

République Algérienne Démocratique et Populaire
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique
Université Mouloud MAMMERY, 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 Collocation
Orthogonale*

Proposé et Dirigé par :

Mr. MAIDI. A

Soutenu le : 24/06/2010

Présenté par :

M^{lle}. LAJB Lydia

Mr. IRID Saïd

Promotion 2010

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

DEDICACES

*A mes très chers parents.
A mon unique sœur et mes frères.
A ma formidable grand-mère.
A mon binôme.*

Lydia

*A mes très chers parents.
A mon unique frère et mes sœurs.
A mon binôme.*

Saïd

Avec toute notre tendresse

*Vous vous êtes dépensés pour nous sans compter.
En reconnaissance de tous les sacrifices consentis par
tous et chacun pour nous permettre d'atteindre cette
étape de notre vie.*

Affectueuse reconnaissance

*A nos camarades de la promotion 2010 et toute la
famille des automaticiens.*

Sincère gratitude

Nous dédions ce travail

REMERCIEMENTS

En préambule à ce mémoire, la première personne que nous tenons à remercier est M^r. MAIDI Ahmed qui a su nous laisser la liberté nécessaire à l'accomplissement de nos travaux, tout en ayant des remarques et des critiques toujours constructives, pour ses conseils, la gentillesse et la patience qu'il a manifesté à notre égard durant ce parcours, et aussi pour nous avoir fait l'honneur de participer au jury de ce mémoire. Nos échanges continuels, si riches, ont sûrement été la clé de réussite de ce travail.

Enfin, nous tenons à adresser nos sincères remerciements à tous ceux qui, de près ou de loin, y ont contribué.

Nous étendons nos vifs remerciements aux membres du jury qui nous feront l'honneur d'accepter de lire et d'évaluer notre travail.

Nos pensées les plus éminentes vont naturellement à nos familles respectives et en particulier nos parents qui nous ont toujours soutenus quelles que soient nos décisions. Ainsi, nos amis, des plus anciens aux plus récents.

Enfin, pourquoi ne pas le dire, dans cette épreuve où seuls le courage et la maîtrise des connaissances ne suffisent pas, la force qui donne l'impulsion ne peut provenir que du
Bon Dieu.

Merci de tous nos cœurs

Table des matières

Liste des tableaux et figures 01

Introduction générale..... 03

Chapitre I : Généralités sur les systèmes à paramètres distribués

1 Généralités sur les systèmes à paramètres distribués..... 05

1.1 Introduction 06

1.2 Définition d'un système à paramètres distribués..... 06

1.3 Commande des systèmes décrits par des EDP 06

1.3.1 Méthodes indirectes..... 07

1.3.2 Méthodes directes..... 07

1.4 Classification des systèmes à paramètres distribués 07

1.5 Description mathématique des systèmes à paramètres distribués 08

1.6 Commandes et observations des systèmes à paramètres distribués 09

- La commande répartie 09

- La commande par zone..... 09

- La commande ponctuelle..... 09

- La commande par balayage..... 09

- La commande aux frontières 10

- L'observation répartie 10

- L'observation ponctuelle 10

- L'observation par balayage 10

- L'observation par moyennage spatial..... 10

1.7 Conditions aux limites..... 11

• Conditions aux limites de Dirichlet.....	11
• Conditions aux limites de Neumann.....	12
• Conditions aux limites de Fourier	12
1.8 Exemples des systèmes à paramètres distribués.....	12
1.9 Conclusion.....	13

Chapitre II : Simulation par la méthode des lignes

2 Simulation par la méthode des lignes.....	14
2.1 Introduction	15
2.2 Contexte général de la méthode des lignes.....	15
2.2.1 Propriétés et utilisation de la méthode des lignes	15
2.2.2 Application de la méthode des lignes.....	16
2.3 Principe de la méthode des lignes	16
2.3.1 Bases de la méthode des lignes	16
2.3.2 Origine et approche de la méthode des lignes.....	17
2.4 Méthode des différences finies.....	17
2.4.1 Définition	17
2.4.2 Pratique de la méthode des différences finies.....	18
2.5 Choix du pas de maillage (pas de discrétisation)	18
2.5.1 Définition	18
2.5.2 C'est quoi le pas de maillage	18
2.5.3 Illustration	19
2.6 Description mathématique de la méthode des différence finies.....	19
2.6.1 Approximation des opérateurs par les formules de Taylor.....	19
2.6.2 Exemple illustratif.....	21
2.7 Mise en œuvre de la méthode des lignes	23
2.7.1 Discrétisation spatiale et modèle approximé du réacteur.....	23
2.7.2 Simulation numérique du modèle d'état obtenu	27
2.8 Conclusion.....	27

Chapitre III : Méthode des résidus pondérés

3 Méthode des résidus pondérés 28

3.1 Introduction 29

3.2 Définition de la méthode des résidus pondérés 29

3.3 Principe de la méthode des résidus pondérés 29

3.4 Description mathématique de la méthode des résidus pondérés 30

- Résidu sur l'équation 30
- Résidu sur les conditions aux limites 31
- Résidu sur la condition initiale 31

3.4.1 Méthode des moindres carrés..... 32

3.4.2 Méthode de Galerkin..... 33

3.4.3 Méthode des moments..... 34

3.4.4 Méthode de collocation par sous-domaines (méthode des sous-domaines) 34

3.4.5 Méthode de collocation par points (collocation orthogonale) 35

3.5 Généralisation de la méthode des résidus pondérés 35

3.6 Comparaison des différentes méthodes des résidus pondérés 36

3.7 Conclusion..... 37

Chapitre IV :Simulation par la méthode de collocation orthogonale

4 Simulation par la méthode de collocation orthogonale 38

4.1 Introduction 39

4.2 Définition de la méthode de collocation orthogonale..... 39

4.3 Avantages de la méthode de collocation orthogonale 39

4.4 Principe de la méthode de collocation orthogonale..... 40

4.5 Mise en œuvre de la méthode de collocation orthogonale 41

4.5.1	Construction des fonctions de forme : polynômes de Lagrange	41
4.5.2	Choix des points de collocation	42
4.5.3	Localisation des points de collocation	44
4.6	Introduction des conditions aux limites.....	44
4.7	Application de la méthode de collocation au modèle du réacteur chimique	45
4.7.1	Discrétisation spatiale	45
4.7.2	Simulation numérique du modèle d'état obtenu	51
4.8	Comparaison entre la méthode de collocation orthogonale et la méthode des lignes basée sur les différences finies	52
4.9	Conclusion.....	52
Conclusion générale		53
Références Bibliographiques.....		55

Liste des figures

Figure 2.1 Illustration graphique de la dérivée spatiale.....	20
Figure 2.2 Semi-discrétisation en espace.....	21
Figure 2.3 Evolution spatio-temporelle de la concentration dans le réacteur..	27
Figure 4.1 Evolution de la concentration dans le réacteur.....	51

Liste des tableaux

Tableau 3.1 comparaison des méthodes des résidus pondérés.	36
--	----

Introduction Générale

*Savoir ce que tout le monde sait, c'est ne rien savoir.
Le savoir commence là où commence ce que le monde ignore.*

Rémy de Gourmont

La quasi-totalité des procédés physiques ont des variables caractéristiques qui sont non homogènes, c'est-à-dire des variables qui varient en fonction du temps et de l'espace. Parmi ces systèmes, on peut citer les échangeurs de chaleur, les réacteurs chimiques, les structures flexibles. Ces systèmes sont à paramètres distribués.

La dynamique d'un système à paramètres distribués est, généralement, décrite par des équations aux dérivées partielles. Par conséquent, l'analyse de son comportement dynamique, essentiellement par simulation, nécessite l'utilisation des méthodes numériques appropriées.

Pour la simulation des systèmes à paramètres distribués plusieurs méthodes sont proposées. Ces dernières peuvent être scindées en deux classes importantes. Méthodes basées sur l'approximation de l'équation (méthode des lignes), et méthodes basées sur l'approximation de la solution (méthode de collocation orthogonale).

Chaque méthode est bien adaptée à la simulation d'un certain nombre de modèles mathématiques faisant intervenir certains phénomènes physiques, et peut être mal adaptée à d'autres modèles. Par conséquent, une attention doit être accordée au choix de la méthode de simulation afin d'éviter des problèmes d'ordre numérique dus aux limites de la méthode.

L'objectif de ce mémoire est d'étudier deux méthodes de simulation des systèmes à paramètres distribués en l'occurrence, la méthode des lignes et la méthode de collocation orthogonale. Ces méthodes seront étudiées et appliquées à la simulation du comportement dynamique d'un réacteur chimique tubulaire munies de conditions aux limites compliquées.

Ainsi, le mémoire est organisé comme suit :

Le *premier chapitre* est dédié aux généralités sur les systèmes à paramètres distribués, portant sur la définition, la classification et la description mathématique en précisant les différentes conditions aux limites. Le chapitre se conclut en citant quelques exemples de systèmes à paramètres distribués.

Le *deuxième chapitre* expose le principe de la méthode des lignes, ses propriétés fondamentales et l'application de la méthode à la résolution des équations aux dérivées partielles. L'approche adoptée est basée sur les différences finies.

Le *troisième chapitre* est consacré à la description de la méthode des résidus pondérés dont le principe est basé sur l'approximation de la solution de l'équation aux dérivées partielles.

Le *quatrième chapitre* est destiné à l'étude de la méthode de collocation orthogonale et son application à la simulation d'un réacteur chimique. Le chapitre se termine par un paragraphe comparatif avec la méthode des lignes basée sur les différences finies.

Le mémoire s'achève par une conclusion générale sur le travail réalisé.

Chapitre I

Généralités sur les systèmes à paramètres distribués

*Une théorie est quelque chose
que personne ne croit, excepté
la personne qui l'a faite. Une
expérience est quelque chose
que tout le monde croit,
excepté la personne qui l'a
faite.*

Albert Einstein

1.1 Introduction

Depuis plusieurs décennies, la recherche dans le domaine du contrôle des systèmes à paramètres distribués représente un champ d'investigation très important.

Les systèmes à paramètres distribués sont décrits essentiellement par des équations aux dérivées partielles (EDP) linéaires ou non linéaires, éventuellement couplées avec des équations différentielles ordinaires (EDO), des équations intégrales ou intégro-différentielles et des équations algébriques.

Les systèmes d'EDP sont représentés dans des espaces fonctionnels de dimension infinie.

Le contenu de ce chapitre est consacré essentiellement à la définition, à la description mathématique ainsi que la classification des systèmes à paramètres distribués.

1.2 Système à paramètres distribués

Un système à paramètres distribués est un système à variables spatio-temporelles ; Les variables indépendantes sont le temps et l'espace, et les variables spatiales peuvent être mono ou multidimensionnelles.

1.3 Commande des systèmes décrits par des EDP

Pour l'analyse et la commande des systèmes décrits par des EDP, il existe plusieurs approches. Selon la démarche méthodologique, l'étude des systèmes à paramètres distribués, en termes de théorie du contrôle, peut être classifiée en deux catégories différentes [18] : *méthodes directes et indirectes*.

1.3.1 Méthodes indirectes

Le système des EDP évoluant dans un espace fonctionnel de dimension infinie est d'abord approché par un système des EDO dans un espace de dimension finie (\mathbb{R}^n dans la plupart des cas), soit par une approximation des équations au travers d'une discrétisation des opérateurs de dérivation/différentiation (des schémas de différences finies sont couramment pratiqués), soit par une approximation des solutions du système (par des fonctions orthogonales des variables spatiales ou par la méthode des éléments finis, essentiellement).

Comme dans tous les cas, le système ainsi obtenu est représenté dans \mathbb{R}^n , l'avantage des méthodes indirectes consiste en l'accès à de nombreux outils bien développés dans la théorie du contrôle en dimension finie (au sens large). En revanche, certains résultats théoriques pour le système seront fortement subordonnés à la méthode d'approximation et il n'est pas évident de pouvoir prouver la convergence de ces propriétés pour le système en dimension finie vers les propriétés intrinsèques du système en dimension infinie.

1.3.2 Méthodes directes

Dans toute la phase d'étude théorique et de synthèse, le système aux EDP est représenté dans les espaces fonctionnels appropriés, donc de dimension infinie. Bien que les outils mathématiques que l'on emploie pour étudier le système soient plus délicats à maîtriser, l'approche directe nous permet de préserver toutes les informations du système. Les méthodes d'approximation ne sont appliquées que dans la simulation ou lors de l'implémentation finale.

Ce mémoire s'inscrit dans le cadre d'étude des systèmes aux EDP par les méthodes directes, et on s'intéresse aussi à l'utilisation des méthodes directes pour la simulation des systèmes à paramètres distribués.

1.4 Classification des systèmes à paramètres distribués

Dans le cas général [1] du système d'ordre 2, dont la solution x est fonction de deux variables indépendantes z et t , le modèle mathématique s'écrit comme suit :

$$a \frac{\partial^2 x}{\partial z^2} + 2b \frac{\partial^2 x}{\partial z \partial t} + c \frac{\partial^2 x}{\partial t^2} + [\dots] = 0 \quad (1.1)$$

Où le terme entre crochets dépend de x, z, t et des dérivées premières de x .

Par analogie avec l'équation des coniques, l'équation (1.1) est dite :

- Hyperbolique, si $b^2 - ac > 0$.
- Elliptique, si $b^2 - ac < 0$.
- Parabolique, si $b^2 - ac = 0$.

Si les coefficients a, b , et c sont nuls, le type d'équation dépend des seules dérivées premières de x (équations hyperboliques d'ordre 1). Dans ce qui suit, nous considérons la classe particulière de systèmes, assez largement répandue pour laquelle $b = c = 0$. L'équation d'évolution (1.1) est dans ce cas soit parabolique ($a \neq 0$), soit hyperbolique ($a = 0$).

1.5 Description mathématique des systèmes à paramètres distribués

On considère la classe des systèmes définie par l'équation d'état suivante [1] :

$$\frac{\partial x(z, t)}{\partial t} = M[x(z, t)] + H(z)u(z, t) \quad (1.2)$$

Sur un domaine spatial $\Omega \subset \mathbb{R}$ et un domaine temporel $T \subset \mathbb{R}$. Soit $x_0 = x(z, t_0)$ l'état initial.

Des conditions aux limites doivent aussi être fixées sur la frontière de Ω :

$$L[x(z', t)] = u_1(z', t) \quad z' \in Fr(\Omega) \quad (1.3)$$

L, M et H sont des opérateurs matriciels différentiels agissant sur le vecteur d'état x . Les variables $u(z, t)$ et $u_1(z', t)$ sont les entrées ou commandes du système.

1.6 Commandes et observations d'un système à paramètres distribués [8]

➤ Pour les grandeurs de commande, on distingue plusieurs classes :

- **La commande répartie** $u(z,t)$ définie sur $\Omega \times T$.

$$u(z,t) = q(z)u_e(t) \quad (1.4)$$

$q(z)$: représente la structure géométrique du système d'actionneur.

$u_e(t)$: représente le signal d'entrée.

Cette formulation permet de simplifier le calcul dans la transformation du modèle et la détermination de la commande.

- **La commande par zone** définie sur un sous-ensemble $\Omega \times T$.

Si la commande est appliquée sur p zones, on a dans ce cas :

$$u(z,t) = \sum_{i=1}^p q_i(z)u_{ie}(t) \quad (1.5)$$

- **La commande ponctuelle** agissant sur un ou plusieurs points de Ω .

Dans le cas particulier où la zone de commande se réduit à un point particulier situé dans Ω , la fonction $q_i(z)$ est remplacée dans l'équation précédente formellement par l'impulsion de *Dirac*.

$$u(z,t) = \sum_{i=1}^p u_{ie}(t)\delta(z - z_i) \quad (1.6)$$

- **La commande par balayage** pour laquelle les zones ou / et points d'action sont mobiles dans Ω .

- **La commande aux frontières** définie sur $Fr(\Omega) \times T$.

(Cette commande peut elle-même être par zone, fixe ou à balayage dans le cas où $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ ou \mathbb{R}^3).

➤ Pour les observations, on distingue aussi plusieurs classes :

- **L'observation répartie** sur $\Omega \times T$ ou sur un sous-ensemble de $\Omega \times T$.

$$y(z, t) = P(z)x(z, t) \quad (1.7)$$

$P(z)$: caractérise la structure géométrique du système d'observation.

- **L'observation ponctuelle** sur un ou plusieurs points de Ω ou / et de $Fr(\Omega)$.

Elle nécessite de prendre quelques points particuliers z_i sur l'espace Ω sur lesquels on va définir la sortie pour chacun de ces points comme suit :

$$y(z, t) = \int_{\Omega} x(z, t) \delta(z - z_i) dz = x(z, t) \quad (1.8)$$

- **L'observation par balayage** pour laquelle les points d'observation (capteurs) sont mobiles dans Ω .

- **L'observation par moyennage spatial** définie par l'intégrale :

$$y_m(t) = \int_{\Omega} C(z)y(z, t) dz \quad (1.9)$$

Où $C(z)$ est la structure géométrique des capteurs.

1.7 Conditions aux limites

En mathématiques, une condition aux limites est imposée à une équation différentielle ou à une équation aux dérivées partielles lorsque l'on spécifie les valeurs des dérivées que la solution doit vérifier sur les frontières / limites du domaine. Il existe plusieurs types de conditions aux limites parmi lesquelles on peut citer les plus rencontrées :

- Conditions aux limites de Dirichlet.
 - Conditions aux limites de Neumann.
 - Conditions aux limites de Fourier (ou Robin).
 - Conditions aux limites mixtes (mêlées).
 - Conditions aux limites de Danckwerts.
- Pour illustrer quelques conditions aux limites [10], soit une barre métallique, assimilée à un segment de droite de longueur l , négligeant la variation de la température dans les autres dimensions de la barre.

- **Conditions aux limites de Dirichlet**

Considérons les extrémités de la barre métallique fixées à des températures données $Q_0(t)$, $Q_l(t)$ on obtiendra :

$$x(0, t) = Q_0(t), \quad x(l, t) = Q_l(t) \quad (1.10)$$

La condition aux limites de Dirichlet est sans doute l'une des conditions aux limites les plus faciles à comprendre.

- **Conditions aux limites de Neumann**

Quand le flux de chaleur est donné aux bords, le gradient de la température sera fixé et on aura les conditions aux limites suivantes:

$$-\alpha \frac{\partial x}{\partial z} \Big|_{z=0} = F_0(t), \quad \alpha \frac{\partial x}{\partial z} \Big|_{z=l} = F_l(t) \quad (1.11)$$

- **Conditions aux limites de Fourier**

Si on dispose de la température extérieure $x_{ex}(t)$, alors le gradient de la température aux bords sera proportionnel à la différence $(x - x_{ex})$.

Les conditions aux limites seront:

$$-\alpha \frac{\partial x}{\partial z} \Big|_{\varepsilon} = k (x - x_{ex}) \quad (1.12)$$

Avec k : constante $\in \mathbb{R}$.

α : caractérise la diffusion de la chaleur.

ε : la frontière du domaine de variation x .

1.8 Exemples des systèmes à paramètres distribués

Il est important de noter que les systèmes à paramètres distribués ont été l'objet d'un domaine de recherche très actif depuis des décennies, ainsi, l'étude de ces systèmes prend une importance croissante, et cela grâce à leurs utilisation multiple dans différents domaines de la vie quotidienne, vu le nombre de systèmes pouvant être décrits par un ensemble d'EDP linéaires ou non linéaires couplées avec des EDO.

On cite quelques exemples réels :

- *Dans l'aérospatial*, exemple des vaisseaux spatiaux avec antenne.
- *En ingénierie*, le mouvement des systèmes mécaniques comme les robots à bras flexibles contrôlés.
- *Dans le domaine médical*, propagation d'une épidémie.
- *En automobile*, Simulation numérique d'un essai de choc sur une voiture.
- *En traitement d'image*, maillage utilisé pour l'imagerie.
- *En météorologie*, les phénomènes météorologiques.
- *En génie construction*, systèmes de structure flexible.
- *En génie des procédés*, système d'échangeur thermique.

1.9 Conclusion

Dans ce premier chapitre quelques notions de base sur les systèmes à paramètres distribués ont été présentées. Ces dernières ont été limitées à la description mathématique, aux différentes commandes et observations, ainsi qu'aux différents types de conditions aux limites.

Pour étudier le comportement d'un système à paramètres distribués, différentes méthodes de transformation existent. Ces dernières permettent d'approximer le modèle initial par un système à paramètres localisés et de conserver au mieux ses propriétés essentielles.

Une des méthodes les plus utilisées, particulièrement pour la simulation, est la méthode des lignes. Cette dernière fera l'objet du chapitre suivant.

Chapitre II

Simulation par la méthode des lignes

*Dans les mathématiques vous
ne comprenez pas des choses,
vous vous habituez juste à
elles.*

J. Von Neumann

2.1 Introduction

La méthode des lignes est une procédure semi-analytique, est bien connue par les experts en matière de techniques de résolution d'équations aux dérivées partielles. Les domaines d'applications de la méthode ont augmenté considérablement en ces dernières années.

Cette méthode a été initialement développée par des mathématiciens et utilisée, généralement, pour la résolution des problèmes de la physique.

Ce chapitre s'intéresse à l'approximation des dérivées spatiales par des différences finies. Cette étape joue un rôle central dans la méthode des lignes.

2.2 Contexte général de la méthode des lignes

La méthode des lignes est considérée comme une méthode des différences finies spéciale mais plus pertinente en ce qui concerne l'exactitude et le temps de calcul que la méthode des différences finies régulière. Elle consiste fondamentalement en la discrétisation d'une équation donnée dans un ou deux sens tout en utilisant la solution analytique dans le sens restant.

2.2.1 Propriétés et utilisations de la méthode des lignes

La méthode des lignes a les propriétés suivantes [13] qui justifient son utilisation :

- **Efficacité de calcul** : Le caractère semi-analytique de la formulation mène à un algorithme simple et compact, qui fournit des résultats exacts avec moins d'effort de calcul que d'autres techniques.
- **Stabilité numérique** : En séparant la discrétisation du temps et l'espace, il est facile de déterminer la stabilité et la convergence pour un large éventail de problèmes.

- **Effort de programmation réduit** : En se servant des solveurs de problèmes d'EDO de pointe, l'effort de programmation peut être considérablement réduit.
- **Temps de calcul réduit** : Puisque seulement une petite quantité de lignes de discrétisation est nécessaire dans le calcul, il n'y a aucune nécessité de résoudre un grand système d'équations ; par conséquent la durée de calcul est petite.

2.2.2 Application de la méthode des lignes

Pour appliquer la méthode des lignes, on a les '5' phases fondamentales suivantes [16] :

- Division du domaine des solutions en couches.
- Discrétisation de l'équation dans un sens du même rang.
- Transformation pour obtenir des équations ordinaires découplées.
- Transformation et introduction des conditions aux limites.
- Résolution des équations.

2.3 Principe de la méthode des lignes

2.3.1 Bases de la méthode des lignes

L'idée de base de la méthode des lignes est de remplacer les dérivées spatiales dans l'EDP par des approximations algébriques. Une fois que ceci est fait, les dérivées spatiales ne sont expressément plus indiquées en termes de variables spatiales indépendantes mais seulement en termes de la variable temporelle. En d'autres termes, avec seulement une variable indépendante restante, nous avons un système d'équations aux dérivées ordinaires qui approchent ou approximent l'EDP initiale. L'enjeu est alors de préparer le système

rapprochant les équations aux dérivées partielles [11]. Une fois que ceci est fait, nous pouvons appliquer n'importe quel algorithme d'intégration numérique pour que les équations aux dérivées ordinaires, munies des conditions initiales calculent une solution numérique approximative pour l'EDP.

2.3.2 Origine et approche de la méthode des lignes

La méthode des lignes se rapporte le plus souvent à la construction ou à l'analyse des méthodes numériques pour des équations aux dérivées partielles qui s'effectuent d'abord en discrétisant les dérivées spatiales seulement et en laissant la variable du temps continue. Ceci mène à un système d'équations aux dérivées ordinaires auxquelles une méthode numérique pour des équations aux dérivées ordinaires peut être appliquée [7]. Cependant, une importante application des différences finies est la résolution numérique des équations différentielles et des équations aux dérivées partielles ; l'idée est de remplacer les dérivées apparaissant dans l'équation par des différences finies qui les approximent. Les diverses méthodes qui en résultent sont appelées **méthodes des différences finies** [17].

On note aussi que dans certains cas on ne connaît pas de "formule" qui permettrait de calculer directement la valeur de la solution en un point quelconque du domaine Ω . Le problème se pose donc de trouver un moyen *d'approcher les valeurs de la solution d'aussi près qu'on veut*. Une méthode pour y parvenir est la *méthode des différences finies*, que nous allons maintenant décrire.

2.4 Méthode des différences finies

2.4.1 Définition

En mathématiques [6], une **différence finie** est une expression de la forme $f(x + b) - f(x + a)$. (Où f est une fonction numérique) ; la même expression divisée par $(b - a)$ s'appelle un taux d'accroissement (ou *taux de variation*), et il est possible, plus généralement, de définir de même des différences divisées.

2.4.2 Pratique de la méthode des différences finies

Dans le domaine de l'analyse numérique, on peut être amené à rechercher la solution d'une équation aux dérivées partielles. Parmi les méthodes de résolutions couramment pratiquées, la méthode des différences finies est la plus facile d'accès, puisqu'elle repose sur deux notions : la discrétisation des opérateurs de dérivation/différentiation (assez intuitive) par différences finies d'une part, et la convergence du schéma numérique ainsi obtenue d'autre part.

La méthode des différences finies fournit une approximation de la solution en un nombre *fini* de points du domaine Ω . Pour cela, on commence par établir un *maillage uniforme* de l'espace, de même *pas* Δz sur Ω (il est parfois utile de considérer des maillages non uniformes).

2.5 Choix du pas de maillage (pas de discrétisation)

2.5.1 Définition

Un maillage est un ensemble de points du domaine de définition sur lequel on va appliquer la méthode des différences finies.

Pour une application définie sur un segment de \mathbb{R} , on ajoutera en général les deux extrémités du segment ; pour un maillage en dimension supérieure, on sera amené à choisir, éventuellement, des points du contour du domaine de définition.

2.5.2 C'est quoi le pas de maillage

On appelle le *pas* de maillage la distance entre deux points successifs de maillage voisins. En dimension « un », cela se simplifie en différence des abscisses. Ce *pas* n'est pas nécessairement constant, il peut même être judicieux de ne pas le fixer comme tel. Le *pas* (global) de l'approximation peut être défini comme le plus grand *pas* de maillage. Ainsi, si ce

pas global tend vers 0, cela veut dire que la répartition des points de maillage dans l'intervalle choisi tend à se faire sur tout le domaine d'étude par densité.

2.5.3 Illustration

Etant donné un entier $N \geq 1$, on pose :

$$z = \frac{l}{N+1} \quad z \in [0, l]$$

Et on définit un *maillage uniforme* de *pas* Δz de l'intervalle $[0, l]$ comme étant l'ensemble des points $z_i = i \Delta z$, $0 \leq i \leq N+1$ (remarque que $z_0 = 0, z_{N+1} = l$), appelé les *nœuds* de maillage. Le *pas* Δz est destiné à tendre vers zéro, ce qui signifie qu'en principe peut être rendu aussi petit qu'on veut. La *méthode des différences finies* est un moyen d'obtenir une approximation de la solution de la fonction aux nœuds de maillage [3].

2.6 Description mathématique de la méthode des différences finies

De nombreuses applications de ces méthodes se rencontrent en théorie du calcul numérique, ainsi que dans des disciplines scientifiques très variées (telles que la mécanique des fluides, et ses applications à la météorologie ou à l'aérodynamique ; l'analyse des lignes de transmission, des structures de guide d'ondes).

2.6.1 Approximation des opérateurs par les formules de Taylor [4]

Grâce aux formules de Taylor, on définit la discrétisation des opérateurs différentiels (dérivées premières, secondes, etc. partielles ou non).

$$x : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R} \text{ fonction } C^3$$

$$x(z + \Delta z) = x(z) + \Delta z x'(z) + \frac{\Delta z^2}{2} x''(z) + O(\Delta z^3) \quad (2.1)$$

$$x(z - \Delta z) = x(z) - \Delta z x'(z) + \frac{\Delta z^2}{2} x''(z) + O(\Delta z^3) \quad (2.2)$$

$$x'(z) = \frac{x(z + \Delta z) - x(z)}{\Delta z} + O(\Delta z) \quad \text{ordre 1, décentré avant} \quad (2.3)$$

$$x'(z) = \frac{x(z) - x(z - \Delta z)}{\Delta z} + O(\Delta z) \quad \text{ordre 1, décentré arrière} \quad (2.4)$$

$$x'(z) = \frac{x(z + \Delta z) - x(z - \Delta z)}{2\Delta z} + O(\Delta z^2) \quad \text{ordre 2, centré} \quad (2.5)$$

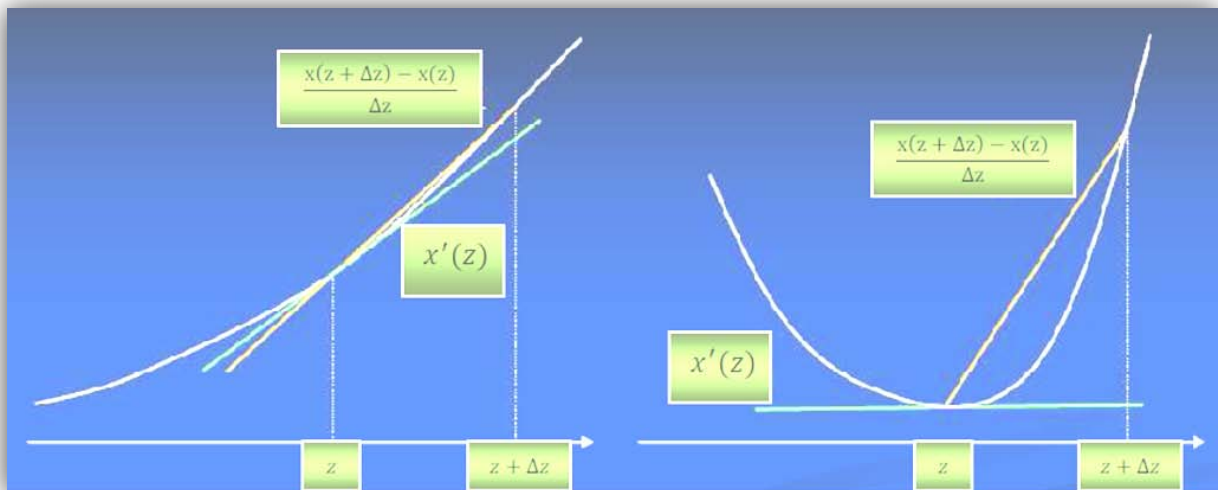


Figure 2.1 Illustration graphique de la dérivée spatiale

$$x'(z) = \frac{x(z + \Delta z) - x(z)}{\Delta z} + \frac{\Delta z}{2} x''(\epsilon_z) \quad \epsilon_z \in [z, z + \Delta z]$$

Bonne approximation si Δz petit et $\sup_{\epsilon \in [z, z + \Delta z]} |x''(\epsilon)|$ petit

Découpage de l'intervalle $[0, 1]$ $(z_i)_{i=1, N+1}$ avec $z_i = i\Delta z$ et $\Delta z = \frac{1}{N+1}$

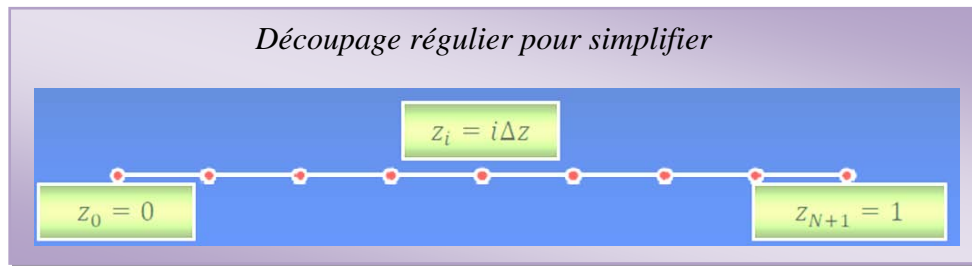


Figure 2.2 Semi-discrétisation en espace

2.6.2 Exemple illustratif

A titre d'exemple illustratif [8] d'une méthode de semi-discrétisation, considérons l'équation de la chaleur suivante :

$$\frac{\partial x(z, t)}{\partial t} = D^2 \frac{\partial^2 x(z, t)}{\partial z^2} \quad z \in [0,1] \quad (2.6)$$

Avec les conditions aux limites :

$$x(0, t) = x(1, t) = 0 \quad (2.7)$$

Et la condition initiale :

$$x(\Delta z, 0) = x_0(\Delta z) \quad (2.8)$$

Un tel problème est appelé *problème aux limites*, car la fonction inconnue (2.6) doit satisfaire les conditions aux limites $x(0, t) = x(1, t) = 0$ posées à la frontière de l'intervalle sur lequel l'équation différentielle doit être satisfaite.

Décomposons le domaine d'espace $[0,1]$ en N intervalles égaux correspondant à un pas de discrétisation $\Delta z = \frac{1}{N}$. Un schéma classique de discrétisation de la dérivée de premier et second ordre est le suivant :

$$\frac{\partial x}{\partial z} \Big|_n \cong \frac{x_{n+1}^* - x_n^*}{\Delta z}$$

$$\frac{\partial^2 x}{\partial z^2} \Big|_n \cong \frac{x_{n+1}^* - 2x_n^* + x_{n-1}^*}{(\Delta z)^2}$$

D'où l'équation différentielle :

$$\dot{x}_n^*(t) = \frac{D^2}{(\Delta z)^2} [x_{n+1}^* - 2x_n^* + x_{n-1}^*] \quad n = 1, 2, 3, \dots, N - 1 \quad (2.9)$$

Avec les conditions aux limites :

$$x_0^*(t) = x(0, t) = 0 \quad (2.10)$$

$$x_N^*(t) = x(1, t) = 0 \quad (2.11)$$

Et les conditions initiales :

$$x_n^*(0) = x_0(n\Delta z) \quad (2.12)$$

Soit sous forme matricielle :

$$\begin{bmatrix} \dot{x}_1 \\ \dot{x}_2 \\ \vdots \\ \dot{x}_{N-1} \end{bmatrix} = \frac{D^2}{(\Delta z)^2} \begin{bmatrix} -2 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 1 & -2 & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & -2 & 1 \\ 0 & \dots & 0 & 1 & -2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_{N-1} \end{bmatrix} \quad (2.13)$$

La matrice dynamique obtenue par ce schéma de discrétisation est tridiagonale symétrique.

Maintenant, en considérant les conditions initiales, on peut résoudre par une méthode d'intégration numérique le système d'équations aux dérivées ordinaires (2.13).

2.7 Mise en œuvre de la méthode des lignes

Considérons un réacteur chimique tubulaire dispersé isotherme [9] dont le comportement dynamique est régi par l'équation d'état du système **Diffusion-Convection-Réaction**, donné comme suit :

$$\frac{\partial x(z, t)}{\partial t} = -v \frac{\partial x(z, t)}{\partial z} + D \frac{\partial^2 x(z, t)}{\partial z^2} + R_a(x(z, t)) \quad (2.14)$$

v : **Convection** (vitesse).

D : Coefficient de **Diffusion**.

$R_a(z, t)$: **Réaction** (fonction non linéaire).

L'évolution de la concentration est décrite par l'EDP (2.14) munie des conditions aux frontières de *Danckaerts*.

$$vx(0^-, t) = vx(0^+, t) - D \frac{\partial x(z, t)}{\partial z} \Big|_{z=0^+} \quad (2.15)$$

$$\frac{\partial x(z, t)}{\partial z} \Big|_{z=l} = 0 \quad (2.16)$$

2.7.1 Discrétisation spatiale et modèle approximé du réacteur

L'évolution de la concentration est décrite par l'équation aux dérivées partielles (2.14), avec les conditions aux limites (2.15) et (2.16).

On considère que $z_0 = 0 < z_1 < z_2 < \dots < z_{N-1} < z_N = l$.

La discrétisation de l'équation (2.14) par les différences finies donne :

$$\dot{x}_i(t) = -\frac{v}{\Delta z} [x_i(t) - x_{i-1}(t)] + \frac{D}{\Delta z^2} [x_{i+1}(t) - 2x_i(t) + x_{i-1}(t)] + R_a(x_i(t)) \quad (2.17)$$

On prend :

$x(0^-, t) = u(t)$: Variable d'entrée.

$x(0^+, t) = x(0, t)$.

$x(l, t) = y(t)$: Variable de sortie.

Pour $i = 1 \dots N$, on utilise la formule (2.17).

✓ **Pour $i = 1$, la formule (2.17) donne :**

$$\dot{x}_1(t) = -\frac{v}{\Delta z} [x_1(t) - x_0(t)] + \frac{D}{\Delta z^2} [x_2(t) - 2x_1(t) + x_0(t)] + R_a(x_1(t)) \quad (2.18)$$

La formule (2.18) dépend de $x_0(t)$, donc on doit utiliser la condition au limite $z = 0$. La discrétisation de la condition au limite $z = 0$ (2.15), donne :

$$vu(t) = vx_0(t) - \frac{D}{\Delta z} (x_1(t) - x_0(t)) \quad (2.19)$$

A partir de cette équation, on détermine $x_0(t)$ comme suit :

$$vu(t) + \frac{D}{\Delta z} x_1(t) = \left(v + \frac{D}{\Delta z} \right) x_0(t) \quad (2.20)$$

D'où :

$$x_0(t) = \frac{vu(t) + \frac{D}{\Delta Z} x_1(t)}{\left(v + \frac{D}{\Delta Z}\right)} \quad (2.21)$$

Ainsi en remplaçant dans (2.18), l'expression (2.21), on aura :

$$\dot{x}_1(t) = \left(\frac{-2D-v\Delta Z}{\Delta Z^2} + \frac{D^2+vD\Delta Z}{v\Delta Z^3+D\Delta Z^2}\right) x_1(t) + \left(\frac{D}{\Delta Z^2}\right) x_2(t) + R_a(x_1(t)) + \left(\frac{v^2\Delta Z+Dv}{v\Delta Z^2+D\Delta Z}\right) u(t) \quad (2.22)$$

✓ **Pour $i = N$, la formule (2.17) donne :**

$$\dot{x}_N(t) = -\frac{v}{\Delta Z} [x_N(t) - x_{N-1}(t)] + \frac{D}{\Delta Z^2} [x_{N+1}(t) - 2x_N(t) + x_{N-1}(t)] + R_a(x_N(t)) \quad (2.23)$$

La formule (2.23) dépend de $x_{N+1}(t)$ qui n'est pas disponible donc on doit utiliser la condition au limite $z = l$. La discrétisation de la condition au limite (2.16), donne :

$$\frac{\partial x(z, t)}{\partial z} \Big|_{z=l} = \frac{1}{\Delta Z} (x_{N+1}(t) - x_N(t)) = 0 \quad (2.24)$$

Par conséquent : $x_{N+1}(t) = x_N(t)$.

Donc, pour $i = N$, il vient :

$$\begin{aligned} \dot{x}_N(t) &= -\frac{v}{\Delta Z} [x_N(t) - x_{N-1}(t)] + \frac{D}{\Delta Z^2} [x_N(t) - 2x_N(t) + x_{N-1}(t)] + R_a(x_N(t)) \\ \dot{x}_N(t) &= \left(\frac{D}{\Delta Z^2} + \frac{v}{\Delta Z}\right) x_{N-1}(t) + \left(-\frac{D}{\Delta Z^2} - \frac{v}{\Delta Z}\right) x_N(t) + R_a(x_N(t)) \end{aligned} \quad (2.25)$$

✓ **Pour $i = 2 \dots N-1$, la formule (2.17) donne :**

$$\dot{x}_i(t) = \left(\frac{D}{\Delta Z^2}\right)x_{i+1}(t) + \left(-\frac{v}{\Delta Z} - \frac{2D}{\Delta Z^2}\right)x_i(t) + \left(\frac{D}{\Delta Z^2} + \frac{v}{\Delta Z}\right)x_{i-1}(t) + R_a(x_i(t)) \quad (2.26)$$

Ainsi on aura :

$$\dot{x}_1(t) = \left(\frac{-2D-v\Delta Z}{\Delta Z^2} + \frac{D^2+vD\Delta Z}{v\Delta Z^3+D\Delta Z^2}\right)x_1(t) + \left(\frac{D}{\Delta Z^2}\right)x_2(t) + R_a(x_1(t)) + \left(\frac{v^2\Delta Z+Dv}{v\Delta Z^2+D\Delta Z}\right)u(t)$$

$$\dot{x}_2(t) = -\frac{v}{\Delta Z}[x_2(t) - x_1(t)] + \frac{D}{\Delta Z^2}[x_3(t) - 2x_2(t) + x_1(t)] + R_a(x_2(t))$$

⋮
⋮

$$\dot{x}_{N-1}(t) = -\frac{v}{\Delta Z}[x_{N-1}(t) - x_{N-2}(t)] + \frac{D}{\Delta Z^2}[x_N(t) - 2x_{N-1}(t) + x_{N-2}(t)] + R_a(x_{N-1}(t))$$

$$\dot{x}_N(t) = \left(\frac{D}{\Delta Z^2} + \frac{v}{\Delta Z}\right)x_{N-1}(t) + \left(-\frac{D}{\Delta Z^2} - \frac{v}{\Delta Z}\right)x_N(t) + R_a(x_N(t))$$

Ou bien sous la forme matricielle :

$$\begin{bmatrix} \dot{x}_1 \\ \dot{x}_2 \\ \dot{x}_3 \\ \vdots \\ \vdots \\ \dot{x}_{N-1} \\ \dot{x}_N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{-2D-v\Delta Z}{\Delta Z^2} + \frac{D^2+vD\Delta Z}{v\Delta Z^3+D\Delta Z^2} & \frac{D}{\Delta Z^2} & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ \frac{D}{\Delta Z^2} - \frac{v}{\Delta Z} & \frac{v}{\Delta Z} - \frac{2D}{\Delta Z^2} & \frac{D}{\Delta Z} & \ddots & & & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \vdots & & & \frac{D}{\Delta Z^2} - \frac{v}{\Delta Z} & \frac{v}{\Delta Z} - \frac{2D}{\Delta Z^2} & \frac{D}{\Delta Z} \\ 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & \frac{D}{\Delta Z^2} + \frac{v}{\Delta Z} & -\frac{D}{\Delta Z^2} - \frac{v}{\Delta Z} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ \vdots \\ x_{N-1} \\ x_N \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \frac{v^2\Delta Z+Dv}{v\Delta Z^2+D\Delta Z} \\ 0 \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} u(t) + R_a \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ \vdots \\ x_{N-1} \\ x_N \end{bmatrix}$$

2.7.2 Simulation numérique du modèle d'état obtenu

Pour $N = 20$ points, on obtient le résultat de la figure 2.3.

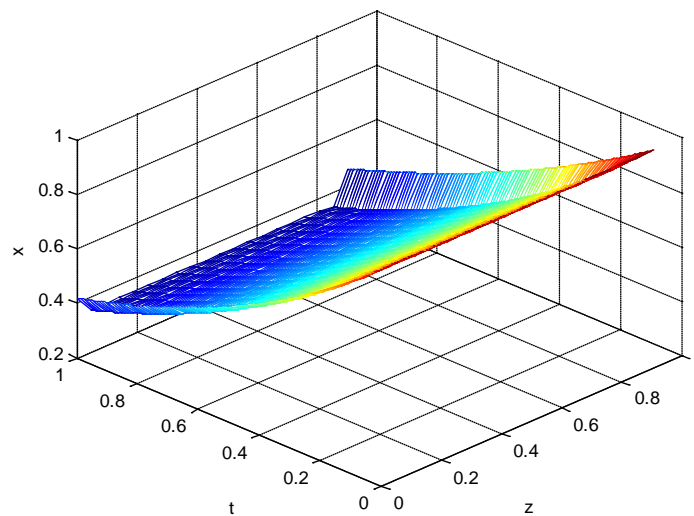


Figure 2.3 Evolution spatio-temporelle de la concentration dans le réacteur

2.8 Conclusion

La méthode des différences finies est une méthode numérique basée sur la discrétisation en temps et/ou en espace. Elle est très utilisée pour traiter des problèmes de physique. Les principaux avantages de cette méthode résident dans sa formulation relativement simple, la robustesse de l'algorithme qu'elle utilise et dans la possibilité d'effectuer des études sur un large éventail d'applications à des problèmes réels. Bien que la méthode des lignes est devenue un outil standard pour résoudre des problèmes pratiques et complexes, il faut savoir aussi qu'on pourra faire appel à d'autres méthodes de résolution approchée.

Par conséquent, ce chapitre, est une introduction simple de la semi-discrétisation spatiale par la méthode des différences finies, qui construit une approximation des équations exactes par substitution des dérivées partielles par des différences. Le chapitre suivant sera consacré à d'autres méthodes de résolution plus simples encore, appelées méthode des résidus pondérés.

Chapitre III

Méthode des résidus pondérés

Un expert est un homme qui a fait toutes erreurs qui peuvent être faites dans un domaine très étroit.

Niels Bohr

3.1 Introduction

Généralement, la méthode des résidus pondérés est utilisée pour 'remanier' les relations d'équilibre des problèmes physiques traités avant l'étape de discrétisation par la méthode des différences finies.

Le principe de cette méthode consiste à approcher partiellement l'annulation du résidu d'une équation différentielle pour trouver une solution discrète approximative.

L'objectif de ce chapitre est de mettre en avant le principe de la méthode des résidus pondérés qui porte sur la minimisation de ces résidus jusqu'à l'obtention de la meilleure approximation de la solution voulue.

3.2 Définition de la méthode des résidus pondérés

La méthode des résidus pondérés est une méthode destinée à réduire la complexité d'un système d'équations pour permettre sa résolution dans le cas où celui-ci présenterait des difficultés d'ordre mathématique (discontinuités, fonction non définie, valeurs infinies ...).

3.3 Principe de la méthode des résidus pondérés

Cette méthode est basée sur :

- La définition d'un résidu (typiquement l'équation régissant le problème).
- La pondération du résidu par une fonction test.
- L'intégration du résidu pondéré sur tout le domaine (spatial ou temporel).
- Une ou plusieurs intégrations par parties, éventuellement.

3.4 Description mathématique de la méthode des résidus pondérés

Considérons l'équation aux dérivées partielles définies sur un domaine Ω [1] :

$$\frac{\partial x(z, t)}{\partial t} = M[x(z, t)] + H(z)u(z, t) \quad (3.1)$$

Cette méthode consiste à déterminer pour l'équation (3.1) une solution modale approchée de la forme :

$$x^*(z, t) = \sum_{i=1}^N a_i(t) f_i(z) + \varphi(z, t) \quad (3.2)$$

Où les fonctions de base $f_i(z)$ sont fixées à priori. Ces fonctions sont appelées fonctions de coordonnées ou fonctions test.

N'étant qu'une approximation de la solution exacte, $x^*(z, t)$ ne vérifie pas exactement l'équation et les conditions initiales et aux limites.

La fonction $\varphi(z, t)$ satisfait les conditions aux limites suivantes :

$$L[x(z', t)] = u_1(z', t) \quad z' \in Fr(\Omega) \quad (3.3)$$

La précision de l'approximation dépend de l'ordre de troncature d'ordre N de la série.

En portant la solution x^* dans l'équation (3.1), les conditions (3.3), et la condition initiale, on définit les résidus suivants :

- **Résidu sur l'équation**

$$R(x^*) = \frac{\partial x^*}{\partial t} - M[x^*] - Hu \quad (3.4)$$

- **Résidu sur les conditions aux limites**

$$R_l(x^*) = L[x^*] - u_1 \quad (3.5)$$

- **Résidu sur la condition initiale**

$$R_0(x^*) = x_0 - x_0^* \quad (3.6)$$

Si $x^*(z, t)$ était la solution exacte, ces trois résidus seraient nuls.

Le principe de la méthode des résidus pondérés [8] consiste à minimiser à chaque instant l'un de ces résidu afin d'obtenir la meilleure approximation possible de la solution.

Collatz a défini les méthodes suivantes, à partir des considérations sur les résidus $R(x^*(z, t))$ et R_l :

- **La méthode intérieure :** Les conditions aux limites sont toujours satisfaites $R_l = 0$, grâce au choix approprié de x^* .
- **La méthode aux limites :** L'équation est toujours satisfaite $R(x^*(z, t)) = 0$.
- **La méthode mixte :** Ni l'équation ni les conditions aux limites ne sont satisfaites, ce qui correspond à $R(x^*(z, t)) \neq 0$ et $R_l \neq 0$.

En faisant un choix approprié de x^* tel que les conditions aux limites soient toujours satisfaites ($R_l=0$), la méthode « intérieure » des résidus pondérés consiste à minimiser le résidu $R(x^*)$, ce qui revient à projeter ce résidu défini en (3.4) sur N fonctions de pondération $\omega_i(z)$ et à écrire que ces projections sont nulles.

En raison de la nature répartie du résidu sur Ω , ces projections sont définies par les produits intérieurs suivants :

$$\langle R(x^*), \omega_i(z) \rangle_{\Omega} = \int_{\Omega} R(x^*) \omega_i(z) d\Omega = 0 \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (3.7)$$

On obtient ainsi un système de N équations permettant de calculer les coefficients inconnus $a_i(t)$ de l'expression (3.2).

Selon le choix des fonctions de pondération $\omega_i(z)$, on obtient plusieurs classes [2] de méthodes des résidus pondérés.

3.4.1 Méthode des moindres carrés

La minimisation du produit scalaire $\langle R(x^*), R(x^*) \rangle_{\Omega}$ par rapport aux inconnus $a_i(t)$ revient à choisir :

$$\omega_i(z) = \frac{\partial R(x^*)}{\partial a_i} \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (3.8)$$

Car de la condition de minimisation :

$$\frac{\partial}{\partial a_i} \langle R(x^*), R(x^*) \rangle_{\Omega} = 0$$

On déduit :

$$\frac{\partial}{\partial a_i} \int_{\Omega} R^2(x^*) d\Omega = 0$$

Par conséquent :

$$\langle R(x^*), \frac{\partial R(x^*)}{\partial a_i} \rangle_{\Omega} = 0$$

3.4.2 Méthode de Galerkin

Dans cette méthode, les conditions suivantes sont posées sur le choix des fonctions :

- Les fonctions de pondération sont choisies dans la même famille que les fonctions de forme.
- Les fonctions de pondération et de forme doivent être linéairement indépendantes.
- Les fonctions de pondération et de forme doivent être les N premiers éléments d'une base de fonctions.
- Les fonctions de forme doivent satisfaire exactement les conditions aux frontières.

La minimisation du produit scalaire $\langle R(x^*), R(x^*) \rangle_{\Omega}$ par rapport aux $\dot{a}_i(t)$ revient à choisir :

$$\omega_i(z) = \frac{\partial R(x^*)}{\partial \dot{a}_i} = f_i(z) \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (3.9)$$

En effet, de la condition de minimisation :

$$\frac{\partial}{\partial \dot{a}_i} \langle R(x^*), R(x^*) \rangle_{\Omega} = 0$$

On déduit :

$$\frac{\partial}{\partial a_i} \int_{\Omega} R^2(x^*) d\Omega = \int_{\Omega} R^2(x^*) \frac{\partial R(x^*)}{\partial \dot{a}_i} d\Omega = 0$$

Or:

$$R(x^*) = \sum_{i=1}^N \dot{a}_i(t) f_i(z) - M \left[\sum_{i=1}^N a_i(t) f_i(z) \right] - Hu$$

Donc :

$$\frac{\partial R(x^*)}{\partial \hat{a}_i} = f_i(z) \quad i = 1, 2, \dots, N$$

3.4.3 Méthode des moments

Dans ce cas, les fonctions $\omega_i(z)$ sont des fonctions linéairement indépendantes orthogonales sur Ω :

$$\omega_i = \eta_i(z) \quad i = 1, 2, \dots, N$$

$$\int_{\Omega} \omega_i(z) \omega_j(z) d\Omega = \delta_{ij} \quad (3.10)$$

Où les δ_{ij} sont les indices de *Kronecker*.

Pratiquement, il est préférable de choisir ces polynômes orthogonaux dans le domaine Ω .

3.4.4 Méthode de collocation par sous-domaines (méthode des sous-domaines)

En partitionnant le domaine Ω en N sous-domaines Ω_i ($i = 1, 2, \dots, N$) non nécessairement disjoints, les fonctions de pondération $\omega_i(z)$ sont ainsi fixées :

$$\omega_i = \begin{cases} \text{constante sur } \Omega_i \\ 0 & \text{ailleurs} \end{cases} \quad (3.11)$$

Ce qui rend nulle l'intégrale de chacun des sous-domaines :

$$\int_{\Omega_i} R(x^*) d\Omega = 0 \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (3.12)$$

La méthode de collocation est le cas limite de cette méthode ; elle correspond à un choix de sous-domaines infiniment petits.

3.4.5 Méthode de collocation par points (collocation orthogonale)

Lorsque chaque sous-domaines Ω_i , défini ci-dessus, se réduit à un point, les fonctions de pondération $\omega_i(z)$ sont identifiées à des fonctions de **Dirac** :

$$\omega_i(z) = \delta(z - z_i) \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (3.13)$$

Dans ce cas le produit scalaire (3.7) s'écrit :

$$\int_{\Omega} R[x^*(z, t)] \delta(z - z_i) d\Omega = 0$$

Soit :

$$R[x^*(z_i, t)] = 0 \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (3.14)$$

En annulant les résidus aux différents points de collocation z_i ($i = 1, 2, \dots, N$) choisis sur Ω , la solution x^* est obtenue exactement en ces points.

Si cette méthode est très simple à mettre en œuvre, elle nécessite un certain nombre de précautions dans le choix des fonctions de base $f_i(z)$, du nombre et de la position des points de collocation.

3.5 Généralisation de la méthode des résidus pondérés

D'une manière générale, on peut dire que l'équation qui a servi à déterminer les paramètres de cette méthode s'écrit :

$$\int_{\Omega} \omega_i(z) R(x^*) d\Omega = 0 \quad (3.15)$$

Où $\omega_i(z)$ sont :

- Fonctions dérivées du résidu par rapport aux coefficients pour les moindres carrés.
- Fonctions de base de l'approximation pour Galerkin.
- Fonctions linéairement indépendantes orthogonales pour la méthode des moments.
- Fonctions « échelon unité » pour la collocation par sous-domaines.
- Fonctions de Dirac pour la collocation par points.

3.6 Comparaison des différentes méthodes des résidus pondérés

Une comparaison subjective de quelques unes de ces méthodes a été réalisée par (Fletcher, 1984) [5], et se résume dans le tableau 3.1 :

Méthode	Galerkin	Moindres Carrés	Sous-domaines	Collocation
Précision	Très grande	Très grande	Grande	Modérée
Facilité de formulation	Modérée	Pauvre	Bonne	Très bonne
Remarques additionnelles	Equivalente à la méthode de Ritz si applicable	Non adéquate pour des problèmes de valeurs propres ou évolutions	Equivalente à la méthode des volumes finis, bonne pour les formulations de conservation	Collocation orthogonale donne une grande précision

Tableau 3.1 comparaison des méthodes des résidus pondérés.

3.7 Conclusion

Il existe diverses méthodes qui font partie de la famille des méthodes des résidus pondérés, elles se différencient entre elles par le choix des fonctions de pondération.

Un point important dans la méthode des résidus pondérés est le choix des points de collocation. Les auteurs Villadsen et Stewart [15] ont montré que la solution était plus précise pour un choix de points de collocation placés aux racines d'un polynôme, par exemple de Jacobi ou de Lagrange. Dans ce cas on parle de la *Méthode de Collocation Orthogonale*. Cette méthode dans le cas d'utilisation des polynômes de Lagrange fera l'objet de description du chapitre suivant.

Chapitre IV

Simulation par la méthode de collocation orthogonale

*La théorie, c'est quand on sait
tout et que rien ne fonctionne.
La pratique, c'est quand tout
fonctionne et que personne ne
sait pourquoi. Ici, nous avons
réuni théorie et pratique :
Rien ne fonctionne... et
personne ne sait pourquoi !*

Albert Einstein

4.1 Introduction

La méthode de *collocation orthogonale* appartient au groupe des méthodes des résidus pondérés qui sont des méthodes de discrétisation de problèmes différentiels très générales. C'est une méthode puissante permettant d'établir un modèle approché d'équations différentielles ordinaires à partir d'un modèle initial d'équations aux dérivées partielles. En ce sens, on peut aussi la considérer comme une méthode de réduction de modèle de systèmes de dimension infinie.

Ce chapitre a pour objectif de présenter la méthode de collocation orthogonale, entre autres ses avantages, son principe, en mettant en évidence les différentes conditions à respecter pour une meilleure application. A la fin de ce chapitre on effectuera une comparaison entre la méthode de collocation et celle des différences finies étudiée dans le *chapitre II*.

4.2 Définition de la méthode de collocation orthogonale

La méthode de collocation constitue des techniques numériques de résolution d'équations aux dérivées partielles. Elle est utilisée dans les problèmes pratiques pour sa facilité d'implémentation, en particulier dans le cadre des éléments finis pour les équations intégrales.

4.3 Avantages de la méthode de collocation orthogonale

Villadsen et Michelsen [14], ont montré que la collocation donnait à moindre coût des résultats similaires (en précision, à ordre de discrétisation comparable) à ceux issus de la méthode de Galerkin (souvent considérée comme la méthode de référence) si certaines précautions sont prises pour son implémentation.

Les atouts de la méthode de collocation sont, entre autres :

- Sa facilité d'implémentation.
- L'ordre très réduit du système différentiel approché obtenu (en comparaison à l'ordre obtenu à précision comparable pour la méthode des différences finies, par exemple).
- La nature des variables d'état reste inchangée après la procédure de réduction.

4.4 Principe de la méthode de collocation orthogonale

L'idée de base de la méthode de collocation orthogonale consiste à rechercher la solution approchée dans un espace d'approximation linéaire de telle manière que cette solution approchée satisfasse le problème différentiel initial en un certain nombre de points choisis du domaine spatial appelés pour cette raison points de collocation.

En général, on utilise comme espace d'approximation à chaque instant l'espace linéaire engendré par un ensemble fini de fonctions de forme (de la variable d'espace) simples et linéairement indépendantes (le plus souvent, des polynômes).

Les fonctions inconnues recherchées sont alors écrites sous la forme de combinaisons linéaires finies des fonctions de formes et les coefficients de ces combinaisons linéaires, variables dans le temps, sont les inconnues du problème différentiel approché.

Dans le cas du réacteur étudié dans le *chapitre II*, la fonction inconnue de notre problème différentiel approché est la concentration x , dépendant à la fois du temps et de l'espace.

4.5 Mise en œuvre de la méthode de collocation orthogonale

Dans la mise en œuvre de la méthode de collocation de très nombreux choix doivent être faits, qui ont des conséquences cruciales (il s'agit en fait d'une faiblesse de cette méthode) [14].

Ces choix concernent : les fonctions de forme utilisées, la localisation des points de collocation et l'introduction des conditions aux limites.

4.5.1 Construction des fonctions de forme : polynômes de Lagrange

Les fonctions de forme sont choisies en toute généralité pour être linéairement indépendantes et engendrer un espace linéaire « intéressant », mais dans la mise en œuvre ultérieure de ces fonctions de forme, il peut être intéressant d'utiliser des fonctions qui rendent plus simple le calcul de la solution approchée et permettent en outre une approximation précise de la solution du problème différentiel.

Les fonctions de forme choisies dans la suite sont les fonctions d'interpolation de *Lagrange*. Leur intérêt est double : d'une part une expression plus simple du problème différentiel approché (gain en termes de nombre d'opérations), d'autre part un calcul direct des concentrations $x_i(t)$ aux différents points de collocation (ce sont les coefficients de l'approximation des profils de la concentration dans la base des polynômes de Lagrange, qui est aussi base d'interpolation aux points de collocation).

Soient $\{z_i\}_{i=1}^N$, N points de collocation, il est possible de construire N polynômes, notés $\{L_j(z)\}_{j=1}^N$, appelés polynômes de Lagrange, de degré $N - 1$ satisfont la condition suivante :

$$L_j(z_i) = \begin{cases} \delta_{ij}=1 & \text{si } i=j \\ \delta_{ij}=0 & \text{si } i \neq j \end{cases}$$

Dont l'expression générale du polynôme est donnée par :

$$L_j(z) = \prod_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^N \frac{z - z_i}{z_j - z_i}$$

Ou sous une forme plus développée :

$$L_1(x) = \frac{(x - x_2)(x - x_3) \dots (x - x_{N-1})(x - x_N)}{(x_1 - x_2)(x_1 - x_3) \dots (x_1 - x_{N-1})(x_1 - x_N)}$$

$$L_2(x) = \frac{(x - x_1)(x - x_3) \dots (x - x_{N-1})(x - x_N)}{(x_2 - x_1)(x_2 - x_3) \dots (x_2 - x_{N-1})(x_2 - x_N)}$$

⋮

$$L_N(x) = \frac{(x - x_1)(x - x_2) \dots (x - x_{N-2})(x - x_{N-1})}{(x_N - x_1)(x_N - x_2) \dots (x_N - x_{N-2})(x_N - x_{N-1})}$$

4.5.2 Choix des points de collocation

Les points de collocation correspondent aux endroits où on impose que la solution approchée satisfasse le problème différentiel de départ. Il faut donc les positionner aux endroits où l'on souhaite avoir le plus de précision.

En général, les points de collocation sont choisis comme racines des polynômes orthogonaux. Ceci présente plusieurs avantages, le plus notable étant de réduire les phénomènes d'oscillations qui apparaissent lors de l'interpolation par des polynômes d'ordre élevé. Ce phénomène peut s'expliquer à l'aide des formules de quadratures usuelles qui montrent que ce choix permet l'intégration des fonctions approchées jusqu'à un ordre «maximal», pour un nombre de points d'interpolation donné.

Un choix intéressant de points de collocation sont les zéros des polynômes de Jacobi.

En effet, les deux paramètres qui définissent cette famille permettent de contrôler facilement et relativement simplement la position des points de collocation (étalement, dissymétrie, concentration vers les bords, etc.).

En général, on a recours à une plus forte concentration de points de discrétisation aux extrémités, ce qui réduit les effets de bords dûs notamment aux conditions aux limites.

Les polynômes de Jacobi sont définis par la récurrence à trois termes :

$$\begin{aligned}
 P_{jac\ 0}(x) &= 1 \\
 P_{jac\ 1}(x) &= \frac{1}{2}a - \frac{1}{2}b + \left(1 + \frac{1}{2}a + \frac{1}{2}b\right)x \\
 &\quad \vdots \\
 P_{jacN}(x) &= \frac{1}{2} \frac{(2N + a + b - 1)(a^2 - b^2 + (2N + a + b)x)}{N(N + a + b)(2N + a + b - 2)} P_{jacN-1}(x) \dots \dots \dots \\
 &\quad - \frac{(N + a - 1)(N + b - 1)(2N + a + b)}{N(N + a + b)(2N + a + b - 2)} P_{jacN-2}(x)
 \end{aligned}$$

Où a et b sont des coefficients supérieurs à $-1/2$ (la valeur $a = b = -1/2$ correspond aux polynômes de *Tchébycheff*).

Il y a aussi les polynômes de Legendre qui sont un cas particulier des polynômes de Jacobi avec $a = b = 0$:

$$P_{jac\ 0}(x) = 1$$

$$P_{jac\ 1}(x) = x$$

⋮
⋮

$$P_{jacN}(x) = \frac{1}{2} \frac{(2N - 1)x}{N} P_{jacN-1}(x) - \frac{2(N - 1)}{N} P_{jacN-2}(x)$$

Il faut bien noter qu'aucune des racines de ces polynômes n'est aux extrémités du réacteur tubulaire, c'est pour cela qu'il faut ajouter deux points aux extrémités correspondant aux conditions aux limites. Finalement, il faut donc calculer les $N - 2$ racines d'un polynôme de degré $N - 2$, pour obtenir N points de collocation.

4.5.3 Localisation des points de collocation

La méthode de collocation ne pose pas de conditions spécifiques sur la localisation des points de collocation, cependant, cette localisation est très importante dans cette méthode pour la précision du résultat. Il est à noter, que la solution des équations différentielles par cette méthode est une approximation de la solution par interpolation polynômiale, et donc présente les caractéristiques propres à ces méthodes d'approximation, en particulier vis-à-vis du nombre et du choix des points de collocation.

Il est bien connu dans ces méthodes que pour obtenir une solution acceptable il est nécessaire d'utiliser un certain nombre de points, et que quand le nombre de points devient très élevé avec une répartition équidistante, la solution présente des oscillations [12]. Ces oscillations apparaissent principalement sur les bords, et sont dûes à l'ordre élevé du polynôme d'interpolation.

Pour éviter ce problème, il est alors nécessaire de disposer les points de collocation suivant les racines des polynômes orthogonaux, de sorte que les points sont plus rapprochés sur les bords réduisant ainsi les oscillations.

4.6 Introduction des conditions aux limites

L'introduction des entrées est très simple avec les fonctions de forme de Lagrange ; la relation directe entre les valeurs physiques et les variables à calculer permet en effet de substituer directement les valeurs des entrées dans un système.

Il est important de noter deux points essentiels, qu'il existe ici les mêmes possibilités pour le choix des conditions aux limites que dans les méthodes antérieures, et que dans cette méthode il faut éliminer l'équation correspondante à la condition au limite choisie.

En définitive, le système sera donné de façon différente selon les conditions aux limites choisies.

4.7 Application de la méthode de collocation au modèle du réacteur chimique [9]

4.7.1 Discrétisation spatiale

Reprenons l'exemple du réacteur chimique tubulaire dispersé isotherme étudié dans le *chapitre II* dont le modèle d'état est :

$$\frac{\partial x(z, t)}{\partial t} = -v \frac{\partial x(z, t)}{\partial z} + D \frac{\partial^2 x(z, t)}{\partial z^2} + R_a(x(z, t)) \quad (4.1)$$

$$vx(0^-, t) = vx(0^+, t) - D \frac{\partial x(z, t)}{\partial z} \Big|_{z=0^+} \quad (4.2)$$

$$\frac{\partial x(z, t)}{\partial z} \Big|_{z=l} = 0 \quad (4.3)$$

Où :

$$x(0^-, t) = u(t) : \text{Variable d'entrée.}$$

$$x(0^+, t) = x(0, t).$$

$$x(l, t) = y(t) : \text{Variable de sortie.}$$

Nous résolvons le modèle d'équation (4.1) et (4.2) en utilisant la collocation orthogonale.

En appliquant la collocation orthogonale sur les éléments finis de N dans le domaine spatial, la variable primaire $x(z, t)$ peut être exprimée comme $x(z, t) = \sum_{i=1}^N L_i(z)x(z_i, t)$ au temps t , où $L_i(z)$ est le polynôme d'interpolation de Lagrange d'ordre $(N-1)$:

$$L_i(z) = \prod_{j=1, j \neq i}^N \frac{z - z_j}{z_i - z_j} \quad (4.4)$$

Qui satisfait :

$$L_i(z_j) = \begin{cases} 1, & \text{si } i=j \\ 0, & \text{si } i \neq j \end{cases} \quad (4.5)$$

Une autre propriété importante des polynômes d'interpolation de Lagrange utilisés dans l'approche de collocation orthogonale est qu'ils sont orthogonaux entre eux, c'est-à-dire :

$$\int_0^1 L_i(z)L_j(z)dz = \begin{cases} 1, & \text{si } i=j \\ 0, & \text{si } i \neq j \end{cases} \quad (4.6)$$

Par conséquent, un nombre restreint de points de collocation est exigé pour obtenir une solution précise.

Basés sur l'arrangement orthogonal de collocation, les éléments de collocation (z_i) et le polynôme d'interpolation de Lagrange peuvent être déterminés à priori sans information de la structure de l'EDP. Alors, les dérivées partielles de x en ce qui concerne la coordonnée peuvent être exprimées comme suit :

$$\frac{\partial x(z, t)}{\partial z} = \sum_{i=1}^N x(z_i, t) \frac{dL_i(z)}{dz} \quad (4.7)$$

$$\frac{\partial^2 x(z, t)}{\partial z^2} = \sum_{i=1}^N x(z_i, t) \frac{d^2 L_i(z)}{dz^2} \quad (4.8)$$

On définit les deux matrices \mathbf{A} et \mathbf{B} comme suit :

$$\mathbf{A} = \left\{ A_{i,j} = \frac{dL_j(z_i)}{dz}; i, j = 1, 2, \dots, N \right\} \quad (4.9)$$

Et:

$$\mathbf{B} = \left\{ B_{i,j} = \frac{d^2 L_j(z_i)}{dz^2}; i, j = 1, 2, \dots, N \right\} \quad (4.10)$$

On a :

$$x(z, t) = \sum_{i=1}^N L_i(z) x(z_i, t) \quad (4.11)$$

D'après (4.7) et (4.8), l'EDP originale (4.1) peut être convertie à un ensemble d'EDO :

$$\begin{aligned} \frac{dx(z_2, t)}{dt} &= -v \sum_{j=1}^N A_{2,j} x(z_j, t) + D \sum_{j=1}^N B_{2,j} x(z_j, t) + Ra(x(z_2, t)) \\ &\vdots \\ \frac{dx(z_{N-1}, t)}{dt} &= -v \sum_{j=1}^N A_{N-1,j} x(z_j, t) + D \sum_{j=1}^N B_{N-1,j} x(z_j, t) + Ra(x(z_{N-1}, t)) \end{aligned} \quad (4.12)$$

Selon (4.1) et les conditions aux frontières (4.2) et (4.3)

Et selon :

$$x(0^-, t) = u(t)$$

On aura :

$$vu(t) = vx(z_1, t) - D \sum_{j=1}^N A_{1,j} x(z_j, t) \quad (4.13)$$

$$\sum_{j=1}^N A_{N,j} x(z_j, t) = 0$$

Le système d'équations (4.12) et (4.13) est une EDO qui peut être encore simplifiée en incorporant les conditions aux limites dans l'équation aux dérivées ordinaires.

D'abord, nous récrivons les équations décrivant les conditions aux limites sous la forme suivante :

On a :

$$vu(t) = vx(z_1, t) - D \sum_{j=1}^N A_{1,j} x(z_j, t)$$

$$vu(t) = x(z_1, t)[v - DA_{1,1}] - DA_{1,N}x(z_N, t) - D \sum_{j=2}^{N-1} A_{1,j} x(z_j, t)$$

D'où :

$$vx(z_1, t) = vu(t) + D \sum_{j=1}^N A_{1,j} x(z_j, t)$$

$$\Rightarrow vx(z_1, t) = vu(t) + D \left[A_{1,1}x(z_1, t) + \sum_{j=2}^N A_{1,j} x(z_j, t) \right]$$

$$\Rightarrow vx(z_1, t) = vu(t) + D \left[A_{1,1}x(z_1, t) + A_{1,N}x(z_N, t) + \sum_{j=2}^{N-1} A_{1,j}x(z_j, t) \right]$$

$$\Rightarrow D \sum_{j=2}^{N-1} A_{1,j}x(z_j, t) + vu(t) = [v - DA_{1,1}]x(z_1, t) - DA_{1,N}x(z_N, t) \quad (4.14)$$

Et on a :

$$\sum_{j=1}^N A_{N,j}x(z_j, t) = 0$$

$$\Rightarrow A_{N,1}x(z_1, t) + \sum_{j=2}^{N-1} A_{N,j}x(z_j, t) + A_{N,N}x(z_N, t) = 0$$

$$\Rightarrow A_{N,1}x(z_1, t) + A_{N,N}x(z_N, t) = - \sum_{j=2}^{N-1} A_{N,j}x(z_j, t) \quad (4.15)$$

On met les équations (4.12), (4.13), (4.14) et (4.15) sous forme matrices-vecteurs, on obtient :

$$\mathbf{A}_d = \{A_{r_{ij}} = A_{i+1,j+1}; \quad i, j = 1, 2, \dots, N-2\}$$

$$\mathbf{B}_d = \{B_{r_{ij}} = B_{i+1,j+1}; \quad i, j = 1, 2, \dots, N-2\}$$

$$\mathbf{A}_b = \begin{bmatrix} A_{2,1} & A_{2,N} \\ \vdots & \vdots \\ A_{N-1,1} & A_{N-1,N} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{B}_b = \begin{bmatrix} B_{2,1} & B_{2,N} \\ \vdots & \vdots \\ B_{N-1,1} & B_{N-1,N} \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{M} = \begin{bmatrix} v - DA_{1,1} & -DA_{1,N} \\ A_{N,1} & A_{N,N} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{V} = \begin{bmatrix} v \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{N} = \begin{bmatrix} DA_{1,2} & \cdots & DA_{1,N-1} \\ -A_{N,2} & \cdots & -A_{N,N-1} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{H} = [0 \quad 1]$$

$$\mathbf{x} = [x(z_2, t) \ x(z_3, t) \ \cdots \ x(z_{N-1}, t)]^T$$

$$\mathbf{d} = [x(z_1, t) \ x(z_N, t)]^T$$

$$\mathbf{f} = [R_a(x(z_2, t)) \ R_a(x(z_3, t)) \ \cdots \ R_a(x(z_{N-1}, t))]^T$$

En utilisant les définitions ci-dessus, on aboutira à :

$$\mathbf{d} = \mathbf{M}^{-1}\mathbf{N}\mathbf{x} + \mathbf{M}^{-1}\mathbf{V}\mathbf{u}$$

A condition que \mathbf{M} ne soit pas une matrice singulière et en utilisant les notations précédentes, les équations (4.12) et (4.13) peuvent être écrites comme suit :

$$\dot{\mathbf{x}} = (-v\mathbf{A}_d + D\mathbf{B}_d)\mathbf{x} + (-v\mathbf{A}_b + D\mathbf{B}_b)\mathbf{d} + \mathbf{f}(\mathbf{x})$$

$$\dot{\mathbf{x}} = [(-v\mathbf{A}_d + D\mathbf{B}_d) + (-v\mathbf{A}_b + D\mathbf{B}_b)\mathbf{M}^{-1}\mathbf{N}]\mathbf{x} + \mathbf{f}(\mathbf{x}) + (-v\mathbf{A}_b + D\mathbf{B}_b)\mathbf{M}^{-1}\mathbf{V}\mathbf{u}$$

Et :

$$\mathbf{y} = \mathbf{H}\mathbf{M}^{-1}\mathbf{N}\mathbf{x} + \mathbf{H}\mathbf{M}^{-1}\mathbf{V}\mathbf{u}$$

Ce qui est sous la forme standard, en passant d'un état d'un processus dynamique non linéaire à un autre :

$$\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{A}_c\mathbf{x} + \mathbf{B}_c\mathbf{u} + \mathbf{f}(\mathbf{x})$$

$$\mathbf{y} = \mathbf{C}_c\mathbf{x} + \mathbf{D}_c\mathbf{u}$$

Où :

$$A_c = [(-vA_d + DB_d) + (-vA_b + DB_b)M^{-1}N]$$

$$B_c = (-vA_b + DB_b)M^{-1}V$$

$$C_c = HM^{-1}N$$

$$D_c = HM^{-1}V$$

4.7.2 Simulation numérique du modèle d'état obtenu

En prenant le nombre de points de collocation $N = 5$, la simulation du modèle approximé obtenu par la méthode de collocation orthogonale conduit au résultat de la figure 4.1.

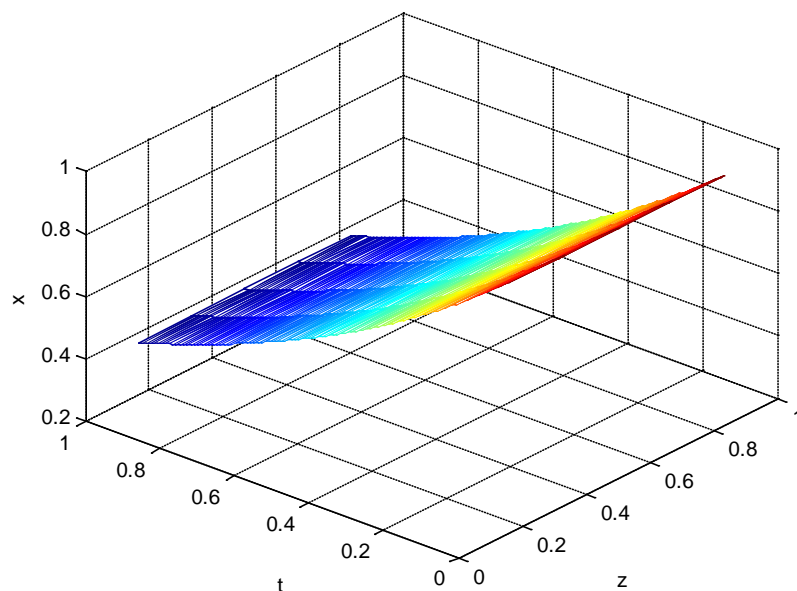


Figure 4.1 Evolution de la concentration dans le réacteur

4.8 Comparaison entre la méthode de collocation orthogonale et la méthode des lignes basée sur les différences finies

Pour obtenir une solution d'une précision similaire il faut utiliser, pour la méthode des différences finies un nombre de points au moins quatre fois supérieur au nombre de points utilisé pour la méthode de collocation. Cela indique que la méthode de collocation est plus « performante » que la méthode des différences finies. Ceci représente deux effets favorables pour la simulation : Un premier effet favorable est la possibilité que les simulations soient plus rapides car l'utilisation d'un petit nombre de points implique moins de temps de calcul. Et le second, qui est une conséquence du premier, est la possibilité d'utiliser des pas de temps plus grands pour la simulation.

4.9 Conclusion

Dans ce chapitre, à l'aide de la méthode de collocation orthogonale on a élaboré un modèle réduit (donné sous forme de représentation d'état) du réacteur chimique. Les notions de base relatives à la méthode de collocation ont été présentées. Ces dernières mettent en évidence les différentes étapes essentielles afin d'aboutir à une meilleure application de la méthode.

Finalement, il est possible de conclure que la méthode de collocation orthogonale est une méthode classique et rapide, facile à implémenter, plus précise par rapport aux autres méthodes de résolution approchée, et efficace en donnant un meilleur résultat en un nombre inférieur de points de collocation.

Conclusion Générale

La Science est des faits ; juste comme des maisons sont faites de pierres, est ainsi la science faite de faits ; mais une pile des pierres n'est pas une maison et une collection de faits n'est pas nécessairement la science.

Henri Poincare

Le travail présenté dans ce mémoire s'inscrit dans le cas de la simulation des systèmes à paramètres distribués. L'objectif principal est non seulement d'étudier deux méthodes de simulation différentes qui sont la méthode des lignes (basée sur les différences finies) et la méthode de collocation orthogonale, mais aussi de comparer leurs performances.

Ainsi, après avoir présenté des généralités sur les systèmes à paramètres distribués, on a mis en évidence, de manière générale, les différentes méthodes de simulation dédiées aux systèmes décrits par des équations aux dérivées partielles en expliquant leurs principes, et particulièrement la méthode des lignes et de collocation orthogonale. Pour comparer ces deux méthodes, une simulation d'un réacteur chimique munie de conditions initiales complexes a été abordée.

Les résultats obtenus, par simulation, permettent de conclure que la méthode des différences finies est relativement simple à utiliser. On a également trouvé que la méthode de collocation orthogonale qui est « du point de vue pratique » la meilleure parmi toutes les méthodes déjà énoncées, que ça soit en termes de précision, de performances, mais aussi de rapidité et d'efficacité.

Enfin, ce qu'on a présenté est loin d'être clôturé, puisque il existe quelques points importants qui peuvent encore être évoqués ou améliorés. On peut, par exemple, appliquer la méthode de collocation orthogonale pour des systèmes plus compliqués, ou d'utiliser d'autres polynômes d'interpolation comme ceux de Legendre par exemple ou les ondelettes.

- [1] **A. RACHID.**, *Systèmes de Régulation*. Masson, Paris, 1997.
- [2] **B.A. FINLAYSON.**, *The method of weighted residuals and variational principles*. ACADIMIC PRESS, New York et Londres, 1972.
- [3] **CIARLET P. G.**, *Introduction à l'analyse numérique matricielle et à l'optimisation*. Paris, Dunod, 1998.
- [4] **E. LUNEVILLE.**, Cours, *Introduction au calcul scientifique*. ENSTA ParisTech. 2007.
- [5] **FLETCHER C.A.J.**, *computational Galerkin methods*. Springer Series in Computational Physics. Springer-Verlag, 1984.
- [6] **FRANCIS B. HILDEBRAND.**, *Finite-Difference Equations and Simulations*. Section **2.2**, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, New Jersey, 1968.
- [7] **HAMDI S., W. E. SCHIESSER** and **G. W. GRIFFITHS.**, *Method of lines*. *Scholarpedia*, 2(7):2859, 2007.
- [8] **J.P. BABARY** et **W. PELCZEWSKI.**, *Commande Optimale des Systèmes Continus Déterministes*. Masson, Paris, 1985.
- [9] **M. Li, P.D. Christofides.**, *Computers and Chemical Engineering*. **32**, 2123–2135, 2008.
- [10] **P.FAURRE., M.ROBBIN.**, *Eléments d'automatique*. Edition Dunod, Paris, 1984.
- [11] **SCHIESSER W. E.** and **G. W. GRIFFITHS.**, *A Compendium of Partial Differential. Equation Models: Method of Lines Analysis with Matlab*. Cambridge University Press, 2009.
- [12] **THEODOR R.**, *Initiation à l'analyse numérique*. Masson, 1994.
- [13] **U. SCHULZ** and **R. PREGLA.**, *A new technique for the analysis of the dispersion characteristics of planar waveguides*, Arch. **ELEK UBERTRAGUNG.**, **34**, pp. 169- 173, 1980. Also in **R. SORRENTINO** (ed.), *Numerical Methods for Passive Microwave and Millimeter Wave Structure*. IEEE Press, New York, pp. 233-237, 1989.
- [14] **VILLADSEN J.V.**, et **M. L. MICHELSON.**, *Solution of differential equation models by polynomial approximation*. Prentice Hall, Englewood Cliffs, NJ, 1978.
- [15] **VILLADSEN J.V.**, et **STEWART W.E.**, *Solution of boundary-value problems by orthogonal collocation*. Chemical Engineering Science, Vol. **22**, pp. 1483-1501, Pergamon Press LTD, Oxford, 1967.
- [16] **W. E. SCHIESSER.**, *The Numerical Method of Lines*. Academic Press, San Diego, 1991.
- [17] **WILLIAM F. AMES.**, *Numerical Methods for Partial Differential Equations*. Section **1.6**. Academic Press, New York, 1977.
- [18] **XIAO-DONG LI.**, *Observation Et Commande De Quelques Systèmes À Paramètres Distribués*. THÈSE DE L'UNIVERSITÉ DE LYON I, 2009.