Chapitre 3: Procédure

PROCEDURE NUMERIQUE

III-1- traitement numérique des équations de transport :

Il apparait que toutes les équations de transport, s'écrivent sous la même forme :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \phi) + \vec{\nabla} (\rho \phi \vec{V} - v_{\phi}) = S_{\phi}$$
(III.1)

Où φ est la propriété transportée, ρ la densité massique, \vec{V} la vitesse de transport, v_{φ} le coefficient de diffusion, et S_{φ} le terme source d'énergie. Il faut donc s'attacher à l'intégration numérique de cette équation.

III-1-1- Principe de la méthode des volumes finis :

Le domaine d'étude est tout d'abord découpé en un ensemble de cellules ou volumes de contrôle, ne se recouvrant pas et entourant chaque nœud du réseau. L'équation aux dérivées partielles est ensuite intégrée sur chaque volume de contrôle, et des hypothèses sur les variations de φ , entre les nœuds du réseau sont formulées pour permettre l'évolution des intégrales désirées. Le résultat est une équation discrète où entrent en jeu, les valeurs de φ , sur un ensemble de nœuds du réseau.

L'interprétation physique de l'équation discrète obtenue est immédiate : elle exprime à l'échelle du volume de contrôle, le principe de conservation de φ , exprimé à l'échelle d'un volume infinitésimal par l'équation (III.1).

Cette interprétation constitue la caractéristique est la plus attrayante de la méthode. En effet la conservation de la masse, de la quantité de mouvement ou de l'énergie, est exactement satisfaite pour n'importe quel groupe de cellules, et évidemment sur le domaine entier, quelque soit le nombre des nœuds du réseau. Une question se pose : faut- il donner une signification aux relations utilisées, représentant les variations inter nodales, ou bien doivent-elles être considérées comme étant de simples auxiliaires de calcul, intervenant uniquement lors de l'évaluation des intégrales nécessaires ? Cela dépend du point de vue que l'on adopte à propos de la solution. Soit, on se place dans le cadre des méthodes à éléments finis et la solution est constituée par une fonction, soit on se place dans le cadre des méthodes aux différences finis où seules les valeurs aux nœuds du réseau. Nous nous plaçons dans le second cas et de ce fait, une fois l'équation discrète établie, l'hypothèse sur le profil peut être totalement oubliée. En conséquence, nous disposons d'une liberté totale concernant le choix des profils nécessaires au calcul des bilans macroscopiques, apporte une généralité beaucoup plus grande que la méthode aux éléments finis ou différences finies en ce qui concerne la résolution d'écoulement complexe. En effet, la prise en compte d'obstacles dans l'écoulement, et la modélisation de ceux –ci par les volumes partiellement obstrués s'en trouve facilitée. Enfin la généralisation aux autres systèmes de coordonnées cylindriques ou sphériques, ne pose aucun problème particulier.

III-1-2- Discrétisation par la méthode des volumes finis :

Effectuons l'intégration temporelle sur le volume de contrôle de l'équation générale de transport. Les interfaces (i+1/2) et (i-1/2), seront toujours situées à mi- chemin de nœuds (i, i+1) et (i, i-1).cela ne restreint pas le calcul au cas des réseaux uniformes.



On désigne par τ_i le volume de contrôle, par $A_{\mp 1/2}$ les aires de l'interface (i $\mp 1/2$) et par σ_I la surface entourant le volume τ_i .

L'intégration de l'équation (III.1), s'écrit alors :

$$\int_{t}^{t+\delta t} \int_{\tau_{i}} \frac{\partial}{\partial t} (\rho \phi) d\tau_{i} dt + \int_{t}^{t+\delta t} \int_{\tau_{i}} \left[\vec{\nabla} \cdot \left(\rho \Phi \vec{V} - v_{\phi} \vec{\nabla} \Phi \right) \right] d\tau_{i} dt = \int_{t}^{t+\delta t} \int_{\tau_{i}} S_{\phi} d\tau_{i} dt \quad (III.2)$$

Désignons par Y₁, Y₂ et Y₃ les trois termes de l'équation (III.2), et calculons ces termes. Pour le calcul du termeY₁, on suppose que la valeur de p Φ au nœud est constante à l'intérieur du volume τ_i , moyennant cette hypothèse Y₁ devient :

$$Y_{i} = \int_{t}^{t+\delta t} \frac{\partial}{\partial t} (\rho \Phi \tau) dt = \tau_{i} [(\rho \Phi)_{i}^{n} - (\rho \Phi)_{i}^{o}]_{i}$$
(III.3)

où $(p\Phi)_i^n$ représente la valeur de $(p\Phi)$ au point i et à l'instant t+ δt , tandis que $(p\Phi)_i^o$ représente la valeur de $(p\Phi)$ ou point i mais à l'instant t. Le calcul de Y_2 s'amorce en transformant l'intégrale du volume en intégrale de surface, on a ainsi :

$$Y_{2} = \int_{t(\sigma_{i})}^{t+\delta t} \int \left(\rho \phi \vec{V} - v_{\phi} \vec{\nabla} \phi\right) \vec{\sigma}_{i} dt$$
(III. 4)

(Considérons maintenant le cas mono dimensionnelle, on obtient : (III.5)

$$Y_{2} = \int_{t}^{t+\delta t} \left[\int_{\tau A_{i+\frac{1}{2}}} \left(\rho \varphi V_{x} - v_{\varphi} \frac{\delta \varphi}{\delta x} \right)_{i+\frac{1}{2}} d\sigma_{ii} dt - \int_{\tau A_{i-\frac{1}{2}}} \left(\rho \varphi V_{x} - v_{\varphi} \frac{\delta \varphi}{\delta x} \right)_{i-\frac{1}{2}} d\sigma_{ii} \right] dt (III.5)$$

Et supposons ensuite que les valeurs :

$$\left(\rho\Phi V_{x}-v_{\Phi}\frac{\delta\Phi}{\delta x}\right)_{i+\frac{1}{2}}$$
 et $\left(\rho\Phi V_{x}-v_{\Phi}\frac{\delta\Phi}{\delta x}\right)_{i-\frac{1}{2}}$

Sont constantes sur les interfaces d'aire $A_{i+1/2}$ et $A_{i-1/2}$, Y_2 s'écrit alors :

$$Y_{2} = \int_{t}^{t+\delta t} A_{i+1/2} \left(\rho \Phi V_{x} - v_{\Phi} \frac{\delta \Phi}{\delta x} \right)_{i+\frac{1}{2}} dt - \int_{t}^{t+\delta t} A_{i+1/2} \left(\rho \Phi V_{x} - v_{\Phi} \frac{\delta \Phi}{\delta x} \right)_{i-\frac{1}{2}} dt$$
(III. 6)

Le réseau ne variant pas en fonction du temps, les quantités $A_{i+1/2}$ et $A_{i-1/2}$, peuvent être sorties des intégrales temporelles, d'où :

$$Y_{2} = A_{i+1/2} \int_{t}^{t+\delta t} \left(\rho \Phi V_{x} - v_{\Phi} \frac{\delta \Phi}{\delta x} \right)_{i+\frac{1}{2}} dt A_{i-1/2} \int_{t}^{t+\delta t} \left(\rho \Phi V_{x} - v_{\Phi} \frac{\delta \Phi}{\delta x} \right)_{i-\frac{1}{2}} dt \qquad (III.7)$$

L'intégration de Y₃est immédiate et conduit à :

$$Y_3 = S_i^0 \tau_i \delta t \tag{III.8}$$

où S_i^o représente la valeur de S au point i et à l'instant t.

Pour récapituler, après intégration des différents termes nous avons :

$$\tau_{i}[(\rho\Phi)_{i}^{n} - (\rho\Phi)_{i}^{o}] + A_{i+1/2} \int_{t}^{t+\delta t} \left(\rho\Phi V_{x} - v_{\Phi}\frac{\delta\Phi}{\delta x}\right)_{i+\frac{1}{2}} dt$$
$$-A_{i-1/2} \int_{t}^{t+\delta t} \left(\rho\Phi V_{x} - v_{\Phi}\frac{\delta\Phi}{\delta x}\right)_{i-\frac{1}{2}} dt = S_{i}^{o}\tau_{i}\delta t \qquad (III.9)$$

Il faut maintenant faire une hypothèse sur la variation en fonction du temps des termes

$$\begin{cases} \left(\rho\Phi V_{x}-v_{\Phi}\frac{\delta\Phi}{\delta x}\right)_{i+\frac{1}{2}} \\ \left(\rho\Phi V_{x}-v_{\Phi}\frac{\delta\Phi}{\delta x}\right)_{i-\frac{1}{2}} \end{cases}$$
(III. 10)

Pour pouvoir effectuer l'intégration temporelle, plusieurs hypothèses sont possibles, et de façon générale exprimons l'intégrale $\int_{t}^{t+\delta t} Y(t) dt$ sous la forme :

$$\int_{t}^{t+\delta t} Y(t)dt = [\alpha Y^{n} + (1-\alpha)Y^{o}]\delta t$$
 (III. 11)

Y désigne le terme $\left(\rho\Phi V_x - v_{\Phi}\frac{\delta\Phi}{\delta x}\right)$, et α un nombre variant entre 0 et 1.

 $\alpha = 0$ conduit à un schéma explicite, tandis que $\alpha = 1$ mène à un schéma totalement implicite. Le schéma de Crank-Nicholson est lui obtenu avec $\alpha = \frac{1}{2}$. Nous utilisons le cas $\alpha = 0$. L'équation générale s'écrit alors :

$$\tau_{i}[(\rho\Phi)_{i}^{n} - (\rho\Phi)_{i}^{0}] + A_{i+\frac{1}{2}} \left(\rho\Phi V_{x} - v_{\Phi}\frac{\delta\Phi}{\delta x}\right)_{i+\frac{1}{2}}^{0} \delta t$$
$$-A_{i-1/2} \int_{t}^{t+\delta t} \left(\rho\Phi V_{x} - v_{\Phi}\frac{\delta\Phi}{\delta x}\right)_{i-\frac{1}{2}}^{0} \delta t = S_{i}^{0} \tau_{i} \delta t \qquad (III.12)$$

Les termes :

$$\left(v_{\Phi}\frac{\delta\Phi}{\delta x}\right)_{i+\frac{1}{2}}^{0}$$
 et $\left(v_{\Phi}\frac{\delta\Phi}{\delta x}\right)_{i-\frac{1}{2}}^{0}$ (III. 13)

. Toutes les équations de transport des particules chargées ou des neutres définies précédemment obéissent à la même forme générique :

Elles s'expriment facilement par :

$$v_{\Phi_{i+1/2}} \left(\frac{\Phi_{i+1}^{0} + \Phi_{i}^{0}}{x_{i+1} - x_{i}} \right) \quad \text{et } v_{\Phi_{i-1/2}} \left(\frac{\Phi_{i}^{0} + \Phi_{i-1}^{0}}{x_{i} - x_{i-1}} \right) \tag{III. 14}$$

Restent les quantités $(\rho \Phi V_x)_{i\pm 1/2}^o$ qu'il faut expliciter en fonction des quantités connues localisées aux nœuds du réseau. Là encore, plusieurs choix sont possibles, donnant naissance aux schémas centrés et "upwind"(S.V.Patankar)[8].

En ce qui concerne les valeurs inconnues

$$(\rho \Phi V_x)_{i\pm 1/2}^o = \frac{1}{2} \left[(\rho \Phi V_x)_{i\pm 1}^o - (\rho \Phi V_x)_i^o \right]$$
(III. 15)

Les valeurs inconnues $(\rho \Phi V_x)_i^n$ s'expriment ainsi en fonction des valeurs à l'instant t de la façon suivante :

$$\begin{aligned} \tau_{i}(\rho\Phi)_{i}^{n} &= \tau_{i}(\rho\Phi)_{i}^{o} + A_{i-1/2} \left\{ \frac{1}{2} \left[(\rho\Phi V_{x})_{1}^{o} + (\rho\Phi V_{x})_{i-1}^{o} \right] - v_{\Phi_{i-1/2}} \left(\frac{\Phi_{i}^{o} - \Phi_{i-1}^{o}}{x_{i} - x_{i-1}} \right) \right\} - A_{i+1/2} \\ &+ \frac{1}{2} \left[(\rho\Phi V_{x})_{i+1}^{o} + (\rho\Phi V_{x})_{1}^{o} \right] - v_{\Phi_{i+1/2}} \left(\frac{\Phi_{i+1}^{o} - \Phi_{i}^{o}}{x_{i+1} - x_{i}} \right) \right\} \end{aligned}$$
(III. 16)

Schéma explicité : $\alpha = 0$

Le fait de poser $\alpha = 0$, consiste à postuler que la variable y conserve la valeur Y^o durant tout l'intervalle de temps δt , et prend brutalement la valeur Y^n à l'instant $t+\delta t$. Ce point de vue amène à l'expression précédemment calculée. Il ressort clairement que la valeur inconnue $(\rho\Phi)^n$, s'obtient directement en fonction des grandeurs connues à l'instant t, d'où la dénomination d'explicite, d'un tel schéma. On peut montrer facilement, sot à partir de l'analyse de Fourier, soit à partir d'augments physiques simples, que les valeurs de δt et δx , ne sont pas indépendantes et doivent vérifier la relation de la stabilité de la forme :

$$\left|\vec{V}(\delta t / \delta x_{,})\right| \le \frac{1}{2} \tag{III. 17}$$

En effet l'équation donnant $(\rho \Phi)^n$, ne tient compte que décharges entre les cellules i, (i+1) et (i-1). La variation de ($\rho \Phi$) ne peut être causée par des flux provenant des cellules autre que (i+1) ou (i-1).

Schéma implicite : $\alpha \neq 0$

Si $\alpha \neq 0$, l n'est pas difficile de se rendre compte que, $(\rho \Phi)^n$ ne s'exprime plus seulement en fonction des grandeurs connues à l'instant t, mais des fonction des grandeurs connues à l'instant t+ δt .

Dans le cas $\alpha = 1$, on obtient le schéma totalement implicite, exigeant la résolution d'un système d'équations linéaires dont les inconnues sont les valeurs $(\rho \Phi)^n$, i variant de 1 à n, si le réseau comporte n nœuds dans la direction considérée.

L'équation générale d'un tel système s'écrit alors :

$$\begin{aligned} \tau_{i}(\rho\Phi)_{i}^{n} &= \tau_{i}(\rho\Phi)_{i}^{o} + A_{i-\frac{1}{2}} \left\{ \frac{1}{2} \left[(\rho\Phi V_{x})_{1}^{n} + (\rho\Phi V_{x})_{i-1}^{n} \right] - v_{\Phi_{i-\frac{1}{2}}} \left(\frac{\Phi_{i}^{n} - \Phi_{i-1}^{n}}{x_{i} - x_{i-1}} \right) \right\} \\ &- \delta t A_{i+\frac{1}{2}} \left\{ \frac{1}{2} \left[(\rho\Phi V_{x})_{i+1}^{n} - (\rho\Phi V_{x})_{i}^{n} \right] - v_{\Phi_{i+\frac{1}{2}}} \left(\frac{\Phi_{i+1}^{n} - \Phi_{i}^{n}}{x_{i+1} - x_{i}} \right) \right\} \delta t + S_{i}^{o} \tau_{i} \delta t \quad (III. 18) \end{aligned}$$

L'équation précédente relie $\Phi_i^n et \Phi_i^o$, $\Phi_{i+1}^n et \Phi_{i-1}^n$, donc la résolution du système s'effectue à chaque pas temporel, grâce à l'inversion d'une matrice tri diagonale.

II-1-3- Procédure de "Time-Splitting "(J.P.Boris. D.L.Book 1973)[6]:

La procédure de "Time-Splitting s'effectue par une succession d'intégrations mono – dimensionnelles, dans chacune des directions de l'espace et du temps. Plaçons-nous par exemple en coordonnées cylindriques et supposons l'existence d'une symétrie de révolution autour de l'axe z. Si on désigne par G une grandeur que nous voulons faire évoluer, qui ne dépend donc spatialement que des variables r et z, l'évolution de G est alors séparée en deux évolutions indépendantes :

- L'une suivant r (radiale), s'effectuant en deux étapes de durée $\delta t/2$ chacune.
- l'autre suivant z (axiale), s'effectuant aussi en deux étapes de durée $\delta t/2$ chacune.

Si on note par O(δt) l'opérateur d'évolution durant δt , O_r(δt) l'opérateur d'évolution durant deux fois $\delta t/2$ dans la direction r à z constant et $O_z(\delta t)$ l'opérateur d'évolution durant aussi deux fois $\delta t/2$ dans la direction z à r constant, nous aurons :

$$(\delta t) = O_{r}(\delta t) \otimes O_{z}(\delta t) = O_{z}(\delta t) \otimes O_{r}(\delta t)$$
(III. 19)

$$\begin{cases} O_{r}(\delta t) = O_{r}(\delta t/2) \otimes O_{r}(\delta t/2) \\ O_{z}(\delta t) = O_{z}(\delta t/2) \otimes O_{z}(\delta t/2) \end{cases}$$
(III. 20)

Si $G_{(i,j)}^t$ désigne l'ensemble des valeurs de la grandeur G sur le à l'instant t, on obtient les valeurs $G_{(i,j)}^{t+\delta t}$ de la façon suivante :



avec :

 $G_{(i,j=constante)}^{t+\delta t}$ les valeurs intermédiaires obtenues la direction radiale à z constant et

 $G_{(i=constante t,j)}^{t+\delta t}$ les valeurs intermédiaires obtenues suivant la direction axiale à r constant.

III-2- Les techniques de correction de flux de transport (F.C.T) : III-2-1-Introduction :

Il est bien connu que le schéma centré ne produit des résultats physiquement acceptables que si le nombre de Peclet local, rapport de l'intensité de la convection sur l'intensité de la diffusion, est en valeur absolue inférieur à 2 (S.V.Patankar) [6].En particulier, prés des "forts gradient", on constate la présence d'oscillations totalement dépourvues de signification physique, détruisant ainsi la positivité de la solution. Si on adopte le point de vue l'analyse de Fourier, le schéma est dispersif, c'est-à-dire que l'harmonique k se propage avec une vitesse qui n'est pas indépendant de son rang.

Nous nous proposons de remédier à cette situation à l'aide de la technique de correction de flux de transport (F.C.T.) développée par J.P.Boris et D.L.Book(1973) [4] [5]. au Nanal Research Laboratory.

III-2-1-principe de la technique FCT :

Le principe de base de la F.C.T. réside dans l'application, au profil issu du schéma de transport dispersif, une diffusion corrective localisée uniquement dans les régions où des oscillations ont tendance à se produire. Il apparaît ainsi, que la F.C.T. est une technique et non pas un algorithme de transport particulier. La qualité du profil résultant réside donc, dans les propriétés du couple (algorithme de transport, technique F.C.T.).

La F.C.T.atteint son objectif en deux étapes. La première étape applique à tout le profil une diffusion, dont l'intensité suffisante pour "gommer "les oscillations superposées au signal physique. La forme originale du signal en est donc évidement altérée, et il est nécessaire de procéder à sa restauration, c'est le but de la seconde étape appelée "anti-diffusion".

Notons par, Ω^t l'opération de transport effectuée par l'algorithme directement issu des équations de conservation discrétisées , Ω^d l'opération de diffusion et , Ω^a celle d'anti-diffusion. Un traitement "F.C.T. " classique fait passer l'ensemble des valeurs F_i^o ,

à l'ensemble des valeurs F_i^n , de la façon suivante :

$$\{F_i^o\} \xrightarrow{\Omega^t} \{F_i^t\} \xrightarrow{\Omega^a} \{F_i^{td}\} \xrightarrow{\Omega^a} \{F_i^n\}$$
(III.21)

Si l'on avait choisit le schéma "upwind" au lieu du schéma centré, pour exprimer les valeurs aux interfaces en fonction des valeurs nœuds, l'algorithme du transport aurait alors fourni un profil dépourvu d'oscillations parasites, mais présentant une diffusion numérique artificielle (D.L.Book,J.P.Boris et K.Hain). Il est dans ce cas possible de traiter un tel profil par F.C.T. , uniquement en appliquant l'anti-diffusion. La séquence d'opérations s'écrit alors :

$$\{F_i^o\} \xrightarrow{\Omega^t} \{F_i^{dt}\} \xrightarrow{\Omega^a} \{F_i^n\}$$
(III.22)

III-2-2- Le transport diffusif :

Le transport de grandeur F au point i s'écrit :

$$F_{i}^{t} = F_{i}^{0} - \frac{1}{2} (F_{i}^{0} + F_{i+1}^{0}) \varepsilon_{i+\frac{1}{2}}^{0} + \frac{1}{2} (F_{i}^{0} + F_{i-1}^{0}) \varepsilon_{i-\frac{1}{2}}^{0} + S^{0}$$
(III.23)

Ou : F_i^0 est la valeur de F au point i à l'instant t, F_i^t est la valeur de F au point i après transport (l'exposant t signifie valeur obtenue après transport), $\varepsilon_{1/2}^0$ un coefficient défini par ;

$$\epsilon_{i\pm 1/2}^{0} = \left(V_{i}^{0} + V_{i\pm 1}^{0} \right) \left(\delta t / \delta x \right)$$
(III. 24)

 V_i^0 : Est la valeur de la vitesse au point i à l'instant t, et $V_{i\pm 1}^0$ la valeur de la vitesse au point i+1 et l'instant t+ δt . La définition de la grandeur F au point i s'écrit :

$$F_i^d = F_i^0 + f_{i+1/2}^0 - f_{i-1/2}^0$$
(III.25)

où les flux bruts de diffusion sont donnés par les expressions suivantes :

$$\begin{cases} f_{i+1/2}^{0} = v_{i+\frac{1}{2}(F_{i+1}^{0} - F_{i}^{0})} \\ f_{i-1/2}^{0} = v_{i-\frac{1}{2}(F_{i}^{0} - F_{i-1}^{0})} \end{cases}$$
(III. 26)

Ou : $v_{i\pm\frac{1}{2}}$ est le coefficient de diffusion (explicité plus loin) et dépendant du rapport

$$V\frac{\Delta t}{\Delta x}$$

Nous définissons encore les quantités ε^{\pm} , $\prod_{i=1}^{+}$ et $\prod_{i=1}^{-}$ par :

$$\varepsilon^{\pm} = \frac{1}{2} \pm V_i \left(\frac{\delta t}{\delta X}\right) \tag{III. 27}$$

$$\prod_{i}^{+} = \frac{\varepsilon_{i}^{-}}{(\varepsilon_{i+1}^{+} + \varepsilon_{i}^{-})}$$
(III.28)

$$\prod_{i=1}^{-} = 1 + \prod_{i}^{+}$$
(III. 29)

Finalement la solution que nous obtenons après transport + diffusion est de la forme :

$$F_{i}^{td} = 4[\prod_{i}^{+}]^{2} f_{i+1/2}^{0} - 4[\prod_{i}^{-}]^{2} f_{i-1/2}^{0} + \prod_{i}^{+} \left(F_{i}^{0} - S_{i+\frac{1}{2}}\right) - \prod_{i}^{-} \left(F_{i}^{0} - S_{i-\frac{1}{2}}\right)$$

Une telle diffusion est appliquée en tout point sans distinction. L'étape suivante consiste à annuler cette diffusion là où elle n'est par nécessaire.

III-2-3- Anti- diffusion :

Notons qu'il existe plusieurs façons d'effectuer l'anti-diffusion, une parmi elles est donné par la formule suivante :

$$\begin{cases} f_{i+1/2}^{0} = \mu_{i+\frac{1}{2}(F_{i+1}^{t} - F_{i}^{t})} \\ f_{i+1/2}^{0} = \mu_{i-\frac{1}{2}(F_{i}^{t} - F_{i-1}^{t})} \end{cases}$$

 $\mu_{i\pm \frac{1}{2}}$: est coefficient d'anti-diffusion

Une telle anti - diffusion est appelée « Phoenical »car elle compense exactement la diffusion quand la vitesse s'annule et permet donc de retrouver la grandeur intacte, tel le Phénix qui renait de ses cendres. La vitesse s'annule et permet donc de retrouver la grandeur intacte. C'est le rôle du « flux limiter » qui réalise cela dans le respect de la règle suivante :

$$f_{i+1/2}^{c} = \text{sgn.max} \left\{ 0, \min\left\{ \text{sgn} \delta F_{i-\frac{1}{2}}^{td}, \left| f_{i+1/2}^{t} \right|, \text{sgn.} \delta F_{i+\frac{3}{2}}^{td} \right\}$$
(III. 32)

Avec :

$$|\text{sgn}| = 1$$
 , $\text{signe}\left(f_{i+\frac{1}{2}}^{t}\right) = \text{signe}\left(f_{i+\frac{1}{2}}^{0} + \frac{1}{8}(\delta F_{i+1}^{t} - \delta F_{i}^{t})\right)$ (III. 33)

$$et \begin{cases} f_{1+\frac{1}{2}} = \mu_{i+\frac{1}{2}}(F_{i+1}^{t} - F_{i}^{t}) \\ f_{i-\frac{1}{2}} = \mu_{i-\frac{1}{2}}(F_{i}^{t} - \delta F_{i-1}^{t}) \end{cases}$$
(III. 34)

L'anti-diffusion ne doit ni créer de nouveaux extremums, ni accentuer les extrêmes déjà existants. La formulation précédente ponctuelle, se transforme sous l'effet de la diffusion en un plateau de trois points, sur lequel l'anti-diffusion ne peut agir, c'est le phénomène de « Clipping ». Finalement, la nouvelle valeur de la grandeur F calculée au point, l'instant t+ $t + \delta t$ s'obtient par la relation :

$$F_i^n = F_i^{td} - f_{i+1/2}^c + f_{i-1/2}^c$$
(III.35)

Les coefficients de diffusion $v_{i\pm 1/2}^{o}$ et d'anti-diffusion $\mu_{i\pm\frac{1}{2}}^{o}$ peuvent être ajustés suivant les particularités du problème étudié et le but recherché.

Proposent :
$$\begin{cases} v_{i\pm1/2}^{0} = \frac{1}{6} + \frac{1}{3} \left(\varepsilon_{i\pm1/2}^{c} \right)^{2} \\ \mu_{i\pm1/2}^{0} = \frac{1}{6} - \frac{1}{3} \left(\varepsilon_{i\pm1/2}^{c} \right)^{2} \end{cases}$$
(III. 36)

Nous noterons que, de la formation adoptée, à toutes les étapes décrites ci-dessus, toute quantité soustraite (respectivement ajoutée) au point i+1, de sorte que la méthode reste conservative.

D'autre part, la formation précédente qui prévoit que la cellule n'échange qu'avec les cellules contiguës soit i-1, de sorte que la vitesse de transport \vec{V} Le pas spatial δX et le pas temporel δt vérifient en tout pont et à chaque instant la relation de stabilité de :

$$\left|\vec{V}(\Delta x/\Delta t)\right| \le \frac{1}{2} \tag{III.37}$$

III-3-Etude de l'algorithme SHAST2D :

SHAST2D (Sharp and Smooth Transport Algoritm) est un algorithme numérique proposé par un groupe d'auteurs D.L.Book, J.P.Boris, et K Hain (1978) [5]. permettant de résoudre pour deux dimensions spatiales l'ensemble d'équations suivantes :

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla}. \left(\rho \vec{V} \right) = 0 \\ \frac{\partial}{\partial t} \left(\rho \vec{V} \right) + \vec{\nabla}. \left(\rho \vec{V}. \vec{V} \right) = \vec{S}_{V} \\ \frac{\partial W}{\partial t} + \vec{\nabla}. \left(W. \vec{V} \right) = S_{e} \end{cases}$$
(III. 38)

On remarque que chacune des équations peut se mettre sous la forme générale suivante :

$$\frac{\partial F}{\partial t} + \vec{\nabla}. \left(F \vec{V} \right) = S \tag{III. 39}$$

où *F* représente la quantité transportée (densité, quantité de mouvement ou énergie totale). \vec{V} est la vitesse totale de transport que l'on détaillera par la suite et **S** le module (au sens mathématique) du terme source, soit de vitesse S_V , soit de l'énergie S_e , et $W = \frac{3}{2}P + \frac{1}{2}\rho V^2$ l'énergie totale du système (thermique et cinétique, *P* la pression du gaz). On note par SHASTR {F, V, S, δr , δt } la procédure de transport dans la direction r (radiale), et par SHASTZ{*F*, *V*, *S*, δz , δt } la procédure de transport dans la direction z (axiale). Nous appliquerons aux deux procédures la technique F.C.T. Dans deux cas, on obtient les valeurs de { $F_i^{t+\partial t}$ } à l'instant t+ δt , à partir des valeurs { F_i^t } connues à l'instant t. Les quantités de départ sont notées ρ^0 , V^0 , S^0 , W^0 , représentant respectivement densité de masse, vitesse de transport, terme source et énergie. Les grandeurs à calculer sont notées ρ^n , V^n , S^n , W^n . le transport s'effectue sur un réseau, ayant δr comme pas spatial dans la direction radiale, et δz dans la direction axiale, et se déroule en quatre étapes que nous allons détailler plus loin.

-1^{ère}étape :

On suppose connaitre les valeurs initiales de la densité de masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie, puis on calcul leurs nouvelles valeurs après transport, on détermine d'abord la vitesse de transport et la pression. L'évolution s'effectuera de l'instant t à l'instant t + $\delta/2$.

$$\begin{cases} V_{r}^{0} = \frac{(\rho V_{r})^{0}}{\rho^{0}}; V_{z}^{0} = \frac{(\rho V_{z})^{0}}{\rho^{0}} \\ P^{0} = \frac{2}{3} [W^{0} - 0.5\rho^{0}(V_{r}^{0})^{2} - 0.5\rho^{0}(V_{z}^{0})^{2}] \\ P^{hr} = SHASTR \left\{ \rho^{0}, V_{r}^{0}, S_{r}^{0}, \delta r, \frac{\delta t}{2} \right\} \\ (\rho v_{r})^{hr} = SHASTR \left\{ (\rho v_{r})^{0}, V_{r}^{0}, S_{r}^{0}, \delta r, \frac{\delta t}{2} \right\} \\ (\rho v_{z})^{hr} = SHASTR \left\{ (\rho v_{z})^{0}, V_{r}^{0}, 0, \delta r, \frac{\delta t}{2} \right\} \\ W^{hr} = SHASTR \left\{ W^{0}, V_{r}^{0}, S_{r}^{0}, \delta r, \frac{\delta t}{2} \right\} \end{cases}$$
(A1)

Le transport suivant la direction r durant un demi cycle $\delta/2$. Le transport se déroule à vitesse constante V_r^0 et les valeurs obtenues à la fin de ce demi-cycle vont comme valeurs initiales pour le transport suivant. Notons que la vitesse V_z^0 n'intervient que dans le calcul de l'énergie cinétique.

-2^{ème} étape :

à l'aide des valeurs obtenues au cours de la première étape, on continue le calcul des nouvelles valeurs de la densité, de la quantité de mouvement et l'énergie, mais de l'instant $t + \delta t/2$, à l'instant $t + \delta t$.

$$\begin{cases} V_{r}^{hr} = \frac{(\rho V_{r})^{hr}}{\rho^{hr}}; V_{z}^{hr} = \frac{(\rho V_{z})^{hr}}{\rho^{hr}} \\ P^{hr} = \frac{2}{3} \Big[W^{hr} - 0.5\rho^{hr} (V_{r}^{hr})^{2} - 0.5\rho^{hr} (V_{z}^{hr})^{2} \Big] \\ P^{r} = SHASTR\{\rho^{0}, V_{r}^{hr}, S_{r}^{hr}, \delta r, \delta t\} \\ (\rho v_{r})^{r} = SHASTR\{(\rho v_{r})^{0}, V_{r}^{hr}, S_{r}^{hr}, \delta r, \delta t\} \\ (\rho v_{z})^{r} = SHASTR\{(\rho v_{z})^{0}, V_{r}^{hr}, 0, \delta r, \delta t\} \\ W^{r} = SHASTR\{W^{0}, V_{r}^{hr}, S_{r}^{hr}, \delta r, \delta t\} \end{cases}$$
(A2)

Les valeurs obtenues constituent le résultat de l'évolution radiale durant $t + \delta t$. L'étape suivante consiste à faire évoluer le gaz dans la direction z

-3^{ème} étape :

Les valeurs P^r (densité massique), $(\rho V_z)^r$ et $(\rho V_r)^r$ (quantité de mouvement) et W^r (énergie), obtenues précédemment vont servir comme valeurs initiales pour le

$$\begin{cases} V_z^r = \frac{(\rho V_z)^r}{\rho^r}; V_r^r = \frac{(\rho V_r)^r}{\rho^r} \\ P^r = \frac{2}{3} [W^r - 0.5\rho^r (V_r^r)^2 - 0.5\rho^r (V_z^r)^2] \\ P^{hz} = SHASTZ \left\{ \rho^r, V_z^r, S_z^r, \delta z, \frac{\delta t}{2} \right\} \\ (\rho v_r)^{hz} = SHASTZ \left\{ (\rho v_r)^r, V_z^r, 0, \delta z, \frac{\delta t}{2} \right\} \\ (\rho v_r)^{hz} = SHASTZ \left\{ (\rho v_z)^r, V_z^r, S_z^r, \delta z, \frac{\delta t}{2} \right\} \\ W^{hz} = SHASTZ \left\{ W^r, V_z^r, S_z^r, \delta z, \frac{\delta t}{2} \right\} \end{cases}$$
(A3)

-4^{ème} étape :

avec les mêmes remarques que précédemment le transport s'effectuera à vitesse constante.

$$\begin{cases} V_{z}^{hz} = \frac{(\rho V_{z})^{hz}}{\rho^{hz}}; V_{r}^{hz} = \frac{(\rho V_{z})^{hz}}{\rho^{hz}} \\ P^{hz} = \frac{2}{3} \Big[W^{hz} - 0.5 \rho^{hz} (V_{r}^{hz})^{2} - 0.5 \rho^{hz} (V_{z}^{hz})^{2} \Big] \\ P^{n} = SHASTZ \{ \rho^{r}, V_{r}^{hz}, S_{r}^{hz}, \delta z, \delta t \} \\ (\rho v_{r})^{n} = SHASTZ \{ (\rho v_{r})^{r}, V_{r}^{hz}, 0, \delta z, \delta t \} \\ (\rho v_{z})^{n} = SHASTZ \{ (\rho v_{z})^{r}, V_{z}^{hz}, S_{z}^{hr}, \delta z, \delta t \} \\ W^{n} = SHASTZ \{ W^{r}, V_{z}^{hz}, S_{z}^{hz}, \delta z, \delta t \} \end{cases}$$
(A4)

Les valeurs P^n (densité massique), $(\rho V_z)^n$ et $(\rho V_r)^n$ (quantité de mouvement) et W^n (énergie), obtenues durant ce dernier demi-cycle sont les valeurs recherchées.

III-4- Mise en œuvre du code :

III-4-1-Résolution dans l'approximation "Time-Splitting" :

Les équations (III.14, III.15 et III.18) obtenues dans le chapitre III, dans le cadre du formalisme de la dynamique de gaz de neutres, sont traitées par l'algorithme SHAST2D FCT.

III-4-1-1-Transport radial :

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \rho V_r) = 0\\ \frac{\partial}{\partial t} (\rho V_r) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \rho V_r V_r) = (SV)_r\\ \frac{\partial}{\partial t} (\rho V_z) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \rho V_z V_r) = 0\\ \frac{\partial}{\partial t} W + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r W V_r) = (SE)_r \end{cases}$$
(III. 40)

où les quantités ρ , (ρV_r) et W représentent respectivement la densité de masse, la quantité de mouvement et d'énergie totale des neutres. (SV)_r est le terme source de vitesse et(SE)_rle terme source d'énergie, que l'on va expliciter :

$$\begin{cases} (SV)_{r} = \frac{\partial P}{\partial r} - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r\tau_{rr}) - \frac{\tau_{\theta\theta}}{r} - \frac{\partial}{\partial z} \tau_{zrz} \\ (SE)_{r} = f_{t} J_{r} E_{r} + \frac{K(T)}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \frac{\partial T}{\partial r}) - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \{r(P + \tau_{rr})V_{r}\} - \frac{\partial}{\partial z} (\tau_{rz}V_{r}) \end{cases}$$
(III. 41)

où P=NkT est la pression du gaz, J_r la composante radiale de la densité de courant τ_{rz} et $\tau_{\theta\theta}$ sont les différentes composantes du tenseur viscosité de courant ont été tirées de l'ouvrage de R.B.Brid,, WEStewart, ENLight foot (1960) :

$$\begin{cases} \tau_{rr} = -\eta(T) \left(2 \frac{\partial V_r}{\partial r} - \frac{2}{3} \text{div} \vec{V} \right) \\ \tau_{rz} = -\eta(T) \left(2 \frac{\partial V_z}{\partial r} - \frac{\partial V_r}{\partial z} \right) \\ \tau_{\theta\theta} = -\eta(T) \left(2 \frac{\partial V_r}{r} - \frac{2}{3} \text{div} \vec{V} \right) \end{cases}$$
(III. 42)

III-4-1-2-Transport axial :

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial z} (\rho V) = 0\\ \frac{\partial}{\partial t} (\rho V_r) + \frac{\partial}{\partial z} (\rho V_r V_z) = 0\\ \frac{\partial}{\partial t} (\rho V_z) + \frac{\partial}{\partial z} (\rho V_z V_z) = (SV)_z\\ \frac{\partial}{\partial t} W + \frac{\partial}{\partial z} (W V_z) = (SE)_z \end{cases}$$
(III.43)

où les quantités $\rho(\rho V_z)$ et W représentent respectivement la densité de masse, la quantité de mouvement et l'énergie totale des neutres.

 $(SV)_z$ est le terme source de vitesse et $(SE)_z$ représente le terme source d'énergie, que l'on va expliciter :

$$\begin{cases} (SV)_{Z} = -\frac{\partial P}{\partial z} - \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(r\tau_{rz}) - \frac{\partial}{\partial z}\tau_{rzz} \\ (SE)_{z} = f_{t}J_{z}E_{z} + K(T)\left(\frac{\partial^{2}T}{\partial z^{2}}\right) - \frac{\partial}{\partial z}\{(P + \tau_{zz})V_{z}\} - \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(r\tau_{rz}V_{z}) \end{cases}$$
(III. 44)

où J_z et E_z sont les composantes axiale de la densité de courant et du champ électrique τ_{zz} et τ_{rz} sont les différentes composantes du tenseur viscosité

$$\begin{cases} \tau_{rzz} = -\eta(T) \left(2 \frac{\partial V_z}{\partial z} - \frac{2}{3} div \vec{V} \right) \\ \tau_{rz} = -\eta(T) \left(2 \frac{\partial V_z}{\partial r} - \frac{\partial V_r}{\partial z} \right) \end{cases}$$
(III. 45)

III-4-1-3- Calcul des termes sources sur l'axe :

Compte tenu de l'utilisation des coordonnées cylindriques à cause la symétrie de révolution autour de l'axe de la décharge, on doit avoir toujours $V_z = 0$ sur l'axe. Ceci implique de transport de certains termes sur l'axe.

• transport radial :

Pour la quantité de mouvement, (ρV_r) est nulle sur l'axe, donc on a immédiatement $(SV)_{raxe} = 0$. Pour le transport de l'énergie, nous avons $|f_z JE|_r = 0$ et on doit calculer la limite des autres termes quand $r \rightarrow 0$ (les calculs sont détaillés dans l'annexe).

$$(SE)_{raxe} = 2K(T)\frac{\partial^2 T}{\partial r^2} - P\frac{\partial V_r}{\partial r} + \frac{4}{3}\eta(T)\left\{\left(\frac{\partial V_r}{\partial r}\right)^2 - \frac{\partial V_z}{\partial z}\frac{\partial V_r}{\partial r}\right\}$$
(III. 46)

• transport axial

On doit également prendre la limite lorsque $r \rightarrow 0$ de l'ensemble des termes de $(SV)_z$ et $(SE)_z$. on obtient les valeur suivantes:

$$(SE)_{zaxe} = |f_t JE|_r + K(T) \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} - \frac{\partial}{\partial z} (\rho V_z) \frac{4}{3} \eta(T) \left\{ V_z \frac{\partial V_z}{\partial z^2} + \left(\frac{\partial V_z}{\partial z} \right)^2 - \frac{\partial V_z}{\partial z} \frac{\partial V_r}{\partial r} \right\}$$
(III. 47)

Le terme (SV)_{zaxe} s'écrit :

$$(SV)_{Zaxe} = -\frac{\partial P}{\partial z} + \frac{4}{3}\eta(T)\frac{\partial^2 V_z}{\partial z^2}$$
(III. 48)

Il nous reste à définir la zone d'étude et la construction du réseau, puis ensuite, valider le code numérique et donner la précision des calculs effectués. L'injection peut être décomposée en deux réparties ainsi dans l'une et l'autre direction, axiale et radiale.

III-4-2-Définition du domaine d'étude :

Nous supposons l'existence de la symétrie de révolution autour de l'axe de la décharge, le cadre de résolution se schématise alors de la façon suivante :



Figure (III.1) : définition du domaine d'étude

Définition du réseau :

Les différents paramètres représentés sur la figure III.1. sont définis comme suite : le réseau est défini par l'ensemble des couples de nœuds (i, j), où i correspond à la

position du nœud sur l'axe radial et j à sa position sur l'axe z . Le couple (0.1) correspond à l'origine des axes (point D₁). Le couple (0,2) correspond à la surface du plan.

 $\Delta r = r_{i+1} - r_i$ est la distance entre deux nœuds sur l'axe r.

 $\Delta z = z_{i+1} - z_i$ est la distance entre deux nœuds sur l'axe z

La zone d'étude est déterminée par l'ensemble des points $(D_1, D_2, D_3, D_4, D_5)$. On complétera par symétrie l'analyse dans le domaine $(D_1, D_2, D_6, D_7, D_8)$. Les limites (D_4, D_5) et (D_3, D_4) peuvent se déplacer librement et indépendamment l'une de l'autre, respectivement dans la direction radiale ou la direction axiale en fonction de la vitesse des neutres calculée sur ces limites.

Pour cela, si on note par N_{br} la valeur de i repérant la limite (D_4, D_5) , on doit comparer à chaque itération, la vitesse radiale obtenue sur cette verticale, à une valeur fixe choisie et définie au début de programme . On procède de la même manière pour la limite horizontale. Si la vitesse calculée est égale ou supérieure à cette vitesse, la limite du domaine de calcul est repoussée. On limite ainsi au maximum, les erreurs pouvant être introduites par des limites de calcul qui ne correspondent pas aux limites physiques, tout en économisant un temps de calcul important. L'énergie injectée occupe le volume délimité par l'ensemble des points (M_1, D_2, M_2) , et sera stable durant toute l'étude de la décharge, seule la distribution changera en fonction du cas étudié. La pointe est définie par l'ensemble des points $(D_2, D_6, L_2, L_3, D_3)$. Enfin, les limites du domaine d'étude sont définies par les points (L_4, L_5) pour la paroi latérale, et par (L_1, L_4) pour la paroi supérieure.

III-5-Problème des conditions sur l'axe, le plan, les parois :

III-5-1-sur l'axe :

La composante radiale de la vitesse doit toujours être nulle, ainsi que les gradients de toutes les grandeurs (densité, température et pression) calculées dans la direction radiale. Ceci se traduit par les relations suivantes :

$$\begin{cases} V_{\rm r}(0,z,t) = 0 & ; \quad \frac{\partial}{\partial r} V_{\rm r}(0,z,t) = 0 \\ \frac{\partial}{\partial r} T(0,z,t) = 0 & \\ \frac{\partial}{\partial r} N(0,z,t) = 0; & \frac{\partial}{\partial r} P(0,z,t) = 0 \end{cases}$$
(III. 49)

III-5-2-sur le plan :

on distingue deux cas :

En-dessous du plan, la température reste constante $T_0=300$ K tandis que toutes les autres grandeurs sont nulles.

$$\begin{cases} V_r(r, 1, t) = 0 & ; & V_z(r \ 1, t) = 0 \\ T(r, 1, t) = T_0, & \\ N(r, 1, t) = 0 & ; & P(r, 1, t) = 0 \end{cases}$$
(III.50)

A la surface du plan, la vitesse axiale est nulle (V_z = 0), tandis que la vitesse radiale (V_r) dépendra de la vitesse totale, calculée au nœud voisin correspondant, c'est-à-dire V_r(i, j = 1) = V_r(i, j = 2), où (1≤ i ≤ 200). Les autres grandeurs (la densité, et la température) sont calculées par extrapolation. On obtient les relations suivantes :

$$\begin{cases} T(r, 2, t) = 2T(r, 3, t) - T(r, 4, t) \\ N(r, 2, t) = 2N(r, 3, t) - N(r, 4, t) \\ P(r, 2, t) = 2P(r, 3, t) - P(r, 4, t) \end{cases}$$
(III. 51)

III-5-3-sur la pointe :

on distingue trois cas :

 à l'intérieur de la pointe, on garde les mêmes conditions que celles, que l'on a choisies en dessous du plan, à savoir :

$$\begin{cases} V_{r}(r, z, t) = 0 & ; & V_{z}(r, z, t) = 0 \\ T(r, z, t) = T_{0}; & & (III.52) \\ N(r, z, t) = 0 & ; & P(r, z, t) = 0 \end{cases}$$

 Sur la pointe (côte oblique D₂D₃), les valeurs sont calculées de la même façon que sur le plan :

$$\begin{cases} T(rl, z, t) = 2T(r - 2 z, t) - T(r - 3, z, t) \\ N(rl, z, t) = 2N(r - 2, z, t) - N(r - 3, z, t) \\ P(rl, z, t) = 2P(r - 2, z, t) - P(r - 3, z, t) \end{cases}$$
(III. 53)

 Sur la pointe (côté latéral D₃L₃), les valeurs sont calculées de la même façon que précédemment

$$\begin{cases} T(rl, z, t) = 2T(lr + 2, z, t) - T(rl + 3, z, t) \\ N(rl, z, t) = 2N(lr + 2, z, t) - N(rl + 3, z, t) \\ P(rl, z, t) = 2P(lr + 2, z, t) - P(rl + 3, z, t) \end{cases}$$
(III. 54)

III-5-4-sur les parois :

Les parois constituent la limite de notre domaine, on grade les mêmes valeurs que celles prises sous la surface du plan ou de la pointe.

$$\begin{cases} V_{r}(r, z_{p}, t) = V_{r}(r_{P}, z, t) = 0 & ; & V_{z}(r_{P}, z, t) = V_{z}(r, z_{p}, t) = 0 \\ T(r, z_{p}, t) = T(r_{P}, z, t) = T_{0} & (III.55) \\ N(r, z_{p}, t) = N(r_{P}, z, t) = 0 & ; & P(r_{P}, z, t) = P(r, z_{p}, t) = 0 \end{cases}$$

III-6-conclusion :

ayant défini la procédure numérique et conditions initiales et aux limites, nous passons maintenant à la résolution des ces équations.