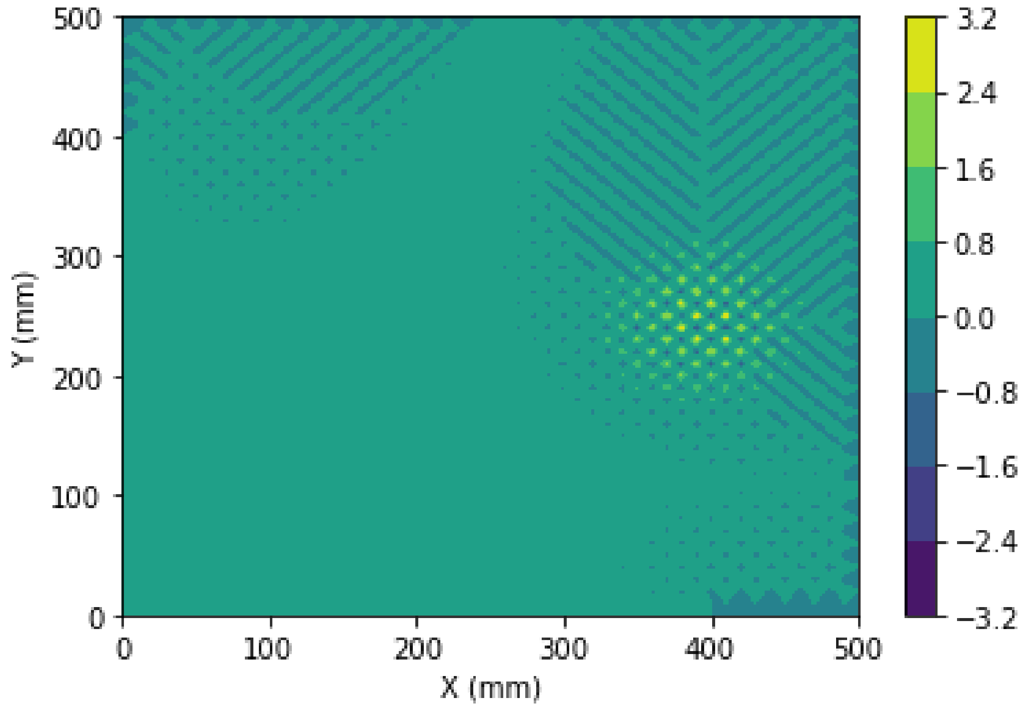
# Calcul Scientifique Numérique

PROJETS GROUPES 3B, 6A, 8A





Hamza EL YAMANI
Chargé d'enseignement en Mécanique
ISAE-ENSMA

# Table des matières

# Avant-propos

Ce document propose 5 sujets pour les projets de calcul scientifique numérique. Chaque binôme choisira un sujet et traitera au moins une équation proposée sur le sujet. En effet, la programmation de la résolution des équations est le siège de l'analyse numérique à effectuer et ne représente pas la majeure partie du projet. Le plus important reste de montrer votre analyse des différents résultats obtenus.

Les consignes des sujets ne sont pas nécessairement toutes à respecter. Autrement dit, vous n'êtes pas obligé de traiter l'ensemble du sujet que vous aurez choisi. Cependant, il est nécessaire de montrer un contenu minimal respectable, avec par la suite plusieurs aspects que vous avez décidé d'étudier.

Voici quelques consignes supplémentaires aux consignes pour les sujets proposés (là aussi, consignes supplémentaires non-exhaustives) :

- Vous pouvez choisir une équation aux dérivées partielles et appliquer plusieurs schémas numériques, en comparant chacun de ces schémas entre eux ;
- Vous pouvez traiter un problème différent en changeant les conditions aux limites et/ou les conditions initiales tout en restant dans le contexte physique du sujet ;
- Vous pouvez faire varier les conditions aux limites et/ou les conditions initiales légèrement, et en observer la réponse ;
- Vous pouvez comparer les résultats numériques aux solutions analytiques, si ces solutions existent, en effectuant le calcul théorique vous-même ou en effectuant quelques recherches supplémentaires ;
- Vous pouvez étudier la stabilité de manière analytique, afin d'en déduire des conditions à remplir sur la résolution numérique (et en comprendre la contrainte physique sur la résolution numérique) ;
- Vous pouvez écrire le problème numérique sous forme de problème matriciel ;
- Vous pouvez traiter l'intégralité du sujet, avec pour chaque équation des schémas numériques qui vous ont semblé pertinent.

Parmi les sujets proposés, seuls des sujets avec la méthode des différences finies sont proposés. Vous aurez notamment l'occasion d'étudier les éléments finis sur d'autres modules. Les sujets ont des thématiques variés, dont les intitulés sont les suivants :

- Sujet 1 – Compression dynamique : Sujet de dynamique des solides et des matériaux ;
- Sujet 2 – Tube à choc : Sujet de dynamique des fluides compressibles ;
- Sujet 3 – Isolation thermique : Sujet de thermique, conduction, convection ;
- Sujet 4 – Diffusion moléculaire : Sujet de génie des procédés, transfert de matière ;
- Sujet 5 – Vibration de poutres : Sujet de dynamique et vibrations.

Remarque : Il est susceptible que ce document subisse (encore) quelques changements mineurs au cours du projet.

# Sujet 1 : Compression dynamique

## 1.1 Problème général

Nous souhaitons étudier la réponse en compression d'un échantillon de matériau de longueur $L$ face à une sollicitation en vitesse d'une durée fixe. En $x = 0$, un déplacement $u(0,t)$ est imposé et en $x = L$, le déplacement est nul. Par exemple, le déplacement imposé serait obtenu à partir de la vitesse que l'on peut définir par :

$$v(0,t) = \begin{cases} v_0 \; si \; 0 \leq t \leq t_f \\ 0 \; sinon \end{cases}$$

On se placera essentiellement dans le cadre d'une compression simple, sans effort volumique appliqué, avec l'étude de la réponse sur une dimension. Plusieurs modèles de comportement seront à étudier : élastique, viscoélastique, élasto-plastique parfait, élasto-viscoplastique.

Les équations sont écrites en convention positive en traction, ce qui signifie que les grandeurs de déformation et de contrainte sont négatives.

L'équation à résoudre sera basée sur le principe fondamental de la dynamique :

$$\rho \frac{\partial^2 \vec{u}}{\partial t^2} = \overrightarrow{div}\left(\underline{\underline{\sigma}}\right) + \vec{f_v}$$

Avec $\vec{f_v}$ le vecteur des efforts volumiques.

- Simplifier cette équation dans le cas d'une compression unidimensionnelle, et pour un déplacement selon $\vec{x}$.

Par la suite, nous considérerons que :

$$\varepsilon(x,t) = \frac{\partial u}{\partial x}(x,t)$$

## 1.2 Matériau élastique

On considère la compression d'un matériau élastique, dont le comportement sera modélisé par l'expression suivante :

$$\sigma(x,t) = E\varepsilon(x,t)$$

Avec $E$ le module d'Young.

- Déterminer l'équation aux dérivées partielles à résoudre d'inconnue $u(x,t)$ ;
- De quel type d'équation s'agit-il ?
- Discrétiser cette équation à l'aide d'un schéma aux différences finies, en précisant la nature de la discrétisation ;
- Discuter de l'existence et de l'unicité de la solution de l'équation aux dérivées partielles ;
- Programmer la résolution de l'équation. Vous pouvez le faire pour plusieurs schémas numériques, en discutant de la convergence et de la stabilité de la solution obtenue ;
- Résoudre le même problème en discrétisant directement la contrainte et en discrétisant l'équation aux dérivées partielles avec le terme de contrainte. Ce sera utile pour les parties suivantes.

## 1.3 Matériau viscoélastique

On considère la compression d'un matériau viscoélastique, dont le comportement sera modélisé par l'expression suivante :

$$\sigma(x,t) = E\varepsilon(x,t) + \mu \frac{\partial \varepsilon}{\partial t}(x,t)$$

Avec $\mu$ le coefficient de viscosité.

- Déterminer l'équation aux dérivées partielles à résoudre d'inconnue $u(x,t)$ ;
- Discrétiser cette équation à l'aide d'un schéma aux différences finies, en précisant la nature de la discrétisation ;
- Discuter de l'existence et de l'unicité de la solution de l'équation aux dérivées partielles ;
- Programmer la résolution de l'équation. Vous pouvez le faire pour plusieurs schémas numériques, en discutant de la convergence et de la stabilité de la solution obtenue ;

## 1.4 Matériau élasto-plastique

On considère la compression d'un matériau élasto-plastique parfait, dont le comportement sera modélisé par l'expression suivante :

$$\sigma(x,t) = \max\big(E\varepsilon(x,t), -\sigma_y\big)$$

Avec $\sigma_y$ la contrainte seuil.

- Sans remplacer la contrainte par son expression, discrétiser le système d'équation aux dérivées partielles ;
- Programmer la résolution de l'équation. On s'intéressera uniquement à la période de temps correspondant au chargement.

## 1.5 Matériau élasto-viscoplastique

On considère la compression d'un matériau élasto-viscoplastique parfait, dont le comportement sera modélisé par l'expression suivante :

$$\sigma(x,t) = \max\big(E\varepsilon(x,t), -\sigma_y\big) + \mu_p \frac{\partial \varepsilon_p}{\partial t}(x,t)$$

Avec $\varepsilon_p(x,t)$ la déformation plastique, dont l'évolution est donnée par :

$$\frac{\partial \varepsilon_p}{\partial t} = \min\left(\frac{\sigma + \sigma_y}{\mu_p}, 0\right)$$

Autrement dit, si le matériau est en phase élastique, la contrainte est proportionnelle à la déformation ($\sigma(x,t) = E\varepsilon(x,t)$), et lorsque la phase élastique est dépassée, la contrainte va peu évoluer et sera plafonné par un seuil dépendant de la vitesse de déformation du matériau.

- Sans remplacer la contrainte par son expression, discrétiser le système d'équation aux dérivées partielles ;
- Programmer la résolution de l'équation. On s'intéressera uniquement à la période de temps correspondant au chargement.

# Sujet 2 : Tube à choc

## 2.1 Problème général

Nous souhaitons modéliser le dispositif expérimental du tube à choc, dispositif permettant de générer une onde de choc. Le dispositif est composé de deux chambres séparées par un diaphragme : une chambre à haute pression et une chambre à basse pression. Dans chacune des chambres, un gaz est mis sous pression, avec une différence de pression entre les deux chambres. A l'instant initial, le diaphragme est rompu, et une onde de choc se propage dû à la différence de pression entre les deux chambres. Cette onde se propage dans la chambre basse pression tandis qu'une onde de détente se propage dans la chambre haute pression. Nous considérons la nature du gaz comme étant l'air.

Le système d'équation d'Euler permet de traduire en équation l'évolution du système :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + u\frac{\partial \rho}{\partial x} + \rho\frac{\partial u}{\partial x} = 0$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{1}{\rho}\frac{\partial p}{\partial x} = 0$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} + u\frac{\partial p}{\partial x} + \gamma p\frac{\partial u}{\partial x} = 0$$

Ce système étant relativement complexe vis-à-vis des objectifs du projet (trois variables d'état à considérer), nous allons traiter des versions simplifiées de l'équation de quantité de mouvement (la deuxième équation).

## 2.2 Equation de convection linéaire

L'équation de convection linéaire est une équation aux dérivées partielles d'inconnue la vitesse $u$, et dont l'expression est la suivante :

$$\frac{\partial u}{\partial t} + c\frac{\partial u}{\partial x} = 0$$

Avec $c$ une quantité scalaire représentant une vitesse.

Nous considérons les conditions initiales du problème de Riemann, c'est-à-dire :

$$u(0,x) = \begin{cases} u_L \; si \; x < x_D \\ u_R \; si \; x > x_D \end{cases}$$

- De quel type d'équation s'agit-il ?
- Discrétiser cette équation à l'aide d'un schéma aux différences finies, en précisant la nature de la discrétisation ;
- Discuter de l'existence et de l'unicité de la solution de l'équation aux dérivées partielles ;
- Discuter de la stabilité du schéma numérique choisi. Pour ce faire, vous pouvez chercher les conditions en injectant une fonction d'onde dans l'équations aux dérivées partielles et/ou dans le schéma numérique ;
- Programmer la résolution de l'équation.

## 2.3 Equation de convection-diffusion

L'équation de convection-diffusion linéaire est une équation aux dérivées partielles d'inconnue la vitesse $u$, et dont l'expression intègre le terme de comportement visqueux du fluide est la suivante :

$$\frac{\partial u}{\partial t} + c\frac{\partial u}{\partial x} = \nu\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

Avec $c$ une quantité scalaire représentant une vitesse et $\nu$ la viscosité cinématique.

Nous considérons les conditions initiales du problème de Riemann.

- De quel type d'équation s'agit-il ?
- Discrétiser cette équation à l'aide d'un schéma explicite, en différences centrées pour les dérivées spatiales ;
- Discuter de l'existence et de l'unicité de la solution de l'équation aux dérivées partielles ;
- Discuter de la stabilité du schéma numérique. Pour ce faire, vous pouvez chercher les conditions en injectant une fonction d'onde dans l'équations aux dérivées partielles et/ou dans le schéma numérique ;
- Programmer la résolution de l'équation ;
- Augmenter le paramètre de viscosité $\nu$ et observer la stabilité des résultats obtenus.

## 2.4 Equation de Burgers

L'équation de Burgers est une équation aux dérivées partielles non linéaire d'inconnue la vitesse $u$, et dont l'expression est la suivante :

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u\frac{\partial u}{\partial x} = 0$$

Nous considérons les conditions initiales du problème de Riemann. Par la suite, nous prendrons les conditions initiales suivantes :

$$u(0,x) = \begin{cases} u_L \; si \; x < x_D - \frac{l}{2} \\ -\left(\frac{u_L - u_R}{l}\right)x + \left(u_L + \frac{(u_L - u_R)}{l}\left(x_D - \frac{l}{2}\right)\right) \; si \; x_D - \frac{l}{2} \leq x \leq x_D + \frac{l}{2} \\ u_R \; si \; x > x_D + \frac{l}{2} \end{cases}$$

- Discrétiser cette équation à l'aide d'un schéma aux différences finies, en précisant la nature de la discrétisation ;
- Programmer la résolution de l'équation. Traiter le problème pour $u_L > u_R$ et pour $u_L < u_R$.

# Sujet 3 : Isolation thermique

## 3.1 Problème général

Nous souhaitons modéliser l'isolation thermique d'un système en instationnaire. Le problème sera traité progressivement, avec un matériau, puis plusieurs, et avec différents types de conditions aux limites : température imposée (condition de Dirichlet), et/ou flux thermique conducto-convectif imposé (condition de Neumann). Le problème sera traité en 1D. En $x = 0$, une température constante sera imposée dans un premier temps, puis un flux convectif sera imposé.

L'équation de la chaleur générale est donnée par :

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} + div(\vec{q}) = P_s$$

Avec $\vec{q}$ le vecteur flux de chaleur. Ce vecteur, dans le cas de la conduction, est égale à :

$$\vec{q} = -\lambda \overrightarrow{grad}(T)$$

- Donner la version simplifiée de cette équation dans notre cas ;
- De quel type d'équation s'agit-il ?

## 3.2 Conduction instationnaire sur un matériau : température imposée

Nous considérons la conduction sur un matériau, de conductivité thermique constante, et d'une épaisseur $L$ fixe. On impose une température constante en $x = 0$ et une température constante différente en $x = L$.

- Discrétiser cette équation à l'aide d'un schéma aux différences finies, en précisant la nature de la discrétisation ;
- Discuter de l'existence et de l'unicité de la solution de l'équation aux dérivées partielles ;
- Programmer la résolution de l'équation. Notons qu'il sera nécessaire d'imposer une température initiale en chaque point de l'espace (conditions initiales).

## 3.3 Conduction instationnaire sur un matériau : flux imposé

Nous considérons la conduction sur un matériau, de conductivité thermique constante, et d'une épaisseur $L$ fixe. On impose un flux en $x = 0$ et/ou en $x = L$ d'abord constant, puis un flux convectif tel que :

$$\varphi(0, t) = -h(T(0, t) - T_{ext})$$

- Discrétiser cette équation à l'aide d'un schéma aux différences finies, en précisant la nature de la discrétisation ;
- Discuter de l'existence et de l'unicité de la solution de l'équation aux dérivées partielles ;
- Programmer la résolution de l'équation. Notons qu'il sera nécessaire d'imposer une température initiale en chaque point de l'espace (conditions initiales).

## 3.4 Conduction instationnaire sur plusieurs matériaux

Nous considérons la conduction sur plusieurs matériaux, de conductivités thermiques différentes, et d'épaisseurs différentes, dont l'un des matériaux correspond à un isolant thermique.

- Ecrire la forme de l'équation à résoudre et mettre en évidence le terme qui changera en fonction du matériau ;
- Ecrire les conditions initiales et conditions aux limites de votre choix ;
- Discrétiser l'équation à l'aide d'un schéma aux différences finies, en précisant la nature de la discrétisation ;
- Discuter de l'existence et de l'unicité de la solution de l'équation aux dérivées partielles ;
- Programmer la résolution de l'équation. Notons qu'il sera nécessaire d'imposer une température initiale en chaque point de l'espace (conditions initiales).

# Sujet 4 : Diffusion moléculaire

## 4.1 Problème général

Nous souhaitons modéliser la diffusion moléculaire d'un corps pur fluide dans un solvant. Deux problèmes seront traités : le premier en 1D et le deuxième en 2D. Avant l'expérience, le corps fluide est contenu dans un volume donné à une concentration molaire donnée, isolé par un diaphragme d'un autre fluide (non considéré dans les équations). Le diaphragme se rompt à $t = 0$. Les molécules vont se diffuser dans l'ensemble du volume qu'elles peuvent occuper. Nous étudierons à l'échelle macroscopique cette diffusion. Pour ce faire, le problème est régi par deux équations, que sont les lois de Fick.

La première loi de Fick met en relation le flux de matière en fonction du gradient de concentration :

$$\vec{j} = -D\overrightarrow{grad}C$$

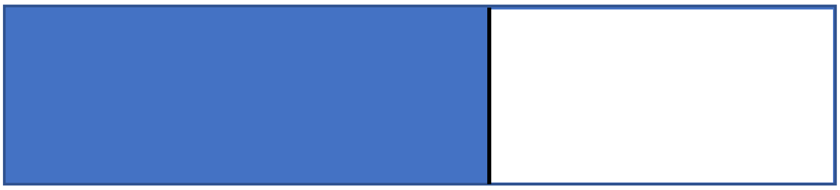
La seconde loi de Fick, mettant en lien la variation temporelle de concentration et la divergence du flux de matière :

$$\frac{\partial C}{\partial t} + div(\vec{j}) = 0$$

- Déterminer la forme générale de l'équation aux dérivées partielles à résoudre ;
- De quel type d'équation s'agit-il ?

## 4.2 Diffusion d'un fluide en 1D

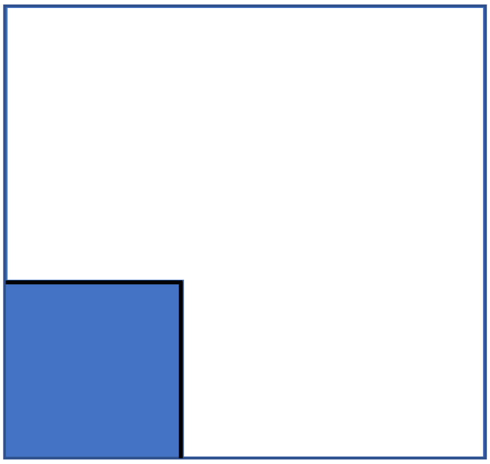
Nous considérons la diffusion d'un fluide, dilué dans le volume donné en bleu sur le schéma suivant :



- Adapter l'équation obtenue précédemment au problème 1D ;
- Exprimer les conditions initiales du problème. Vous pouvez considérer, dans un premier temps pour les conditions aux limites, que la concentration reste la même au niveau des extrémités. Vous pouvez adapter ces conditions aux limites par la suite ;
- Discrétiser cette équation à l'aide d'un schéma aux différences finies, en précisant la nature de la discrétisation ;
- Discuter de l'existence et de l'unicité de la solution de l'équation aux dérivées partielles ;
- Programmer la résolution de l'équation. Vous pouvez le faire pour plusieurs schémas numériques, en discutant de la convergence et de la stabilité de la solution obtenue.

## 4.3 Diffusion d’un fluide en 2D

Nous considérons la diffusion d’un fluide, dilué dans le volume donné en bleu sur le schéma suivant :



- Adapter l’équation obtenue précédemment au problème 2D ;
- Discrétiser l’équation obtenue dans la première partie à l’aide d’un schéma aux différences finies, en précisant la nature de la discrétisation ;
- Discuter de l’existence et de l’unicité de la solution de l’équation aux dérivées partielles ;
- Programmer la résolution de l’équation. Vous pouvez le faire pour plusieurs schémas numériques, en discutant de la convergence et de la stabilité de la solution obtenue.

# Sujet 5 : Vibration de poutres

## 5.1 Problème général

Nous souhaitons étudier la réponse d'une poutre élastique homogène isotrope face à plusieurs sollicitations différentes de vibrations et à des fréquences différentes. En $x = 0$, la poutre est encastrée et en $x = L$, une sollicitation en vibration est imposée. La poutre sera considérée de section rectangulaire.

## 5.2 Vibration en traction

En traction, l'équation de la dynamique appliquée à la poutre met en relation l'effort normal $N$ et le déplacement $u$ selon x de la poutre :

$$\frac{\partial N}{\partial x} + p_x = \rho S \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}$$

Avec $p_x$ une force linéique normale appliquée sur la poutre.

La condition aux limites en $x = L$ est :

$$u(L, t) = u_0 \sin(\omega t)$$

Avec $u_0$ l'amplitude du déplacement selon x.

La relation de comportement en traction est :

$$N = ES \frac{\partial u}{\partial x}$$

- Déterminer l'équation aux dérivées partielles à résoudre ;
- De quel type d'équation s'agit-il ?
- Discrétiser cette équation à l'aide d'un schéma aux différences finies, en précisant la nature de la discrétisation ;
- Discuter de l'existence et de l'unicité de la solution de l'équation aux dérivées partielles ;
- Programmer la résolution de l'équation ;
- Effectuer des simulations avec les valeurs de $\omega$ suivantes ($n$ valeur entière à varier) :

$$\omega = \frac{(2n-1)}{2L} \pi \sqrt{\frac{E}{\rho}}$$

## 5.3 Vibration en flexion

En flexion, les équations de la dynamique appliquées à la poutre mettent en relation l'effort tranchant $T_y$, le moment fléchissant $M_{fz}$ et le déplacement $v$ selon y :

$$\frac{\partial T_y}{\partial x} + p_y = \rho S \frac{\partial^2 v}{\partial t^2}$$

$$\frac{\partial M_{fz}}{\partial x} + \mu_z + T_y = 0$$

Avec $p_y$ une force linéique transversale selon y appliquée sur la poutre, et $\mu_z$ un couple linéique autour de z.

La condition aux limites en $x = L$ est :

$$v(L,t) = v_0 \sin(\omega t)$$

Avec $v_0$ l'amplitude du déplacement selon y.

La relation de comportement en flexion (hypothèse de Bernoulli) est :

$$M_{fz} = EI_z \frac{\partial^2 v}{\partial x^2}$$

- Déterminer l'équation aux dérivées partielles à résoudre ;
- Discrétiser cette équation à l'aide d'un schéma aux différences finies, en précisant la nature de la discrétisation ;
- Discuter de l'existence et de l'unicité de la solution de l'équation aux dérivées partielles ;
- Programmer la résolution de l'équation ;
- Effectuer des simulations avec les valeurs de $\omega$ suivantes, pour $n > 2$ :

$$\omega = \left(\frac{(2n-1)}{2L}\pi\right)^2 \sqrt{\frac{EI}{\rho S}}$$

## 5.4 Vibration en torsion

En torsion, l'équation de la dynamique appliquée à la poutre met en relation le moment de torsion $M_t$ et l'angle de rotation $\theta$ autour de x :

$$\frac{\partial M_t}{\partial x} + \mu_x = \rho I_0 \frac{\partial^2 \theta}{\partial t^2}$$

Avec $\mu_x$ un couple linéique de torsion appliqué à la poutre.

La condition aux limites en $x = L$ est :

$$\theta(L,t) = \theta_0 \sin(\omega t)$$

Avec $\theta_0$ l'amplitude de la rotation autour de x.

La relation de comportement en torsion est :

$$M_t = GI_0 \frac{\partial \theta}{\partial x}$$

- Déterminer l'équation aux dérivées partielles à résoudre ;
- De quel type d'équation s'agit-il ?
- Discrétiser cette équation à l'aide d'un schéma aux différences finies, en précisant la nature de la discrétisation ;
- Programmer la résolution de l'équation.
- Effectuer des simulations avec les valeurs de $\omega$ suivantes :

$$\omega = \frac{(2n-1)}{2L}\pi \sqrt{\frac{G}{\rho}}$$

- Générer le maillage spécifique permettant d'observer les vibrations de la poutre en 3D (par exemple, surface 2D effectuant des mouvements hors-plan).