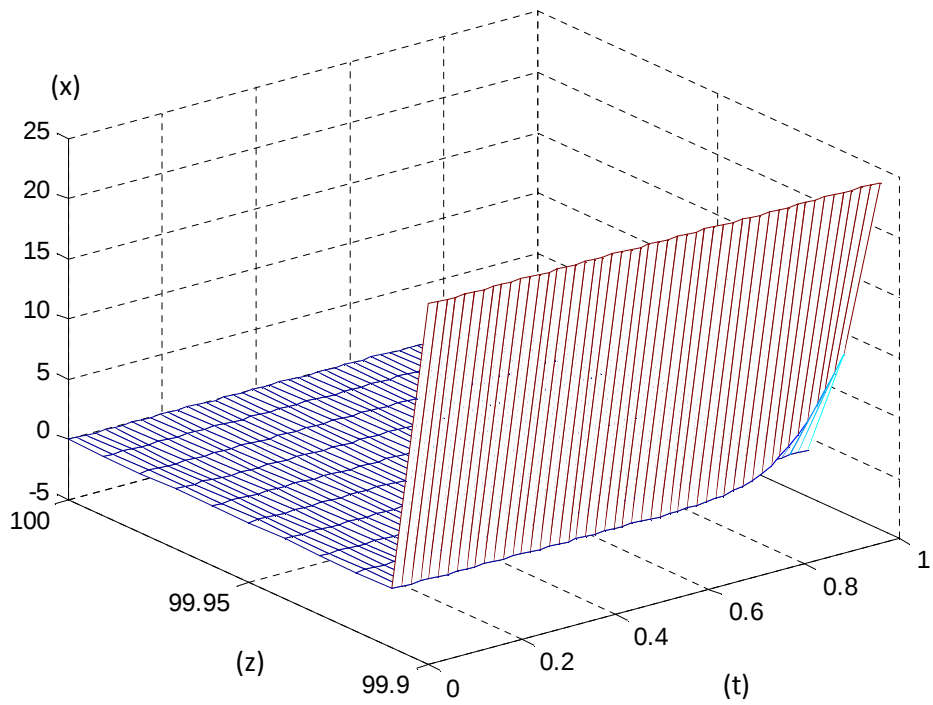


Figure III .2 : Profil dans le cas de la séquence CDR

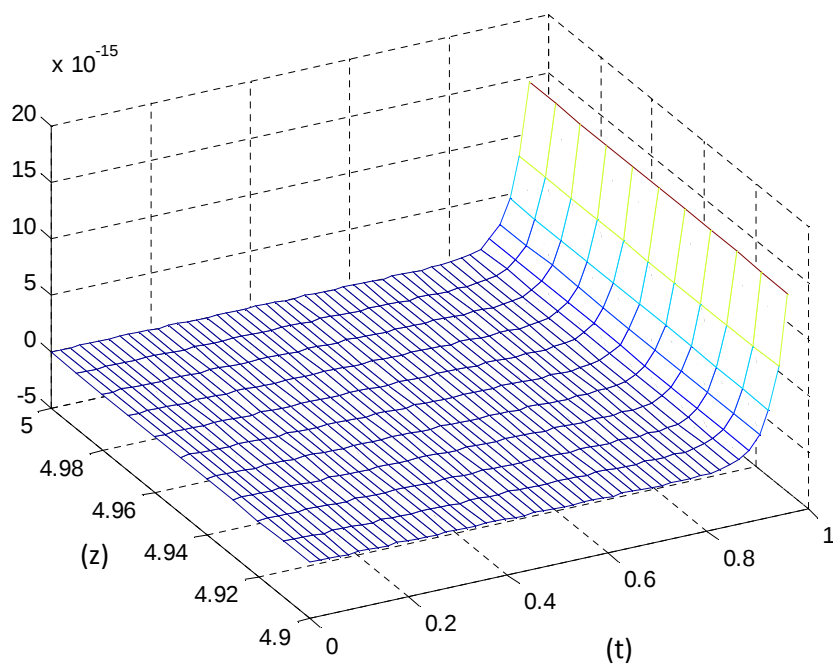


Figure III .3 Profil dans le cas de la séquence CRD

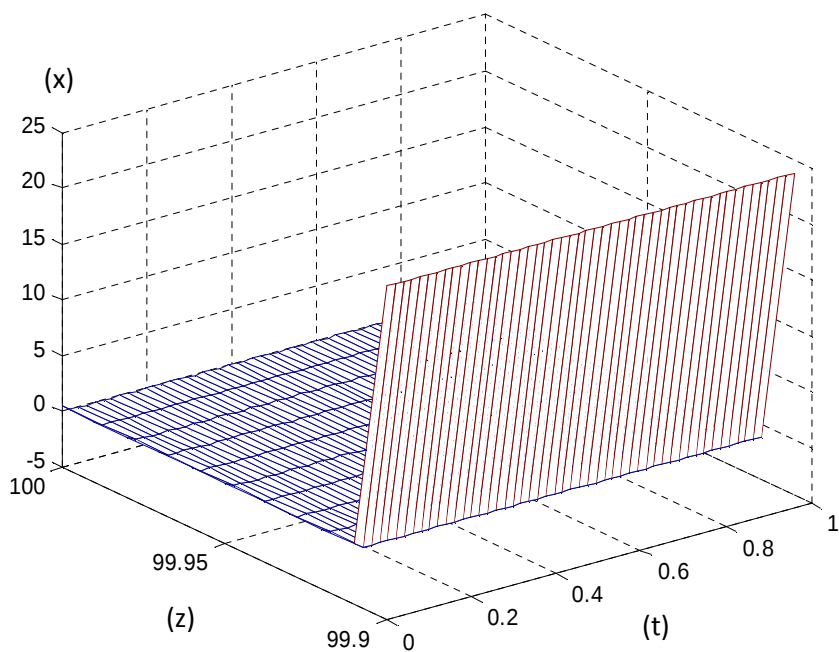


Figure III.4 : Profil dans le cas de la séquence DCR

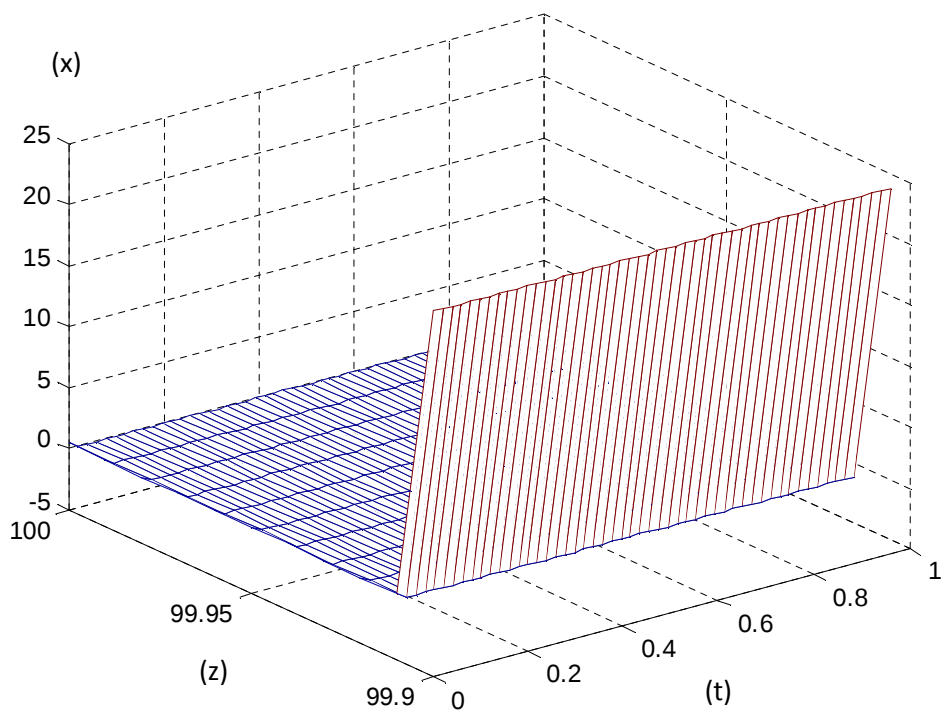


Figure III .5 Profil dans le cas de la séquence DRC

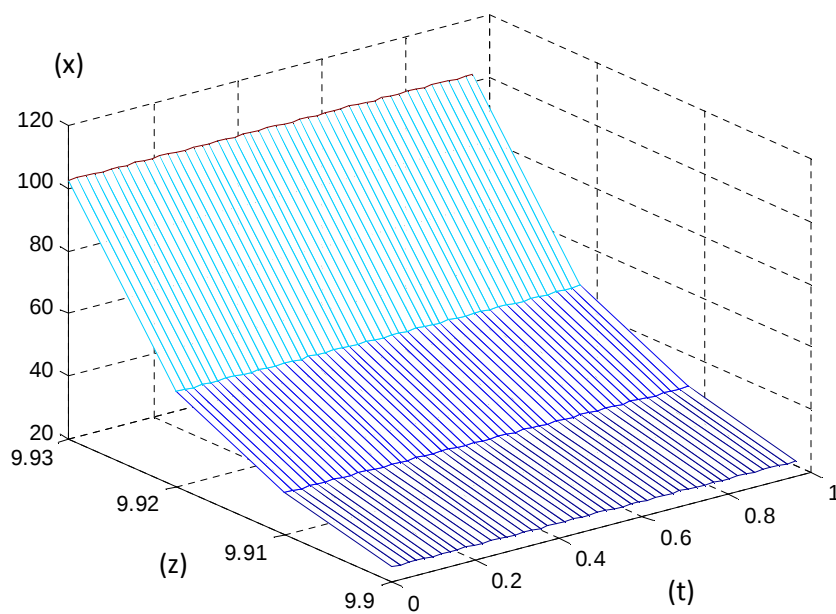


Figure III.6 : Profil dans le cas de la séquence RCD

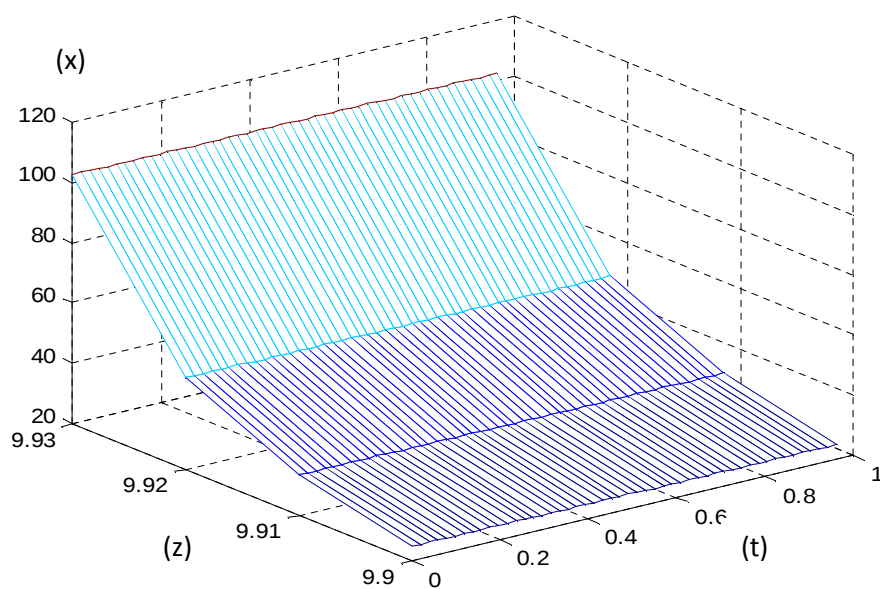


Figure III.7 : Profil dans le cas de la séquence RDC

### III.7.3 Interprétation des résultats

Les résultats de simulation obtenus ont montrés que la résolution du problème convection-diffusion-réaction par la méthode de séparation d'opérateurs, aboutit à une solution dont la précision dépend de la séquence c'est-à-dire de l'ordre de simulation des trois phénomènes. Ainsi, on constate que la séquence de résolution « CDR », par exemple, ne donne pas le même résultat, pour la solution du problème, que celui obtenu par les autres séquences « DCR », « DRC », « RCD » et celui obtenu par la méthode des lignes (simulation du système global).

Par conséquent l'ordre dont le quel les trois phénomènes physiques apparaissent est en effet motivé par l'importance relative de chacun d'entre eux par rapport à l'autre. Dans cet exemple étudié, la séquence qui donne un résultat plus proche de celui obtenu par la méthode des lignes appliquée pour la simulation du système global est la séquence qui commence par la diffusion, c'est-à-dire « DCR » et « DRC » parce que la diffusion dans ce cas est plus importante que la convection et la réaction, ces deux dernières sont commutatives (elles ont la même importance) alors pour avoir un résultat proche du système global on doit utiliser la séquence qui débute par la diffusion.

Evidement, cet ordre dépend du procédé considéré et il peut différer dans d'autres exemples. Par exemple Renou Stephan [3] a appliqué cette méthode à un réacteur tubulaire et a montré que la séquence de résolution qui donne les meilleures résultats consiste à l'analyse des sous-problèmes dans l'ordre « convection-diffusion-réaction ».

Dans ce sens la méthode de séparation d'opérateurs doit être essentiellement vue comme une méthode dont la quelle les différents phénomènes physiques sont ordonnés dans une séquence dont la détermination peut différer d'une application à une autre.

#### Remarque III.3

La technique de séparation d'opérateurs appliquée au modèle convection-diffusion réaction due à sa complexité présente à cette date une littérature qui n'est pas assez fourni, néanmoins cette technique appliquée à un modèle convection-diffusion-réaction donne de très bons résultats expérimentaux proches de la réalité.

### III.8 Avantages de la méthode de séparation d'opérateurs

- La méthode de séparation d'opérateurs permet de traiter chaque processus du problème de façon indépendante par des méthodes numériques appropriées.
- La technique de séparation d'opérateurs appliquée à des modèles de convection-dispersion, convection-diffusion et diffusion-réaction présente des résultats mathématiques et expérimentaux (empiriques) très satisfaisants. [3]
- La méthode de séparation d'opérateurs permet de résoudre les équations paraboliques et hyperboliques.
- Elle est simple à mettre en œuvre et plusieurs variations peuvent être mise en place pour raffiner selon le type du problème. La résolution ne nécessite pas une attention particulière au nombre de Péclet. Ainsi cette approche est bien adaptée aux procédés pour lesquels les conditions d'opérations sont variables ; par exemple il est possible de simuler en utilisant cette approche à un système dans lequel le terme dispersif est négligeable.
- La méthode de séparation d'opérateurs et ses différentes variantes permettent d'éliminer les oscillations numériques qui polluent la solution d'approximation par les méthodes classiques.
- Lors de la simulation du terme de la réaction le temps de simulation par la méthode de séparation d'opérateurs reste constant et sensiblement identique dans le cas où le terme de réaction est linéaire et dans le cas où elle est non linéaire. Ceci s'explique par le fait que cette méthode résout le problème en décomposant les étapes de résolutions en trois sous problèmes contrairement à la méthode des lignes qui fait la résolution du problème en une seule étape. Ainsi le changement de l'ordre de la réaction n'affecte que l'étape de résolution du sous problème de la réaction qui est réalisée avec une intégration directe du terme de réaction.[5]

### III.9 Comparaison des deux méthodes (la méthode des lignes et celle de séparation d'opérateurs)

Les différents résultats obtenus lors la simulation du système global par la méthode des lignes et les différentes variantes de la méthode de séparation d'opérateurs a permis de faire

une comparaison entre ces deux méthodes. Les résultats de la comparaison sont résumés dans le Tableau **III.1** :

| Méthode                            | Avantages                                                                                                                                                                                                                                                                                                            | Désavantages                                                                                                                                                                               |
|------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Méthode des lignes                 | <ul style="list-style-type: none"> <li>-Mise en œuvre simple</li> <li>-conditions aux frontières exactes. [4]</li> </ul>                                                                                                                                                                                             | <ul style="list-style-type: none"> <li>-Nombre important d'EDO</li> <li>- présence des oscillations. [4]</li> <li>-Diffusion numérique. [4]</li> <li>-simulation linéaire lente</li> </ul> |
| Méthode de séparation d'opérateurs | <ul style="list-style-type: none"> <li>-Mise en œuvre simple.</li> <li>-Méthode à pas fixe. [5]</li> <li>-Pas de diffusion numérique</li> <li>-pas d'oscillations</li> <li>-présence de plusieurs variantes</li> <li>-Robuste aux perturbations des paramétrées</li> <li>-simulation non- linéaire rapide</li> </ul> | <ul style="list-style-type: none"> <li>-Méthode heuristique</li> <li>-Erreur plus importante dans le cas de système dispersifs. [4]</li> </ul>                                             |

**Tableau III.1 comparaison entre la méthode des lignes et la méthode de séparation d'opérateurs**

### III.9.1 Résultats de la comparaison

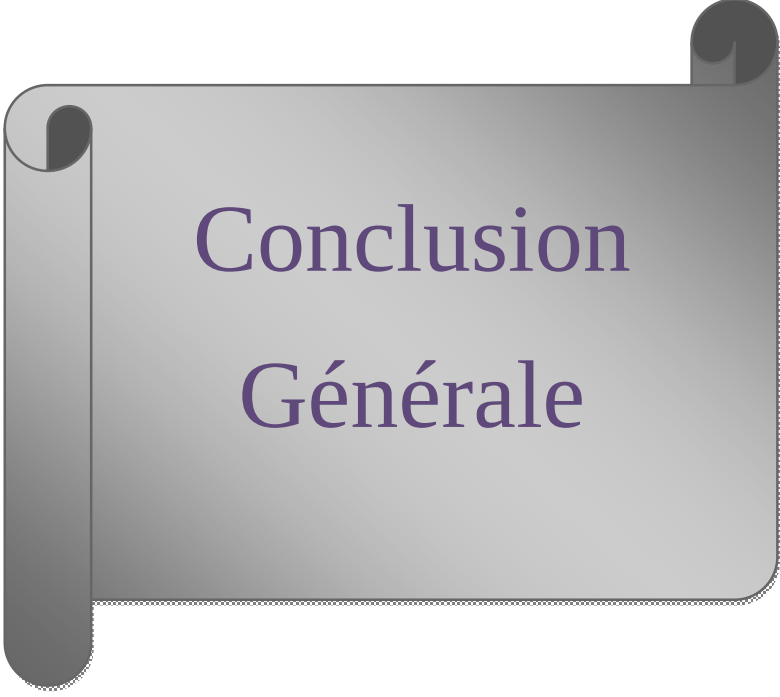
D'après le tableau de comparaison précédant on retient que la méthode de séparation d'opérateurs présente plus de qualités que celle des lignes pour l'analyse adéquate du problème convection-diffusion-réaction.

### III.10 Conclusion

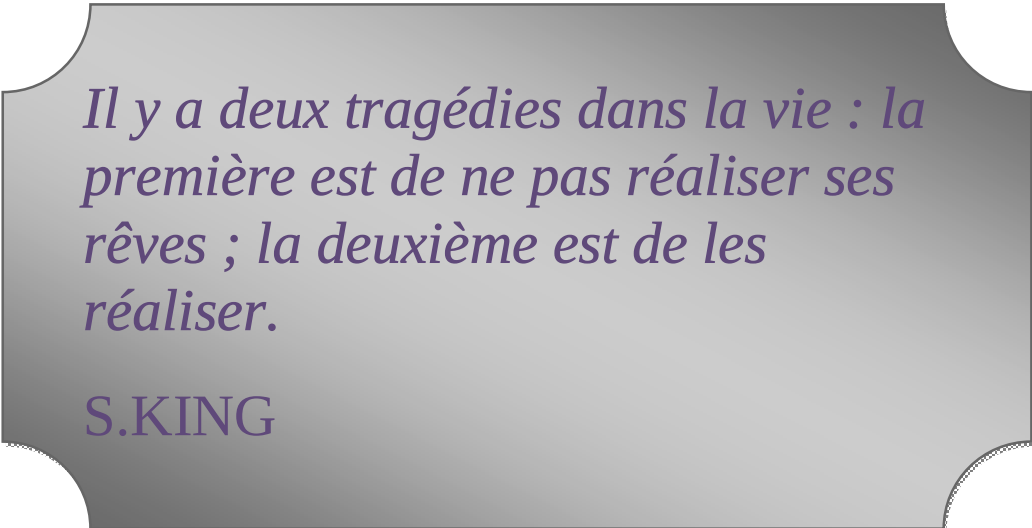
La résolution de l'équation de diffusion-convection-réaction est un problème relativement difficile, notamment quand le mécanisme de la convection est prédominant ou bien le terme réactif est non linéaire. Sa résolution par des méthodes numériques classiques est souvent peu satisfaisante due au caractère diffusif et/ou oscillatoire de ces méthodes.

En se basant sur ces conclusions on peut donc envisager une résolution séparée des sous problèmes par la technique de séparation d'opérateurs en utilisant cette dernière pour discrétiser l'équation de type convection-diffusion-réaction. L'intérêt des techniques utilisées est de traiter ces différents processus de convection, diffusion, et de réaction avec des méthodes numériques appropriées.

Les travaux réalisés sur le modèle convection-diffusion-réaction ont montré que la méthode de séparation d'opérateurs présente six variantes, parmi ces variantes on a constaté que « DCR », et « DRC » représentent mieux le comportement du modèle global.



# Conclusion Générale



*Il y a deux tragédies dans la vie : la première est de ne pas réaliser ses rêves ; la deuxième est de les réaliser.*

S.KING

Le travail présenté dans ce mémoire porte sur l'étude de la méthode de séparation d'opérateurs, l'objectif est de l'utiliser pour la simulation des systèmes à paramètres distribués (SPD) de type diffusion-convection-réaction, et de comparer ses performances par rapport à celles de la méthode des lignes (semi-discrétisation).

La technique de séparation d'opérateurs est utilisée pour discrétiser l'équation de type convection-diffusion-réaction en séparant les différents phénomènes.

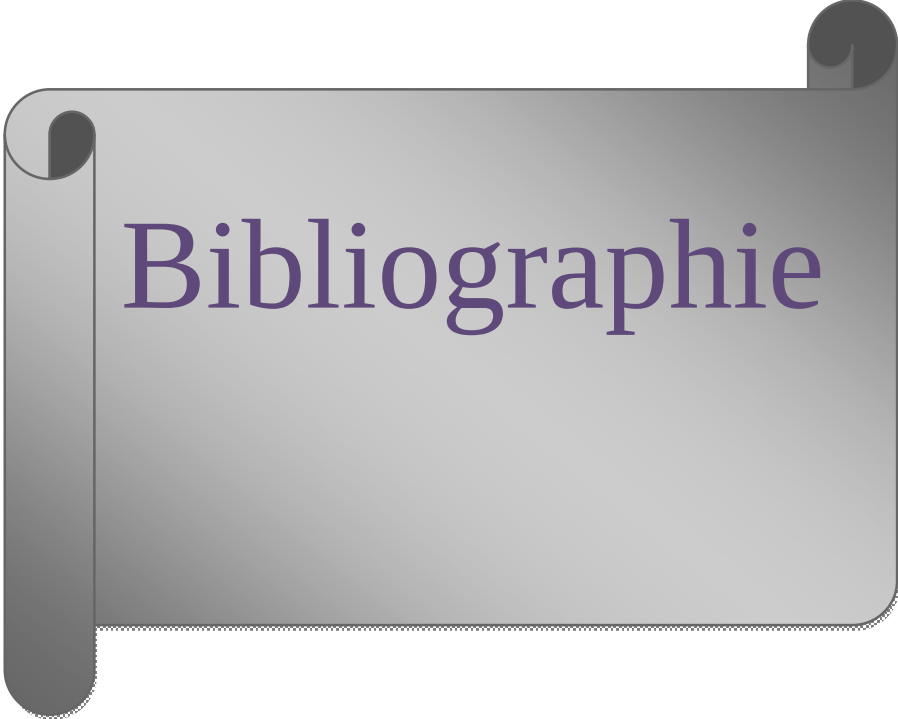
Ainsi, après avoir présenté des généralités et des notions de bases relatives aux SPD, on a exposé deux techniques de simulation des systèmes à paramètres distribués, en l'occurrence la méthode des lignes et la méthode de séparation d'opérateurs. Ces deux méthodes ont été illustrées et appliquées pour la simulation d'un modèle de type diffusion-convection-réaction. Puis on a terminé par la comparaison entre les résultats de simulation obtenus par les deux méthodes.

Les résultats obtenus montrent que la méthode des lignes présente des limites comme l'instabilité et la diffusion numérique, contrairement à la méthode de séparation d'opérateurs qui est simple à implanter et en plus d'être un algorithme rapide elle s'est montrée efficace dans l'élimination des oscillations. De plus cette méthode n'engendre pas une diffusion numérique si la séquence à suivre pour l'intégration est bien choisie. Par exemple, dans le travail réalisé, dans ce mémoire, a montré que deux séquences représentent mieux le système global simulé par la méthode des lignes.

En résumé, la méthode de séparation d'opérateurs constitue une approche très intéressante pour la simulation des systèmes à paramètres distribués, par conséquent certains points méritent d'être explorés parmi lesquels on peut citer :

- Comparaison de la méthode de séparation d'opérateurs par rapport à d'autres méthodes en considérant des critères.
- L'analyse des performances de cet algorithme pourrait être étendue à des systèmes complexes non linéaires. Une approche par alternance des phénomènes de transport ou par alternance des bilans pourrait donner des résultats intéressants.

- L'étude des phénomènes liés à l'écoulement de l'eau.



# Bibliographie

# Bibliographie

- [1].**A.RACHID**, *Systèmes de Régulation* .Masson, Paris, 1997.
- [2].**J.P.BABARY et W.PELCZEWSKI**, *Commande des Systèmes Continus Déterministes*, Masson, Paris, 1985.
- [3].**S.RENOU, M.PERRIER, D.DOCHAIN, S.GENDRON**, *Solution of the Convection-Dispersion-Reaction by a sequencing method*
- [4].**J.D.OUREGA**, *Résolution numérique des systèmes d'équations paraboliques par les Méthodes de Décentrage(UPWIND)*, Ecole Polytechnique de Montréal, aout 2002.
- [5].**S. RENOU**, *Commande non Linéaire d'un système décrit par des équations paraboliques : Application au procédé de blanchiment*, Ecole Polytechnique de Montréal, décembre 2000.
- [6]. **R.T.PICARD**, *Problèmes de réaction-diffusion avec convection : Une étude mathématique et numérique*, LYON 1,2002.
- [7].**A.MAIDI**, *Commande des systèmes décrits par des équations aux dérivées partielles, Hyperboliques* thèse de doctorat, U.M.M.T.O-F.G.E.I, 2008
- [8]. **Xiao-Dong LI**, *Observation et Commande de quelques systèmes à paramètres distribués*, LION 1, 2009.
- [9].**Martin VOHRALIK.**, *Méthodes numériques pour des équations elliptiques et paraboliques non linéaires*, PARIS XI, 2004.
- [10].**B.SPORTISSE, V.MALLET**, *Calcul scientifique pour l'environnement*, Cours ENSTA, décembre 2005