

UNIVERSITÉ PARIS 13

N° attribué par la bibliothèque

|_|_|_|_|_|_|_|_|_|_|_|_|_|_|_|

THÈSE

pour obtenir le grade de

DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ PARIS 13

Discipline : Mathématiques appliquées

présentée et soutenue publiquement

par

Paul-Marie BERTHE

le 18 décembre 2013

Titre :

**Méthode de décomposition de domaine de type relaxation d'ondes
optimisée pour l'équation de convection-diffusion instationnaire
discrétisée par volumes finis**

JURY

M. Frédéric NATAF	Directeur de recherche au CNRS, Paris 6	Rapporteur
Mme Florence HUBERT	Maître de conférences, Marseille	Rapporteur
Mme Laurence HALPERN	Professeur d'Université, Paris 13	Examinateur
Mme Juliette RYAN	Ingénieur de recherche ONERA	Examinateur
M. Robert EYMARD	Professeur d'Université, Paris-Est	Examinateur
Mme Caroline JAPHET	Maître de conférences, Paris 13	Co-directeur de thèse
M. Pascal OMNES	Ingénieur de recherche CEA, PAST Paris 13	Directeur de thèse

Remerciements

Je voudrais d'abord remercier le CEA pour son accueil au sein du laboratoire LMSF du service STMF, où j'ai trouvé des conditions idéales pour mener mon travail de thèse.

J'adresse tout particulièrement mes remerciements à Pascal Omnes qui a dirigé ma thèse durant ces quatre années avec une constance sans relâche, m'apportant une aide précieuse grâce à la clarté de ses explications, à la pertinence de ses conseils, à la découverte incessante d'idées nouvelles. Je n'oublierai ni sa fine pédagogie qui m'a amené à comprendre les choses en profondeur, ni sa patience et sa gentillesse qui ont grandement contribué à rendre nos relations franches et agréables.

Ma gratitude va également à Caroline Japhet qui a co-dirigé ce travail avec une application et un soin de chaque instant, une disponibilité entière, une aide bienveillante sans me ménager son soutien par ses encouragements. Elle m'a appris d'une part à prendre du recul par rapport à mon travail et d'autre part à aller toujours plus loin, deux exigences indispensables dans un travail de recherche.

Je remercie vivement M. Frédéric Nataf et Mme Florence Hubert d'avoir accepté d'être les rapporteurs de ma thèse. Leur savoir et leurs judicieuses remarques me serviront à préciser et à améliorer ce travail.

Mes remerciements vont aussi à Mme Laurence Halpern qui m'a initié aux méthodes de décomposition de domaine lors d'un groupe de travail à l'Université Paris 13 et qui me fait l'honneur de participer à mon jury de thèse.

Je remercie également M. Robert Eymard et Mme Juliette Ryan qui ont tous deux bien voulu faire partie de mon jury de thèse.

Je remercie tous les membres du LMSF pour leur sympathie, en particulier Jean-Luc de Palacio, Philippe Roblin, Christian Van Wambeke, Christian Gonella, Jean-Christophe Bremenson, et tout spécialement Pierre Bonneau qui m'a beaucoup aidé pour la partie informatique de ma thèse.

Merci aussi à Anh Ha Le et Minh Binh Tran pour leur gentillesse, ainsi qu'à tous ceux qui m'ont apporté leur aide d'une manière ou d'une autre, au CEA ou à l'Université Paris 13.

Au moment où j'achève cette thèse, je veux dire toute ma reconnaissance à mes chers parents qui m'ont transmis le goût pour les études et m'ont toujours soutenu dans mon travail. Un grand merci également à ma grand-mère bien présente dans ma vie et à mes frères et sœurs qui m'ont aidé et encouragé chacun à leur manière.

Merci enfin à tous mes amis si fidèles à mes côtés pendant les quatre années de mon séjour studieux à Paris.

Table des matières

Introduction	1
I Analyse 1D	15
1 Le schéma monodomaine 1D pour l'équation de convection-diffusion instationnaire	19
1.1 Discrétisation en temps Galerkin Discontinu	20
1.2 Discrétisation en espace	22
1.2.1 Intégration sur la cellule en espace	22
1.2.2 Discrétisation des termes de diffusion	23
1.2.3 Discrétisation des termes de convection	23
1.2.4 Schéma centré	25
1.2.5 Schéma décentré classique à deux points	29
1.2.6 Schéma décentré hybride	30
2 Les schémas multidomaine 1D	39
2.1 Présentation des schémas multidomaine	41
2.1.1 Le schéma centré	41
2.1.2 Le schéma décentré classique	44
2.1.3 Le schéma décentré hybride	51
2.2 Identité de la solution multidomaine et monodomaine	54
3 Algorithme de Schwarz optimisé	59
3.1 L'algorithme de Schwarz	60
3.2 Taux de convergence continu	62
3.2.1 Adaptation pour le schéma décentré 0	66
3.2.2 Adaptation pour le schéma décentré 1	67
3.3 Taux de convergence discret	67
3.4 Résultats numériques	77
3.4.1 Comparaison des différents algorithmes discrets	78
3.4.2 Comparaison de l'optimisation continue et discrète	81
II Analyse 2D	85
4 Le problème discret monodomaine pour l'équation de convection-diffusion	89

4.1	Le schéma DDFV - Notations	89
4.2	Le schéma étendu à l'équation de convection-diffusion	94
4.2.1	Le schéma intérieur	94
4.2.2	Le schéma au bord	96
4.3	Existence et unicité pour le problème discret monodomaine	100
4.3.1	Rappel au niveau continu	101
4.3.2	Au niveau discret	101
5	Le problème discret multidomaine	111
5.1	Rappel de la formulation multidomaine continue	111
5.2	Le schéma DDFV du problème local	112
5.3	Existence et unicité du problème discret multidomaine	118
5.4	Du multidomaine au monodomaine	123
6	L'algorithme de Schwarz optimisé de type relaxation d'ondes pour le schéma DDFV	127
6.1	Rappel de l'algorithme de Schwarz continu	128
6.2	L'algorithme de Schwarz discret pour le problème multidomaine discret	129
6.2.1	Présentation de l'algorithme	129
6.2.2	Convergence de l'algorithme discret de Schwarz de type relaxation d'ondes	130
7	Etude du taux de convergence de l'algorithme	137
7.1	Le taux de convergence continu	138
7.1.1	EDP continue	138
7.1.2	Conditions de transmission	139
7.1.3	Prise en compte de la géométrie dans un cas particulier	142
7.2	Le taux de convergence discret en diffusion pure	144
7.3	Le taux de convergence adapté à un problème dominé par la convection	151
7.3.1	Ecriture du schéma décentré comme un schéma centré	152
7.3.2	Adaptation du taux de convergence	154
8	Résultats numériques	157
8.1	Ordre du schéma monodomaine	158
8.2	Problème de diffusion pure à coefficients discontinus	160
8.2.1	Maillage rectangulaire	161
8.2.2	Maillage triangulaire	163
8.3	Problème de convection-diffusion à coefficients constants	165
8.3.1	Différentes valeurs de convection	166
8.4	Problème de convection-diffusion avec une vitesse tournante	169
8.5	Problème instationnaire de convection-diffusion - cas Pamina	173
	Conclusion	179
	Bibliographie	181

Introduction

Le stockage des déchets radioactifs

Que faire des déchets radioactifs ? Voilà une question à laquelle l'ANDRA (Agence Nationale pour la gestion des déchets radioactifs) travaille depuis sa création en 1979 en cherchant des solutions sûres et efficaces pour l'ensemble des déchets radioactifs.

Ceux-ci peuvent être classés en plusieurs groupes selon leur activité (plus ou moins radioactifs) et leur durée de vie. On distingue cinq catégories de déchets : les déchets de très faible activité (TFA), de faible et moyenne activité à vie courte (FMA-VC), de faible activité à vie longue (FA-VL), de moyenne activité à vie longue (MA-VL, dits aussi déchets B) et ceux de haute activité (HA, dits aussi déchets C) [1]. Les déchets radioactifs sont considérés à vie courte si tous les radionucléides qui les composent ont une période radioactive inférieure ou égale à 31 ans. Sinon, ils sont dits à vie longue. L'origine des déchets radioactifs provient pour une grande part du secteur électronucléaire (59%) (production d'électricité par les centrales nucléaires, traitement des combustibles usés,...) mais aussi des secteurs de la défense (26%), de la recherche (11%), de l'industrie non électronucléaire (3%) et du secteur médical (1%). Les déchets HA sont essentiellement issus des combustibles usés alors que les déchets MA-VL proviennent plutôt des structures métalliques qui entourent le combustible ou des résidus liés au fonctionnement des installations nucléaires. Si les déchets HA et MA-VL ne représentent que 3% du volume de l'ensemble de tous les déchets radioactifs recensés en France, ils représentent en revanche 99% de leur radioactivité. On y trouve par exemple de l'uranium 235 qui met 700 millions d'années à perdre la moitié de sa radioactivité, le césium 135 qui met plus de 2 millions d'années ou le chlore 36 qui met 300 000 ans. Ces déchets sont vitrifiés dans une pâte de verre (HA) ou compactés et cimentés (MA-VL) puis placés par les producteurs de déchets dans des colis cylindriques en acier inoxydable d'une longueur de 1,3 à 1,6 mètre et d'un diamètre de 60 cm (1,7 à 2 tonnes) avant d'être entreposés dans les usines de La Hague (Manche), de Marcoule (Gard) et Cadarache (Bouches-du-Rhône) où ils sont entreposés dans des puits ventilés. En effet, lors de leur production, les colis de déchets radioactifs sont chauds (350°C en moyenne) et ont besoin d'être refroidis (le seuil maximal étant fixé à 100°C environ) avant de pouvoir faire l'objet d'une solution de stockage géologique à long terme [4].

Les études concernant la faisabilité d'un stockage en formation géologique profonde des déchets nucléaires HA et MA-VL, dont le volume représente à ce jour 3 000 m³ et 40 000 m³ respectivement, sont menées depuis la loi de décembre 1991 (loi Bataille). Un stockage géologique est un stockage qui utilise la roche pour confiner la radioactivité présente dans les déchets radioactifs. A la différence de l'entre-

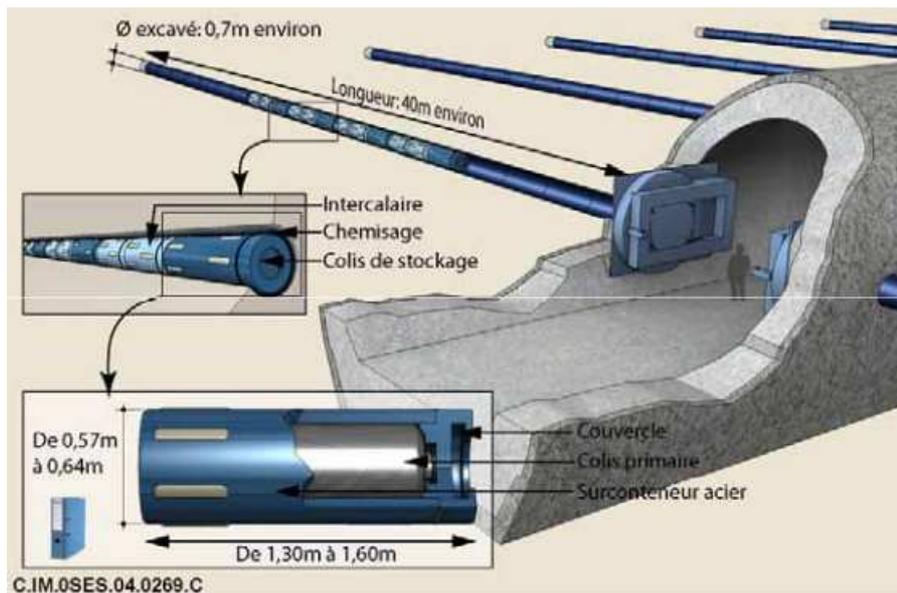


FIGURE 1 – Détails d'une alvéole des déchets HA de la galerie de stockage.

posage des déchets sur leurs lieux de production qui demande une forte surveillance active, la solution de stockage permet de profiter de l'action du milieu géologique sur les déchets. Après des études géologiques menées sur quatre sites favorables à l'implantation de laboratoires souterrains, dans des couches géologiques d'argile ou de granite, la création d'un laboratoire in situ (dans l'argile) en Meuse est décidée en 1999 afin d'étudier la couche d'argile qui devrait recevoir le stockage. Les propriétés de l'argile (faible perméabilité, capacité de rétention, propriétés géochimiques, stabilité tectonique, homogénéité de la couche) en font une barrière naturelle capable d'isoler les déchets de l'environnement. En 2005, l'ANDRA conclut que la couche d'argile du site de Meuse / Haute Marne à Bure est apte à recevoir un tel stockage. L'exploitation est envisagée pour 2025.

Les colis primaires contenant les déchets vitrifiés ou bétonnés seraient placés dans des conteneurs métalliques ou en béton, appelés colis de stockage, eux-mêmes disposés dans des cavités souterraines (alvéoles) creusées à 500 m de profondeur dans les argilites du Callovo-Oxfordien, couche épaisse de 100 m environ, entourée par des couches de calcaire d'une épaisseur de 400 m environ (Figure 1). Des puits verticaux reliant la surface et le niveau de stockage permettraient d'accéder aux alvéoles, de 7 m (resp. 12 m) de diamètre et de 40 m (resp. 250 m) de long pour les déchets C (resp. déchets B). Les installations souterraines du stockage s'étendraient à terme sur près de 15 km², avec 350 km de galeries construites au fur et à mesure sur une période d'un siècle. Les deux zones de stockage pour les deux types de déchets B et C seraient composés de modules, eux-mêmes constitués de quelques centaines d'alvéoles [4] (Figures 2 et 3).

Un tel stockage doit d'abord s'opposer à la circulation d'eau. C'est en effet le facteur principal d'altération des colis et d'entraînement des radionucléides. Pour limiter la circulation d'eau, un système de multi-barrières est conçu : scellement des alvéoles par des barrières ouvragées en béton et des bouchons de bentonite, une argile qui gonfle en présence d'eau et devient particulièrement imperméable (voir

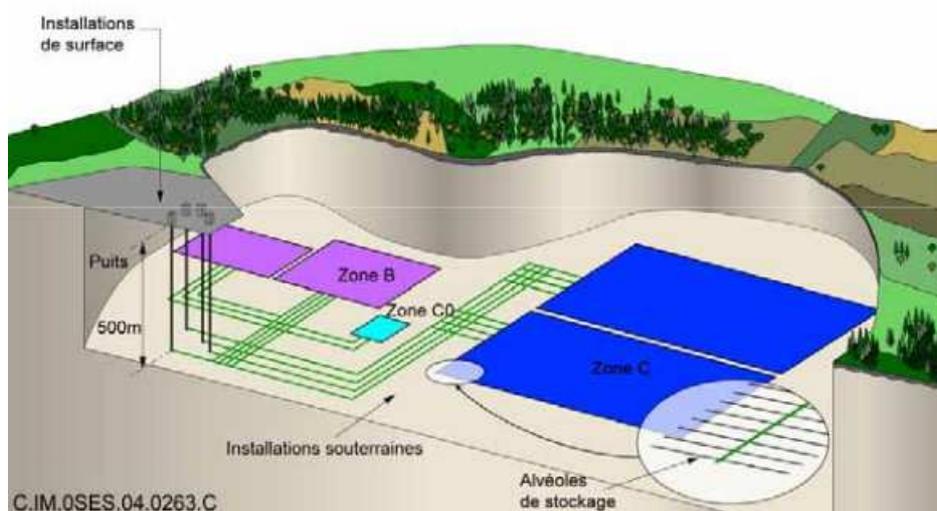


FIGURE 2 – Installations du stockage.

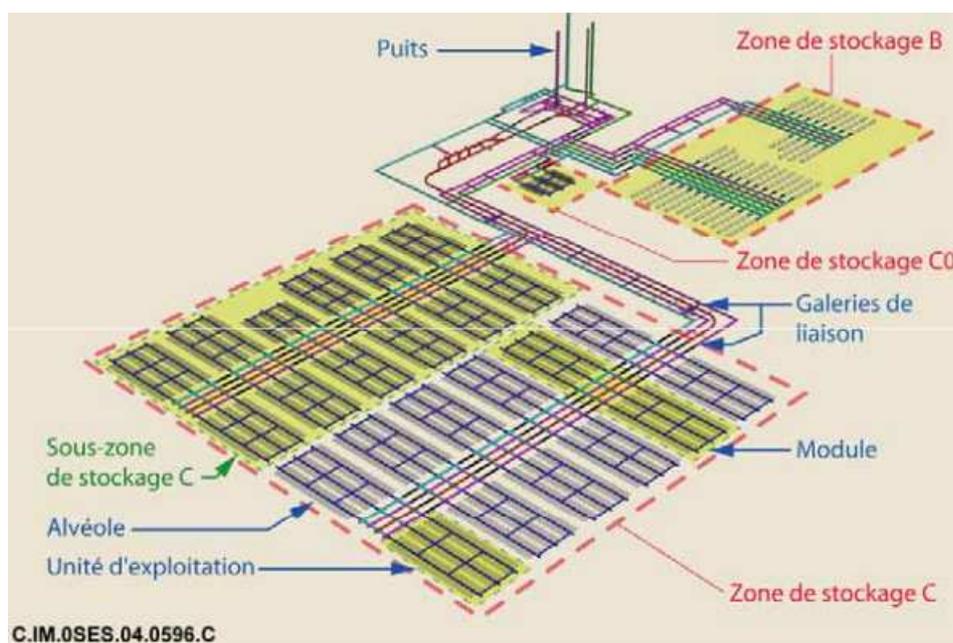


FIGURE 3 – Structure du stockage.

Figure 4). Le stockage a aussi pour fonction de limiter le relâchement des radionucléides. Cela est réalisé en particulier par les conditions physiques et chimiques du conditionnement des déchets : maîtrise de la température, de la corrosion, de l'altération du verre,... Enfin le stockage doit retarder et atténuer la migration des radionucléides qui auraient été relâchés. Les différentes barrières y participent : le verre qui enrobe les déchets HA se dégrade très lentement, les conteneurs en acier des déchets HA retardent l'arrivée d'eau et la dissolution du verre du fait de leur étanchéité pendant environ 1000 ans, le béton permet de fixer certains radionucléides et d'en limiter la dissolution. Une autre difficulté est de préserver les propriétés favorables de l'argile qui pourraient être remises en cause par le creusement des ou-

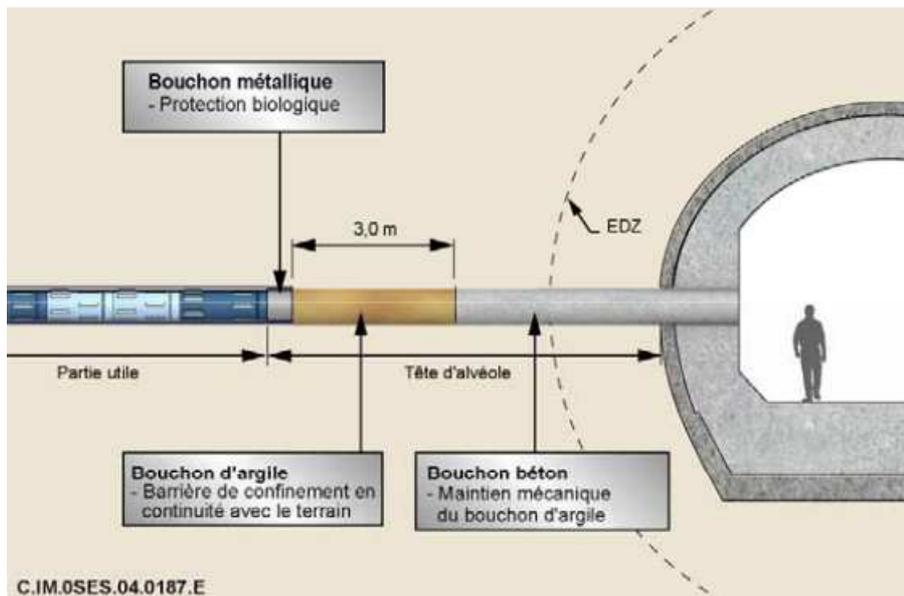


FIGURE 4 – Coupe schématique d'une alvéole avec le système de barrières artificielles.

vrages souterrains du fait des déformations mécaniques ou de la chaleur engendrée par la radioactivité.

Au fil du temps, plusieurs centaines d'années après la fermeture du stockage, l'eau et l'oxygène dégraderont le béton et l'acier des colis renfermant les déchets radioactifs vitrifiés ou bétonnés. Les radionucléides les plus solubles et les plus mobiles commenceront alors à se déplacer dans la roche. Dans l'argile qui est une roche très imperméable où l'eau se déplace très lentement, les radionucléides migreront principalement par diffusion. Ils se disperseront alors progressivement sur une étendue très importante et quelques uns remonteront lentement à la surface en traversant les autres couches géologiques de propriétés très différentes. Vue l'échelle de temps considérée (de plusieurs milliers à plusieurs millions d'années), le transport de radionucléides par convection ne peut toutefois pas être négligé.

C'est sur cette conception du stockage proposée par l'ANDRA [5] qu'a été analysée la sûreté du stockage, notamment son comportement et son évolution dans l'espace et le temps. La prédiction sur de très longues périodes de temps (plusieurs milliers et même millions d'années) nécessite le recours aux simulations numériques, basées sur les données acquises sur le terrain et la connaissance des phénomènes physiques mis en jeu. Le projet PAMINA (*Performance Assessment Methodologies IN Application to guide the development of the safety case*) fait partie des études de sûreté du stockage. Il porte sur le calcul de la migration des radionucléides dans l'argile [47]. Les simulations consistent d'une part à déterminer le moment où les radionucléides contenus dans les colis de déchets seront relâchés et commenceront à migrer dans l'argile et d'autre part à prédire l'évolution de la concentration des radionucléides dans l'argile au cours du temps. Ainsi, l'une des simulations envisagées par le projet PAMINA, qui sera étudiée dans le dernier chapitre de cette thèse, prend en compte une géométrie simplifiée bidimensionnelle, vue comme une coupe d'une géométrie 3D prise dans la hauteur de la couche d'argile (voir [47] page 14). Sont pris en compte trois zones particulières : le colis de déchets situé au centre

de la couche d'argile, la zone (EDZ) endommagée par le creusement des galeries remplies de remblai et enfin l'argile.

Dans les modèles décrivant la physique des phénomènes évoqués ci-dessus, deux phénomènes principaux doivent être considérés : d'une part, l'écoulement d'eau à travers le milieu poreux et d'autre part la migration des radionucléides qui s'échappent du colis dans l'eau et sont diffusés et transportés par l'écoulement. Le premier est modélisé par l'équation de Darcy

$$\mathbf{b} = -\kappa \nabla h \quad (1)$$

donnant la vitesse \mathbf{b} de l'eau dans le milieu poreux de perméabilité κ en fonction de la charge hydraulique $h = \frac{p}{\rho g} + z$ où p est la pression, ρ la masse volumique de l'eau, g l'accélération de la pesanteur et z la hauteur. L'eau étant un fluide incompressible, la conservation de la masse en régime permanent se traduit par $\nabla \cdot \mathbf{b} = 0$. Le phénomène de migration des radionucléides provenant à la fois d'un mécanisme de diffusion-dispersion décrit par la loi de Fick et de la convection, il est modélisé par l'équation de convection-diffusion instationnaire donnée par

$$\omega \frac{\partial c}{\partial t} - \nabla \cdot (\mathbf{K} \nabla c - \mathbf{b}c) = f,$$

où c représente la concentration des radionucléides, ω la porosité, \mathbf{K} le tenseur de diffusion et f un terme source.

Vues la complexité et les dimensions de la structure du stockage, la modélisation mathématique doit subir certaines simplifications (argile supposé homogène, géométrie du colis, restriction du calcul à une partie de la structure en supposant par exemple que tous les colis sont identiques,...) pour envisager des simulations numériques.

Plusieurs difficultés liées à la complexité du problème de stockage décrit ci-dessus demeurent et sont autant de défis pour la simulation numérique. Premièrement, les propriétés hétérogènes des différents matériaux considérés (colis, zone endommagée, argile et les autres couches géologiques) obligent à considérer des paramètres physiques discontinus entre les différentes zones. De plus, la prise en compte de l'anisotropie de l'argile (qui peut être vue comme un matériau composite naturel) intervient dans le tenseur de perméabilité. Deuxièmement, les échelles d'espace et de temps liées à des phénomènes physiques de différentes nature (diffusion, convection) varient beaucoup : à l'échelle du colis, le temps de relâchement des radionucléides se produit sur une courte période de temps tandis que l'échelle du phénomène de diffusion a lieu sur une surface très étendue et sur un temps très long. Ainsi la prise en compte simultanée de ces phénomènes requiert de pouvoir utiliser différentes discrétisations suivant les zones de calcul. Troisièmement, la complexité de la géométrie du stockage se traduira par l'utilisation de maillages non structurés n'excluant pas les mailles déformées et raffinées localement de façon non conforme. Enfin, la modélisation sur des grandes échelles d'espace et de temps ainsi que la précision du calcul attendu sont deux facteurs augmentant fortement le coût de calcul. Les difficultés évoquées représentent des contraintes par rapport au choix des schémas numériques et poussent en faveur d'une méthode de décomposition de domaine, afin de profiter des développements de la puissance des machines et des atouts du calcul parallèle.

Nous supposons le calcul du flux d'eau (champ \mathbf{b} dont il est question ci-dessus en (1)) en milieu poreux donné par une résolution antérieure de l'équation de Darcy. Le cadre de cette thèse est celui de l'étude de l'équation de convection-diffusion en régime instationnaire en milieu poreux. Ce modèle est suffisamment général pour s'étendre à de nombreuses autres applications physiques (simulation de réservoir, écoulements, transferts de chaleur,...). Deux aspects sont donc à considérer : d'une part le choix des schémas en espace et en temps capables de traiter les différentes difficultés évoquées ci-dessus et d'autre part la mise en oeuvre de la méthode de décomposition de domaine choisie dans ce travail pour traiter le problème de grande taille.

Présentation des schémas considérés

Le schéma en temps choisi devant permettre de prendre en compte des pas de temps différents selon différentes zones du maillage, nous avons retenu le schéma Galerkin Discontinu qui repose sur l'approximation de la solution par un polynôme discontinu par morceaux d'ordre quelconque définissant l'ordre du schéma. Dans la suite, nous avons considéré l'ordre 0, qui s'écrit alors comme un schéma d'Euler implicite, ou l'ordre 1. Ce schéma très souple peut s'écrire sous une formulation variationnelle et une analyse d'erreur, quelque soit l'ordre d'approximation du polynôme, est connue [67, 94]. D'autre part, une analyse d'erreur a posteriori pour ce schéma est donnée dans [78], ce qui permet d'adapter la discrétisation du maillage temporel selon les zones du domaine de calcul. Il est d'autant plus recommandé dans notre cadre qu'il s'adapte idéalement à la décomposition de domaine comme nous le verrons ci-dessous.

Dans le cadre des calculs de sûreté pour le problème du stockage, C. Le Potier revient dans [87, 11] sur les motivations qui ont poussé le CEA, au début des années 2 000, au choix des méthodes de volumes finis. Si dans un premier temps les méthodes d'éléments finis de Lagrange avaient été retenues, c'est d'une part parce qu'elles étaient les plus répandues mais aussi parce qu'elles étaient considérées comme ayant la propriété de bien approcher le flux diffusif sur des maillages de simplexes, même pour un tenseur de diffusion anisotrope. En revanche, l'approximation du terme de convection peut provoquer un problème de monotonie, ce qui peut entraîner des oscillations numériques lorsque la convection est dominante. De la même manière, il était constaté dans [87] que les méthodes d'éléments finis mixtes hybrides (EFMH) qui donnent une approximation de la solution, du flux et du gradient de la solution, étaient généralement très précises pour les problèmes elliptiques hétérogènes, par rapport aux méthodes de volumes finis connues il y a une dizaine d'années. Beaucoup d'efforts ont été entrepris depuis pour améliorer la précision et la robustesse des méthodes de volumes finis. Déjà quelques années après, la balance penchait plus du côté des méthodes de volumes finis, notamment sur des cas anisotropes. Dans [88], on constate en effet que si pour des problèmes isotropes les méthodes d'éléments finis mixtes hybrides sont plus précises pour un maillage donné que la méthode de volumes finis présentée dans [88], c'est l'inverse qui est vrai lorsque l'anisotropie augmente. Les méthodes EFMH peuvent recéler aussi des problèmes de stabilité et de monotonie pour l'approximation du terme de convection, même sur des maillages réguliers. Le manque de monotonie peut être

résolu, par des techniques de condensation de masse (*mass lumping*) au prix de fortes restrictions sur le maillage. Les méthodes de volumes finis sont connues au contraire pour être adaptées à l'approximation des termes de convection, la stabilité étant assurée par un schéma décentré amont. Le *benchmark* sur les méthodes de volumes finis [57] montre qu'aujourd'hui, il existe des méthodes de volumes finis plus précises (surtout pour le calcul des flux) que des méthodes d'éléments finis P_1 Lagrange ou d'éléments finis mixtes hybrides, voir d'éléments finis P_2 Lagrange, en notant que la précision est mesurée par rapport à la taille du maillage ou au nombre d'inconnues ou encore au nombre de termes non nuls dans la matrice.

Les méthodes de volumes finis pour les équations elliptiques ou paraboliques ont été largement étudiées depuis une quinzaine d'années : ainsi de nombreuses méthodes émergent à ce jour. Dans la suite, nous allons en faire un rapide survol. Une synthèse récente peut être trouvée dans [30]. Notons que la méthode des volumes finis est maintenant largement utilisée dans l'industrie pour les équations de mécanique des fluides du fait de l'intuition physique sous-jacente à la construction des schémas volumes finis (bilan des flux et conservation des flux), et de la simplicité de son implémentation et d'un coût de calcul en général réduit tout au moins pour les versions les plus simples.

La méthode des volumes finis repose sur l'intégration de l'équation continue sur les cellules d'un maillage. Par la formule de Gauss, les intégrales sur les cellules sont transformées en des intégrales de flux sur les arêtes. Pour le terme de diffusion $\nabla \cdot (\mathbf{K} \nabla c)$ défini sur le domaine Ω , il s'agit de donner une approximation des flux diffusifs à travers les arêtes du maillage (de normale notée \mathbf{n}), définis par $\nabla c \cdot (\mathbf{K}^T \mathbf{n})$. Différentes classes de méthodes sont usuellement définies : celles qui sont centrées sur les cellules (*cell centered*) du maillage initial (dit primal) avec une inconnue par cellule, celles qui sont centrées sur les sommets (*vertex centered*) avec une inconnue sur chaque cellule duale centrée sur les sommets du maillage initial. D'autres méthodes combinent ces deux classes de méthodes en gardant des inconnues aux centres et aux sommets des éléments et en considérant les deux maillages primal et dual. D'autres enfin font appel à des inconnues par cellules et sur les arêtes.

Déterminer un schéma volumes finis pour le problème de diffusion revient à approcher le flux diffusif $\nabla c \cdot (\mathbf{K}^T \mathbf{n})$ sur les arêtes des cellules du maillage considéré (primal, dual ou les deux). Si le maillage est tel que $\mathbf{K}^T \mathbf{n}$ est colinéaire au vecteur reliant les deux centres des cellules adjacentes partageant l'arête sur laquelle est défini le flux – correspondant au cas d'un maillage orthogonal si $\mathbf{K} = \mathbf{Id}$ – alors le flux peut être approché simplement par une différence finie à deux points. Puisque cette condition de K-orthogonalité impose une contrainte très forte sur les maillages (en particulier les maillages non conformes ne peuvent pas la vérifier), ce schéma n'est pas adapté pour autant de complexité. Sur des maillages généraux, la reconstruction du gradient complet a alors été proposée en utilisant de nouvelles inconnues. C'est le cas des schémas multi-points comme par exemple le schéma en O [2] qui calcule des flux par demi-arêtes. Pour les calculer, on rassemble les demi-arêtes que partagent un même sommet en une zone d'interaction qui passe par les milieux des arêtes et les centres des cellules liées au sommet. Les gradients sont calculés dans chacun des quadrangles formés par le sommet, le centre d'un triangle et les deux milieux des arêtes de ce triangle issues du sommet, en fonction de l'inconnue principale au centre du triangle et d'inconnues auxiliaires aux milieux des arêtes. Celles-ci sont

éliminées localement en écrivant la conservation des flux à travers les demi-arêtes. Finalement, cette procédure permet d'écrire le flux sur les demi-arêtes de la zone d'interaction comme une combinaison linéaire des inconnues principales aux centres des cellules. Ces schémas ne sont pas toujours monotones ou coercifs. Pour satisfaire la propriété de monotonie, C. Le Potier a proposé un schéma multi-points pour un opérateur de diffusion fortement anisotrope sur des maillages quelconques en définissant le gradient discret de manière non linéaire [89]. Concernant la reconstruction du gradient, les schémas diamants [23, 24] utilisent des inconnues supplémentaires aux sommets et définissent un gradient discret sur les mailles appelées diamants associées à chacune des arêtes du maillage. Chaque cellule diamant est un quadrilatère construit à partir des deux sommets de l'arête et des deux centres des cellules adjacentes à l'arête considérée. Les inconnues aux sommets sont interpolées à partir des inconnues aux centres des cellules voisines. L'avantage d'une telle construction est qu'elle est valable sur tout type de maillages. En revanche, l'analyse de convergence de ce schéma (essentiellement liée à l'analyse de sa coercivité) n'est donnée que sous des hypothèses géométriques très contraignantes. La matrice associée au schéma est non symétrique et le système linéaire plus coûteux à résoudre. D'autres schémas, comme les volumes finis mixtes [31], les volumes finis hybrides [34], les schémas mimétiques [16], le schéma SUSHI (*Scheme Using Stabilization and Hybrid Interfaces*) [35, 9] rassemblés en une même analyse dans [32] et désignés par HMM (*Hybrid Mimetic Mixed*), introduisent des inconnues sur les arêtes qui ne sont pas éliminées et qui participent à rendre les schémas inconditionnellement coercifs via un terme de stabilisation. En revanche, la synthèse [30] indique que le calcul des flux étant assez non local puisqu'il dépend de toutes les inconnues sur les arêtes de la maille, cela rend les méthodes HMM moins précises sur des maillages grossiers. Enfin, la propriété de monotonie n'est pas toujours vérifiée. Une autre idée est donnée par les schémas DDFV [27, 29, 58, 59] qui s'inspirent des schémas diamants, en utilisant les inconnues aux centres et aux sommets pour la discrétisation du gradient défini sur les mailles diamants. Mais à la différence de [23, 24], les inconnues aux sommets sont conservées en plus des inconnues aux centres des mailles. Pour avoir autant d'équations que d'inconnues, l'équation continue est intégrée sur le maillage primal et sur le maillage dual centré sur les sommets. Le gradient complet est reconstruit à l'aide d'une différence finie dans la direction donnée par l'arête primale, et dans la direction donnée par la droite rejoignant les deux centres des cellules adjacentes à l'arête. Dans le cas où \mathbf{K} est discontinu, des inconnues auxiliaires sont introduites au milieu des arêtes primales, de telle sorte que la maille diamant est découpée en deux cellules demi-diamants. Le gradient est alors calculé sur chaque cellule demi-diamant et l'inconnue auxiliaire introduite au milieu de l'arête primale est déterminée en écrivant la conservation du flux. Ce schéma présente de nombreux avantages [29] : il est adapté, comme les schémas diamants, pour tout type de maillage même très déformé, dégénéré et hautement non conforme, il est toujours coercif parce que les opérateurs discrets du gradient et de la divergence définis vérifient une formule de Green discrète, (d'où son nom *Discrete Duality Finite Volume* en référence à cette propriété de dualité discrète) et le calcul des gradients est plus local que celui des schémas HMM. Sur des maillages K-orthogonaux, il se découple en deux schémas dont les flux sont à deux points, sur les deux maillages primal et dual. Toutefois sur certains cas-tests [57], il est constaté que le schéma

n'est pas monotone. On pourrait retenir contre ce schéma sa lourdeur d'écriture, mais la complexité est le fait des notations, non du schéma dont la matrice et le second membre s'assemblent naturellement en parcourant les arêtes du maillage et dont des extensions 3D ont déjà été proposées [6, 20, 22]. Les atouts de ce schéma, tout particulièrement la propriété de coercivité sur tous maillages quelconques et non conformes et la possibilité de traiter des tenseurs anisotropes et hétérogènes correspondent aux critères requis par le problème de stockage. Ce schéma a été étendu à des problèmes de diffusion non linéaires [8, 14, 20], d'électro-cardiologie [7, 22], de dérive-diffusion et de transport d'énergie [18], d'électrostatique et magnéto-statique [28] et aux écoulements de Stokes [26, 69, 70, 71]. Il a aussi été étendu aux équations de convection-diffusion [21], version stationnaire du problème auquel nous nous intéressons ici. Dans [21], la prise en compte du terme de convection est soit considérée à l'ordre 1 par un schéma amont standard, soit à l'ordre 2 par une reconstruction polynomiale linéaire de la solution sur la cellule dans laquelle le gradient est calculé comme une moyenne des gradients DDFV sur les arêtes de la cellule considérée. Le flux convectif sur l'interface est alors reconstruit à partir des inconnues aux centres et de la pente du gradient. Bien que [21] n'aborde pas les problèmes de monotonie, comme la méthode DDFV ne respecte pas toujours le principe du maximum, il est probable que cette méthode ne respecte pas non plus un principe du maximum en dehors de toute adaptation non linéaire des pentes. Dans le cadre des méthodes HMM (*Hybrid Mimetic Mixed*), où une inconnue est introduite sur l'arête, les résultats proposés par [25] utilisent ceux de [32] pour l'extension au problème de convection-diffusion. Plusieurs discrétisations du flux convectif sont proposées : les schémas centré et décentré amont bien connus, mais aussi un schéma décentré utilisant l'inconnue hybride sur l'arête. Ce dernier s'adaptant bien au cadre de la décomposition de domaine, que nous allons préciser dans la suite, nous retiendrons l'idée de cette discrétisation du flux convectif à la suite de [50] en l'appliquant au schéma DDFV sur le maillage primal.

Outre le choix du schéma numérique en temps (Galerkin Discontinu) et en espace (DDFV) adapté à la modélisation du stockage des déchets, nous prendrons en compte la difficulté liée au problème de grande taille au travers de la méthode de décomposition de domaine de Schwarz dont nous rappelons brièvement la genèse.

La méthode de décomposition de domaine

A l'origine, les méthodes de décomposition de domaine ont été utilisées pour résoudre des problèmes de grande taille, du fait des dimensions importantes du domaine de calcul, ou de la précision requise pour la résolution du système linéaire associé à la discrétisation d'une EDP. D'une part, les méthodes directes sont souvent trop coûteuses pour résoudre le système linéaire, d'autre part un seul ordinateur ne permet pas toujours de stocker la matrice. Avec l'émergence des calculateurs multi-processeurs et le calcul hautement parallèle, les méthodes de décomposition de domaine permettent alors de décomposer le système linéaire initial en sous-systèmes linéaires plus petits pouvant être résolus par un seul processeur. Selon un algorithme itératif, les différents processeurs chargés de résoudre les problèmes locaux échangent, aux interfaces entre les sous-problèmes, les informations néces-

saires pour converger vers la solution globale. Ces méthodes se sont développées et ont été étendues à d'autres besoins. En effet, dans certaines applications, la modélisation recouvre différents milieux physiques ayant des propriétés très différentes (c'est le cas de la modélisation du stockage où l'on doit prendre en compte différents matériaux de propriétés hétérogènes) ou considère différents modèles selon des zones différentes (par exemple la modélisation du climat avec plusieurs modèles climatiques, ou encore le couplage océan atmosphère). Dans ces cas de problèmes hétérogènes ou de couplage de modèles, les échelles en espace et en temps diffèrent et il est alors souhaitable d'utiliser des discrétisations différentes en espace et en temps selon les sous-domaines. Les méthodes de décomposition de domaine sont alors particulièrement adaptées, puisqu'elles découpent les problèmes en différents sous-domaines. On entrevoit cependant que la difficulté consistera dans la manière de transmettre les informations entre les sous-domaines.

L'origine des méthodes de décomposition de domaine remonte à H.A. Schwarz, qui a introduit en 1870 [93] une méthode itérative, connue aujourd'hui sous le nom de méthode de Schwarz multiplicative (ou *Schwarz alternating method*), pour prouver l'existence de fonctions harmoniques dans des domaines irréguliers (il prend l'exemple d'un domaine composé d'un rectangle et d'un cercle qui s'intersectent). L'idée n'a été reprise que plus d'un siècle plus tard, au moment du développement dans les années 1980 des architectures informatiques parallèles et des supercalculateurs multiprocesseurs. Les méthodes de décomposition de domaine, bien adaptées aux calculs massivement parallèles, sont alors devenues un nouveau champ d'étude de l'analyse numérique pour la résolution des équations aux dérivées partielles linéaires et non linéaires (voir [49, 12, 91, 95, 80] et les références qui y sont incluses). En particulier, P.L. Lions [75, 76] propose à la fin des années 1980 une version parallèle de l'algorithme de Schwarz, avec recouvrement des sous-domaines où le raccordement de la solution est assuré par la transmission d'une donnée de Dirichlet. Cet algorithme a néanmoins deux inconvénients : d'une part l'hypothèse de recouvrement des sous-domaines est nécessaire pour la convergence et d'autre part la convergence est d'autant plus lente que la zone de recouvrement est petite. Pour remédier à cet inconvénient, il propose en 1990 une variante [77] pour des domaines qui ne se recouvrent pas, basée sur des conditions de transmission de type Robin. Ces conditions sont le point clé de nombreux travaux et nous utiliserons ce type de conditions dans cette thèse. P.L. Lions note qu'il est possible de remplacer les constantes intervenant dans la condition de Robin par des fonctions sur l'interface ou des opérateurs locaux et même non locaux. La question était donc de déterminer les meilleurs opérateurs qui rendraient l'algorithme de Schwarz optimal. Les opérateurs non locaux se prêtant difficilement au calcul numérique, des approximations utilisant des développements de Taylor ont tout d'abord été proposées ([19] pour une petite diffusion dans le cas d'un problème de convection-diffusion dominée par la convection, puis [82, 83] pour une approximation basses fréquences). La première utilisation de conditions optimisées a été introduite dans [63, 64, 65]. Celles-ci sont telles que le ou les paramètres des conditions de transmission de type Robin (ou plus généralement de type Ventcell) sont choisis de façon à optimiser le taux de convergence de l'algorithme. Une analyse et une synthèse de ces conditions sont données dans [37]. Ces conditions dites optimisées donnent leur nom aux méthodes dites de Schwarz optimisées. Ces méthodes convergent nécessairement plus vite que

les méthodes de Schwarz classiques, pour un même coût par itération.

Pour les problèmes paraboliques plusieurs approches sont possibles.

- Une première consiste à discrétiser en temps l'équation à l'aide d'un schéma implicite puis d'utiliser à chaque pas de temps la décomposition de domaine en espace (voir par exemple [17]). L'inconvénient majeur de cette démarche est que les pas de temps doivent être les mêmes dans les différents sous-domaines. Elle est de plus coûteuse puisqu'elle nécessite d'échanger très souvent une petite quantité d'informations.
- Une seconde approche consiste à discrétiser l'équation en espace puis à résoudre le système d'équations différentielles ordinaires (en temps) obtenu par une méthode de type relaxation d'ondes (voir par exemple [62]).
- Une troisième approche, dite décomposition de domaine espace-temps, consiste à résoudre indépendamment les sous-problèmes en espace et en temps dans les sous-domaines puis à itérer sur les valeurs définies sur les interfaces espace-temps entre les sous-domaines pour raccorder la solution entre les sous-domaines adjacents. La force de cette approche globale en temps est que différentes discrétisations en espace et en temps peuvent être choisies dans les différents sous-domaines, les données étant transférées dans ce cas sur l'interface espace-temps, à l'aide de projections entre les différentes grilles espace-temps. Cette approche a été introduite dans [46, 48]. Cet algorithme convergeant lentement, une version optimisée, basée sur les idées des méthodes de Schwarz optimisées [64, 65, 37] a été proposée dans [41, 42, 79, 10]. Cette méthode est dite méthode de relaxation d'ondes optimisée ou *Optimized Schwarz waveform relaxation method* (OSWR). Elle est bien adaptée pour la résolution des problèmes en milieu poreux décrits ci-dessus, c'est donc cette approche que nous choisirons dans cette thèse.

Considérons plus en détail l'algorithme OSWR au niveau continu : trouver u tel que

$$\begin{cases} \mathcal{L}u = f & \text{dans } \Omega \times (0, T), \\ u(\cdot, 0) = u_0 & \text{dans } \Omega, \\ \mathcal{C}u = g & \text{sur } \partial\Omega \times (0, T), \end{cases} \quad (2)$$

où \mathcal{L} et \mathcal{C} sont des opérateurs aux dérivées partielles. Soient Ω_1 et Ω_2 deux sous-domaines sans recouvrement formant une partition de Ω , séparés par une interface Γ (on considère deux sous-domaines pour simplifier mais la méthode se généralise à plusieurs sous-domaines) et soit \mathbf{n}_i la normale extérieure à Ω_i , $i = 1, 2$. Soit \mathcal{B}_i , $i = 1, 2$ l'opérateur de transmission choisi sur l'interface espace-temps $\Gamma \times (0, T)$. Une méthode de type OSWR pour le problème (2) est sa reformulation : trouver $(u_i)_{i=1,2}$ tel que

$$\begin{cases} \mathcal{L}u_1 = f & \text{dans } \Omega_1 \times (0, T) \\ u_1(\cdot, 0) = u_0|_{\Omega_1} & \text{dans } \Omega_1 \\ \mathcal{C}u_1 = g & \text{sur } \partial\Omega_1 \times (0, T) \\ \mathcal{B}_1 u_1 = \mathcal{B}_1 u_2 & \text{sur } \Gamma \times (0, T) \end{cases} \quad , \quad \begin{cases} \mathcal{L}u_2 = f & \text{dans } \Omega_2 \times (0, T) \\ u_2(\cdot, 0) = u_0|_{\Omega_2} & \text{dans } \Omega_2 \\ \mathcal{C}u_2 = g & \text{sur } \partial\Omega_2 \times (0, T) \\ \mathcal{B}_2 u_2 = \mathcal{B}_2 u_1 & \text{sur } \Gamma \times (0, T) \end{cases}$$

qui conduit à l'algorithme itératif suivant :

$$\left\{ \begin{array}{ll} \mathcal{L}u_1^{(\ell+1)} = f & \text{dans } \Omega_1 \times (0, T) \\ u_1^{(\ell+1)}(\cdot, 0) = u_{0|\Omega_1} & \text{dans } \Omega_1 \\ \mathcal{C}u_1^{(\ell+1)} = g & \text{sur } \partial\Omega_1 \times (0, T) \\ \mathcal{B}_1u_1^{(\ell+1)} = \mathcal{B}_1u_2^{(\ell)} & \text{sur } \Gamma \times (0, T) \end{array} \right. , \quad \left\{ \begin{array}{ll} \mathcal{L}u_2^{(\ell+1)} = f & \text{dans } \Omega_2 \times (0, T) \\ u_2^{(\ell+1)}(\cdot, 0) = u_{0|\Omega_2} & \text{dans } \Omega_2 \\ \mathcal{C}u_2^{(\ell+1)} = g & \text{sur } \partial\Omega_2 \times (0, T) \\ \mathcal{B}_2u_2^{(\ell+1)} = \mathcal{B}_2u_1^{(\ell)} & \text{sur } \Gamma \times (0, T) \end{array} \right. ,$$

avec $\mathcal{B}_1u_2^{(0)} = g_1$ et $\mathcal{B}_2u_1^{(0)} = g_2$ donnés.

Du choix des opérateurs d'interface \mathcal{B}_1 et \mathcal{B}_2 dépend la vitesse de convergence de l'algorithme. Dans l'algorithme proposé par Lions dans [77], avec \mathcal{L} l'opérateur du laplacien, les opérateurs de Robin sont de la forme suivante : $\mathcal{B}_i = \frac{\partial}{\partial \mathbf{n}_i} + \alpha_i$, où $\alpha_i > 0$, $i = 1, 2$ donnés. Un opérateur de type Ventcell [19, 65, 10] (par exemple avec $\mathcal{L} = \frac{\partial}{\partial t} - \Delta$) est de la forme $\mathcal{B}_i = \frac{\partial}{\partial \mathbf{n}_i} + \alpha_i + \beta_i(\frac{\partial}{\partial t} - \Delta_{\tau_i})$, où Δ_{τ_i} est l'opérateur de Laplace-Beltrami sur Γ , et $\alpha_i > 0$, $\beta_i > 0$, $i = 1, 2$ donnés. Ces conditions peuvent être réécrites de manière plus générale comme $\mathcal{B}_i = \frac{\partial}{\partial \mathbf{n}_i} + \Lambda_i$ où les Λ_i , $i = 1, 2$, sont des opérateurs aux dérivées partielles le long de l'interface à déterminer de façon judicieuse pour optimiser la vitesse de convergence de l'algorithme (i.e. on optimisera le taux de convergence sur les paramètres intervenant dans Λ_i ; par exemple pour un opérateur de Robin, on optimisera le taux de convergence sur α_i , $i = 1, 2$).

Cette méthode OSWR a été introduite pour les problèmes paraboliques et hyperboliques dans [41], puis étendue aux problèmes d'advection-diffusion à coefficients constants dans [79]. L'optimisation des paramètres intervenant dans les conditions de Robin ou Ventcell a été étudiée dans [39, 79, 10] et pour des problèmes à coefficients discontinus dans [40, 54, 73, 66]. L'extension à des grilles non conformes en temps est introduite dans [13, 40]. Dans [13, 53], une méthode de Galerkin Discontinue (DG) pour la discrétisation en temps est proposée pour pouvoir traiter des grilles non conformes en temps, en dimension un, pour résoudre des problèmes à coefficients discontinus. L'extension à des problèmes hétérogènes en dimension supérieure, avec une analyse de la convergence utilisant des estimations a priori, ainsi que l'utilisation de grilles non conformes en temps et une analyse de l'estimation d'erreur en temps est proposée dans [55, 56]. L'analyse rigoureuse du schéma DG a été donnée quelque soit le degré de l'approximation et avec différents pas de temps dans les différents sous-domaines (voir [55, 56]). Les projections entre les différentes grilles espace-temps peuvent être effectuées à l'aide d'un algorithme de complexité optimale [45, 44]. Une application aux problèmes en milieux poreux est proposée dans [54, 66] et dans [60, 61] dans le cas d'éléments finis mixtes. Une autre approche en volumes finis avec des pas de temps locaux dans les sous-domaines est proposée dans [36].

Dans le cadre des méthodes de décomposition de domaine en volumes finis, une méthode est proposée dans [3] pour résoudre des problèmes de diffusion et d'advection-diffusion stationnaires. Cette méthode permet de discrétiser en volumes finis des conditions de transmission de type Robin avec des maillages non-conformes à l'interface entre les sous-domaines. Une autre approche est donnée dans [92] pour un problème de diffusion stationnaire à coefficients fortement discontinus. Pour

l'extension de l'approche multidomaine à un schéma de type DDFV, une première méthode est proposée dans [68, 15] pour un problème de diffusion stationnaire, avec des conditions de Robin. Une analyse du taux de convergence est donnée dans [43]. Dans [52], une approche multidomaine en volumes finis avec des conditions de transmission de Ventcell est proposée, pour résoudre un problème de convection-diffusion stationnaire. Dans cette approche, une discrétisation avec un flux à deux points à l'intérieur du domaine est utilisée, avec une adaptation à l'interface pour traiter des maillages non-conformes. Dans cette thèse nous proposons un schéma volumes finis différent pour résoudre l'équation d'avection-diffusion instationnaire, permettant de traiter des maillages beaucoup plus généraux.

Plan de la thèse

Rappelons que nous cherchons à résoudre l'équation de convection-diffusion instationnaire en deux dimensions d'espace avec un tenseur de diffusion hétérogène, des pas de temps et d'espace éventuellement non conformes et des maillages quelconques pouvant être déformés. Nous avons choisi de travailler avec un schéma en temps de type Galerkin Discontinu s'adaptant bien au cadre de la décomposition de domaine et avec le schéma DDFV qui a l'avantage de pouvoir être utilisé sur des maillages quelconques et non conformes. Le schéma DDFV a été étudié pour le problème de diffusion stationnaire dans le cadre de la décomposition de domaine avec les méthodes de Schwarz optimisées dans [68, 43, 52]. Il reste alors à proposer une discrétisation du terme de convection telle qu'elle soit adaptée à une écriture locale à un sous-domaine.

Dans la première partie de ce document, nous nous plaçons en une dimension d'espace. Cette partie est une partie préparatoire, qui a pour but d'identifier d'éventuelles difficultés pouvant se présenter en deux dimensions d'espace. La principale difficulté rencontrée est liée à la discrétisation amont du flux convectif : dans un contexte de décomposition de domaine où le schéma doit être local au sous-domaine, le décentrage du terme de convection doit être redéfini à l'interface entre les sous-domaines de telle sorte que le schéma défini sur le domaine global (dit schéma monodomaine) soit équivalent au schéma défini sur chacun des sous-domaines complété des conditions de transmission (dit schéma multidomaine). Une autre idée est de reprendre la discrétisation hybride du flux convectif donnée par [25] et utilisée par [50] en décomposition de domaine. La formulation multidomaine obtenue s'obtient naturellement grâce à l'inconnue supplémentaire sur l'interface. Des résultats de comparaison de la vitesse de convergence des différents schémas sont donnés en fin de première partie.

Dans la deuxième partie de ce travail, nous étendons le schéma DDFV au problème de convection-diffusion instationnaire en deux dimensions d'espace. La discrétisation du terme de convection est définie différemment sur le maillage primal et sur le maillage dual. Sur le primal, nous avons choisi le schéma décentré hybride utilisé par [50] à cause de son écriture naturellement locale. Sur le dual, nous avons considéré un schéma décentré standard, qui ne pose pas de problème vis-à-vis de la décomposition de domaine car son écriture est toujours locale au sous-domaine (parce que les noeuds sont partagés par les deux sous-domaines). Le caractère bien posé de ce nouveau schéma est alors démontré. Nous avons défini ensuite un nou-

veau schéma multidomaine (comprenant la discrétisation des conditions d'interface), dont nous montrons le caractère bien posé puis l'équivalence avec le schéma monodomaine proposé. En s'inspirant des grandes lignes de la preuve donnée par [56] où l'algorithme de Schwarz est appliqué pour une équation de convection-diffusion semi-discrète en temps avec un schéma de Galerkin Discontinu, nous donnons pour ce nouveau schéma la preuve de convergence de l'algorithme de Schwarz. Nous rappelons le calcul du taux de convergence continu permettant de déterminer les paramètres optimisés et nous proposons d'une part un taux discret dans le cas particulier du problème de diffusion instationnaire et une adaptation du taux continu qui s'avère utile lorsque le phénomène de convection est dominant. Nous donnons dans un dernier chapitre plusieurs validations du schéma monodomaine et du schéma multidomaine et nous terminons par la présentation du cas-test PAMINA introduit ci-dessus.

Principales contributions de la thèse

Les principales contributions de cette thèse sont l'extension du schéma volumes finis DDFV à l'équation de convection-diffusion instationnaire ainsi que l'extension et l'analyse de la méthode de décomposition de domaine espace-temps à ce nouveau schéma. La méthode multidomaine est basée sur l'utilisation de conditions de transmission de Robin. L'une des difficultés est la discrétisation de ce type de conditions avec un schéma volumes finis permettant d'une part de traiter des maillages très généraux, et d'autre part de préserver une discrétisation naturelle multidomaine de la condition de Robin (c'est-à-dire une discrétisation du terme d'advection à la fois simple et qui reste locale au sous-domaine). Le schéma proposé dans ce travail, basé sur une approche volumes finis "hybride" et DDFV, permet de coupler de façon naturelle les conditions de Robin en multidomaine sur des maillages quelconques. Un algorithme itératif est proposé et analysé pour résoudre ce schéma multidomaine discret. Une autre difficulté est de trouver les bons paramètres de Robin permettant une convergence rapide de cet algorithme multidomaine : nous avons comparé des approches continue et discrète d'optimisation de ce paramètre. Nous avons proposé une approche prenant en compte la diffusion numérique du schéma, qui permet d'améliorer nettement la convergence dans le cas d'une convection très fortement dominante.

Première partie

Analyse 1D

L'objet de cette thèse réside principalement dans l'écriture et l'analyse d'un schéma décentré de type volumes finis à dualité discrète (DDFV) pour l'équation de convection-diffusion instationnaire, adaptable à la décomposition de domaines, nous présentons dans cette partie plusieurs choix possibles de schémas décentrés en une dimension. A l'issue de cette partie, nous retiendrons un de ces schémas pour l'analyse en deux dimensions.

Soit le problème suivant de convection-diffusion-réaction instationnaire en une dimension à résoudre :

$$\omega(x)\partial_t c - \partial_x(\nu(x)\partial c - bc) + \eta c = f \quad \text{dans } \Omega \times (0, T), \quad (3)$$

avec une condition initiale et des conditions limites à définir. Dans (3), les coefficients ω , b , ν , et η désignent successivement la porosité, la convection, la diffusion et la réaction. Dans cette partie 1D, b est supposé constant.

L'approximation de l'équation (3) sera donnée par un schéma en temps de type Galerkin Discontinu et en espace par des schémas de type volumes finis centrés sur les mailles. Dans le premier chapitre, nous rappelons le schéma Galerkin Discontinu à l'ordre 0 et 1, ainsi que différentes discrétisations possibles pour la convection, donnant lieu aux schéma centré, au schéma décentré classique et au schéma décentré hybride, pour lesquelles la propriété fondamentale d'existence et d'unicité de la solution peut être montrée.

Pour les problèmes de grande taille ou dans le cas de coefficients très hétérogènes, nous avons vu qu'il était souvent souhaitable de se placer dans le cadre de la décomposition de domaines. Dans ce cas, le domaine global Ω est décomposé en plusieurs sous-domaines et le problème monodomaine doit alors être remplacé par un système équivalent de sous-problèmes définis sur chacun des sous-domaines et par des conditions d'interface assurant la transmission des données entre les sous-domaines. Au niveau discret, nous devons d'une part assurer l'existence et l'unicité de la solution multidomaine et montrer que la solution multidomaine obtenue est identique à la solution monodomaine. L'objet du chapitre 2 est de présenter les différents schémas multidomaine (ceux présentés dans le chapitre 1 adaptés au cadre multidomaine), de montrer leur caractère bien posé et de montrer l'identité de la solution multidomaine et de la solution monodomaine.

La méthode itérative de Schwarz optimisée pour la résolution du problème multidomaine est alors présentée dans le chapitre 3, en évoquant l'optimisation des paramètres intervenant dans les conditions de transmission, puis en présentant des cas-tests numériques de comparaison entre les différents algorithmes discrets.

Chapitre 1

Le schéma monodomaine 1D pour l'équation de convection-diffusion instationnaire

Sommaire

1.1	Discrétisation en temps Galerkin Discontinu	20
1.2	Discrétisation en espace	22
1.2.1	Intégration sur la cellule en espace	22
1.2.2	Discrétisation des termes de diffusion	23
1.2.3	Discrétisation des termes de convection	23
1.2.4	Schéma centré	25
1.2.5	Schéma décentré classique à deux points	29
1.2.6	Schéma décentré hybride	30

Le problème monodomaine (3) défini précédemment avec des conditions aux bords de type Dirichlet ou Neumann est discrétisé en temps par un schéma de type Galerkin Discontinu (DG) basé sur une approximation polynomiale de l'inconnue c sur une partition \mathcal{T} de l'intervalle en temps $(0, T)$. La souplesse de ce schéma permet d'envisager éventuellement des pas de temps différents selon les sous-domaines, qu'une analyse d'erreur a posteriori permet d'adapter [78]. De plus, quelque soit l'ordre du schéma, on trouve dans [94] une analyse rigoureuse donnant des estimations d'erreur. Dans la suite, nous présentons ce schéma en temps à l'ordre 0 et 1, à partir de [56] qui reprend l'analyse de [67]. Nous nous restreindrons à l'ordre 0 (P_0) pour présenter la discrétisation en espace dans un souci de clarté. En espace, les schémas considérés sont de type volumes finis (VF) centrés sur les mailles. Ils sont adaptés au traitement d'une diffusion discontinue. Nous présentons les schémas centré et décentré classiques, ainsi que le schéma décentré proposé par [50] à partir de [25, 35, 31].

1.1 Discrétisation en temps Galerkin Discontinu

Soit \mathcal{T} la partition en temps de l'intervalle $(0, T)$ composée de N sous-intervalles $I_n := (t_{n-1}, t_n)$ de longueur $\Delta t_n := t_n - t_{n-1}$ pouvant être inégaux. L'idée du schéma de Galerkin Discontinu est d'approcher la solution c par un polynôme U de degré d sur chaque intervalle I_n .

L'équation forte obtenue sur I_n est donnée dans [56] par

$$\omega(x) \partial_t(\mathcal{I}_n U) + \partial_x(bU) - \partial_x(\nu(x)\partial_x U) + \eta U = \mathcal{P}f \text{ dans } \Omega \times I_n, \quad (1.1)$$

où \mathcal{P} est un opérateur de projection L^2 sur l'ensemble \mathbf{P}_d des polynômes de degré au plus égal à d , et \mathcal{I}_n est un opérateur d'interpolation aux $d + 1$ points

$$t_{n-1} + \tau_1(t_n - t_{n-1}), \dots, t_{n-1} + \tau_{d+1}(t_n - t_{n-1}),$$

où les $d + 1$ points de Radau ($0 < \tau_1 < \dots < \tau_{d+1} = 1$) sont définis de telle sorte que la quadrature de Gauss-Radau $\int_0^1 f(t)dt \approx \sum_{q=1}^{d+1} \omega_q f(\tau_q)$ soit exacte pour les polynômes de \mathbf{P}_{2d} .

L'opérateur d'interpolation \mathcal{I}_n est tel que $\mathcal{I}_n U \in \mathbf{P}_{d+1}$ pour tout $U \in \mathbf{P}_d$, ce qui assure que le terme de la dérivée en temps de (1.1) soit bien d'ordre d , comme les autres termes. Il vérifie de plus $\mathcal{I}_n U(t_{n-1}) = U(t_{n-1}^-)$ et $\mathcal{I}_n U(t_n) = U(t_n^-)$. Sur la figure 1.1, nous représentons $\mathcal{I}U$ dans le cas où $d = 0$ à gauche et le cas où $d = 1$ à droite.



FIGURE 1.1 – Approximation polynomiale U en noir d'ordre $d = 0$ (gauche) et $d = 1$ (droite). L'opérateur d'interpolation \mathcal{I} dont la restriction à chaque intervalle I_n est \mathcal{I}_n est représenté en bleu. Les points d'interpolation sont représentés en rouge (ceux de l'ordre 0) et en vert (ceux de l'ordre 1).

Cas particulier $d = 0$

Dans ce cas, $U = U_0^n$ est constant en temps sur I_n et l'unique point de Radau est $\tau_1 = 1$. On exprime alors $\mathcal{I}_n U$ dans une base de \mathbf{P}_1 sur I_n comme

$$\mathcal{I}_n U = A_0 + A_1 \frac{t - t_{n-1}}{\Delta t_n},$$

vérifiant

$$\begin{cases} \mathcal{I}_n U(t_{n-1}) = U(t_{n-1}^-) = U_0^{n-1} \\ \mathcal{I}_n U(t_n) = U(t_n^-) = U_0^n \end{cases} \iff \begin{cases} A_0 = U_0^{n-1} \\ A_0 + A_1 = U_0^n. \end{cases}$$

On obtient alors

$$\mathcal{I}_n U = U_0^{n-1} + (U_0^n - U_0^{n-1}) \frac{t - t_{n-1}}{\Delta t_n}.$$

Sur $I_n = (t_{n-1}, t_n)$, l'équation (1.1) s'écrit finalement

$$\omega(x) \frac{U_0^n - U_0^{n-1}}{\Delta t_n} - \partial_x(\nu(x)\partial_x U_0^n) + \partial_x(bU_0^n) + \eta U_0^n = \mathcal{P}f \text{ dans } \Omega, \quad (1.2)$$

qui est similaire à un schéma d'Euler implicite.

Cas particulier $d = 1$

En utilisant $\{1, 2\frac{t - t_{n-1/2}}{\Delta t_n}\}$ comme base (orthogonale) de \mathbf{P}_1 , on peut écrire sur I_n :

$$U = U_0^n + 2U_1^n \frac{t - t_{n-1/2}}{\Delta t_n}$$

et

$$\mathcal{P}f = f_0^n + 2f_1^n \frac{t - t_{n-1/2}}{\Delta t_n}.$$

De même que précédemment, on écrit

$$\mathcal{I}_n U = A_0 + 2A_1 \frac{t - t_{n-1/2}}{\Delta t_n} + 4A_2 \left(\frac{t - t_{n-1/2}}{\Delta t_n} \right)^2.$$

Cet opérateur est tel que

$$\begin{cases} \mathcal{I}_n U(t_{n-1}) = U(t_{n-1}^-) = U_0^{n-1} + U_1^{n-1} \\ \mathcal{I}_n U\left(t_{n-1} + \frac{1}{3}\Delta t_n\right) = U\left(t_{n-1} + \frac{1}{3}\Delta t_n\right) = U_0^n - \frac{1}{3}U_1^n \\ \mathcal{I}_n U(t_n) = U(t_n^-) = U_0^n + U_1^n, \end{cases}$$

soit

$$\begin{cases} A_0 - A_1 + A_2 = U_0^{n-1} + U_1^{n-1} \\ A_0 - \frac{1}{3}A_1 + \frac{1}{9}A_2 = U_0^n - \frac{1}{3}U_1^n \\ A_0 + A_1 + A_2 = U_0^n + U_1^n \end{cases} \iff \begin{cases} A_0 = \frac{5}{4}U_0^n - \frac{1}{4}(U_0^{n-1} + U_1^n + U_1^{n-1}) \\ A_1 = \frac{1}{2}(U_0^n - U_0^{n-1} + U_1^n - U_1^{n-1}) \\ A_2 = \frac{3}{4}(U_1^n + U_1^{n-1} + U_0^{n-1} - U_0^n). \end{cases}$$

Sur $I_n = (t_{n-1}, t_n)$, l'équation (1.1) s'écrit alors

$$\begin{aligned} & \frac{\omega}{\Delta t_n} (U_0^n - U_0^{n-1} + U_1^n - U_1^{n-1}) - \partial_x(\nu \partial_x U_0^n) + \partial_x(bU_0^n) + \eta U_0^n - f_0^n \\ & + \left[\frac{3\omega}{\Delta t_n} [(U_0^{n-1} - U_0^n + U_1^n + U_1^{n-1})] - \partial_x(\nu \partial_x U_1^n) + \partial_x(bU_1^n) + \eta U_1^n - f_1^n \right] 2 \frac{t - t_{n-1/2}}{\Delta t_n} = 0. \end{aligned} \quad (1.3)$$

Ainsi la résolution de (1.3) conduit à celle du système à deux équations

$$\begin{cases} \frac{\omega(x)}{\Delta t_n} (U_0^n - U_0^{n-1} + U_1^n - U_1^{n-1}) - \partial_x(\nu(x) \partial_x U_0^n) + \partial_x(bU_0^n) + \eta U_0^n - f_0^n = 0 \\ \frac{3\omega(x)}{\Delta t_n} [(U_0^{n-1} - U_0^n + U_1^n + U_1^{n-1})] - \partial_x(\nu(x) \partial_x U_1^n) + \partial_x(bU_1^n) + \eta U_1^n - f_1^n = 0. \end{cases} \quad (1.4)$$

Détermination de f_0^n et f_1^n

$\mathcal{P}f$ étant la projection de f sur \mathbf{P}_1 , $f - \mathcal{P}f$ est orthogonal à chacun des vecteurs de la base $\{1, 2\frac{t - t_{n-1/2}}{\Delta t_n}\}$. D'une part,

$$(f - \mathcal{P}f, 1) = 0 \iff \int_{t_{n-1}}^{t_n} f(t) dt = \int_{t_{n-1}}^{t_n} f_0^n + 2f_1^n \frac{t - t_{n-1/2}}{\Delta t_n} dt = \Delta t_n f_0^n.$$

D'autre part, $\left(f - \mathcal{P}f, 2\frac{t - t_{n-1/2}}{\Delta t_n}\right) = 0$ donne

$$\int_{t_{n-1}}^{t_n} 2f(t) \frac{t - t_{n-1/2}}{\Delta t_n} dt = \int_{t_{n-1}}^{t_n} 2f_0^n \frac{t - t_{n-1/2}}{\Delta t_n} + 4f_1^n \frac{(t - t_{n-1/2})^2}{(\Delta t_n)^2} dt = \frac{1}{3} \Delta t_n f_1^n.$$

D'où

$$f_1^n = \frac{3}{\Delta t_n} \int_{t_{n-1}}^{t_n} 2f(t) \cdot \frac{t - t_{n-1/2}}{\Delta t_n} dt \quad (1.5a)$$

$$f_0^n = \frac{1}{\Delta t_n} \int_{t_{n-1}}^{t_n} f(t) dt. \quad (1.5b)$$

1.2 Discrétisation en espace

Le principe de la méthode volumes finis est d'intégrer l'équation continue sur chaque cellule du domaine. On décompose alors le domaine unidimensionnel Ω en I intervalles $[x_{i-\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}}]$ de longueur Δx_i ($i = 1, \dots, I$). Les extrémités du domaine sont $x_{\frac{1}{2}}$ et $x_{I+\frac{1}{2}}$.

1.2.1 Intégration sur la cellule en espace

En intégrant l'équation semi-discrète en temps à l'ordre 0 (1.2) sur la cellule $[x_{i-\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}}]$, dans laquelle nous remplaçons les notations U_0^n et f_0^n par U^n et f^n , nous obtenons

$$\int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \omega \frac{U^n - U^{n-1}}{\Delta t_n} - \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} [\partial_x(\nu \partial_x U^n - bU^n) + \eta U^n] dx = \frac{1}{\Delta t_n} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} f^n dx, \quad (1.6)$$

où nous notons que le flux $\nu \partial_x U^n - bU^n$ doit être supposé continu. En notant

$$\tilde{U}_i^n := \frac{1}{\Delta x_i} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} U^n(x) dx \quad (1.7)$$

la valeur moyenne de U^n sur la cellule $[x_{i-\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}}]$ et ω_i une valeur constante du paramètre ω sur chaque cellule, nous pouvons écrire

$$\begin{aligned} \omega_i \frac{\Delta x_i}{\Delta t_n} (\tilde{U}_i^n - \tilde{U}_i^{n-1}) - (\nu \partial_x U^n - bU^n) \left(x_{i+\frac{1}{2}}\right) \\ + (\nu \partial_x U^n - bU^n) \left(x_{i-\frac{1}{2}}\right) + \eta \Delta x_i \tilde{U}_i^n = \Delta x_i \tilde{f}_i^n, \end{aligned} \quad (1.8)$$

où \tilde{f}_i^n est la valeur moyenne exacte de f sur la cellule $[x_{i-\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}}]$.

Le choix des inconnues et la manière d'exprimer chacun des termes de (1.8) en fonction de ces inconnues définira le schéma volumes finis. En une dimension d'espace, le choix le plus naturel est de prendre le centre x_i de la cellule $[x_{i-\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}}]$ comme point de contrôle. Notons $U_i^n := U^n(x_i)$ l'approximation de \tilde{U}_i^n . Avec ce choix de x_i comme barycentre de la cellule, cette approximation est en $O((\Delta x_i)^2)$.

Si nous avons choisi pour x_i un autre point de $[x_{i-\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}}]$, l'approximation n'aurait été que d'ordre Δx_i . Dans le flux à approcher $(\nu \partial_x U^n - bU^n)$ en $x_{i+\frac{1}{2}}$ et $x_{i-\frac{1}{2}}$, on distinguera le flux diffusif et le flux convectif. Puisque nous considérons des méthodes volumes finis centrés sur les cellules, la discrétisation ne doit dépendre que des inconnues principales aux centres x_i ($i = 1, \dots, I$), sauf sur les mailles de bord où les points extrêmes $x_{\frac{1}{2}}$ et $x_{I+\frac{1}{2}}$ interviendront et seront déterminés par les conditions limites. Les coefficients non constants ω et ν sont définis sur chaque cellule par leurs valeurs aux points de contrôle x_i , soit $\omega_i := \omega(x_i)$ et $\nu_i := \nu(x_i)$. Quant à b , rappelons que nous l'avons supposé constant.

Dans la suite, donnons l'approximation du flux diffusif et du flux convectif.

1.2.2 Discrétisation des termes de diffusion

La discrétisation du flux diffusif $\nu \partial_x U^n$ s'exprime différemment à gauche et à droite de $x_{i+\frac{1}{2}}$, à cause de la possible discontinuité de ν en ces points. Vu de la maille i , le flux diffusif en $x_{i+\frac{1}{2}}$ noté $(\nu \partial_x U^n)_{i, i+\frac{1}{2}}$ est donné par l'approximation aux différences finies suivante

$$(\nu \partial_x U^n)_{i, i+\frac{1}{2}} \simeq 2\nu_i \frac{U_{i+\frac{1}{2}}^n - U_i^n}{\Delta x_i} \quad (1.9a)$$

et vu de la maille $i+1$, nous avons de même

$$(\nu \partial_x U^n)_{i+1, i+\frac{1}{2}} \simeq 2\nu_{i+1} \frac{U_{i+1}^n - U_{i+\frac{1}{2}}^n}{\Delta x_{i+1}}, \quad (1.9b)$$

où $U_{i+\frac{1}{2}}^n$ est une inconnue auxiliaire approchant $U^n(x_{i+\frac{1}{2}})$ qui sera éliminée en écrivant la conservation du flux diffusif.

1.2.3 Discrétisation des termes de convection

Il y a plusieurs choix possibles pour la discrétisation du terme de convection $bU^n(x_{i+\frac{1}{2}})$. Donnons trois choix de discrétisations : centrée, décentrée classique et décentrée hybride.

Discrétisation centrée

Dans le cas où ν est continu et U^n régulière, un développement limité détermine une approximation de $U^n(x_{i+\frac{1}{2}})$ à l'ordre 2 donnée par

$$U^n(x_{i+\frac{1}{2}}) \simeq \frac{\Delta x_{i+1} U_i^n + \Delta x_i U_{i+1}^n}{\Delta x_i + \Delta x_{i+1}},$$

et la formule ci-dessus est exacte si U^n est une fonction P_1 . Mais si ν est discontinu en $x_{i+\frac{1}{2}}$, alors $\partial_x U^n$ est discontinu, puisque bU^n et le flux total $\nu \partial_x U^n - bU^n$ sont continus en ce point. Cela empêche donc de faire un développement limité. Or une autre manière de définir une approximation d'ordre 2 est de dire que l'interpolation au point $x_{i+\frac{1}{2}}$ en fonction des points x_i et x_{i+1} est celle qui est exacte pour des fonctions localement P_1 . Connaissant U_i^n et U_{i+1}^n , on cherche donc $U_{i+\frac{1}{2}}^n$ qui vérifie

la continuité du flux en $x_{i+\frac{1}{2}}$ équivalente dans ce cas à la conservation du flux diffusif qui s'écrit

$$(\nu \partial_x U^n)_{i, i+\frac{1}{2}} = (\nu \partial_x U^n)_{i+1, i+\frac{1}{2}}.$$

Celle-ci s'écrit à partir des flux diffusifs donnés par (1.9) comme

$$2\nu_i \frac{U^n_{i+\frac{1}{2}} - U_i^n}{\Delta x_i} = 2\nu_{i+1} \frac{U_{i+1}^n - U_{i+\frac{1}{2}}^n}{\Delta x_{i+1}}. \quad (1.10)$$

Nous en déduisons que

$$U_{i+\frac{1}{2}}^n \left(\frac{2\nu_i}{\Delta x_i} + \frac{2\nu_{i+1}}{\Delta x_{i+1}} \right) = \frac{2\nu_i}{\Delta x_i} U_i^n + \frac{2\nu_{i+1}}{\Delta x_{i+1}} U_{i+1}^n,$$

soit

$$U_{i+\frac{1}{2}}^n = \frac{\nu_i U_i^n \Delta x_{i+1} + \nu_{i+1} U_{i+1}^n \Delta x_i}{\nu_i \Delta x_{i+1} + \nu_{i+1} \Delta x_i}. \quad (1.11)$$

Cela permet donc d'écrire le flux convectif centré comme

$$bU^n \left(x_{i+\frac{1}{2}} \right) \simeq b \left[\frac{\nu_i \Delta x_{i+1}}{\nu_i \Delta x_{i+1} + \nu_{i+1} \Delta x_i} U_i^n + \frac{\nu_{i+1} \Delta x_i}{\nu_i \Delta x_{i+1} + \nu_{i+1} \Delta x_i} U_{i+1}^n \right]. \quad (1.12)$$

Si $\Delta x_i = \Delta x_{i+1}$ et $\nu_i = \nu_{i+1}$, nous retrouvons la forme habituellement utilisée, soit $U^n \left(x_{i+\frac{1}{2}} \right) \simeq \frac{1}{2}(U_i^n + U_{i+1}^n)$.

Discrétisation décentrée classique

Le schéma décentré classique à deux points s'écrit

$$bU^n \left(x_{i+\frac{1}{2}} \right) \simeq [b]^+ U_i^n + [b]^- U_{i+1}^n, \quad (1.13)$$

où l'on note $[b]^+$ et $[b]^-$ les parties positives et négatives de b définies par

$$\begin{aligned} [b]^+ &= \max(0, b), \\ [b]^- &= \min(b, 0), \end{aligned} \quad (1.14)$$

de telle sorte que $\forall b, b = [b]^- + [b]^+$.

Discrétisation décentrée hybride

Quant au schéma décentré hybride, utilisé par [50], il est défini avec les inconnues aux centres et aux sommets. Vu de la cellule i , le flux $bU^n \left(x_{i+\frac{1}{2}} \right)$ noté $(bU^n)_{i, i+\frac{1}{2}}$ est défini par

$$(bU^n)_{i, i+\frac{1}{2}} \simeq [b]^+ U_i^n + [b]^- U_{i+\frac{1}{2}}^n, \quad (1.15a)$$

et vu de la cellule $i+1$, nous avons de même

$$(bU^n)_{i+1, i+\frac{1}{2}} \simeq [b]^+ U_{i+\frac{1}{2}}^n + [b]^- U_i^n, \quad (1.15b)$$

où $U_{i+\frac{1}{2}}^n$ est l'inconnue approchant $U^n \left(x_{i+\frac{1}{2}} \right)$, continue en $x_{i+\frac{1}{2}}$ et déjà utilisé dans la définition du flux diffusif (1.9).

Ces trois discrétisations pour le flux convectif donnent lieu à trois schémas différents pour l'équation (1.8), dits centré, décentré classique et décentré hybride.

Pour résumer, notons que les inconnues aux sommets $x_{i+\frac{1}{2}}$, notées $U_{i+\frac{1}{2}}^n$ ($i = 1, \dots, I-1$) interviennent dans l'expression de la discrétisation du terme de diffusion (1.9), et dans l'expression du flux convectif (1.15) lorsque la discrétisation de type décentré hybride est utilisée.

Dans le schéma centré et le schéma décentré classique à deux points, les inconnues $U_{i+\frac{1}{2}}^n$ sont déterminées par (1.11) grâce à l'égalité (1.10) exprimant la continuité du flux diffusif en chacun des points $x_{i+\frac{1}{2}}$ (équivalente à la continuité du flux total car $(bU^n)_{i,i+\frac{1}{2}} = (bU^n)_{i+1,i+\frac{1}{2}}$). Cela permet de réécrire les flux diffusifs (1.9a) et (1.9b) comme

$$(\nu\partial_x U^n)_{i,i+\frac{1}{2}} = \frac{2\nu_i\nu_{i+1}(U_{i+1}^n - U_i^n)}{\nu_i\Delta x_{i+1} + \nu_{i+1}\Delta x_i}, \quad (1.16a)$$

et de manière analogue

$$(\nu\partial_x U^n)_{i,i-\frac{1}{2}} = -\frac{2\nu_{i-1}\nu_i(U_i^n - U_{i-1}^n)}{\nu_{i-1}\Delta x_i + \nu_i\Delta x_{i-1}}. \quad (1.16b)$$

Dans le schéma décentré hybride, les inconnues $U_{i+\frac{1}{2}}^n$ sont définies par la continuité du flux total en $x_{i+\frac{1}{2}}$ donnée par

$$(\nu\partial_x U^n)_{i,i+\frac{1}{2}} - (bU^n)_{i,i+\frac{1}{2}} = (\nu\partial_x U^n)_{i+1,i+\frac{1}{2}} - (bU^n)_{i+1,i+\frac{1}{2}},$$

soit, en utilisant (1.9) et (1.15),

$$\begin{aligned} 2\nu_i \frac{U_{i+\frac{1}{2}}^n - U_i^n}{\Delta x_i} - \left([b]^+ U_i^n + [b]^- U_{i+\frac{1}{2}}^n \right) \\ = 2\nu_{i+1} \frac{U_{i+1}^n - U_{i+\frac{1}{2}}^n}{\Delta x_{i+1}} - \left([b]^+ U_{i+\frac{1}{2}}^n + [b]^- U_i^n \right). \end{aligned} \quad (1.17)$$

Donnons une description complète des trois schémas évoqués ci-dessus, à savoir les schémas centré, décentré classique et décentré hybride, en écrivant les matrices associées.

1.2.4 Schéma centré

Le schéma centré pour les mailles intérieures s'écrit à partir de (1.8), où \tilde{U}_i^n est approché par U_i^n , les flux diffusifs $(\nu\partial_x U^n)_{i,i+\frac{1}{2}}$ et $(\nu\partial_x U^n)_{i,i-\frac{1}{2}}$ sont définis par (1.16a) et (1.16b), les flux convectifs $bU^n(x_{i-\frac{1}{2}})$ et $bU^n(x_{i+\frac{1}{2}})$ sont donnés par (1.12) et \tilde{f}_i^n est approché par $f_i^n := f^n(x_i)$, la valeur de f^n au point x_i . Nous avons donc, pour tout $i \in [1, I-1]$,

$$\begin{aligned} \omega_i \frac{\Delta x_i}{\Delta t_n} (U_i^n - U_i^{n-1}) - \frac{2\nu_i\nu_{i+1}(U_{i+1}^n - U_i^n)}{\nu_i\Delta x_{i+1} + \nu_{i+1}\Delta x_i} + \frac{2\nu_{i-1}\nu_i(U_i^n - U_{i-1}^n)}{\nu_{i-1}\Delta x_i + \nu_i\Delta x_{i-1}} \\ + b \left[\frac{\nu_i\Delta x_{i+1}}{\nu_i\Delta x_{i+1} + \nu_{i+1}\Delta x_i} U_i^n + \frac{\nu_{i+1}\Delta x_i}{\nu_i\Delta x_{i+1} + \nu_{i+1}\Delta x_i} U_{i+1}^n \right] \\ - b \left[\frac{\nu_{i-1}\Delta x_i}{\nu_{i-1}\Delta x_i + \nu_i\Delta x_{i-1}} U_{i-1}^n + \frac{\nu_i\Delta x_{i-1}}{\nu_{i-1}\Delta x_i + \nu_i\Delta x_{i-1}} U_i^n \right] \\ + \eta\Delta x_i U_i^n - \Delta x_i f_i^n = 0, \end{aligned} \quad (1.18)$$

soit, en posant $D_i = \nu_i \Delta x_{i+1} + \nu_{i+1} \Delta x_i$,

$$\begin{aligned} & U_i^n \left[\omega_i \frac{\Delta x_i}{\Delta t_n} + b \frac{\nu_i \Delta x_{i+1}}{D_i} - b \frac{\nu_i \Delta x_{i-1}}{D_{i-1}} + \frac{2\nu_i \nu_{i+1}}{D_i} + \frac{2\nu_{i-1} \nu_i}{D_{i-1}} + \eta \Delta x_i \right] \\ & + U_{i+1}^n \left[b \frac{\nu_{i+1} \Delta x_i}{D_i} - \frac{2\nu_i \nu_{i+1}}{D_i} \right] + U_{i-1}^n \left[-b \frac{\nu_{i-1} \Delta x_i}{D_{i-1}} - \frac{2\nu_{i-1} \nu_i}{D_{i-1}} \right] \\ & = \omega_i \frac{\Delta x_i}{\Delta t_n} U_i^{n-1} + \Delta x_i f_i^n. \end{aligned} \quad (1.19)$$

Donnons la discrétisation sur les mailles de bord ($i = 1$ et $i = I$). Dans le cas d'une condition de Dirichlet

$$U_{\frac{1}{2}}^n = g_{\frac{1}{2}}^{D,n} \quad \text{et} \quad U_{I+\frac{1}{2}}^n = g_{I+\frac{1}{2}}^{D,n}. \quad (1.20)$$

Le flux diffusif en $x_{\frac{1}{2}}$ et $x_{I+\frac{1}{2}}$ est donné par

$$(\nu \partial_x U^n)_{1, \frac{1}{2}} \simeq 2\nu_1 \frac{U_1^n - U_{\frac{1}{2}}^n}{\Delta x_1} = 2\nu_1 \frac{U_1^n - g_{\frac{1}{2}}^{D,n}}{\Delta x_1} \quad (1.21a)$$

et

$$(\nu \partial_x U^n)_{I, I+\frac{1}{2}} \simeq 2\nu_I \frac{U_{I+\frac{1}{2}}^n - U_I^n}{\Delta x_I} = 2\nu_I \frac{g_{I+\frac{1}{2}}^{D,n} - U_I^n}{\Delta x_I}, \quad (1.21b)$$

et le flux convectif par

$$bU^n \left(x_{\frac{1}{2}} \right) \simeq bU_{\frac{1}{2}}^n = bg_{\frac{1}{2}}^{D,n} \quad (1.22a)$$

et

$$bU^n \left(x_{I+\frac{1}{2}} \right) \simeq bU_{I+\frac{1}{2}}^n = bg_{I+\frac{1}{2}}^{D,n}. \quad (1.22b)$$

A partir de l'équation (1.8), et en utilisant (1.12), (1.16a), (1.16b), (1.21) et (1.22), le schéma s'écrit sur la maille de centre x_1 comme

$$\begin{aligned} & U_1^n \left[\omega_1 \frac{\Delta x_1}{\Delta t_n} + b \frac{\nu_1 \Delta x_2}{D_1} + \frac{2\nu_1}{\Delta x_1} + \frac{2\nu_1 \nu_2}{D_1} + \eta \Delta x_1 \right] \\ & + U_2^n \left[b \frac{\nu_2 \Delta x_1}{D_1} - \frac{2\nu_1 \nu_2}{D_1} \right] \\ & = \omega_1 \frac{\Delta x_1}{\Delta t_n} U_1^{n-1} + \left(b + \frac{2\nu_1}{\Delta x_1} \right) g_{\frac{1}{2}}^{D,n} + \Delta x_1 f_1^n, \end{aligned} \quad (1.23)$$

et d'une manière analogue sur la maille x_I

$$\begin{aligned} & U_I^n \left[\omega_I \frac{\Delta x_I}{\Delta t_n} - b \frac{\nu_I \Delta x_{I-1}}{D_{I-1}} + \frac{2\nu_I}{\Delta x_I} + \frac{2\nu_{I-1} \nu_I}{D_{I-1}} + \eta \Delta x_I \right] \\ & + U_{I-1}^n \left[-b \frac{\nu_{I-1} \Delta x_I}{D_{I-1}} - \frac{2\nu_{I-1} \nu_I}{D_{I-1}} \right] \\ & = \omega_I \frac{\Delta x_I}{\Delta t_n} U_I^{n-1} + \left(\frac{2\nu_I}{\Delta x_I} - b \right) g_{I+\frac{1}{2}}^{D,n} + \Delta x_I f_I^n. \end{aligned} \quad (1.24)$$

La condition de Neumann donnée par

$$\begin{aligned} (\nu \partial_x U^n)_{\frac{1}{2}} &\simeq 2\nu_1 \frac{U_1^n - U_{\frac{1}{2}}^n}{\Delta x_1} = g_{\frac{1}{2}}^{N,n} \\ \text{et} \quad (\nu \partial_x U^n)_{I+\frac{1}{2}} &\simeq 2\nu_I \frac{U_{I+\frac{1}{2}}^n - U_I^n}{\Delta x_I} = g_{I+\frac{1}{2}}^{N,n}, \end{aligned} \quad (1.25)$$

donne

$$U_{\frac{1}{2}}^n = U_1^n - \frac{\Delta x_1}{2\nu_1} g_{\frac{1}{2}}^{N,n} \quad \text{et} \quad U_{I+\frac{1}{2}}^n = U_I^n + \frac{\Delta x_I}{2\nu_I} g_{I+\frac{1}{2}}^{N,n}. \quad (1.26)$$

Ainsi les deux équations sur les mailles de bords de centre x_1 et x_I , pour une condition de Neumann, sont données respectivement par

$$\begin{aligned} &U_1^n \left[\omega_1 \frac{\Delta x_1}{\Delta t_n} + b \frac{\nu_1 \Delta x_2}{D_1} - b + \frac{2\nu_1 \nu_2}{D_1} + \eta \Delta x_1 \right] \\ &+ U_2^n \left[b \frac{\nu_2 \Delta x_1}{D_1} - \frac{2\nu_1 \nu_2}{D_1} \right] \\ &= \omega_1 \frac{\Delta x_1}{\Delta t_n} U_1^{n-1} - \left(\frac{b \Delta x_1}{2\nu_1} + 1 \right) g_{\frac{1}{2}}^{N,n} + \Delta x_1 f_1^n, \end{aligned} \quad (1.27)$$

et

$$\begin{aligned} &U_I^n \left[\omega_I \frac{\Delta x_I}{\Delta t_n} - b \frac{\nu_I \Delta x_{I-1}}{D_{I-1}} + b + \frac{2\nu_{I-1} \nu_I}{D_{I-1}} + \eta \Delta x_I \right] \\ &+ U_{I-1}^n \left[-b \frac{\nu_{I-1} \Delta x_I}{D_{I-1}} - \frac{2\nu_{I-1} \nu_I}{D_{I-1}} \right] \\ &= \omega_I \frac{\Delta x_I}{\Delta t_n} U_I^{n-1} + \left(1 - \frac{b \Delta x_I}{2\nu_I} \right) g_{I+\frac{1}{2}}^{N,n} + \Delta x_I f_I^n. \end{aligned} \quad (1.28)$$

Théorème 1.1. *La matrice associée au schéma centré défini par (1.19) et*

- soit (1.23) et (1.24) pour des conditions de Dirichlet,
- soit (1.27) et (1.28) pour des conditions de Neumann,

est une M-matrice si $\forall i = 1, \dots, I, \Delta x_i \leq \frac{2\nu_i}{|b|}$.

Nous rappelons d'abord, d'après [90], la définition d'une M-matrice.

Définition 1.2. *Soit $M \in \mathbb{R}^{I \times I}$ une matrice inversible. M est une M-matrice si $M_{ij} < 0 \quad \forall j \neq i$ et si tous les coefficients de M^{-1} sont positifs ou nuls.*

En particulier une matrice M vérifiant

- $M_{ij} \leq 0 \quad \forall j \neq i$
- $\sum_{j=1}^I M_{ij} > 0 \quad \forall i \in \llbracket 1, I \rrbracket$.

est une M-matrice.

Démonstration. Puisque la matrice associée au schéma centré est tridiagonale, notons B_i ($i \in \llbracket 1, I-1 \rrbracket$) les termes de la diagonale supérieure et C_i ($i \in \llbracket 2, I \rrbracket$) ceux de la diagonale inférieure. Les termes diagonaux A_i , B_i et C_i sont définis d'après (1.19) pour les points intérieurs, par (1.23) et (1.24) pour les conditions de Dirichlet et par (1.27) et (1.28) pour les conditions de Neumann.

Pour $i \in \llbracket 2, I-1 \rrbracket$:

$$B_i = b \frac{\nu_{i+1} \Delta x_i}{D_i} - \frac{2\nu_i \nu_{i+1}}{D_i} \leq 0 \iff b \Delta x_i \leq 2\nu_i$$

et

$$C_i = -b \frac{\nu_{i-1} \Delta x_i}{D_{i-1}} - \frac{2\nu_{i-1} \nu_i}{D_{i-1}} \leq 0 \iff -b \Delta x_i \leq 2\nu_i,$$

d'où la condition suffisante $\Delta x_i \leq \frac{2\nu_i}{|b|}$ pour les termes extradiagonaux. D'autre part, la somme des termes

$$A_i + B_i + C_i = \omega_i \frac{\Delta x_i}{(\Delta t)_n} + \eta \Delta x_i > 0, \quad \forall i \in \llbracket 2, I-1 \rrbracket.$$

Pour $i = 1$ avec des conditions de Dirichlet :

$$\text{Le terme extradiagonal } B_1 = b \frac{\nu_2 \Delta x_1}{D_1} - \frac{2\nu_1 \nu_2}{D_1} \leq 0 \text{ si } \Delta x_1 \leq \frac{2\nu_1}{|b|}.$$

De plus,

$$A_1 + B_1 = \omega_1 \frac{\Delta x_1}{\Delta t_n} + b + \frac{2\nu_1}{\Delta x_1} + \eta \Delta x_1 > 0.$$

Pour $i = 1$ avec des conditions de Neumann :

$$B_1 = b \frac{\nu_2 \Delta x_1}{D_1} - \frac{2\nu_1 \nu_2}{D_1} \leq 0 \iff \Delta x_1 \leq \frac{2\nu_1}{|b|}$$

$$A_1 + B_1 = \omega_1 \frac{\Delta x_1}{\Delta t_n} + \eta \Delta x_1 > 0.$$

Pour $i = I$ avec des conditions de Dirichlet :

$$C_I = -b \frac{\nu_{I-1} \Delta x_I}{D_{I-1}} - \frac{2\nu_{I-1} \nu_I}{D_{I-1}} \leq 0 \iff \Delta x_I \leq \frac{2\nu_I}{|b|}$$

$$\text{et } A_I + C_I = \omega_I \frac{\Delta x_I}{\Delta t_n} - b + \frac{2\nu_I}{\Delta x_I} + \eta \Delta x_I \text{ est positif si } \Delta x_I \leq \frac{2\nu_I}{|b|}.$$

Pour $i = I$ avec des conditions de Neumann :

$$C_I^n = -b \frac{\nu_{I-1} \Delta x_I}{D_{I-1}} - \frac{2\nu_{I-1} \nu_I}{D_{I-1}} \leq 0 \iff \Delta x_I \leq \frac{2\nu_I}{|b|}.$$

$$\text{Aussi } A_I + C_I = \omega_I \frac{\Delta x_I}{\Delta t_n} + \eta \Delta x_I > 0. \quad \square$$

1.2.5 Schéma décentré classique à deux points

Le schéma intérieur du schéma décentré classique à deux points peut être écrit à partir de l'équation (1.18) en remplaçant les termes de convection centrés (1.12) par (1.13). Il vient alors

$$\begin{aligned} & \omega_i \frac{\Delta x_i}{\Delta t_n} (U_i^n - U_i^{n-1}) + [b]^+ (U_i^n - U_{i-1}^n) + [b]^- (U_{i+1}^n - U_i^n) \\ & - \frac{2\nu_i \nu_{i+1} (U_{i+1}^n - U_i^n)}{\nu_i \Delta x_{i+1} + \nu_{i+1} \Delta x_i} + \frac{2\nu_{i-1} \nu_i (U_i^n - U_{i-1}^n)}{\nu_{i-1} \Delta x_i + \nu_i \Delta x_{i-1}} + \eta \Delta x_i U_i^n - \Delta x_i f_i^n = 0. \end{aligned} \quad (1.29)$$

soit, en reprenant la notation $D_i = \nu_i \Delta x_{i+1} + \nu_{i+1} \Delta x_i$ et en remarquant que

$$[b]^+ - [b]^- = |b|, \quad (1.30)$$

nous avons

$$\begin{aligned} & U_i^n \left[\omega_i \frac{\Delta x_i}{\Delta t_n} + |b| + \frac{2\nu_i \nu_{i+1}}{D_i} + \frac{2\nu_{i-1} \nu_i}{D_{i-1}} + \eta \Delta x_i \right] \\ & + U_{i-1}^n \left[-[b]^+ - \frac{2\nu_{i-1} \nu_i}{D_{i-1}} \right] + U_{i+1}^n \left[[b]^- - \frac{2\nu_i \nu_{i+1}}{D_i} \right] \\ & = \omega_i \frac{\Delta x_i}{\Delta t_n} U_i^{n-1} + \Delta x_i f_i^n. \end{aligned} \quad (1.31)$$

Sur les mailles de bords ($i = 1$ et $i = I$), on peut écrire la discrétisation du schéma décentré classique en conservant les inconnues de bord $U_{\frac{1}{2}}^n$ et $U_{I+\frac{1}{2}}^n$, ce qui donne

$$\begin{aligned} & \omega_1 \frac{\Delta x_1}{\Delta t_n} (U_1^n - U_1^{n-1}) + [b]^+ (U_1^n - U_{1/2}^n) + [b]^- (U_2^n - U_1^n) \\ & - \frac{2\nu_1 \nu_2 (U_2^n - U_1^n)}{\nu_1 \Delta x_2 + \nu_2 \Delta x_1} + \frac{2\nu_1 (U_1^n - U_{1/2}^n)}{\Delta x_1} + \eta \Delta x_1 U_1^n - \Delta x_1 f_1^n = 0 \end{aligned}$$

et

$$\begin{aligned} & \omega_I \frac{\Delta x_I}{\Delta t_n} (U_I^n - U_I^{n-1}) + [b]^+ (U_I^n - U_{I-1}^n) + [b]^- (U_{I+1/2}^n - U_I^n) \\ & + \frac{2\nu_{I-1} \nu_I (U_I^n - U_{I-1}^n)}{\nu_{I-1} \Delta x_I + \nu_I \Delta x_{I-1}} - \frac{2\nu_I (U_{I+1/2}^n - U_I^n)}{\Delta x_I} + \eta \Delta x_I U_I^n - \Delta x_I f_I^n = 0. \end{aligned}$$

Ainsi, en appliquant les conditions de Dirichlet (1.20) et en utilisant (1.30), nous obtenons

$$\begin{aligned} & U_1^n \left[\omega_1 \frac{\Delta x_1}{\Delta t_n} + |b| + \frac{2\nu_1}{\Delta x_1} + \frac{2\nu_1 \nu_2}{\nu_1 \Delta x_2 + \nu_2 \Delta x_1} + \eta \Delta x_1 \right] \\ & + U_2^n \left[[b]^- - \frac{2\nu_1 \nu_2}{\nu_1 \Delta x_2 + \nu_2 \Delta x_1} \right] \\ & = \omega_1 \frac{\Delta x_1}{\Delta t_n} U_1^{n-1} + \left([b]^+ + \frac{2\nu_1}{\Delta x_1} \right) g_{\frac{1}{2}}^{D,n} + \Delta x_1 f_1^n \end{aligned} \quad (1.32)$$

et

$$\begin{aligned}
 & U_I^n \left[\omega_I \frac{\Delta x_I}{\Delta t_n} + |b| + \frac{2\nu_I}{\Delta x_I} + \frac{2\nu_{I-1}\nu_I}{\nu_{I-1}\Delta x_I + \nu_I\Delta x_{I-1}} + \eta\Delta x_I \right] \\
 & + U_{I-1}^n \left[-[b]^+ - \frac{2\nu_{I-1}\nu_I}{\nu_{I-1}\Delta x_I + \nu_I\Delta x_{I-1}} \right] \\
 & = \omega_I \frac{\Delta x_I}{(\Delta t)_n} U_I^{n-1} + \left(\frac{2\nu_I}{\Delta x_I} - [b]^- \right) g_{I+\frac{1}{2}}^{D,n} + \Delta x_I f_I^n,
 \end{aligned} \tag{1.33}$$

et, en appliquant les conditions de Neumann données par (1.25) ou (1.26), l'équation est donnée par

$$\begin{aligned}
 & U_1^n \left[\omega_1 \frac{\Delta x_1}{\Delta t_n} - [b]^- + \frac{2\nu_1\nu_2}{\nu_1\Delta x_2 + \nu_2\Delta x_1} + \eta\Delta x_1 \right] \\
 & + U_2^n \left[[b]^- - \frac{2\nu_1\nu_2}{\nu_1\Delta x_2 + \nu_2\Delta x_1} \right] \\
 & = \omega_1 \frac{\Delta x_1}{\Delta t_n} U_1^{n-1} - \left(\frac{[b]^+ \Delta x_1}{2\nu_1} + 1 \right) g_{\frac{1}{2}}^{N,n} + \Delta x_1 f_1^n
 \end{aligned} \tag{1.34}$$

et

$$\begin{aligned}
 & U_I^n \left[\omega_I \frac{\Delta x_I}{\Delta t_n} + [b]^+ + \frac{2\nu_{I-1}\nu_I}{\nu_{I-1}\Delta x_I + \nu_I\Delta x_{I-1}} + \eta\Delta x_I \right] \\
 & + U_{I-1}^n \left[-[b]^+ - \frac{2\nu_{I-1}\nu_I}{\nu_{I-1}\Delta x_I + \nu_I\Delta x_{I-1}} \right] \\
 & = \omega_I \frac{\Delta x_I}{(\Delta t)_n} U_I^{n-1} + \left(1 - \frac{[b]^- \Delta x_I}{2\nu_I} \right) g_{I+\frac{1}{2}}^{N,n} + \Delta x_I f_I^n.
 \end{aligned} \tag{1.35}$$

Théorème 1.3. *La matrice associée au schéma décentré classique défini par (1.31) et*

- soit (1.32) et (1.33) pour des conditions de Dirichlet,
- soit (1.34) et (1.35) pour des conditions de Neumann,

est une M -matrice.

Démonstration. On observe que les termes de la matrice vérifient de façon simple les conditions données dans la Définition 1.2. \square

1.2.6 Schéma décentré hybride

En reprenant l'équation (1.8), les expressions (1.9a) et (1.9b) du flux diffusif et la définition du terme de convection donnée par (1.15), le schéma peut être écrit, sur la maille de centre x_i , comme

$$\begin{aligned}
 & \frac{\omega_i \Delta x_i}{\Delta t_n} \left(U_i^n - U_i^{n-1} \right) - \frac{2\nu_i}{\Delta x_i} \left(U_{i+\frac{1}{2}}^n - U_i^n \right) + \frac{2\nu_i}{\Delta x_i} \left(U_i^n - U_{i-\frac{1}{2}}^n \right) \\
 & + [b]^+ \left(U_i^n - U_{i-\frac{1}{2}}^n \right) + [b]^- \left(U_{i+\frac{1}{2}}^n - U_i^n \right) + \eta \Delta x_i U_i^n - \Delta x_i f_i^n = 0,
 \end{aligned} \tag{1.36}$$

soit

$$\begin{aligned} & \frac{\omega_i \Delta x_i}{\Delta t_n} (U_i^n - U_i^{n-1}) + \left(-\frac{2\nu_i}{\Delta x_i} + [b]^- \right) (U_{i+\frac{1}{2}}^n - U_i^n) \\ & + \left(\frac{2\nu_i}{\Delta x_i} + [b]^+ \right) (U_i^n - U_{i-\frac{1}{2}}^n) + \eta \Delta x_i U_i^n - \Delta x_i f_i^n = 0. \end{aligned} \quad (1.37)$$

Les inconnues aux sommets sont éliminées en écrivant l'égalité (1.17) du flux total (flux diffusif et flux convectif) en chacun de ces points :

$$\begin{aligned} & 2\nu_i \frac{U_{i+\frac{1}{2}}^n - U_i^n}{\Delta x_i} - \left([b]^+ U_i^n + [b]^- U_{i+\frac{1}{2}}^n \right) \\ & = 2\nu_{i+1} \frac{U_{i+1}^n - U_{i+\frac{1}{2}}^n}{\Delta x_{i+1}} - \left([b]^+ U_{i+\frac{1}{2}}^n + [b]^- U_{i+1}^n \right), \end{aligned}$$

soit, en utilisant (1.30),

$$U_{i+\frac{1}{2}}^n \left(\frac{2\nu_i}{\Delta x_i} + \frac{2\nu_{i+1}}{\Delta x_{i+1}} + |b| \right) = \left(\frac{2\nu_i}{\Delta x_i} + [b]^+ \right) U_i^n + \left(\frac{2\nu_{i+1}}{\Delta x_{i+1}} - [b]^- \right) U_{i+1}^n.$$

Il vient alors

$$U_{i+\frac{1}{2}}^n = \frac{\left(\frac{2\nu_i}{\Delta x_i} + [b]^+ \right) U_i^n + \left(\frac{2\nu_{i+1}}{\Delta x_{i+1}} - [b]^- \right) U_{i+1}^n}{\left(\frac{2\nu_i}{\Delta x_i} + \frac{2\nu_{i+1}}{\Delta x_{i+1}} + |b| \right)}. \quad (1.38)$$

L'expression précédente (1.38) est utilisée pour calculer les termes de (1.37). Nous avons en effet

$$U_{i+\frac{1}{2}}^n - U_i^n = \frac{\left(\frac{2\nu_{i+1}}{\Delta x_{i+1}} - [b]^- \right) (U_{i+1}^n - U_i^n)}{\left(\frac{2\nu_i}{\Delta x_i} + \frac{2\nu_{i+1}}{\Delta x_{i+1}} + |b| \right)} \quad (1.39)$$

et

$$U_i^n - U_{i-\frac{1}{2}}^n = \frac{\left(\frac{2\nu_{i-1}}{\Delta x_{i-1}} + [b]^+ \right) (U_i^n - U_{i-1}^n)}{\left(\frac{2\nu_i}{\Delta x_i} + \frac{2\nu_{i-1}}{\Delta x_{i-1}} + |b| \right)}. \quad (1.40)$$

Par conséquent, le schéma décentré hybride sur les mailles intérieures peut s'écrire

$$\begin{aligned} & - \frac{\left(\frac{2\nu_i}{\Delta x_i} + [b]^+ \right) \left(\frac{2\nu_{i-1}}{\Delta x_{i-1}} + [b]^+ \right)}{\left(\frac{2\nu_i}{\Delta x_i} + \frac{2\nu_{i-1}}{\Delta x_{i-1}} + |b| \right)} U_{i-1}^n - \frac{\left(\frac{2\nu_i}{\Delta x_i} - [b]^- \right) \left(\frac{2\nu_{i+1}}{\Delta x_{i+1}} - [b]^- \right)}{\left(\frac{2\nu_i}{\Delta x_i} + \frac{2\nu_{i+1}}{\Delta x_{i+1}} + |b| \right)} U_{i+1}^n \\ & + \left[\frac{\omega_i \Delta x_i}{\Delta t_n} + \eta \Delta x_i + \frac{\left(\frac{2\nu_i}{\Delta x_i} - [b]^- \right) \left(\frac{2\nu_{i+1}}{\Delta x_{i+1}} - [b]^- \right)}{\left(\frac{2\nu_i}{\Delta x_i} + \frac{2\nu_{i+1}}{\Delta x_{i+1}} + |b| \right)} + \frac{\left(\frac{2\nu_i}{\Delta x_i} + [b]^+ \right) \left(\frac{2\nu_{i-1}}{\Delta x_{i-1}} + [b]^+ \right)}{\left(\frac{2\nu_i}{\Delta x_i} + \frac{2\nu_{i-1}}{\Delta x_{i-1}} + |b| \right)} \right] U_i^n \\ & = \omega_i \frac{\Delta x_i}{\Delta t_n} U_i^{n-1} + \Delta x_i f_i^n. \end{aligned} \quad (1.41)$$

Pour écrire le schéma sur les mailles de bord en laissant apparaître les inconnues $U_{\frac{1}{2}}^n$ et $U_{I+\frac{1}{2}}^n$, reprenons l'expression du schéma décentré hybride (1.36) et remplaçons $U_{\frac{3}{2}}^n - U_1^n$ (resp. $U_I^n - U_{I-\frac{1}{2}}^n$) par sa valeur tirée de (1.39) (resp. (1.40)). Il vient alors

$$\begin{aligned}
 & - \left(\frac{2\nu_1}{\Delta x_1} + [b]^+ \right) U_{\frac{1}{2}}^n - \frac{\left(\frac{2\nu_1}{\Delta x_1} - [b]^- \right) \left(\frac{2\nu_2}{\Delta x_2} - [b]^- \right)}{\left(\frac{2\nu_1}{\Delta x_1} + \frac{2\nu_2}{\Delta x_2} + |b| \right)} U_2^n \\
 & + \left[\frac{\omega_1 \Delta x_1}{\Delta t_n} + \eta \Delta x_1 + \frac{\left(\frac{2\nu_1}{\Delta x_1} - [b]^- \right) \left(\frac{2\nu_2}{\Delta x_2} - [b]^- \right)}{\left(\frac{2\nu_1}{\Delta x_1} + \frac{2\nu_2}{\Delta x_2} + |b| \right)} + \left(\frac{2\nu_1}{\Delta x_1} + [b]^+ \right) \right] U_1^n \\
 & = \omega_1 \frac{\Delta x_1}{\Delta t_n} U_1^{n-1} + \Delta x_1 f_1^n,
 \end{aligned} \tag{1.42}$$

et de manière analogue

$$\begin{aligned}
 & - \left(\frac{2\nu_I}{\Delta x_I} - [b]^- \right) U_{I+\frac{1}{2}}^n - \frac{\left(\frac{2\nu_{I-1}}{\Delta x_{I-1}} + [b]^+ \right) \left(\frac{2\nu_I}{\Delta x_I} + [b]^+ \right)}{\left(\frac{2\nu_{I-1}}{\Delta x_{I-1}} + \frac{2\nu_I}{\Delta x_I} + |b| \right)} U_{I-1}^n \\
 & + \left[\frac{\omega_I \Delta x_I}{\Delta t_n} + \eta \Delta x_I + \frac{\left(\frac{2\nu_{I-1}}{\Delta x_{I-1}} + [b]^+ \right) \left(\frac{2\nu_I}{\Delta x_I} + [b]^+ \right)}{\left(\frac{2\nu_{I-1}}{\Delta x_{I-1}} + \frac{2\nu_I}{\Delta x_I} + |b| \right)} + \left(\frac{2\nu_I}{\Delta x_I} - [b]^- \right) \right] U_I^n \\
 & = \omega_I \frac{\Delta x_I}{\Delta t_n} U_I^{n-1} + \Delta x_I f_I^n.
 \end{aligned} \tag{1.43}$$

Lorsque les conditions de Dirichlet (1.20) sont appliquées, nous remplaçons simplement $U_{\frac{1}{2}}^n$ et $U_{I+\frac{1}{2}}^n$ par $g_{\frac{1}{2}}^{D,n}$ et $g_{I+\frac{1}{2}}^{D,n}$ dans les expressions (1.42) et (1.43). Il vient alors

$$\begin{aligned}
 & \left[\frac{\omega_1 \Delta x_1}{\Delta t_n} + \eta \Delta x_1 + \frac{\left(\frac{2\nu_1}{\Delta x_1} - [b]^- \right) \left(\frac{2\nu_2}{\Delta x_2} - [b]^- \right)}{\left(\frac{2\nu_1}{\Delta x_1} + \frac{2\nu_2}{\Delta x_2} + |b| \right)} + \left(\frac{2\nu_1}{\Delta x_1} + [b]^+ \right) \right] U_1^n \\
 & - \frac{\left(\frac{2\nu_1}{\Delta x_1} - [b]^- \right) \left(\frac{2\nu_2}{\Delta x_2} - [b]^- \right)}{\left(\frac{2\nu_1}{\Delta x_1} + \frac{2\nu_2}{\Delta x_2} + |b| \right)} U_2^n \\
 & = \omega_1 \frac{\Delta x_1}{\Delta t_n} U_1^{n-1} + \Delta x_1 f_1^n + \left(\frac{2\nu_1}{\Delta x_1} + [b]^+ \right) g_{\frac{1}{2}}^{D,n}
 \end{aligned} \tag{1.44}$$

et

$$\begin{aligned}
& \left[\frac{\omega_I \Delta x_I}{\Delta t_n} + \eta \Delta x_I + \frac{\left(\frac{2\nu_{I-1}}{\Delta x_{I-1}} + [b]^+ \right) \left(\frac{2\nu_I}{\Delta x_I} + [b]^+ \right)}{\left(\frac{2\nu_{I-1}}{\Delta x_{I-1}} + \frac{2\nu_I}{\Delta x_I} + |b| \right)} + \left(\frac{2\nu_I}{\Delta x_I} - [b]^- \right) \right] U_I^n \\
& - \frac{\left(\frac{2\nu_{I-1}}{\Delta x_{I-1}} + [b]^+ \right) \left(\frac{2\nu_I}{\Delta x_I} + [b]^+ \right)}{\left(\frac{2\nu_{I-1}}{\Delta x_{I-1}} + \frac{2\nu_I}{\Delta x_I} + |b| \right)} U_{I-1}^n \\
& = \omega_I \frac{\Delta x_I}{\Delta t_n} U_I^{n-1} + \Delta x_I f_I^n + \left(\frac{2\nu_I}{\Delta x_I} - [b]^- \right) g_{I+\frac{1}{2}}^{D,n}.
\end{aligned} \tag{1.45}$$

Pour écrire la discrétisation du schéma décentré hybride lorsque les conditions de Neumann sont appliquées, nous utilisons les expressions (1.42) et (1.43) avec (1.26). D'où

$$\begin{aligned}
& \left[\frac{\omega_1 \Delta x_1}{\Delta t_n} + \eta \Delta x_1 + \frac{\left(\frac{2\nu_1}{\Delta x_1} - [b]^- \right) \left(\frac{2\nu_2}{\Delta x_2} - [b]^- \right)}{\left(\frac{2\nu_1}{\Delta x_1} + \frac{2\nu_2}{\Delta x_2} + |b| \right)} \right] U_1^n \\
& - \frac{\left(\frac{2\nu_1}{\Delta x_1} - [b]^- \right) \left(\frac{2\nu_2}{\Delta x_2} - [b]^- \right)}{\left(\frac{2\nu_1}{\Delta x_1} + \frac{2\nu_2}{\Delta x_2} + |b| \right)} U_2^n \\
& = \omega_1 \frac{\Delta x_1}{\Delta t_n} U_1^{n-1} + \Delta x_1 f_1^n - \left(1 + \frac{[b]^+ \Delta x_1}{2\nu_1} \right) g_{\frac{1}{2}}^{N,n}
\end{aligned} \tag{1.46}$$

et

$$\begin{aligned}
& \left[\frac{\omega_I \Delta x_I}{\Delta t_n} + \eta \Delta x_I + \frac{\left(\frac{2\nu_{I-1}}{\Delta x_{I-1}} + [b]^+ \right) \left(\frac{2\nu_I}{\Delta x_I} + [b]^+ \right)}{\left(\frac{2\nu_{I-1}}{\Delta x_{I-1}} + \frac{2\nu_I}{\Delta x_I} + |b| \right)} \right] U_I^n \\
& - \frac{\left(\frac{2\nu_{I-1}}{\Delta x_{I-1}} + [b]^+ \right) \left(\frac{2\nu_I}{\Delta x_I} + [b]^+ \right)}{\left(\frac{2\nu_{I-1}}{\Delta x_{I-1}} + \frac{2\nu_I}{\Delta x_I} + |b| \right)} U_{I-1}^n \\
& = \omega_I \frac{\Delta x_I}{\Delta t_n} U_I^{n-1} + \Delta x_I f_I^n + \left(1 - \frac{[b]^- \Delta x_I}{2\nu_I} \right) g_{I+\frac{1}{2}}^{N,n}.
\end{aligned} \tag{1.47}$$

Théorème 1.4. *La matrice associée au schéma décentré hybride défini par (1.41)*

et

- soit (1.44) et (1.45) pour des conditions de Dirichlet,
- soit (1.46) et (1.47) pour des conditions de Neumann,

est une M -matrice.

Démonstration. On observe là encore que les termes de la matrice vérifient de façon simple les conditions données dans la Définition 1.2. \square

Les M-matrices possèdent la propriété du principe du maximum discret permettant de montrer l'existence et l'unicité de la solution associée au problème matriciel. Ainsi, en montrant la propriété de M-matrice pour les schémas centré, décentré classique et décentré hybride, on obtient le caractère bien posé de ces schémas.

Remarque 1.5. *Le principe du maximum et la propriété de M-matrice ne sont que des conditions suffisantes pour montrer que le problème est bien posé. Ces conditions peuvent ne pas être vérifiées bien que le problème soit bien posé comme ce sera le cas en deux dimensions d'espace pour le schéma de type DDFV.*

Suite à la remarque précédente, on donne également ci-après la preuve d'existence et d'unicité de la solution associée au schéma décentré hybride, par estimation d'énergie, en vue du 2D.

Théorème 1.6. *Le problème associé au schéma décentré hybride défini par (1.36) et soit (1.20) pour des conditions de Dirichlet, soit (1.25) pour des conditions de Neumann, est bien posé si la vitesse b est sortante là où la condition de Neumann est appliquée.*

Démonstration. Pour montrer le caractère bien posé du schéma décentré hybride défini par (1.36) avec les conditions de bord Dirichlet et Neumann données par (1.20) et (1.25), il suffit de montrer l'injectivité puisqu'il y a, par construction du schéma, autant d'équations que d'inconnues.

Rappelons le flux total au temps t_n , noté $F_{i,i+\frac{1}{2}}^n$ sur la maille à gauche de $x_{i+\frac{1}{2}}$ ($i \in \llbracket 1, I \rrbracket$) et $F_{i+1,i+\frac{1}{2}}^n$ sur la maille à droite de $x_{i+\frac{1}{2}}$ ($i \in \llbracket 1, I-1 \rrbracket$), écrit à partir des flux de diffusion (1.9) et des flux de convection (1.15). Vu de la cellule de centre x_{i+1} , il vient

$$F_{i+1,i+\frac{1}{2}}^n = 2\nu_{i+1} \frac{U_{i+1}^n - U_{i+\frac{1}{2}}^n}{\Delta x_{i+1}} - \left([b]^+ U_{i+\frac{1}{2}}^n + [b]^- U_{i+1}^n \right), \quad (1.48a)$$

ou vu de la cellule de centre x_i ,

$$F_{i,i+\frac{1}{2}}^n = 2\nu_i \frac{U_{i+\frac{1}{2}}^n - U_i^n}{\Delta x_i} - \left([b]^+ U_i^n + [b]^- U_{i+\frac{1}{2}}^n \right). \quad (1.48b)$$

De plus, la conservation du flux total permet d'écrire $F_{i,i+\frac{1}{2}}^n = F_{i+1,i+\frac{1}{2}}^n$. Ainsi nous rappelons le schéma au temps t_n sur les cellules intérieures $[x_{i-\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}}]$:

$$\omega_i \frac{\Delta x_i}{\Delta t} \left(U_i^n - U_i^{n-1} \right) - F_{i,i+\frac{1}{2}}^n + F_{i,i-\frac{1}{2}}^n + \eta \Delta x_i U_i^n = \Delta x_i f_i^n. \quad (1.49)$$

L'injectivité consiste alors à montrer que, au temps t_n ,

$$\left\{ \begin{array}{l} \omega_i \frac{\Delta x_i}{\Delta t} U_i^n - F_{i,i+\frac{1}{2}}^n + F_{i,i-\frac{1}{2}}^n + \eta \Delta x_i U_i^n = 0 \\ U_{\frac{1}{2}}^n = 0, \quad U_{I+\frac{1}{2}}^n = 0 \quad (\text{Dirichlet}) \\ 2\nu_1 \frac{U_1^n - U_{\frac{1}{2}}^n}{\Delta x_1} = 0, \quad 2\nu_I \frac{U_{I+\frac{1}{2}}^n - U_I^n}{\Delta x_I} = 0 \quad (\text{Neumann}) \end{array} \right. \implies U_i^n = 0 \quad \forall i \in \llbracket 1, I \rrbracket. \quad (1.50)$$

soit, en multipliant la première équation de (1.50) par U_i^n puis en sommant sur $i \in \llbracket 1, I \rrbracket$,

$$\left\{ \begin{array}{l} \sum_{i=1}^I \left(\omega_i \frac{\Delta x_i}{\Delta t_n} + \eta \Delta x_i \right) (U_i^n)^2 + F_{1, \frac{1}{2}}^n U_1^n \\ \quad + \sum_{i=1}^{I-1} F_{i, i+\frac{1}{2}}^n (U_{i+1}^n - U_i^n) - F_{I, I+\frac{1}{2}}^n U_I^n = 0 \\ U_{\frac{1}{2}}^n = 0, \quad U_{I+\frac{1}{2}}^n = 0 \quad (\text{Dirichlet}) \\ 2\nu_1 \frac{U_1^n - U_{\frac{1}{2}}^n}{\Delta x_1} = 0, \quad 2\nu_I \frac{U_{I+\frac{1}{2}}^n - U_I^n}{\Delta x_I} = 0 \quad (\text{Neumann}) \end{array} \right. \implies U_i^n = 0 \quad \forall i \in \llbracket 1, I \rrbracket. \quad (1.51)$$

Cela revient donc à montrer la positivité de

$$F_{1, \frac{1}{2}}^n U_1^n + \sum_{i=1}^{I-1} F_{i, i+\frac{1}{2}}^n (U_{i+1}^n - U_i^n) - F_{I, I+\frac{1}{2}}^n U_I^n \quad \forall i \in \llbracket 1, I \rrbracket. \quad (1.52)$$

Dans la suite, nous omettrons l'exposant n relatif au temps. En réécrivant

$$F_{i, i+\frac{1}{2}}(U_{i+1} - U_i) = F_{i, i+\frac{1}{2}}(U_{i+1} - U_{i+\frac{1}{2}}) + F_{i, i+\frac{1}{2}}(U_{i+\frac{1}{2}} - U_i),$$

il vient, à partir de la définition du flux total (1.48),

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^{I-1} F_{i, i+\frac{1}{2}}(U_{i+1} - U_i) &= \sum_{i=1}^{I-1} \frac{2\nu_i}{\Delta x_i} (U_{i+\frac{1}{2}} - U_i)^2 + \frac{2\nu_{i+1}}{\Delta x_{i+1}} (U_{i+1} - U_{i+\frac{1}{2}})^2 \\ &\quad - \sum_{i=1}^{I-1} ([b]^+ U_{i+\frac{1}{2}} + [b]^- U_{i+1}) (U_{i+1} - U_{i+\frac{1}{2}}) \\ &\quad - \sum_{i=1}^{I-1} ([b]^+ U_i + [b]^- U_{i+\frac{1}{2}}) (U_{i+\frac{1}{2}} - U_i). \end{aligned} \quad (1.53)$$

Détaillons le calcul des deux dernières lignes de (1.53) :

$$\begin{aligned} ([b]^+ U_{i+\frac{1}{2}} + [b]^- U_{i+1}) &= \\ ([b]^+ - [b]^-) \frac{U_{i+1} - U_{i+\frac{1}{2}}}{2} - \frac{[b]^+}{2} U_{i+\frac{1}{2}} - \frac{[b]^-}{2} U_{i+1} - \frac{[b]^-}{2} U_{i+\frac{1}{2}} - \frac{[b]^+}{2} U_{i+1}, \end{aligned} \quad (1.54)$$

et de même

$$\begin{aligned} ([b]^+ U_i + [b]^- U_{i+\frac{1}{2}}) &= \\ ([b]^+ - [b]^-) \frac{U_{i+\frac{1}{2}} - U_i}{2} - \frac{[b]^+}{2} U_i - \frac{[b]^+}{2} U_{i+\frac{1}{2}} - \frac{[b]^-}{2} U_{i+\frac{1}{2}} - \frac{[b]^-}{2} U_i. \end{aligned} \quad (1.55)$$

Puisque $[b]^+ + [b]^- = b$, nous pouvons réécrire les deux dernières lignes de (1.53)

comme

$$\begin{aligned}
& - \sum_{i=1}^{I-1} \left([b]^+ U_{i+\frac{1}{2}} + [b]^- U_{i+1} \right) \left(U_{i+1} - U_{i+\frac{1}{2}} \right) \\
& \quad + \left([b]^+ U_i + [b]^- U_{i+\frac{1}{2}} \right) \left(U_{i+\frac{1}{2}} - U_i \right) \\
& = \sum_{i=1}^{I-1} \frac{|b|}{2} \left(U_{i+1} - U_{i+\frac{1}{2}} \right)^2 + \sum_{i=1}^{I-1} \frac{|b|}{2} \left(U_{i+\frac{1}{2}} - U_i \right)^2 \\
& - \sum_{i=1}^{I-1} \frac{b}{2} \left(U_{i+1} + U_{i+\frac{1}{2}} \right) \left(U_{i+1} - U_{i+\frac{1}{2}} \right) - \sum_{i=1}^{I-1} \frac{b}{2} \left(U_i + U_{i+\frac{1}{2}} \right) \left(U_{i+\frac{1}{2}} - U_i \right),
\end{aligned} \tag{1.56}$$

soit

$$\begin{aligned}
& - \sum_{i=1}^{I-1} \left([b]^+ U_{i+\frac{1}{2}} + [b]^- U_{i+1} \right) \left(U_{i+1} - U_{i+\frac{1}{2}} \right) \\
& \quad + \left([b]^+ U_i + [b]^- U_{i+\frac{1}{2}} \right) \left(U_{i+\frac{1}{2}} - U_i \right) \\
& = \sum_{i=1}^{I-1} \frac{|b|}{2} \left(U_{i+1} - U_{i+\frac{1}{2}} \right)^2 + \sum_{i=1}^{I-1} \frac{|b|}{2} \left(U_{i+\frac{1}{2}} - U_i \right)^2 \\
& - \sum_{i=1}^{I-1} \frac{b}{2} \left[\left(U_{i+1} \right)^2 - \left(U_{i+\frac{1}{2}} \right)^2 + \left(U_{i+\frac{1}{2}} \right)^2 - \left(U_i \right)^2 \right].
\end{aligned} \tag{1.57}$$

L'expression (1.53) peut donc être écrite comme

$$\begin{aligned}
\sum_{i=1}^{I-1} F_{i,i+\frac{1}{2}} (U_{i+1} - U_i) & = \sum_{i=1}^{I-1} \frac{2\nu_i}{\Delta x_i} \left(U_{i+\frac{1}{2}} - U_i \right)^2 + \frac{2\nu_{i+1}}{\Delta x_{i+1}} \left(U_{i+1} - U_{i+\frac{1}{2}} \right)^2 \\
& + \sum_{i=1}^{I-1} \frac{|b|}{2} \left(U_{i+1} - U_{i+\frac{1}{2}} \right)^2 + \sum_{i=1}^{I-1} \frac{|b|}{2} \left(U_{i+\frac{1}{2}} - U_i \right)^2 \\
& - \frac{b}{2} (U_I)^2 + \frac{b}{2} (U_1)^2.
\end{aligned} \tag{1.58}$$

Revenons maintenant à l'expression (1.52) dont il faut montrer la positivité. Grâce à (1.58), cette expression s'écrit

$$\begin{aligned}
& \sum_{i=1}^{I-1} \frac{2\nu_i}{\Delta x_i} \left(U_{i+\frac{1}{2}} - U_i \right)^2 + \frac{2\nu_{i+1}}{\Delta x_{i+1}} \left(U_{i+1} - U_{i+\frac{1}{2}} \right)^2 \\
& + \sum_{i=1}^{I-1} \frac{|b|}{2} \left(U_{i+1} - U_{i+\frac{1}{2}} \right)^2 + \sum_{i=1}^{I-1} \frac{|b|}{2} \left(U_{i+\frac{1}{2}} - U_i \right)^2 \\
& + F_{1,\frac{1}{2}} U_1 + \frac{b}{2} (U_1)^2 - F_{I,I+\frac{1}{2}} U_I - \frac{b}{2} (U_I)^2
\end{aligned} \tag{1.59}$$

Seuls les termes aux bords restent à envisager puisque tous les autres termes sont positifs. Les conditions aux limites homogènes de Dirichlet (1.20) se traduisent par $U_{\frac{1}{2}} = 0$ et $U_{I+\frac{1}{2}} = 0$ tandis que celles de Neumann (1.25) conduisent à $U_{\frac{1}{2}} = U_1$ et $U_{I+\frac{1}{2}} = U_I$.

En $x_{\frac{1}{2}}$, la condition de Dirichlet ($U_{\frac{1}{2}} = 0$) donne

$$F_{1,\frac{1}{2}} U_1 + \frac{b}{2} (U_1)^2 = \frac{2\nu_1}{\Delta x_1} (U_1)^2 - [b]^- (U_1)^2 + \frac{b}{2} (U_1)^2,$$

qui est toujours positif. La condition de Neumann ($U_{\frac{1}{2}} = U_1$) donne

$$F_{1,\frac{1}{2}}U_1 + \frac{b}{2}(U_1)^2 = -([b]^+ + [b]^-)(U_1)^2 + \frac{b}{2}(U_1)^2 = -\frac{b}{2}(U_1)^2,$$

qui est positif sous la condition que la vitesse soit sortante ($b \leq 0$) en $x_{\frac{1}{2}}$.

Nous montrons de même que

$$-F_{I,I+\frac{1}{2}}U_I - \frac{b}{2}(U_I)^2 = \frac{2\nu_I}{\Delta x_I}(U_I)^2 + [b]^+(U_I)^2 - \frac{b}{2}(U_I)^2,$$

qui est toujours positif. Pour la condition de Neumann, nous avons

$$-F_{I,I+\frac{1}{2}}U_I - \frac{b}{2}(U_I)^2 = ([b]^+ + [b]^-)(U_I)^2 - \frac{b}{2}(U_I)^2 = \frac{b}{2}(U_I)^2,$$

qui est positif sous la condition que la vitesse soit sortante ($b \geq 0$) en $x_{I+\frac{1}{2}}$. \square

Remarque 1.7. *Nous avons montré qu'il est possible de prouver l'existence et l'unicité de la solution du schéma décentré hybride, par estimation d'énergie. Toutefois, nous savons le montrer avec une condition supplémentaire suffisante (la vitesse b est sortante là où la condition de Neumann est appliquée) par rapport à la démonstration du théorème 1.4 de caractérisation de la M -matrice associée au schéma.*

Chapitre 2

Les schémas multidomaine 1D

Sommaire

2.1	Présentation des schémas multidomaine	41
2.1.1	Le schéma centré	41
2.1.2	Le schéma décentré classique	44
2.1.3	Le schéma décentré hybride	51
2.2	Identité de la solution multidomaine et monodomaine .	54

Dans le chapitre précédent, nous avons présenté les schémas centré, décentré classique et décentré hybride pour le problème monodomaine (3) avec des conditions limites de type Dirichlet ou Neumann. La propriété de M-matrice, vérifiée pour chacun des trois schémas, assure la positivité des schémas (avec une condition dans le cas du schéma centré) : ils sont donc bien posés. Dans la suite, nous privilégierons le schéma décentré pour traiter la convection et on utilisera le schéma centré comme point de départ et comme référence pour les autres schémas.

Dans ce chapitre, nous présentons le problème multidomaine pour le problème continu (3). Pour cela, nous nous plaçons dans le cadre simplifié de deux sous-domaines pour plus de clarté, bien que tout puisse être étendu à un nombre quelconque de sous-domaines sans difficulté supplémentaire. Soient Ω_L (gauche) et Ω_R (droite) ces deux sous-domaines unidimensionnel, séparés par l'interface réduite au point x_Γ . L'exposant L (resp. R) sera toujours relatif au sous-domaine Ω_L (resp. Ω_R).

Résoudre le problème multidomaine consiste alors à résoudre deux sous-problèmes locaux en espace et en temps sur chacun des deux sous-domaines puis à transférer la solution et le flux associé via les conditions de transmission définies sur l'interface espace-temps $\{x_\Gamma\} \times (0, T)$. Ces conditions d'interface permettent de raccorder à l'interface la solution des deux sous-domaines et le flux total, qui sont tous deux continus en tout point du domaine Ω , a fortiori en x_Γ . Sur l'interface espace-temps $\{x_\Gamma\} \times (0, T)$, cette double condition

$$c^L = c^R \quad \text{et} \quad \nu^L \partial_x c^L - bc^L = \nu^R \partial_x c^R - bc^R$$

peut être réécrite [91], moyennant une combinaison linéaire, sous la forme équiva-

lente

$$\nu^L \partial_x c^L - bc^L + \Lambda^L c^L = \nu^R \partial_x c^R - bc^R + \Lambda^L c^R \quad \text{sur } \{x_\Gamma\} \times (0, T) \quad (2.1)$$

et

$$-\nu^R \partial_x c^R + bc^R + \Lambda^R c^R = -\nu^L \partial_x c^L + bc^L + \Lambda^R c^L \quad \text{sur } \{x_\Gamma\} \times (0, T), \quad (2.2)$$

où $\Lambda^L u = \alpha^L u + \beta^L \partial_t u$ et $\Lambda^R u = \alpha^R u + \beta^R \partial_t u$, avec α^L et α^R des paramètres réels strictement positifs, et β^L et β^R positifs ou nuls. Les conditions (2.1) et (2.2) sont dites de type Robin si elles sont d'ordre 0 ($\beta^L = \beta^R = 0$), d'ordre 1 sinon.

En notant $f^L := f|_{\Omega_L}$ (resp. $f^R := f|_{\Omega_R}$) et g^R (resp. g^L) le second membre de (2.1) (resp. (2.2)), le problème multidomaine au niveau continu consiste donc à résoudre

$$\begin{cases} \omega^L \partial_t c^L - \partial_x (\nu^L \partial_x c^L - bc^L) + \eta c^L = f^L & \text{dans } \Omega_L \times (0, T) \\ \nu^L \partial_x c^L - bc^L + \Lambda^L c^L = g^R & \text{sur } \{x_\Gamma\} \times (0, T) \end{cases} \quad (2.3)$$

et

$$\begin{cases} \omega^R \partial_t c^R - \partial_x (\nu^R \partial_x c^R - bc^R) + \eta c^R = f^R & \text{dans } \Omega_R \times (0, T) \\ -\nu^R \partial_x c^R + bc^R + \Lambda^R c^R = g^L & \text{sur } \{x_\Gamma\} \times (0, T). \end{cases} \quad (2.4)$$

Bien que le problème multidomaine continu (2.3) - (2.4) soit équivalent au problème monodomaine (3), il faut noter que pour un schéma donné (centré, décentré classique ou décentré hybride), la solution peut ne pas être identique si on ne prend garde à la discrétisation de la condition d'interface et des équations résolues sur les cellules liées à l'interface. Par exemple, [50] montre à l'aide d'un contre-exemple que cette propriété n'est pas toujours vérifiée pour le schéma décentré standard, ce qui implique que la résolution du problème monodomaine discret et celle du problème multidomaine discret ne sont pas nécessairement identiques. Si la propriété d'identité de la solution monodomaine et multidomaine est jugée fondamentale, c'est parce que le schéma monodomaine est le schéma de référence pour lequel l'analyse est en général connue. Sans cela, il faudrait refaire l'analyse du schéma multidomaine.

L'objet de ce chapitre est de définir, pour les problèmes (2.3) et (2.4), les schémas multidomaine correspondants aux trois schémas monodomaine présentés dans le chapitre 1. Nous montrons d'une part que chacun de ces schémas multidomaine admet une unique solution et d'autre part que cette solution coïncide avec la solution monodomaine.

Comme dans la description discrète du schéma monodomaine, nous présentons les schémas multidomaine avec l'ordre 0 en temps du schéma Galerkin Discontinu. Là encore, la notation U remplacera systématiquement U_0 . Le domaine global Ω est discrétisé en I sous-intervalles de centre x_i et de pas d'espace Δx_i . On note $\{x_\Gamma\} = \{x_{P+\frac{1}{2}}\}$, de telle sorte que $\Omega_L = (x_{\frac{1}{2}}, x_{P+\frac{1}{2}})$ et $\Omega_R = (x_{P+\frac{1}{2}}, x_{I+\frac{1}{2}})$.

Nous montrerons dans le paragraphe 2.2 l'équivalence des schémas multidomaine et monodomaine.

2.1 Présentation des schémas multidomaine

En repartant des schémas monodomaine centré, décentré classique et décentré hybride donnés dans le chapitre 1, nous définissons au moins une formulation multidomaine pour chacun d'eux. La formulation multidomaine consiste à définir la discrétisation de l'EDP et de la condition d'interface. Le schéma monodomaine (voir Chapitre 1) peut être appliqué au moins sur toutes les cellules qui ne sont pas liées à l'interface. Il reste à définir la discrétisation de l'EDP sur les cellules liées à l'interface ainsi que celle des conditions d'interface. Nous verrons que si les schémas centré et décentré hybride s'adaptent naturellement à une formulation multidomaine, il n'en est pas de même pour le schéma décentré classique. Dans ce qui suit, nous présentons ces schémas multidomaine et nous nous intéressons à leur caractère bien posé.

2.1.1 Le schéma centré

Nous écrivons le schéma centré multidomaine en repartant de l'équation exacte (1.8) obtenue après intégration de l'EDP sur la maille de centre x_P , où nous utilisons les approximations du flux diffusif (1.16b) en $x_{P-\frac{1}{2}}$ et (1.9a) en $x_{P+\frac{1}{2}}$, et les approximations du flux convectif (1.12) en $x_{P-\frac{1}{2}}$ et $bU_{P+\frac{1}{2}}^{L,n}$ sur l'interface $\{x_{P+\frac{1}{2}}\}$. Nous obtenons alors

$$\begin{aligned} & \frac{\omega_P \Delta x_P}{\Delta t_n} (U_P^{L,n} - U_P^{L,n-1}) \\ & - \frac{2\nu_P}{\Delta x_P} (U_{P+\frac{1}{2}}^{L,n} - U_P^{L,n}) + bU_{P+\frac{1}{2}}^{L,n} + \frac{2\nu_{P-1}\nu_P(U_P^{L,n} - U_{P-1}^{L,n})}{\nu_{P-1}\Delta x_P + \nu_P\Delta x_{P-1}} \\ & - b \left[\frac{\nu_{P-1}\Delta x_P}{\nu_{P-1}\Delta x_P + \nu_P\Delta x_{P-1}} U_{P-1}^n + \frac{\nu_P\Delta x_{P-1}}{\nu_{P-1}\Delta x_P + \nu_P\Delta x_{P-1}} U_P^n \right] \\ & + \eta \Delta x_P U_P^{L,n} - \Delta x_P f_P^{L,n} = 0, \end{aligned} \quad (2.5)$$

soit, en rappelant que $D_i = \nu_i \Delta x_{i+1} + \nu_{i+1} \Delta x_i$ pour $i = 2, \dots, I-1$,

$$\begin{aligned} & U_P^{L,n} \left[\omega_P \frac{\Delta x_P}{\Delta t_n} - b \frac{\nu_P \Delta x_{P-1}}{D_{P-1}} + \frac{2\nu_P}{\Delta x_P} + \frac{2\nu_{P-1}\nu_P}{D_{P-1}} + \eta \Delta x_P \right] \\ & + U_{P-1}^{L,n} \left[-b \frac{\nu_{P-1}\Delta x_P}{D_{P-1}} - \frac{2\nu_{P-1}\nu_P}{D_{P-1}} \right] - \left(\frac{2\nu_P}{\Delta x_P} - b \right) U_{P+\frac{1}{2}}^{L,n} \\ & = \omega_P \frac{\Delta x_P}{\Delta t_n} U_P^{L,n-1} + \Delta x_P f_P^{L,n}. \end{aligned} \quad (2.6)$$

La condition d'interface discrétise le flux total en $\{x_{P+\frac{1}{2}}\}$ de la même manière que dans le schéma (2.5). Il vient donc

$$2\nu_P \frac{U_{P+\frac{1}{2}}^{L,n} - U_P^{L,n}}{\Delta x_P} - bU_{P+\frac{1}{2}}^{L,n} + \alpha^L U_{P+\frac{1}{2}}^{L,n} + \frac{\beta^L}{\Delta t_n} (U_{P+\frac{1}{2}}^{L,n} - U_{P+\frac{1}{2}}^{L,n-1}) = g_{P+\frac{1}{2}}^{R,n}, \quad (2.7)$$

où $g_{P+\frac{1}{2}}^{R,n}$ est une approximation de g^R (sur $\{x_{P+\frac{1}{2}}\}$) à l'instant t_n et les autres notations identiques à celle du chapitre 1.

D'une manière analogue, nous écrivons le schéma multidomaine sur la maille de centre x_{P+1} , située à droite de l'interface $x_{P+\frac{1}{2}}$, comme

$$\begin{aligned} & \frac{\omega_{P+1}\Delta x_{P+1}}{\Delta t_n} \left(U_{P+1}^{R,n} - U_{P+1}^{R,n-1} \right) \\ & + \frac{2\nu_{P+1}}{\Delta x_{P+1}} \left(U_{P+1}^{R,n} - U_{P+\frac{1}{2}}^{R,n} \right) - bU_{P+\frac{1}{2}}^{R,n} - \frac{2\nu_{P+1}\nu_{P+2}(U_{P+2}^{R,n} - U_{P+1}^{R,n})}{\nu_{P+1}\Delta x_{P+2} + \nu_{P+2}\Delta x_{P+1}} \\ & + b \left[\frac{\nu_{P+1}\Delta x_{P+2}}{\nu_{P+1}\Delta x_{P+2} + \nu_{P+2}\Delta x_{P+1}} U_{P+1}^{R,n} + \frac{\nu_{P+2}\Delta x_{P+1}}{\nu_{P+1}\Delta x_{P+2} + \nu_{P+2}\Delta x_{P+1}} U_{P+2}^{R,n} \right] \\ & + \eta\Delta x_{P+1}U_{P+1}^{R,n} - \Delta x_{P+1}f_{P+1}^{R,n} = 0, \end{aligned} \quad (2.8)$$

ou encore

$$\begin{aligned} & U_{P+1}^{R,n} \left[\omega_{P+1} \frac{\Delta x_{P+1}}{\Delta t_n} + b \frac{\nu_{P+1}\Delta x_{P+2}}{D_{P+1}} + \frac{2\nu_{P+1}}{\Delta x_{P+1}} + \frac{2\nu_{P+1}\nu_{P+2}}{D_{P+1}} + \eta\Delta x_{P+1} \right] \\ & + U_{P+2}^{R,n} \left[b \frac{\nu_{P+2}\Delta x_{P+1}}{D_{P+1}} - \frac{2\nu_{P+1}\nu_{P+2}}{D_{P+1}} \right] - \left(b + \frac{2\nu_{P+1}}{\Delta x_{P+1}} \right) U_{P+\frac{1}{2}}^{R,n} \\ & = \omega_{P+1} \frac{\Delta x_{P+1}}{\Delta t_n} U_{P+1}^{R,n-1} + \Delta x_{P+1} f_{P+1}^{R,n}. \end{aligned} \quad (2.9)$$

La discrétisation de la condition d'interface permettant de déterminer l'inconnue $U_{P+\frac{1}{2}}^{R,n}$ utilise la discrétisation du flux total apparaissant dans (2.8). D'où

$$-2\nu_{P+1} \frac{U_{P+1}^{R,n} - U_{P+\frac{1}{2}}^{R,n}}{\Delta x_{P+1}} + bU_{P+\frac{1}{2}}^{R,n} + \alpha^R U_{P+\frac{1}{2}}^{R,n} + \frac{\beta^R}{\Delta t_n} \left(U_{P+\frac{1}{2}}^{R,n} - U_{P+\frac{1}{2}}^{R,n-1} \right) = g_{P+\frac{1}{2}}^{L,n}, \quad (2.10)$$

avec $g_{P+\frac{1}{2}}^{L,n}$ une approximation de g^L (sur $\{x_{P+\frac{1}{2}}\}$) à l'instant t_n .

Les conditions d'interface (2.7) et (2.10) permettent de déterminer $U_{P+\frac{1}{2}}^{L,n}$ et $U_{P+\frac{1}{2}}^{R,n}$:

$$\left\{ \begin{aligned} U_{P+\frac{1}{2}}^{L,n} &= \frac{\frac{2\nu_P}{\Delta x_P} U_P^{L,n} + \frac{\beta^L}{\Delta t_n} U_{P+\frac{1}{2}}^{L,n-1} + g_{P+\frac{1}{2}}^{R,n}}{\frac{2\nu_P}{\Delta x_P} - b + \alpha^L + \frac{\beta^L}{\Delta t_n}} \\ U_{P+\frac{1}{2}}^{R,n} &= \frac{\frac{2\nu_{P+1}}{\Delta x_{P+1}} U_{P+1}^{R,n} + \frac{\beta^R}{\Delta t_n} U_{P+\frac{1}{2}}^{R,n-1} + g_{P+\frac{1}{2}}^{L,n}}{\frac{2\nu_{P+1}}{\Delta x_{P+1}} + b + \alpha^R + \frac{\beta^R}{\Delta t_n}}. \end{aligned} \right. \quad (2.11)$$

Ainsi, en insérant les expressions (2.11) dans (2.6) et (2.9), nous obtenons les lignes de la matrice associée au schéma centré sur les mailles P et $P+1$. En reprenant les notations du chapitre 1, nous avons

$$\begin{aligned} A_P &= \omega_P \frac{\Delta x_P}{\Delta t_n} - b \frac{\nu_P \Delta x_{P-1}}{D_{P-1}} + \frac{2\nu_P}{\Delta x_P} + \frac{2\nu_{P-1}\nu_P}{D_{P-1}} + \eta\Delta x_P \\ & \quad - \left(\frac{2\nu_P}{\Delta x_P} - b \right) \frac{\frac{2\nu_P}{\Delta x_P}}{\frac{2\nu_P}{\Delta x_P} - b + \alpha^L + \frac{\beta^L}{\Delta t_n}}, \end{aligned}$$

soit

$$A_P = \omega_P \frac{\Delta x_P}{\Delta t_n} + \frac{\nu_P(2\nu_{P-1} - b\Delta x_{P-1})}{D_{P-1}} + \eta\Delta x_P + \frac{\left(\frac{2\nu_P}{\Delta x_P}\right) \left(\alpha^L + \frac{\beta^L}{\Delta t_n}\right)}{\frac{2\nu_P}{\Delta x_P} - b + \alpha^L + \frac{\beta^L}{\Delta t_n}}. \quad (2.12)$$

Le terme de la diagonale supérieure est donné par

$$C_P = -b \frac{\nu_{P-1}\Delta x_P}{D_{P-1}} - \frac{2\nu_{P-1}\nu_P}{D_{P-1}}. \quad (2.13)$$

De même,

$$\begin{aligned} A_{P+1} = & \omega_{P+1} \frac{\Delta x_{P+1}}{\Delta t_n} + b \frac{\nu_{P+1}\Delta x_{P+2}}{D_{P+1}} + \frac{2\nu_{P+1}}{\Delta x_{P+1}} + \frac{2\nu_{P+1}\nu_{P+2}}{D_{P+1}} + \eta\Delta x_{P+1} \\ & - \left(b + \frac{2\nu_{P+1}}{\Delta x_{P+1}}\right) \frac{\frac{2\nu_{P+1}}{\Delta x_{P+1}}}{\frac{2\nu_{P+1}}{\Delta x_{P+1}} + b + \alpha^R + \frac{\beta^R}{\Delta t_n}}, \end{aligned}$$

soit

$$\begin{aligned} A_{P+1} = & \omega_{P+1} \frac{\Delta x_{P+1}}{\Delta t_n} + b \frac{\nu_{P+1}\Delta x_{P+2}}{D_{P+1}} + \frac{2\nu_{P+1}\nu_{P+2}}{D_{P+1}} + \eta\Delta x_{P+1} \\ & + \frac{\left(b + \frac{2\nu_{P+1}}{\Delta x_{P+1}}\right) \left(\alpha^R + \frac{\beta^R}{\Delta t_n}\right)}{\frac{2\nu_{P+1}}{\Delta x_{P+1}} + b + \alpha^R + \frac{\beta^R}{\Delta t_n}}. \end{aligned} \quad (2.14)$$

Et le terme de la diagonale inférieure s'écrit

$$B_{P+1} = b \frac{\nu_{P+2}\Delta x_{P+1}}{D_{P+1}} - \frac{2\nu_{P+1}\nu_{P+2}}{D_{P+1}}. \quad (2.15)$$

Théorème 2.1. Soit la matrice associée au schéma centré définie par (1.19) et

- soit (1.23) et (1.24) pour des conditions de Dirichlet,
- soit (1.27) et (1.28) pour des conditions de Neumann,

et (2.6) et (2.9) pour les conditions d'interface (2.7) et (2.10) avec α^L et α^R des paramètres réels strictement positifs, et β^L et β^R positifs ou nuls.

C'est une M-matrice si $\forall i = 1, \dots, I$, $\Delta x_i \leq \frac{2\nu_i}{|b|}$ et $\alpha^L + \frac{\beta^L}{\Delta t_n} \geq |b|$.

Démonstration. Puisque les lignes de la matrice correspondant aux mailles intérieures et aux mailles de bord Dirichlet et Neumann ont été analysées dans la preuve du théorème 1.1, il reste seulement à considérer les lignes correspondant aux conditions d'interface, soit les lignes P et $P + 1$.

Sur la ligne $P + 1$,

$$B_{P+1} = b \frac{\nu_{P+2}\Delta x_{P+1}}{D_{P+1}} - \frac{2\nu_{P+1}\nu_{P+2}}{D_{P+1}} \leq 0 \iff \Delta x_{P+1} \leq \frac{2\nu_{P+1}}{|b|}.$$

De plus, $A_{P+1}^n + B_{P+1}^n$ est clairement positif sans restriction pour $b > 0$ et avec la condition $\Delta x_{P+1} \leq \frac{2\nu_{P+1}}{|b|}$ si $b \leq 0$, car les paramètres α et β sont positifs.

Sur la ligne P ,

$$C_P = -b \frac{\nu_{P-1} \Delta x_P}{D_{P-1}} - \frac{2\nu_{P-1} \nu_P}{D_{P-1}} \leq 0 \iff \Delta x_P \leq \frac{2\nu_P}{|b|}.$$

D'autre part, en ajoutant (2.12) et (2.13), on trouve

$$A_P + C_P = \omega_P \frac{\Delta x_P}{\Delta t_n} - b + \frac{\left(\frac{2\nu_P}{\Delta x_P}\right) \left(\alpha^L + \frac{\beta^L}{\Delta t_n}\right)}{\frac{2\nu_P}{\Delta x_P} - b + \alpha^L + \frac{\beta^L}{\Delta t_n}} + \eta \Delta x_P, \quad (2.16)$$

ou encore

$$\begin{aligned} A_P + C_P &= \omega_P \frac{\Delta x_P}{\Delta t_n} + \eta \Delta x_P + \frac{-\frac{2b\nu_P}{\Delta x_P} + b^2 + \left(\frac{2\nu_P}{\Delta x_P} - b\right) \left(\alpha^L + \frac{\beta^L}{\Delta t_n}\right)}{\frac{2\nu_P}{\Delta x_P} - b + \alpha^L + \frac{\beta^L}{\Delta t_n}} \\ &= \omega_P \frac{\Delta x_P}{\Delta t_n} + \eta \Delta x_P + \frac{b \left(b - \alpha^L - \frac{\beta^L}{\Delta t_n}\right) - \frac{2\nu_P}{\Delta x_P} \left(b - \alpha^L - \frac{\beta^L}{\Delta t_n}\right)}{\frac{2\nu_P}{\Delta x_P} - b + \alpha^L + \frac{\beta^L}{\Delta t_n}} \\ &= \omega_P \frac{\Delta x_P}{\Delta t_n} + \eta \Delta x_P + \frac{\left(b - \alpha^L - \frac{\beta^L}{\Delta t_n}\right) \left[b - \frac{2\nu_P}{\Delta x_P}\right]}{\frac{2\nu_P}{\Delta x_P} - b + \alpha^L + \frac{\beta^L}{\Delta t_n}}, \end{aligned}$$

qui est positif si $\Delta x_P \leq \frac{2\nu_P}{|b|}$ et $\alpha^L + \frac{\beta^L}{\Delta t_n} \geq |b|$. □

2.1.2 Le schéma décentré classique

Pour comprendre en quoi le schéma décentré classique ne s'adapte pas naturellement à la formulation multidomaine, écrivons le schéma monodomaine et multidomaine sur la maille $P + 1$ (maille intérieure dans le cas monodomaine et maille de bord dans le cas multidomaine) avec $b > 0$. Rappelons le schéma monodomaine donné par (1.18) sur la maille intérieure $P + 1$:

$$\begin{aligned} &\frac{\omega_{P+1} \Delta x_{P+1}}{\Delta t_n} (U_{P+1}^n - U_{P+1}^{n-1}) \\ &- \frac{2\nu_{P+1} \nu_{P+2} (U_{P+2}^n - U_{P+1}^n)}{\nu_{P+1} \Delta x_{P+2} + \nu_{P+2} \Delta x_{P+1}} + \frac{2\nu_P \nu_{P+1} (U_{P+1}^n - U_P^n)}{\nu_P \Delta x_{P+1} + \nu_{P+1} \Delta x_P} \\ &+ b U_{P+1}^n - b U_P^n + \eta \Delta x_{P+1} U_{P+1}^n - \Delta x_{P+1} f_{P+1}^n = 0. \end{aligned} \quad (2.17)$$

Le schéma multidomaine est défini à partir de l'équation exacte (1.8) où les flux diffusifs sont définis par (1.9a) en $x_{P+\frac{1}{2}}$ et (1.16b) en $x_{P+\frac{3}{2}}$ et le flux convectif en

$x_{P+\frac{3}{2}}$ par (1.13). Quant à l'approximation du flux convectif décentré en $x_{P+\frac{1}{2}}$, on le note $b\bar{U}_{P+\frac{1}{2}}^{R,n}$. Cela se traduit par

$$\begin{aligned} & \frac{\omega_{P+1}\Delta x_{P+1}}{\Delta t_n} (U_{P+1}^{R,n} - U_{P+1}^{R,n-1}) \\ & - \frac{2\nu_{P+1}\nu_{P+2}(U_{P+2}^{R,n} - U_{P+1}^{R,n})}{\nu_{P+1}\Delta x_{P+2} + \nu_{P+2}\Delta x_{P+1}} + \frac{2\nu_{P+1}}{\Delta x_{P+1}} (U_{P+1}^{R,n} - U_{P+\frac{1}{2}}^{R,n}) \\ & + bU_{P+1}^{R,n} - b\bar{U}_{P+\frac{1}{2}}^{R,n} + \eta\Delta x_{P+1}U_{P+1}^{R,n} - \Delta x_{P+1}f_{P+1}^{R,n} = 0. \end{aligned} \quad (2.18)$$

La difficulté tient au fait que le flux convectif $b\bar{U}_{P+\frac{1}{2}}^{R,n}$ ne peut pas être décentré, la valeur décentrée $bU_P^{L,n}$ étant invisible au regard du sous-domaine Ω_R .

Si nous choisissons de prendre $b\bar{U}_{P+\frac{1}{2}}^{R,n} = bU_{P+\frac{1}{2}}^{R,n}$, et que l'on continue à discrétiser la condition de transmission comme dans le cas centré, à savoir

$$\begin{aligned} & -2\nu_{P+1}\frac{U_{P+1}^{R,n} - U_{P+\frac{1}{2}}^{R,n}}{\Delta x_{P+1}} + bU_{P+\frac{1}{2}}^{R,n} + \alpha^R U_{P+\frac{1}{2}}^{R,n} + \frac{\beta^R}{\Delta t_n} (U_{P+\frac{1}{2}}^{R,n} - U_{P+\frac{1}{2}}^{R,n-1}) \\ & = -2\nu_P\frac{U_{P+\frac{1}{2}}^{L,n} - U_P^{L,n}}{\Delta x_P} + bU_{P+\frac{1}{2}}^{L,n} + \alpha^R U_{P+\frac{1}{2}}^{L,n} + \frac{\beta^R}{\Delta t_n} (U_{P+\frac{1}{2}}^{L,n} - U_{P+\frac{1}{2}}^{L,n-1}), \end{aligned} \quad (2.19)$$

la continuité de la solution à l'interface ($U_{P+\frac{1}{2}}^{R,n} = U_{P+\frac{1}{2}}^{L,n}$) implique que nous avons de nouveau

$$U_{P+\frac{1}{2}}^{L,n} = U_{P+\frac{1}{2}}^{R,n} = \frac{\nu_P\Delta x_{P+1}U_P^{L,n} + \nu_{P+1}\Delta x_P U_{P+1}^{R,n}}{\nu_P\Delta x_{P+1} + \nu_{P+1}\Delta x_P}. \quad (2.20)$$

Si le flux diffusif

$$2\nu_P\frac{U_{P+\frac{1}{2}}^{L,n} - U_P^{L,n}}{\Delta x_P} = 2\nu_{P+1}\frac{U_{P+1}^{R,n} - U_{P+\frac{1}{2}}^{R,n}}{\Delta x_{P+1}}$$

correspond bien au flux diffusif du schéma monodomaine, il n'en est pas de même pour le flux convectif puisque pour le schéma multidomaine

$$b\bar{U}_{P+\frac{1}{2}}^{R,n} = b\left(\frac{\nu_P\Delta x_{P+1}U_P^{L,n} + \nu_{P+1}\Delta x_P U_{P+1}^{R,n}}{\nu_P\Delta x_{P+1} + \nu_{P+1}\Delta x_P}\right),$$

alors qu'il vaut $b\bar{U}_{P+\frac{1}{2}}^{R,n} = bU_P^{L,n}$ pour le schéma monodomaine.

Les schémas monodomaine et multidomaine seront identiques si et seulement si $b\bar{U}_{P+\frac{1}{2}}^{R,n} = bU_P^{L,n}$. Comme la condition d'interface (2.19) implique (2.20), qui lui-même conduit à

$$U_P^{L,n} = \frac{(\nu_P\Delta x_{P+1} + \nu_{P+1}\Delta x_P)U_{P+\frac{1}{2}}^{R,n} - \nu_{P+1}\Delta x_P U_{P+1}^{R,n}}{\nu_P\Delta x_{P+1}}, \quad (2.21)$$

il suffit de choisir pour $b\bar{U}_{P+\frac{1}{2}}^{R,n}$ la valeur donnée par (2.21), qui est bien locale au sous-domaine Ω_R . Le schéma associé sera désigné par "décentré 0".

Une autre manière de définir ce flux convectif décentré, dans le contexte, qui est le nôtre, d'un algorithme itératif pour la résolution du problème multidomaine, est de prendre la valeur $bU_P^{L,n}$ à l'itération précédente. Ce schéma sera désigné dans la suite par "décentré 1". Il semble plus naturel que le précédent (pour lequel l'information du flux décentré n'est pas en amont!), mais a l'inconvénient de ne pas être local à l'itération courante du processus itératif.

Notons que si $b < 0$, c'est le schéma sur la maille P qui doit être modifié. D'une manière analogue aux calculs précédents, le schéma multidomaine décentré peut être écrit sur la maille P comme

$$\begin{aligned} & \frac{\omega_P \Delta x_P}{\Delta t_n} (U_P^{L,n} - U_P^{L,n-1}) \\ & - \frac{2\nu_P}{\Delta x_P} (U_{P+\frac{1}{2}}^{L,n} - U_P^{L,n}) + \frac{2\nu_{P-1}\nu_P (U_P^{L,n} - U_{P-1}^{L,n})}{\nu_{P-1}\Delta x_P + \nu_P\Delta x_{P-1}} \\ & + [b]^+ U_P^{L,n} + [b]^- \bar{U}_{P+\frac{1}{2}}^{L,n} - [b]^+ U_{P-1}^{L,n} - [b]^- U_P^{L,n} \\ & + \eta \Delta x_P U_P^{L,n} - \Delta x_P f_P^{L,n} = 0, \end{aligned} \quad (2.22)$$

où le flux convectif $[b]^- \bar{U}_{P+\frac{1}{2}}^{L,n}$ sera défini d'une manière tout à fait comparable à $[b]^+ \bar{U}_{P+\frac{1}{2}}^{R,n}$. De même que précédemment, la condition d'interface est donnée par

$$2\nu_P \frac{U_{P+\frac{1}{2}}^{L,n} - U_P^{L,n}}{\Delta x_P} - b U_{P+\frac{1}{2}}^{L,n} + \alpha^L U_{P+\frac{1}{2}}^{L,n} + \frac{\beta^L}{\Delta t_n} (U_{P+\frac{1}{2}}^{L,n} - U_{P+\frac{1}{2}}^{L,n-1}) = g_{P+\frac{1}{2}}^{R,n}. \quad (2.23)$$

Le schéma décentré 0

Soient

$$\bar{U}_{P+\frac{1}{2}}^{R,n} = \frac{(\nu_P \Delta x_{P+1} + \nu_{P+1} \Delta x_P) U_{P+\frac{1}{2}}^{R,n} - \nu_{P+1} \Delta x_P U_{P+1}^{R,n}}{\nu_P \Delta x_{P+1}} \quad (2.24)$$

et

$$\bar{U}_{P+\frac{1}{2}}^{L,n} = \frac{(\nu_P \Delta x_{P+1} + \nu_{P+1} \Delta x_P) U_{P+\frac{1}{2}}^{L,n} - \nu_P \Delta x_{P+1} U_P^{L,n}}{\nu_{P+1} \Delta x_P}. \quad (2.25)$$

En utilisant (2.25), l'équation (2.22) sur la maille P peut être réécrite de la manière suivante :

$$\begin{aligned} & U_P^{L,n} \left[\frac{\omega_P \Delta x_P}{\Delta t_n} + \frac{2\nu_P}{\Delta x_P} + \frac{2\nu_{P-1}\nu_P}{\nu_{P-1}\Delta x_P + \nu_P\Delta x_{P-1}} + [b]^+ - [b]^- \left(1 + \frac{\nu_P \Delta x_{P+1}}{\nu_{P+1} \Delta x_P} \right) + \eta \Delta x_P \right] \\ & + U_{P-1}^{L,n} \left[-[b]^+ - \frac{2\nu_{P-1}\nu_P}{\nu_{P-1}\Delta x_P + \nu_P\Delta x_{P-1}} \right] \\ & + U_{P+\frac{1}{2}}^{L,n} \left[-\frac{2\nu_P}{\Delta x_P} + [b]^- \left(1 + \frac{\nu_P \Delta x_{P+1}}{\nu_{P+1} \Delta x_P} \right) \right] \\ & = \omega_P \frac{\Delta x_P}{\Delta t_n} U_P^{L,n-1} + \Delta x_P f_P^n. \end{aligned}$$

La condition d'interface (2.23) donne $U_{P+\frac{1}{2}}^{L,n}$. Cela permet d'écrire

$$\begin{aligned}
& U_P^{L,n} \left[\frac{\omega_P \Delta x_P}{\Delta t_n} + \frac{2\nu_{P-1}\nu_P}{\nu_{P-1}\Delta x_P + \nu_P\Delta x_{P-1}} + [b]^+ + \eta\Delta x_P \right] \\
& + U_P^{L,n} \left[\frac{2\nu_P}{\Delta x_P} - [b]^- \left(1 + \frac{\nu_P\Delta x_{P+1}}{\nu_{P+1}\Delta x_P} \right) \right] \left(1 - \frac{\frac{2\nu_P}{\Delta x_P}}{\frac{2\nu_P}{\Delta x_P} - b + \alpha^L + \frac{\beta^L}{\Delta t_n}} \right) \\
& + U_{P-1}^{L,n} \left[-[b]^+ - \frac{2\nu_{P-1}\nu_P}{\nu_{P-1}\Delta x_P + \nu_P\Delta x_{P-1}} \right] \\
& = \omega_P \frac{\Delta x_P}{\Delta t_n} U_P^{L,n-1} + \Delta x_P f_P^{L,n} \\
& + \left[\frac{2\nu_P}{\Delta x_P} - [b]^- \left(1 + \frac{\nu_P\Delta x_{P+1}}{\nu_{P+1}\Delta x_P} \right) \right] \left(\frac{\frac{\beta^L}{\Delta t_n} U_{P+\frac{1}{2}}^{L,n-1} + g_{P+\frac{1}{2}}^{R,n}}{\frac{2\nu_P}{\Delta x_P} - b + \alpha^L + \frac{\beta^L}{\Delta t_n}} \right).
\end{aligned} \tag{2.26}$$

De la même manière, le schéma (2.18) sur la maille $P + 1$ peut être réécrit avec b quelconque en utilisant (2.24). Il vient

$$\begin{aligned}
& U_{P+1}^{R,n} \left[\frac{\omega_{P+1}\Delta x_{P+1}}{\Delta t_n} + \frac{2\nu_{P+1}\nu_{P+2}}{\nu_{P+1}\Delta x_{P+2} + \nu_{P+2}\Delta x_{P+1}} - [b]^- + \eta\Delta x_{P+1} \right. \\
& \quad \left. + \frac{2\nu_{P+1}}{\Delta x_{P+1}} + [b]^+ \left(1 + \frac{\nu_{P+1}\Delta x_P}{\nu_P\Delta x_{P+1}} \right) \right] \\
& + U_{P+2}^{R,n} \left[[b]^- - \frac{2\nu_{P+1}\nu_{P+2}}{\nu_{P+1}\Delta x_{P+2} + \nu_{P+2}\Delta x_{P+1}} \right] \\
& + U_{P+\frac{1}{2}}^{R,n} \left[-\frac{2\nu_{P+1}}{\Delta x_{P+1}} - [b]^+ \left(1 + \frac{\nu_{P+1}\Delta x_P}{\nu_P\Delta x_{P+1}} \right) \right] \\
& = \omega_{P+1} \frac{\Delta x_{P+1}}{\Delta t_n} U_{P+1}^{R,n-1} + \Delta x_{P+1} f_{P+1}^{R,n},
\end{aligned} \tag{2.27}$$

qui devient, en remplaçant $U_{P+\frac{1}{2}}^{R,n}$ par son expression donnée par la condition d'in-

terface (2.19) où le second membre est remplacé par $g_{P+\frac{1}{2}}^{L,n}$:

$$\begin{aligned}
& U_{P+1}^{R,n} \left[\frac{\omega_{P+1} \Delta x_{P+1}}{\Delta t_n} + \frac{2\nu_{P+1}\nu_{P+2}}{\nu_{P+1}\Delta x_{P+2} + \nu_{P+2}\Delta x_{P+1}} - [b]^- + \eta \Delta x_{P+1} \right] \\
& + U_{P+1}^{R,n} \left[\frac{2\nu_{P+1}}{\Delta x_{P+1}} + [b]^+ \left(1 + \frac{\nu_{P+1}\Delta x_P}{\nu_P \Delta x_{P+1}} \right) \right] \left(1 - \frac{\frac{2\nu_{P+1}}{\Delta x_{P+1}}}{\frac{2\nu_{P+1}}{\Delta x_{P+1}} + b + \alpha^R + \frac{\beta^R}{\Delta t_n}} \right) \\
& + U_{P+2}^{R,n} \left[[b]^- - \frac{2\nu_{P+1}\nu_{P+2}}{\nu_{P+1}\Delta x_{P+2} + \nu_{P+2}\Delta x_{P+1}} \right] \\
& = \omega_{P+1} \frac{\Delta x_{P+1}}{\Delta t_n} U_{P+1}^{R,n-1} + \Delta x_{P+1} f_{P+1}^{R,n} \\
& + \left[\frac{2\nu_{P+1}}{\Delta x_{P+1}} + [b]^+ \left(1 + \frac{\nu_{P+1}\Delta x_P}{\nu_P \Delta x_{P+1}} \right) \right] \left(\frac{\frac{\beta^L}{\Delta t_n} U_{P+\frac{1}{2}}^{R,n-1} + g_{P+\frac{1}{2}}^{L,n}}{\frac{2\nu_{P+1}}{\Delta x_{P+1}} + b + \alpha^R + \frac{\beta^R}{\Delta t_n}} \right).
\end{aligned} \tag{2.28}$$

Théorème 2.2. Soit la matrice associée au schéma décentré 0 définie par (1.31) et

- soit (1.32) et (1.33) pour des conditions de Dirichlet,
- soit (1.34) et (1.35) pour des conditions de Neumann,

et (2.26) et (2.28) pour les conditions d'interface données par (2.7) et (2.10) avec α^L et α^R des paramètres réels strictement positifs et β^L et β^R des paramètres réels positifs ou nuls.

C'est une M-matrice si $\alpha^L + \frac{\beta^L}{\Delta t_n} \geq |b|$ et $\alpha^R + \frac{\beta^R}{\Delta t_n} \geq |b|$.

Démonstration. Le théorème 1.3 fournit le résultat pour les mailles intérieures et les mailles de bord lorsqu'une condition de Dirichlet ou de Neumann est appliquée. Il suffit alors de considérer les lignes P et $P+1$ de la matrice.

Il est clair que les termes de la diagonale inférieure sur la ligne P

$$C_P = -[b]^+ - \frac{2\nu_{P-1}\nu_P}{\nu_{P-1}\Delta x_P + \nu_P\Delta x_{P-1}} \leq 0$$

et ceux de la diagonale supérieure sur la ligne $P+1$

$$B_{P+1} = [b]^- - \frac{2\nu_{P+1}\nu_{P+2}}{\nu_{P+1}\Delta x_{P+2} + \nu_{P+2}\Delta x_{P+1}} \leq 0.$$

D'autre part,

$$\begin{aligned}
A_P + C_P &= \frac{\omega_P \Delta x_P}{\Delta t_n} + \eta \Delta x_P \\
&+ \left[\frac{2\nu_P}{\Delta x_P} - [b]^- \left(1 + \frac{\nu_P \Delta x_{P+1}}{\nu_{P+1} \Delta x_P} \right) \right] \left(1 - \frac{\frac{2\nu_P}{\Delta x_P}}{\frac{2\nu_P}{\Delta x_P} - b + \alpha^L + \frac{\beta^L}{\Delta t_n}} \right) \\
&= \frac{\omega_P \Delta x_P}{\Delta t_n} + \eta \Delta x_P \\
&+ \left[\frac{2\nu_P}{\Delta x_P} - [b]^- \left(1 + \frac{\nu_P \Delta x_{P+1}}{\nu_{P+1} \Delta x_P} \right) \right] \left(\frac{-b + \alpha^L + \frac{\beta^L}{\Delta t_n}}{\frac{2\nu_P}{\Delta x_P} - b + \alpha^L + \frac{\beta^L}{\Delta t_n}} \right).
\end{aligned}$$

Et de même,

$$\begin{aligned}
A_{P+1} + B_{P+1} &= \frac{\omega_{P+1} \Delta x_{P+1}}{\Delta t_n} + \eta \Delta x_{P+1} \\
&+ \left[\frac{2\nu_{P+1}}{\Delta x_{P+1}} + [b]^+ \left(1 + \frac{\nu_{P+1} \Delta x_P}{\nu_P \Delta x_{P+1}} \right) \right] \left(\frac{b + \alpha^R + \frac{\beta^R}{\Delta t_n}}{\frac{2\nu_{P+1}}{\Delta x_{P+1}} + b + \alpha^R + \frac{\beta^R}{\Delta t_n}} \right).
\end{aligned}$$

Sous la condition suffisante du théorème, $A_P + C_P > 0$ et $A_{P+1} + B_{P+1} > 0$. \square

Le schéma décentré 1

Nous rappelons que ce schéma n'a de sens que dans le cadre d'un processus itératif puisque $\overline{U}_{P+\frac{1}{2}}^{R,n}$ (resp. $\overline{U}_{P+\frac{1}{2}}^{L,n}$) est défini par $U_P^{L,n}$ (resp. $U_{P+1}^{R,n}$) à l'itération précédente de l'algorithme itératif.

En repartant de (2.22), le schéma peut donc s'écrire sur la maille P comme

$$\begin{aligned}
&U_P^{L,n} \left[\frac{\omega_P \Delta x_P}{\Delta t_n} + \frac{2\nu_P}{\Delta x_P} + \frac{2\nu_{P-1} \nu_P}{\nu_{P-1} \Delta x_P + \nu_P \Delta x_{P-1}} + [b]^+ - [b]^- + \eta \Delta x_P \right] \\
&+ U_{P-1}^{L,n} \left[-[b]^+ - \frac{2\nu_{P-1} \nu_P}{\nu_{P-1} \Delta x_P + \nu_P \Delta x_{P-1}} \right] \\
&- \frac{2\nu_P}{\Delta x_P} U_{P+\frac{1}{2}}^{L,n} \\
&= \omega_P \frac{\Delta x_P}{\Delta t_n} U_P^{L,n-1} + \Delta x_P f_P^{L,n} - [b]^- U_{P+1}^{R,n}.
\end{aligned}$$

En utilisant la condition d'interface (2.23) exprimant $U_{P+\frac{1}{2}}^{L,n}$, il vient

$$\begin{aligned}
& U_P^{L,n} \left[\frac{\omega_P \Delta x_P}{\Delta t_n} + \frac{2\nu_{P-1}\nu_P}{\nu_{P-1}\Delta x_P + \nu_P\Delta x_{P-1}} + [b]^+ - [b]^- + \eta\Delta x_P \right] \\
& + U_P^{L,n} \left[\frac{2\nu_P}{\Delta x_P} \left(1 - \frac{\frac{2\nu_P}{\Delta x_P}}{\frac{2\nu_P}{\Delta x_P} - b + \alpha^L + \frac{\beta^L}{\Delta t_n}} \right) \right] \\
& + U_{P-1}^{L,n} \left[-[b]^+ - \frac{2\nu_{P-1}\nu_P}{\nu_{P-1}\Delta x_P + \nu_P\Delta x_{P-1}} \right] \\
& = \omega_P \frac{\Delta x_P}{\Delta t_n} U_P^{L,n-1} + \Delta x_P f_P^{L,n} - [b]^- U_{P+1}^{R,n} + \frac{\frac{2\nu_P}{\Delta x_P} \left(\frac{\beta^L}{\Delta t_n} U_{P+\frac{1}{2}}^{L,n-1} + g_{P+\frac{1}{2}}^{R,n} \right)}{\frac{2\nu_P}{\Delta x_P} - b + \alpha^L + \frac{\beta^L}{\Delta t_n}}.
\end{aligned} \tag{2.29}$$

De la même manière sur la maille $P+1$, en repartant de (2.18) avec b quelconque, le schéma s'écrit

$$\begin{aligned}
& U_{P+1}^{R,n} \left[\frac{\omega_{P+1} \Delta x_{P+1}}{\Delta t_n} + \frac{2\nu_{P+1}\nu_{P+2}}{\nu_{P+1}\Delta x_{P+2} + \nu_{P+2}\Delta x_{P+1}} + \frac{2\nu_{P+1}}{\Delta x_{P+1}} + [b]^+ - [b]^- + \eta\Delta x_{P+1} \right] \\
& + U_{P+2}^{R,n} \left[[b]^- - \frac{2\nu_{P+1}\nu_{P+2}}{\nu_{P+1}\Delta x_{P+2} + \nu_{P+2}\Delta x_{P+1}} \right] - \frac{2\nu_{P+1}}{\Delta x_{P+1}} U_{P+\frac{1}{2}}^{R,n} \\
& = \omega_{P+1} \frac{\Delta x_{P+1}}{\Delta t_n} U_{P+1}^{R,n-1} + \Delta x_{P+1} f_{P+1}^{R,n} + [b]^+ U_P^{L,n}.
\end{aligned} \tag{2.30}$$

En remplaçant $U_{P+\frac{1}{2}}^{R,n}$ par son expression donnée par la condition d'interface (2.19), il vient

$$\begin{aligned}
& U_{P+1}^{R,n} \left[\frac{\omega_{P+1} \Delta x_{P+1}}{\Delta t_n} + \frac{2\nu_{P+1}\nu_{P+2}}{\nu_{P+1}\Delta x_{P+2} + \nu_{P+2}\Delta x_{P+1}} + [b]^+ - [b]^- + \eta\Delta x_{P+1} \right] \\
& + U_{P+1}^{R,n} \left[\frac{2\nu_{P+1}}{\Delta x_{P+1}} \left(1 - \frac{\frac{2\nu_{P+1}}{\Delta x_{P+1}}}{\frac{2\nu_{P+1}}{\Delta x_{P+1}} + b + \alpha^R + \frac{\beta^R}{\Delta t_n}} \right) \right] \\
& + U_{P+2}^{R,n} \left[[b]^- - \frac{2\nu_{P+1}\nu_{P+2}}{\nu_{P+1}\Delta x_{P+2} + \nu_{P+2}\Delta x_{P+1}} \right] \\
& = \omega_{P+1} \frac{\Delta x_{P+1}}{\Delta t_n} U_{P+1}^{R,n-1} + \Delta x_{P+1} f_{P+1}^{R,n} + [b]^+ U_P^{L,n} + \frac{\frac{2\nu_{P+1}}{\Delta x_{P+1}} \left(\frac{\beta^R}{\Delta t_n} U_{P+\frac{1}{2}}^{R,n-1} + g_{P+\frac{1}{2}}^{L,n} \right)}{\frac{2\nu_{P+1}}{\Delta x_{P+1}} + b + \alpha^R + \frac{\beta^R}{\Delta t_n}}.
\end{aligned} \tag{2.31}$$

Théorème 2.3. Soit la matrice associée au schéma décentré 1 définie par (1.31) et

- soit (1.32) et (1.33) pour des conditions de Dirichlet,
- soit (1.34) et (1.35) pour des conditions de Neumann,

et (2.29) et (2.31) pour les conditions d'interface données par (2.7) et (2.10) avec α^L et α^R des paramètres réels strictement positifs et β^L et β^R des paramètres réels positifs ou nuls.

C'est une M-matrice si $\alpha^L + \frac{\beta^L}{\Delta t_n} \geq |b|$ et $\alpha^R + \frac{\beta^R}{\Delta t_n} \geq |b|$.

Démonstration. La démonstration est tout à fait analogue à celle du théorème 2.2. \square

2.1.3 Le schéma décentré hybride

C'est devant la difficulté soulevée précédemment (avec l'usage du schéma décentré classique) que [50] a proposé l'alternative du schéma décentré hybride, qui s'adapte naturellement à une formulation multidomaine. Le schéma décentré hybride multidomaine s'exprime exactement comme le schéma décentré hybride monodomaine (1.36) sur toutes les mailles. Sur la maille P , nous avons

$$\begin{aligned} & \frac{\omega_P \Delta x_P}{\Delta t_n} (U_P^{L,n} - U_P^{L,n-1}) - \frac{2\nu_P}{\Delta x_P} (U_{P+\frac{1}{2}}^{L,n} - U_P^{L,n}) + \frac{2\nu_P}{\Delta x_P} (U_P^{L,n} - U_{P-\frac{1}{2}}^{L,n}) \\ & + [b]^+ (U_P^{L,n} - U_{P-\frac{1}{2}}^{L,n}) + [b]^- (U_{P+\frac{1}{2}}^{L,n} - U_P^{L,n}) + \eta \Delta x_P U_P^{L,n} - \Delta x_P f_P^{L,n} = 0, \end{aligned} \quad (2.32)$$

soit, à la manière de (1.43),

$$\begin{aligned} & - \left(\frac{2\nu_P}{\Delta x_P} - [b]^- \right) U_{P+\frac{1}{2}}^{L,n} - \frac{\left(\frac{2\nu_{P-1}}{\Delta x_{P-1}} + [b]^+ \right) \left(\frac{2\nu_P}{\Delta x_P} + [b]^+ \right)}{\left(\frac{2\nu_{P-1}}{\Delta x_{P-1}} + \frac{2\nu_P}{\Delta x_P} + |b| \right)} U_{P-1}^{L,n} \\ & + \left[\frac{\omega_P \Delta x_P}{\Delta t_n} + \eta \Delta x_P + \frac{\left(\frac{2\nu_{P-1}}{\Delta x_{P-1}} + [b]^+ \right) \left(\frac{2\nu_P}{\Delta x_P} + [b]^+ \right)}{\left(\frac{2\nu_{P-1}}{\Delta x_{P-1}} + \frac{2\nu_P}{\Delta x_P} + |b| \right)} \right. \\ & \left. + \left(\frac{2\nu_P}{\Delta x_P} - [b]^- \right) \right] U_P^{L,n} = \omega_P \frac{\Delta x_P}{\Delta t_n} U_P^{L,n-1} + \Delta x_P f_P^{L,n}. \end{aligned} \quad (2.33)$$

Le flux total de la condition d'interface sur $\{x_{P+\frac{1}{2}}\}$ est discrétisée de la même manière que le flux total apparaissant dans le schéma (2.32). D'où

$$2\nu_P \frac{U_{P+\frac{1}{2}}^{L,n} - U_P^{L,n}}{\Delta x_P} - [b]^+ U_P^{L,n} - [b]^- U_{P+\frac{1}{2}}^{L,n} + \alpha^L U_{P+\frac{1}{2}}^{L,n} + \frac{\beta^L}{\Delta t_n} (U_{P+\frac{1}{2}}^{L,n} - U_{P+\frac{1}{2}}^{L,n-1}) = g_{P+\frac{1}{2}}^{R,n}, \quad (2.34)$$

avec $g_{P+\frac{1}{2}}^{R,n}$ une approximation de g^L (en $\{x_{P+\frac{1}{2}}\}$) à l'instant t_n . D'une manière similaire, le schéma sur la maille de centre x_{P+1} , à droite de l'interface $x_{P+\frac{1}{2}}$, est donné par

$$\begin{aligned} & \frac{\omega_{P+1} \Delta x_{P+1}}{\Delta t_n} (U_{P+1}^{R,n} - U_{P+1}^{R,n-1}) - \frac{2\nu_{P+1}}{\Delta x_{P+1}} (U_{P+\frac{3}{2}}^{R,n} - U_{P+1}^{R,n}) + \frac{2\nu_{P+1}}{\Delta x_{P+1}} (U_{P+1}^{R,n} - U_{P+\frac{1}{2}}^{R,n}) \\ & + [b]^+ (U_{P+1}^{R,n} - U_{P+\frac{1}{2}}^{R,n}) + [b]^- (U_{P+\frac{3}{2}}^{R,n} - U_{P+1}^{R,n}) + \eta \Delta x_{P+1} U_{P+1}^{R,n} - \Delta x_{P+1} f_{P+1}^{R,n} = 0, \end{aligned} \quad (2.35)$$

soit encore, à la manière de (1.42),

$$\begin{aligned}
& - \left(\frac{2\nu_{P+1}}{\Delta x_{P+1}} + [b]^+ \right) U_{P+\frac{1}{2}}^{R,n} - \frac{\left(\frac{2\nu_{P+1}}{\Delta x_{P+1}} - [b]^- \right) \left(\frac{2\nu_{P+2}}{\Delta x_{P+2}} - [b]^- \right)}{\left(\frac{2\nu_{P+1}}{\Delta x_{P+1}} + \frac{2\nu_{P+2}}{\Delta x_{P+2}} + |b| \right)} U_{P+2}^{R,n} \\
& + \left[\frac{\omega_{P+1} \Delta x_{P+1}}{\Delta t_n} + \eta \Delta x_{P+1} + \frac{\left(\frac{2\nu_{P+1}}{\Delta x_{P+1}} - [b]^- \right) \left(\frac{2\nu_{P+2}}{\Delta x_{P+2}} - [b]^- \right)}{\left(\frac{2\nu_{P+1}}{\Delta x_{P+1}} + \frac{2\nu_{P+2}}{\Delta x_{P+2}} + |b| \right)} \right. \\
& \left. + \left(\frac{2\nu_{P+1}}{\Delta x_{P+1}} + [b]^+ \right) \right] U_{P+1}^{R,n} = \omega_{P+1} \frac{\Delta x_{P+1}}{\Delta t_n} U_{P+1}^{R,n-1} + \Delta x_{P+1} f_{P+1}^{R,n}.
\end{aligned} \tag{2.36}$$

La condition d'interface sur $\{x_{P+\frac{1}{2}}\}$ est discrétisée de telle sorte que le flux total soit donné comme dans le schéma (2.35). D'où

$$\begin{aligned}
& - 2\nu_{P+1} \frac{U_{P+1}^{R,n} - U_{P+\frac{1}{2}}^{R,n}}{\Delta x_{P+1}} + [b]^+ U_{P+\frac{1}{2}}^{R,n} + [b]^- U_{P+1}^{R,n} \\
& + \alpha^R U_{P+\frac{1}{2}}^{R,n} + \frac{\beta^R}{\Delta t_n} (U_{P+\frac{1}{2}}^{R,n} - U_{P+\frac{1}{2}}^{R,n-1}) = g_{P+\frac{1}{2}}^{L,n},
\end{aligned} \tag{2.37}$$

avec $g_{P+\frac{1}{2}}^{L,n}$ une approximation de g^L (en $\{x_{P+\frac{1}{2}}\}$) à l'instant t_n .

Les expressions de $U_{P+\frac{1}{2}}^{L,n}$ et $U_{P+\frac{1}{2}}^{R,n}$ sont déterminées par les conditions d'interface que nous redonnons ci-dessous à l'ordre 1 :

$$\left\{ \begin{array}{l}
2\nu_P \frac{U_{P+\frac{1}{2}}^{L,n} - U_P^{L,n}}{\Delta x_P} - [b]^+ U_P^{L,n} - [b]^- U_{P+\frac{1}{2}}^{L,n} \\
\quad + \alpha^L U_{P+\frac{1}{2}}^{L,n} + \frac{\beta^L}{\Delta t_n} (U_{P+\frac{1}{2}}^{L,n} - U_{P+\frac{1}{2}}^{L,n-1}) = g_{P+\frac{1}{2}}^{R,n} \\
- 2\nu_{P+1} \frac{U_{P+1}^{R,n} - U_{P+\frac{1}{2}}^{R,n}}{\Delta x_{P+1}} + [b]^+ U_{P+\frac{1}{2}}^{R,n} + [b]^- U_{P+1}^{R,n} \\
\quad + \alpha^R U_{P+\frac{1}{2}}^{R,n} + \frac{\beta^R}{\Delta t_n} (U_{P+\frac{1}{2}}^{R,n} - U_{P+\frac{1}{2}}^{R,n-1}) = g_{P+\frac{1}{2}}^{L,n}.
\end{array} \right. \tag{2.38}$$

Elles permettent de déterminer

$$\left\{ \begin{array}{l}
U_{P+\frac{1}{2}}^{L,n} = \frac{\left(\frac{2\nu_P}{\Delta x_P} + [b]^+ \right) U_P^{L,n} + g_{P+\frac{1}{2}}^{R,n} + \frac{\beta^L}{\Delta t_n} U_{P+\frac{1}{2}}^{L,n-1}}{\frac{2\nu_P}{\Delta x_P} - [b]^- + \alpha^L + \frac{\beta^L}{\Delta t_n}} \\
U_{P+\frac{1}{2}}^{R,n} = \frac{\left(\frac{2\nu_{P+1}}{\Delta x_{P+1}} - [b]^- \right) U_{P+1}^{R,n} + g_{P+\frac{1}{2}}^{L,n} + \frac{\beta^R}{\Delta t_n} U_{P+\frac{1}{2}}^{R,n-1}}{\frac{2\nu_{P+1}}{\Delta x_{P+1}} + [b]^+ + \alpha^R + \frac{\beta^R}{\Delta t_n}}.
\end{array} \right. \tag{2.39}$$

En injectant (2.39) dans les expressions du schéma sur les mailles P et $P + 1$ (2.33) et (2.36), nous obtenons

$$\begin{aligned}
& \left[\frac{\left(\frac{2\nu_{P-1}}{\Delta x_{P-1}} + [b]^+ \right) \left(\frac{2\nu_P}{\Delta x_P} + [b]^+ \right)}{\left(\frac{2\nu_{P-1}}{\Delta x_{P-1}} + \frac{2\nu_P}{\Delta x_P} + |b| \right)} + \frac{\left(\frac{2\nu_P}{\Delta x_P} - [b]^- \right) \left(\alpha^L + \frac{\beta^L}{\Delta t_n} - b \right)}{\frac{2\nu_P}{\Delta x_P} - [b]^- + \alpha^L + \frac{\beta^L}{\Delta t_n}} \right] U_P^{L,n} \\
& + \left(\frac{\omega_P \Delta x_P}{\Delta t_n} + \eta \Delta x_P \right) U_P^{L,n} - \frac{\left(\frac{2\nu_{P-1}}{\Delta x_{P-1}} + [b]^+ \right) \left(\frac{2\nu_P}{\Delta x_P} + [b]^+ \right)}{\left(\frac{2\nu_{P-1}}{\Delta x_{P-1}} + \frac{2\nu_P}{\Delta x_P} + |b| \right)} U_{P-1}^{L,n} \\
& = \omega_P \frac{\Delta x_P}{\Delta t_n} U_P^{L,n-1} + \Delta x_P f_P^{L,n} + \frac{\left(\frac{2\nu_P}{\Delta x_P} - [b]^- \right) \left(g_{P+\frac{1}{2}}^{R,n} + \frac{\beta^L}{\Delta t_n} U_{P+\frac{1}{2}}^{L,n-1} \right)}{\frac{2\nu_P}{\Delta x_P} - [b]^- + \alpha^L + \frac{\beta^L}{\Delta t_n}},
\end{aligned} \tag{2.40}$$

et de manière analogue sur $P + 1$

$$\begin{aligned}
& \left[\frac{\left(\frac{2\nu_{P+1}}{\Delta x_{P+1}} - [b]^- \right) \left(\frac{2\nu_{P+2}}{\Delta x_{P+2}} - [b]^- \right)}{\left(\frac{2\nu_{P+1}}{\Delta x_{P+1}} + \frac{2\nu_{P+2}}{\Delta x_{P+2}} + |b| \right)} + \frac{\omega_{P+1} \Delta x_{P+1}}{\Delta t_n} + \eta \Delta x_{P+1} \right. \\
& \quad \left. + \frac{\left(\frac{2\nu_{P+1}}{\Delta x_{P+1}} + [b]^+ \right) \left(b + \alpha^R + \frac{\beta^R}{\Delta t_n} \right)}{\frac{2\nu_{P+1}}{\Delta x_{P+1}} + [b]^+ + \alpha^R + \frac{\beta^R}{\Delta t_n}} \right] U_{P+1}^{R,n} \\
& - \frac{\left(\frac{2\nu_{P+1}}{\Delta x_{P+1}} - [b]^- \right) \left(\frac{2\nu_{P+2}}{\Delta x_{P+2}} - [b]^- \right)}{\left(\frac{2\nu_{P+1}}{\Delta x_{P+1}} + \frac{2\nu_{P+2}}{\Delta x_{P+2}} + |b| \right)} U_{P+2}^{R,n} \\
& = \omega_{P+1} \frac{\Delta x_{P+1}}{\Delta t_n} U_{P+1}^{R,n-1} + \Delta x_{P+1} f_{P+1}^{R,n} + \frac{\left(\frac{2\nu_{P+1}}{\Delta x_{P+1}} + [b]^+ \right) \left(g_{P+\frac{1}{2}}^{L,n} + \frac{\beta^R}{\Delta t_n} U_{P+\frac{1}{2}}^{R,n-1} \right)}{\frac{2\nu_{P+1}}{\Delta x_{P+1}} + [b]^+ + \alpha^R + \frac{\beta^R}{\Delta t_n}}.
\end{aligned} \tag{2.41}$$

Théorème 2.4. Soit la matrice associée au schéma décentré hybride définie par (1.41) et

- soit (1.44) et (1.45) pour des conditions de Dirichlet,
- soit (1.46) et (1.47) pour des conditions de Neumann,

et (2.40) et (2.41) pour les conditions d'interface données par (2.38) avec α^L et α^R des paramètres réels strictement positifs et β^L et β^R des paramètres réels positifs ou nuls.

C'est une M -matrice si $\alpha^L + \frac{\beta^L}{\Delta t_n} \geq |b|$ et $\alpha^R + \frac{\beta^R}{\Delta t_n} \geq |b|$.

Démonstration. En prenant les expressions (2.40) et (2.41), il apparaît clairement que les termes devant $U_{P-1}^{L,n}$ (C_P) et devant $U_{P+2}^{R,n}$ (B_{P+1}) sont négatifs. De même,

sous les conditions $\alpha^L + \frac{\beta^L}{\Delta t_n} \geq |b|$ et $\alpha^R + \frac{\beta^R}{\Delta t_n} \geq |b|$, alors $A_P + C_P > 0$ et $A_{P+1} + B_{P+1} > 0$. \square

2.2 Identité de la solution multidomaine et monodomaine

Ayant défini les schémas monodomaine dans le chapitre 1 et les schémas multidomaine dans ce qui précède (chapitre 2) et montré l'existence et l'unicité d'une solution monodomaine et multidomaine pour chacun des schémas (sous certaines conditions sur les paramètres), il reste à montrer que la solution multidomaine coïncide avec la solution monodomaine.

Dans le cas du schéma centré et du schéma décentré hybride, le schéma est identique sur toutes les mailles, y compris sur celles qui sont adjacentes à l'interface. De plus, la discrétisation de la condition de transmission écrite à l'interface est équivalente à la discrétisation de l'équation exprimant la continuité du flux total écrite à chaque sommet du maillage monodomaine. Par conséquent, il reste simplement à vérifier l'égalité de la solution et du flux total à l'interface pour conclure.

Dans le cas du schéma centré, les conditions d'interface s'écrivent

$$\left\{ \begin{array}{l} 2\nu_P \frac{U_{P+\frac{1}{2}}^{L,n} - U_P^{L,n}}{\Delta x_P} - bU_{P+\frac{1}{2}}^{L,n} + \alpha^L U_{P+\frac{1}{2}}^{L,n} + \frac{\beta^L}{\Delta t_n} (U_{P+\frac{1}{2}}^{L,n} - U_{P+\frac{1}{2}}^{L,n-1}) = \\ 2\nu_{P+1} \frac{U_{P+1}^{R,n} - U_{P+\frac{1}{2}}^{R,n}}{\Delta x_{P+1}} - bU_{P+\frac{1}{2}}^{R,n} + \alpha^L U_{P+\frac{1}{2}}^{R,n} + \frac{\beta^L}{\Delta t_n} (U_{P+\frac{1}{2}}^{R,n} - U_{P+\frac{1}{2}}^{R,n-1}) \\ - 2\nu_{P+1} \frac{U_{P+1}^{R,n} - U_{P+\frac{1}{2}}^{R,n}}{\Delta x_{P+1}} + bU_{P+\frac{1}{2}}^{R,n} + \alpha^R U_{P+\frac{1}{2}}^{R,n} + \frac{\beta^R}{\Delta t_n} (U_{P+\frac{1}{2}}^{R,n} - U_{P+\frac{1}{2}}^{R,n-1}) = \\ - 2\nu_P \frac{U_{P+\frac{1}{2}}^{L,n} - U_P^{L,n}}{\Delta x_P} + bU_{P+\frac{1}{2}}^{L,n} + \alpha^R U_{P+\frac{1}{2}}^{L,n} + \frac{\beta^R}{\Delta t_n} (U_{P+\frac{1}{2}}^{L,n} - U_{P+\frac{1}{2}}^{L,n-1}). \end{array} \right. \quad (2.42)$$

En ajoutant les membres croisés des deux équations de (2.42), il vient $U_{P+\frac{1}{2}}^{L,n} = U_{P+\frac{1}{2}}^{R,n}$. A partir de là, en reprenant l'une ou l'autre équation, on déduit l'égalité du flux total à l'interface.

Dans le cas du schéma décentré hybride, les conditions d'interface sont données

par

$$\left\{ \begin{array}{l} 2\nu_P \frac{U_{P+\frac{1}{2}}^{L,n} - U_P^{L,n}}{\Delta x_P} - [b]^+ U_P^{L,n} - [b]^- U_{P+\frac{1}{2}}^{L,n} + \alpha^L U_{P+\frac{1}{2}}^{L,n} + \frac{\beta^L}{\Delta t_n} (U_{P+\frac{1}{2}}^{L,n} - U_{P+\frac{1}{2}}^{L,n-1}) = \\ 2\nu_{P+1} \frac{U_{P+1}^{R,n} U_{P+\frac{1}{2}}^{R,n}}{\Delta x_{P+1}} - [b]^+ U_{P+\frac{1}{2}}^{R,n} - [b]^- U_{P+1}^{R,n} + \alpha^L U_{P+\frac{1}{2}}^{R,n} + \frac{\beta^L}{\Delta t_n} (U_{P+\frac{1}{2}}^{R,n} - U_{P+\frac{1}{2}}^{R,n-1}) \\ - 2\nu_{P+1} \frac{U_{P+1}^{R,n} - U_{P+\frac{1}{2}}^{R,n}}{\Delta x_{P+1}} + [b]^+ U_{P+\frac{1}{2}}^{R,n} + [b]^- U_{P+1}^{R,n} + \alpha^R U_{P+\frac{1}{2}}^{R,n} + \frac{\beta^L}{\Delta t_n} (U_{P+\frac{1}{2}}^{R,n} - U_{P+\frac{1}{2}}^{R,n-1}) = \\ - 2\nu_P \frac{U_{P+\frac{1}{2}}^{L,n} - U_P^{L,n}}{\Delta x_P} + [b]^+ U_P^{L,n} + [b]^- U_{P+\frac{1}{2}}^{L,n} + \alpha^R U_{P+\frac{1}{2}}^{L,n} + \frac{\beta^L}{\Delta t_n} (U_{P+\frac{1}{2}}^{L,n} - U_{P+\frac{1}{2}}^{L,n-1}), \end{array} \right. \quad (2.43)$$

et en procédant de la même façon que précédemment, on obtient l'égalité de la solution à l'interface et l'égalité du flux total, qui est la même que celle écrite dans la formulation monodomaine (1.17).

Pour les deux schémas décentrés désignés par décentré 0 et décentré 1, le schéma multidomaine et le schéma monodomaine sont définis de la même manière partout exceptés sur les mailles adjacentes à l'interface. Il faut donc vérifier que les mêmes équations sont résolues sur les mailles P et $P+1$.

Dans le cas du schéma décentré 1 où l'on définit le flux convectif multidomaine comme le flux décentré emprunté au sous-domaine voisin, il est alors évident que le schéma multidomaine est le même que le schéma monodomaine.

Dans le cas du schéma décentré 0, considérons le cas où la vitesse de convection b est positive. Ainsi, la seule difficulté réside sur la maille $P+1$ (dans le cas où $b < 0$, il faut procéder d'une manière tout à fait analogue sur la maille P). Rappelons le schéma monodomaine sur la maille $P+1$:

$$\begin{aligned} & \frac{\Delta x_{P+1}}{\Delta t_n} (U_{P+1}^n - U_{P+1}^{n-1}) + b (U_{P+1}^n - U_P^n) \\ & - \frac{2\nu_{P+1}\nu_{P+2}(U_{P+2}^n - U_{P+1}^n)}{\nu_{P+1}\Delta x_{P+2} + \nu_{P+2}\Delta x_{P+1}} + \frac{2\nu_P\nu_{P+1}(U_{P+1}^n - U_P^n)}{\nu_P\Delta x_{P+1} + \nu_{P+1}\Delta x_P} \\ & + \eta\Delta x_{P+1}U_{P+1}^n - \Delta x_{P+1}f_{P+1}^n = 0. \end{aligned} \quad (2.44)$$

En partant du schéma multidomaine sur la maille $P+1$, il nous faut retrouver l'expression (2.44). Nous avons

$$\begin{aligned} & \frac{\Delta x_{P+1}}{\Delta t_n} (U_{P+1}^{R,n} - U_{P+1}^{R,n-1}) + b(U_{P+1}^{R,n} - \bar{U}_{P+\frac{1}{2}}^{R,n}) \\ & - \frac{2\nu_{P+1}\nu_{P+2}(U_{P+2}^{R,n} - U_{P+1}^{R,n})}{\nu_{P+1}\Delta x_{P+2} + \nu_{P+2}\Delta x_{P+1}} + 2\nu_{P+1} \frac{U_{P+1}^{R,n} - U_{P+\frac{1}{2}}^{R,n}}{\Delta x_{P+1}} \\ & + \eta\Delta x_{P+1}U_{P+1}^{R,n} - \Delta x_{P+1}f_{P+1}^{R,n} = 0. \end{aligned} \quad (2.45)$$

En comparant les expressions (2.44) et (2.45), nous constatons que plusieurs termes sont identiques. Il reste donc à vérifier que

$$-b\bar{U}_{P+\frac{1}{2}}^{R,n} + 2\nu_{P+1} \frac{U_{P+1}^{R,n} - U_{P+\frac{1}{2}}^{R,n}}{\Delta x_{P+1}} = -bU_P^n + \frac{2\nu_P\nu_{P+1}(U_{P+1}^n - U_P^n)}{\nu_P\Delta x_{P+1} + \nu_{P+1}\Delta x_P}. \quad (2.46)$$

En utilisant la définition de $\overline{U}_{P+\frac{1}{2}}^{R,n}$ donnée par (2.24)

$$\overline{U}_{P+\frac{1}{2}}^{R,n} = \frac{(\nu_P \Delta x_{P+1} + \nu_{P+1} \Delta x_P) U_{P+\frac{1}{2}}^{R,n} - \nu_{P+1} \Delta x_P U_{P+1}^{R,n}}{\nu_P \Delta x_{P+1}},$$

nous pouvons calculer

$$\begin{aligned} & -b \overline{U}_{P+\frac{1}{2}}^{R,n} + 2\nu_{P+1} \frac{U_{P+1}^{R,n} - U_{P+\frac{1}{2}}^{R,n}}{\Delta x_{P+1}} \\ &= -b \frac{\nu_P \Delta x_{P+1} + \nu_{P+1} \Delta x_P}{\nu_P \Delta x_{P+1}} U_{P+\frac{1}{2}}^{R,n} + b \frac{\nu_{P+1} \Delta x_P}{\nu_P \Delta x_{P+1}} U_{P+1}^{R,n} + 2\nu_{P+1} \frac{U_{P+1}^{R,n} - U_{P+\frac{1}{2}}^{R,n}}{\Delta x_{P+1}} \\ &= \left(\frac{2\nu_{P+1}}{\Delta x_{P+1}} + b \frac{\nu_{P+1} \Delta x_P}{\nu_P \Delta x_{P+1}} \right) U_{P+\frac{1}{2}}^{R,n} - \left(b \frac{\nu_P \Delta x_{P+1} + \nu_{P+1} \Delta x_P}{\nu_P \Delta x_{P+1}} + \frac{2\nu_{P+1}}{\Delta x_{P+1}} \right) U_{P+1}^{R,n}. \end{aligned}$$

Rappelons les conditions de transmission

$$\left\{ \begin{array}{l} 2\nu_P \frac{U_{P+\frac{1}{2}}^{L,n} - U_P^{L,n}}{\Delta x_P} - b U_{P+\frac{1}{2}}^{L,n} + \alpha^L U_{P+\frac{1}{2}}^{L,n} + \frac{\beta^L}{\Delta t_n} (U_{P+\frac{1}{2}}^{L,n} - U_{P+\frac{1}{2}}^{L,n-1}) = \\ 2\nu_{P+1} \frac{U_{P+1}^{R,n} - U_{P+\frac{1}{2}}^{R,n}}{\Delta x_{P+1}} - b U_{P+\frac{1}{2}}^{R,n} + \alpha^L U_{P+\frac{1}{2}}^{R,n} + \frac{\beta^L}{\Delta t_n} (U_{P+\frac{1}{2}}^{R,n} - U_{P+\frac{1}{2}}^{R,n-1}), \\ -2\nu_{P+1} \frac{U_{P+1}^{R,n} - U_{P+\frac{1}{2}}^{R,n}}{\Delta x_{P+1}} + b U_{P+\frac{1}{2}}^{R,n} + \alpha^R U_{P+\frac{1}{2}}^{R,n} + \frac{\beta^R}{\Delta t_n} (U_{P+\frac{1}{2}}^{R,n} - U_{P+\frac{1}{2}}^{R,n-1}) = \\ -2\nu_P \frac{U_{P+\frac{1}{2}}^{L,n} - U_P^{L,n}}{\Delta x_P} + b U_{P+\frac{1}{2}}^{L,n} + \alpha^R U_{P+\frac{1}{2}}^{L,n} + \frac{\beta^R}{\Delta t_n} (U_{P+\frac{1}{2}}^{L,n} - U_{P+\frac{1}{2}}^{L,n-1}). \end{array} \right. \quad (2.47)$$

En ajoutant les membres croisés des deux équations de (2.47), nous obtenons la continuité de la solution à l'interface $U_{P+\frac{1}{2}}^{L,n} = U_{P+\frac{1}{2}}^{R,n}$, ce qui conduit à

$$U_{P+\frac{1}{2}}^{L,n} = \frac{\nu_P \Delta x_{P+1} U_P^{L,n} + \nu_{P+1} \Delta x_P U_{P+1}^{R,n}}{\nu_P \Delta x_{P+1} + \nu_{P+1} \Delta x_P}.$$

Par conséquent, il vient

$$\begin{aligned} & -b \overline{U}_{P+\frac{1}{2}}^{R,n} + 2\nu_{P+1} \frac{U_{P+1}^{R,n} - U_{P+\frac{1}{2}}^{R,n}}{\Delta x_{P+1}} \\ &= \left(\frac{2\nu_{P+1}}{\Delta x_{P+1}} + b \frac{\nu_{P+1} \Delta x_P}{\nu_P \Delta x_{P+1}} \right) U_{P+\frac{1}{2}}^{R,n} \\ & \quad - \left(b \frac{\nu_P \Delta x_{P+1} + \nu_{P+1} \Delta x_P}{\nu_P \Delta x_{P+1}} + \frac{2\nu_{P+1}}{\Delta x_{P+1}} \right) \cdot \left(\frac{\nu_P \Delta x_{P+1} U_P^{L,n} + \nu_{P+1} \Delta x_P U_{P+1}^{R,n}}{\nu_P \Delta x_{P+1} + \nu_{P+1} \Delta x_P} \right), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= U_P^{L,n} \left(-b - \frac{2\nu_P\nu_{P+1}}{\nu_P\Delta x_{P+1} + \nu_{P+1}\Delta x_P} \right) \\
&\quad + U_{P+1}^{R,n} \left(\frac{2\nu_{P+1}}{\Delta x_{P+1}} - \frac{2\nu_{P+1}\nu_{P+1}\Delta x_P}{\Delta x_{P+1}(\nu_P\Delta x_{P+1} + \nu_{P+1}\Delta x_P)} \right) \\
&= U_P^{L,n} \left(-b - \frac{2\nu_P\nu_{P+1}}{\nu_P\Delta x_{P+1} + \nu_{P+1}\Delta x_P} \right) + U_{P+1}^{R,n} \left(\frac{2\nu_P\nu_{P+1}}{\nu_P\Delta x_{P+1} + \nu_{P+1}\Delta x_P} \right) \\
&= -b U_P^{L,n} + \frac{2\nu_P\nu_{P+1} (U_{P+1}^{R,n} - U_P^{L,n})}{\nu_P\Delta x_{P+1} + \nu_{P+1}\Delta x_P},
\end{aligned}$$

qui est exactement (2.46). Nous avons donc montré que les mêmes équations étaient résolues sur les mailles adjacentes et que la solution et le flux total (tel que défini dans la condition de transmission) étaient continus à l'interface.

Chapitre 3

Algorithme de Schwarz optimisé

Sommaire

3.1	L'algorithme de Schwarz	60
3.2	Taux de convergence continu	62
3.2.1	Adaptation pour le schéma décentré 0	66
3.2.2	Adaptation pour le schéma décentré 1	67
3.3	Taux de convergence discret	67
3.4	Résultats numériques	77
3.4.1	Comparaison des différents algorithmes discrets	78
3.4.2	Comparaison de l'optimisation continue et discrète	81

Dans ce qui précède, nous avons montré l'équivalence du problème discret monodomaine et du problème discret multidomaine, au sens où la solution unique du problème discret multidomaine coïncide avec la solution unique du problème monodomaine. La méthode de décomposition de domaine utilisée dans le cadre de ce travail est la méthode itérative de Schwarz optimisé, dont l'efficacité repose sur l'optimisation du taux de convergence de l'algorithme.

En effet, la vitesse de convergence de l'algorithme de Schwarz tient à la détermination judicieuse des conditions d'interface. Selon les informations échangées à l'interface, l'algorithme peut même ne pas converger, comme c'est le cas de l'algorithme de Schwarz classique sans recouvrement, avec des conditions de Dirichlet à l'interface, pour le problème de Poisson [75]. Les conditions de transmission sont dites optimales lorsque l'algorithme converge en deux itérations (pour le cas de deux sous-domaines). Ces conditions coïncident avec les conditions transparentes qui ont été étudiées pour le problème de convection-diffusion dans [51]. En général, les opérateurs optimaux ne sont pas différentiels, ce qui les rend difficiles à utiliser d'un point de vue numérique [19]. Pour pallier à cet inconvénient, l'idée d'approcher ces opérateurs exacts par des opérateurs locaux est proposée par [19, 82] au moyen de développements de Taylor. Ces opérateurs approchés, différentiels en espace le long de l'interface et en temps, sont représentés par des polynômes dans l'espace de Fourier. Selon l'ordre du polynôme, un ou plusieurs paramètres apparaissent alors dans les conditions d'interface. Si tout choix de ces paramètres (nombres réels strictement positifs) assure la convergence de l'algorithme, il en est un en particulier qui optimise, pour toutes les fréquences discrètes, le taux de convergence de l'algorithme.

C'est ainsi que [63, 64, 65] ont défini les conditions de transmission optimisées pour une condition de Ventcell (ordre 2). La notion de conditions optimisées pour un problème en temps a ensuite été étendue dans [41]. Notons que dans certains cas, le choix de ces paramètres peut aussi être déterminé asymptotiquement à partir de la théorie des problèmes de meilleur approximation ([40] en 1D instationnaire avec des coefficients discontinus, [33] en 2D stationnaire à coefficients constants) ou même de manière analytique (en 1D instationnaire : [38] en diffusion pure à coefficients constants, [73] et [74] en diffusion pure à coefficients discontinus et [39] avec convection à coefficients constants ; en 2D stationnaire : [33] en diffusion pure à coefficients discontinus ou avec convection avec coefficients constants ; en 2D instationnaire : [10] avec convection à coefficients constants).

Dans la suite, nous définissons l'algorithme de Schwarz discret DDFV associé au problème multidomaine défini dans le chapitre 2 puis nous établirons dans les paragraphes 3.2 et 3.3 les taux de convergence continu et discret afin de déterminer les paramètres optimisés des conditions de transmission considérées.

3.1 L'algorithme de Schwarz

L'algorithme de Schwarz peut se décliner en deux versions : l'une séquentielle dite de type Gauss-Seidel, l'autre parallèle de type Jacobi. La première consiste à résoudre le problème local dans un sous-domaine en utilisant les informations transmises par le sous-domaine voisin à l'itération précédente et ainsi de suite, en passant d'un sous-domaine à l'autre. Dans la version parallèle, les sous-problèmes locaux sont résolus en même temps et utilisent les informations transmises par les sous-domaines voisins à l'itération précédente. Décrivons ici l'algorithme de Schwarz dans sa version parallèle (Jacobi) avec deux sous-domaines et pour des conditions de Robin. Nous l'écrivons dans le cas d'un schéma décentré 0 pour que la présentation soit plus claire, mais nous préciserons dans la suite les changements à faire pour les autres schémas.

Soit une donnée initiale (itération 0 de l'algorithme de Schwarz) sur l'interface. Etant donné à l'itération (ℓ) de l'algorithme de Schwarz, pour tout temps t_n ($n \in \{1, \dots, N\}$) :

- $U_i^{L,n(\ell)}$, les valeurs discrètes de U^L sur le domaine Ω_L aux centres des mailles ($i \in \{1, \dots, P\}$) aux instants $n\Delta t_n$,
- $U_{i+\frac{1}{2}}^{L,n(\ell)}$, les valeurs discrètes de U^L aux sommets du domaine intérieur, du bord et de l'interface ($i \in \{0, \dots, P\}$) aux instants $n\Delta t_n$,
- $U_i^{R,n(\ell)}$, les valeurs discrètes de U^R sur le domaine Ω_R aux centres des mailles ($i \in \{P+1, \dots, I\}$) aux instants $n\Delta t_n$,
- $U_{i+\frac{1}{2}}^{R,n(\ell)}$, les valeurs discrètes de U^R aux sommets du domaine intérieur, du bord et de l'interface ($i \in \{P, \dots, I-1\}$) aux instants $n\Delta t_n$,

A l'itération $(\ell + 1)$ de l'algorithme, on calcule en parallèle,

- d'une part (dans Ω_L) :
 - la solution discrète $U_i^{L,n(\ell+1)}$ aux centres des mailles ($i \in \{1, \dots, P\}$) et sur le sommet de bord $x_{\frac{1}{2}}$, pour tout temps t_n , en utilisant le schéma multidomaine décentré 0 dont la matrice associée est définie par (1.31), et soit (1.32) et (1.33) pour des conditions de Dirichlet, soit (1.34) et (1.35) pour des conditions de Neumann,
 - la solution discrète $U_{P+\frac{1}{2}}^{L,n(\ell+1)}$ sur l'interface en utilisant la condition de transmission donnée par (2.47), soit

$$2\nu_P \frac{U_{P+\frac{1}{2}}^{L,n(\ell+1)} - U_P^{L,n(\ell+1)}}{\Delta x_P} - bU_{P+\frac{1}{2}}^{L,n(\ell+1)} + \alpha^L U_{P+\frac{1}{2}}^{L,n(\ell+1)} = \\ 2\nu_{P+1} \frac{U_{P+1}^{R,n(\ell)} - U_{P+\frac{1}{2}}^{R,n(\ell)}}{\Delta x_{P+1}} - bU_{P+\frac{1}{2}}^{R,n(\ell)} + \alpha^L U_{P+\frac{1}{2}}^{R,n(\ell)},$$

- d'autre part (dans Ω_R) :
 - la solution discrète $U_i^{R,n(\ell+1)}$ pour tout temps t_n , aux centres des mailles ($i \in \{P+1, \dots, I\}$) et sur le sommet de bord $x_{I+\frac{1}{2}}$, en utilisant le schéma multidomaine décentré 0,
 - la solution discrète $U_{P+\frac{1}{2}}^{R,n(\ell+1)}$ pour tout temps t_n , sur l'interface, en utilisant l'autre condition de transmission donnée par (2.47), soit

$$-2\nu_{P+1} \frac{U_{P+1}^{R,n(\ell+1)} - U_{P+\frac{1}{2}}^{R,n(\ell+1)}}{\Delta x_{P+1}} + bU_{P+\frac{1}{2}}^{R,n(\ell+1)} + \alpha^R U_{P+\frac{1}{2}}^{R,n(\ell+1)} = \\ -2\nu_P \frac{U_{P+\frac{1}{2}}^{L,n(\ell)} - U_P^{L,n(\ell)}}{\Delta x_P} + bU_{P+\frac{1}{2}}^{L,n(\ell)} + \alpha^R U_{P+\frac{1}{2}}^{L,n(\ell)}.$$

Les solutions sur Ω_L et Ω_R ayant été calculées à l'itération $(\ell + 1)$, on peut passer alors à l'itération $(\ell + 2)$ et procéder de même.

Dans le cas où $\beta_R \neq 0$ et $\beta_L \neq 0$, l'algorithme s'écrit de façon similaire, en adaptant les conditions de transmissions, définies (à convergence) dans le chapitre précédent en (2.47).

L'algorithme de Schwarz appliqué au schéma centré (resp. schéma décentré 1) est le même que précédemment mis à part que les solutions sur chacun des sous-domaines sont calculées en utilisant la matrice associée à ces schémas, c'est-à-dire la matrice définie par (1.19) (resp. (1.31)) et soit (1.23) et (1.24) (resp. (1.32) et (1.33)) pour des conditions de Dirichlet, soit (1.27) et (1.28) (resp. (1.34) et (1.35)) pour des conditions de Neumann. Pour l'algorithme de Schwarz appliqué au schéma décentré hybride, il faut considérer la matrice définie par (1.41) et soit (1.44) et (1.45) pour des conditions de Dirichlet, soit (1.46) et (1.47) pour des conditions de Neumann. D'autre part, les conditions de transmission sont données par (2.43) au lieu de (2.47).

L'efficacité de l'algorithme de Schwarz dépend du choix des paramètres α^L et

α^R (dans le cas de type Robin) et α^L , α^R , β^L et β^R (dans le cas de conditions d'ordre 1).

3.2 Taux de convergence continu

Idéalement, il faudrait déterminer ce taux de convergence par rapport à la discrétisation du schéma et de la condition de transmission utilisées. Néanmoins la complexité des calculs en 1D et la nécessité de définir pour un problème donné autant de taux de convergence que de schémas utilisés sont des inconvénients qui jouent en faveur de la détermination du taux de convergence continu, utilisant l'EDP et la condition de transmission au niveau continu, pour lequel des propriétés d'équioscillation ont été démontrées dans [10]. Le taux de convergence continu pour le problème de convection-diffusion a été donné par exemple dans [39]. Nous reprenons les principales lignes de ces calculs.

Rappelons tout d'abord l'algorithme de Schwarz continu à partir duquel le taux de convergence continu est déterminé. L'algorithme itératif pour résoudre le problème multidomaine (2.3) et (2.4) s'écrit

$$\begin{cases} \omega^L \partial_t c^{L(\ell+1)} - \partial_x \left(\nu^L \partial_x c^{L(\ell+1)} - b c^{L(\ell+1)} \right) + \eta c^{L(\ell+1)} = f^L & \text{dans } \Omega_L \times (0, T) \\ \left(\nu^L \partial_x - b + \Lambda^L \right) c^{L(\ell+1)} = \left(\nu^R \partial_x - b + \Lambda^L \right) c^{R(\ell)} & \text{sur } \{x_\Gamma\} \times (0, T) \end{cases} \quad (3.1)$$

et

$$\begin{cases} \omega^R \partial_t c^{R(\ell+1)} - \partial_x \left(\nu^R \partial_x c^{R(\ell+1)} - b c^{R(\ell+1)} \right) + \eta c^{R(\ell+1)} = f^R & \text{dans } \Omega_R \times (0, T) \\ \left(-\nu^R \partial_x + b + \Lambda^R \right) c^{R(\ell+1)} = \left(-\nu^L \partial_x + b + \Lambda^R \right) c^{L(\ell)} & \text{sur } \{x_\Gamma\} \times (0, T), \end{cases} \quad (3.2)$$

où il faut donner en plus :

- les conditions limites de Dirichlet ou de Neumann sur $\Omega_L \times (0, T)$ (resp. $\Omega_R \times (0, T)$),
- la solution initiale sur Ω_L (resp. Ω_R)
- les valeurs initiales sur l'interface espace-temps de $g^L = \left(-\nu^L \partial_x + b + \Lambda^R \right) c^{L(0)}$ et $g^R = \left(\nu^R \partial_x - b + \Lambda^L \right) c^{R(0)}$ sur l'interface $\{x_\Gamma\} \times (0, T)$.

Déterminons à présent le taux de convergence continu basé sur l'algorithme de Schwarz continu écrit ci-dessus.

On considère deux sous-domaines $\Omega_L = (-\infty, 0)$ et $\Omega_R = (0, +\infty)$ sans recouvrement. Notons $e^{L(\ell)} = c|_{\Omega_L} - c^{L(\ell)}$ et $e^{R(\ell)} = c|_{\Omega_R} - c^{R(\ell)}$ les erreurs entre la solution continue monodomaine c et les solutions continues multidomaine c^L et c^R à l'itération (ℓ) . Calculons la transformée de Fourier en temps. Dans l'espace de Fourier, l'EDP sur l'erreur $e^{L(\ell)}$ s'écrit sur le domaine Ω_L :

$$\omega^L i\theta \widehat{e}^{L(\ell)} - \nu^L \frac{\partial^2 \widehat{e}^{L(\ell)}}{\partial x^2} + b \frac{\partial \widehat{e}^{L(\ell)}}{\partial x} + \eta \widehat{e}^{L(\ell)} = 0, \quad (3.3)$$

où ω^L et ν^L (resp. ω^R et ν^R) sont la porosité et la diffusion sur le sous-domaine Ω_L (resp. Ω_R), θ est la variable de Fourier en temps, et $\widehat{e}^{L(\ell)}$ (resp. $\widehat{e}^{R(\ell)}$) est la

transformée de Fourier en temps de $e^{L(\ell)}$ (resp. $e^{R(\ell)}$).

De l'équation caractéristique associée à cette EDO

$$-\nu^L X^2 + bX + (i\theta\omega^L + \eta) = 0,$$

nous en déduisons les racines

$$r_L^\pm = \frac{b \pm \sqrt{b^2 + 4\nu^L(i\theta\omega^L + \eta)}}{2\nu^L}. \quad (3.4)$$

Et de la même manière sur l'autre sous-domaine Ω_R supposé infini à droite, l'EDP continue

$$\omega^R i\theta \widehat{e}^{R(\ell)} - \nu^R \frac{\partial^2 \widehat{e}^{R(\ell)}}{\partial x^2} + b \frac{\partial \widehat{e}^{R(\ell)}}{\partial x} + \eta \widehat{e}^{R(\ell)} = 0 \quad (3.5)$$

donne les racines de l'équation caractéristique associée, définies par

$$r_R^\pm = \frac{b \pm \sqrt{b^2 + 4\nu^R(i\theta\omega^R + \eta)}}{2\nu^R}. \quad (3.6)$$

Les quantités sous les racines carrées apparaissant dans (3.4) et (3.6) sont notées

$$d^L = b^2 + 4\nu^L(i\theta\omega^L + \eta) \quad d^R = b^2 + 4\nu^R(i\theta\omega^R + \eta). \quad (3.7)$$

On en déduit alors les erreurs $\widehat{e}^{L(\ell)}$ et $\widehat{e}^{R(\ell)}$. Sous l'hypothèse que celles-ci restent bornées lorsque x tend vers $-\infty$ et $+\infty$ respectivement et puisque $\text{Re}(r_L^-) < 0$ et $\text{Re}(r_R^+) > 0$, nous obtenons alors :

$$\begin{cases} \widehat{e}^{L(\ell)}(x, \theta) = A^L(\ell)(\theta) e^{r_L^+ x} \\ \widehat{e}^{R(\ell)}(x, \theta) = A^R(\ell)(\theta) e^{r_R^- x}, \end{cases} \quad (3.8)$$

où $A^L(\ell)$ et $A^R(\ell)$ sont déterminés par les conditions de transmission données par (3.1) et (3.2) rappelées ci-dessous :

$$\begin{aligned} (\nu^L \partial_x - b + \Lambda^L) e^{L(\ell+1)} &= (\nu^R \partial_x - b + \Lambda^L) e^{R(\ell)} \\ (-\nu^R \partial_x + b + \Lambda^R) e^{R(\ell+1)} &= (-\nu^L \partial_x + b + \Lambda^R) e^{L(\ell)} \end{aligned}$$

où $\mathcal{B}_L := \nu \partial_x - b + \Lambda^L$ et $\mathcal{B}_R := -\nu \partial_x - b + \Lambda^R$ sont les opérateurs à définir. En notant λ^L et λ^R les symboles des opérateurs Λ^L et Λ^R , nous obtenons grâce à (3.8)

$$A^L(\ell+1) (\nu^L r_L^+ - b + \lambda^L) e^{r_L^+ x_{P+1/2}} = A^R(\ell) (\nu^R r_R^- - b + \lambda^L) e^{r_R^- x_{P+1/2}}$$

$$A^R(\ell+1) (-\nu^R r_R^- + b + \lambda^R) e^{r_R^- x_{P+1/2}} = A^L(\ell) (-\nu^L r_L^+ + b + \lambda^R) e^{r_L^+ x_{P+1/2}}.$$

Le taux de convergence, défini comme le rapport entre l'erreur à l'itération $(\ell + 1)$ et à l'itération $(\ell - 1)$ peut alors s'écrire

$$\rho := \frac{e^{L(\ell+1)}}{e^{L(\ell-1)}} = \frac{A^L(\ell+1)}{A^L(\ell-1)} = \left(\frac{\nu^R r_R^- - b + \lambda^L}{\nu^L r_L^+ - b + \lambda^L} \right) \left(\frac{-\nu^L r_L^+ + b + \lambda^R}{-\nu^R r_R^- + b + \lambda^R} \right). \quad (3.9)$$

L'algorithme est optimal s'il converge en deux itérations, autrement dit si chacun des termes entre parenthèses de ρ s'annule, c'est-à-dire en prenant les symboles d'opérateurs

$$\begin{cases} \lambda^{L opt} = b - \nu^R r_R^- = b - \nu^R \left(\frac{b - \sqrt{d^R}}{2\nu^R} \right) = \frac{b + \sqrt{d^R}}{2} \\ \lambda^{R opt} = \nu^L r_L^+ - b = \nu^L \left(\frac{b + \sqrt{d^L}}{2\nu^L} \right) - b = \frac{\sqrt{d^L} - b}{2}. \end{cases} \quad (3.10)$$

Les racines (3.4) et (3.6) étant non polynomiales en θ , ces symboles d'opérateurs ne correspondent pas à des opérateurs différentiels. Il sont donc approchés par des polynômes d'ordre 0 ou d'ordre 1 (en $i\theta$), correspondant à des opérateurs différentiels de la forme $\Lambda = \alpha + \beta\partial_t$. Si $\beta = 0$, l'opérateur est d'ordre 0, ce qui donne lieu aux conditions d'ordre 0 (Robin). Sinon, les conditions de transmission sont d'ordre 1.

Nous proposons différents moyens d'approcher ces opérateurs optimaux. Nous indiquons dans le tableau suivant les différentes désignations et la manière correspondante de choisir les symboles d'opérateurs approchés $\lambda^{L app}$ et $\lambda^{R app}$ d'après la définition de $\lambda^{L opt}$ et $\lambda^{R opt}$ en (3.10).

Condition	paramètre(s) à optimiser	$\lambda^{L app}$	$\lambda^{R app}$
Robin1s	p	$\frac{b+p}{2}$	$\frac{p-b}{2}$
RobinSnu	p	$\frac{b + \nu^R p}{2}$	$\frac{\nu^L p - b}{2}$
Robin2s	p^L, p^R	$\frac{b + p^R}{2}$	$\frac{p^L - b}{2}$
Ordre1	p, q	$\frac{b + p + i\theta q}{2}$	$\frac{p + i\theta q - b}{2}$
Ordre1Swnu	p, q	$\frac{b + \nu^R p + i\omega^R \nu^R \theta q}{2}$	$\frac{\nu^L p - b + i\omega^L \nu^L \theta q}{2}$

Tableau 3.1 – Définition des symboles d'opérateurs approchés $\lambda^{L app}$ et $\lambda^{R app}$ selon les conditions d'interface considérées.

L'idée derrière les différents choix donnés par le tableau 3.1 est d'approcher au mieux les racines $\sqrt{d^L}$ et $\sqrt{d^R}$ apparaissant dans $\lambda^{L opt}$ et $\lambda^{R opt}$ (voir (3.10)) avec le moins de degrés de liberté possible car plus le nombre de paramètres à optimiser est important, plus le problème d'optimisation est complexe. Il y a peu de raison d'approcher les deux quantités $\sqrt{d^L}$ et $\sqrt{d^R}$ (définies par (3.7)), différentes du fait des discontinuités de ω et ν , par un unique polynôme p ou $p + i\theta q$, mais il peut être avantageux d'utiliser un *scaling* [33] sur le paramètre d'optimisation p et/ou q , différent à gauche et à droite, comme nous l'avons fait par exemple pour les conditions Ordre1Snu et Ordre1Swnu.

Condition	paramètre(s) à optimiser	α^L	β^L	α^R	β^R
Robin1s	p	$\frac{b+p}{2}$	0	$\frac{b+p}{2}$	0
RobinSnu	p	$\frac{b+\nu^R p}{2}$	0	$\frac{\nu^L p - b}{2}$	0
Robin2s	p^L, p^R	$\frac{b+p^R}{2}$	0	$\frac{p^L - b}{2}$	0
Ordre1	p, q	$\frac{b+p}{2}$	$\frac{q}{2}$	$\frac{p-b}{2}$	$\frac{q}{2}$
Ordre1Swnu	p, q	$\frac{b+\nu^R p}{2}$	$\frac{\omega^R \nu^R q}{2}$	$\frac{\nu^L p - b}{2}$	$\frac{\omega^L \nu^L q}{2}$

Tableau 3.2 – Lien pour chaque condition d’interface entre λ^L (resp. λ^R) et α^L et β^L (resp. α^R et β^R) en fonction des paramètres p, p^L, p^R , et (p, q) sur lesquels est réalisée l’optimisation.

En résumé du tableau 3.1, donnons la liste des conditions d’interface considérées :

- Conditions d’ordre 0 :
 - condition de **Robin 1-sided**, désignée par **Robin1s** (un seul paramètre p à gauche et à droite pour approcher $\sqrt{d^L}$ et $\sqrt{d^R}$)
 - condition de **Robin 1-sided avec scaling**, désignée par **RobinSnu** (un seul paramètre p avec le *scaling* ν^R / ν^L)
 - condition de **Robin 2-sided**, désignée par **Robin2s** (un paramètre p^R approchant $\sqrt{d^R}$ à gauche et un paramètre p^L approchant $\sqrt{d^L}$ à droite).
- Conditions d’ordre 1 :
 - condition d’**ordre 1** désignée par **Ordre1** (deux paramètres p et q identiques de chaque côté, $p + i\theta q$ approchant $\sqrt{d^L}$ et $\sqrt{d^R}$),
 - condition d’**ordre 1 avec scaling**, désignée par **Ordre1Swnu** (deux paramètres p et q avec ν^R / ν^L comme *scaling* sur p et $\nu^R \omega^R / \nu^L \omega^L$ comme *scaling* sur q).

Notons qu’une condition d’ordre 1 avec 4 paramètres d’optimisation p^L, q^L, p^R et q^R aurait pu être considérée, mais cela a l’inconvénient de rendre plus difficile numériquement le problème d’optimisation.

Ainsi les symboles d’opérateurs approchés $\lambda^{L app}$ et $\lambda^{R app}$, définis dans le tableau 3.1 dépendent des paramètres d’optimisation p (ou p^L / p^R) et q (ou q^L / q^R) et de la variable de Fourier θ .

Ils peuvent être aussi donnés en fonction des paramètres $\alpha^L, \beta^L, \alpha^R$ et β^R puisque $\lambda^{L app} = \alpha^L + \beta^L i\theta$ et $\lambda^{R app} = \alpha^R + \beta^R i\theta$. Le lien entre ces paramètres est résumé dans le tableau 3.2.

Le taux de convergence (3.9) s’écrit alors

$$\rho(p, q, \theta) = \frac{\nu^R r_R^- - b + \lambda^{L app}}{\nu^L r_L^+ - b + \lambda^{L app}} \cdot \frac{-\nu^L r_L^+ + b + \lambda^{R app}}{-\nu^R r_R^- + b + \lambda^{R app}}, \quad (3.11)$$

et l’optimisation du taux de convergence consiste à chercher le ou les paramètres d’optimisation p / q qui minimise(nt) le maximum du module du taux de conver-

gence sur l'ensemble discret des fréquences admises par le maillage temporel. Le(s) paramètre(s) optimisé(s) p^* et (p^*, q^*) sont respectivement solutions des problèmes d'optimisation

$$\min_{p>0} \left(\max_{\theta \in [\frac{\pi}{T}, \frac{\pi}{\Delta t}]} |\rho(p, 0, \theta)| \right), \quad (3.12)$$

et

$$\min_{p>0, q>0} \left(\max_{\theta \in [\frac{\pi}{T}, \frac{\pi}{\Delta t}]} |\rho(p, q, \theta)| \right), \quad (3.13)$$

où T est le temps final et Δt le pas de temps.

Les paramètres optimisés obtenus étant les meilleurs au regard du problème continu, il est clair qu'ils seront d'autant mieux adaptés à un problème discret que celui-ci approchera mieux le problème continu. Asymptotiquement, un schéma centré d'ordre 2 approchant plus précisément le problème continu qu'un schéma décentré d'ordre 1, il s'en suit que les paramètres optimisés à partir de l'EDP continue conviendront mieux pour un schéma centré que pour un schéma décentré. Dans le cas d'un schéma décentré, plutôt que de calculer le taux de convergence discret (plus compliqué), il est possible d'adapter le calcul du taux de convergence en tenant compte de la viscosité artificielle introduite par le décentrage. C'est ce que nous proposons ci-dessous dans le cas des schémas décentré 0 et décentré 1.

3.2.1 Adaptation pour le schéma décentré 0

Il est bien connu qu'un schéma décentré est équivalent à un schéma centré doté d'une nouvelle viscosité $\nu' = \nu + \frac{|b|\Delta x}{2}$ contenant la viscosité artificielle provenant du décentrage du terme de convection. Il est possible de tirer profit de cette propriété pour mieux approcher le taux de convergence effectif (qui est le taux de convergence discret du schéma) par le taux de convergence de l'algorithme posé sur un problème continu : en partant de l'EDP continue modifiée (avec ν' au lieu de ν), on calcule un taux de convergence plus adapté au schéma décentré.

Reprenons brièvement les étapes effectuées ci-dessus. Les erreurs $\hat{e}^{L(\ell)}$ et $\hat{e}^{R(\ell)}$ sont encore données par

$$\begin{cases} \hat{e}^{L(\ell)}(x, \theta) = A^{L(\ell)}(\theta) e^{r_L^+ x} \\ \hat{e}^{R(\ell)}(x, \theta) = A^{R(\ell)}(\theta) e^{r_R^- x} \end{cases}$$

où les racines dépendent désormais de la viscosité modifiée ν' :

$$r_L^\pm = \frac{b \pm \sqrt{b^2 + 4\nu'^L(i\theta\omega^L + \eta)}}{2\nu'^L} \quad r_R^\pm = \frac{b \pm \sqrt{b^2 + 4\nu'^R(i\theta\omega^R + \eta)}}{2\nu'^R}. \quad (3.14)$$

Le flux convectif n'étant pas décentré dans la discrétisation des conditions de transmission (cf (2.47)), la viscosité modifiée n'entre pas en jeu ici. Le taux de convergence est alors défini de la même manière que précédemment

$$\rho := \frac{A^{L(\ell+1)}}{A^{L(\ell-1)}} = \frac{\nu^R r_R^- - b + \lambda^L}{\nu^L r_L^+ - b + \lambda^L} \cdot \frac{-\nu^L r_L^+ + b + \lambda^R}{-\nu^R r_R^- + b + \lambda^R},$$

où la viscosité modifiée est cachée dans les racines r_L^+ et r_R^- . Les symboles des opérateurs optimaux sont donnés par

$$\begin{cases} \lambda^{L\ opt} = b - \nu^R r_R^- = b + \frac{\nu^R}{2\nu'^R} \left(b + \sqrt{4\nu'^R(i\theta\omega^R + \eta)} \right), \\ \lambda^{R\ opt} = \nu^L r_L^+ - b = \frac{\nu^L}{2\nu'^L} \left(b + \sqrt{b^2 + 4\nu'^L(i\theta\omega^L + \eta)} \right) - b. \end{cases} \quad (3.15)$$

Tout le reste est identique, excepté que les *scaling* utilisés prennent en compte la viscosité modifiée, étant donnée qu'elle apparaît sous la racine carrée à approcher.

3.2.2 Adaptation pour le schéma décentré 1

En plus d'être un schéma décentré auquel peut s'appliquer ce qui vient d'être dit dans le paragraphe 3.2.1, le schéma décentré 1 a la particularité de présenter sur une des mailles adjacentes à l'interface (à droite de l'interface si $b > 0$ et à gauche sinon) une absence de terme de convection ($b = 0$), celui-ci étant transféré dans le membre de droite (car l'information du décentrement du flux convectif est donnée par le sous-domaine voisin, invisible aux yeux du sous-domaine considéré, donc faisant parti des données connues).

Tenir compte de cette caractéristique propre à ce schéma est possible en écrivant l'EDP sur le domaine de droite privée de son terme de convection.

Soit $b > 0$. Les racines relatives à l'EDP s'écrivent maintenant

$$r_L^\pm = \frac{b \pm \sqrt{b^2 + 4\nu'^L(i\theta\omega^L + \eta)}}{2\nu'^L} \quad r_R^\pm = \pm \frac{\sqrt{4\nu'^R(i\theta\omega^R + \eta)}}{2\nu'^R}. \quad (3.16)$$

Les conditions de transmission sont les mêmes que précédemment, ce qui aboutit au même taux de convergence. Les symboles d'opérateurs optimaux sont donnés par

$$\begin{cases} \lambda^{L\ opt} = b - \nu^R r_R^- = b + \frac{\nu^R}{2\nu'^R} \sqrt{4\nu'^R(i\theta\omega^R + \eta)}, \\ \lambda^{R\ opt} = \nu^L r_L^+ - b = \frac{\nu^L}{2\nu'^L} \left(b + \sqrt{b^2 + 4\nu'^L(i\theta\omega^L + \eta)} \right) - b. \end{cases} \quad (3.17)$$

3.3 Taux de convergence discret

La vitesse de convergence de l'algorithme de Schwarz étant dépendante du schéma utilisé, l'idéal est de pouvoir déterminer les paramètres d'optimisation, a fortiori le taux de convergence, par rapport à la discrétisation de l'EDP ([81], [63]). Dans ce qui suit, nous déterminons donc le taux de convergence discret relatif aux schémas décentrés 0 et 1 en espace avec un schéma Galerkin Discontinu d'ordre 0 en temps. Nous considérons un maillage de pas constant Δx^L et Δx^R sur chaque sous-domaine et un pas de temps constant noté Δt . Nous supposons de plus les coefficients constants par sous-domaine et b positif. Lorsque les notations Δx , ω et ν sont utilisées sans l'exposant L ou R , cela signifie que l'égalité (ou l'inégalité) concernée est vraie pour les deux sous-domaines.

Ecrivons dans un premier temps les équations discrètes vérifiées par l'erreur sur chacune des mailles. Considérons deux sous-domaines dont les bornes sont infinies.

Distinguons les mailles intérieures et les mailles jouxtant l'interface. Sur les mailles intérieures i telles que $i \geq P + 2$ et $i \leq P - 1$, le schéma décentré classique consiste en une récurrence à trois points. L'équation caractéristique associée possède alors deux racines r^+ et r^- et la solution E_i s'écrit sous la forme $A(r^+)^i + B(r^-)^i$, où A et B sont des constantes à déterminer. L'une d'entre elles est rendue nulle par les conditions à l'infini.

Sur les mailles adjacentes à l'interface $\{x_{P+\frac{1}{2}}\}$, c'est-à-dire sur les mailles P et $P + 1$, le schéma exprime respectivement $E_{P+1}^{R,n(\ell)}$ en fonction de $E_{P+2}^{R(\ell)}$ et $E_{P+\frac{1}{2}}^{R(\ell)}$ d'une part, et $E_P^{L(\ell)}$ en fonction de $E_{P-1}^{L(\ell)}$ et $E_{P+\frac{1}{2}}^{L(\ell)}$ d'autre part. Les deux conditions de transmission expriment, quant à elles, la donnée de l'interface $E_{P+\frac{1}{2}}^{L(\ell)}$ ou $E_{P+\frac{1}{2}}^{R(\ell)}$ à partir de données déjà connues, ce qui permet de déterminer $E_{P+1}^{R(\ell)}$ et $E_P^{L(\ell)}$.

Traitement des points intérieurs

Sur les points intérieurs, les schémas décentré 0 monodomaine et multidomaine sont identiques. En notant $E_i^{L,n(\ell)}$ (resp. $E_i^{R,n(\ell)}$) l'erreur entre la solution discrète monodomaine $U_{0_i}^n$ et la solution discrète multidomaine $U_{0_i}^{L,n(\ell)}$ (resp. $U_{0_i}^{R,n(\ell)}$), nous avons sur le sous-domaine de gauche ($i \leq P - \frac{1}{2}$)

$$\begin{aligned} & \left[\omega^L \frac{\Delta x^L}{\Delta t} + b + \frac{2\nu^L}{\Delta x} + \eta \Delta x \right] E_i^{L,n(\ell)} \\ & - \frac{\nu^L}{\Delta x^L} E_{i+1}^{L,n(\ell)} - \left(b + \frac{\nu^L}{\Delta x^L} \right) E_{i-1}^{L,n(\ell)} = \omega^L \frac{\Delta x^L}{\Delta t} E_i^{L,n-1(\ell)} \end{aligned} \quad (3.18)$$

et sur le domaine de droite $i \geq P + \frac{3}{2}$ une équation similaire en remplaçant $E_i^{L,n(\ell)}$ par $E_i^{R,n(\ell)}$.

En utilisant une transformée de Fourier discrète en temps, (3.18) devient

$$\begin{aligned} & \left[\omega^L \frac{\Delta x^L}{\Delta t} (1 - e^{-i\theta \Delta t}) + b + \frac{2\nu^L}{\Delta x^L} + \eta \Delta x^L \right] \hat{E}_i^{L(\ell)} \\ & - \frac{\nu^L}{\Delta x^L} \hat{E}_{i+1}^{L(\ell)} - \left(b + \frac{\nu^L}{\Delta x^L} \right) \hat{E}_{i-1}^{L(\ell)} = 0. \end{aligned} \quad (3.19)$$

L'équation caractéristique associée est donnée par

$$\frac{\nu^L}{\Delta x^L} X^2 - \left[\omega^L \frac{\Delta x^L}{\Delta t} (1 - e^{-i\theta \Delta t}) + b + \frac{2\nu^L}{\Delta x^L} + \eta \Delta x^L \right] X + \left(b + \frac{\nu^L}{\Delta x^L} \right) = 0 \quad (3.20)$$

et admet deux racines r_L^+ et r_L^- . Tout ce qui précède étant également valable sur Ω_R , les erreurs $\hat{E}_i^{L(\ell)}$ et $\hat{E}_i^{R(\ell)}$ définies sur les deux sous-domaines s'écrivent

$$\hat{E}_i^{L(\ell)} = A^L(\theta) (r_L^+)^i + B^L(\theta) (r_L^-)^i \quad \text{et} \quad \hat{E}_i^{R(\ell)} = A^R(\theta) (r_R^+)^i + B^R(\theta) (r_R^-)^i.$$

En montrant que l'une des deux racines est de module strictement supérieure à 1 et que l'autre est de module strictement inférieur à 1, les conditions limites à l'infini, c'est-à-dire lorsque $i \rightarrow +\infty$ à droite ou $i \rightarrow -\infty$ à gauche permettront alors de poser comme nulle l'une des deux constantes A^L (resp. A^R) et B^L (resp. B^R).

Pour simplifier, on omet pour un temps les exposants L et R dans les notations. Commençons par écrire l'expression des racines à partir de l'équation caractéristique (3.20) :

$$r^\pm = \frac{\Delta x}{2\nu} \left(\omega \frac{\Delta x}{\Delta t} (1 - e^{-i\theta\Delta t}) + b + \frac{2\nu}{\Delta x} + \eta\Delta x \pm \sqrt{\left[\omega \frac{\Delta x}{\Delta t} (1 - e^{-i\theta\Delta t}) + b + \frac{2\nu}{\Delta x} + \eta\Delta x \right]^2 - \frac{4\nu}{\Delta x} \left[b + \frac{\nu}{\Delta x} \right]} \right). \quad (3.21)$$

Montrons donc que $|r^+| > 1$ et $|r^-| < 1$. Pour montrer que $|r^+| > 1$, nous cherchons d'abord à montrer que $|r^+| \geq |r^-|$. En notant ξ^+ et ξ^- les arguments respectifs des deux racines r^+ et r^- , on peut écrire

$$r^+ = |r^+| e^{i\xi^+} \quad \text{et} \quad r^- = |r^-| e^{i\xi^-}.$$

D'après (3.20), le produit des racines vaut donc

$$1 + \frac{b\Delta x}{\nu} = r^+ \cdot r^- = |r^+| \cdot |r^-| e^{i(\xi^- + \xi^+)}. \quad (3.22)$$

Comme $r^+ \cdot r^- \in \mathbb{R}^+$, nous avons $\xi^- + \xi^+ \in \{2k\pi, k \in \mathbb{Z}\}$. En notant $\xi = \xi^+$, les racines peuvent alors s'écrire comme

$$\begin{cases} r^+ = |r^+| \cos(\xi) + i |r^+| \sin(\xi), \\ r^- = |r^-| \cos(\xi) - i |r^-| \sin(\xi). \end{cases} \quad (3.23)$$

Par ailleurs, la somme des racines est donnée à partir du polynôme caractéristique (3.20) par

$$r^+ + r^- = \frac{\omega\Delta x^2}{\nu\Delta t} (1 - e^{-i\theta\Delta t}) + \frac{b\Delta x}{\nu} + 2 + \frac{\eta\Delta x^2}{\nu}. \quad (3.24)$$

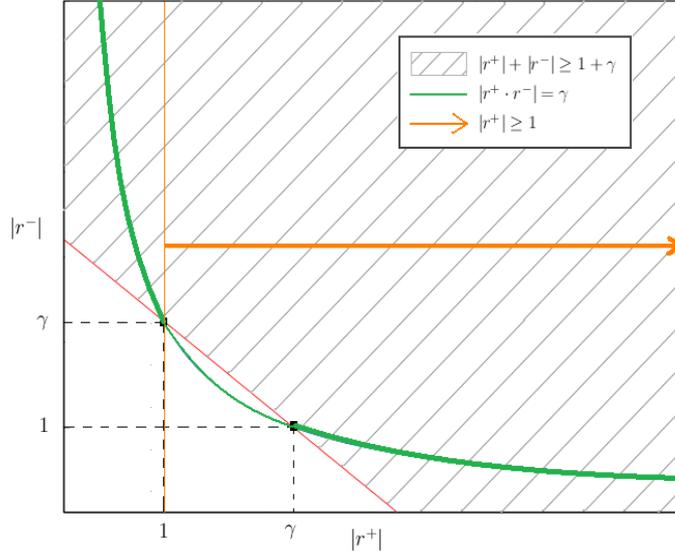
En utilisant (3.23) et (3.24), nous déduisons

$$(|r^+| + |r^-|) \cos(\xi) = \frac{\omega\Delta x^2}{\nu\Delta t} (1 - \cos(\theta\Delta t)) + \frac{b\Delta x}{\nu} + 2 + \frac{\eta\Delta x^2}{\nu}, \quad (3.25)$$

soit $\cos(\xi) > 0$. Puisque la racine carrée d'un nombre complexe est par définition de partie réelle positive, il est clair, à partir l'expression de (3.21), que $\operatorname{Re}(r^+) \geq \operatorname{Re}(r^-)$. Alors, selon (3.23) et en utilisant que $\cos(\xi) > 0$, nous obtenons

$$\begin{aligned} \operatorname{Re}(r^+) \geq \operatorname{Re}(r^-) &\iff |r^+| \cos(\xi) \geq |r^-| \cos(\xi) \\ &\iff |r^+| \geq |r^-|. \end{aligned} \quad (3.26)$$

Nous concluons alors que $|r^+| > 1$. En effet, si $|r^+| \leq 1$, alors $r^+ \cdot r^- \leq 1$ car $|r^+| \geq |r^-|$, ce qui est impossible d'après l'expression du produit des racines (3.22), strictement supérieure à 1. Nous pouvons maintenant montrer, soit de manière graphique (cf figure 3.1), soit par un calcul rapide que nous donnons ci-après, que

FIGURE 3.1 – $\rho_2 := |r_2| \leq 1$: solution graphique

$$|r^-| \leq 1.$$

En effet, en notant $\gamma = 1 + \frac{b\Delta x}{\nu}$ et en réécrivant le produit et la somme des racines donnés par (3.22) et (3.24), nous avons

$$\begin{cases} |r^+| = \frac{\gamma}{|r^-|}, \\ |r^+| + |r^-| = \frac{\gamma}{|r^-|} + |r^-| \geq 1 + \gamma. \end{cases} \quad (3.27)$$

De la deuxième inégalité, nous pouvons écrire successivement

$$\begin{aligned} |r^-|^2 - |r^-|(1 + \gamma) + \gamma &\geq 0, \\ (|r^-| - 1)(|r^-| - \gamma) &\geq 0. \end{aligned} \quad (3.28)$$

Comme $|r^+| \cdot |r^-| = \gamma = 1 + \frac{b\Delta x}{\nu}$ et $|r^+| > 1$, alors $|r^-| < \gamma$. Pour vérifier l'inégalité précédente, il est nécessaire que $|r^-| - 1 \leq 0$, soit $|r^-| \leq 1$.

Montrons pour terminer l'inégalité stricte $|r^-| < 1$. Grâce à (3.25) et à la définition de $\gamma = 1 + \frac{b\Delta x}{\nu}$, nous pouvons écrire

$$|r^+| + |r^-| \geq (|r^+| + |r^-|) \cos(\xi) \geq 1 + \gamma.$$

L'inégalité de gauche est stricte dès que $\xi \notin \{2k\pi, k \in \mathbb{Z}\}$. Si cette condition n'est pas remplie, alors r^+ et r^- sont des réels purs (cf (3.23)). Puisque $\theta \in \left[\frac{\pi}{T}, \frac{\pi}{\Delta t}\right]$, cela n'est possible en considérant l'expression des racines (3.21) que si $\theta\Delta t = \pi$. Et nous avons alors $1 - \cos(\theta\Delta t) = 2$. Il vient, d'après (3.25),

$$|r^+| + |r^-| \geq 1 + \gamma + \frac{2\omega\Delta x^2}{\nu\Delta t} > 1 + \gamma.$$

Nous avons donc dans tous les cas

$$|r^+| + |r^-| > 1 + \gamma. \quad (3.29)$$

La deuxième inégalité de (3.27) et (3.28) est alors stricte, ce qui implique que $|r^-| < 1$. Nous avons ainsi montré que $|r^+| > 1$ et $|r^-| < 1$.

Puisque les erreurs ne doivent pas exploser à l'infini, on doit avoir $A^L = 0$ et $B^R = 0$, ce qui conduit à

$$\hat{E}_i^L(\ell) = B^L(\theta) (r_L^+)^i \quad \text{et} \quad \hat{E}_i^R(\ell) = A^R(\theta) (r_R^-)^i. \quad (3.30)$$

Traitement des mailles autour de l'interface

Puisque les conditions de transmission (2.47) sont équivalentes à la continuité du flux diffusif écrit en chaque sommet intérieur (entre deux mailles) du domaine global, elles peuvent être écrites sur la solution monodomaine en $x_{P+\frac{1}{2}}$. Par linéarité, les conditions de transmission (2.47) écrites sur la solution multidomaine sont donc valables aussi sur l'erreur. La transformée de Fourier étant appliquée, nous avons donc

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{2\nu^L}{\Delta x^L} \left(\hat{E}_{P+\frac{1}{2}}^L(\ell) - \hat{E}_P^L(\ell) \right) - b\hat{E}_{P+\frac{1}{2}}^L(\ell) + \lambda^L \hat{E}_{P+\frac{1}{2}}^L(\ell) = \\ \quad + \frac{2\nu^R}{\Delta x^R} \left(\hat{E}_{P+1}^R(\ell) - \hat{E}_{P+\frac{1}{2}}^R(\ell) \right) - b\hat{E}_{P+\frac{1}{2}}^R(\ell) + \lambda^L \hat{E}_{P+\frac{1}{2}}^R(\ell) \\ - \frac{2\nu^R}{\Delta x^R} \left(\hat{E}_{P+1}^R(\ell) - \hat{E}_{P+\frac{1}{2}}^R(\ell) \right) + b\hat{E}_{P+\frac{1}{2}}^R(\ell) + \lambda^R U_0^{Rn} \hat{E}_{P+\frac{1}{2}}^R(\ell) = \\ \quad - \frac{2\nu^L}{\Delta x^L} \left(\hat{E}_{P+\frac{1}{2}}^L(\ell) - \hat{E}_P^L(\ell) \right) + b\hat{E}_{P+\frac{1}{2}}^L(\ell) + \lambda^R \hat{E}_{P+\frac{1}{2}}^L(\ell). \end{array} \right. \quad (3.31)$$

Ayant montré dans le paragraphe 2.2 que les mêmes équations discrètes monodomaine et multidomaine étaient résolues sur les mailles à gauche et à droite de l'interface, nous pouvons écrire l'équation discrétisée sur l'erreur.

À gauche, d'après l'expression (2.5) du schéma multidomaine pour lequel nous prenons la transformée de Fourier, nous obtenons

$$\omega^L \frac{\Delta x^L}{\Delta t} (1 - e^{-i\theta\Delta t}) \hat{E}_P^L(\ell) + b \left(\hat{E}_P^L(\ell) - \hat{E}_{P-1}^L(\ell) \right) - \frac{\nu^L}{\Delta x^L} \left(2\hat{E}_{P+\frac{1}{2}}^L(\ell) - 3\hat{E}_P^L(\ell) + \hat{E}_{P-1}^L(\ell) \right) + \eta \Delta x^L \hat{E}_P^L(\ell) = 0. \quad (3.32)$$

À droite, il faut distinguer entre les deux schémas décentrés multidomaine. Dans le cas d'un schéma décentré 0, nous obtenons à partir de (2.27)

$$\omega^R \frac{\Delta x^R}{\Delta t} (1 - e^{-i\theta\Delta t}) \hat{E}_{P+1}^R(\ell) + b \left(1 + \frac{\nu^R \Delta x^L}{\nu^L \Delta x^R} \right) \left(\hat{E}_{P+1}^R(\ell) - \hat{E}_{P+\frac{1}{2}}^R(\ell) \right) - \frac{\nu^R}{\Delta x^R} \left(\hat{E}_{P+2}^R(\ell) - 3\hat{E}_{P+1}^R(\ell) + 2\hat{E}_{P+\frac{1}{2}}^R(\ell) \right) + \eta \Delta x \hat{E}_{P+1}^R(\ell) = 0. \quad (3.33)$$

Dans le cas du schéma décentré 1, l'expression (2.30) nous permet d'écrire

$$\begin{aligned} \omega^R \frac{\Delta x^R}{\Delta t} (1 - e^{-i\theta\Delta t}) \hat{E}_{P+1}^{R(\ell)} + b \hat{E}_{P+1}^{R(\ell)} + \eta \Delta x^R \hat{E}_{P+1}^{R(\ell)} \\ - \frac{\nu^R}{\Delta x^R} \left(\hat{E}_{P+2}^{R(\ell)} - 3\hat{E}_{P+1}^{R(\ell)} + 2\hat{E}_{P+\frac{1}{2}}^{R(\ell)} \right) = b \hat{E}_P^{L(\ell-1)}. \end{aligned} \quad (3.34)$$

Détermination du taux de convergence discret

1^{er} cas : schéma décentré 0

Donnons les quatre équations utilisées dans la suite et réécrites à partir de (3.31), (3.32) et (3.33).

2 équations pour le schéma à gauche et à droite de l'interface :

$$\begin{aligned} - \left[b \left(1 + \frac{\nu^R \Delta x^L}{\nu^L \Delta x^R} \right) + \frac{2\nu^R}{\Delta x^R} \right] \hat{E}_{P+\frac{1}{2}}^{R(\ell)} + \left[\omega^R \frac{\Delta x^R}{\Delta t} (1 - e^{-i\theta\Delta t}) \right. \\ \left. + b \left(1 + \frac{\nu^R \Delta x^L}{\nu^L \Delta x^R} \right) + \frac{3\nu^R}{\Delta x^R} + \eta \Delta x^R \right] \hat{E}_{P+1}^{R(\ell)} - \frac{\nu^R}{\Delta x^R} \hat{E}_{P+2}^{R(\ell)} = 0. \end{aligned} \quad (3.35)$$

$$\begin{aligned} - \frac{2\nu^L}{\Delta x^L} \hat{E}_{P+\frac{1}{2}}^{L(\ell)} + \left[\omega^L \frac{\Delta x^L}{\Delta t} (1 - e^{-i\theta\Delta t}) + b + \frac{3\nu^L}{\Delta x^L} + \eta \Delta x^L \right] \hat{E}_P^{L(\ell)} \\ - \left[b + \frac{\nu^L}{\Delta x^L} \right] \hat{E}_{P-1}^{L(\ell)} = 0. \end{aligned} \quad (3.36)$$

2 équations pour les conditions de transmission :

$$\left[\frac{2\nu^R}{\Delta x^R} + b + \lambda^R \right] \hat{E}_{P+\frac{1}{2}}^{R(\ell)} - \frac{2\nu^R}{\Delta x^R} \hat{E}_{P+1}^{R(\ell)} = \left[-\frac{2\nu^L}{\Delta x^L} + b + \lambda^R \right] \hat{E}_{P+\frac{1}{2}}^{L(\ell-1)} + \frac{2\nu^L}{\Delta x^L} \hat{E}_P^{L(\ell-1)}. \quad (3.37)$$

$$\left[\frac{2\nu^L}{\Delta x^L} - b + \lambda^L \right] \hat{E}_{P+\frac{1}{2}}^{L(\ell)} - \frac{2\nu^L}{\Delta x^L} \hat{E}_P^{L(\ell)} = \left[-\frac{2\nu^R}{\Delta x^R} - b + \lambda^L \right] \hat{E}_{P+\frac{1}{2}}^{R(\ell-1)} + \frac{2\nu^R}{\Delta x^R} \hat{E}_{P+1}^{R(\ell-1)}. \quad (3.38)$$

D'après (3.30), nous pouvons écrire

$$\hat{E}_{P+1}^{R(\ell)} = B(\theta) (r^-)^{P+1} \quad \text{et} \quad \hat{E}_{P+2}^{R(\ell)} = B(\theta) (r^-)^{P+2} = r^- \hat{E}_{P+1}^{R(\ell)},$$

ainsi que

$$\hat{E}_P^{L(\ell)} = A(\theta) (r^+)^P \quad \text{et} \quad \hat{E}_{P-1}^{L(\ell)} = A(\theta) (r^+)^{P-1} = \hat{E}_P^{L(\ell)} / r^+.$$

Nous pouvons alors exprimer $\hat{E}_{P+\frac{1}{2}}^{L(\ell)}$ et $\hat{E}_{P+\frac{1}{2}}^{R(\ell)}$ à partir des équations (3.37) et (3.38) comme

$$\begin{aligned} \hat{E}_{P+\frac{1}{2}}^{R(\ell)} &= \frac{1}{b \left(1 + \frac{\nu^R \Delta x^L}{\nu^L \Delta x^R}\right) + \frac{2\nu^R}{\Delta x^R}} \left[\omega^R \frac{\Delta x^R}{\Delta t} (1 - e^{-i\theta \Delta t}) \right. \\ &\quad \left. + b \left(1 + \frac{\nu^R \Delta x^L}{\nu^L \Delta x^R}\right) + \frac{3\nu^R}{\Delta x^R} + \eta \Delta x^R - \frac{\nu^R}{\Delta x^R} r^- \right] B^{(\ell)}(r^-)^{P+1} \\ &:= C_1 B^{(\ell)}(\theta) (r^-)^{P+1}, \end{aligned} \quad (3.39)$$

$$\begin{aligned} \hat{E}_{P+\frac{1}{2}}^{L(\ell)} &= \frac{\Delta x^L}{2\nu^L} \left[\left(\omega^L \frac{\Delta x^L}{\Delta t} (1 - e^{-i\theta \Delta t}) + b + \frac{3\nu^L}{\Delta x^L} + \eta \Delta x^L \right) r^- \right. \\ &\quad \left. - \left(b + \frac{\nu^L}{\Delta x^L} \right) \right] A^{(\ell)}(r^+)^{P-1} \\ &:= C_2 A^{(\ell)}(\theta) (r^+)^{P-1}. \end{aligned} \quad (3.40)$$

Afin d'alléger les calculs, nous utiliserons dans la suite les constantes C_1 et C_2 définies dans (3.39) et (3.40). Reprenons à présent les conditions de transmission (3.35) et (3.36) afin de trouver une relation entre $A^{(\ell)}$ (ou $B^{(\ell)}$) et $A^{(\ell-2)}$ (ou $B^{(\ell-2)}$).

$$\begin{aligned} \left(\left[\frac{2\nu^R}{\Delta x^R} + b + \lambda^R \right] C_1 - \frac{2\nu^R}{\Delta x^R} \right) (r^-)^{P+1} B^{(\ell)} &= \\ \left(\left[-\frac{2\nu^L}{\Delta x^L} + b + \lambda^R \right] C_2 + \frac{2\nu^L}{\Delta x^L} r^+ \right) (r^+)^{P-1} A^{(\ell-1)}, \\ \left(\left[\frac{2\nu^L}{\Delta x^L} - b + \lambda^L \right] C_2 - \frac{2\nu^L}{\Delta x^L} r^+ \right) (r^+)^{P-1} A^{(\ell)} &= \\ \left(\left[-\frac{2\nu^R}{\Delta x^R} - b + \lambda^L \right] C_1 + \frac{2\nu^R}{\Delta x^R} \right) (r^-)^{P+1} B^{(\ell-1)}, \end{aligned}$$

Il vient donc

$$\begin{aligned} \frac{|A^{(\ell)}|}{|A^{(\ell-2)}|} &= \frac{|B^{(\ell)}|}{|B^{(\ell-2)}|} = \\ \frac{\left| \left[-\frac{2\nu^L}{\Delta x^L} + b + \lambda^R \right] C_2 + \frac{2\nu^L}{\Delta x^L} r^+ \right|}{\left| \left[\frac{2\nu^R}{\Delta x^R} + b + \lambda^R \right] C_1 - \frac{2\nu^R}{\Delta x^R} \right|} &\cdot \frac{\left| \left[-\frac{2\nu^R}{\Delta x^R} - b + \lambda^L \right] C_1 + \frac{2\nu^R}{\Delta x^R} \right|}{\left| \left[\frac{2\nu^L}{\Delta x^L} - b + \lambda^L \right] C_2 - \frac{2\nu^L}{\Delta x^L} r^+ \right|}. \end{aligned} \quad (3.41)$$

Idealement, pour le cas décentré 0, les symboles d'opérateur λ^L et λ^R doivent être

tels que

$$\begin{cases} \left[-\frac{2\nu^L}{\Delta x^L} + b + \lambda^R \right] C_2 + \frac{2\nu^L}{\Delta x^L} r^+ = 0 \\ \left[-\frac{2\nu^R}{\Delta x^R} - b + \lambda^L \right] C_1 + \frac{2\nu^R}{\Delta x^R} = 0 \end{cases}$$

$$\iff \begin{cases} \lambda^{R\text{opt}} = -\frac{2\nu^L}{\Delta x^L} \cdot \frac{r^+}{C_2} - b + \frac{2\nu^L}{\Delta x^L} \\ \lambda^{L\text{opt}} = -\frac{2\nu^R}{\Delta x^R} \cdot \frac{1}{C_1} + b + \frac{2\nu^R}{\Delta x^R}. \end{cases} \quad (3.42)$$

Ces opérateurs étant non locaux, on cherche à les approcher par des opérateurs différentiels, c'est-à-dire de la forme $\Lambda = \alpha + \beta\partial_t$, de symboles $\lambda = \alpha + \frac{\beta}{\Delta t}(1 - e^{-i\theta\Delta t})$. En prenant les notations

$$F^R = \frac{2\nu^R}{\Delta x^R} + \alpha^R + b + \frac{\beta^R}{\Delta t}(1 - e^{-i\theta\Delta t}) \quad G^R = -\frac{2\nu^R}{\Delta x^R} + \alpha^L - b + \frac{\beta^L}{\Delta t}(1 - e^{-i\theta\Delta t})$$

$$F^L = \frac{2\nu^L}{\Delta x^L} + \alpha^L - b + \frac{\beta^L}{\Delta t}(1 - e^{-i\theta\Delta t}) \quad G^L = -\frac{2\nu^L}{\Delta x^L} + \alpha^R + b + \frac{\beta^R}{\Delta t}(1 - e^{-i\theta\Delta t}),$$

nous obtenons une expression plus claire du taux de convergence

$$\frac{A^{(\ell)}}{A^{(\ell-2)}} = \frac{B^{(\ell)}}{B^{(\ell-2)}} = \frac{G^L C_2 + \frac{2\nu^L}{\Delta x^L} r^+}{F^R C_1 - \frac{2\nu^R}{\Delta x^R}} \cdot \frac{G^R C_1 + \frac{2\nu^R}{\Delta x^R}}{F^L C_2 - \frac{2\nu^L}{\Delta x^L} r^+}.$$

Pour déterminer les symboles d'opérateurs approchés $\lambda^{L\text{app}}$ et $\lambda^{R\text{app}}$ à partir du système (3.42), nous approchons r^+/C_2 par $p^L + \frac{q^L}{(\Delta t)}(1 - e^{-i\theta\Delta t})$ et $1/C_1$ par $p^R + \frac{q^R}{(\Delta t)}(1 - e^{-i\theta\Delta t})$, où nous rappelons que C_1 et C_2 sont définies dans (3.39) et (3.40). Ainsi

$$\begin{aligned} \lambda^{R\text{app}} &= \frac{2\nu^L}{\Delta x^L}(1 - p^L) - b - \frac{2\nu^L}{\Delta x^L} \cdot \frac{q^L}{(\Delta t)}(1 - e^{-i\theta\Delta t}) \\ &:= \alpha^R + \frac{\beta^R}{(\Delta t)}(1 - e^{-i\theta\Delta t}) \end{aligned} \quad (3.43)$$

$$\begin{aligned} \lambda^{L\text{app}} &= \frac{2\nu^R}{\Delta x^R}(1 - p^R) + b - \frac{2\nu^R}{\Delta x^R} \cdot \frac{q^R}{(\Delta t)}(1 - e^{-i\theta\Delta t}) \\ &:= \alpha^L + \frac{\beta^L}{(\Delta t)}(1 - e^{-i\theta\Delta t}) \end{aligned}$$

et un parallèle avec le cas continu peut être établi.

2^{eme} cas : schéma décentré 1

Nous procédons ici de la même manière que précédemment. Les deux équations de transmission (3.37) et (3.38) sont identiques au cas précédent. Quant aux deux

équations provenant du schéma sur les mailles à gauche et à droite de l'interface, elles sont réécrites à partir de (3.31), (3.32) et (3.34) :

$$-\frac{2\nu^R}{\Delta x^R} \hat{E}_{P+\frac{1}{2}}^{R(\ell)} + \left[\omega^R \frac{\Delta x^R}{\Delta t} (1 - e^{-i\theta\Delta t}) + b + \frac{3\nu^R}{\Delta x^R} + \eta\Delta x^R \right] \hat{E}_{P+1}^{R(\ell)} - \frac{\nu^R}{\Delta x^R} \hat{E}_{P+2}^{R(\ell)} = b\hat{E}_P^{L(\ell-1)} \quad (3.44)$$

$$-\frac{2\nu^L}{\Delta x^L} \hat{E}_{P+\frac{1}{2}}^{L(\ell)} + \left[\omega^L \frac{\Delta x^L}{\Delta t} (1 - e^{-i\theta\Delta t}) + b + \frac{3\nu^L}{\Delta x^L} + \eta\Delta x^L \right] \hat{E}_P^{L(\ell)} - \left[b + \frac{\nu^L}{\Delta x^L} \right] \hat{E}_{P-1}^{L(\ell)} = 0. \quad (3.45)$$

En écrivant

$$\hat{E}_{P+1}^{R(\ell)} = B(\theta) (r^-)^{P+1} \quad \text{et} \quad \hat{E}_{P+2}^{R(\ell)} = B(\theta) (r^-)^{P+2} = r^- \hat{E}_{P+1}^{R(\ell)},$$

ainsi que

$$\hat{E}_P^{L(\ell)} = A(\theta) (r^+)^P \quad \text{et} \quad \hat{E}_{P-1}^{L(\ell)} = A(\theta) (r^+)^{P-1} = \hat{E}_P^{L(\ell)} / r^+,$$

nous obtenons l'expression de $\hat{E}_{P+\frac{1}{2}}^{R(\ell)}$ et $\hat{E}_{P+\frac{1}{2}}^{L(\ell)}$ à partir des équations (3.44) et (3.45) :

$$\hat{E}_{P+\frac{1}{2}}^{R(\ell)} = \frac{\Delta x^R}{2\nu^R} \left[\left(\omega^R \frac{\Delta x^R}{\Delta t} (1 - e^{-i\theta\Delta t}) + b + \frac{3\nu^R}{\Delta x^R} + \eta\Delta x^R \right) - \frac{\nu^R}{\Delta x^R} r^- \right] B^{(\ell)} (r^-)^{P+1} - \frac{\Delta x^R}{2\nu^R} b (r^+)^P A^{(\ell-1)} \quad (3.46)$$

$$:= C_3 B^{(\ell)}(\theta) (r^-)^{P+1} - \frac{\Delta x^R}{2\nu^R} A^{(\ell-1)}(\theta) b (r^+)^P,$$

$$\hat{E}_{P+\frac{1}{2}}^{L(\ell)} = C_2 A^{(\ell)}(\theta) (r^+)^{P-1}. \quad (3.47)$$

Reprenant les conditions de transmission (3.37) et (3.38), et utilisant la constante C_3 définie dans (3.46) nous pouvons écrire

$$\left(\left[\frac{2\nu^R}{\Delta x^R} + b + \lambda^R \right] C_3 - \frac{2\nu^+}{\Delta x^+} \right) (r^-)^{P+1} B^{(\ell)} = \left(\left[\frac{2\nu^R}{\Delta x^R} + b + \lambda^R \right] \frac{\Delta x^R}{2\nu^R} b r^+ + \left[-\frac{2\nu^L}{\Delta x^L} + b + \alpha^R \right] C_2 + \frac{2\nu^L}{\Delta x^L} r^+ \right) (r^+)^{P-1} A^{(\ell-1)} \quad (3.48)$$

et

$$\left(\left[\frac{2\nu^L}{\Delta x^L} - b + \lambda^L \right] C_2 - \frac{2\nu^L}{\Delta x^L} r^+ \right) (r^+)^{P-1} A^{(\ell)} = \left(\left[-\frac{2\nu^R}{\Delta x^R} - b + \lambda^L \right] C_3 + \frac{2\nu^R}{\Delta x^R} \right) (r^-)^{P+1} B^{(\ell-1)} - \left[-\frac{2\nu^R}{\Delta x^R} - b + \lambda^L \right] \frac{\Delta x^R}{2\nu^R} b (r^+)^P A^{(\ell-2)}. \quad (3.49)$$

Nous pouvons donc écrire formellement

$$\begin{cases} B^{(\ell)} = s_1 A^{(\ell-1)} \\ A^{(\ell)} = s_2 B^{(\ell-1)} + s_3 A^{(\ell-2)} \end{cases}$$

où s_1 , s_2 et s_3 sont définis d'après les expressions (3.48) et (3.49). On obtient facilement une relation entre $A^{(\ell)}$ et $A^{(\ell-2)}$:

$$A^{(\ell)} = s_2 B^{(\ell-1)} + s_3 A^{(\ell-2)} = (s_2 s_1 + s_3) A^{(\ell-2)}. \quad (3.50)$$

De même, nous pouvons écrire la deuxième équation

$$A^{(\ell)} = s_2 B^{(\ell-1)} + s_3 A^{(\ell-2)} = \left(s_2 + \frac{s_3}{s_1} \right) B^{(\ell-1)},$$

ce qui permet d'obtenir à partir de la première équation

$$B^{(\ell)} = s_1 A^{(\ell-1)} = s_1 \left(s_2 + \frac{s_3}{s_1} \right) B^{(\ell-2)} = (s_1 s_2 + s_3) B^{(\ell-2)}.$$

Le taux de convergence défini par le rapport entre $A^{(\ell)}$ et $A^{(\ell-2)}$ (le même qu'entre $B^{(\ell)}$ et $B^{(\ell-2)}$) est donné alors par $(s_2 s_1 + s_3)$. En prenant $s_2 = 0$ et $s_3 = 0$, le taux de convergence s'annule : les symboles d'opérateurs optimaux peuvent alors être définis par

$$\begin{cases} \lambda^{R opt} = -b + \frac{\frac{2\nu^L}{\Delta x^L} C_2 - \left(b + \frac{2\nu^L}{\Delta x^L} \right) r^+}{\frac{\Delta x^R}{2\nu^R} b r^+ + C_2} \\ \lambda^{L opt} = \frac{2\nu^R}{\Delta x^R} + b, \end{cases} \quad (3.51)$$

où nous constatons que le paramètre $\lambda^{L opt}$ est défini de manière exacte. En approchant $\lambda^{R opt} + b$ (cf 3.51) par $p^L + \frac{q^L}{(\Delta t)}(1 - e^{-i\theta\Delta t})$, les symboles d'opérateurs sont alors cherchés sous la forme

$$\begin{cases} \lambda^{L opt} \\ \lambda^{R app} = -b + p^L + \frac{q^L}{(\Delta t)}(1 - e^{-i\theta\Delta t}). \end{cases} \quad (3.52)$$

En reprenant les notations établies dans le paragraphe précédent pour F^R , F^L , G^R et G^L , (3.48) et (3.49) peuvent être réécrites comme

$$\begin{aligned} \left(F^R C_3 - \frac{2\nu^R}{\Delta x^R} \right) (r^-)^{P+1} B^{(\ell)} &= \\ \left[F^R \frac{\Delta x^R}{2\nu^R} b r^+ + \left(G^L C_2 + \frac{2\nu^L}{\Delta x^L} r^+ \right) \right] (r^+)^{P-1} A^{(\ell-1)} \\ \left(F^L C_2 - \frac{2\nu^L}{\Delta x^L} r^+ \right) (r^+)^{P-1} A^{(\ell)} &= \\ \left(G^R C_3 + \frac{2\nu^R}{\Delta x^R} \right) (r^-)^{P+1} B^{(\ell-1)} - G^R \frac{\Delta x^R}{2\nu^R} b (r^+)^P A^{(\ell-2)}. \end{aligned}$$

Cela conduit à la formulation explicite du taux de convergence suivante

$$\begin{aligned}
\frac{A^{(\ell)}}{A^{(\ell-2)}} &= \frac{B^{(\ell)}}{B^{(\ell-2)}} = - \frac{G^R \frac{\Delta x^R}{2\nu^R} b (r^+)^P}{\left(F^L C_2 - \frac{2\nu^L}{\Delta x^L} r^+\right) (r^+)^{P-1}} \\
&+ \frac{\left[F^R \frac{\Delta x^R}{2\nu^R} b r^+ + \left(G^L C_2 + \frac{2\nu^L}{\Delta x^L} r^+\right)\right] (r^+)^{P-1}}{\left(F^R C_3 - \frac{2\nu^R}{\Delta x^R}\right) (r^-)^{P+1}} \cdot \frac{\left(G^R C_3 + \frac{2\nu^R}{\Delta x^R}\right) (r^-)^{P+1}}{\left(F^L C_2 - \frac{2\nu^L}{\Delta x^L} r^+\right) (r^+)^{P-1}} \\
&= \frac{\left(F^R + G^R\right) b r^+ + \left(G^L C_2 + \frac{2\nu^L}{\Delta x^L} r^+\right) \left(G^R C_3 + \frac{2\nu^R}{\Delta x^R}\right)}{\left(F^R C_3 - \frac{2\nu^R}{\Delta x^R}\right) \cdot \left(F^L C_2 - \frac{2\nu^L}{\Delta x^L} r^+\right)}.
\end{aligned} \tag{3.53}$$

Notons que les paramètres d'optimisation α^L , α^R , β^L et β^R interviennent uniquement dans les constantes F^R , F^L , G^R et G^L .

3.4 Résultats numériques

Bien que les schémas monodomaine et multidomaine aient été étudiés dans les chapitres 1 et 2 pour le schéma Galerkin Discontinu en temps d'ordre 0 dans un souci de clarté, nous avons réalisé les différents cas-tests suivants aussi bien à l'ordre 0 (P_0) qu'à l'ordre 1 (P_1). Dans un premier temps, nous comparons les différents algorithmes discrets à paramètres de Robin fixés, provenant de l'optimisation du taux de convergence continu pour les différentes conditions de transmission proposées dans le paragraphe 3.2. Nous comparons ensuite la convergence de l'algorithme de Schwarz en considérant d'une part l'optimisation du taux de convergence continu défini dans le paragraphe 3.2 d'autre part celle du taux de convergence discret donné dans le paragraphe 3.3 pour les schémas décentrés 0 et 1.

Nous considérons l'équation instationnaire de convection-diffusion-réaction (3) sur le domaine $\Omega = (0, 4)$:

$$\omega(x)\partial_t c - \partial_x(\nu(x)\partial c - bc) + \eta c = f \quad \text{dans } \Omega \times (0, T),$$

Nous nous plaçons dans le cadre de deux sous-domaines $\Omega_1 = (0, 2)$ et $\Omega_2 = (2, 4)$, avec un pas d'espace $\Delta x = 0.01$ et un pas de temps $\Delta t = 0.01$ constants. Le temps final est $T = 2$. Les conditions aux bords sont de type Dirichlet. Dans cette partie numérique, l'algorithme de Schwarz est considéré dans sa version Gauss-Seidel afin d'obtenir deux fois moins d'itérations. Puisque nous souhaitons étudier numériquement la convergence de l'algorithme de Schwarz et que toutes les équations intervenant dans l'algorithme sont linéaires, on considère l'algorithme sur l'erreur (entre la solution multidomaine et la solution monodomaine), c'est-à-dire que nous

prenons $f = 0$ et une solution initiale nulle. D'autre part, l'itéré initial de l'algorithme de Schwarz est un random sur l'interface.

3.4.1 Comparaison des différents algorithmes discrets

A chaque schéma multidomaine défini dans le chapitre 2 correspond un algorithme discret. Nous cherchons ici à observer l'effet de la discrétisation des conditions de transmission sur la convergence de l'algorithme. Pour les différents schémas multidomaine proposés, à savoir le schéma centré, les schémas décentrés 0 et 1 et le schéma décentré hybride, et pour différents paramètres physiques constants ou non, nous donnons la vitesse de convergence de l'algorithme pour les diverses conditions de transmission introduites dans le tableau 3.1. Pour traduire la vitesse de convergence, nous déterminons le nombre d'itérations nécessaires à ce que l'erreur, calculée dans la norme $L^2(0, T; L^2(\Omega))$, soit inférieure à 10^{-15} . Les résultats sont rassemblés dans les tableaux qui suivent. Les deux figures (3.2(b)) et (3.2(a)) visualisent l'évolution de l'erreur au cours des itérations dans deux cas présentés dans les tableaux.

	Centré	Décentré 0	Décentré 1	Décentré Hybride
Robin1s	10	11	18	7
RobinSnu	10	11	18	7
Robin2s	10	11	18	7
Ordre1	8	8	19	5
Ordre1Swnu	8	8	19	5

Tableau 3.3 – Coefficients constants en P_0 : $\omega = 1$, $\nu = 0.01$, $b = 5$, $\eta = 0$.

	Centré	Décentré 0	Décentré 1	Décentré Hybride
Robin1s	16	11	18	10
Robin2s	16	11	18	10
Ordre1	12	11	19	7
Ordre1Swnu	11	8	18	7

Tableau 3.4 – Coefficients constants en P_1 : $\omega = 1$, $\nu = 0.01$, $b = 5$, $\eta = 0$.

Premièrement, on remarque que la vitesse de convergence de l'algorithme de Schwarz est comparable dans le cas du schéma centré, décentré 0 et décentré hybride, mais qu'elle est nettement plus lente dans le cas du schéma décentré 1. Cette mauvaise convergence pour le schéma décentré 1 se vérifie dans les cas présentés où la vitesse de convection b est grande ($b = 1$ ou $b = 5$). Dans ces cas (tableaux 3.3, 3.4, 3.5 et 3.7), la vitesse de convergence pour le schéma décentré 1 n'est améliorée par aucune condition, même avec un *scaling* dans le cas de paramètres discontinus et la condition de Robin 2-sided donne même parfois de moins bons résultats que la condition Robin 1-sided (tableau 3.5). Seul le cas où $b = 0.01$ montre un nombre

	Centré	Décentré 0	Décentré 1	Décentré Hybride
Robin1s	26	26	24	26
RobinSnu	11	12	32	11
Robin2s	10	10	31	10
Ordre1	24	23	29	24
Ordre1Swnu	13	14	31	13

Tableau 3.5 – Coefficients non constants en P_0 : $\omega_1 = 0.06$, $\omega_2 = 1$, $\nu_1 = 0.05$, $\nu_2 = 1$, $b = 1$, $\eta = 0$.

	Centré	Décentré 0	Décentré 1	Décentré Hybride
Robin1s	50	50	49	50
RobinSnu	13	13	13	13
Robin2s	12	12	12	12
Ordre1	32	32	32	32
Ordre1Swnu	10	10	10	10

Tableau 3.6 – Coefficients non constants en P_0 : $\omega_1 = 0.06$, $\omega_2 = 1$, $\nu_1 = 0.05$, $\nu_2 = 1$, $b = 0.01$, $\eta = 0$.

	Centré	Décentré 0	Décentré 1	Décentré Hybride
Robin1s	28	28	23	28
RobinSnu	12	13	34	12
Robin2s	10	10	31	10
Ordre1	28	26	28	28
Ordre1Swnu	13	14	32	13

Tableau 3.7 – Coefficients non constants en P_1 : $\omega_1 = 0.06$, $\omega_2 = 1$, $\nu_1 = 0.05$, $\nu_2 = 1$, $b = 1$, $\eta = 0$.

d'itérations comparable (voir tableau 3.6) aux trois autres schémas. Cela est naturel puisque ce qui distingue le schéma décentré 1 du schéma décentré 0 tient au traitement du décentrage de la convection à l'interface. Ainsi, plus le terme de convection est faible, moins la différence entre les deux schémas doit être importante. Sur les quelques cas présentés, les résultats obtenus montrent que le schéma décentré 1 n'est pas une bonne approche pour discrétiser les conditions à l'interface.

D'autre part, on peut confirmer que le *scaling* apporte un réel gain lorsque les paramètres ν et ω sont discontinus (voir par exemple les tableaux 3.5 et 3.6). La condition d'ordre 0 avec un *scaling* RobinSnu, qui n'a qu'un seul paramètre d'optimisation, donne presque d'aussi bons résultats que la condition de Robin 2-sided qui en considère deux.

Les paramètres optimisés sont calculés à partir du taux de convergence continu

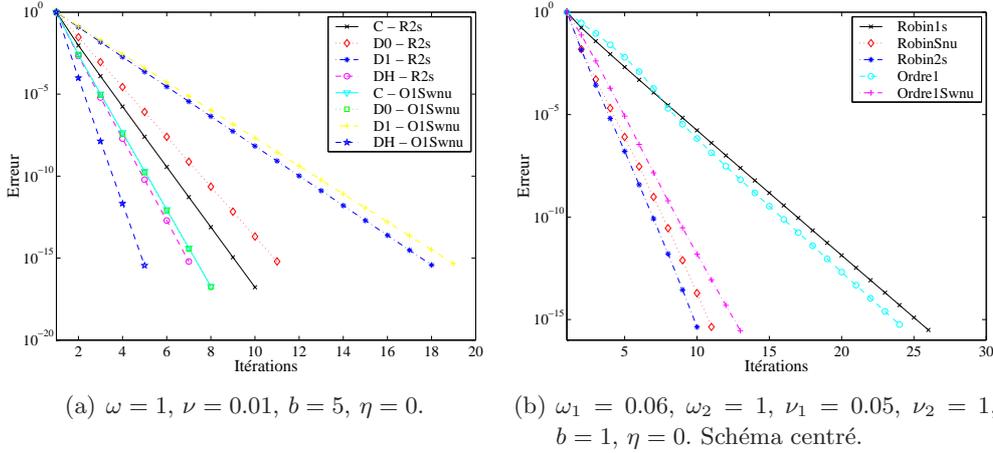


FIGURE 3.2 – Evolution de l’erreur entre la solution multidomaine et la solution monodomaine en norme $L^2(0, T; L^2(\Omega))$ à chaque itération de l’algorithme de Schwarz : (b) pour différentes conditions de transmission avec le schéma centré, (a) les différents schémas centré (C), décentré 0 (D0), décentré 1 (D1) et décentré hybride (DH) pour la condition de Robin 2-sided (notée R2s) et la condition Ordre1Swnu (O1Swnu).

donné par (3.11). Dans le cas du schéma décentré 0 et du schéma décentré 1, les adaptations proposées respectivement dans les paragraphes 3.2.1 et 3.2.2 sont adoptées.

Pour valider les paramètres optimisés obtenus par une optimisation numérique, via la fonction *fminsearch* de *Matlab*, nous considérons une gamme de valeurs de paramètres de Robin centrée autour de la valeur du paramètre optimisé et nous calculons l’erreur associée à chacun de ces paramètres. Dans le cas de la condition de Robin 2-sided (voir tableau 3.1), nous avons représenté sur les figures 3.3 et 3.4 les lignes de niveaux de l’erreur obtenue après 20 itérations de l’algorithme de Schwarz, pour différents paramètres physiques ω , ν et b continus ou non, et dans le cas des schémas centré, décentré 0 et décentré 1, d’ordre 0 en temps, afin d’inclure les trois différentes optimisations (celle – standard – à partir du taux de convergence continu, et les deux adaptations proposées pour le schéma décentré 0 d’une part et pour le schéma décentré 1 d’autre part). Sur chaque figure la valeur numérique du paramètre optimisé $p^* = (p^{L*}, p^{R*})$ (voir le tableau 3.1) est indiquée par une étoile rouge. Nous pouvons évaluer la pertinence de ce paramètre optimisé en le comparant à l’optimum numérique, c’est-à-dire celui qui réalise un nombre minimum d’itérations de l’algorithme discret.

Sur la sous-figure 3.3(c) correspondant au schéma décentré 1, nous remarquons que le paramètre optimisé se situe dans une enveloppe non-convexe, contrairement aux autres cas (sous-figures 3.3(a) et 3.3(b)). En revanche, dans le cas de coefficients non constants, la sous-figure correspondant au cas du schéma décentré (3.4(c)) ne s’oppose pas aux deux autres (3.4(a) et 3.4(b)), montrant une forme analogue d’enveloppe convexe, très étendue dans ce cas. Dans tous les cas visualisés, le paramètre numérique optimisé avec le taux de convergence continu (adapté dans les cas des schémas décentré 0 et 1) est pertinent car il est proche de l’optimum numérique.

Dans la suite, nous nous proposons de comparer l’optimisation continue et l’optimisation discrète pour les deux schémas décentré 0 et décentré 1, afin de voir si la convergence de l’algorithme discret correspondant peut être améliorée.

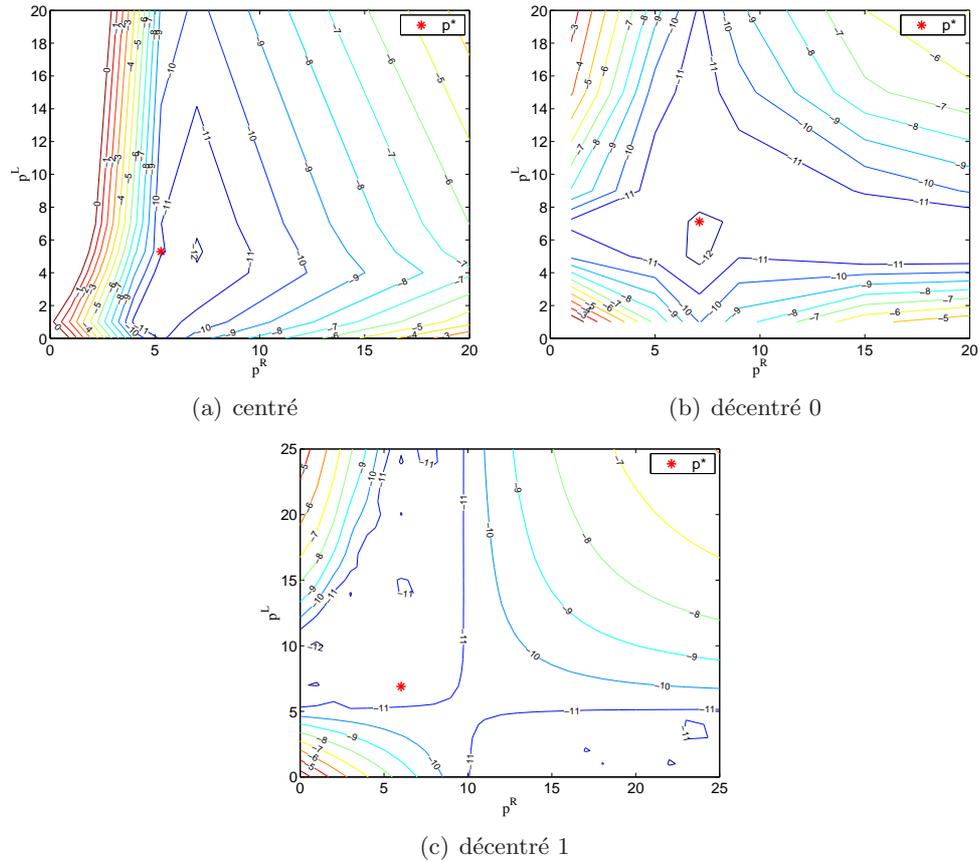


FIGURE 3.3 – Erreur entre la solution multidomaine et la solution monodomaine après 20 itérations de l’algorithme de Schwarz, pour des couples de paramètres d’optimisation (p^L, p^R) pour $\omega = 1$, $\nu = 0.01$, $b = 5$ et $\eta = 0$. L’étoile rouge correspond à la valeur numérique du paramètre optimisé $p^* = (p^{L*}, p^{R*})$ obtenu avec l’optimisation du taux de convergence continu.

3.4.2 Comparaison de l’optimisation continue et discrète

Dans le paragraphe 3.3, nous avons introduit le taux de convergence discret pour les schémas décentré 0 et décentré 1. Comme il est déterminé à partir de la discrétisation des conditions de transmission, nous pouvons nous attendre à une meilleure convergence. Nous montrons sur les figures 3.5 et 3.6 la comparaison de la vitesse de convergence de l’algorithme de Schwarz avec respectivement une condition de Robin 1-sided et une condition de Robin 2-sided lorsque le paramètre optimisé est déterminé à partir du taux de convergence continu ou discret. Le résultat confirme donc l’intuition de départ. Dans le cas du schéma décentré 0, le taux de convergence discret apporte une amélioration nette lorsque les conditions de Robin 1-sided sont utilisées, mais aucune amélioration pour la condition de Robin 2-sided. Dans le cas du schéma décentré 1, le taux discret semble nécessaire quelque soit la condition de transmission considérée.

En résumé, nous avons observé que le taux de convergence discret pour les schémas décentré 0 et décentré 1 était bien adapté quelque soit la condition de transmission considérée. Optimiser le taux de convergence continu peut donner des résultats analogues à ceux de l’optimisation du taux de convergence discret pour le schéma décentré 0 à condition de prendre des conditions de transmission avec

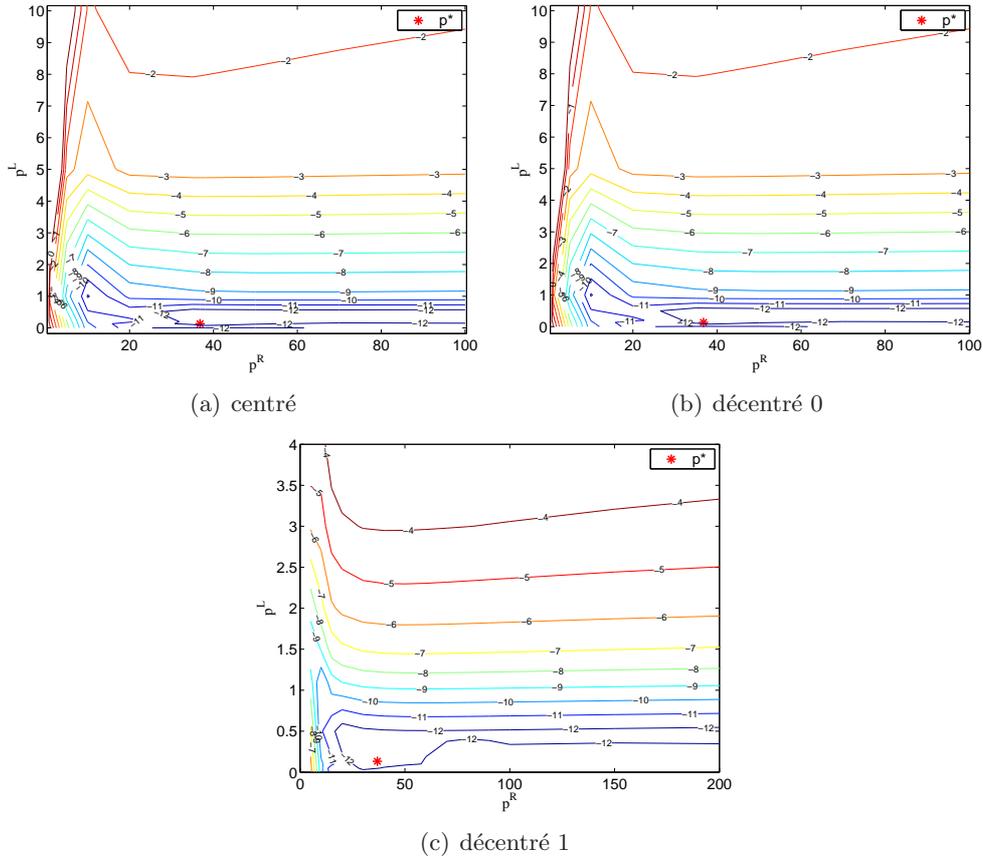


FIGURE 3.4 – Erreur entre la solution multidomaine et la solution monodomaine après 20 itérations de l’algorithme de Schwarz, pour des couples de paramètres d’optimisation (p^L, p^R) , dans le cas de données physiques non constantes $\omega_1 = 0.06$, $\omega_2 = 1$, $\nu_1 = 0.05$, $\nu_2 = 1$, $b = 0.01$, $\eta = 0$. L’étoile rouge correspond à la valeur numérique du paramètre optimisé $p^* = (p^{L*}, p^{R*})$ obtenu avec l’optimisation du taux de convergence continu.

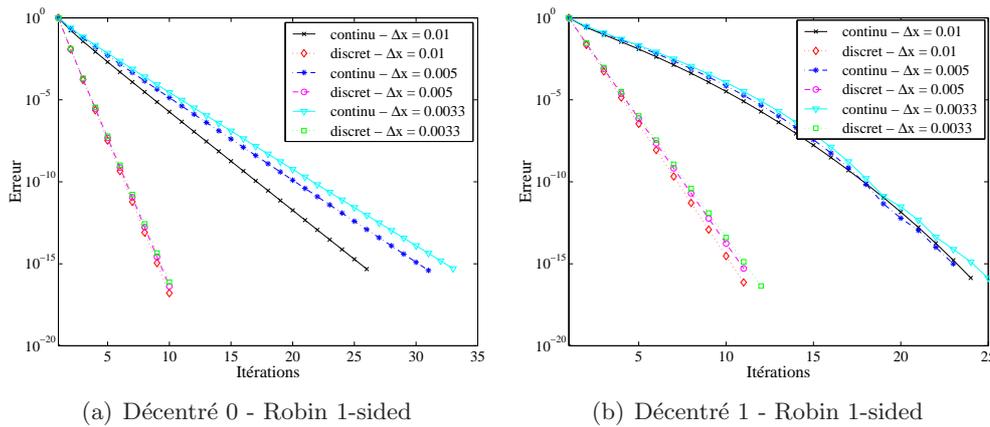


FIGURE 3.5 – $\omega_1 = 0.06$, $\omega_2 = 1$, $\nu_1 = 0.05$, $\nu_2 = 1$, $b = 1$, $\eta = 0$. Comparaison de l’erreur entre la solution multidomaine et la solution monodomaine en norme $L^2(0, T; L^2(\Omega))$ au cours des itérations de l’algorithme de Schwarz, où la valeur numérique du paramètre optimisé de la condition de Robin 1-sided est calculée à partir du taux de convergence continu ou discret pour le schéma décentré 0 (gauche) et décentré 1 (droite), en considérant plusieurs pas d’espace Δx .

un *scaling*. Comme de telles conditions ne compliquent pas davantage le problème d'optimisation continu, et vue la complexité de la détermination du taux de convergence discret, la prise en compte de telles conditions avec une optimisation du taux de convergence continu semble un bon choix au vu des cas étudiés. En revanche, dans le cas du schéma décentré 1, l'optimisation du taux de convergence discret est nécessaire, ce qui est un grand inconvénient dans la pratique.

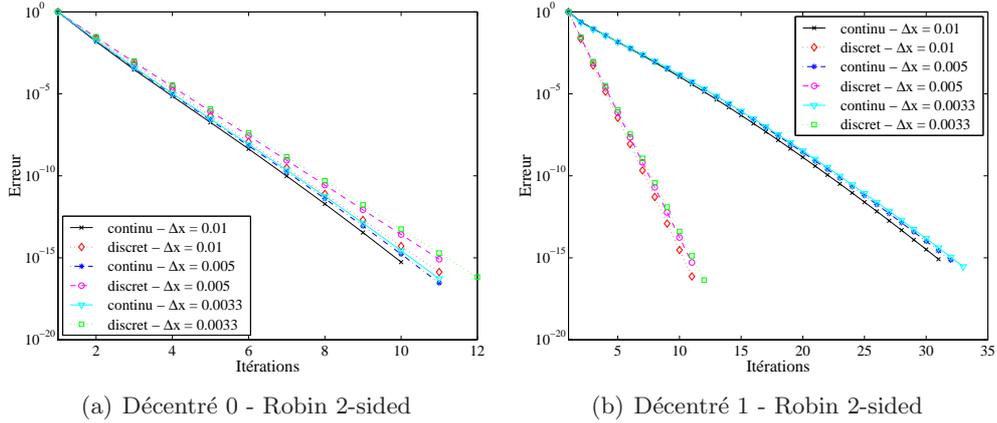


FIGURE 3.6 – $\omega_1 = 0.06$, $\omega_2 = 1$, $\nu_1 = 0.05$, $\nu_2 = 1$, $b = 1$, $\eta = 0$. Comparaison de l'erreur entre la solution multidomaine et la solution monodomaine en norme $L^2(0, T; L^2(\Omega))$ au cours des itérations de l'algorithme de Schwarz, où la valeur numérique du paramètre optimisé de la condition de Robin 2-sided est calculée à partir du taux de convergence continu ou discret pour le schéma décentré 0 (gauche) et décentré 1 (droite), en considérant plusieurs pas d'espace Δx .

Nous avons constaté en définissant la formulation multidomaine du schéma décentré classique et du schéma décentré hybride que seul ce dernier s'adaptait naturellement à une écriture locale au sous-domaine. À travers les résultats numériques obtenus dans ce paragraphe, nous constatons que la convergence de l'algorithme avec le schéma décentré hybride est au moins aussi bonne voire meilleure que celle avec les schémas centré et décentré 0. Pour ces raisons, nous avons choisi de retenir le schéma décentré hybride pour la discrétisation du flux convectif en deux dimensions d'espace, en l'adaptant au schéma DDFV.

Deuxième partie

Analyse 2D

Considérons à présent l'équation de convection-diffusion en régime instationnaire et en milieu poreux, en deux dimensions, définie par

$$\begin{aligned}\mathcal{L}c = \omega \partial_t c - \nabla \cdot (\mathbf{K} \nabla c - \mathbf{b}c) &= f \quad \text{dans } \Omega \times (0, T), \\ c(\cdot, 0) &= c_0 \quad \text{dans } \Omega,\end{aligned}\tag{3.54}$$

et des conditions limites appropriées de type Dirichlet ou Neumann aux bords de Ω , un domaine borné de \mathbb{R}^2 .

Dans (3.54), c représente une concentration (par exemple, la concentration en radionucléides dans le contexte du stockage des déchets radioactifs), f le terme source, \mathbf{K} la matrice de diffusion symétrique et définie positive, pouvant être anisotrope, ω le coefficient de porosité et \mathbf{b} la vitesse de convection de divergence nulle donnée par l'équation de Darcy $\mathbf{b} = -\boldsymbol{\kappa} \nabla h$ où h est la charge hydraulique et $\boldsymbol{\kappa}$ le tenseur éventuellement anisotrope de perméabilité. L'équation (3.54) modélisant l'écoulement et le transport des radionucléides dans un sous-sol composé de couches géologiques dont les propriétés sont très hétérogènes, les paramètres physiques ω , \mathbf{K} et $\boldsymbol{\kappa}$ sont supposés discontinus. Quant à la vitesse de convection, seule sa composante normale est supposée continue.

Nous proposons d'approcher l'équation (3.54) par le schéma volumes finis de type DDFV développé pour le problème de diffusion [29] et étendu ici à l'advection. La présentation de ce nouveau schéma, dans sa partie connue et dans son extension, fait l'objet du premier chapitre où l'on montre ensuite que le problème discret approchant (3.54), appelé problème monodomaine, est bien posé.

Dans une approche de décomposition de domaines sans recouvrement, le problème monodomaine précédent est décomposé en sous problèmes équivalents définis sur des sous-domaines sans recouvrement et formant une partition de Ω . Ceux-ci sont reliés par les conditions de transmission assurant la continuité de la solution et celle du flux à l'interface entre les sous-domaines. Dans le chapitre 2, on adapte aux sous problèmes locaux le schéma DDFV défini dans le chapitre 1, et l'on donne la discrétisation des conditions de transmission utilisées. On démontre aussi le caractère bien posé de ce problème discret multidomaine.

Ensuite, nous présentons dans le chapitre 3 l'algorithme de type OSWR (*Optimized Schwarz Waveform Relaxation*) adapté au schéma DDFV du problème discret multidomaine. Nous montrons la convergence de cet algorithme de Schwarz vers la solution du problème discret monodomaine.

La vitesse de convergence des algorithmes OSWR est optimisée à travers un ou plusieurs paramètres intervenant dans les conditions de transmission. Nous rappelons dans le chapitre 4 le calcul du taux de convergence obtenu à partir de l'équation continue (3.54) et dans le cas particulier du problème de diffusion pure, nous établissons le taux de convergence à partir du schéma discret DDFV.

Nous achevons cette partie (chapitre 5) par différents cas-tests numériques en terminant par le cas PAMINA présenté dans l'introduction.

Chapitre 4

Le problème discret monodomaine pour l'équation de convection-diffusion

Sommaire

4.1	Le schéma DDFV - Notations	89
4.2	Le schéma étendu à l'équation de convection-diffusion .	94
4.2.1	Le schéma intérieur	94
4.2.2	Le schéma au bord	96
4.3	Existence et unicité pour le problème discret monodomaine	100
4.3.1	Rappel au niveau continu	101
4.3.2	Au niveau discret	101

Dans ce chapitre, nous considérons le schéma volumes finis de type DDFV (*Discrete Duality Finite Volume*) pour l'approximation de l'équation de convection-diffusion en régime instationnaire (3.54). Dans un premier temps, nous rappelons le schéma DDFV tel qu'il est construit pour l'approximation de l'équation de diffusion, en posant au fur et à mesure les notations utiles pour la suite.

4.1 Le schéma DDFV - Notations

Soit un maillage donné recouvrant Ω , appelé maillage primal, de bord $\partial\Omega$. Le principe des méthodes de volumes finis est d'intégrer l'équation sur des volumes de contrôle : soit sur les cellules du maillage initial, dit primal (approximation de la solution au centre des mailles), soit sur des cellules construites autour des noeuds du maillage primal dites cellules duales (approximation de la solution aux sommets), donnant lieu à deux grandes classes de méthodes : celles centrées sur les cellules (*cell-centered methods*) et celles centrées sur les sommets (*vertex-centered methods*).

Le schéma DDFV utilise des inconnues à la fois aux noeuds et aux centres du maillage primal, permettant la reconstruction du gradient dans ses deux directions, quelque soit le maillage utilisé. En effet, après intégration du laplacien

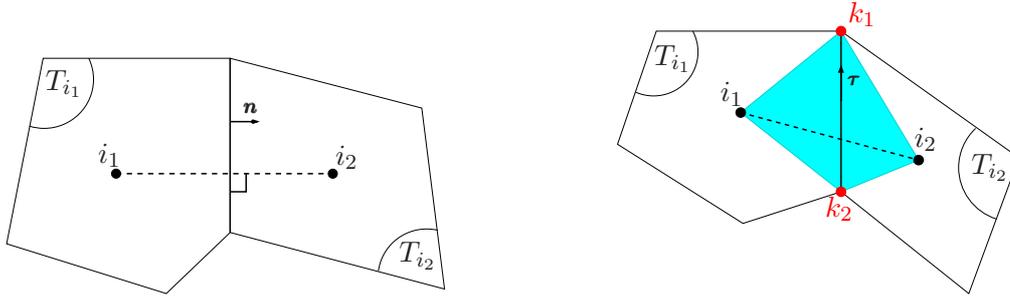


FIGURE 4.1 – Maillage primal. A gauche, cas particulier d'un maillage dit admissible : les deux points i_1 et i_2 suffisent pour définir le gradient normal. A droite, la cellule diamant en cyan dont les diagonales sont les deux directions à considérer pour la reconstruction du gradient, faisant intervenir les quatre points i_1, i_2, k_1 et k_2 .

Δc sur une cellule du maillage primal puis en appliquant la formule de Gauss, il reste à approcher le flux $\nabla c \cdot \mathbf{n}$ (où \mathbf{n} désigne la normale extérieure) sur les arêtes du maillage primal. Pour des maillages particuliers où les arêtes sont perpendiculaires au segment reliant les deux centres des cellules adjacentes à l'arête considérée (cas des maillages dit admissibles, comme ceux de type Voronoi), le gradient peut être exprimé simplement par une différence finie. En revanche, pour tous les autres maillages ne vérifiant pas cette condition, comme tous les maillages non conformes par exemple, le gradient doit être approché dans ses deux directions, faisant alors intervenir les inconnues aux centres et aux noeuds des mailles primales. Ainsi à chaque arête du maillage primal est associé un quadrilatère dont les deux diagonales sont d'une part l'arête elle-même et d'autre part le segment reliant les deux centres des cellules adjacentes à l'arête considérée (voir Figure 4.1). L'ensemble de ces quadrilatères (plats pour les arêtes de bord), appelés cellules diamants, forme une partition de Ω , dit maillage diamant.

Dans le schéma DDFV, les inconnues aux noeuds sont considérées comme des inconnues supplémentaires (et non approchées par une interpolation, comme dans [21]). C'est pourquoi, en vue d'obtenir autant d'équations que d'inconnues, l'équation est intégrée sur les mailles primales et duales.

Considérons à présent l'équation de diffusion dans le cadre général :

$$-\nabla \cdot (\mathbf{K} \nabla c) = f, \tag{4.1}$$

où \mathbf{K} est le tenseur de diffusion, pouvant être discontinu aux interfaces entre les mailles primales.

Soit \mathcal{T}_i le maillage primal formé de I cellules T_i de centre i . Les J arêtes primales du maillage sont notées $A_j, j \in [1, J]$, de normales sortantes \mathbf{n}_j (ou encore \mathbf{n}_{i_j} pour souligner qu'il s'agit d'une normale sortante par rapport à T_i). Parmi les J arêtes primales, on dénombre J^Γ arêtes primales situées sur le bord $\Gamma = \partial\Omega$. On suppose les J arêtes primales ordonnées de telle sorte que celles du bord sont les dernières, d'indices $j \in [J - J^\Gamma + 1, J]$. Par simplification, on notera souvent $j \in \Gamma$ pour désigner ces arêtes primales de bord. Pour traiter la possible discontinuité du tenseur de diffusion \mathbf{K} et dans la perspective de la décomposition de domaine (voir dans le chapitre 5), nous introduisons σ_j point milieu de l'arête A_j . Quant aux K sommets

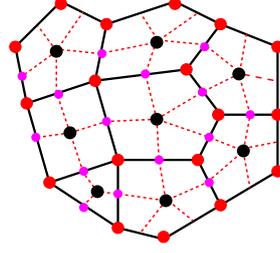


FIGURE 4.2 – Maillage primal \mathcal{T}_i en noir : les centres i sont les points noirs et les arêtes primales A_j sont les lignes continues en noir reliant deux points rouges. Maillage dual \mathcal{P}_k en pointillé rouge : les centres k sont les points rouges et les arêtes duales sont représentées par les lignes pointillées en rouge reliant deux points noirs en passant par les points magenta, σ_j , milieu des arêtes primales.

du maillage primal, ils sont notés $\{k, k \in [1, K]\}$. Chaque sommet k est aussi le centre d'une maille duale formée par les arêtes dont les extrémités sont le centre des mailles primales T_i entourant le point k et le point-milieu σ_j de l'arête A_j associée à T_i et issue du sommet k . Le maillage dual, noté \mathcal{P}_k , est l'ensemble des K cellules duales P_k éventuellement non convexes.

Dans la suite, nous utiliserons une notation locale à une arête quelconque A_j : seront notés $i_1(j)$ et $i_2(j)$ les centres des deux mailles primales $T_{i_1(j)}$ et $T_{i_2(j)}$ adjacentes de A_j (cas des arêtes intérieures) et $k_1(j)$ et $k_2(j)$ les deux extrémités de A_j et centres des cellules duales $P_{k_1(j)}$ et $P_{k_2(j)}$. Dans le cas d'une arête primale de bord, seul $i_1(j)$, associé à la maille primale de bord $T_{i_1(j)}$, est défini. Par abus d'écriture, afin de ne pas surcharger les notations, nous utiliserons (souvent) les notations $i_1, i_2, T_{i_1}, T_{i_2}, k_1, k_2, P_{k_1}$ et P_{k_2} sans référence à l'indice j .

Pour compléter les notations, nous nous plaçons dans ce cadre local. La normale extérieure à A_j , vue de $T_{i_1(j)}$ (resp. $T_{i_2(j)}$), est notée \mathbf{n}_{i_1j} (resp. \mathbf{n}_{i_2j}). A chaque arête A_j sont associées les deux arêtes duales $A'_{j,1} = [i_1\sigma_j]$ et $A'_{j,2} = [i_2\sigma_j]$, mis à part pour les arêtes de bord où seule l'arête duale $A'_{j,1} = [i_1\sigma_j]$ est définie. Ces deux arêtes duales sont communes aux deux cellules duales voisines P_{k_1} et P_{k_2} : vues de P_{k_1} (resp. P_{k_2}), les normales extérieures aux arêtes $A'_{j,1}$ et $A'_{j,2}$ sont notées respectivement $\mathbf{n}'_{k_1,j,1}$ et $\mathbf{n}'_{k_1,j,2}$ (resp. $\mathbf{n}'_{k_2,j,1}$ et $\mathbf{n}'_{k_2,j,2}$).

Nous introduisons α l'indice lié à la numérotation locale introduite ci-dessus : $\alpha \in \{1, 2\}$ si $j \in [1, J - J^F]$ et $\alpha = 1$ si $j \in [J - J^F + 1, J]$. Pour relier la notation locale (indices i_1 et i_2) et la notation globale (indice i), on définit $\alpha_{ij} = 1$ si $i = i_1(j)$ ou $\alpha_{ij} = 2$ si $i = i_2(j)$, soit $\alpha_{ij} = \alpha$ si $i = i_\alpha(j)$.

Au lieu des cellules diamants formées par les points $k_1(j), i_1(j), k_2(j)$ et $i_2(j)$, comme décrit plus haut dans le cas particulier du laplacien, deux demi-diamants $D_{j,1}$ et $D_{j,2}$ seront associés à l'arête A_j , représentant respectivement les triangles $k_1i_1k_2$ et $k_1i_2k_2$ sauf dans le cas d'une arête de bord où un seul demi-diamant $D_{j,1}$ est associé.

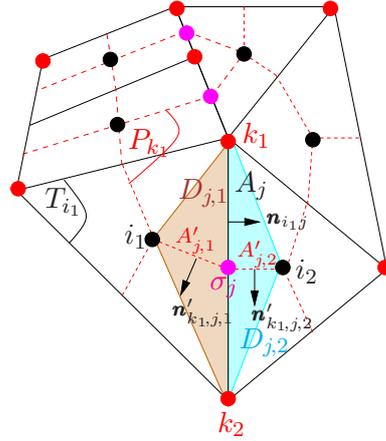


FIGURE 4.3 – Notations locales du schéma DDFV. Maillage primal (en noir), maillage dual (pointillé en rouge) et cellules demi-diamants (triangles colorés). A chaque arête primaire A_j est associée une cellule demi-diamant $D_{j,1}$ (resp. $D_{j,2}$), l'arête duale $A'_{j,1}$ (resp. $A'_{j,2}$) de normale $\mathbf{n}'_{k_1,j,1}$ (resp. $\mathbf{n}'_{k_1,j,2}$).

Nous avons donc défini les trois maillages primal, dual et diamant (ou demi-diamant). Introduisons maintenant une notation utile pour la suite : $|Y|$ désignera la mesure d'un élément géométrique Y , soit une aire dans le cas d'une cellule soit une longueur dans le cas d'une arête. Nous définissons dans la suite deux produits scalaires discret : l'un $(\cdot, \cdot)_{T,P}$ défini sur le maillage primal et dual, l'autre $(\cdot, \cdot)_{\mathcal{D}}$ défini sur le maillage des demi-diamants.

Définition 4.1. *Le produit scalaire discret $(\cdot, \cdot)_{T,P}$ est défini pour tout $(\Phi, \Psi) = ((\Phi_i, \Phi_k), (\Psi_i, \Psi_k)) \in (\mathbb{R}^I \times \mathbb{R}^K)^2$ par*

$$(\Phi, \Psi)_{T,P} := \frac{1}{2} \left(\sum_{i \in [1, I]} |T_i| \Phi_i \Psi_i + \sum_{k \in [1, K]} |P_k| \Phi_k \Psi_k \right). \quad (4.2)$$

Notons $\|\cdot\|_{T,P}$ la norme associée au produit scalaire $(\cdot, \cdot)_{T,P}$.

Définition 4.2. *Le produit scalaire discret $(\cdot, \cdot)_{\mathcal{D}}$ est défini pour tout $(\Phi, \Psi) = ((\Phi_{i_1j}, \Phi_{i_2j}), (\Psi_{i_1j}, \Psi_{i_2j})) \in (\mathbb{R}^J \times \mathbb{R}^{J-J^\Gamma})^2$ par*

$$(\Phi, \Psi)_{\mathcal{D}} := \sum_{j \in [1, J-J^\Gamma]} (|D_{j,1}| \Phi_{i_1j} \Psi_{i_1j} + |D_{j,2}| \Phi_{i_2j} \Psi_{i_2j}) + \sum_{j \in \Gamma} |D_{j,1}| \Phi_{i_1j} \Psi_{i_1j}. \quad (4.3)$$

Notons $|\cdot|_{\mathcal{D}}$ la norme associée au produit scalaire $(\cdot, \cdot)_{\mathcal{D}}$.

L'équation de diffusion continue (4.1) est approchée en utilisant les opérateurs de gradient discret et de divergence discrète définis ci-dessous. Contrairement à [29] qui définit les gradients discrets sur les cellules diamants entières (Figure 4.1), ceux-ci seront systématiquement définis sur les demi-diamants (Figure 4.3) afin de prendre en compte les discontinuités éventuelles de \mathbf{K} ainsi que les interfaces dues à la décomposition de domaine, coïncidant avec des arêtes primales (cf chapitre 5). Sur chaque cellule demi-diamant $D_{j,\alpha}$ ($\alpha \in \{1, 2\}$ si $j \in [1, J - J^\Gamma]$ et $\alpha = 1$ si $j \in [J - J^\Gamma + 1, J]$) en correspondance avec son arête primaire A_j et son arête duale $A'_{j,\alpha}$, est alors défini un gradient discret reconstruit selon les deux directions A_j et $A'_{j,\alpha}$.

Définition 4.3. Le gradient discret ∇_h est défini sur $D_{j,\alpha}$ ($\alpha \in \{1, 2\}$ si $j \in [1, J - J^\Gamma]$ et $\alpha = 1$ si $j \in [J - J^\Gamma + 1, J]$) à partir des valeurs aux points i_α , σ_j , k_1 et k_2 de $D_{j,\alpha}$ par

$$(\nabla_h c)_{ij} = \frac{1}{2|D_{j,\alpha_{ij}}|} \left((c_{k_2} - c_{k_1}) |A'_{j,\alpha_{ij}}| \mathbf{n}'_{k_1,j,\alpha_{ij}} + (c_{\sigma_j} - c_i) |A_j| \mathbf{n}_{ij} \right), \quad (4.4)$$

en notant c_{i_α} , c_{σ_j} , c_{k_1} et c_{k_2} les valeurs respectives de c aux points i_α , σ_j , k_1 et k_2 .

En écrivant la composante tangentielle du gradient discret comme une différence finie aux points k_1 et k_2 , nous tenons compte de la continuité du flux $(\nabla_h c)_{ij} \cdot \overrightarrow{k_1 k_2}$ à travers l'arête duale $A'_{j,\alpha_{ij}}$. La continuité du flux à travers les arêtes primales A_j , $j \in [1, J - J^\Gamma]$ permet quant à elle d'éliminer toutes les inconnues c_{σ_j} , exceptées celles aux bords qui sont conservées.

Nous donnons aussi la définition de la divergence discrète à partir de [14].

Définition 4.4. L'opérateur de la divergence discrète $\nabla_h \cdot : (\mathbb{R}^{2J - J^\Gamma})^2 \mapsto \mathbb{R}^I \times \mathbb{R}^K$ est défini pour tout \mathbf{u} par ses valeurs sur T_i et P_k par

$$\begin{aligned} (\nabla_h \cdot \mathbf{u})_i &:= \frac{1}{|T_i|} \sum_{A_j \subset \partial T_i} |A_j| \mathbf{u}_{j,\alpha_{ij}} \cdot \mathbf{n}_{ij} \\ (\nabla_h \cdot \mathbf{u})_k &:= \frac{1}{|P_k|} \left(\sum_{A'_{j,\alpha} \subset \partial P_k} |A'_{j,\alpha}| \mathbf{u}_{j,\alpha} \cdot \mathbf{n}'_{k,j,\alpha} + \sum_{A_j \supset \partial P_k \cap \partial \Omega} \frac{|A_j|}{2} \mathbf{u}_{j,1} \cdot \mathbf{n}_j \right), \end{aligned} \quad (4.5)$$

où $\mathbf{u}_{j,\alpha}$ ($\alpha = \alpha_{ij} \in \{1, 2\}$ si $A_j \not\subset \Gamma$ et $\alpha = 1$ si $A_j \subset \Gamma$) représente la valeur discrète de \mathbf{u} sur $D_{j,\alpha}$.

Remarque 4.5. Sur la notation de (4.5) :

- $\sum_{A_j \subset \partial T_i}$ fait la somme sur les arêtes primales A_j de ∂T_i
- $\sum_{A'_{j,\alpha} \subset \partial P_k}$ (resp. $\sum_{A_j \supset \partial P_k \cap \partial \Omega}$) réalise la somme sur les arêtes duales intérieures à Ω (resp. demi-arêtes de bord $\partial \Omega$) de ∂P_k .

Cette notation sera désormais utilisée dans la suite sans précisions.

L'équation $-\nabla \cdot (\mathbf{K} \nabla c) = f$ intégrée sur T_i et P_k est alors approchée par $-(\nabla_h \cdot (\mathbf{K} \nabla_h c))_i = f_i$ sur T_i et par $-(\nabla_h \cdot (\mathbf{K} \nabla_h c))_k = f_k$ sur P_k , où f_i et f_k représentent les valeurs moyennes respectives de f sur T_i et P_k . De plus, en écrivant la continuité du flux normal $(\mathbf{K} \nabla c)_{ij} \cdot \mathbf{n}_{ij}$ à travers chaque arête primale $A_j \not\subset \Gamma$, il est possible de prouver l'existence et l'unicité de ce problème discret de diffusion avec des conditions limites de Dirichlet ou de Neumann [29] en utilisant une formule discrète de Green reliant le gradient discret et la divergence discrète (son opérateur adjoint).

Les principales notations étant posées, et la discrétisation du gradient étant rappelée, revenons à l'équation de convection-diffusion pour présenter le schéma DDFV complet.

4.2 Le schéma étendu à l'équation de convection-diffusion

Nous réécrivons cette équation de convection-diffusion en milieu poreux, donnée dans l'introduction en (3.54) :

$$\mathcal{L}c = \omega \partial_t c - \nabla \cdot (\mathbf{K} \nabla c - \mathbf{b}c) = f \quad \text{dans } \Omega \times (0, T), \quad (4.6)$$

$$c(\cdot, 0) = c_0 \quad \text{dans } \Omega, \quad (4.7)$$

$$c = 0 \quad \text{sur } \Gamma_D \times (0, T), \quad (4.8)$$

$$(\mathbf{K} \nabla c) \cdot \mathbf{n} = 0 \quad \text{sur } \Gamma_N \times (0, T), \quad (4.9)$$

où (4.8) et (4.9) sont les conditions limites homogènes de Dirichlet ou de Neumann définies respectivement sur Γ_D et Γ_N définis tels que $\partial\Omega = \Gamma_D \cup \Gamma_N$. On supposera de plus (voir théorème 4.9) que

$$\nabla \cdot \mathbf{b} \geq 0 \quad \text{dans } \Omega, \quad (4.10)$$

$$\mathbf{b} \cdot \mathbf{n} \geq 0 \quad \text{sur } \Gamma_N. \quad (4.11)$$

Pour la discrétisation en temps, nous décomposons l'intervalle en temps $(0, T)$ en N sous-intervalles $I_n := (t_{n-1}, t_n)$ de pas de temps $\Delta t_n := t_n - t_{n-1}$. Ayant fait le choix de considérer l'ordre 0 du schéma Galerkin discontinu, ce schéma en temps ne pose aucune difficulté. L'approximation de c au temps t_n est notée avec l'exposant n : ainsi c_i^n (resp. c_k^n) est l'approximation de c au temps t_n dans la cellule T_i (resp. P_k).

Le champ de vitesse \mathbf{b} est donné au niveau discret par ses valeurs $\mathbf{b}_{j,\alpha}$ sur chaque demi-diamant $D_{j,\alpha}$ ($\alpha \in \{1, 2\}$ si $j \in [1, J - J^\Gamma]$ et $\alpha = 1$ si $j \in [J - J^\Gamma + 1, J]$). Lorsque le champ de vitesse provient de la résolution de l'équation de Darcy utilisant un schéma DDFV, les valeurs discrètes données par demi-diamant sont directement utilisables. Lorsqu'on dispose d'un champ de vitesse \mathbf{b} analytique, $\mathbf{b}_{j,\alpha}$ est donné par

$$\mathbf{b}_{j,\alpha} \cdot \mathbf{n}_{ij} := \frac{1}{|A_j|} \int_{A_j} \mathbf{b} \cdot \mathbf{n}_{ij}(\xi) d\xi \quad (4.12)$$

et

$$\mathbf{b}_{j,\alpha} \cdot \mathbf{n}'_{kj,\alpha} := \frac{1}{|A'_{j,\alpha}|} \int_{A'_{j,\alpha}} \mathbf{b} \cdot \mathbf{n}'_{kj,\alpha}(\xi) d\xi. \quad (4.13)$$

Puisque \mathbf{n}_{ij} et $\mathbf{n}'_{kj,\alpha}$ sont deux directions indépendantes de $D_{j,\alpha}$, $\mathbf{b}_{j,\alpha}$ est défini de manière unique par demi-diamant.

4.2.1 Le schéma intérieur

Intégrée sur les cellules primales T_i et sur les cellules duales intérieures P_k , l'équation (4.6) peut être discrétisée sur chaque I_n et T_i par

$$\omega_i \frac{c_i^n - c_i^{n-1}}{\Delta t_n} - \frac{1}{|T_i|} \sum_{A_j \subset \partial T_i} |A_j| F_{ij}^n = f_i^n, \quad (4.14)$$

et de manière analogue, sur les intervalles I_n et les cellules duales P_k par

$$\omega_k \frac{c_k^n - c_k^{n-1}}{\Delta t_n} - \frac{1}{|P_k|} \sum_{A'_{j,\alpha} \subset \partial P_k} |A'_{j,\alpha}| F_{kj,\alpha}^n = f_k^n. \quad (4.15)$$

Dans (4.14), $\omega_i := \omega|_{T_i}$ est bien défini car la discontinuité du coefficient de porosité a lieu suivant les mailles primales. Quant à la valeur de ω sur P_k , noté ω_k dans (4.15), elle est donnée comme une moyenne des valeurs de ω sur les mailles primales entourant le sommet k :

$$|P_k| \omega_k = \sum_{i \in [1, I]} |P_k \cap T_i| \omega_i. \quad (4.16)$$

Les seconds membres $f_{i_\alpha}^n$ et $f_{k_1}^n$ de (4.14) et (4.15) sont définis de la manière suivante :

$$\begin{aligned} f_i^n &:= \frac{1}{\Delta t_n |T_i|} \int_{I_n} \int_{T_i} f(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x} dt, \\ f_k^n &:= \frac{1}{\Delta t_n |P_k|} \int_{I_n} \int_{P_k} f(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x} dt. \end{aligned} \quad (4.17)$$

Afin d'alléger les notations, nous omettons (sauf mention explicite) l'exposant n dans la suite de ce chapitre.

Les flux primaux F_{ij} de T_i à travers les arêtes primales A_j et les flux duaux $F_{kj, \alpha}$ de P_k à travers les arêtes duales $A'_{j, \alpha}$, intervenant dans (4.14) et (4.15), contiennent une partie diffusive et une partie convective. Ils sont définis comme suit :

$$F_{ij} := [\mathbf{K}_i (\nabla_h c)_{ij}] \cdot \mathbf{n}_{ij} - (\mathbf{bc} \cdot \mathbf{n})_{ij}, \quad (4.18)$$

$$F_{kj, \alpha} := [\mathbf{K}_{i_\alpha} (\nabla_h c)_{i_\alpha j}] \cdot \mathbf{n}'_{kj, \alpha} - (\mathbf{bc} \cdot \mathbf{n}')_{kj, \alpha}. \quad (4.19)$$

Dans l'expression de ces flux primaux (4.18) et duaux (4.19), la discrétisation de la partie diffusive est donnée par le gradient discret (Définition 4.3). D'autre part, $\mathbf{K}_i = \mathbf{K}|_{T_i}$ est la valeur moyenne de \mathbf{K} sur T_i . Dans la pratique, \mathbf{K} est pris constant sur chaque T_i .

Pour discrétiser la partie convective des flux donnés par (4.18) et (4.19), avec un schéma amont, nous utilisons les notations $[a]^+$ et $[a]^-$ des parties positive et négative de a définies dans la partie I (1.14). La partie convective du flux primal, notée $(\mathbf{bc} \cdot \mathbf{n})_{ij}$ est discrétisée par le décentrage amont

$$(\mathbf{bc} \cdot \mathbf{n})_{ij} := [(\mathbf{bc} \cdot \mathbf{n})_{ij}]^+ c_i + [(\mathbf{bc} \cdot \mathbf{n})_{ij}]^- c_{\sigma_j}, \quad (4.20)$$

où $(\mathbf{bc} \cdot \mathbf{n})_{ij}$ est donné par

$$(\mathbf{bc} \cdot \mathbf{n})_{ij} := \frac{1}{|A_j|} \int_{A_j} \mathbf{b}_{j, \alpha} \cdot \mathbf{n}_{ij}(\xi) d\xi, \quad (4.21)$$

qui a un sens en raison de la continuité de $\mathbf{b}_{j, \alpha} \cdot \mathbf{n}_{ij}$ à travers les mailles primales A_j . L'idée d'un tel décentrement dans (4.20), local au demi-diamant $D_{j, \alpha_{ij}}$ utilisant la valeur de c au point σ_j , est empruntée à [50], dans l'optique de la décomposition de domaine (voir chapitre 5). Il est ainsi parfaitement défini aux arêtes du bord $\partial\Omega$.

Quant à la partie convective du flux dual, notée $(\mathbf{bc} \cdot \mathbf{n}')_{kj,\alpha}$, elle est discrétisée suivant le schéma décentré amont classique

$$(\mathbf{bc} \cdot \mathbf{n}')_{kj,\alpha} := [\mathbf{b}_{j,\alpha} \cdot \mathbf{n}'_{kj,\alpha}]^+ c_k + [\mathbf{b}_{j,\alpha} \cdot \mathbf{n}'_{kj,\alpha}]^- c_{v_{kj}}, \quad (4.22)$$

où l'on pose $v_{kj} = k_2$ si $k = k_1(j)$ et $v_{kj} = k_1$ si $k = k_2(j)$, c'est-à-dire une notation analogue à α_{ij} pour lier la notation duale locale (indices k_1 et k_2) et la notation duale globale (indice k). Dans la pratique, $\mathbf{b}_{j,\alpha}$ est souvent pris constant sur chaque demi-diamant $D_{j,\alpha}$.

L'inconnue c_{σ_j} (pour $\sigma_j \notin \partial\Omega$) est éliminée en écrivant la conservation du flux primal à travers chaque arête primale intérieure

$$F_{i_1j} = -F_{i_2j} \quad \forall A_j = \partial T_{i_1} \cap \partial T_{i_2}. \quad (4.23)$$

L'expression de c_{σ_j} obtenue à partir de (4.23), fonction des seules inconnues c_{i_1} , c_{i_2} , c_{k_1} et c_{k_2} de $D_{j,1} \cup D_{j,2}$, est alors remplacée dans les définitions du gradient (4.4) et du flux primal (4.20), intervenant pour le premier dans le flux primal (4.18) et le flux dual (4.19) et pour le second dans le seul flux primal (4.18).

Notons que le schéma dual est aussi conservatif dans sa partie diffusive et sa partie convective prises séparément : en effet, la conservation du flux diffusif et du flux convectif provient de la définition du gradient (4.4) et du flux convectif (4.22).

4.2.2 Le schéma au bord

Il reste à prendre en compte les conditions limites (4.8) et (4.9) sur les mailles primales et duales.

Lorsqu'une condition de Dirichlet est appliquée sur le bord $\partial\Omega$, l'équation continue (4.6) n'est pas intégrée sur les cellules duales de bord P_k mais la condition (4.8) est imposée de manière forte :

$$c_k = 0 \quad \forall k \in \bar{\Gamma}_D. \quad (4.24)$$

De même, les valeurs aux points $\sigma_j \in A_j \subset \Gamma_D$ sont imposées de manière forte

$$c_{\sigma_j} = 0 \quad \forall \sigma_j \in \Gamma_D. \quad (4.25)$$

Le traitement est différent lorsqu'une condition de type Neumann est appliquée sur la frontière $\partial\Omega$. Premièrement, la discrétisation de la condition (4.9) sur les arêtes $A_j \subset \Gamma_N$

$$[\mathbf{K}_{i_1}(\nabla_h c)_{i_1j}] \cdot \mathbf{n}_{i_1j} = 0, \quad \forall A_j \subset \Gamma_N, \quad (4.26)$$

permet de déterminer les valeurs de c_{σ_j} sur le bord. Rappelons que sur le bord, seul $i_1(j)$ a un sens, par convention. D'autre part, les équations liées aux noeuds duaux $k \in \bar{\Gamma}_N$ sont déterminées en intégrant l'équation continue (4.6) sur les mailles duales

de bord P_k associées. La discrétisation sur I_n et sur chacune de ces mailles duales de bord P_k est donnée par

$$\omega_k \frac{c_k^n - c_k^{n-1}}{\Delta t_n} - \frac{1}{|P_k|} \left(\sum_{A'_{j,\alpha} \subset \partial P_k} |A'_{j,\alpha}| F_{k,j,\alpha}^n + \sum_{\substack{A_j \supset \partial P_k \cap \Gamma_N \\ k \in \mathring{\Gamma}_N}} \frac{|A_j|}{2} F_{i_1 j, k}^n \right) = f_k^n, \quad (4.27)$$

où la première somme concerne les arêtes duales intérieures de P_k (voir 4.19) et la deuxième somme prend en compte les arêtes de bord de P_k incluses dans les arêtes primales de bord $A_j \subset \Gamma_N$. La discrétisation spatiale du flux $F_{i_1 j, k}^n$, intervenant dans (4.27), à travers les demi-arêtes primales de bord issues du point $k \in \mathring{\Gamma}_N$, est définie par

$$F_{i_1 j, k} := [\mathbf{K}_{i_1}(\nabla_h c)_{i_1 j}] \cdot \mathbf{n}_{i_1 j} - (\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_{j, k} c_k. \quad (4.28)$$

Nous reconnaissons dans le premier terme de (4.28) la partie diffusive du flux (4.18) à travers les arêtes primales : les flux diffusifs sur les deux demi-arêtes de bord issues de $k \in \mathring{\Gamma}_N$ sont ceux définis sur les arêtes primales A_j associées. Quant au terme $(\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_{j, k}$ du flux convectif à travers les demi-arêtes de bord Neumann des mailles duales de bord P_k , $k \in \mathring{\Gamma}_N$, il faut distinguer différents cas de figure, dépendant de la donnée de \mathbf{b} .

- Si \mathbf{b} est défini analytiquement, alors $(\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_{j, k}$ peut être calculé sur les deux demi-arêtes de bord Neumann issues de $k \in \mathring{\Gamma}_N$:

$$(\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_{j, k} = \frac{1}{|A_j|} \int_{A_j \supset \partial P_k \cap \Gamma_N} \mathbf{b} \cdot \mathbf{n}_{i_1 j}(\xi) d\xi,$$

- Si le champ de vitesse $\mathbf{b}_{j, \alpha}$ est donné par la résolution numérique de l'équation de Darcy par le schéma DDFV, où la condition limite de Neumann est appliquée sur les mêmes arêtes, il suffit de reprendre la valeur de $\mathbf{b}_{j, \alpha} \cdot \mathbf{n}_{i_1 j}$ déjà définie sur ces mêmes demi-arêtes :

$$(\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_{j, k} = \mathbf{b}_{j, \alpha} \cdot \mathbf{n}_{i_1 j},$$

- Si le champ de vitesse $\mathbf{b}_{j, \alpha}$ vient de la résolution numérique de l'équation de Darcy par le schéma DDFV avec des conditions limites différentes, un seul flux convectif noté $(\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_k$ sur les deux demi-arêtes issues d'un sommet $k \in \mathring{\Gamma}_N$ est considéré, soit

$$|\partial P_k \cap \Gamma_N| (\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_k = \sum_{\substack{A_j \supset \partial P_k \cap \Gamma_N \\ k \in \mathring{\Gamma}_N}} \frac{|A_j|}{2} (\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_{j, k}. \quad (4.29)$$

Ce flux $(\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_k$ est défini tel qu'il complète la divergence discrète de \mathbf{b} sur la maille duale de bord P_k , soit

$$|\partial P_k \cap \Gamma_N| (\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_k = |P_k| \left(\nabla_h^C \cdot \mathbf{b} \right)_{k \in \Gamma} - \sum_{A'_{j,\alpha} \subset \partial P_k} |A'_{j,\alpha}| \mathbf{b}_{j,\alpha} \cdot \mathbf{n}'_{k,j,\alpha}$$

où $\nabla_h^C \cdot$ est un nouvel opérateur de divergence discrète pour les termes liés à la convection défini ci-dessous.

Définition 4.6. L'opérateur de la divergence discrète $\nabla_h^C : (\mathbb{R}^{2J-J\Gamma})^2 \mapsto \mathbb{R}^I \times \mathbb{R}^K$ est défini pour tout \mathbf{u} par ses valeurs sur T_i et P_k par

$$\begin{aligned} (\nabla_h^C \cdot \mathbf{u})_i &:= (\nabla_h \cdot \mathbf{u})_i, \\ (\nabla_h^C \cdot \mathbf{u})_{k \notin \Gamma} &:= (\nabla_h \cdot \mathbf{u})_{k \notin \Gamma}, \\ (\nabla_h^C \cdot \mathbf{u})_{k \in \Gamma} &:= \frac{1}{|P_k|} \left(\sum_{A_j \supset \partial P_k \cap \Gamma} \frac{|A_j|}{2} (\mathbf{u} \cdot \mathbf{n})_{j,k} + \sum_{A'_{j,\alpha} \subset \partial P_k} |A'_{j,\alpha}| \mathbf{u}_{j,\alpha} \cdot \mathbf{n}'_{k,j,\alpha} \right), \end{aligned}$$

ou de manière équivalente, grâce à (4.29),

$$(\nabla_h^C \cdot \mathbf{u})_{k \in \Gamma} = \frac{1}{|P_k|} \left(|\partial P_k \cap \Gamma| (\mathbf{u} \cdot \mathbf{n})_k + \sum_{A'_{j,\alpha} \subset \partial P_k} |A'_{j,\alpha}| \mathbf{u}_{j,\alpha} \cdot \mathbf{n}'_{k,j,\alpha} \right), \quad (4.30)$$

en rappelant que $\mathbf{u}_{j,\alpha}$ ($\alpha = \alpha_{ij} \in \{1, 2\}$ si $A_j \not\subset \Gamma$ et $\alpha = 1$ si $A_j \subset \Gamma$) représente la valeur discrète de \mathbf{u} sur $D_{j,\alpha}$ et en notant que $(\mathbf{u} \cdot \mathbf{n})_{j,k}$ représente les flux à travers les demi-arêtes de bord de P_k (incluses dans les arêtes primales A_j issues de $k \in \Gamma$) et $(\mathbf{u} \cdot \mathbf{n})_k$ désigne le flux à travers l'union de ces demi-arêtes de bord de P_k ($k \in \Gamma$), défini par cette même équation (4.30).

Notons bien que la seule différence entre la divergence discrète $\nabla_h \cdot$ et la divergence discrète $\nabla_h^C \cdot$ tient à l'expression du terme de convection sur les arêtes de bord d'une maille duale de bord. Ce terme diffère si le champ de vitesse est donné par une expression analytique ou par la résolution DDFV du problème de Darcy ayant des conditions limites différentes de celles du problème de transport résolu ici.

Dans la proposition suivante, on établit le lien existant entre la divergence du champ de vitesse \mathbf{b} donnée par le calcul de Darcy et la nouvelle divergence discrète de \mathbf{b} définie ci-dessus.

Proposition 4.7. Si \mathbf{b} est donné analytiquement avec $\nabla \cdot \mathbf{b} \geq 0$ ou si $\mathbf{b} = (\mathbf{b}_{j,\alpha})$ est donné par la résolution du problème de Darcy par le schéma DDFV avec $\nabla_h \cdot \mathbf{b} \geq 0$ sur les mailles primales et les mailles duales, alors $\nabla_h^C \cdot \mathbf{b} \geq 0$.

Démonstration. Distinguons les deux cas :

- 1^{er} cas : \mathbf{b} est donné analytiquement avec $\nabla \cdot \mathbf{b} \geq 0$.

Par la définition 4.6, nous avons

$$(\nabla_h^C \cdot \mathbf{b})_i = \frac{1}{|T_i|} \sum_{A_j \subset \partial T_i} |A_j| \mathbf{b}_{j,\alpha_{ij}} \cdot \mathbf{n}_{ij}$$

Puisque $\mathbf{b}_{j,\alpha_{ij}}$ est défini à partir de l'expression analytique \mathbf{b} , il vient

$$\begin{aligned} (\nabla_h^C \cdot \mathbf{b})_i &= \frac{1}{|T_i|} \sum_{A_j \subset \partial T_i} \int_{A_j \subset \partial T_i} \mathbf{b} \cdot \mathbf{n}_{ij}(\xi) d\xi \\ &= \frac{1}{|T_i|} \int_{\partial T_i} \mathbf{b} \cdot \mathbf{n}(\xi) d\xi = \frac{1}{|T_i|} \int_{T_i} \nabla \cdot \mathbf{b} \geq 0 \end{aligned}$$

En écrivant des égalités analogues pour les mailles duales intérieures ($k \notin \Gamma$) et les mailles duales de bord ($k \in \Gamma$), on obtient facilement que $\nabla_h^C \cdot \mathbf{b} \geq 0$.

- 2^{ème} cas : $\mathbf{b} = (\mathbf{b}_{j,\alpha})$ est donné par la résolution du problème de Darcy par le schéma DDFV avec $\nabla_h \cdot \mathbf{b}_{j,\alpha} \geq 0$ sur les mailles primales et les mailles duales.

On a déjà $(\nabla_h^C \cdot \mathbf{b})_i = (\nabla_h \cdot \mathbf{b})_i$ et $(\nabla_h^C \cdot \mathbf{b})_k = (\nabla_h \cdot \mathbf{b})_k$ pour $k \notin \Gamma$. Pour $k \in \Gamma_N$, distinguons le cas où k est aussi de type Neumann pour le calcul de Darcy de celui où il ne l'est pas.

- Dans le premier cas, on a $(\nabla_h^C \cdot \mathbf{b})_k = (\nabla_h \cdot \mathbf{b})_k$ par définition des deux divergences.
- Dans le second cas, on utilise le fait que $(\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_k$ complète la divergence de \mathbf{b} sur P_k donnée par le calcul de Darcy et notée f_D .

On a donc $(\nabla_h^C \cdot \mathbf{b})_k = \frac{1}{|P_k|} \int_{P_k} f_D$ qui est positif par hypothèse.

□

Appliquée au flux convectif \mathbf{bc} , la divergence $\nabla_h^C \cdot$ n'est pas clairement définie. Il nous faut préciser le sens de $(\nabla_h^C \cdot (\mathbf{bc}))_{k \in \dot{\Gamma}_N}$, compte tenu du fait que \mathbf{b} et c ne sont pas définis aux mêmes points. Les termes de cette divergence donnant les flux convectifs sur les demi-arêtes de bord sont exactement ceux de la partie convective du flux total (4.28). Il vient donc

$$\left(\nabla_h^C \cdot (\mathbf{bc}) \right)_{k \in \dot{\Gamma}_N} = \frac{1}{|P_k|} \left(\sum_{\substack{A_j \supset \partial P_k \cap \Gamma_N \\ k \in \dot{\Gamma}_N}} \frac{|A_j|}{2} (\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_{j,k} c_k + \sum_{A'_{j,\alpha} \subset \partial P_k} |A'_{j,\alpha}| (\mathbf{bc} \cdot \mathbf{n}')_{kj,\alpha} \right), \quad (4.31)$$

ou de manière équivalente, si $(\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_{j,k}$ n'est pas déterminé explicitement sur les demi-arêtes de bord de P_k incluses dans $A_j \subset \Gamma_N$,

$$\left(\nabla_h^C \cdot (\mathbf{bc}) \right)_{k \in \dot{\Gamma}_N} = \frac{1}{|P_k|} \left(|\partial P_k \cap \Gamma_N| (\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_k c_k + \sum_{A'_{j,\alpha} \subset \partial P_k} |A'_{j,\alpha}| (\mathbf{bc} \cdot \mathbf{n}')_{kj,\alpha} \right), \quad (4.32)$$

où $(\mathbf{bc} \cdot \mathbf{n}')_{kj,\alpha}$ est donné par (4.22) et $(\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_k$ est défini par la relation (4.30) appliquée à \mathbf{b} .

Remarquons qu'il est inutile de préciser le sens de $(\nabla_h^C \cdot (\mathbf{bc}))_{k \in \bar{\Gamma}_D}$, étant donné que cette quantité n'apparaît pas dans le schéma.

Dans la suite, nous notons $\nabla_h^{T,P}$ l'opérateur discret de divergence, adapté à l'équation de convection-diffusion avec des conditions de Dirichlet et Neumann.

Définition 4.8. L'opérateur discret de divergence $\nabla_h^{T,P} : (\mathbb{R}^{2J-J^\Gamma})^2 \mapsto \mathbb{R}^I \times \mathbb{R}^K$ est défini pour tout $\mathbf{u} = \mathbf{u}^C + \mathbf{u}^D$ décomposé en termes de convection \mathbf{u}^C et en termes de diffusion \mathbf{u}^D , par

$$\begin{aligned} (\nabla_h^{T,P} \cdot \mathbf{u})_i &:= (\nabla_h \cdot \mathbf{u})_i, \\ (\nabla_h^{T,P} \cdot \mathbf{u})_{k \in \Omega \setminus \Gamma} &:= (\nabla_h \cdot \mathbf{u})_{k \in \Omega \setminus \Gamma}, \\ (\nabla_h^{T,P} \cdot \mathbf{u})_{k \in \Gamma} &:= (\nabla_h^C \cdot \mathbf{u}^C)_{k \in \Gamma} + (\nabla_h \cdot \mathbf{u}^D)_{k \in \Gamma}, \end{aligned} \quad (4.33)$$

où les opérateurs de divergence $\nabla_h \cdot$ et $\nabla_h^C \cdot$ sont donnés par les définitions 4.4 et 4.6.

4.3 Existence et unicité pour le problème discret monodomaine

Théorème 4.9. *Soient \mathbf{K} la matrice de diffusion symétrique définie positive, \mathbf{b} la vitesse de convection de composante normale positive sur le bord où la condition de Neumann est appliquée, vérifiant de plus $\nabla_h^C \cdot \mathbf{b} \geq 0$.*

Alors le problème discret de convection-diffusion, approchant le problème continu (4.6) - (4.9) et défini par les expressions (4.14) - (4.30), est bien posé.

Démonstration. L'existence et l'unicité de la solution pour le problème discret de convection-diffusion défini par les équations (4.14) - (4.30) sera obtenue si l'on peut montrer d'une part que le système discret résolu au temps t_n a autant d'équations que d'inconnues et d'autre part qu'il est injectif.

La première affirmation est évidente par construction du schéma défini par les équations (4.14) - (4.30), en particulier les équations sur les mailles primales, duales intérieures et duales de bord données respectivement par (4.14), (4.15) et (4.28), l'équation de continuité du flux normal sur les arêtes primales intérieures (4.23) et les conditions limites (4.24) et (4.25) pour Dirichlet et (4.26) pour Neumann.

L'injectivité consiste à montrer que, pour $c^n \in \mathbb{R}^I \times \mathbb{R}^{J^\Gamma} \times \mathbb{R}^K$,

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\omega}{\Delta t_n} c_i^n - (\nabla_h^{T,P} \cdot (\mathbf{K} \nabla_h c^n + \mathbf{b} c^n))_i = 0 \\ \frac{\omega}{\Delta t_n} c_k^n - (\nabla_h^{T,P} \cdot (\mathbf{K} \nabla_h c^n + \mathbf{b} c^n))_{k \in \Omega \setminus \bar{\Gamma}_D} = 0 \\ c_{\sigma_j}^n = 0, c_k^n = 0 \quad \forall \sigma_j \in \Gamma_D, \forall k \in \bar{\Gamma}_D \\ [\mathbf{K}_{i_1} (\nabla_h c^n)_{i_1 j}] \cdot \mathbf{n}_{i_1 j} = 0 \quad \forall A_j \subset \Gamma_N \end{array} \right. \implies c^n = 0. \quad (4.34)$$

En multipliant les deux premières équations de (4.34) par c^n , et en utilisant le fait que $c_k^n = 0$ pour $k \in \bar{\Gamma}_D$, cela revient à montrer que

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\omega}{\Delta t_n} \|c^n\|_{T,P}^2 - \left(\nabla_h^{T,P} \cdot (\mathbf{K} \nabla_h c^n - \mathbf{b} c^n), c^n \right)_{T,P} = 0 \\ c_{\sigma_j}^n = 0, c_k^n = 0 \quad \forall \sigma_j \in \Gamma_D, \forall k \in \bar{\Gamma}_D \\ [\mathbf{K}_{i_1} (\nabla_h c^n)_{i_1 j}] \cdot \mathbf{n}_{i_1 j} = 0 \quad \forall A_j \subset \Gamma_N \end{array} \right. \implies c^n = 0, \quad (4.35)$$

où le produit scalaire $(\cdot, \cdot)_{T,P}$ est défini en (4.2). Une condition suffisante pour montrer (4.35) est de montrer la positivité de $\left(-\nabla_h^{T,P} \cdot (\mathbf{K} \nabla_h c^n - \mathbf{b} c^n), c^n \right)_{T,P}$, impliquant alors $\|c^n\|_{T,P} = 0$, d'où $c_i^n = 0 \forall i \in I$ et $c_k^n = 0 \forall k \in K$. De plus, $c_{\sigma_j}^n = 0 \forall j \in \Gamma$ par les conditions homogènes de Dirichlet ou de Neumann.

Dans la suite de la preuve, nous omettrons l'exposant n relatif au temps.

Tout d'abord, notons que les hypothèses du théorème 4.9 requises pour la positivité du produit scalaire discret $\left(-\nabla_h^{T,P} \cdot (\mathbf{K} \nabla_h c - \mathbf{b} c), c \right)_{T,P}$ sont analogues à celles données dans le cas continu. Nous rappelons ci-dessous le calcul de la positivité de $-\int_{\Omega} (\nabla \cdot (\mathbf{K} \nabla c - \mathbf{b} c)) c$ et les hypothèses associées.

4.3.1 Rappel au niveau continu

Sur le domaine Ω de bord Γ , nous avons

$$\int_{\Omega} -(\nabla \cdot (\mathbf{K}\nabla c - \mathbf{b}c)) c = \int_{\Omega} (\mathbf{K}\nabla c) \cdot \nabla c - \int_{\Gamma} (\mathbf{K}\nabla c) \cdot \mathbf{n} c + \int_{\Omega} (\nabla \cdot (\mathbf{b}c)) c.$$

Le troisième terme du membre de droite peut être exprimé de deux manières différentes :

$$\int_{\Omega} (\nabla \cdot (\mathbf{b}c)) c = - \int_{\Omega} \mathbf{b}c \cdot \nabla c + \int_{\Gamma} \mathbf{b} \cdot \mathbf{n} c^2,$$

ou bien

$$\int_{\Omega} (\nabla \cdot (\mathbf{b}c)) c = \int_{\Omega} (\nabla \cdot \mathbf{b}) c^2 + \int_{\Omega} \mathbf{b}c \cdot \nabla c.$$

Il vient alors

$$\int_{\Omega} (\nabla \cdot (\mathbf{b}c)) c = \int_{\Omega} (\nabla \cdot \mathbf{b}) c^2 - \int_{\Omega} (\nabla \cdot (\mathbf{b}c)) c + \int_{\Gamma} \mathbf{b} \cdot \mathbf{n} c^2,$$

soit

$$\int_{\Omega} (\nabla \cdot (\mathbf{b}c)) c = \frac{1}{2} \int_{\Omega} (\nabla \cdot \mathbf{b}) c^2 + \frac{1}{2} \int_{\Gamma} \mathbf{b} \cdot \mathbf{n} c^2.$$

On a finalement

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} -\nabla \cdot (\mathbf{K}\nabla c - \mathbf{b}c) c = \\ \int_{\Omega} (\mathbf{K}\nabla c) \cdot \nabla c - \int_{\Gamma} (\mathbf{K}\nabla c) \cdot \mathbf{n} c + \frac{1}{2} \int_{\Omega} (\nabla \cdot \mathbf{b}) c^2 + \frac{1}{2} \int_{\Gamma} \mathbf{b} \cdot \mathbf{n} c^2. \end{aligned} \quad (4.36)$$

Pour obtenir la positivité de (4.36), il faut donc supposer $\nabla \cdot \mathbf{b} \geq 0$ sur Ω et $\mathbf{b} \cdot \mathbf{n} \geq 0$ sur Γ_N où la condition $(\mathbf{K}\nabla c) \cdot \mathbf{n} = 0$ annule l'autre terme de bord. Sur Γ_D , aucune hypothèse supplémentaire n'est nécessaire, compte tenu de la condition limite $c = 0$ qui annule les deux termes de bord.

Donnons à présent la démonstration de la positivité de

$$\left(-\nabla_h^{T,P} \cdot (\mathbf{K}\nabla_h c^n - \mathbf{b}c^n), c^n \right)_{T,P}, \quad (4.37)$$

équivalent discret de $-\int_{\Omega} (\nabla \cdot (\mathbf{K}\nabla c - \mathbf{b}c)) c$, où nous rappelons que l'opérateur $\nabla_h^{T,P}$ est défini par (4.33).

4.3.2 Au niveau discret

D'après la définition du produit scalaire (4.2), nous pouvons écrire (4.37) comme

$$\begin{aligned} - \left(\nabla_h^{T,P} \cdot (\mathbf{K}\nabla_h c - \mathbf{b}c), c \right)_{T,P} = & - \frac{1}{2} \sum_{i \in [1,I]} |T_i| (\nabla_h^{T,P} \cdot (\mathbf{K}\nabla_h c - \mathbf{b}c))_i c_i \\ & - \frac{1}{2} \sum_{k \in [1,K]} |P_k| (\nabla_h^{T,P} \cdot (\mathbf{K}\nabla_h c - \mathbf{b}c))_k c_k. \end{aligned}$$

En écrivant la divergence discrète à l'aide des flux (4.18), (4.19) et (4.28), on peut écrire

$$\begin{aligned}
 & - \left(\nabla_h^{T,P} \cdot (\mathbf{K} \nabla_h c - \mathbf{bc}), c \right)_{T,P} = \\
 & - \frac{1}{2} \sum_{i \in [1,I]} \sum_{A_j \subset \partial T_i} F_{ij} c_i \\
 & - \frac{1}{2} \sum_{k \in [1,K]} \left(\sum_{A'_{j,\alpha} \subset \partial P_k} |A'_{j,\alpha}| F_{kj,\alpha} + \sum_{A_j \supset \partial P_k \cap \Gamma} \frac{|A_j|}{2} F_{ij,k} \right) c_k,
 \end{aligned} \tag{4.38}$$

où il faut noter que le flux dual $F_{ij,k}$ sur les demi-arêtes de bord de P_k tel que $k \in \bar{\Gamma}_D$ n'intervient pas dans le schéma défini dans le paragraphe 4.2. Bien que contenu dans la dernière somme de (4.38), sa contribution est nulle car il est multiplié par c_k qui vaut zéro aux points $k \in \bar{\Gamma}_D$.

Au lieu d'une somme sur les éléments, (4.38) peut être transformé en une somme sur les arêtes A_j en distinguant celles qui sont intérieures (notées $A_j \not\subset \Gamma$) et celles qui appartiennent au bord du domaine Ω (notées $A_j \subset \Gamma$). En utilisant l'équation de continuité du flux primal $F_{i_1j} = -F_{i_2j}$ (4.23) sur les arêtes primales intérieures et l'égalité (toujours vraie) des flux duaux sur les arêtes duales intérieures $F_{k_1j,\alpha} = -F_{k_2j,\alpha}$, l'expression (4.38) devient

$$\begin{aligned}
 & - (\nabla_h \cdot (\mathbf{K} \nabla_h c - \mathbf{bc}), c)_{T,P} = \\
 & - \frac{1}{2} \sum_{A_j \not\subset \Gamma} |A_j| F_{i_1j} (c_{i_1} - c_{i_2}) - \frac{1}{2} \sum_{A_j \subset \Gamma} |A_j| F_{i_1j} c_{i_1} \\
 & - \frac{1}{2} \sum_{A_j \not\subset \Gamma} \sum_{\alpha \in \{1,2\}} |A'_{j,\alpha}| F_{k_1j,\alpha} (c_{k_1} - c_{k_2}) \\
 & - \frac{1}{2} \sum_{A_j \subset \Gamma} |A'_{j,1}| F_{k_1j,1} (c_{k_1} - c_{k_2}) \\
 & - \frac{1}{2} \sum_{A_j \subset \Gamma} \frac{|A_j|}{2} (F_{i_1j,k_1} c_{k_1} + F_{i_1j,k_2} c_{k_2}).
 \end{aligned} \tag{4.39}$$

Distinguons les termes relatifs aux arêtes intérieures et ceux aux arêtes de bord. Désignons une notation pour chacune des expressions suivantes, à calculer séparément :

$$EP_\Gamma = -\frac{1}{2} \sum_{A_j \subset \Gamma} |A_j| F_{i_1j} c_{i_1}, \tag{4.40}$$

$$\begin{aligned}
 ED_\Gamma &= -\frac{1}{2} \sum_{A_j \subset \Gamma} |A'_{j,1}| F_{k_1j,1} (c_{k_1} - c_{k_2}) \\
 & - \frac{1}{2} \sum_{A_j \subset \Gamma} \frac{|A_j|}{2} (F_{i_1j,k_1} c_{k_1} + F_{i_1j,k_2} c_{k_2}),
 \end{aligned} \tag{4.41}$$

$$EP_{int} = -\frac{1}{2} \sum_{A_j \not\subset \Gamma} |A_j| F_{i_1j} (c_{i_1} - c_{i_2}), \tag{4.42}$$

$$ED_{int} = -\frac{1}{2} \sum_{A_j \not\subset \Gamma} \sum_{\alpha \in \{1,2\}} |A'_{j,\alpha}| F_{k_1j,\alpha} (c_{k_1} - c_{k_2}). \tag{4.43}$$

Calcul de EP_{int}

Introduisons c_{σ_j} dans l'expression (4.42) de EP_{int} en tenant compte de l'égalité des flux $F_{i_1j} = -F_{i_2j}$ (4.23) sur les mailles primales $A_j \not\subset \Gamma$:

$$EP_{int} = -\frac{1}{2} \sum_{A_j \not\subset \Gamma} |A_j| \left(F_{i_1j} (c_{i_1} - c_{\sigma_j}) + F_{i_2j} (c_{i_2} - c_{\sigma_j}) \right). \quad (4.44)$$

Séparons les termes liés à la diffusion (notés EP_{int}^D) et ceux liés à la convection (notés EP_{int}^C) :

$$\begin{aligned} EP_{int}^D &= -\frac{1}{2} \sum_{A_j \not\subset \Gamma} |A_j| \left(\mathbf{K}_{i_1} (\nabla_h c)_{i_1j} \cdot \mathbf{n}_{i_1j} (c_{i_1} - c_{\sigma_j}) \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{2} \sum_{A_j \not\subset \Gamma} |A_j| \left(\mathbf{K}_{i_2} (\nabla_h c)_{i_2j} \cdot \mathbf{n}_{i_2j} (c_{i_2} - c_{\sigma_j}) \right), \right. \end{aligned} \quad (4.45)$$

et

$$\begin{aligned} EP_{int}^C &= \frac{1}{2} \sum_{A_j \not\subset \Gamma} |A_j| \left([(\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_{i_1j}]^+ c_{i_1} + [(\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_{i_1j}]^- c_{\sigma_j} \right) (c_{i_1} - c_{\sigma_j}) \\ &\quad + \frac{1}{2} \sum_{A_j \not\subset \Gamma} |A_j| \left([(\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_{i_2j}]^+ c_{i_2} + [(\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_{i_2j}]^- c_{\sigma_j} \right) (c_{i_2} - c_{\sigma_j}). \end{aligned} \quad (4.46)$$

En vertu de (4.21), remarquons que $(\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_{i_2j} = -(\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_{i_1j}$. De plus, comme pour tout a , $[-a]^- = -[a]^+$ et $[-a]^+ = -[a]^-$, alors nous pouvons écrire

$$[(\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_{i_2j}]^+ = -[(\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_{i_1j}]^- \quad \text{et} \quad [(\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_{i_2j}]^- = -[(\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_{i_1j}]^+.$$

Nous avons donc

$$\begin{aligned} EP_{int}^C &= \frac{1}{2} \sum_{A_j \not\subset \Gamma} |A_j| [(\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_{i_1j}]^+ \left(c_{i_1} (c_{i_1} - c_{\sigma_j}) + c_{\sigma_j} (c_{\sigma_j} - c_{i_2}) \right) \\ &\quad + \frac{1}{2} \sum_{A_j \not\subset \Gamma} |A_j| [(\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_{i_1j}]^- \left(c_{\sigma_j} (c_{i_1} - c_{\sigma_j}) + c_{i_2} (c_{\sigma_j} - c_{i_2}) \right). \end{aligned} \quad (4.47)$$

Or,

$$\begin{aligned} c_{i_1} (c_{i_1} - c_{\sigma_j}) + c_{\sigma_j} (c_{\sigma_j} - c_{i_2}) &= \frac{(c_{i_1} - c_{\sigma_j})^2}{2} + \frac{c_{i_1}^2 - c_{\sigma_j}^2}{2} + \frac{(c_{\sigma_j} - c_{i_2})^2}{2} + \frac{c_{\sigma_j}^2 - c_{i_2}^2}{2} \\ &= \frac{(c_{i_1} - c_{\sigma_j})^2}{2} + \frac{c_{i_1}^2}{2} + \frac{(c_{\sigma_j} - c_{i_2})^2}{2} - \frac{c_{i_2}^2}{2}. \end{aligned}$$

De même,

$$\begin{aligned} c_{\sigma_j} (c_{i_1} - c_{\sigma_j}) + c_{i_2} (c_{\sigma_j} - c_{i_2}) &= -\frac{(c_{i_1} - c_{\sigma_j})^2}{2} + \frac{c_{i_1}^2 - c_{\sigma_j}^2}{2} - \frac{(c_{\sigma_j} - c_{i_2})^2}{2} + \frac{c_{\sigma_j}^2 - c_{i_2}^2}{2} \\ &= -\frac{(c_{i_1} - c_{\sigma_j})^2}{2} + \frac{c_{i_1}^2}{2} - \frac{(c_{\sigma_j} - c_{i_2})^2}{2} - \frac{c_{i_2}^2}{2}. \end{aligned}$$

Ainsi, (4.47) devient

$$\begin{aligned}
 EP_{int}^C &= \frac{1}{2} \sum_{A_j \notin \Gamma} |A_j| [(\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_{i1j}]^+ \left(\frac{(c_{i1} - c_{\sigma_j})^2}{2} + \frac{(c_{\sigma_j} - c_{i2})^2}{2} \right) \\
 &+ \frac{1}{2} \sum_{A_j \notin \Gamma} |A_j| [(\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_{i1j}]^- \left(-\frac{(c_{i1} - c_{\sigma_j})^2}{2} - \frac{(c_{\sigma_j} - c_{i2})^2}{2} \right) \\
 &+ \frac{1}{2} \sum_{A_j \notin \Gamma} |A_j| \left([(\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_{i1j}]^+ + [(\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_{i1j}]^- \right) \cdot \left(\frac{c_{i1}^2}{2} - \frac{c_{i2}^2}{2} \right).
 \end{aligned} \tag{4.48}$$

Soit, en utilisant encore que $[(\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_{i2j}]^+ = -[(\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_{i1j}]^-$ et le fait que

$$[(\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_{i1j}]^+ + [(\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_{i1j}]^- = \mathbf{b} \cdot \mathbf{n}_{i1j} = -\mathbf{b} \cdot \mathbf{n}_{i2j},$$

nous obtenons

$$\begin{aligned}
 EP_{int}^C &= \frac{1}{4} \sum_{A_j \notin \Gamma} |A_j| |(\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_{i1j}| \left((c_{i1} - c_{\sigma_j})^2 + (c_{\sigma_j} - c_{i2})^2 \right) \\
 &+ \frac{1}{4} \sum_{A_j \notin \Gamma} |A_j| \left((\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_{i1j} c_{i1}^2 + (\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_{i2j} c_{i2}^2 \right)
 \end{aligned} \tag{4.49}$$

car $[(\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_{i1j}]^+ - [(\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_{i1j}]^- = |(\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_{i1j}|$. L'expression finale de EP_{int} (4.42) est finalement obtenue en sommant les expressions EP_{int}^D (4.45) et EP_{int}^C (4.49).

Calcul de ED_{int}

On procède d'une manière analogue pour calculer ED_{int} (4.43) dont l'expression est donnée par

$$ED_{int} = -\frac{1}{2} \sum_{A_j \notin \Gamma} \sum_{\alpha \in \{1,2\}} |A'_{j,\alpha}| F_{k1j,\alpha} (c_{k1} - c_{k2}),$$

et que l'on décompose comme $ED_{int} = ED_{int}^D + ED_{int}^C$ pour séparer les termes de diffusion et ceux de convection. Nous avons alors

$$\begin{aligned}
 ED_{int}^D &= -\frac{1}{2} \sum_{A_j \notin \Gamma} |A'_{j,1}| [\mathbf{K}_{i1}(\nabla_h c)_{i1j}] \cdot \mathbf{n}'_{k1j,1} (c_{k1} - c_{k2}) \\
 &- \frac{1}{2} \sum_{A_j \notin \Gamma} |A'_{j,2}| [\mathbf{K}_{i2}(\nabla_h c)_{i2j}] \cdot \mathbf{n}'_{k1j,2} (c_{k1} - c_{k2}),
 \end{aligned} \tag{4.50}$$

et

$$\begin{aligned}
 ED_{int}^C &= \frac{1}{2} \sum_{A_j \notin \Gamma} |A'_{j,1}| \left([\mathbf{b}_{j,1} \cdot \mathbf{n}'_{k1j,1}]^+ c_{k1} + [\mathbf{b}_{j,1} \cdot \mathbf{n}'_{k1j,1}]^- c_{k2} \right) (c_{k1} - c_{k2}) \\
 &+ \frac{1}{2} \sum_{A_j \notin \Gamma} |A'_{j,2}| \left([\mathbf{b}_{j,2} \cdot \mathbf{n}'_{k1j,2}]^+ c_{k1} + [\mathbf{b}_{j,2} \cdot \mathbf{n}'_{k1j,2}]^- c_{k2} \right) (c_{k1} - c_{k2}).
 \end{aligned} \tag{4.51}$$

L'expression ED_{int}^C se réécrit

$$\begin{aligned} ED_{int}^C &= \frac{1}{2} \sum_{A_j \notin \Gamma} \left(|A'_{j,1}| [\mathbf{b}_{j,1} \cdot \mathbf{n}'_{k_1j,1}]^+ + |A'_{j,2}| [\mathbf{b}_{j,2} \cdot \mathbf{n}'_{k_1j,2}]^+ \right) c_{k_1} (c_{k_1} - c_{k_2}) \\ &\quad + \frac{1}{2} \sum_{A_j \notin \Gamma} \left(|A'_{j,1}| [\mathbf{b}_{j,1} \cdot \mathbf{n}'_{k_1j,1}]^- + |A'_{j,2}| [\mathbf{b}_{j,2} \cdot \mathbf{n}'_{k_1j,2}]^- \right) c_{k_2} (c_{k_1} - c_{k_2}). \end{aligned} \quad (4.52)$$

En utilisant la même technique que plus haut, nous écrivons

$$\begin{aligned} c_{k_1} (c_{k_1} - c_{k_2}) &= \frac{(c_{k_1} - c_{k_2})^2}{2} + \frac{c_{k_1}^2}{2} - \frac{c_{k_2}^2}{2} \\ c_{k_2} (c_{k_1} - c_{k_2}) &= -\frac{(c_{k_1} - c_{k_2})^2}{2} + \frac{c_{k_1}^2}{2} - \frac{c_{k_2}^2}{2}, \end{aligned}$$

ce qui permet de réécrire (4.52) comme

$$\begin{aligned} ED_{int}^C &= \frac{1}{2} \sum_{A_j \notin \Gamma} \left(|A'_{j,1}| [\mathbf{b}_{j,1} \cdot \mathbf{n}'_{k_1j,1}]^+ + |A'_{j,2}| [\mathbf{b}_{j,2} \cdot \mathbf{n}'_{k_1j,2}]^+ \right) \frac{(c_{k_1} - c_{k_2})^2}{2} \\ &\quad - \frac{1}{2} \sum_{A_j \notin \Gamma} \left(|A'_{j,1}| [\mathbf{b}_{j,1} \cdot \mathbf{n}'_{k_1j,1}]^- + |A'_{j,2}| [\mathbf{b}_{j,2} \cdot \mathbf{n}'_{k_1j,2}]^- \right) \frac{(c_{k_1} - c_{k_2})^2}{2} \\ &\quad + \frac{1}{4} \sum_{A_j \notin \Gamma} \left(|A'_{j,1}| \mathbf{b}_{j,1} \cdot \mathbf{n}'_{k_1j,1} + |A'_{j,2}| \mathbf{b}_{j,2} \cdot \mathbf{n}'_{k_1j,2} \right) c_{k_1}^2 \\ &\quad + \frac{1}{4} \sum_{A_j \notin \Gamma} \left(|A'_{j,1}| \mathbf{b}_{j,1} \cdot \mathbf{n}'_{k_2j,1} + |A'_{j,2}| \mathbf{b}_{j,2} \cdot \mathbf{n}'_{k_2j,2} \right) c_{k_2}^2. \end{aligned} \quad (4.53)$$

L'expression complète de ED_{int} est obtenue en sommant les expressions de ED_{int}^D (4.50) et ED_{int}^C (4.53).

Calcul de ED_Γ

On écrit, comme précédemment, $ED_\Gamma = ED_\Gamma^D + ED_\Gamma^C$ en séparant les termes de diffusion et de convection. D'après (4.19), (4.28), (4.31) et (4.41), on a

$$\begin{aligned} ED_\Gamma^D &= -\frac{1}{2} \sum_{A_j \subset \Gamma} |A'_{j,1}| [\mathbf{K}_{i_1} (\nabla_h c)_{i_1j}] \cdot \mathbf{n}'_{k_1j,1} (c_{k_1} - c_{k_2}) \\ &\quad - \frac{1}{2} \sum_{A_j \subset \Gamma} \frac{|A_j|}{2} \left([\mathbf{K}_{i_1} (\nabla_h c)_{i_1j}] \cdot \mathbf{n}_{i_1j} (c_{k_1} + c_{k_2}) \right), \end{aligned} \quad (4.54)$$

et

$$\begin{aligned} ED_\Gamma^C &= \frac{1}{2} \sum_{A_j \subset \Gamma} |A'_{j,1}| \left([\mathbf{b}_{j,1} \cdot \mathbf{n}'_{k_1j,1}]^+ c_{k_1} + [\mathbf{b}_{j,1} \cdot \mathbf{n}'_{k_1j,1}]^- c_{k_2} \right) \cdot (c_{k_1} - c_{k_2}) \\ &\quad + \frac{1}{2} \sum_{A_j \subset \Gamma} \frac{|A_j|}{2} \left((\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_{j,k_1} c_{k_1}^2 + (\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_{j,k_2} c_{k_2}^2 \right). \end{aligned} \quad (4.55)$$

En utilisant encore

$$\begin{aligned} c_{k_1} (c_{k_1} - c_{k_2}) &= \frac{(c_{k_1} - c_{k_2})^2}{2} + \frac{c_{k_1}^2}{2} - \frac{c_{k_2}^2}{2} \\ c_{k_2} (c_{k_1} - c_{k_2}) &= -\frac{(c_{k_1} - c_{k_2})^2}{2} + \frac{c_{k_1}^2}{2} - \frac{c_{k_2}^2}{2}, \end{aligned}$$

(4.55) devient

$$\begin{aligned}
 ED_{\Gamma}^C &= \frac{1}{2} \sum_{A_j \subset \Gamma} |A'_{j,1}| \left([\mathbf{b}_{j,1} \cdot \mathbf{n}'_{k_1j,1}]^+ \frac{(c_{k_1} - c_{k_2})^2}{2} - [\mathbf{b}_{j,1} \cdot \mathbf{n}'_{k_1j,1}]^- \frac{(c_{k_1} - c_{k_2})^2}{2} \right) \\
 &+ \frac{1}{4} \sum_{A_j \subset \Gamma} |A'_{j,1}| (\mathbf{b}_{j,1} \cdot \mathbf{n}'_{k_1j,1}) c_{k_1}^2 + \frac{1}{4} \sum_{A_j \subset \Gamma} |A'_{j,1}| (\mathbf{b}_{j,1} \cdot \mathbf{n}'_{k_2j,1}) c_{k_2}^2 \\
 &+ \frac{1}{2} \sum_{A_j \subset \Gamma} \frac{|A_j|}{2} \left((\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_{j,k_1} c_{k_1}^2 + (\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_{j,k_2} c_{k_2}^2 \right),
 \end{aligned}$$

soit

$$\begin{aligned}
 ED_{\Gamma}^C &= \frac{1}{2} \sum_{A_j \subset \Gamma} |A'_{j,1}| |\mathbf{b}_{j,1} \cdot \mathbf{n}'_{k_1j,1}| \frac{(c_{k_1} - c_{k_2})^2}{2} \\
 &+ \frac{1}{4} \sum_{A_j \subset \Gamma} |A'_{j,1}| (\mathbf{b}_{j,1} \cdot \mathbf{n}'_{k_1j,1}) c_{k_1}^2 + \frac{1}{4} \sum_{A_j \subset \Gamma} |A'_{j,1}| (\mathbf{b}_{j,1} \cdot \mathbf{n}'_{k_2j,1}) c_{k_2}^2 \quad (4.56) \\
 &+ \frac{1}{2} \sum_{A_j \subset \Gamma} \frac{|A_j|}{2} \left((\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_{j,k_1} c_{k_1}^2 + (\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_{j,k_2} c_{k_2}^2 \right).
 \end{aligned}$$

Ainsi, l'expression complète de $ED_{\Gamma} = ED_{\Gamma}^D + ED_{\Gamma}^C$ est donnée par les expressions (4.54) et (4.56).

Calcul de EP_{Γ}

Nous décomposons l'expression (4.40) de EP_{Γ} en deux termes : ceux de diffusion (notés EP_{Γ}^D), et ceux de convection (notés EP_{Γ}^C), eux même dénotés différemment selon qu'ils concernent la condition limite de Dirichlet (notés $EP_{\Gamma_D}^C$) ou celle de Neumann (notés $EP_{\Gamma_D}^C$).

Rappelons d'abord l'expression de EP_{Γ} à partir de (4.40) :

$$\begin{aligned}
 EP_{\Gamma} &= -\frac{1}{2} \sum_{A_j \subset \Gamma} |A_j| [\mathbf{K}_{i_1}(\nabla_h c)_{i_1j}] \cdot \mathbf{n}_{i_1j} c_{i_1} \\
 &+ \frac{1}{2} \sum_{A_j \subset \Gamma} |A_j| \left([(\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_{i_1j}]^+ c_{i_1} + [(\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_{i_1j}]^- c_{\sigma_j} \right) c_{i_1}.
 \end{aligned}$$

Introduisons l'inconnue c_{σ_j} dans les termes de diffusion :

$$\begin{aligned}
 EP_{\Gamma}^D &= -\frac{1}{2} \sum_{A_j \subset \Gamma} |A_j| [\mathbf{K}_{i_1}(\nabla_h c)_{i_1j}] \cdot \mathbf{n}_{i_1j} (c_{i_1} - c_{\sigma_j}) \\
 &- \frac{1}{2} \sum_{A_j \subset \Gamma} |A_j| [\mathbf{K}_{i_1}(\nabla_h c)_{i_1j}] \cdot \mathbf{n}_{i_1j} c_{\sigma_j}. \quad (4.57)
 \end{aligned}$$

D'autre part,

$$EP_{\Gamma}^C = \frac{1}{2} \sum_{A_j \subset \Gamma} |A_j| \left([(\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_{i_1j}]^+ c_{i_1} + [(\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_{i_1j}]^- c_{\sigma_j} \right) c_{i_1}. \quad (4.58)$$

L'expression (4.58) peut se développer comme

$$EP_{\Gamma}^C = \frac{1}{2} \sum_{A_j \subset \Gamma} |A_j| \left[\frac{1}{2} \left([(\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_{i1j}]^+ + [(\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_{i1j}]^- \right) c_{i1}^2 \right. \\ \left. + \frac{1}{2} \left([(\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_{i1j}]^+ - [(\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_{i1j}]^- \right) c_{i1}^2 \right. \\ \left. + [(\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_{i1j}]^- c_{\sigma_j} c_{i1} \right],$$

ou encore comme

$$EP_{\Gamma}^C = \frac{1}{2} \sum_{A_j \subset \Gamma} |A_j| \left(\frac{1}{2} (\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_{i1j} c_{i1}^2 + \frac{1}{2} [(\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_{i1j}]^+ c_{i1}^2 \right. \\ \left. - \frac{1}{2} [(\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_{i1j}]^- \left[(c_{i1} - c_{\sigma_j})^2 - c_{\sigma_j}^2 \right] \right).$$

On obtient finalement

$$EP_{\Gamma}^C = \frac{1}{4} \sum_{A_j \subset \Gamma} |A_j| (\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_{i1j} c_{i1}^2 \\ + \frac{1}{4} \sum_{A_j \subset \Gamma} |A_j| [(\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_{i1j}]^+ c_{i1}^2 \\ + \frac{1}{4} \sum_{A_j \subset \Gamma} |A_j| [(\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_{i1j}]^- c_{\sigma_j}^2 \\ - \frac{1}{4} \sum_{A_j \subset \Gamma} |A_j| [(\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_{i1j}]^- (c_{\sigma_j} - c_{i1})^2. \quad (4.59)$$

L'expression complète de $EP_{\Gamma} = EP_{\Gamma}^D + EP_{\Gamma}^C$ s'obtient en ajoutant respectivement les expressions (4.57) et (4.59).

L'expression du produit scalaire discret (4.39) a finalement été décomposée de la manière suivante, selon les termes liés à la diffusion :

$$EP_{int}^D \text{ (4.45)} + ED_{int}^D \text{ (4.50)} + ED_{\Gamma}^D \text{ (4.54)} + EP_{\Gamma}^D \text{ (4.57)},$$

et selon les termes de convection :

$$EP_{int}^C \text{ (4.49)} + ED_{int}^C \text{ (4.53)} + ED_{\Gamma}^C \text{ (4.56)} + EP_{\Gamma}^C \text{ (4.59)}.$$

En ajoutant (4.45) et (4.50), il vient

$$-\frac{1}{2} \sum_{A_j \not\subset \Gamma} (\mathbf{K}_{i_1} (\nabla_h c)_{i1j}) \cdot \left[|A_j| (c_{i1} - c_{\sigma_j}) \mathbf{n}_{i1j} + |A'_{j,1}| (c_{k_1} - c_{k_2}) \mathbf{n}'_{k_1j,1} \right] \\ - \frac{1}{2} \sum_{A_j \not\subset \Gamma} (\mathbf{K}_{i_2} (\nabla_h c)_{i2j}) \cdot \left[|A_j| (c_{i2} - c_{\sigma_j}) \mathbf{n}_{i2j} + |A'_{j,2}| (c_{k_1} - c_{k_2}) \mathbf{n}'_{k_1j,2} \right], \quad (4.60)$$

où l'on reconnaît, grâce à la définition du gradient discret (4.3), dans les deux expressions entre crochets de (4.60) $|D_{j,1}|(\nabla_h c)_{i_1j}$ et $|D_{j,2}|(\nabla_h c)_{i_2j}$ sur les demi-diamants intérieurs. De même, la première ligne de (4.54) et (4.57) donnent

$$-\frac{1}{2} \sum_{A_j \subset \Gamma} (\mathbf{K}_{i_1}(\nabla_h c)_{i_1j}) \cdot \left[|A_j| (c_{i_1} - c_{\sigma_j}) \mathbf{n}_{i_1j} + |A'_{j,1}| (c_{k_1} - c_{k_2}) \mathbf{n}'_{k_1j,1} \right], \quad (4.61)$$

ce qui complète alors le gradient discret sur les demi-diamants de bord. L'ajout des expressions EP_{int}^D , ED_{int}^D , ED_{Γ}^D et EP_{Γ}^D données par (4.60), (4.61) et la deuxième ligne des expressions (4.54) et (4.57), aboutit donc à

$$\begin{aligned} & \sum_{j \in [1, J]} |D_{j,1}| (\mathbf{K}_{i_1}(\nabla_h c)_{i_1j}) \cdot (\nabla_h c)_{i_1j} + \sum_{A_j \not\subset \Gamma} |D_{j,2}| (\mathbf{K}_{i_2}(\nabla_h c)_{i_2j}) \cdot (\nabla_h c)_{i_2j} \\ & - \sum_{A_j \subset \Gamma} |A_j| \left([\mathbf{K}_{i_1}(\nabla_h c)_{i_1j}] \cdot \mathbf{n}_{i_1j} \frac{c_{k_1} + 2c_{\sigma_j} + c_{k_2}}{4} \right). \end{aligned} \quad (4.62)$$

Par la définition (4.3) du produit scalaire $(\cdot, \cdot)_{\mathcal{D}}$, la première ligne de (4.62) est justement $(\mathbf{K} \nabla_h c, \nabla_h c)_{\mathcal{D}}$ qui est positif car \mathbf{K} est une matrice définie positive. En se reportant au cas continu rappelé dans le paragraphe 4.3.1, en particulier l'expression (4.36), on constate qu'elle est l'équivalent discret de $\int_{\Omega} (\mathbf{K} \nabla c) \cdot \nabla c$. Quant à la dernière ligne, elle correspond au terme continu $\int_{\Gamma} (\mathbf{K} \nabla c \cdot \mathbf{n}) c$ et est nulle. En effet :

- si $A_j \subset \Gamma_D$, alors

$$c_{\sigma_j} = c_k = 0 \quad \forall \sigma_j \in \Gamma_D, \forall k \in \Gamma_D \text{ (voir (4.24) et (4.25)),}$$

- si $A_j \subset \Gamma_N$, alors

$$[\mathbf{K}_{i_1}(\nabla_h c)_{i_1j}] \cdot \mathbf{n}_{i_1j} = 0, \quad \forall A_j \subset \Gamma_N \text{ (voir (4.26)).}$$

Quant à la somme des termes de convection, on souhaite faire apparaître les termes liés à la divergence de \mathbf{b} sur les mailles primales et duales, autrement dit $\frac{1}{2}(\nabla_h^C \cdot \mathbf{b}, c^2)_{T,P}$, équivalent discret de $\frac{1}{2} \int_{\Omega} (\nabla \cdot \mathbf{b}) c^2$ et des termes de bord analogues à $\frac{1}{2} \int_{\Gamma} \mathbf{b} \cdot \mathbf{n} c^2$, tous deux présents dans (4.36).

Donnons tout d'abord l'expression de $\frac{1}{2}(\nabla_h^C \cdot \mathbf{b}, c^2)_{T,P}$ à partir de la définition 4.8 :

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} (\nabla_h^{T,P} \cdot \mathbf{b}, c^2)_{T,P} \\ & = \frac{1}{4} \sum_{i \in [1, I]} \sum_{A_j \subset \partial T_i} |A_j| (\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_{ij} c_i^2 + \frac{1}{4} \sum_{k \in \Omega \setminus \Gamma} \sum_{A'_{j,\alpha} \subset \partial P_k} \mathbf{b}_{j,\alpha} \cdot \mathbf{n}'_{kj,\alpha} c_k^2 \\ & + \frac{1}{4} \sum_{k \in \Gamma} \left[\sum_{A'_{j,\alpha} \subset \partial P_k} \mathbf{b}_{j,\alpha} \cdot \mathbf{n}'_{kj,\alpha} + \sum_{A_j \supset \partial P_k \cap \partial \Gamma} \frac{|A_j|}{2} (\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_{j,k} \right] c_k^2, \end{aligned} \quad (4.63)$$

ce qui donne, en ramenant (4.63) à une somme sur les arêtes primales A_j :

$$\begin{aligned}
 & \frac{1}{2}(\nabla_h^C \cdot \mathbf{b}, c^2)_{T,P} \\
 &= \frac{1}{4} \sum_{A_j \not\subset \Gamma} |A_j| \left((\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_{i_1 j} c_{i_1}^2 + (\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_{i_2 j} c_{i_2}^2 \right) \\
 &+ \frac{1}{4} \sum_{A_j \subset \Gamma} |A_j| (\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_{i_1 j} c_{i_1}^2 \\
 &+ \frac{1}{4} \sum_{A_j \not\subset \Gamma} \sum_{\alpha \in \{1,2\}} |A'_{j,\alpha}| \left(\mathbf{b}_{j,\alpha} \cdot \mathbf{n}'_{k_1 j, \alpha} c_{k_1}^2 + \mathbf{b}_{j,\alpha} \cdot \mathbf{n}'_{k_2 j, \alpha} c_{k_2}^2 \right) \\
 &+ \frac{1}{4} \sum_{A_j \subset \Gamma} |A'_{j,1}| \left(\mathbf{b}_{j,1} \cdot \mathbf{n}'_{k_1 j, 1} c_{k_1}^2 + \mathbf{b}_{j,1} \cdot \mathbf{n}'_{k_2 j, 1} c_{k_2}^2 \right) \\
 &+ \frac{1}{4} \sum_{A_j \subset \Gamma} \frac{|A_j|}{2} \left((\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_{j, k_1} c_{k_1}^2 + (\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_{j, k_2} c_{k_2}^2 \right).
 \end{aligned} \tag{4.64}$$

Dans l'expression (4.64) ci-dessus, les deux premières sommes du membre de droite correspondent à la divergence de \mathbf{b} sur les mailles primales tandis que les autres termes donnent cette divergence sur les mailles duales. Remarquons que la dernière ligne de (4.64) contient les flux $(\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_{j,k}$ sur les demi-arêtes de bord Dirichlet ($k \in \bar{\Gamma}_D$) : ceux-ci n'apparaissent pas dans le schéma et ne sont donc pas définis explicitement. Ils n'ont en fait pas besoin de l'être puisqu'ils interviennent dans la preuve d'une manière implicite, étant multipliés par c_k , nul dès que $k \in \bar{\Gamma}_D$.

Reprenons à présent les termes de convection (4.49), (4.53), (4.56) et (4.59) :

- la deuxième ligne de EP_{int}^C (4.49) est exactement la même que la deuxième ligne de (4.64),
- la première ligne de EP_{Γ}^C (4.59) égale la troisième ligne de (4.64),
- les troisième et quatrième lignes de ED_{int}^C (4.53) représentent la quatrième ligne de (4.64),
- la deuxième ligne de ED_{Γ}^C (4.56) est identique à la cinquième ligne de (4.64),
- la troisième ligne de ED_{Γ}^C (4.56) vaut deux fois la sixième ligne de (4.64).

Par conséquent, les termes de convection peuvent être écrits comme

$$\begin{aligned}
 & \frac{1}{2}(\nabla_h^C \cdot \mathbf{b}, c^2)_{T,P} + S_{pos} \\
 &+ \frac{1}{4} \sum_{A_j \subset \Gamma} \frac{|A_j|}{2} \left((\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_{j, k_1} c_{k_1}^2 + (\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_{j, k_2} c_{k_2}^2 \right) \\
 &+ \frac{1}{4} \sum_{A_j \subset \Gamma} |A_j| [(\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_{i_1 j}]^- c_{\sigma_j}^2
 \end{aligned} \tag{4.65}$$

où S_{pos} désigne la somme des termes positifs provenant des termes de EP_{int}^C (première ligne de (4.49)), ED_{int}^C (première et deuxième lignes de (4.53)), ED_{Γ}^C (première ligne de (4.56)) et EP_{Γ}^C (deuxième et quatrième lignes de (4.59)). S_{pos} est

donné par

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{4} \sum_{A_j \notin \Gamma} |A_j| |(\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_{i_1 j}| \left((c_{i_1} - c_{\sigma_j})^2 + (c_{\sigma_j} - c_{i_2})^2 \right) \\
& + \frac{1}{2} \sum_{A_j \notin \Gamma} \left(|A'_{j,1}| [\mathbf{b}_{j,1} \cdot \mathbf{n}'_{k_1 j,1}]^+ + |A'_{j,2}| [\mathbf{b}_{j,2} \cdot \mathbf{n}'_{k_1 j,2}]^+ \right) \frac{(c_{k_1} - c_{k_2})^2}{2} \\
& - \frac{1}{2} \sum_{A_j \notin \Gamma} \left(|A'_{j,1}| [\mathbf{b}_{j,1} \cdot \mathbf{n}'_{k_1 j,1}]^- + |A'_{j,2}| [\mathbf{b}_{j,2} \cdot \mathbf{n}'_{k_1 j,2}]^- \right) \frac{(c_{k_1} - c_{k_2})^2}{2} \quad (4.66) \\
& + \frac{1}{2} \sum_{A_j \subset \Gamma} |A'_{j,1}| |\mathbf{b}_{j,1} \cdot \mathbf{n}'_{k_1 j,1}| \frac{(c_{k_1} - c_{k_2})^2}{2} \\
& + \frac{1}{4} \sum_{A_j \subset \Gamma} |A_j| [(\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_{i_1 j}]^+ c_{i_1}^2 - \frac{1}{4} \sum_{A_j \subset \Gamma} |A_j| [(\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_{i_1 j}]^- (c_{\sigma_j} - c_{i_1})^2.
\end{aligned}$$

La positivité de (4.66) est claire dès que l'on sait que $[a]^+ \geq 0$ et $[a]^- \leq 0$ pour tout a . Reste à étudier la positivité de (4.65) selon les conditions limites :

– Si $A_j \subset \Gamma_D$, alors

$$c_{\sigma_j} = c_k = 0 \quad \forall \sigma_j \in \Gamma_D, \forall k \in \Gamma_D \text{ (voir (4.24) et (4.25)),}$$

et les termes de (4.65) relatifs à Γ_D s'annulent tous.

– Si $A_j \subset \Gamma_N$, alors il faut supposer $(\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_{i_1 j} \geq 0$ et $(\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_{j,k} \geq 0$ ($k \in \hat{\Gamma}_N$) pour conclure. Cela est une hypothèse du théorème.

Sous les hypothèses du théorème, nous avons montré que (4.38) vérifie

$$\left(\nabla_h^{T,P} \cdot (\mathbf{K} \nabla_h c - \mathbf{b}c), c \right)_{T,P} \geq (\mathbf{K} \nabla_h c, \nabla_h c)_{\mathcal{D}} + \frac{1}{2} (\nabla_h^C \cdot \mathbf{b}, c^2)_{T,P} \geq 0. \quad (4.67)$$

Cela permet de montrer l'injectivité (4.35) et de conclure la preuve. □

Chapitre 5

Le problème discret multidomaine

Sommaire

5.1	Rappel de la formulation multidomaine continue	111
5.2	Le schéma DDFV du problème local	112
5.3	Existence et unicité du problème discret multidomaine	118
5.4	Du multidomaine au monodomaine	123

Dans le chapitre 4, nous avons défini le schéma discret DDFV pour le problème monodomaine de convection-diffusion approchant le problème continu défini sur le domaine global $\Omega \times (0, T)$, rappelé ci-dessous

$$\begin{aligned} \mathcal{L}c &= \omega \partial_t c - \nabla \cdot (\mathbf{K} \nabla c - \mathbf{b}c) = f, & \text{dans } \Omega \times (0, T), \\ c(\cdot, 0) &= c_0 & \text{dans } \Omega, \\ c &= 0 & \text{sur } \Gamma_D \times (0, T), \\ \mathbf{K} \nabla c \cdot \mathbf{n} &= 0 & \text{sur } \Gamma_N \times (0, T). \end{aligned} \tag{5.1}$$

Dans la suite, nous rappelons la formulation multidomaine continue associée au problème (5.1), qui a été analysée pour des conditions de Robin et de Ventcell dans [55, 56]. D'un point de vue discret, une formulation multidomaine a été donnée par S. Krell dans [68] avec le schéma DDFV, pour le problème de diffusion. Nous proposons alors une version discrète multidomaine avec le schéma DDFV pour le problème de convection-diffusion. Nous montrerons d'une part que la formulation proposée est bien posée et d'autre part qu'elle est équivalente à la formulation monodomaine introduite dans le chapitre 4.

5.1 Rappel de la formulation multidomaine continue

Le problème continu (5.1) est équivalent à un ensemble de sous-problèmes définis chacun sur un sous-domaine de Ω et des conditions de raccord entre les solutions et entre les flux, aux interfaces entre les sous-domaines.

Plaçons nous dans le cadre le plus simple de deux sous-domaines (la généralisation ne pose pas de difficultés particulières) : soient Ω_L et Ω_R les deux sous-domaines

sans recouvrement formant une partition de Ω , d'interface $\Gamma_{Rob} = \Omega_L \cap \Omega_R$. Les bords Dirichlet et Neumann de Ω_L (resp. Ω_R) sont notés $\Gamma_D^L = \Gamma_D \cap \partial\Omega_L$ (resp. $\Gamma_D^R = \Gamma_D \cap \partial\Omega_R$) et $\Gamma_N^L = \Gamma_N \cap \partial\Omega_L$ (resp. $\Gamma_N^R = \Gamma_N \cap \partial\Omega_R$). Les normales sortantes de Ω_L (resp. Ω_R) sont notées aussi \mathbf{n}^L (resp. \mathbf{n}^R). Dans la suite, l'exposant L (resp. R) ajouté aux différentes notations déjà introduites ou à venir, caractérisera toujours le domaine Ω_L (resp. Ω_R).

Ainsi (5.1) est équivalent à un système de deux sous-problèmes définis sur Ω_L et Ω_R :

$$\left\{ \begin{array}{ll} \mathcal{L}c^L = f|_{\Omega_L} & \text{dans } \Omega_L \times (0, T) \\ c^L(\cdot, 0) = c_{0|\Omega_L} & \text{dans } \Omega_L \\ c^L = 0 & \text{sur } \Gamma_D^L \times (0, T) \\ \mathbf{K}^L \nabla c^L \cdot \mathbf{n}^L = 0 & \text{sur } \Gamma_N^L \times (0, T) \end{array} \right. \quad \left\{ \begin{array}{ll} \mathcal{L}c^R = f|_{\Omega_R} & \text{dans } \Omega_R \times (0, T) \\ c^R(\cdot, 0) = c_{0|\Omega_R} & \text{dans } \Omega_R \\ c^R = 0 & \text{sur } \Gamma_D^R \times (0, T) \\ \mathbf{K}^R \nabla c^R \cdot \mathbf{n}^R = 0 & \text{sur } \Gamma_N^R \times (0, T) \end{array} \right. \quad (5.2)$$

auquel on ajoute les conditions de raccord, dites conditions de transmission physique, données par

$$\left\{ \begin{array}{ll} c^L = c^R & \text{sur } \Gamma_{Rob} \times (0, T) \\ (\mathbf{K}^L \nabla c^L - \mathbf{b}^L c^L) \cdot \mathbf{n}^L = -(\mathbf{K}^R \nabla c^R - \mathbf{b}^R c^R) \cdot \mathbf{n}^R & \text{sur } \Gamma_{Rob} \times (0, T) \end{array} \right. \quad (5.3)$$

ou par toute combinaison linéaire équivalente de ces deux égalités. C'est ainsi que sont écrites ces conditions d'interface sur $\Gamma_{Rob} \times (0, T)$:

$$\left\{ \begin{array}{l} (\mathbf{K}^L \nabla c^L - \mathbf{b}^L c^L) \cdot \mathbf{n}^L + \lambda^L c^L = -(\mathbf{K}^R \nabla c^R - \mathbf{b}^R c^R) \cdot \mathbf{n}^R + \lambda^L c^R \\ (\mathbf{K}^R \nabla c^R - \mathbf{b}^R c^R) \cdot \mathbf{n}^R + \lambda^R c^R = -(\mathbf{K}^L \nabla c^L - \mathbf{b}^L c^L) \cdot \mathbf{n}^L + \lambda^R c^L \end{array} \right. \quad (5.4)$$

où λ^L et λ^R sont des fonctions strictement positives de $L^\infty(\Gamma)$.

En notant que $\mathbf{n}^L = -\mathbf{n}^R$, les conditions (5.4) peuvent être réécrites via les opérateurs d'interface de Robin \mathcal{B}_L et \mathcal{B}_R définis sur $\Gamma_{Rob} \times (0, T)$:

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathcal{B}_L(\mathbf{K}^L, \mathbf{b}^L) c^L = \mathcal{B}_L(\mathbf{K}^R, \mathbf{b}^R) c^R \\ \mathcal{B}_R(\mathbf{K}^R, \mathbf{b}^R) c^R = \mathcal{B}_R(\mathbf{K}^L, \mathbf{b}^L) c^L \end{array} \right. \quad (5.5)$$

où les opérateurs d'interface sont définis par $\mathcal{B}_L c = (\mathbf{K} \nabla c - \mathbf{b} c) \cdot \mathbf{n}^L + \lambda^L c$ et $\mathcal{B}_R c = (\mathbf{K} \nabla c - \mathbf{b} c) \cdot \mathbf{n}^R + \lambda^R c$.

Dans la section suivante, nous discrétisons la formulation multidomaine continue (5.2) avec le schéma DDFV, et nous introduisons la discrétisation des conditions de Robin (5.4).

5.2 Le schéma DDFV du problème local

Le problème local est en fait un problème monodomaine avec des conditions limites de type Dirichlet/Neumann et Robin. La discrétisation du problème local sera donc comparable à celle du problème monodomaine, avec quelques adaptations liées à la condition de Robin. Puisque les deux sous-domaines Ω_L et Ω_R sont indépendant l'un de l'autre, nous convenons que la notation locale utilisée dans le chapitre précédent peut être utilisée indifféremment dans un domaine ou un autre.

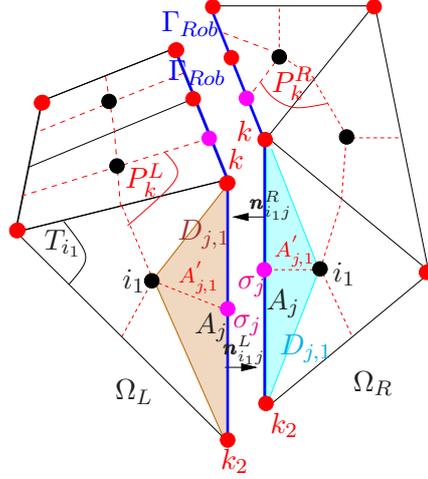


FIGURE 5.1 – Notation locale à l'intérieur de chaque sous-domaine Ω_L et Ω_R . Visualisation des cellules duales de l'interface (P_k^L et P_k^R avec $k \in \Gamma_{Rob}$) en pointillés rouge. A l'arête de bord $A_j \subset \Gamma_{Rob}$ correspond une seule cellule demi-diamant $D_{j,1}$ pour chacun des sous-domaines.

Rappelons le schéma sur les mailles primales (4.14), avec des conditions de Dirichlet et de Neumann sur Ω_L . Sur chaque I_n et T_i^L de Ω_L , nous avons

$$\omega_i^L \frac{c_i^{L,n} - c_i^{L,n-1}}{\Delta t_n} - \frac{1}{|T_i^L|} \sum_{A_j \subset \partial T_i^L} |A_j| F_{ij}^{L,n} = f_i^{L,n}, \quad (5.6)$$

où

$$F_{ij}^{L,n} = [\mathbf{K}_i^L (\nabla_h c^{L,n})_{ij}] \cdot \mathbf{n}_{ij}^L - [(\mathbf{b}^L \cdot \mathbf{n}^L)_{ij}]^+ c_i^{L,n} - [(\mathbf{b}^L \cdot \mathbf{n}^L)_{ij}]^- c_{\sigma_j}^n. \quad (5.7)$$

L'équation de continuité des flux $F_{i_2 j}^{L,n} = -F_{i_1 j}^{L,n}$ écrite sur les arêtes primales A_j intérieures (élimination de $c_{\sigma_j}^{L,n}$) ainsi qu'une condition pour chaque arête primale de bord portant sur $c_{\sigma_j}^{L,n}$ complètent le schéma primal. Pour une condition de Dirichlet, nous imposons

$$c_{\sigma_j}^{L,n} = 0,$$

tandis qu'une condition de Neumann se traduit par

$$\mathbf{K}_{i_1}^L (\nabla_h c^{L,n})_{i_1 j} \cdot \mathbf{n}_{i_1 j}^L = 0.$$

Lorsque $\sigma_j \in \Gamma_{Rob}$, nous utilisons la condition de Robin (5.4) discrétisée par

$$F_{i_1 j}^{L,n} + \lambda_j^L c_{\sigma_j}^{L,n} = g_j^{L,n}, \quad (5.8)$$

où $F_{i_1 j}^{L,n}$ représente le flux à travers l'arête de bord A_j vu de Ω_L (pour rappel, dans la notation locale, $D_{j,1}$ est le seul demi-diamant associé à une arête de bord A_j) et λ_j^L est la moyenne de λ^L sur A_j . Notons que $g_j^{L,n}$, un nombre réel quelconque, remplace le second membre de (5.4) afin de rester dans un cadre local.

L'équation (5.6) est tout aussi valable sur Ω_R en remplaçant l'exposant L par R . Rappelons que les notations étant locales à chaque sous-domaine, cela justifie

l'emploi de $i_1(j)$ de chaque côté de l'arête $A_j \subset \Gamma_{Rob}$ (voir Figure 5.1). Ecrivons la condition de Robin associée, avec des notations analogues aux précédentes :

$$F_{i_1 j}^{R,n} + \lambda_j^R c_{\sigma_j}^{R,n} = g_j^{R,n}.$$

Puisque la seule différence entre le problème local et le problème monodomaine réside dans la frontière de Robin, le schéma sur les mailles duales intérieures est bien sûr identique dans les deux problèmes. Rappelons cette équation (4.15) en l'écrivant sur chaque I_n et P_k^L intérieure de Ω_L (la même expression est valable sur le sous-domaine Ω_R) :

$$\omega_k^L \frac{c_k^{L,n} - c_k^{L,n-1}}{\Delta t_n} - \frac{1}{|P_k^L|} \sum_{A'_{j,\alpha} \subset \partial P_k^L} |A'_{j,\alpha}| F_{k j, \alpha}^{L,n} = f_k^{L,n}, \quad (5.9)$$

où

$$F_{k j, \alpha}^{L,n} = [\mathbf{K}_{i_\alpha}^L (\nabla_h c^{L,n})_{i_\alpha j}] \cdot \mathbf{n}'_{k j, \alpha} - [\mathbf{b}_{j, \alpha}^L \cdot \mathbf{n}'_{k j, \alpha}]^+ c_k - [\mathbf{b}_{j, \alpha}^L \cdot \mathbf{n}'_{k j, \alpha}]^- c_{v_{kj}}, \quad (5.10)$$

en rappelant que $v_{kj} = k_2$ si $k = k(j)$ et $v_{kj} = k$ si $k = k_2(j)$.

Nous rappelons que le schéma discret ne s'écrit pas sur les mailles duales de bord dans le cas d'une condition de Dirichlet : si le centre k d'une maille duale P_k^L appartient à la frontière $\bar{\Gamma}_D^L$, la valeur de l'inconnue c_k^L est simplement imposée par la condition de Dirichlet.

Dans le cas d'une condition de Neumann, l'équation continue est en revanche intégrée sur les mailles duales de bord P_k^L ($k \in \mathring{\Gamma}_N^L$), donnant lieu à la discrétisation suivante qui distingue un flux sur les arêtes duales intérieures et un flux sur les arêtes duales de bord :

$$\omega_k^L \frac{c_k^{L,n} - c_k^{L,n-1}}{\Delta t_n} - \frac{1}{|P_k^L|} \left(\sum_{A'_{j,\alpha} \subset \partial P_k^L} |A'_{j,\alpha}| F_{k j, \alpha}^{L,n} + \sum_{A_j \supset \partial P_k^L \cap \Gamma_N^L} \frac{|A_j|}{2} F_{i_1 j, k}^{L,n} \right) = f_k^{L,n}, \quad (5.11)$$

où $F_{k j, \alpha}^{L,n}$ est défini par (5.10) et le flux $F_{i_1 j, k}^{L,n}$ à travers les demi-arêtes de bord $[\sigma_j, k] \subset \Gamma_N^L$ est rappelé ci-dessous :

$$F_{i_1 j, k}^{L,n} := [\mathbf{K}_{i_1}^L (\nabla_h c^{L,n})_{i_1 j}] \cdot \mathbf{n}_{i_1 j}^L - (\mathbf{b}^L \cdot \mathbf{n}^L)_{j, k} c_k^{L,n}. \quad (5.12)$$

Dans le cas de la condition de Robin, l'équation continue est aussi intégrée sur les mailles duales de bord P_k (avec $k \in \mathring{\Gamma}_{Rob}$ ou $k \in \Gamma_{Rob} \cap \Gamma_N^L$), donnant lieu au schéma suivant :

$$\omega_k^L \frac{c_k^{L,n} - c_k^{L,n-1}}{\Delta t_n} - \frac{1}{|P_k^L|} \left[\sum_{A'_{j,\alpha} \subset \partial P_k^L} |A'_{j,\alpha}| F_{k j, \alpha}^{L,n} + \sum_{\substack{A_j \supset \partial P_k^L \cap \Gamma_N^L \\ k \in \Gamma_{Rob} \cap \Gamma_N^L}} \frac{|A_j|}{2} F_{i_1 j, k}^{L,n} \right. \\ \left. + |\partial P_k^L \cap \Gamma_{Rob}| F_{k, \Gamma_{Rob}}^{L,n} \right] = f_k^{L,n}, \quad (5.13)$$

où le flux $F_{i_1 j_1 k}^{L,n}$ à travers la demi-arête de bord Neumann $\partial P_k^L \cap \Gamma_N^L$ est donné par (5.12) et $F_{k, \Gamma_{Rob}}^{L,n}$ est une approximation du flux à travers $\partial P_k^L \cap \Gamma_{Rob}$, autrement dit de

$$\frac{1}{\Delta t_n |\partial P_k^L \cap \Gamma_{Rob}|} \int_{I_n} \int_{\partial P_k^L \cap \Gamma_{Rob}} (\mathbf{K} \nabla c^L - \mathbf{b} c^L) \cdot \mathbf{n}_L. \quad (5.14)$$

Ce flux $F_{k, \Gamma_{Rob}}^{L,n}$ n'est jamais calculé explicitement. Il est déterminé par la condition de Robin (5.4) adaptée au cadre local et discrétisée sur la frontière Robin des cellules duales de bord $\partial P_k^L \cap \Gamma_{Rob}$ comme suit :

$$F_{k, \Gamma_{Rob}}^{L,n} + \lambda_k^L c_k^{L,n} = g_k^{L,n}, \quad (5.15)$$

où $g_k^{L,n}$ est un nombre réel donné et λ_k^L est une approximation de λ^L sur $\partial P_k^L \cap \Gamma_{Rob}$.

Il faut d'abord noter que $\partial P_k^L \cap \Gamma_{Rob}$ représente soit l'union des deux demi-arêtes issues de k lorsque $k \in \overset{\circ}{\Gamma}_{Rob}$, soit une seule demi-arête dans le cas où $k \in \Gamma_{Rob} \cap \Gamma_N^L$. L'inconnue de flux $F_{k, \Gamma_{Rob}}^{L,n}$ n'est alors définie sur une demi-arête que dans le cas où $k \in \Gamma_{Rob} \cap \Gamma_N^L$. Sinon, elle est définie sur l'union des deux demi-arêtes issues de k , à la différence de [68] qui considèrerait systématiquement une inconnue de flux par demi-arête. Cependant, dans leurs récents travaux, les auteurs de [52] utilisent aussi désormais une seule inconnue de flux pour les deux demi-arêtes issues de k .

D'autre part, lorsque le point dual $k \in \Gamma_{Rob}$ n'est pas le milieu de $\partial P_k^L \cap \Gamma_{Rob}$ (autrement dit lorsque les deux demi-arêtes issues de k ne sont pas de même longueur), l'approximation de la condition de Robin par (5.15) n'est que d'ordre un lorsqu'une seule inconnue de flux $F_{k, \Gamma_{Rob}}^{L,n}$ sur $\partial P_k^L \cap \Gamma_{Rob}$ est définie. Cela pourrait éventuellement conduire à un schéma moins précis si elle était utilisée pour discrétiser une condition limite sur le bord de Ω , mais ce n'est pas le cas ici puisqu'il s'agit d'une condition de transmission qui n'aura pas d'influence sur la précision du schéma monodomaine.

Enfin, il faut dire un mot du cas général où plus de deux sous-domaines sont considérés. Supposons par exemple qu'un sommet du bord $k \in \Omega_L$ appartienne à deux autres sous-domaines Ω_{R_1} et Ω_{R_2} . Nous notons $\Gamma_{Rob}^{R_1}$ et $\Gamma_{Rob}^{R_2}$ les deux frontières Robin séparant Ω_L et Ω_{R_1} d'une part et Ω_L et Ω_{R_2} d'autre part, si bien que $k \in \Gamma_{Rob}^{R_1} \cap \Gamma_{Rob}^{R_2}$. Nous considérons alors deux inconnues de flux : une sur la demi-arête $\partial P_k^L \cap \Gamma_{Rob}^{R_1}$ et l'autre sur la deuxième demi-arête $\partial P_k^L \cap \Gamma_{Rob}^{R_2}$ liée au sommet k .

Le schéma discret sur les mailles duales de bord de Ω_R peut être écrit d'une manière tout à fait similaire à (5.11) (pour Γ_N^R) et (5.13) (pour $\Gamma_{Rob} \cap \Omega_R$) en remplaçant l'exposant L par R . Nous nous contentons d'écrire l'équivalent de (5.15) sur Ω_R :

$$F_{k, \Gamma_{Rob}}^{R,n} + \lambda_k^R c_k^{R,n} = g_k^{R,n},$$

où $F_{k, \Gamma_{Rob}}^{R,n}$ et λ_k^R sont respectivement l'approximation du flux à travers $\partial P_k^R \cap \Gamma_{Rob}$ et l'approximation de λ^R sur cette même portion de frontière tandis que $g_k^{R,n}$ est un nombre réel donné par la condition de Robin.

Pour que le schéma discret du problème local donné sur Ω_L par les expressions (5.6) - (5.15) soit complètement défini, il reste à préciser le sens de $(\mathbf{b}^L \cdot \mathbf{n}^L)_{j,k}$ sur les demi-arêtes, définissant le flux $F_{i_1,j,k}^{L,n}$ donné par (5.12), intervenant dans (5.11) et (5.13).

Pour $k \in \mathring{\Gamma}_N^L$, il suffit de se reporter à la discussion faite à la fin du paragraphe 4.2.2 du chapitre 4 :

- soit \mathbf{b}^L est donné par une expression analytique sur les demi-arêtes issues de k , et alors $(\mathbf{b}^L \cdot \mathbf{n}^L)_{j,k}$ est défini par

$$(\mathbf{b}^L \cdot \mathbf{n}^L)_{j,k} = \frac{2}{|A_j|} \int_{A_j \cap \partial P_k^L \cap \Gamma_N^L} \mathbf{b}^L \cdot \mathbf{n}_{i_1 j}^L(\xi) d\xi,$$

- soit $(\mathbf{b}^L \cdot \mathbf{n}^L)_{j,k}$ est donné directement par la résolution de l'équation de Darcy si les conditions limites sont identiques au problème de convection-diffusion :

$$(\mathbf{b}^L \cdot \mathbf{n}^L)_{j,k} = \mathbf{b}_{j,\alpha}^L \cdot \mathbf{n}_{ij}^L,$$

- soit dans le cas échéant, la somme $(\mathbf{b}^L \cdot \mathbf{n}^L)_k$ des deux flux $(\mathbf{b}^L \cdot \mathbf{n}^L)_{j,k}$ sur les deux demi-arêtes associées à k (cf (4.29)) est définie en bouclant la divergence de \mathbf{b}^L (cf définition (4.30)) sur les mailles duales de bord.

$$|\partial P_k^L \cap \Gamma_N^L| (\mathbf{b}^L \cdot \mathbf{n}^L)_k = |P_k^L| \left(\nabla_h^C \cdot \mathbf{b}^L \right)_{k \in \Gamma_N^L} - \sum_{A'_{j,\alpha} \subset \partial P_k^L} |A'_{j,\alpha}| \mathbf{b}_{j,\alpha}^L \cdot \mathbf{n}_{k,j,\alpha}^{L'}$$

Si $k \in \Gamma_{Rob} \cap \Gamma_N^L$, le choix de $(\mathbf{b}^L \cdot \mathbf{n}^L)_{j,k}$ sur la demi-arête de bord Neumann est libre (on prendra par exemple la valeur du flux primal $(\mathbf{b}^L \cdot \mathbf{n}^L)_{i_1 j}$), à condition qu'il soit positif et qu'en recollant les deux sous-domaines, les deux flux définis sur chacune des demi-arêtes $\partial P_k^L \cap \Gamma_N^L$ et $\partial P_k^R \cap \Gamma_N^R$ (provenant d'un sous-domaine différent) permettent de retrouver le flux monodomaine correspondant à travers $\partial P_k \cap \Gamma_N$. Cette condition est toujours vérifiée dès que les flux sont considérés par demi-arête de bord Neumann dans le schéma monodomaine. En revanche, lorsqu'un unique flux $(\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_k$ est déterminé sur l'union des deux demi-arêtes issues de $k \in \mathring{\Gamma}_N$ dans le schéma monodomaine, cette condition n'est pas évidente a priori. Cette condition est utilisée dans le paragraphe 5.4.

Si $k \in \Gamma_{Rob} \cap \Gamma_N^L$ ou $k \in \mathring{\Gamma}_{Rob}$, le flux $(\mathbf{b}^L \cdot \mathbf{n}^L)_k$ à travers $\partial P_k^L \cap \Gamma_{Rob}$ n'intervient pas explicitement dans le schéma (il est contenu dans l'inconnue de flux $F_{k,\Gamma_{Rob}}^{L,n}$). En revanche, ce flux apparaît dans la preuve et les hypothèses du théorème d'existence et d'unicité du problème multidomaine 5.4 exposé ci-après. Ces flux sont définis tels qu'ils complètent la divergence discrète de \mathbf{b}^L sur les mailles duales de bord Robin :

$$\begin{aligned} |\partial P_k^L \cap \bar{\Gamma}_{Rob}| (\mathbf{b}^L \cdot \mathbf{n}^L)_k = \\ |P_k^L| \left(\nabla_h^C \cdot \mathbf{b}^L \right)_{k \in \bar{\Gamma}_{Rob}} - \sum_{A'_{j,\alpha} \subset \partial P_k^L} |A'_{j,\alpha}| \mathbf{b}_{j,\alpha}^L \cdot \mathbf{n}_{k,j,\alpha}^{L'} - \sum_{\substack{A_j \subset \Gamma_D \cup \Gamma_N \\ k \in \Gamma \setminus \mathring{\Gamma}_{Rob}}} \frac{|A_j|}{2} (\mathbf{b}^L \cdot \mathbf{n}^L)_{j,k} \end{aligned}$$

où $\nabla_h^C \cdot$ est redéfini ci-dessous, à partir de la définition 4.6, afin de prendre en compte les conditions de Robin.

Définition 5.1. *L'opérateur de la divergence discrète $\nabla_h^C \cdot : (\mathbb{R}^{2J-J^\Gamma})^2 \mapsto \mathbb{R}^I \times \mathbb{R}^K$ avec $\Gamma = \Gamma_D \cup \Gamma_N \cup \Gamma_{Rob}$ est défini pour tout \mathbf{u} par ses valeurs sur T_i et P_k par*

$$\begin{aligned} (\nabla_h^C \cdot \mathbf{u})_i &:= (\nabla_h \cdot \mathbf{u})_i, \\ (\nabla_h^C \cdot \mathbf{u})_{k \notin \Gamma} &:= (\nabla_h \cdot \mathbf{u})_{k \notin \Gamma}, \\ (\nabla_h^C \cdot \mathbf{u})_{k \in \dot{\Gamma}_{Rob}} &:= \frac{1}{|P_k|} \left(|\partial P_k \cap \Gamma_{Rob}| (\mathbf{u} \cdot \mathbf{n})_k + \sum_{A'_{j,\alpha} \subset \partial P_k} |A'_{j,\alpha}| \mathbf{u}_{j,\alpha} \cdot \mathbf{n}'_{k,j,\alpha} \right), \\ (\nabla_h^C \cdot \mathbf{u})_{k \in \Gamma \setminus \dot{\Gamma}_{Rob}} &:= \frac{1}{|P_k|} \left(\sum_{\substack{A_j \subset \Gamma_D \cup \Gamma_N \\ k \in \Gamma \setminus \dot{\Gamma}_{Rob}}} \frac{|A_j|}{2} (\mathbf{u} \cdot \mathbf{n})_{j,k} + \sum_{A'_{j,\alpha} \subset \partial P_k} |A'_{j,\alpha}| \mathbf{u}_{j,\alpha} \cdot \mathbf{n}'_{k,j,\alpha} \right. \\ &\quad \left. + \sum_{\substack{A_j \subset \Gamma_{Rob} \\ k \in \Gamma \setminus \dot{\Gamma}_{Rob}}} |\partial P_k \cap \Gamma_{Rob}| (\mathbf{u} \cdot \mathbf{n})_{j,k} \right) \end{aligned}$$

en rappelant encore que $\mathbf{u}_{j,\alpha}$ ($\alpha = \alpha_{ij} \in \{1, 2\}$ si $A_j \not\subset \Gamma$ et $\alpha = 1$ si $A_j \subset \Gamma$) représente la valeur discrète de \mathbf{u} sur $D_{j,\alpha}$, que $(\mathbf{u} \cdot \mathbf{n})_{j,k}$ représente les flux à travers les demi-arêtes de bord de P_k issues de $k \in \Gamma \setminus \dot{\Gamma}_{Rob}$ et $(\mathbf{u} \cdot \mathbf{n})_k$ désigne le flux à travers $\partial P_k \cap \Gamma_{Rob}$ tel que $k \in \dot{\Gamma}_{Rob}$.

On complète dans la suite la proposition 4.7 qui établissait le lien entre la divergence du champ de vitesse \mathbf{b} donnée par le calcul de Darcy et la divergence discrète $\nabla_h^C \cdot$ de \mathbf{b} pour les sommets $k \in \bar{\Gamma}_{Rob}$.

Proposition 5.2. *Si $\mathbf{b} = (\mathbf{b}_{j,\alpha})$ est donné par la résolution du problème de Darcy par le schéma DDFV avec $(\nabla_h \cdot \mathbf{b})_k = f_k \geq 0$ sur les mailles duales telles que $k \in \bar{\Gamma}_{Rob}$, alors $(\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_k$ est continu et $(\nabla_h^C \cdot \mathbf{b})_k \geq 0$.*

Démonstration. Considérons le cas où $k \in \dot{\Gamma}_{Rob}$ par simplicité d'écriture. En écrivant la définition de $(\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_k$ à gauche et à droite, nous avons

$$|\partial P_k^L \cap \dot{\Gamma}_{Rob}| (\mathbf{b}^L \cdot \mathbf{n}^L)_k = |P_k^L| f_k^L - \sum_{A'_{j,\alpha} \subset \partial P_k^L} |A'_{j,\alpha}| \mathbf{b}_{j,\alpha}^L \cdot \mathbf{n}'_{k,j,\alpha}$$

et

$$|\partial P_k^R \cap \dot{\Gamma}_{Rob}| (\mathbf{b}^R \cdot \mathbf{n}^R)_k = |P_k^R| f_k^R - \sum_{A'_{j,\alpha} \subset \partial P_k^R} |A'_{j,\alpha}| \mathbf{b}_{j,\alpha}^R \cdot \mathbf{n}'_{k,j,\alpha}$$

où f_k^L et f_k^R sont les valeurs moyennes de f sur P_k^L et P_k^R . En ajoutant ces deux expressions, on obtient que

$$|\partial P_k^L \cap \dot{\Gamma}_{Rob}| (\mathbf{b}^L \cdot \mathbf{n}^L)_k + |\partial P_k^R \cap \dot{\Gamma}_{Rob}| (\mathbf{b}^R \cdot \mathbf{n}^R)_k = |P_k| f_k - \sum_{A'_{j,\alpha} \subset \partial P_k} |A'_{j,\alpha}| \mathbf{b}_{j,\alpha} \cdot \mathbf{n}'_{k,j,\alpha}$$

c'est-à-dire $(\mathbf{b}^L \cdot \mathbf{n}^L)_k + (\mathbf{b}^R \cdot \mathbf{n}^R)_k = 0$, ce qui donne la continuité de $(\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_k$. Par la définition 5.1, on a aussi que $(\nabla_h^C \cdot \mathbf{b}^L)_k = f_k^L \geq 0$. \square

Il reste alors à prendre en compte les conditions de Robin dans la définition 4.8 de l'opérateur de divergence $\nabla_h^{T,P}$.

Définition 5.3. L'opérateur discret de divergence $\nabla_h^{T,P} : (\mathbb{R}^{2J-J^\Gamma})^2 \mapsto \mathbb{R}^I \times \mathbb{R}^K$ avec $\Gamma = \Gamma_D \cup \Gamma_N \cup \Gamma_{Rob}$ est défini pour tout $\mathbf{u} = \mathbf{u}^C + \mathbf{u}^D$ décomposé en termes de convection \mathbf{u}^C et en termes de diffusion \mathbf{u}^D , par

$$\begin{aligned} (\nabla_h^{T,P} \cdot \mathbf{u})_i &:= (\nabla_h \cdot \mathbf{u})_i \\ (\nabla_h^{T,P} \cdot \mathbf{u})_{k \in \Omega \setminus \Gamma} &:= (\nabla_h \cdot \mathbf{u})_{k \in \Omega \setminus \Gamma} \\ (\nabla_h^{T,P} \cdot \mathbf{u})_{k \in \dot{\Gamma}_{Rob}} &:= (\nabla_h \cdot \mathbf{u})_{k \in \dot{\Gamma}_{Rob}} \\ (\nabla_h^{T,P} \cdot \mathbf{u})_{k \in \Gamma \setminus \dot{\Gamma}_{Rob}} &:= (\nabla_h^C \cdot \mathbf{u}^C)_{k \in \Gamma \setminus \dot{\Gamma}_{Rob}} + (\nabla_h \cdot \mathbf{u}^D)_{k \in \Gamma \setminus \dot{\Gamma}_{Rob}}, \end{aligned} \quad (5.16)$$

où les opérateurs de divergence $\nabla_h \cdot$ et $\nabla_h^C \cdot$ sont donnés par les définitions 4.4 et 5.1.

Notons que dans le cas où un sommet k appartient à plus de deux sous-domaines et tel que $k \in \Gamma_{Rob}^{R_1} \cap \Gamma_{Rob}^{R_2}$ en reprenant la notation introduite un peu plus haut, la divergence sur la maille duale de bord associé à ce point k se traite comme pour $k \in \Gamma_{Rob} \cap \Gamma_N^L$, c'est-à-dire comme pour $k \in \Gamma \setminus \dot{\Gamma}_{Rob}$.

Dans ce qui suit, nous donnons la preuve d'existence et d'unicité du problème multidomaine discret défini ci-dessus, à partir de la preuve donnée pour le problème monodomaine discret dans le théorème 4.9 (paragraphe 5.3).

5.3 Existence et unicité du problème discret multidomaine

Théorème 5.4. Soient \mathbf{K}^L la matrice de diffusion symétrique définie positive, \mathbf{b}^L la vitesse de convection de composante normale positive sur le bord où la condition de Neumann est appliquée, vérifiant de plus $\nabla_h^{T,P} \cdot \mathbf{b}^L \geq 0$.

Si, de plus,

$$\begin{cases} \lambda_j^L \geq \frac{1}{2}(\mathbf{b}^L \cdot \mathbf{n}^L)_{i_1j} & \forall j : A_j \subset \Gamma_{Rob} \\ \lambda_k^L \geq \frac{1}{2}(\mathbf{b}^L \cdot \mathbf{n}^L)_k & \forall k \in \dot{\Gamma}_{Rob} \\ \lambda_k^L \geq \frac{1}{2}(\mathbf{b}^L \cdot \mathbf{n}^L)_{j,k} & \forall k \in \Gamma_{Rob} \cap \Gamma_N \end{cases} \quad (5.17)$$

alors le problème discret multidomaine de convection-diffusion défini sur Ω_L par les expressions (5.6) - (5.15) avec les conditions d'interface de Robin définies par

$$\begin{cases} F_{i_1j}^{L,n} + \lambda_j^L c_{\sigma_j}^{L,n} = g_j^{L,n} & \forall j : A_j \subset \Gamma_{Rob} \\ F_{k,\Gamma_{Rob}}^{L,n} + \lambda_k^L c_k^{L,n} = g_k^{L,n} & \forall k \in \bar{\Gamma}_{Rob} \setminus \bar{\Gamma}_D \end{cases} \quad (5.18)$$

est bien posé.

Démonstration. Comme dans la preuve du théorème 4.9, l'unique difficulté tient dans la démonstration de la positivité de $(-\nabla_h^{T,P} \cdot (\mathbf{K}^L \nabla_h c^L - \mathbf{b}^L c^L), c^L)_{T,P}$ à un temps donné.

Nous avons vu dans le paragraphe 5.2 que la discrétisation du problème local était identique à celle du problème monodomaine à l'intérieur (arêtes primales et

duales intérieures) et sur les bords de Dirichlet et de Neumann. Il suffit donc de traiter les termes correspondant au bord Γ_{Rob} .

Dans la suite, nous omettons l'exposant L pour plus de clarté.

Sur les mailles primales, ce terme peut s'écrire

$$-\frac{1}{2} \sum_{A_j \subset \Gamma_{Rob}} |A_j| F_{i_1j} c_{i_1}, \quad (5.19)$$

où F_{i_1j} est donné par (5.7). En introduisant l'inconnue c_{σ_j} , nous avons donc

$$\begin{aligned} & -\frac{1}{2} \sum_{A_j \subset \Gamma_{Rob}} |A_j| F_{i_1j} (c_{i_1} - c_{\sigma_j}) \\ & -\frac{1}{2} \sum_{A_j \subset \Gamma_{Rob}} |A_j| F_{i_1j} c_{\sigma_j}, \end{aligned} \quad (5.20)$$

soit, en séparant les termes de diffusion et de convection dans la première ligne,

$$\begin{aligned} & -\frac{1}{2} \sum_{A_j \subset \Gamma_{Rob}} |A_j| [\mathbf{K}_{i_1}(\nabla_h c)_{i_1j}] \cdot \mathbf{n}_{i_1j} (c_{i_1} - c_{\sigma_j}) \\ & + \frac{1}{2} \sum_{A_j \subset \Gamma_{Rob}} |A_j| \left([(\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_{i_1j}]^+ c_{i_1} - [(\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_{i_1j}]^- c_{\sigma_j} \right) (c_{i_1} - c_{\sigma_j}) \\ & - \frac{1}{2} \sum_{A_j \subset \Gamma_{Rob}} |A_j| F_{i_1j} c_{\sigma_j}. \end{aligned} \quad (5.21)$$

Réécrivons (5.21) en détaillant la deuxième ligne :

$$\begin{aligned} & -\frac{1}{2} \sum_{A_j \subset \Gamma_{Rob}} |A_j| [\mathbf{K}_{i_1}(\nabla_h c)_{i_1j}] \cdot \mathbf{n}_{i_1j} (c_{i_1} - c_{\sigma_j}) \\ & + \frac{1}{2} \sum_{A_j \subset \Gamma_{Rob}} |A_j| [(\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_{i_1j}]^+ \left(\frac{(c_{i_1} - c_{\sigma_j})^2}{2} + \frac{c_{i_1}^2}{2} - \frac{c_{\sigma_j}^2}{2} \right) \\ & + \frac{1}{2} \sum_{A_j \subset \Gamma_{Rob}} |A_j| [(\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_{i_1j}]^- \left(-\frac{(c_{i_1} - c_{\sigma_j})^2}{2} + \frac{c_{i_1}^2}{2} - \frac{c_{\sigma_j}^2}{2} \right) \\ & - \frac{1}{2} \sum_{A_j \subset \Gamma_{Rob}} |A_j| F_{i_1j} c_{\sigma_j}, \end{aligned} \quad (5.22)$$

ou encore

$$\begin{aligned} & -\frac{1}{2} \sum_{A_j \subset \Gamma_{Rob}} |A_j| [\mathbf{K}_{i_1}(\nabla_h c)_{i_1j}] \cdot \mathbf{n}_{i_1j} (c_{i_1} - c_{\sigma_j}) \\ & + \frac{1}{4} \sum_{A_j \subset \Gamma_{Rob}} |A_j| (\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_{i_1j} c_{i_1}^2 \\ & - \frac{1}{4} \sum_{A_j \subset \Gamma_{Rob}} |A_j| (\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_{i_1j} c_{\sigma_j}^2 \\ & + \frac{1}{4} \sum_{A_j \subset \Gamma_{Rob}} |A_j| \left([(\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_{i_1j}]^+ (c_{i_1} - c_{\sigma_j})^2 - [(\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_{i_1j}]^- (c_{i_1} - c_{\sigma_j})^2 \right) \\ & - \frac{1}{2} \sum_{A_j \subset \Gamma_{Rob}} |A_j| F_{i_1j} c_{\sigma_j}. \end{aligned} \quad (5.23)$$

Sur les mailles duales, les termes provenant de la frontière Robin peuvent être écrits

$$\begin{aligned}
& -\frac{1}{2} \sum_{A_j \subset \Gamma_{Rob}} |A'_{j,1}| [\mathbf{K}_{i_1}(\nabla_h c)_{i_1 j}] \cdot \mathbf{n}'_{k_1 j,1} (c_{k_1} - c_{k_2}) \\
& + \frac{1}{2} \sum_{A_j \subset \Gamma_{Rob}} |A'_{j,1}| \left([\mathbf{b}_{j,1} \cdot \mathbf{n}'_{k_1 j,1}]^+ c_{k_1} + [\mathbf{b}_{j,1} \cdot \mathbf{n}'_{k_1 j,1}]^- c_{k_2} \right) \cdot (c_{k_1} - c_{k_2}) \\
& - \frac{1}{2} \sum_{k \in \bar{\Gamma}_{Rob}} |\partial P_k \cap \Gamma_{Rob}| F_{k, \Gamma_{Rob}} c_k \\
& - \frac{1}{2} \sum_{\substack{A_j \subset \Gamma_D \cup \Gamma_N \\ k \in \bar{\Gamma}_{Rob}}} \frac{|A_j|}{2} \left([\mathbf{K}_{i_1}(\nabla_h c)_{i_1 j}] \cdot \mathbf{n}_{i_1 j} - (\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_{j,k} c_k \right) c_k
\end{aligned} \tag{5.24}$$

ou, en utilisant (4.55) - (4.56),

$$\begin{aligned}
& -\frac{1}{2} \sum_{A_j \subset \Gamma_{Rob}} |A'_{j,1}| [\mathbf{K}_{i_1}(\nabla_h c)_{i_1 j}] \cdot \mathbf{n}'_{k_1 j,1} (c_{k_1} - c_{k_2}) \\
& - \frac{1}{2} \sum_{\substack{A_j \subset \Gamma_D \cup \Gamma_N \\ k \in \bar{\Gamma}_{Rob}}} \frac{|A_j|}{2} [\mathbf{K}_{i_1}(\nabla_h c)_{i_1 j}] \cdot \mathbf{n}_{i_1 j} c_k \\
& + \frac{1}{2} \sum_{A_j \subset \Gamma_{Rob}} |A'_{j,1}| |\mathbf{b}_{j,1} \cdot \mathbf{n}'_{k_1 j,1}| \frac{(c_{k_1} - c_{k_2})^2}{2} \\
& + \frac{1}{4} \sum_{A_j \subset \Gamma_{Rob}} |A'_{j,1}| (\mathbf{b}_{j,1} \cdot \mathbf{n}'_{k_1 j,1}) c_{k_1}^2 + \frac{1}{4} \sum_{A_j \subset \Gamma_{Rob}} |A'_{j,1}| (\mathbf{b}_{j,1} \cdot \mathbf{n}'_{k_2 j,1}) c_{k_2}^2 \\
& - \frac{1}{2} \sum_{k \in \bar{\Gamma}_{Rob}} |\partial P_k \cap \Gamma_{Rob}| F_{k, \Gamma_{Rob}} c_k + \frac{1}{2} \sum_{\substack{A_j \subset \Gamma_D \cup \Gamma_N \\ k \in \bar{\Gamma}_{Rob}}} \frac{|A_j|}{2} (\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_{j,k} c_k^2.
\end{aligned} \tag{5.25}$$

En sommant la première ligne des expressions (5.23) et (5.25), on obtient

$$- \sum_{A_j \subset \Gamma_{Rob}} |D_{j,1}| \mathbf{K}_{i_1}(\nabla_h c)_{i_1 j} \cdot (\nabla_h c)_{i_1 j}, \tag{5.26}$$

qui est une partie de $(\mathbf{K}(\nabla_h c), (\nabla_h c))_{\mathcal{D}}$.

Il faut aussi retrouver, des deux expressions (5.23) et (5.25), les termes relatifs à la frontière Γ_{Rob} provenant de $\frac{1}{2}(\nabla_h^{T,P} \cdot \mathbf{b}, c^2)_{T,P}$, c'est-à-dire

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{4} \sum_{A_j \subset \Gamma_{Rob}} |A_j| (\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_{i_1 j} c_{i_1}^2 + \frac{1}{4} \sum_{k \in \bar{\Gamma}_{Rob}} |\partial P_k \cap \Gamma_{Rob}| (\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_k c_k^2 \\
& + \frac{1}{4} \sum_{\substack{A_j \subset \Gamma_D \cup \Gamma_N \\ k \in \bar{\Gamma}_{Rob}}} \frac{|A_j|}{2} (\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_{j,k} c_k^2 + \frac{1}{4} \sum_{\substack{A_j \subset \Gamma_{Rob} \\ k \in \bar{\Gamma}_{Rob} \setminus \bar{\Gamma}_{Rob}}} |\partial P_k \cap \Gamma_{Rob}| (\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_{j,k} c_k^2 \\
& + \frac{1}{4} \sum_{A_j \subset \Gamma_{Rob}} |A'_{j,1}| (\mathbf{b}_{j,1} \cdot \mathbf{n}'_{k_1 j,1}) c_{k_1}^2 + \frac{1}{4} \sum_{A_j \subset \Gamma_{Rob}} |A'_{j,1}| (\mathbf{b}_{j,1} \cdot \mathbf{n}'_{k_2 j,1}) c_{k_2}^2,
\end{aligned} \tag{5.27}$$

où $(\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_k$ pour $k \in \overset{\circ}{\Gamma}_{Rob}$ et $(\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_{j,k}$ pour $k \in \bar{\Gamma}_{Rob}$ et $A_j \subset \Gamma_{Rob}$ introduit dans la définition 5.1, bouclent $\nabla_h^{T,P} \cdot \mathbf{b}$ sur P_k .

En faisant (5.23) + (5.25) - (5.26) - (5.27), il reste

$$\begin{aligned}
& -\frac{1}{4} \sum_{A_j \subset \Gamma_{Rob}} |A_j| (\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_{i_1 j} c_{\sigma_j}^2 - \frac{1}{2} \sum_{A_j \subset \Gamma_{Rob}} |A_j| F_{i_1 j} c_{\sigma_j} \\
& -\frac{1}{2} \sum_{\substack{A_j \subset \Gamma_D \cup \Gamma_N \\ k \in \bar{\Gamma}_{Rob}}} \frac{|A_j|}{2} [\mathbf{K}_{i_1} (\nabla_h c)_{i_1 j}] \cdot \mathbf{n}_{i_1 j} c_k \\
& + \frac{1}{8} \sum_{\substack{A_j \subset \Gamma_D \cup \Gamma_N \\ k \in \bar{\Gamma}_{Rob}}} |A_j| (\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_{j,k} c_k^2 \\
& -\frac{1}{4} \sum_{k \in \overset{\circ}{\Gamma}_{Rob}} |\partial P_k \cap \Gamma_{Rob}| (\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_k c_k^2 \\
& -\frac{1}{4} \sum_{\substack{A_j \subset \Gamma_{Rob} \\ k \in \bar{\Gamma}_{Rob} \setminus \overset{\circ}{\Gamma}_{Rob}}} |\partial P_k \cap \Gamma_{Rob}| (\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_{j,k} c_k^2 \\
& -\frac{1}{2} \sum_{k \in \bar{\Gamma}_{Rob}} |\partial P_k \cap \Gamma_{Rob}| F_{k, \Gamma_{Rob}} c_k \\
& + \frac{1}{4} \sum_{A_j \subset \Gamma_{Rob}} |A_j| |(\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_{i_1 j}| (c_{i_1} - c_{\sigma_j})^2 \\
& + \frac{1}{2} \sum_{A_j \subset \Gamma_{Rob}} |A'_{j,1}| |\mathbf{b}_{j,1} \cdot \mathbf{n}'_{k_{1j},1}| \frac{(c_{k_1} - c_{k_2})^2}{2}.
\end{aligned} \tag{5.28}$$

La deuxième ligne de (5.28) est nulle car si $k \in \Gamma_D \cap \Gamma_{Rob}$, alors $c_k = 0$ par la condition de Dirichlet, et si $k \in \Gamma_N \cap \Gamma_{Rob}$, soit $A_j \subset \Gamma_N$, alors $[\mathbf{K}_{i_1} (\nabla_h c)_{i_1 j}] \cdot \mathbf{n}_{i_1 j} = 0$ par définition de la condition de Neumann.

De même, la troisième ligne de (5.28) est nulle ou positive selon la condition limite : si $k \in \Gamma_D$ alors $c_k = 0$ et si $k \in \Gamma_N$ alors $(\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_{j,k}$ est positif par hypothèse.

On peut donc écrire une inégalité analogue à celle écrite pour le problème discret mondomaine (4.67), en remarquant que les deux dernières lignes de (5.28) sont

positives :

$$\begin{aligned}
-\left(\nabla_h^{T,P} \cdot (\mathbf{K}\nabla_h c - \mathbf{b}c), c\right)_{T,P} &\geq (\mathbf{K}\nabla_h c, \nabla_h c)_{\mathcal{D}} + \frac{1}{2}(\nabla_h^{T,P} \cdot \mathbf{b}, c^2)_{T,P} \\
&\quad - \frac{1}{4} \sum_{A_j \subset \Gamma_{Rob}} |A_j| (\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_{i_1 j} c_{\sigma_j}^2 \\
&\quad - \frac{1}{2} \sum_{A_j \subset \Gamma_{Rob}} |A_j| F_{i_1 j} c_{\sigma_j} \\
&\quad - \frac{1}{4} \sum_{k \in \dot{\Gamma}_{Rob}} |\partial P_k \cap \Gamma_{Rob}| (\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_k c_k^2 \\
&\quad - \frac{1}{4} \sum_{\substack{A_j \subset \Gamma_{Rob} \\ k \in \overline{\Gamma}_{Rob} \setminus \dot{\Gamma}_{Rob}}} |\partial P_k \cap \Gamma_{Rob}| (\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_{j,k} c_k^2 \\
&\quad - \frac{1}{2} \sum_{k \in \overline{\Gamma}_{Rob}} |\partial P_k \cap \Gamma_{Rob}| F_{k, \Gamma_{Rob}} c_k
\end{aligned} \tag{5.29}$$

En appliquant les conditions discrétisées de Robin (5.18) en prenant nuls les seconds membres g_j et g_k , on a

$$\begin{aligned}
-\frac{1}{2} \sum_{A_j \subset \Gamma_{Rob}} |A_j| F_{i_1 j} c_{\sigma_j} &= \frac{1}{2} \sum_{A_j \subset \Gamma_{Rob}} |A_j| \lambda_j c_{\sigma_j}^2 \\
-\frac{1}{2} \sum_{k \in \overline{\Gamma}_{Rob} \setminus \overline{\Gamma}_D} |\partial P_k \cap \Gamma_{Rob}| F_{k, \Gamma_{Rob}} c_k &= \frac{1}{2} \sum_{k \in \overline{\Gamma}_{Rob} \setminus \overline{\Gamma}_D} |\partial P_k \cap \Gamma_{Rob}| \lambda_k c_k^2.
\end{aligned} \tag{5.30}$$

On peut donc réécrire (5.29) comme

$$\begin{aligned}
-\left(\nabla_h^{T,P} \cdot (\mathbf{K}\nabla_h c - \mathbf{b}c), c\right)_{T,P} &\geq (\mathbf{K}\nabla_h c, \nabla_h c)_{\mathcal{D}} + \frac{1}{2}(\nabla_h^{T,P} \cdot \mathbf{b}, c^2)_{T,P} \\
&\quad + \frac{1}{2} \sum_{A_j \subset \Gamma_{Rob}} |A_j| \left(\lambda_j - \frac{(\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_{i_1 j}}{2}\right) c_{\sigma_j}^2 \\
&\quad + \frac{1}{2} \sum_{k \in \dot{\Gamma}_{Rob}} |\partial P_k \cap \Gamma_{Rob}| \left(\lambda_k - \frac{(\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_k}{2}\right) c_k^2 \\
&\quad + \frac{1}{2} \sum_{\substack{A_j \subset \Gamma_{Rob} \\ k \in \Gamma_{Rob} \cap \Gamma_N}} |\partial P_k \cap \Gamma_{Rob}| \left(\lambda_k - \frac{(\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_{j,k}}{2}\right) c_k^2
\end{aligned} \tag{5.31}$$

en utilisant la condition de Dirichlet $c_k = 0$ lorsque $k \in \overline{\Gamma}_D$.

Avec l'hypothèse (5.17) sur les paramètres de Robin λ_j et λ_k

$$\begin{aligned}
\lambda_j &\geq \frac{(\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_{i_1 j}}{2} \quad \forall A_j \subset \Gamma_{Rob}, \\
\lambda_k &\geq \frac{(\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_k}{2} \quad \forall k \in \dot{\Gamma}_{Rob} \quad \text{et} \quad \lambda_k \geq \frac{(\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_{j,k}}{2} \quad \forall k \in \Gamma_{Rob} \cap \Gamma_N,
\end{aligned} \tag{5.32}$$

et en remarquant que les trois dernières lignes sont positives, nous pouvons conclure à la positivité de $\left(-\nabla_h^{T,P} \cdot (\mathbf{K}\nabla_h c - \mathbf{b}c), c\right)_{T,P}$ pour le schéma local avec une interface de Robin. \square

Ayant montré que les problèmes discrets monodomaine et multidomaine étaient bien posés, nous montrons à présent l'identité des solutions associées à chacun de ces problèmes.

5.4 Du multidomaine au monodomaine

Dans le chapitre 4, nous avons démontré dans le théorème 4.9 l'existence et l'unicité de la solution pour le problème discret monodomaine défini sur Ω par (4.14) - (4.30). Nous avons introduit le problème multidomaine au niveau continu (paragraphe 5.1) avant de définir le problème discret associé à partir du schéma monodomaine (paragraphe 5.2) et de montrer l'existence et l'unicité de la solution du problème discret multidomaine sur Ω_L ou Ω_R (paragraphe 5.3). Nous avons donc définis deux schémas admettant chacun une solution unique, l'une sur Ω et l'autre sur Ω_L ou Ω_R . Reste donc à montrer que le schéma discret monodomaine est équivalent au schéma discret multidomaine sur $\Omega = \Omega_L \cup \Omega_R$, autrement dit que la solution discrète associée au schéma monodomaine est identique sur Ω à la solution discrète associée au schéma multidomaine. Pour cela, nous montrerons d'une part que la solution multidomaine sur les points de l'interface $\Gamma_{Rob} = \Omega_L \cap \Omega_R$ est identique dans l'un ou l'autre sous-domaine Ω_L ou Ω_R et d'autre part que le vecteur des solutions multidomaine sur Ω_L et Ω_R ainsi recollées à l'interface vérifie les équations monodomaine.

L'interface Γ_{Rob} se situant au niveau des arêtes primales, le maillage primal du problème local est exactement le même que le maillage primal du problème global, restreint seulement au sous-domaine considéré. Cela reste vrai pour des maillages non conformes car, dans ce cas, chacun des points des maillages locaux est aussi un point du maillage global, ayant comme conséquence que chaque arête primale A_j sur l'interface Γ_{Rob} correspond à une arête dans les maillages locaux et dans le maillage global (Figure 5.2).

L'équation résolue sur chacune des cellules primales est donc la même pour le problème monodomaine et pour le problème multidomaine. Il reste simplement à vérifier la continuité de la solution sur l'interface ($c_{\sigma_j}^L = c_{\sigma_j}^R$, $\forall j : A_j \subset \Gamma_{Rob}$) ainsi que la continuité des flux ($F_{i_1j}^{L,n} = -F_{i_1j}^{R,n}$).

En ajoutant les membres croisés des deux équations de la condition de Robin écrite à convergence sur les arêtes primales $A_j \subset \Gamma_{Rob}$:

$$\begin{aligned} F_{i_1j}^{L,n} + \lambda_j^L c_{\sigma_j}^{L,n} &= -F_{i_1j}^{R,n} + \lambda_j^L c_{\sigma_j}^{R,n} & \forall j : A_j \subset \Gamma_{Rob}, \forall n \\ F_{i_1j}^{R,n} + \lambda_j^R c_{\sigma_j}^{R,n} &= -F_{i_1j}^{L,n} + \lambda_j^R c_{\sigma_j}^{L,n} & \forall j : A_j \subset \Gamma_{Rob}, \forall n, \end{aligned} \quad (5.33)$$

nous obtenons

$$(\lambda_j^L + \lambda_j^R) c_{\sigma_j}^{L,n} = (\lambda_j^L + \lambda_j^R) c_{\sigma_j}^{R,n},$$

d'où

$$c_{\sigma_j}^{L,n} = c_{\sigma_j}^{R,n} \quad \forall j : A_j \subset \Gamma_{Rob}, \forall n.$$

En utilisant cette égalité dans l'une des deux équations de (5.33), il vient l'égalité des flux

$$F_{i_1j}^{L,n} = -F_{i_1j}^{R,n} \quad \forall j : A_j \subset \Gamma_{Rob}, \forall n,$$

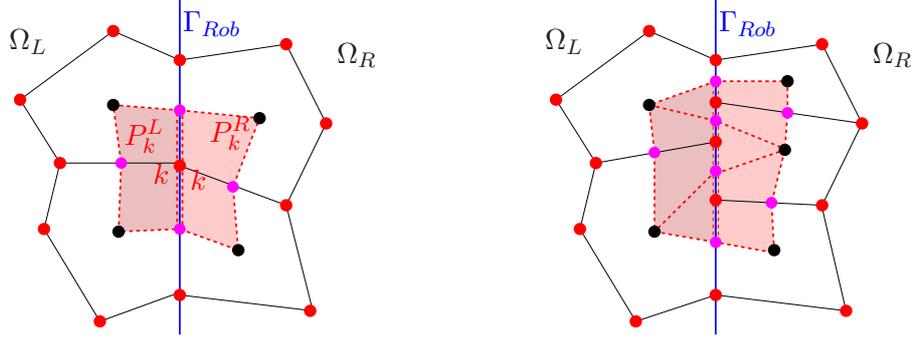


FIGURE 5.2 – Cellules duales de bord P_k^L (rose foncé) et P_k^R (rose clair) à l'interface Γ_{Rob} . Sous-figure de gauche : en monodomaine, la cellule duale associée au point k est la réunion des deux cellules duales de bord $P_k^L \cup P_k^R$. Sous-figure de droite : dans le cas d'un maillage non conforme, les deux maillages correspondant aux sous-domaines Ω_L et Ω_R ont en commun, sur l'interface, toutes les arêtes primales prises une à une et les sommets correspondants (points rouges), centres de mailles duales de bord.

qui correspond à la continuité du flux écrite sur chacune des arêtes primales intérieures.

Le traitement sur les mailles duales demande un peu plus d'attention puisque l'interface Γ_{Rob} divise certaines cellules duales P_k du domaine global Ω en deux sous-cellules duales, engendrant ainsi deux mailles duales de bord : l'une P_k^L sur Ω_L et l'autre P_k^R sur Ω_R telles que $P_k^L \cup P_k^R = P_k$ (voir figure 5.2).

Rappelons la condition de Robin à convergence, sur chaque frontière $\partial P_k^L \cap \Gamma_{Rob} = \partial P_k^R \cap \Gamma_{Rob}$:

$$\begin{aligned} F_{k,\Gamma_{Rob}}^{L,n} + \lambda_k^L c_k^{L,n} &= -F_{k,\Gamma_{Rob}}^{R,n} + \lambda_k^R c_k^{R,n} & \forall k \in \partial P_k^L \cap \Gamma_{Rob}, \forall n \\ F_{k,\Gamma_{Rob}}^{R,n} + \lambda_k^R c_k^{R,n} &= -F_{k,\Gamma_{Rob}}^{L,n} + \lambda_k^L c_k^{L,n} & \forall k \in \partial P_k^R \cap \Gamma_{Rob}, \forall n \end{aligned} \quad (5.34)$$

En ajoutant les membres croisés des deux égalités de (5.34), nous avons là encore

$$c_k^{L,n} = c_k^{R,n} \text{ (noté simplement } c_k^n),$$

et donc également

$$F_{k,\Gamma_{Rob}}^{L,n} = -F_{k,\Gamma_{Rob}}^{R,n} \quad \forall k \in \partial P_k^L \cap \Gamma_{Rob}, \forall n.$$

Montrons à présent que la somme de l'équation associée à la maille duale de bord P_k^L et de celle associée à P_k^R redonne l'équation associée à la maille duale P_k coupée par l'interface Γ_{Rob} .

Sur P_k^L et P_k^R , nous avons respectivement :

$$\begin{aligned} \omega_k^L \frac{c_k^{L,n} - c_k^{L,n-1}}{\Delta t_n} - \frac{1}{|P_k^L|} \sum_{A'_{j,\alpha} \subset \partial P_k^L} |A'_{j,\alpha}| F_{k_j,\alpha}^{L,n} \\ - \frac{1}{|P_k^L|} \left(\sum_{A_j \supset \partial P_k^L \cap \Gamma_N^L} \frac{|A_j|}{2} F_{i1j,k}^{L,n} + |\partial P_k^L \cap \Gamma_{Rob}| F_{k,\Gamma_{Rob}}^{L,n} \right) = f_k^{L,n}, \end{aligned} \quad (5.35)$$

et

$$\begin{aligned} & \omega_k^R \frac{c_k^{R,n} - c_k^{R,n-1}}{\Delta t_n} - \frac{1}{|P_k^R|} \sum_{A'_{j,\alpha} \subset \partial P_k^R} |A'_{j,\alpha}| F_{kj,\alpha}^{R,n} \\ & - \frac{1}{|P_k^R|} \left(\sum_{A_j \supset \partial P_k^R \cap \Gamma_N^R} \frac{|A_j|}{2} F_{i1j,k}^{R,n} + |\partial P_k^R \cap \Gamma_{Rob}| F_{k,\Gamma_{Rob}}^{R,n} \right) = f_k^{R,n}. \end{aligned} \quad (5.36)$$

En multipliant (5.35) par $|P_k^L|$ et (5.36) par $|P_k^R|$, puis en sommant ces deux expressions et en utilisant l'égalité $c_k^{L,n} = c_k^{R,n} = c_k^n$, on trouve

$$\begin{aligned} & (|P_k^L| \omega_k^L + |P_k^R| \omega_k^R) \frac{c_k^{L,n} - c_k^{L,n-1}}{\Delta t_n} \\ & - \sum_{A'_{j,\alpha} \subset \partial P_k^L} |A'_{j,\alpha}| F_{kj,\alpha}^{L,n} - \sum_{A'_{j,\alpha} \subset \partial P_k^R} |A'_{j,\alpha}| F_{kj,\alpha}^{R,n} \\ & - \sum_{A_j \supset \partial P_k^L \cap \Gamma_N^L} \frac{|A_j|}{2} F_{i1j,k}^{L,n} - \sum_{A_j \supset \partial P_k^R \cap \Gamma_N^R} \frac{|A_j|}{2} F_{i1j,k}^{R,n} \\ & - |\partial P_k^L \cap \Gamma_{Rob}| (F_{k,\Gamma_{Rob}}^{L,n} + F_{k,\Gamma_{Rob}}^{R,n}) = |P_k^L| f_k^{L,n} + |P_k^R| f_k^{R,n}. \end{aligned} \quad (5.37)$$

D'après la définition (4.16) de ω_k sur P_k , on conclut déjà que

$$|P_k^L| \omega_k^L + |P_k^R| \omega_k^R = |P_k| \omega_k.$$

Aussi, puisque $F_{k,\Gamma_{Rob}}^{L,n} = -F_{k,\Gamma_{Rob}}^{R,n}$, alors le dernier terme du membre de gauche de (5.37) est nul. L'expression (5.37) devient donc

$$\begin{aligned} & |P_k| \omega_k \frac{c_k^n - c_k^{n-1}}{\Delta t_n} - \sum_{A'_{j,\alpha} \subset \partial P_k^L} |A'_{j,\alpha}| F_{kj,\alpha}^{L,n} - \sum_{A'_{j,\alpha} \subset \partial P_k^R} |A'_{j,\alpha}| F_{kj,\alpha}^{R,n} \\ & - \sum_{A_j \supset \partial P_k^L \cap \Gamma_N^L} \frac{|A_j|}{2} F_{i1j,k}^{L,n} - \sum_{A_j \supset \partial P_k^R \cap \Gamma_N^R} \frac{|A_j|}{2} F_{i1j,k}^{R,n} = |P_k^L| f_k^{L,n} + |P_k^R| f_k^{R,n}. \end{aligned} \quad (5.38)$$

Ecrivons maintenant l'équation résolue sur la maille duale P_k du domaine global :

$$\begin{aligned} & |P_k| \omega_k \frac{c_k^n - c_k^{n-1}}{\Delta t_n} - \sum_{A'_{j,\alpha} \subset \partial P_k} |A'_{j,\alpha}| F_{kj,\alpha}^n \\ & - \sum_{A_j \supset \partial P_k \cap \Gamma_N} \frac{|A_j|}{2} F_{i1j,k}^n = |P_k| f_k. \end{aligned} \quad (5.39)$$

Les deux sommes de la deuxième ligne de (5.38) regroupent les flux sur toutes les arêtes duales intérieures de P_k , d'où

$$- \sum_{A'_{j,\alpha} \subset \partial P_k^L} |A'_{j,\alpha}| F_{kj,\alpha}^{L,n} - \sum_{A'_{j,\alpha} \subset \partial P_k^R} |A'_{j,\alpha}| F_{kj,\alpha}^{R,n} = - \sum_{A'_{j,\alpha} \subset \partial P_k} |A'_{j,\alpha}| F_{kj,\alpha}^n.$$

Quant au flux $F_{i1j,k}^n$ sur le bord de Neumann $\partial P_k \cap \Gamma_N$, union de deux demi-arêtes de bord issues du noeud k , il doit être décomposé en son flux diffusif et son flux convectif. Lorsque ces flux sont définis par demi-arêtes, il devient facile de voir qu'en

ajoutant la contribution des flux $F_{i_1j,k}^{L,n}$ et $F_{i_1j,k}^{R,n}$ de chacun des deux sous-domaines (les deux sommes de la deuxième ligne de (5.38)), on retrouve exactement le même flux $F_{i_1j,k}^n$ monodomaine (troisième terme de (5.39)). Si le flux diffusif est toujours défini sur les demi-arêtes issues de k , il n'en est pas de même du flux convectif. Cependant, même dans le cas où un unique flux convectif $(\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_k$ (monodomaine) est défini sur $\partial P_k \cap \Gamma_N$, les flux convectifs (multidomaine) définis sur $\partial P_k^L \cap \Gamma_N^L$ et $\partial P_k^R \cap \Gamma_N^R$ peuvent être toujours choisis de telle sorte que le flux convectif monodomaine soit exactement la somme des flux multidomaine. On pourra se reporter à la discussion faite précédemment, dans le paragraphe 5.2.

Par conséquent, à la condition que

$$|P_k^L|f_k^{L,n} + |P_k^R|f_k^{R,n} = |P_k|f_k^n \quad \forall k \in \partial P_k^L \cap \Gamma_{Rob}, \quad \forall n, \quad (5.40)$$

les équations résolues sur le maillage dual sont équivalentes en monodomaine et en multidomaine, ayant montré au préalable que $c_k^{L,n} = c_k^{R,n} = c_k^n$. La conclusion étant la même sur le maillage primal, nous pouvons conclure, sous l'hypothèse (5.40), que la solution du schéma multidomaine est identique à la solution du schéma monodomaine.

Notons que la condition (5.40) est vérifiée en prenant pour f_k la valeur moyenne de f sur P_k , $\frac{1}{|P_k|} \int_{P_k} f$, et de la même manière pour f_k^L et f_k^R . C'est ainsi que nous calculons le second membre dans la pratique.

Chapitre 6

L'algorithme de Schwarz optimisé de type relaxation d'ondes pour le schéma DDFV

Sommaire

6.1	Rappel de l'algorithme de Schwarz continu	128
6.2	L'algorithme de Schwarz discret pour le problème mul- tidomaine discret	129
6.2.1	Présentation de l'algorithme	129
6.2.2	Convergence de l'algorithme discret de Schwarz de type relaxation d'ondes	130

L'idée de l'algorithme itératif de Schwarz est de ramener la résolution du problème monodomaine (sur le domaine global Ω) à la résolution de sous-problèmes locaux (sur Ω_L et Ω_R), avec pour contre-partie d'échanger des données à l'interface entre les sous-domaines, via les conditions de transmission, aussi appelées conditions d'interface. Ces conditions doivent être telles que les problèmes locaux dans chaque sous-domaine soient bien posés et telles que l'algorithme converge vers la solution monodomaine.

Dans ce qui précède, nous avons montré que le problème discret multidomaine défini dans le chapitre 5, avec des conditions limites de type Dirichlet et Neumann et les conditions d'interface Robin (5.4), était bien posé et équivalent au problème discret monodomaine défini dans le chapitre 4.

La formulation discrète multidomaine est résolue par un algorithme itératif de Schwarz de type relaxation d'ondes. La convergence de l'algorithme par estimation d'énergie est donnée au niveau continu et en semi-discret en temps dans [56]. Nous introduisons dans la suite l'algorithme discret DDFV pour le problème de convection-diffusion pour lequel nous démontrons la convergence pour le schéma espace-temps par estimation d'énergie.

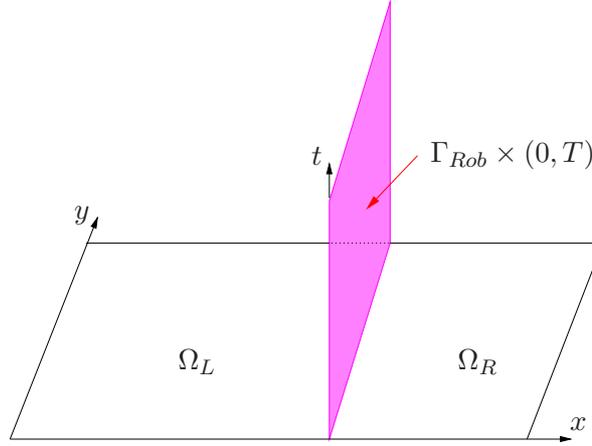


FIGURE 6.1 – Configuration avec deux sous-domaine Ω_L et Ω_R et l'interface espace-temps $\Gamma_{Rob} \times (0, T)$ sur laquelle sont définis les opérateurs d'interface \mathcal{B}_L et \mathcal{B}_R .

6.1 Rappel de l'algorithme de Schwarz continu

L'algorithme itératif de Schwarz de type relaxation d'ondes, dans sa version parallèle, est initialement écrit à partir du problème multidomaine continu (5.2) associé aux conditions d'interface de Robin (5.4) de la manière suivante :

$$\left\{ \begin{array}{ll} \mathcal{L}_L c^{L(\ell+1)} = f|_{\Omega_L} & \text{dans } \Omega_L \times (0, T) \\ c^{L(\ell+1)}(\cdot, 0) = c_0|_{\Omega_L} & \text{dans } \Omega_L \\ c^{L(\ell+1)} = 0 & \text{sur } \Gamma_D^L \times (0, T) \\ \mathbf{K}^L \nabla c^{L(\ell+1)} \cdot \mathbf{n}^L = 0 & \text{sur } \Gamma_N^L \times (0, T) \\ \mathcal{B}_L(\mathbf{K}^L, \mathbf{b}^L) c^{L(\ell+1)} = \mathcal{B}_L(\mathbf{K}^R, \mathbf{b}^R) c^{R(\ell)} & \text{sur } \Gamma_{Rob} \times (0, T) \end{array} \right. \quad (6.1)$$

$$\left\{ \begin{array}{ll} \mathcal{L}_R c^{R(\ell+1)} = f|_{\Omega_R} & \text{dans } \Omega_R \times (0, T) \\ c^{R(\ell+1)}(\cdot, 0) = c_0|_{\Omega_R} & \text{dans } \Omega_R \\ c^{R(\ell+1)} = 0 & \text{sur } \Gamma_D^R \times (0, T) \\ \mathbf{K}^R \nabla c^{R(\ell+1)} \cdot \mathbf{n}^R = 0 & \text{sur } \Gamma_N^R \times (0, T) \\ \mathcal{B}_R(\mathbf{K}^R, \mathbf{b}^R) c^{R(\ell+1)} = \mathcal{B}_R(\mathbf{K}^L, \mathbf{b}^L) c^{L(\ell)} & \text{sur } \Gamma_{Rob} \times (0, T), \end{array} \right. \quad (6.2)$$

l'algorithme étant initialisé sur l'interface par

$$g^L = \mathcal{B}_L(\mathbf{K}^R, \mathbf{b}^R) c^{R(0)} \quad (6.3)$$

$$g^R = \mathcal{B}_R(\mathbf{K}^L, \mathbf{b}^L) c^{L(0)} \quad (6.4)$$

donnés dans $L^2(0, T; L^2(\Gamma_{Rob}))$. De plus, on rappelle que

$$\mathcal{L}_S c^S = \omega^S \partial_t c^S - \nabla \cdot (\mathbf{K}^S \nabla c^S - \mathbf{b}^S c^S), \quad (6.5)$$

$$\mathcal{B}_L(\mathbf{K}^S, \mathbf{b}^S) c^S = (\mathbf{K}^S \nabla c^S - \mathbf{b}^S c^S) \cdot \mathbf{n}^L + \lambda^L c^S, \quad (6.6)$$

$$\mathcal{B}_R(\mathbf{K}^S, \mathbf{b}^S) c^S = (\mathbf{K}^S \nabla c^S - \mathbf{b}^S c^S) \cdot \mathbf{n}^R + \lambda^R c^S, \quad (6.7)$$

en notant S l'exposant L ou R lorsqu'il est indifféremment l'un ou l'autre.

Le caractère bien posé du problème continu pour l'équation de convection-diffusion a été montré au niveau continu dans [56] où l'on trouve aussi la preuve de la convergence de l'algorithme de Schwarz de type relaxation d'ondes associé au problème continu (6.1) - (6.7).

Ainsi, étant donné le second membre f , la condition initiale c_0 et la valeur initiale g^L (resp. g^R) sur l'interface espace-temps $\Gamma_{Rob} \times (0, T)$ (voir Figure 6.1), l'algorithme (6.1) - (6.2) calcule en parallèle la solution $c^{L(1)}$ et $c^{R(1)}$ (itération 1) sur $\Omega_L \times (0, T)$ et $\Omega_R \times (0, T)$. La solution obtenue sur chaque sous-domaine permet de calculer $\mathcal{B}_R c^{L(1)}$ (resp. $\mathcal{B}_L c^{R(1)}$) contenant les données de l'interface espace-temps, à échanger au domaine voisin. La solution peut alors être calculée à l'itération suivante. Le processus est ainsi répété jusqu'à convergence.

Nous présentons ci-après l'algorithme discret de Schwarz de relaxation d'ondes pour le schéma multidomaine DDFV.

6.2 L'algorithme de Schwarz discret pour le problème multidomaine discret

Au lieu d'être appliqué à l'EDP continue (5.1) avec les opérateurs d'interface $\mathcal{B}_L c = (\mathbf{K} \nabla c - \mathbf{b}c) \cdot \mathbf{n}^L + \lambda^L c$ et $\mathcal{B}_R c = (\mathbf{K} \nabla c - \mathbf{b}c) \cdot \mathbf{n}^R + \lambda^R c$, l'algorithme (6.1) - (6.2) est appliqué au schéma DDFV pour le problème local défini dans la section 5.2 avec les conditions discrétisées de Robin (5.8) et (5.15).

6.2.1 Présentation de l'algorithme

Soient, à l'itération initiale ($\ell = 0$) de l'algorithme de Schwarz, $(g_{\sigma_j}^{S,n}$ et $g_k^{S,n})$ les valeurs discrètes de g^S sur le domaine Ω_S aux noeuds σ_j et k pour tout temps t_n . La solution à l'itération ($\ell = 1$) peut alors être calculée.

Donnons le passage d'une itération quelconque (ℓ) à la suivante. Etant donné à l'itération (ℓ), pour tout temps t_n :

- $(c_{i_1}^{S,n(\ell)}, c_k^{S,n(\ell)}, c_{\sigma_j}^{S,n(\ell)})$ les valeurs discrètes de c sur le domaine Ω_S aux noeuds i_1, k, σ_j ,
- $(F_{i_1 j}^{S,n(\ell)}, F_{k j, \alpha}^{S,n(\ell)}, F_{i_1 j, k}^{S,n(\ell)}, F_{k, \Gamma_{Rob}}^{S,n(\ell)})$ les flux discrets définis respectivement sur les arêtes primales A_j , les arêtes duales intérieures $A'_{j, \alpha}$, les arêtes duales de bord Neumann $[\sigma_j, k] \subset \Gamma_N^S$, et la frontière des mailles duales de bord Robin $\partial P_k^S \cap \Gamma_{Rob}$,

on calcule à l'itération ($\ell + 1$) de l'algorithme :

- la solution discrète $(c_{i_1}^{S,n(\ell+1)}, c_k^{S,n(\ell+1)}, c_{\sigma_j}^{S,n(\ell+1)})$ pour tout temps t_n ,
- les flux discrets $(F_{i_1 j}^{S,n(\ell+1)}, F_{k j, \alpha}^{S,n(\ell+1)}, F_{i_1 j, k}^{S,n(\ell+1)}, F_{k, \Gamma_{Rob}}^{S,n(\ell+1)})$ pour tout t_n ,

en utilisant le schéma discret défini par (5.6) - (5.15) et les équations d'interface de Robin suivantes :

$$\begin{aligned} F_{i_1 j}^{L,n(\ell+1)} + \lambda_j^L c_{\sigma_j}^{L,n(\ell+1)} &= -F_{i_1 j}^{R,n(\ell)} + \lambda_j^L c_{\sigma_j}^{R,n(\ell)} & \forall j : A_j \subset \Gamma_{Rob} \\ F_{k, \Gamma_{Rob}}^{L,n(\ell+1)} + \lambda_k^L c_k^{L,n(\ell+1)} &= -F_{k, \Gamma_{Rob}}^{R,n(\ell)} + \lambda_k^L c_k^{R,n(\ell)} & \forall k \in \Gamma_{Rob} \end{aligned} \quad (6.8)$$

et

$$\begin{aligned} F_{i_1j}^{R,n(\ell+1)} + \lambda_j^R c_{\sigma_j}^{R,n(\ell+1)} &= -F_{i_1j}^{L,n(\ell)} + \lambda_j^R c_{\sigma_j}^{L,n(\ell)} & \forall j : A_j \subset \Gamma_{Rob} \\ F_{k,\Gamma_{Rob}}^{R,n(\ell+1)} + \lambda_k^R c_k^{R,n(\ell+1)} &= -F_{k,\Gamma_{Rob}}^{L,n(\ell)} + \lambda_k^R c_k^{L,n(\ell)} & \forall k \in \Gamma_{Rob}. \end{aligned} \quad (6.9)$$

Montrons maintenant la convergence de l'algorithme itératif de Schwarz de type relaxation d'ondes pour le problème discret en espace et en temps, défini ci-dessus, dans le cas d'une grille conforme en temps.

6.2.2 Convergence de l'algorithme discret de Schwarz de type relaxation d'ondes

Théorème 6.1. *Supposons une grille conforme en temps. Soient \mathbf{K}^L (resp. \mathbf{K}^R) la matrice de diffusion symétrique définie positive, \mathbf{b}^L (resp. \mathbf{b}^R) la vitesse de convection de composante normale positive sur le bord Γ_N^L (resp. Γ_N^R), vérifiant de plus $\nabla_h^{T,P} \cdot \mathbf{b}^L \geq 0$ (resp. $\nabla_h^{T,P} \cdot \mathbf{b}^R \geq 0$).*

Si, de plus,

$$\left\{ \begin{array}{ll} \lambda_j^L \geq \frac{1}{2}(\mathbf{b}^L \cdot \mathbf{n}^L)_{i_1j} & \text{et } \lambda_j^R \geq \frac{1}{2}(\mathbf{b}^R \cdot \mathbf{n}^R)_{i_1j} & \forall j : A_j \subset \Gamma_{Rob} \\ \lambda_k^L \geq \frac{1}{2}(\mathbf{b}^L \cdot \mathbf{n}^L)_k & \text{et } \lambda_{k^R} \geq \frac{1}{2}(\mathbf{b}^R \cdot \mathbf{n}^R)_k & \forall k \in \Gamma_{Rob} \\ \lambda_k^L \geq \frac{1}{2}(\mathbf{b}^L \cdot \mathbf{n}^L)_{j,k} & \text{et } \lambda_k^R \geq \frac{1}{2}(\mathbf{b}^R \cdot \mathbf{n}^R)_{j,k} & \forall k \in \Gamma_{Rob} \cap \Gamma_N \end{array} \right. \quad (6.10)$$

et

$$\left\{ \begin{array}{ll} \lambda_j^R - \lambda_j^L - (\mathbf{b}^L \cdot \mathbf{n}^L)_{i_1j} = 0 & \forall j : A_j \subset \Gamma_{Rob} \\ \lambda_k^R - \lambda_k^L - (\mathbf{b}^L \cdot \mathbf{n}^L)_k = 0 & \forall k \in \Gamma_{Rob} \\ \lambda_k^R - \lambda_k^L - (\mathbf{b}^L \cdot \mathbf{n}^L)_{j,k} = 0 & \forall k \in \Gamma_{Rob} \cap \Gamma_N, \end{array} \right. \quad (6.11)$$

alors l'algorithme de Schwarz de type relaxation d'ondes converge vers la solution du problème multidomaine discret défini par les expressions (5.6) - (5.15).

Démonstration. La preuve de ce théorème s'appuie sur [56] qui traite la convergence de l'algorithme pour le problème de convection-diffusion semi-discret en temps avec le même schéma Galerkin Discontinu en temps.

Notons $e^{L(\ell)} = c^{L(\ell)} - c^L$ (resp. $e^{R(\ell)} = c^{R(\ell)} - c^R$) l'erreur entre la solution discrète à l'itération ℓ de l'algorithme et la solution du problème multidomaine discret sur Ω_L (resp. Ω_R) donné par les expressions (5.6) - (5.15).

La méthode de Galerkin discontinu en temps (voir partie I, chapitre 1, paragraphe 1.1) permet d'écrire d'après [94] :

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_t(\mathcal{I}^L E^{L(\ell)}) - \nabla_h \cdot (\mathbf{K}^L \nabla_h E^{L(\ell)} - \mathbf{b}^L E^{L(\ell)}) = 0 \\ \partial_t(\mathcal{I}^R E^{R(\ell)}) - \nabla_h \cdot (\mathbf{K}^R \nabla_h E^{R(\ell)} - \mathbf{b}^R E^{R(\ell)}) = 0, \end{array} \right. \quad (6.12)$$

où E^L désigne l'approximation polynomiale en temps (de degré quelconque d) sur chaque sous intervalle I_n de l'erreur e^L et \mathcal{I}^L (resp. \mathcal{I}^R) est l'opérateur d'interpolation polynomiale de degré $d + 1$ défini dans Ω_L (resp. Ω_R) tel que $\mathcal{I}^L E^L(t_n) = E^L(t_n^-)$.

D'autre part, notons

$$\psi_{i_1j}^{L(\ell)} = F_{i_1j}^{L(\ell)} - F_{i_1j}^L \quad (\text{resp. } \psi_{i_1j}^{R(\ell)} = F_{i_1j}^{R(\ell)} - F_{i_1j}^R),$$

la différence entre le flux primal discret à l'itération ℓ de l'algorithme et le flux primal $F_{i_1j}^L$ (resp. $F_{i_1j}^R$) du problème multidomaine discret sur Ω_L (resp. Ω_R) défini par (5.7). Nous notons de même

$$\phi_{k,\Gamma_{Rob}}^{L(\ell)} = F_{k,\Gamma_{Rob}}^{L(\ell)} - F_{k,\Gamma_{Rob}}^L \quad (\text{resp. } \phi_{k,\Gamma_{Rob}}^{R(\ell)} = F_{k,\Gamma_{Rob}}^{R(\ell)} - F_{k,\Gamma_{Rob}}^R),$$

la différence entre le flux dual à l'itération ℓ de l'algorithme et le flux dual $F_{k,\Gamma_{Rob}}^L$ (resp. $F_{k,\Gamma_{Rob}}^R$) à travers $\partial P_k^L \cap \Gamma_{Rob}$ du problème multidomaine discret sur Ω_L (resp. Ω_R) défini par (5.13).

On peut alors écrire les équations d'interface de Robin (6.8) et (6.9) comme

$$\begin{aligned} \psi_{i_1j}^{L(\ell+1)} + \lambda_j^L E_{\sigma_j}^{L(\ell+1)} &= -\psi_{i_1j}^{R(\ell)} + \lambda_j^L E_{\sigma_j}^{R(\ell)} & \forall j : A_j \subset \Gamma_{Rob} \\ \phi_{k,\Gamma_{Rob}}^{L(\ell+1)} + \lambda_k^L E_k^{L(\ell+1)} &= -\phi_{k,\Gamma_{Rob}}^{R(\ell)} + \lambda_k^L E_k^{R(\ell)} & \forall k \in \bar{\Gamma}_{Rob}, \end{aligned} \quad (6.13)$$

et

$$\begin{aligned} \psi_{i_1j}^{R(\ell+1)} + \lambda_j^R E_{\sigma_j}^{R(\ell+1)} &= -\psi_{i_1j}^{L(\ell)} + \lambda_j^R E_{\sigma_j}^{L(\ell)} & \forall j : A_j \subset \Gamma_{Rob} \\ \phi_{k,\Gamma_{Rob}}^{R(\ell+1)} + \lambda_k^R E_k^{R(\ell+1)} &= -\phi_{k,\Gamma_{Rob}}^{L(\ell)} + \lambda_k^R E_k^{L(\ell)} & \forall k \in \bar{\Gamma}_{Rob}. \end{aligned} \quad (6.14)$$

Sur Ω_L , l'équation homogène (6.12) combinée avec l'inégalité (5.29) devient

$$\begin{aligned} &\partial_t \left(\mathcal{I}^L E^{L(\ell+1)}, E^{L(\ell+1)} \right)_{T,P} \\ &+ \left(\mathbf{K}^L \nabla_h E^{L(\ell+1)}, \nabla_h E^{L(\ell+1)} \right)_{\mathcal{D}} + \frac{1}{2} \left(\nabla_h^{T,P} \cdot \mathbf{b}^L, (E^{L(\ell+1)})^2 \right)_{T,P} \\ &\leq \frac{1}{2} \sum_{A_j \subset \Gamma_{Rob}} |A_j| \left(\psi_{i_1j}^{L(\ell+1)} + \frac{1}{2} (\mathbf{b}^L \cdot \mathbf{n}^L)_{i_1j} E_{\sigma_j}^{L(\ell+1)} \right) E_{\sigma_j}^{L(\ell+1)} \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{k \in \bar{\Gamma}_{Rob}} |\partial P_k \cap \Gamma_{Rob}| \left(\phi_{k,\Gamma_{Rob}}^{L(\ell+1)} + \frac{1}{2} (\mathbf{b}^L \cdot \mathbf{n}^L)_k E_k^{L(\ell+1)} \right) E_k^{L(\ell+1)}. \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{\substack{A_j \subset \Gamma_{Rob} \\ k \in \bar{\Gamma}_{Rob}}} |\partial P_k \cap \Gamma_{Rob}| \left(\phi_{k,\Gamma_{Rob}}^{L(\ell+1)} + \frac{1}{2} (\mathbf{b}^L \cdot \mathbf{n}^L)_{j,k} E_k^{L(\ell+1)} \right) E_k^{L(\ell+1)}. \end{aligned} \quad (6.15)$$

Les trois produits présents dans le membre de droite de (6.15) sont exprimés de telle sorte à faire apparaître les membres de gauche et de droite de la condition de Robin (6.13). En utilisant la formule

$$ab = \frac{1}{2(\lambda_1 + \lambda_2)} \left[(a + \lambda_1 b)^2 - (a - \lambda_2 b)^2 \right] - \frac{1}{2} (\lambda_1 - \lambda_2) b^2,$$

et en prenant $\psi_{i_1j}^{L(\ell+1)}$ (resp. $\phi_{k,\Gamma_{Rob}}^{L(\ell+1)}$) pour a et $E_{\sigma_j}^{L(\ell+1)}$ (resp. $E_k^{L(\ell+1)}$) pour b , il vient pour j tel que $A_j \subset \Gamma_{Rob}$:

$$\begin{aligned} &\left[\psi_{i_1j}^{L(\ell+1)} + \frac{1}{2} (\mathbf{b}^L \cdot \mathbf{n}^L)_{i_1j} E_{\sigma_j}^{L(\ell+1)} \right] E_{\sigma_j}^{L(\ell+1)} \\ &= \frac{1}{2(\lambda_j^L + \lambda_j^R)} \left[\left(\psi_{i_1j}^{L(\ell+1)} + \lambda_j^L E_{\sigma_j}^{L(\ell+1)} \right)^2 - \left(\psi_{i_1j}^{L(\ell+1)} - \lambda_j^R E_{\sigma_j}^{L(\ell+1)} \right)^2 \right] \\ &- \frac{1}{2} \left(\lambda_j^L - \lambda_j^R - (\mathbf{b}^L \cdot \mathbf{n}^L)_{i_1j} \right) \left(E_{\sigma_j}^{L(\ell+1)} \right)^2, \end{aligned} \quad (6.16)$$

pour $k \in \mathring{\Gamma}_{Rob}$:

$$\begin{aligned}
 & \left[\phi_{k,\Gamma_{Rob}}^{L(\ell+1)} + \frac{1}{2}(\mathbf{b}^L \cdot \mathbf{n}^L)_k E_k^{L(\ell+1)} \right] E_k^{L(\ell+1)} \\
 &= \frac{1}{2(\lambda_k^L + \lambda_k^R)} \left[\left(\phi_{k,\Gamma_{Rob}}^{L(\ell+1)} + \lambda_k^L E_k^{L(\ell+1)} \right)^2 - \left(\phi_{k,\Gamma_{Rob}}^{L(\ell+1)} - \lambda_k^R E_k^{L(\ell+1)} \right)^2 \right] \\
 & - \frac{1}{2} \left(\lambda_k^L - \lambda_k^R - (\mathbf{b}^L \cdot \mathbf{n}^L)_k \right) \left(E_k^{L(\ell+1)} \right)^2, \tag{6.17}
 \end{aligned}$$

et pour $k \in \Gamma_{Rob} \cap \Gamma_N$:

$$\begin{aligned}
 & \left[\phi_{k,\Gamma_{Rob}}^{L(\ell+1)} + \frac{1}{2}(\mathbf{b}^L \cdot \mathbf{n}^L)_{j,k} E_k^{L(\ell+1)} \right] E_k^{L(\ell+1)} \\
 &= \frac{1}{2(\lambda_k^L + \lambda_k^R)} \left[\left(\phi_{k,\Gamma_{Rob}}^{L(\ell+1)} + \lambda_k^L E_k^{L(\ell+1)} \right)^2 - \left(\phi_{k,\Gamma_{Rob}}^{L(\ell+1)} - \lambda_k^R E_k^{L(\ell+1)} \right)^2 \right] \\
 & - \frac{1}{2} \left(\lambda_k^L - \lambda_k^R - (\mathbf{b}^L \cdot \mathbf{n}^L)_{j,k} \right) \left(E_k^{L(\ell+1)} \right)^2. \tag{6.18}
 \end{aligned}$$

Réécrivons alors l'expression (6.15) en utilisant (6.16) - (6.18) :

$$\begin{aligned}
 & \partial_t \left(\mathcal{I}^L E^{L(\ell+1)}, E^{L(\ell+1)} \right)_{T,P} \\
 & + \left(\mathbf{K}^L \nabla_h E^{L(\ell+1)}, \nabla_h E^{L(\ell+1)} \right)_{\mathcal{D}} + \frac{1}{2} \left(\nabla_h^{T,P} \cdot \mathbf{b}^L, \left(E^{L(\ell+1)} \right)^2 \right)_{T,P} \\
 & + \sum_{A_j \subset \Gamma_{Rob}} \frac{|A_j|}{4(\lambda_j^L + \lambda_j^R)} \left[\left(\psi_{i_1 j}^{L(\ell+1)} - \lambda_j^R E_{\sigma_j}^{L(\ell+1)} \right)^2 \right] \\
 & + \sum_{k \in \overline{\Gamma}_{Rob}} \frac{|\partial P_k \cap \Gamma_{Rob}|}{4(\lambda_k^L + \lambda_k^R)} \left[\left(\phi_{k,\Gamma_{Rob}}^{L(\ell+1)} - \lambda_k^R E_k^{L(\ell+1)} \right)^2 \right] \\
 & \leq \sum_{A_j \subset \Gamma_{Rob}} \frac{|A_j|}{4(\lambda_j^L + \lambda_j^R)} \left[\left(\psi_{i_1 j}^{L(\ell+1)} + \lambda_j^L E_{\sigma_j}^{L(\ell+1)} \right)^2 \right] \\
 & + \sum_{k \in \overline{\Gamma}_{Rob}} \frac{|\partial P_k \cap \Gamma_{Rob}|}{4(\lambda_k^L + \lambda_k^R)} \left[\left(\phi_{k,\Gamma_{Rob}}^{L(\ell+1)} + \lambda_k^L E_k^{L(\ell+1)} \right)^2 \right] \\
 & - \frac{1}{4} \sum_{A_j \subset \Gamma_{Rob}} |A_j| \left(\lambda_j^L - \lambda_j^R - (\mathbf{b}^L \cdot \mathbf{n}^L)_{i_1 j} \right) \left(E_{\sigma_j}^{L(\ell+1)} \right)^2 \\
 & - \frac{1}{4} \sum_{k \in \mathring{\Gamma}_{Rob}} |\partial P_k \cap \Gamma_{Rob}| \left(\lambda_k^L - \lambda_k^R - (\mathbf{b}^L \cdot \mathbf{n}^L)_k \right) \left(E_k^{L(\ell+1)} \right)^2 \\
 & - \frac{1}{4} \sum_{\substack{A_j \subset \Gamma_{Rob} \\ k \in \overline{\Gamma}_{Rob}}} |\partial P_k \cap \Gamma_{Rob}| \left(\lambda_k^L - \lambda_k^R - (\mathbf{b}^L \cdot \mathbf{n}^L)_{j,k} \right) \left(E_k^{L(\ell+1)} \right)^2. \tag{6.19}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \partial_t \left(\mathcal{I}^R E^{R(\ell+1)}, E^{R(\ell+1)} \right)_{T,P} \\
& + \left(\mathbf{K}^R \nabla_h E^{R(\ell+1)}, \nabla_h E^{R(\ell+1)} \right)_{\mathcal{D}} + \frac{1}{2} \left(\nabla_h^{T,P} \cdot \mathbf{b}^R, \left(E^{R(\ell+1)} \right)^2 \right)_{T,P} \\
& + \sum_{A_j \subset \Gamma_{Rob}} \frac{|A_j|}{4(\lambda_j^L + \lambda_j^R)} \left[\left(\psi_{i1j}^{R(\ell+1)} - \lambda_j^R E_{\sigma_j}^{R(\ell+1)} \right)^2 \right] \\
& + \sum_{k \in \bar{\Gamma}_{Rob}} \frac{|\partial P_k \cap \Gamma_{Rob}|}{4(\lambda_k^L + \lambda_k^R)} \left[\left(\phi_{k,\Gamma_{Rob}}^{R(\ell+1)} - \lambda_k^R E_k^{R(\ell+1)} \right)^2 \right] \\
\leq & \sum_{A_j \subset \Gamma_{Rob}} \frac{|A_j|}{4(\lambda_j^L + \lambda_j^R)} \left[\left(\psi_{i1j}^{R(\ell+1)} + \lambda_j^R E_{\sigma_j}^{R(\ell+1)} \right)^2 \right] \\
& + \sum_{k \in \bar{\Gamma}_{Rob}} \frac{|\partial P_k \cap \Gamma_{Rob}|}{4(\lambda_k^L + \lambda_k^R)} \left[\left(\phi_{k,\Gamma_{Rob}}^{R(\ell+1)} + \lambda_k^R E_k^{R(\ell+1)} \right)^2 \right] \\
& - \frac{1}{4} \sum_{A_j \subset \Gamma_{Rob}} |A_j| \left(\lambda_j^R - \lambda_j^L - (\mathbf{b}^R \cdot \mathbf{n}^R)_{i1j} \right) \left(E_{\sigma_j}^{R(\ell+1)} \right)^2 \\
& - \frac{1}{4} \sum_{k \in \bar{\Gamma}_{Rob}} |\partial P_k \cap \Gamma_{Rob}| \left(\lambda_k^R - \lambda_k^L - (\mathbf{b}^R \cdot \mathbf{n}^R)_k \right) \left(E_k^{R(\ell+1)} \right)^2 \\
& - \frac{1}{4} \sum_{\substack{A_j \subset \Gamma_{Rob} \\ k \in \bar{\Gamma}_{Rob}}} |\partial P_k \cap \Gamma_{Rob}| \left(\lambda_k^R - \lambda_k^L - (\mathbf{b}^R \cdot \mathbf{n}^R)_{j,k} \right) \left(E_k^{R(\ell+1)} \right)^2.
\end{aligned} \tag{6.20}$$

Dans la suite, nous intégrons l'expression (6.19) et (6.20) sur $I_n = (t_{n-1}, t_n)$, en utilisant l'inégalité $\int_{I_n} \partial_t(\mathcal{I}E)E dt \geq \frac{1}{2} [E(t_n^-)^2 - E(t_{n-1}^-)^2]$ [78]. Nous obtenons donc sur Ω_L :

$$\begin{aligned}
& \|E^{L(\ell+1)}(t_n^L)\|_{T,P}^2 - \|E^{L(\ell+1)}(t_{n-1}^L)\|_{T,P}^2 \\
& + 2 \int_{I_n} \left(\mathbf{K}^L \nabla_h E^{L(\ell+1)}, \nabla_h E^{L(\ell+1)} \right)_{\mathcal{D}} + \int_{I_n} \left(\nabla_h^{T,P} \cdot \mathbf{b}^L, \left(E^{L(\ell+1)} \right)^2 \right)_{T,P} \\
& + \int_{I_n} \sum_{A_j \subset \Gamma_{Rob}} \frac{|A_j|}{2(\lambda_j^L + \lambda_j^R)} \left[\left(\psi_{i1j}^{L(\ell+1)} - \lambda_j^R E_{\sigma_j}^{L(\ell+1)} \right)^2 \right] \\
& + \int_{I_n} \sum_{k \in \bar{\Gamma}_{Rob}} \frac{|\partial P_k \cap \Gamma_{Rob}|}{2(\lambda_k^L + \lambda_k^R)} \left[\left(\phi_{k,\Gamma_{Rob}}^{L(\ell+1)} - \lambda_k^R E_k^{L(\ell+1)} \right)^2 \right] \\
\leq & \int_{I_n} \sum_{A_j \subset \Gamma_{Rob}} \frac{|A_j|}{2(\lambda_j^L + \lambda_j^R)} \left[\left(\psi_{i1j}^{L(\ell+1)} + \lambda_j^R E_{\sigma_j}^{L(\ell+1)} \right)^2 \right] \\
& + \int_{I_n} \sum_{k \in \bar{\Gamma}_{Rob}} \frac{|\partial P_k \cap \Gamma_{Rob}|}{2(\lambda_k^L + \lambda_k^R)} \left[\left(\phi_{k,\Gamma_{Rob}}^{L(\ell+1)} + \lambda_k^R E_k^{L(\ell+1)} \right)^2 \right] \\
& - \frac{1}{2} \int_{I_n} \sum_{A_j \subset \Gamma_{Rob}} |A_j| \left(\lambda_j^L - \lambda_j^R - (\mathbf{b}^L \cdot \mathbf{n}^L)_{i1j} \right) \left(E_{\sigma_j}^{L(\ell+1)} \right)^2 \\
& - \frac{1}{2} \int_{I_n} \sum_{k \in \bar{\Gamma}_{Rob}} |\partial P_k \cap \Gamma_{Rob}| \left(\lambda_k^L - \lambda_k^R - (\mathbf{b}^L \cdot \mathbf{n}^L)_k \right) \left(E_k^{L(\ell+1)} \right)^2 \\
& - \frac{1}{2} \int_{I_n} \sum_{\substack{A_j \subset \Gamma_{Rob} \\ k \in \bar{\Gamma}_{Rob}}} |\partial P_k \cap \Gamma_{Rob}| \left(\lambda_k^L - \lambda_k^R - (\mathbf{b}^L \cdot \mathbf{n}^L)_{j,k} \right) \left(E_k^{L(\ell+1)} \right)^2.
\end{aligned} \tag{6.21}$$

Puisque l'erreur E^L s'annule au temps initial $t_0 = 0$, la somme sur tous les intervalles en temps de la première ligne de (6.21) vaut $\|E^{L(\ell+1)}(T)\|_{T,P}^2$. De plus, la somme des intégrales sur I_n donne une intégrale sur $(0, T)$. Il peut être fait de même sur Ω_R . En sommant sur les sous-domaines, il vient

$$\begin{aligned}
& \|E^{L(\ell+1)}(T)\|_{T,P}^2 + \|E^{R(\ell+1)}(T)\|_{T,P}^2 \\
& + 2 \int_0^T \left(\mathbf{K}^L \nabla_h E^{L(\ell+1)}, \nabla_h E^{L(\ell+1)} \right)_{\mathcal{D}} + 2 \int_0^T \left(\mathbf{K}^R \nabla_h E^{R(\ell+1)}, \nabla_h E^{R(\ell+1)} \right)_{\mathcal{D}} \\
& + \int_0^T \left(\nabla_h^{T,P} \cdot \mathbf{b}^L, \left(E^{L(\ell+1)} \right)^2 \right)_{T,P} + \int_0^T \left(\nabla_h^{T,P} \cdot \mathbf{b}^R, \left(E^{R(\ell+1)} \right)^2 \right)_{T,P} \\
& + \int_0^T \sum_{A_j \subset \Gamma_{Rob}} \frac{|A_j|}{2(\lambda_j^L + \lambda_j^R)} \left[\left(\psi_{i1j}^{L(\ell+1)} - \lambda_j^R E_{\sigma_j}^{L(\ell+1)} \right)^2 + \left(\psi_{i1j}^{R(\ell+1)} - \lambda_j^L E_{\sigma_j}^{R(\ell+1)} \right)^2 \right] \\
& + \int_0^T \sum_{k \in \dot{\Gamma}_{Rob}} \frac{|\partial P_k \cap \Gamma_{Rob}|}{2(\lambda_k^L + \lambda_k^R)} \left[\left(\phi_{k,\Gamma_{Rob}}^{L(\ell+1)} - \lambda_k^R E_k^{L(\ell+1)} \right)^2 + \left(\phi_{k,\Gamma_{Rob}}^{R(\ell+1)} - \lambda_k^L E_k^{R(\ell+1)} \right)^2 \right] \\
& + \frac{1}{2} \int_0^T \sum_{A_j \subset \Gamma_{Rob}} |A_j| \left(\lambda_j^L - \lambda_j^R - (\mathbf{b}^L \cdot \mathbf{n}^L)_{i1j} \right) \left[\left(E_{\sigma_j}^{L(\ell+1)} \right)^2 - \left(E_{\sigma_j}^{R(\ell+1)} \right)^2 \right] \\
& + \frac{1}{2} \int_0^T \sum_{k \in \dot{\Gamma}_{Rob}} |\partial P_k \cap \Gamma_{Rob}| \left(\lambda_k^L - \lambda_k^R - (\mathbf{b}^L \cdot \mathbf{n}^L)_k \right) \left[\left(E_k^{L(\ell+1)} \right)^2 - \left(E_k^{R(\ell+1)} \right)^2 \right] \\
& + \frac{1}{2} \int_0^T \sum_{\substack{A_j \subset \Gamma_{Rob} \\ k \in \dot{\Gamma}_{Rob}}} |\partial P_k \cap \Gamma_{Rob}| \left(\lambda_k^L - \lambda_k^R - (\mathbf{b}^L \cdot \mathbf{n}^L)_{j,k} \right) \left[\left(E_k^{L(\ell+1)} \right)^2 - \left(E_k^{R(\ell+1)} \right)^2 \right] \\
& \leq \int_0^T \sum_{A_j \subset \Gamma_{Rob}} \frac{|A_j|}{2(\lambda_j^L + \lambda_j^R)} \left[\left(\psi_{i1j}^{L(\ell+1)} + \lambda_j^L E_{\sigma_j}^{L(\ell+1)} \right)^2 + \left(\psi_{i1j}^{R(\ell+1)} + \lambda_j^R E_{\sigma_j}^{R(\ell+1)} \right)^2 \right] \\
& + \int_0^T \sum_{k \in \dot{\Gamma}_{Rob}} \frac{|\partial P_k \cap \Gamma_{Rob}|}{2(\lambda_k^L + \lambda_k^R)} \left[\left(\phi_{k,\Gamma_{Rob}}^{L(\ell+1)} + \lambda_k^L E_k^{L(\ell+1)} \right)^2 + \left(\phi_{k,\Gamma_{Rob}}^{R(\ell+1)} + \lambda_k^R E_k^{R(\ell+1)} \right)^2 \right],
\end{aligned} \tag{6.22}$$

où l'on a utilisé la continuité de la composante normale de \mathbf{b} à l'interface Γ_{Rob} ($\mathbf{b}^R \cdot \mathbf{n}^R = -\mathbf{b}^L \cdot \mathbf{n}^L$).

Réécrivons l'inégalité (6.22) de manière à faire apparaître des termes semblables dans le membre de gauche et le membre de droite. En utilisant que

$$\left(\psi_{i1j}^{L(\ell+1)} - \lambda_j^R E_{\sigma_j}^{L(\ell+1)} \right)^2 = \left(-\psi_{i1j}^{L(\ell+1)} + \lambda_j^R E_{\sigma_j}^{L(\ell+1)} \right)^2,$$

ainsi que sur les trois autres termes analogues du membre de gauche de (6.22), il

vient

$$\begin{aligned}
& \|E^{L(\ell+1)}(T)\|_{T,P}^2 + \|E^{R(\ell+1)}(T)\|_{T,P}^2 \\
& + 2 \int_0^T \left(\mathbf{K}^L \nabla_h E^{L(\ell+1)}, \nabla_h E^{L(\ell+1)} \right)_{\mathcal{D}} \\
& + 2 \int_0^T \left(\mathbf{K}^R \nabla_h E^{R(\ell+1)}, \nabla_h E^{R(\ell+1)} \right)_{\mathcal{D}} \\
& + \int_0^T \left(\nabla_h^{T,P} \cdot \mathbf{b}^L, (E^{L(\ell+1)})^2 \right)_{T,P} + \int_0^T \left(\nabla_h^{T,P} \cdot \mathbf{b}^R, (E^{R(\ell+1)})^2 \right)_{T,P} \\
& + \int_0^T \sum_{A_j \subset \Gamma_{Rob}} \frac{|A_j|}{2} (\lambda_j^L - \lambda_j^R - (\mathbf{b}^L \cdot \mathbf{n}^L)_{i1j}) \left[(E_{\sigma_j}^{L(\ell+1)})^2 - (E_{\sigma_j}^{R(\ell+1)})^2 \right] \\
& + \int_0^T \sum_{k: \partial P_k \subset \Gamma_{Rob}} \frac{|\partial P_k \cap \Gamma_{Rob}|}{2} (\lambda_k^L - \lambda_k^R - (\mathbf{b}^L \cdot \mathbf{n}^L)_k) \left[(E_k^{L(\ell+1)})^2 - (E_k^{R(\ell+1)})^2 \right] \\
& + Z^{\ell+1} \leq Z^\ell,
\end{aligned} \tag{6.23}$$

où

$$\begin{aligned}
Z^\ell &= \int_0^T \sum_{A_j \subset \Gamma_{Rob}} \frac{|A_j|}{2(\lambda_j^L + \lambda_j^R)} \left[(-\psi_{i1j}^{R(\ell)} + \lambda_j^L E_{\sigma_j}^{R(\ell)})^2 + (-\psi_{i1j}^{L(\ell)} + \lambda_j^R E_{\sigma_j}^{L(\ell)})^2 \right] \\
&+ \int_0^T \sum_{k: \partial P_k \subset \Gamma_{Rob}} \frac{|\partial P_k \cap \Gamma_{Rob}|}{2(\lambda_k^L + \lambda_k^R)} \left[(-\phi_{k,\Gamma_{Rob}}^{R(\ell)} + \lambda_k^L E_k^{R(\ell)})^2 + (-\phi_{k,\Gamma_{Rob}}^{L(\ell)} + \lambda_k^R E_k^{L(\ell)})^2 \right].
\end{aligned} \tag{6.24}$$

Il reste à sommer sur les itérations de Schwarz $\ell \in \{1, \dots, N_\ell\}$. L'hypothèse (6.11) du théorème 6.1 permet d'achever la preuve en annulant les deux expressions du membre de gauche de (6.23) non nécessairement positifs. Dans ce cas, nous obtenons

$$\begin{aligned}
& \sum_{l=1}^{N_\ell} \|E^{L(\ell+1)}(T)\|_{T,P}^2 + \sum_{l=1}^{N_l} \|E^{R(\ell+1)}(T)\|_{T,P}^2 \\
& + 2 \sum_{l=1}^{N_\ell} \int_0^T \left(\mathbf{K}^L \nabla_h E^{L(\ell+1)}, \nabla_h E^{L(\ell+1)} \right)_{\mathcal{D}} \\
& + 2 \sum_{l=1}^{N_\ell} \int_0^T \left(\mathbf{K}^R \nabla_h E^{R(\ell+1)}, \nabla_h E^{R(\ell+1)} \right)_{\mathcal{D}} \\
& + \sum_{l=1}^{N_\ell} \int_0^T \left(\nabla_h^{T,P} \cdot \mathbf{b}^L, (E^{L(\ell+1)})^2 \right)_{T,P} + \sum_{l=1}^{N_\ell} \int_0^T \left(\nabla_h^{T,P} \cdot \mathbf{b}^R, (E^{R(\ell+1)})^2 \right)_{T,P}. \\
& + Z^{N_\ell} \leq Z^1
\end{aligned} \tag{6.25}$$

Les paramètres de Robin sont tels que $\lambda_j^L + \lambda_j^R > 0$ et $\lambda_k^L + \lambda_k^R > 0$ par la condition (6.10) (en rappelant que $\mathbf{b}^L \cdot \mathbf{n}^L = -\mathbf{b}^R \cdot \mathbf{n}^R$). Par conséquent, d'après (6.24), $Z^\ell \geq 0$ pour tout ℓ . Aussi Z^1 est une constante ne dépendant pas de ℓ . De plus, puisque la matrice \mathbf{K}^L (resp. \mathbf{K}^R) et $\nabla_h^{T,P} \cdot \mathbf{b}^L$ (resp. $\nabla_h^{T,P} \cdot \mathbf{b}^R$) sont supposés positifs, les termes des séries sont positifs.

Cela permet de conclure que les séries convergent et que les termes $\|E^{L(\ell)}(T)\|_{T,P}$, $\|E^{R(\ell)}(T)\|_{T,P}$, $\int_0^T |\nabla_h E^{L(\ell)}|_{\mathcal{D}}$ et $\int_0^T |\nabla_h E^{R(\ell)}|_{\mathcal{D}}$ convergent vers 0.

On peut en fait montrer que $\|E^{L(\ell)}(t_n)\|_{T,P}$ et $\|E^{R(\ell)}(t_n)\|_{T,P}$ convergent vers 0 quelque soit t_n puisqu'au lieu de faire une somme sur le nombre N de pas de temps, on peut tout aussi bien faire cette somme sur n'importe quel nombre de pas de temps. Notons que cela ne serait plus vrai si le maillage temporel était non conforme. Cela implique que $\int_0^T \|E^{L(\ell)}\|_{T,P}$ et $\int_0^T \|E^{R(\ell)}\|_{T,P}$ convergent vers 0.

De plus, par définition des flux, on obtient aussi la convergence vers 0 de $\int_0^T \psi_{i_1 j}^{L(\ell)}$, $\int_0^T \psi_{i_1 j}^{R(\ell)}$, $\int_0^T \phi_k^{L(\ell)}$ et $\int_0^T \phi_k^{R(\ell)}$ pour tout $j, k \in \Gamma_{Rob}$. □

Chapitre 7

Etude du taux de convergence de l'algorithme

Sommaire

7.1	Le taux de convergence continu	138
7.1.1	EDP continue	138
7.1.2	Conditions de transmission	139
7.1.3	Prise en compte de la géométrie dans un cas particulier	142
7.2	Le taux de convergence discret en diffusion pure	144
7.3	Le taux de convergence adapté à un problème dominé par la convection	151
7.3.1	Ecriture du schéma décentré comme un schéma centré	152
7.3.2	Adaptation du taux de convergence	154

Dans une méthode de Schwarz optimisé, les paramètres des conditions de transmission introduites dans le problème multidomaine sont déterminés comme étant ceux qui optimisent, pour toutes les fréquences discrètes, le taux de convergence de l'algorithme continu. Ainsi, étant directement liés à la vitesse de convergence, leur choix est déterminant. Dans la suite, nous nous restreignons à des conditions de Robin (ordre 0). Nous présentons d'abord le problème d'optimisation dans le cas continu à la manière de [10, 54, 66] pour le problème instationnaire de convection-diffusion à coefficients discontinus en deux dimensions. Cette approche est basée d'une part sur le calcul de la transformée de Fourier dans le cas de deux demi-plans et d'autre part sur l'optimisation du taux de convergence continu. Selon le choix des données du problème (taille du domaine et valeurs des données physiques), la décomposition en deux demi-plans infinis peut s'avérer être une hypothèse peu réaliste. En fait, une condition sur les données du problème peut être établie sous laquelle l'influence des frontières est négligeable. Nous donnons cette condition dans le cas d'un domaine borné selon la direction x .

Notons d'autre part que le paramètre de la condition d'interface, obtenu à partir de l'optimisation du taux de convergence continu, est le meilleur relativement à l'EDP continue, non au schéma. Pour des petits pas de temps et d'espace, travailler sur le taux de convergence continu est donc cohérent. Cependant, définir le taux de convergence discret adapté au schéma utilisé est en soi préférable, même si la

complexité des formulations obtenues et la dépendance du taux de convergence à un schéma donné sont deux inconvénients importants dans la pratique. A la suite de [81, 63, 43], nous explicitons dans la deuxième section le taux de convergence discret pour le schéma DDFV pour des maillages cartésiens, dans le cas particulier du problème de diffusion pure. Pour un problème de convection-diffusion dominé par la convection, une autre alternative est de tenir compte dans le calcul du taux de convergence continu d'un nouveau coefficient de diffusion prenant en compte la diffusion physique et la diffusion numérique augmentant avec la convection. Nous détaillerons ce calcul dans un troisième paragraphe, dans le cas d'un maillage rectangulaire.

7.1 Le taux de convergence continu

Rappelons l'équation continue sur $\Omega \times (0, T)$

$$\mathcal{L}c = \omega \partial_t c - \nabla \cdot (\mathbf{K} \nabla c - \mathbf{b}c) = f \quad \text{dans } \Omega \times (0, T), \quad (7.1)$$

et supposons la matrice de diffusion \mathbf{K} diagonale à coefficients constants de part et d'autre de l'interface située en $x = 0$, écrite sous la forme

$$\mathbf{K} = \begin{pmatrix} \nu_x & 0 \\ 0 & \nu_y \end{pmatrix}.$$

Soit $\mathbf{n}^L = (1, 0)$ et $\boldsymbol{\tau}^L = (0, 1)$ les vecteurs normal et tangentiel. Notons alors $b_x := \mathbf{b} \cdot \mathbf{n}^L$ et $b_y := \mathbf{b} \cdot \boldsymbol{\tau}^L$. L'hypothèse de continuité de la vitesse normale à l'interface s'écrit donc

$$b_x^L = \mathbf{b}^L \cdot \mathbf{n}^L = \mathbf{b}^R \cdot \mathbf{n}^L = b_x^R. \quad (7.2)$$

7.1.1 EDP continue

L'équation continue (7.1) est mise sous la forme

$$\omega \frac{\partial c}{\partial t} - \nu_x \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - \nu_y \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} + b_x \frac{\partial c}{\partial x} + b_y \frac{\partial c}{\partial y} = f, \quad (7.3)$$

dans l'intérieur de chacun des deux sous-domaines sur $(0, T)$ de manière à écrire la transformée de Fourier en t et le long de l'interface en y (les variables de Fourier respectives seront notées θ et k). Appliquée à l'erreur $e^{S(\ell)} = c^{S(\ell)} - c^S$ sur Ω_S (indifféremment Ω_L ou Ω_R) entre la solution $c^{S(\ell)}$ à l'itération de Schwarz (ℓ) et la solution convergée multidomaine c^S , l'équation (7.3) s'écrit sur Ω_S

$$\omega^S \frac{\partial e^{S(\ell)}}{\partial t} - \nu_x^S \frac{\partial^2 e^{S(\ell)}}{\partial x^2} - \nu_y^S \frac{\partial^2 e^{S(\ell)}}{\partial y^2} + b_x^S \frac{\partial e^{S(\ell)}}{\partial x} + b_y^S \frac{\partial e^{S(\ell)}}{\partial y} = 0.$$

En prenant la transformée de Fourier définie par

$$\hat{c}(x, k, \theta) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ikx} e^{-i\theta x} c(x, y, t),$$

nous obtenons sur l'un ou l'autre des sous-domaines Ω_S (supposés être infinis en $x \rightarrow +\infty$ et $x \rightarrow -\infty$)

$$-\nu_x^S \frac{\partial^2 \hat{e}^{S(\ell)}(x, k, \theta)}{\partial x^2} + b_x^S \frac{\partial \hat{e}^{S(\ell)}(x, k, \theta)}{\partial x} + (\nu_y^S k^2 + i(\omega^S \theta + b_y^S k)) \hat{e}^{S(\ell)}(x, k, \theta) = 0 \quad (7.4)$$

Le polynôme caractéristique associé permet de déterminer les racines r_L^\pm et r_R^\pm définies par

$$\begin{aligned} r_L^\pm &= \frac{b_x^L \pm \sqrt{(b_x^L)^2 + 4\nu_x^L(\nu_y^L k^2 + i(\omega^L \theta + b_y^L k))}}{2\nu_x^L} \\ r_R^\pm &= \frac{b_x^R \pm \sqrt{(b_x^R)^2 + 4\nu_x^R(\nu_y^R k^2 + i(\omega^R \theta + b_y^R k))}}{2\nu_x^R}. \end{aligned} \quad (7.5)$$

Dans la suite, elles seront notées

$$r_L^\pm := \frac{b_x^L \pm \sqrt{d^L}}{2\nu_x^L} \quad r_R^\pm := \frac{b_x^R \pm \sqrt{d^R}}{2\nu_x^R}. \quad (7.6)$$

Notons que par convention, la racine carrée d'un nombre complexe est un complexe de partie réelle positive. Comme nous cherchons les solutions sur Ω_L et Ω_R de (7.4) bornées en $-\infty$ et $+\infty$, et que $\text{Re}(r_L^\pm) > 0$ et $\text{Re}(r_R^\pm) < 0$, celles-ci sont de la forme

$$\hat{e}^{L(\ell)}(x, k, \theta) = A^{L(\ell)}(k, \theta) e^{r_L^\pm x} \quad \hat{e}^{R(\ell)}(x, k, \theta) = A^{R(\ell)}(k, \theta) e^{r_R^\pm x} \quad (7.7)$$

où les constantes A^L et A^R , dépendant des variables de Fourier k et θ , des paramètres physiques ω , \mathbf{K} , \mathbf{b} et de l'erreur g à l'interface à l'itération initiale $\ell = 0$, sont déterminées grâce aux conditions de transmission.

7.1.2 Conditions de transmission

Réécrivons les conditions d'interface de Robin au niveau continu (5.4) avec les itérations de Schwarz :

$$\left\{ \begin{aligned} (\mathbf{K}^L \nabla \hat{e}^{L(\ell+1)} - \mathbf{b}^L \hat{e}^{L(\ell+1)}) \cdot \mathbf{n}^L + \lambda^L \hat{e}^{L(\ell+1)} \\ &= -(\mathbf{K}^R \nabla \hat{e}^{R(\ell)} - \mathbf{b}^R \hat{e}^{R(\ell)}) \cdot \mathbf{n}^R + \lambda^L \hat{e}^{R(\ell)} \\ (\mathbf{K}^R \nabla \hat{e}^{R(\ell)} - \mathbf{b}^R \hat{e}^{R(\ell)}) \cdot \mathbf{n}^R + \lambda^R \hat{e}^{R(\ell)} \\ &= -(\mathbf{K}^L \nabla \hat{e}^{L(\ell-1)} - \mathbf{b}^L \hat{e}^{L(\ell-1)}) \cdot \mathbf{n}^L + \lambda^R \hat{e}^{L(\ell-1)} \end{aligned} \right. \quad (7.8)$$

Après la transformée de Fourier, nous obtenons

$$\left\{ \begin{aligned} \nu_x^L \frac{\partial \hat{e}^{L(\ell+1)}(x, k, \theta)}{\partial x} - b_x^L \hat{e}^{L(\ell+1)}(x, k, \theta) + \lambda^L \hat{e}^{L(\ell+1)}(x, k, \theta) \\ &= \nu_x^R \frac{\partial \hat{e}^{R(\ell)}(x, k, \theta)}{\partial x} - b_x^R \hat{e}^{R(\ell)}(x, k, \theta) + \lambda^L \hat{e}^{R(\ell)}(x, k, \theta) \\ -\nu_x^R \frac{\partial \hat{e}^{R(\ell)}(x, k, \theta)}{\partial x} + b_x^R \hat{e}^{R(\ell)}(x, k, \theta) + \lambda^R \hat{e}^{R(\ell)}(x, k, \theta) \\ &= -\nu_x^L \frac{\partial \hat{e}^{L(\ell-1)}(x, k, \theta)}{\partial x} + b_x^L \hat{e}^{L(\ell-1)}(x, k, \theta) + \lambda^R \hat{e}^{L(\ell-1)}(x, k, \theta). \end{aligned} \right. \quad (7.9)$$

En insérant les expressions de $\hat{e}^{L(\ell)}$ et $\hat{e}^{R(\ell)}$ données par (7.7) dans les conditions de transmission (7.9), on obtient

$$\left\{ \begin{aligned} (\nu_x^L r_L^+ - b_x^L + \lambda^L) A^{L(\ell+1)} &= (\nu_x^R r_R^- - b_x^R + \lambda^L) A^{R(\ell)} \\ (-\nu_x^R r_R^- + b_x^R + \lambda^R) A^{R(\ell)} &= (-\nu_x^L r_L^+ + b_x^L + \lambda^R) A^{L(\ell-1)}. \end{aligned} \right. \quad (7.10)$$

Alors, le taux de convergence ρ défini par

$$\rho := \frac{\hat{e}^{L(\ell+1)}(k, \theta)}{\hat{e}^{L(\ell-1)}(k, \theta)} = \frac{A^{L(\ell+1)}(k, \theta)}{A^{L(\ell-1)}(k, \theta)}$$

peut s'écrire comme

$$\rho = \frac{\nu_x^R r_R^- - b_x^R + \lambda^L}{\nu_x^L r_L^+ - b_x^L + \lambda^L} \cdot \frac{-\nu_x^L r_L^+ + b_x^L + \lambda^R}{-\nu_x^R r_R^- + b_x^R + \lambda^R}. \quad (7.11)$$

Le paramètre de Robin optimal λ^{opt} est celui qui annule le taux de convergence :

$$\lambda^{L opt} = b_x^R - \nu_x^R r_R^- = \frac{b_x^R + \sqrt{d^R}}{2} \quad \lambda^{R opt} = -b_x^L + \nu_x^L r_L^+ = \frac{-b_x^L + \sqrt{d^L}}{2}.$$

Puisque les racines carrées $\sqrt{d^L}$ et $\sqrt{d^R}$ sont non polynomiales en k et θ , l'opérateur associé est non local. Le paramètre de Robin optimal λ^{opt} est alors approché par le paramètre λ^{app} cherché sous la forme

$$\lambda^{L app} = \frac{b_x^R}{2} + p^L \quad \text{et} \quad \lambda^{R app} = -\frac{b_x^L}{2} + p^R, \quad (7.12)$$

où p^R et p^L sont les deux paramètres à optimiser, approchant respectivement $\frac{\sqrt{d^L}}{2}$ et $\frac{\sqrt{d^R}}{2}$. Le taux de convergence (7.11) associé au paramètre approché λ^{app} peut alors être défini par

$$\rho(p^L, p^R, k, \theta) = \frac{p^L - \frac{\sqrt{d^R}}{2}}{p^L + \frac{(b_x^R - b_x^L)}{2} + \frac{\sqrt{d^L}}{2}} \cdot \frac{p^R - \frac{\sqrt{d^L}}{2}}{p^R + \frac{(b_x^R - b_x^L)}{2} + \frac{\sqrt{d^R}}{2}},$$

qui, en utilisant (7.2) donnant la continuité de la composante normale de la convection, peut encore s'écrire

$$\rho(p^L, p^R, k, \theta) = \frac{p^L - \frac{\sqrt{d^R}}{2}}{p^L + \frac{\sqrt{d^L}}{2}} \cdot \frac{p^R - \frac{\sqrt{d^L}}{2}}{p^R + \frac{\sqrt{d^R}}{2}}. \quad (7.13)$$

Le domaine Ω étant en fait borné, tout comme l'intervalle en temps, les fréquences k et θ supportées par le maillage et la discrétisation en temps sont telles que

$$k \in [k_{min}, k_{max}] \quad \text{et} \quad \theta \in [\theta_{min}, \theta_{max}],$$

où l'on prend

$$k_{min} = \frac{\pi}{L_{\Gamma_{Rob}}}, \quad k_{max} = \frac{\pi}{h}, \quad \theta_{min} = \frac{\pi}{T}, \quad \theta_{max} = \frac{\pi}{dt}, \quad (7.14)$$

avec $L_{\Gamma_{Rob}}$ la longueur de l'interface, et h et dt les pas d'espace et de temps sur l'interface Γ_{Rob} .

Le problème d'optimisation est alors de minimiser sur $p^L, p^R > 0$ le maximum du module du taux de convergence sur l'ensemble des fréquences discrètes :

$$\min_{p^L, p^R > 0} \left(\max_{\substack{k \in [k_{min}, k_{max}] \\ \theta \in [\theta_{min}, \theta_{max}]}} |\rho(p^L, p^R, k, \theta)| \right). \quad (7.15)$$

On peut choisir d'optimiser sur un seul paramètre $p = p^L = p^R$ (condition de Robin 1-sided) ou sur les deux paramètres indépendants p^L et p^R (condition de Robin 2-sided). La condition de Robin 1-sided a alors surtout un sens si les coefficients de diffusion et la composante tangentielle de convection sont continus (auquel cas, $d^L = d^R$).

Remarquons qu'en écrivant les paramètres de Robin comme dans (7.12) et dans le cas où la vitesse de convection n'est pas nulle, nous obtenons toujours deux paramètres de Robin distincts λ^{Lapp} et λ^{Rapp} , même avec la condition de Robin 1-sided.

D'autre part, il faut noter que dans le cas de paramètres discontinus, il est intéressant de remplacer les paramètres p^L et p^R dans la formule (7.13) par $p^L = \nu_x^R p_1$ et $p^R = \nu_x^L p_2$ comme le montre O. Dubois [33] pour un problème stationnaire de diffusion à coefficients constants discontinus ν^L et ν^R . En effet, dans le cas où ω et \mathbf{b} sont nuls ainsi que $\nu_x^L = \nu_y^L = \nu^L$ et $\nu_x^R = \nu_y^R = \nu^R$, nous avons $\frac{\sqrt{d^L}}{2} = \nu^L k$ et $\frac{\sqrt{d^R}}{2} = \nu^R k$. Cela justifie donc d'approcher $\frac{\sqrt{d^L}}{2}$ par $p^R = \nu^L p$ et $\frac{\sqrt{d^R}}{2}$ par $p^L = \nu^R p$, permettant ainsi d'optimiser le problème min-max (7.15) sur un unique paramètre tout en tenant compte de la discontinuité de la diffusion. Dans le cas d'un problème instationnaire de diffusion pure, on obtient

$$\frac{\sqrt{d^L}}{2} = \nu^L \sqrt{k^2 + i \frac{\omega^L}{\nu^L} \theta^2} \quad \text{et} \quad \frac{\sqrt{d^R}}{2} = \nu^R \sqrt{k^2 + i \frac{\omega^R}{\nu^R} \theta^2},$$

rendant la conclusion moins évidente. La question est en effet de savoir s'il est raisonnable d'approcher $\sqrt{k^2 + i \frac{\omega^L}{\nu^L} \theta^2}$ et $\sqrt{k^2 + i \frac{\omega^R}{\nu^R} \theta^2}$ par un unique paramètre p . Dans la pratique, nous avons observés que la vitesse de convergence était en général plus rapide que dans le cas d'une condition standard de Robin 1-sided.

Dans le cas de l'optimisation sur deux paramètres, le *scaling* n'apporte en théorie aucune amélioration, mais s'avère utile dans la pratique si l'on utilise une méthode d'optimisation numérique.

La détermination du ou des paramètres d'optimisation peut se faire soit par une optimisation numérique, soit en utilisant les formules analytiques ou asymptotiques trouvées pour certains problèmes et dans certaines conditions. A notre connaissance, aucune formule analytique ou asymptotique n'a été déterminée pour l'équation de convection-diffusion instationnaire à coefficients discontinus en 2D. Des formules existent en 2D pour des problèmes stationnaires de diffusion pure à coefficients discontinus [33] ou avec convection pour des coefficients continus [10]. En 1D, des formules analytiques ont été déterminées pour ces mêmes problèmes ([39],[73] et [74]) et des formules asymptotiques sont données par [40] dans le cas

de coefficients discontinus.

Pour résumer, les paramètres optimisés de Robin intervenant dans les conditions de transmission (7.9) s'écrivent

$$\lambda^* := (\lambda^{L^*}, \lambda^{R^*}) = \left(\frac{b_x^R}{2} + p^{L^*}, -\frac{b_x^L}{2} + p^{R^*} \right) \quad (7.16)$$

où les paramètres p^{L^*} et p^{R^*} sont définis différemment selon les 3 conditions de transmission, désignés par Robin 1-sided, Robin 1-sided avec *scaling* et Robin 2-sided avec *scaling*

$$\left\{ \begin{array}{ll} (p^{L^*}, p^{R^*}) = (p^*, p^*) & \text{(Robin 1-sided)} \\ (p^{L^*}, p^{R^*}) = (\nu_x^R p^*, \nu_x^L p^*) & \text{(Robin 1-sided avec } scaling) \\ (p^{L^*}, p^{R^*}) = (\nu_x^R p_{1^*}, \nu_x^L p_{2^*}) & \text{(Robin 2-sided avec } scaling) \end{array} \right. \quad (7.17)$$

Définition 7.1. *La solution (p^{L^*}, p^{R^*}) du problème d'optimisation min-max (7.15) (resp. $\lambda^* = (\lambda^{L^*}, \lambda^{R^*})$ en considérant l'expression équivalente du taux de convergence (7.11)) vérifie une propriété d'équioscillation si le module du taux de convergence optimisé $\rho(p^{L^*}, p^{R^*}, k, \theta)$ (resp. $\rho(\lambda^*, k, \theta)$) atteint son maximum en exactement $m + 1$ points où m désigne le nombre de paramètres à optimiser.*

Bien que O. Dubois [33] rappelle que cette propriété n'est pas toujours remplie pour les équations de convection-diffusion, elle a par exemple été démontré à coefficients continus [10] ou à coefficients discontinus en diffusion pure [72]. De plus, elle peut être souvent observée et est en tout cas un gage que les valeurs obtenues du paramètre optimisé correspondent bien à un minimum global.

7.1.3 Prise en compte de la géométrie dans un cas particulier

Dans le paragraphe précédent, les solutions données par (7.7) tiennent compte de l'hypothèse de domaines non bornés à l'infini avec une solution qui décroît rapidement à l'infini. Cette hypothèse n'étant pas vérifiée dans les problèmes modélisés, nous cherchons une relation entre les paramètres et la largeur du domaine L_x selon x telle que cette hypothèse soit justifiable. Considérons le cas particulier d'un domaine Ω coupé en deux sous-domaines (bandes) par l'interface $x = x_{\Gamma_{Rob}}$. Le domaine de gauche Ω_L est délimité par les bords $x = x^-$ (à gauche) et $x = x_{\Gamma_{Rob}}$ (à droite), tandis que le domaine de droite est compris entre les bords $x = x_{\Gamma_{Rob}}$ (à gauche) et $x = x^+$ (à droite). Notons $L_x^- = x_{\Gamma_{Rob}} - x^-$ et $L_x^+ = x^+ - x_{\Gamma_{Rob}}$ les largeurs des deux sous-domaines.

Si l'on tient compte de la géométrie du domaine Ω borné à gauche et à droite, les solutions de l'équation (7.4) appliquée à Ω_L et Ω_R sont de la forme

$$\begin{aligned} \hat{e}^{L(\ell)}(x, k, \theta) &= A^{L(\ell)}(k, \theta) e^{r_L^+ x} + B^{L(\ell)}(k, \theta) e^{r_L^- x} \\ \hat{e}^{R(\ell)}(x, k, \theta) &= A^{R(\ell)}(k, \theta) e^{r_R^- x} + B^{R(\ell)}(k, \theta) e^{r_R^+ x} \end{aligned} \quad (7.18)$$

où l'on rappelle que $A^{L(\ell)}$, $A^{R(\ell)}$, $B^{L(\ell)}$ et $B^{R(\ell)}$ sont des constantes qui dépendent aussi des paramètres physiques ω , \mathbf{K} , \mathbf{b} et de l'erreur g à l'interface à l'itération initiale $\ell = 0$. Les deux constantes $B^{L(\ell)}$ et $B^{R(\ell)}$ seront déterminées ici par les conditions aux limites en $x = x^-$ et $x = x^+$. Supposons-les de type Dirichlet homogène. Cela se traduit par

$$\begin{aligned}\hat{e}^{L(\ell)}(x^-, k, \theta) &= A^{L(\ell)}(k, \theta) e^{r_L^+ x^-} + B^{L(\ell)}(k, \theta) e^{r_L^- x^-} = 0 \\ \hat{e}^{R(\ell)}(x^+, k, \theta) &= A^{R(\ell)}(k, \theta) e^{r_R^- x^+} + B^{R(\ell)}(k, \theta) e^{r_R^+ x^+} = 0.\end{aligned}\quad (7.19)$$

D'où

$$\begin{aligned}B^{L(\ell)}(k, \theta) &= -A^{L(\ell)}(k, \theta) e^{r_L^+ x^- - r_L^- x^-} \\ B^{R(\ell)}(k, \theta) &= -A^{R(\ell)}(k, \theta) e^{r_R^- x^+ - r_R^+ x^+}.\end{aligned}\quad (7.20)$$

En utilisant (7.20), les solutions (7.18) peuvent alors s'écrire

$$\begin{aligned}\hat{e}^{L(\ell)}(x, k, \theta) &= A^{L(\ell)}(k, \theta) \left[e^{r_L^+ x} - e^{r_L^+ x^- + r_L^- (x - x^-)} \right] \\ \hat{e}^{R(\ell)}(x, k, \theta) &= A^{R(\ell)}(k, \theta) \left[e^{r_R^- x} - e^{r_R^- x^+ + r_R^+ (x - x^+)} \right],\end{aligned}\quad (7.21)$$

soit

$$\begin{aligned}\hat{e}^{L(\ell)}(x, k, \theta) &= A^{L(\ell)}(k, \theta) e^{r_L^+ x} \left[1 - e^{(r_L^- - r_L^+)(x - x^-)} \right] \\ \hat{e}^{R(\ell)}(x, k, \theta) &= A^{R(\ell)}(k, \theta) e^{r_R^- x} \left[1 - e^{(r_R^+ - r_R^-)(x - x^+)} \right],\end{aligned}\quad (7.22)$$

ou encore, en utilisant l'expression (7.6) des racines,

$$\begin{aligned}\hat{e}^{L(\ell)}(x, k, \theta) &= A^{L(\ell)}(k, \theta) e^{r_L^+ x} \left[1 - e^{-\frac{\sqrt{d^L}}{\nu_x^L} (x - x^-)} \right] \\ \hat{e}^{R(\ell)}(x, k, \theta) &= A^{R(\ell)}(k, \theta) e^{r_R^- x} \left[1 - e^{\frac{\sqrt{d^R}}{\nu_x^R} (x - x^+)} \right].\end{aligned}\quad (7.23)$$

Pour que l'analyse faite dans le paragraphe précédent garde un sens pour des problèmes posés sur des domaines bornés, il faut qu'en $x = x_{\Gamma_{Rob}}$ (interface), les termes entre crochets dans les expressions de (7.23) soient proches de 1.

Autrement dit, on veut que

$$\left| \frac{\sqrt{d^L}}{\nu_x^L} (x_{\Gamma_{Rob}} - x^-) \right| \gg 1 \quad \text{et} \quad \left| \frac{\sqrt{d^R}}{\nu_x^R} (x_{\Gamma_{Rob}} - x^+) \right| \ll 1$$

c'est-à-dire

$$\left\{ \begin{array}{l} \left| \frac{\sqrt{d^L}}{\nu_x^L} L_x^- \right| \gg 1 \\ \left| \frac{\sqrt{d^R}}{\nu_x^R} L_x^+ \right| \gg 1 \end{array} \right. \quad (7.24)$$

Pour un nombre complexe $z = \psi + i\chi = \varphi e^{i\tau}$, rappelons que

$$\left| \sqrt{\psi + i\chi} \right| = \left| \sqrt{\varphi e^{i\tau}} \right| = \left| \sqrt{(\psi^2 + \chi^2)^{\frac{1}{2}}} e^{i\tau} \right| = \left| (\psi^2 + \chi^2)^{\frac{1}{4}} e^{i\frac{\tau}{2}} \right| = (\psi^2 + \chi^2)^{\frac{1}{4}}. \quad (7.25)$$

En reprenant les expressions de d^L et d^R dans (7.5) et (7.6), nous avons donc

$$|\sqrt{d^L}| = \left[(b_x^L)^2 + 4\nu_x^L \nu_y^L k^2 \right]^2 + \left[4\nu_x^L (\omega^L \theta + b_y^L k) \right]^2 \Bigg]^{\frac{1}{4}}. \quad (7.26)$$

Or, d'après (7.14), $k \geq k_{min} = \frac{\pi}{L_{\Gamma_{Rob}}}$. Comme $\omega^L \theta + b_y^L k$ est de signe indéterminé à cause de b_y^L , nous écrivons simplement

$$|\sqrt{d^L}| \geq \left[(b_x^L)^2 + 4\nu_x^L \nu_y^L \frac{\pi^2}{(L_{\Gamma_{Rob}})^2} \right]^{\frac{1}{2}} \quad \forall \theta \in \left[\frac{\pi}{T}, \frac{\pi}{dt} \right], \quad \forall k \in \left[\frac{\pi}{L_{\Gamma_{Rob}}}, \frac{\pi}{h} \right]. \quad (7.27)$$

Ainsi

$$\left| \frac{\sqrt{d^L}}{\nu_x^L} L_x^- \right| \geq \frac{L_x^-}{\nu_x^L} \left[(b_x^L)^2 + 4\nu_x^L \nu_y^L \frac{\pi^2}{(L_{\Gamma_{Rob}})^2} \right]^{\frac{1}{2}} \quad \forall \theta \in \left[\frac{\pi}{T}, \frac{\pi}{dt} \right], \quad \forall k \in \left[\frac{\pi}{L_{\Gamma_{Rob}}}, \frac{\pi}{h} \right]. \quad (7.28)$$

avec une expression analogue pour le sous-domaine de droite.

Dans le cas particulier de diffusion pure, nous avons

$$\left| \frac{\sqrt{d^L}}{\nu_x^L} L_x^- \right| \geq \frac{L_x^-}{\nu_x^L} \left[\left(4\nu_x^L \nu_y^L \frac{\pi^2}{(L_{\Gamma_{Rob}})^2} \right)^4 + \left(4\nu_x^L \omega^L \frac{\pi}{T} \right)^2 \right]^{\frac{1}{4}} \quad (7.29)$$

$$\forall \theta \in \left[\frac{\pi}{T}, \frac{\pi}{dt} \right], \quad \forall k \in \left[\frac{\pi}{L_{\Gamma_{Rob}}}, \frac{\pi}{h} \right].$$

et de manière similaire sur le sous-domaine de droite.

Ainsi les différents paramètres doivent être choisis de telle sorte que (7.27) et (7.29) remplissent la condition (7.24).

7.2 Le taux de convergence discret en diffusion pure

Le problème d'optimisation défini par (7.15) étant relatif au problème continu, les paramètres optimisés p^* permettent d'approcher au mieux les conditions de transmission continues (5.4). Or c'est le schéma DDFV multidomaine, et non le problème continu, qui est résolu. Par conséquent, les paramètres optimisés à partir du taux de convergence continu ne sont pas totalement adaptés au problème discret. Cet inconvénient peut être résolu en établissant un problème d'optimisation relatif au problème discret, bien que la formulation et l'optimisation d'un tel problème soit souvent très complexe. Afin de lever une partie de cette difficulté, nous considérons ici l'équation de diffusion pure sur l'erreur $e^{S(\ell)}$ (entre $c^{S(\ell)}$ et c^S) :

$$\mathcal{L}e^{S(\ell)} = \omega \partial_t e^{S(\ell)} - \nabla \cdot (\mathbf{K} \nabla e^{S(\ell)}) = 0 \quad \text{sur} \quad \Omega_S \times (0, T), \quad (7.30)$$

où Ω_S est indifféremment le sous-domaine Ω_L ou Ω_R . Soit un maillage cartésien régulier de pas h , un pas de temps uniforme $\Delta t_n = \Delta t$ et $\mathbf{K} = \nu \mathbf{Id}$. Supposons de plus que l'interface entre Ω_L ou Ω_R est située en $x = 0$. Afin de n'écrire qu'une seule

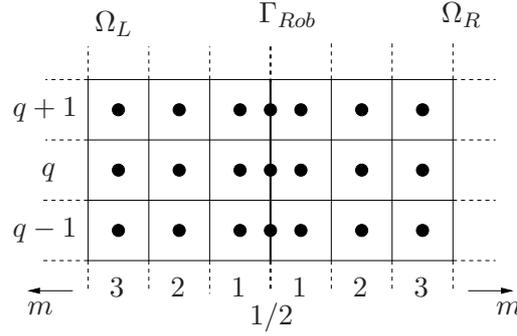


FIGURE 7.1 – Discretisation du maillage primal cartésien de pas régulier. Les centres des mailles carrées sont notées (m, q) . La numérotation est identique de part et d'autre de l'interface.

discretisation valable sur les deux sous-domaines, nous choisissons de repérer les mailles carrées par leurs centres (m, q) en posant $m = 1/2$ en $x = 0$, $(m, q) = (1, q)$ de la même manière les centres sur les deux mailles adjacentes à l'interface, et $m \in \mathbb{N}^*$ croissant de part et d'autre de l'interface (figure 7.1).

L'équation discrète résolue sur le sous-domaine Ω_S (supposé non borné) à l'itération (ℓ) de l'algorithme de Schwarz s'écrit sur les cellules primales intérieures pour $m \geq 2$, comme

$$\omega^S \frac{e_{m,q}^{S,n(\ell)} - e_{m,q}^{S,n-1(\ell)}}{\Delta t} - \frac{\nu^S}{h^2} \left(e_{m+1,q}^{S,n(\ell)} - 2e_{m,q}^{S,n(\ell)} + e_{m-1,q}^{S,n(\ell)} + e_{m,q+1}^{S,n(\ell)} - 2e_{m,q}^{S,n(\ell)} + e_{m,q-1}^{S,n(\ell)} \right) = 0. \quad (7.31)$$

où $e_{m,q}$ est l'inconnue de c sur la maille (m, q) . En introduisant $e_{0,q}^{S,n(\ell)}$ liée à l'inconnu de l'interface $e_{\frac{1}{2},q}^{S,n(\ell)}$ par

$$e_{\frac{1}{2},q}^{S,n(\ell)} = \frac{1}{2} (e_{1,q}^{S,n(\ell)} + e_{0,q}^{S,n(\ell)}), \quad (7.32)$$

l'équation (7.31) peut aussi être écrite pour $m = 1$.

Les centres des cellules duales étant notées (m^*, q^*) avec $m^* = 0$ pour les points de l'interface (mailles duale de bord) et $m^* \in \mathbb{N}$ croissant de part et d'autre de l'interface d'une manière similaire à m . Pour les cellules duales intérieures ($m^* > 0$), l'algorithme discret résout

$$\omega^S \frac{e_{m^*,q^*}^{S,n(\ell)} - e_{m^*,q^*}^{S,n-1(\ell)}}{\Delta t} - \frac{\nu^S}{h^2} \left(e_{m^*+1,q^*}^{S,n(\ell)} - 2e_{m^*,q^*}^{S,n(\ell)} + e_{m^*-1,q^*}^{S,n(\ell)} + e_{m^*,q^*+1}^{S,n(\ell)} - 2e_{m^*,q^*}^{S,n(\ell)} + e_{m^*,q^*-1}^{S,n(\ell)} \right), \quad (7.33)$$

et sur les cellules duales de bord ($m^* = 0$), le schéma est donné par

$$\omega^S \frac{e_{0^*,q^*}^{S,n(\ell)} - e_{0^*,q^*}^{S,n-1(\ell)}}{\Delta t} - \frac{\nu^S}{h^2} \left[2 \left(e_{1^*,q^*}^{S,n(\ell)} - e_{0^*,q^*}^{S,n(\ell)} \right) + \left(e_{0^*,q^*+1}^{S,n(\ell)} - 2e_{0^*,q^*}^{S,n(\ell)} + e_{0^*,q^*-1}^{S,n(\ell)} \right) \right] - \frac{2}{h} \phi_{0^*,q^*}^{S,n(\ell)} = 0, \quad (7.34)$$

où $\phi_{0^*,q^*}^{S,n(\ell)} = F_{0^*,q^*}^{S,n(\ell)} - F_{0^*,q^*}^{S,n}$ est l'erreur entre le flux $F_{0^*,q^*}^{S,n(\ell)}$ sur l'interface de Robin à l'itération (ℓ) et le flux multidomaine convergé $F_{0^*,q^*}^{S,n}$.

Rappelons les conditions de transmission de Robin (5.4) en diffusion pure sur $\Gamma_{Rob} \times (0, T)$ sur les arêtes primales de l'interface :

$$\begin{cases} (\mathbf{K}^L \nabla e^{L(\ell+1)}) \cdot \mathbf{n}^L + \lambda^L e^{L(\ell+1)} = -(\mathbf{K}^R \nabla e^{R(\ell)}) \cdot \mathbf{n}^R + \lambda^L e^{R(\ell)} \\ (\mathbf{K}^R \nabla e^{R(\ell)}) \cdot \mathbf{n}^R + \lambda^R e^{R(\ell)} = -(\mathbf{K}^L \nabla e^{L(\ell-1)}) \cdot \mathbf{n}^L + \lambda^R e^{L(\ell-1)} \end{cases}$$

En utilisant que $\mathbf{n}^L = -\mathbf{n}^R = (1, 0)$, les conditions (7.2) se réécrivent comme

$$\begin{cases} \nu^L \frac{\partial e^{L(\ell+1)}}{\partial x} + \lambda^L e^{L(\ell+1)} = \nu^R \frac{\partial e^{R(\ell)}}{\partial x} + \lambda^L e^{R(\ell)} \\ -\nu^R \frac{\partial e^{R(\ell)}}{\partial x} + \lambda^R e^{R(\ell)} = -\nu^L \frac{\partial e^{L(\ell-1)}}{\partial x} + \lambda^R e^{L(\ell-1)}. \end{cases} \quad (7.35)$$

La discrétisation de la première condition de (7.35) est alors donnée par

$$\nu^L \frac{e_{1,q}^{L(\ell+1)} - e_{\frac{1}{2},q}^{L(\ell+1)}}{h} + \lambda^L e_{\frac{1}{2},q}^{L(\ell+1)} = \nu^R \frac{e_{\frac{1}{2},q}^{R(\ell)} - e_{1,q}^{R(\ell)}}{h} + \lambda^L e_{\frac{1}{2},q}^{R(\ell)}. \quad (7.36)$$

En remplaçant $e_{\frac{1}{2},q}$ par son expression (7.32) en fonction de $e_{0,q}$ et $e_{1,q}$, la discrétisation des deux conditions (7.35) donne

$$\begin{aligned} & \frac{\nu^L}{h} (e_{0,q}^{L,n(\ell)} - e_{1,q}^{L,n(\ell)}) + \lambda^L \frac{(e_{0,q}^{L,n(\ell)} + e_{1,q}^{L,n(\ell)})}{2} \\ &= -\frac{\nu^R}{h} (e_{0,q}^{R,n(\ell-1)} - e_{1,q}^{R,n(\ell-1)}) + \lambda^L \frac{(e_{0,q}^{R,n(\ell-1)} + e_{1,q}^{R,n(\ell-1)})}{2}. \end{aligned} \quad (7.37)$$

et

$$\begin{aligned} & \frac{\nu^R}{h} (e_{0,q}^{R,n(\ell)} - e_{1,q}^{R,n(\ell)}) + \lambda^R \frac{(e_{0,q}^{R,n(\ell)} + e_{1,q}^{R,n(\ell)})}{2} \\ &= -\frac{\nu^L}{h} (e_{0,q}^{L,n(\ell-1)} - e_{1,q}^{L,n(\ell-1)}) + \lambda^R \frac{(e_{0,q}^{L,n(\ell-1)} + e_{1,q}^{L,n(\ell-1)})}{2}, \end{aligned} \quad (7.38)$$

Sur les cellules duales liées à l'interface, les conditions de transmission de Robin s'expriment par

$$\phi_{0^*,q^*}^{L,n(\ell)} + \lambda^L e_{0^*,q^*}^{L,n(\ell)} = -\phi_{0^*,q^*}^{R,n(\ell-1)} + \lambda^L e_{0^*,q^*}^{R,n(\ell-1)}, \quad (7.39)$$

et

$$\phi_{0^*,q^*}^{R,n(\ell)} + \lambda^R e_{0^*,q^*}^{R,n(\ell)} = -\phi_{0^*,q^*}^{L,n(\ell-1)} + \lambda^R e_{0^*,q^*}^{L,n(\ell-1)}. \quad (7.40)$$

Notons $\hat{e}_{m,k}^{S,\theta(\ell)}$ la transformée de Fourier discrète en temps et en espace le long de l'interface (variables de Fourier θ et k) de $e_{m,q}^{S,n(\ell)}$, d'où

$$e_{m,q}^{S,n(\ell)} = \sum_{k,\theta} \hat{e}_{m,k}^{S,\theta(\ell)} e^{ikqh} e^{i\theta n \Delta t} \quad \text{et} \quad e_{m^*,q^*}^{S,n(\ell)} = \sum_{k,\theta} \hat{e}_{m^*,k}^{S,\theta(\ell)} e^{ikqh} e^{i\theta n \Delta t}. \quad (7.41)$$

En prenant la transformée de Fourier discrète de (7.31) et en utilisant (7.41), on peut écrire la relation de récurrence

$$\left[\omega^S \frac{(1 - e^{-i\theta\Delta t})}{\Delta t} - \frac{\nu^S}{h^2} (2 \cos kh - 2) \right] \hat{e}_{m,k}^{S,\theta(\ell)} - \frac{\nu^S}{h^2} (\hat{e}_{m+1,k}^{S,\theta(\ell)} - 2\hat{e}_{m,k}^{S,\theta(\ell)} + \hat{e}_{m-1,k}^{S,\theta(\ell)}) = 0. \quad (7.42)$$

Cette relation (7.42) est vérifiée aussi sur les cellules duales intérieures, en remplaçant $\hat{e}_{m,k}^{S,\theta(\ell)}$ par $\hat{e}_{m^*,k}^{S,\theta(\ell)}$.

Le polynôme caractéristique associé aux deux équations (7.31) et (7.33) peut s'écrire à partir de la relation de récurrence (7.42) :

$$X^2 - 2X + 1 + \left[\alpha_k - \frac{\omega^S h^2}{\nu^S \Delta t} (1 - e^{-i\theta\Delta t}) \right] X = 0, \quad (7.43)$$

avec $\alpha_k = 2 \cos kh - 2$. Puisque les solutions $\hat{e}_{m,k}^{S,\theta(\ell)}$ et $\hat{e}_{m^*,k}^{S,\theta(\ell)}$ sont bornées à l'infini, elles peuvent être écrites

$$\hat{e}_{m,k}^{S,\theta(\ell)} = C_{k,\theta}^{S(\ell)} (r^S)^m \quad \text{et} \quad \hat{e}_{m^*,k}^{S,\theta(\ell)} = C_{k,\theta}^{*S(\ell)} (r^S)^{m^*}, \quad (7.44)$$

où r^S est l'une des deux racines du polynôme caractéristique (7.43) définies par

$$r^{S\pm} := 1 - \frac{\alpha_k}{2} + \frac{\omega^S h^2}{2\nu^S \Delta t} (1 - e^{-i\theta\Delta t}) \pm \frac{1}{2} \sqrt{\left(2 - \alpha_k + \frac{\omega^S h^2}{\nu^S \Delta t} (1 - e^{-i\theta\Delta t}) \right)^2 - 4}, \quad (7.45)$$

ou encore

$$r^{S\pm} = 2 - \cos kh + \frac{\omega^S h^2}{2\nu^S \Delta t} (1 - e^{-i\theta\Delta t}) \pm \sqrt{\left(2 - \cos kh + \frac{\omega^S h^2}{2\nu^S \Delta t} (1 - e^{-i\theta\Delta t}) \right)^2 - 1}. \quad (7.46)$$

La racine intervenant dans (7.44) est celle de module inférieur ou égal à 1. Puisque les racines sont telles que $r^{S+} r^{S-} = 1$, seule l'une des deux racines vérifie cette propriété. Soit z tel que

$$z^2 = \left[2 - \alpha_k + \frac{\omega^S h^2}{\nu^S \Delta t} (1 - e^{-i\theta\Delta t}) \right]^2 - 4 \quad \text{et} \quad \text{Re}(z) \geq 0.$$

Alors

$$\text{Re}(r^{S+}) = 1 - \frac{\alpha_k}{2} + \frac{\omega^S h^2}{\nu^S \Delta t} (1 - \cos(\theta\Delta t)) + \frac{\text{Re}(z)}{2}. \quad (7.47)$$

Comme $1 - \frac{\alpha_k}{2} = 2 - \cos kh \geq 1$, alors $\text{Re}(r^{S+}) \geq 1$.

D'autre part $|r^{S+}| \geq \text{Re}(r^{S+})$ implique $|r^{S+}| \geq 1$, $\forall k, \theta$. Par conséquent, la racine apparaissant dans (7.44) est $r^S = r^{S-}$. Finalement, nous avons

$$\hat{e}_{m,k}^{S,\theta(\ell)} = C_{k,\theta}^{S(\ell)} (r^{S-})^m \quad \text{et} \quad \hat{e}_{m^*,k}^{S,\theta(\ell)} = C_{k,\theta}^{*S(\ell)} (r^{S-})^{m^*}, \quad (7.48)$$

avec r^{S^-} donné par (7.46).

Les constantes $C_{k,\theta}^{S(\ell)}$ et $C_{k,\theta}^{*S(\ell)}$ sont déterminées à partir des conditions de transmission. En prenant (7.37) et (7.38) sur les arêtes primales de bord Robin, avec l'expression (7.44) de $\hat{e}_{m,k}^{S,\theta(\ell)}$, nous obtenons

$$\left[\frac{\nu^L(1-r^{L^-})}{h} + \lambda^L \frac{(1+r^{L^-})}{2} \right] C_{k,\theta}^{L(\ell)} = \left[-\frac{\nu^R(1-r^{R^-})}{h} + \lambda^L \frac{(1+r^{R^-})}{2} \right] C_{k,\theta}^{R(\ell-1)} \quad (7.49)$$

et

$$\left[\frac{\nu^R(1-r^{R^-})}{h} + \lambda^R \frac{(1+r^{R^-})}{2} \right] C_{k,\theta}^{R(\ell)} = \left[-\frac{\nu^L(1-r^{L^-})}{h} + \lambda^R \frac{(1+r^{L^-})}{2} \right] C_{k,\theta}^{L(\ell-1)}. \quad (7.50)$$

Sur les frontières duales de l'interface, nous utilisons (7.39) pour écrire

$$\phi_{0^*,q^*}^{L,n(\ell)} = -\lambda^L e_{0^*,q^*}^{L,n(\ell)} - \phi_{0^*,q^*}^{R,n(\ell-1)} + \lambda^L e_{0^*,q^*}^{R,n(\ell-1)},$$

qui est ensuite inséré dans l'expression (7.34) du schéma sur les cellules duales de bord Robin du sous-domaine Ω_L . Il vient alors

$$\begin{aligned} \omega^L \frac{e_{0^*,q^*}^{L,n(\ell)} - e_{0^*,q^*}^{L,n-1(\ell)}}{\Delta t} \\ - \frac{\nu^L}{h^2} \left[2 \left(e_{1^*,q^*}^{L,n(\ell)} - e_{0^*,q^*}^{L,n(\ell)} \right) + \left(e_{0^*,q^*+1}^{L,n(\ell)} - 2e_{0^*,q^*}^{L,n(\ell)} + e_{0^*,q^*-1}^{L,n(\ell)} \right) \right] \\ + \frac{2}{h} \lambda^L e_{0^*,q^*}^{L,n(\ell)} + \frac{2}{h} \phi_{0^*,q^*}^{R,n(\ell-1)} - \frac{2}{h} \lambda^L e_{0^*,q^*}^{R,n(\ell-1)} = 0. \end{aligned} \quad (7.51)$$

En réécrivant l'expression (7.34) du schéma sur les cellules duales de bord Robin sur Ω_R , à l'itération $\ell - 1$

$$\begin{aligned} \omega^R \frac{e_{0^*,q^*}^{R,n(\ell-1)} - e_{0^*,q^*}^{R,n-1(\ell-1)}}{\Delta t} \\ - \frac{\nu^R}{h^2} \left[2 \left(e_{1^*,q^*}^{R,n(\ell-1)} - e_{0^*,q^*}^{R,n(\ell-1)} \right) + \left(e_{0^*,q^*+1}^{R,n(\ell-1)} - 2e_{0^*,q^*}^{R,n(\ell-1)} + e_{0^*,q^*-1}^{R,n(\ell-1)} \right) \right] \\ - \frac{2}{h} \phi_{0^*,q^*}^{R,n(\ell-1)} = 0, \end{aligned} \quad (7.52)$$

nous voyons que le terme $\phi_{0^*,q^*}^{R,n(\ell-1)}$ apparaît dans les deux expressions, ce qui permet d'écrire la relation suivante

$$\begin{aligned} \omega^L \frac{e_{0^*,q^*}^{L,n(\ell)} - e_{0^*,q^*}^{L,n-1(\ell)}}{\Delta t} + \frac{2}{h} \lambda^L e_{0^*,q^*}^{L,n(\ell)} \\ - \frac{\nu^L}{h^2} \left[2 \left(e_{1^*,q^*}^{L,n(\ell)} - e_{0^*,q^*}^{L,n(\ell)} \right) + \left(e_{0^*,q^*+1}^{L,n(\ell)} - 2e_{0^*,q^*}^{L,n(\ell)} + e_{0^*,q^*-1}^{L,n(\ell)} \right) \right] \\ = -\omega^R \frac{e_{0^*,q^*}^{R,n(\ell-1)} - e_{0^*,q^*}^{R,n-1(\ell-1)}}{\Delta t} + \frac{2}{h} \lambda^L e_{0^*,q^*}^{R,n(\ell-1)} \\ + \frac{\nu^R}{h^2} \left[2 \left(e_{1^*,q^*}^{R,n(\ell-1)} - e_{0^*,q^*}^{R,n(\ell-1)} \right) + \left(e_{0^*,q^*+1}^{R,n(\ell-1)} - 2e_{0^*,q^*}^{R,n(\ell-1)} + e_{0^*,q^*-1}^{R,n(\ell-1)} \right) \right]. \end{aligned} \quad (7.53)$$

En utilisant l'expression (7.44) et en prenant la transformée de Fourier, nous avons finalement

$$\begin{aligned} & \left[\omega^L \frac{(1 - e^{-i\theta\Delta t})}{\Delta t} - \frac{\nu^L}{h^2} (2 r^{L^-} - 2 + \alpha_k) + \frac{2}{h} \lambda^L \right] C_{k,\theta}^{*L(\ell)} \\ &= \left[-\omega^R \frac{(1 - e^{-i\theta\Delta t})}{\Delta t} + \frac{\nu^R}{h^2} (2 r^{R^-} - 2 + \alpha_k) + \frac{2}{h} \lambda^L \right] C_{k,\theta}^{*R(\ell-1)}. \end{aligned} \quad (7.54)$$

Nous avons de même, à partir de (7.40),

$$\begin{aligned} & \left[\omega^R \frac{(1 - e^{-i\theta\Delta t})}{\Delta t} - \frac{\nu^R}{h^2} (2 r^{R^-} - 2 + \alpha_k) + \frac{2}{h} \lambda^R \right] C_{k,\theta}^{*R(\ell)} \\ &= \left[-\omega^L \frac{(1 - e^{-i\theta\Delta t})}{\Delta t} + \frac{\nu^L}{h^2} (2 r^{L^-} - 2 + \alpha_k) + \frac{2}{h} \lambda^R \right] C_{k,\theta}^{*L(\ell-1)}. \end{aligned} \quad (7.55)$$

Nous pouvons ainsi définir trois taux de convergence, un primal ρ_P à partir de (7.49) et (7.50), l'autre dual ρ_D avec (7.54) et (7.55) et le troisième global ρ_G défini à partir des deux autres :

$$\rho_P = \frac{\left[-\frac{\nu^R(1 - r^{R^-})}{h} + \lambda^L \frac{(1 + r^{R^-})}{2} \right]}{\left[\frac{\nu^L(1 - r^{L^-})}{h} + \lambda^L \frac{(1 + r^{L^-})}{2} \right]} \cdot \frac{\left[-\frac{\nu^L(1 - r^{L^-})}{h} + \lambda^R \frac{(1 + r^{L^-})}{2} \right]}{\left[\frac{\nu^R(1 - r^{R^-})}{h} + \lambda^R \frac{(1 + r^{R^-})}{2} \right]}, \quad (7.56)$$

$$\begin{aligned} \rho_D &= \frac{\left[-\omega^R \frac{(1 - e^{-i\theta\Delta t})}{\Delta t} + \frac{\nu^R}{h^2} (2 r^{R^-} - 2 + \alpha_k) + \frac{2}{h} \lambda^L \right]}{\left[\omega^L \frac{(1 - e^{-i\theta\Delta t})}{\Delta t} - \frac{\nu^L}{h^2} (2 r^{L^-} - 2 + \alpha_k) + \frac{2}{h} \lambda^L \right]} \\ &= \frac{\left[-\omega^L \frac{(1 - e^{-i\theta\Delta t})}{\Delta t} + \frac{\nu^L}{h^2} (2 r^{L^-} - 2 + \alpha_k) + \frac{2}{h} \lambda^R \right]}{\left[\omega^R \frac{(1 - e^{-i\theta\Delta t})}{\Delta t} - \frac{\nu^R}{h^2} (2 r^{R^-} - 2 + \alpha_k) + \frac{2}{h} \lambda^R \right]}, \end{aligned} \quad (7.57)$$

et enfin le taux de convergence global défini par

$$\rho_G = \max(|\rho_P|, |\rho_D|). \quad (7.58)$$

Le problème d'optimisation du taux de convergence discret est alors défini par

$$\min_{\lambda^L, \lambda^R > 0} \left(\max_{\substack{k \in [k_{min}, k_{max}] \\ \theta \in [\theta_{min}, \theta_{max}]}} \rho_G(\lambda^L, \lambda^R, k, \theta, h, \Delta t) \right) \quad (7.59)$$

où les bornes de k et θ sont définies par (7.14). Nous noterons $\lambda_G^* = (\lambda_G^{L*}, \lambda_G^{R*})$ le couple des paramètres optimisés. De même, $\lambda_P^* = (\lambda_P^{L*}, \lambda_P^{R*})$ et $\lambda_D^* = (\lambda_D^{L*}, \lambda_D^{R*})$ désigneront les paramètres optimisés de ρ_P et ρ_D . Notons que c'est l'hypothèse sur le maillage rectangulaire qui permet de définir un taux de convergence primal et un taux de convergence dual indépendants l'un de l'autre. Dans ce cas particulier, le schéma primal et le schéma dual sont en effet entièrement découplés. Les résultats ne sont donc plus vrais pour des maillages quelconques.

D'une manière analogue à (7.17) dans le cas continu, on peut définir les conditions de Robin 1-sided avec *scaling* et Robin 2-sided avec *scaling* en exprimant λ_G^{L*} et λ_G^{R*} comme

$$\left\{ \begin{array}{l} (\lambda_G^{L*}, \lambda_R^{L*}) = (\nu^R p_G^*, \nu^L p_G^*) \quad (\text{Robin 1-sided avec } scaling) \\ (\lambda_G^{L*}, \lambda_R^{L*}) = (\nu^R p_{G1}^*, \nu^L p_{G2}^*) \quad (\text{Robin 2-sided avec } scaling). \end{array} \right. \quad (7.60)$$

Ci-dessous, nous proposons un cas-test de comparaison entre les différents taux de convergence continu ρ (7.11) et discrets ρ_P (7.56), ρ_D (7.57) et ρ_G (7.58) pour des coefficients continus et discontinus. Nous considérons les deux cas suivants de diffusion pure sur un maillage rectangulaire de pas régulier $h = 1/320$. Soient $(0, 1)$ l'intervalle en temps décomposé en 50 pas de temps, $L_{\Gamma_{Rob}} = 1$ la longueur de l'interface, $\omega = 1$, $\nu^L = 10^{-2}$ (cas 1) ou $\nu^L = 10^{-3}$ (cas 2) et $\nu^R = 10^{-2}$. Le problème min-max continu (7.15) ou discret (7.59) est résolu numériquement par la fonction *fminsearch* de *Matlab* en considérant une condition de Robin 1-sided.

Sur les figures 7.2(a) et 7.2(c), nous observons pour les trois taux de convergence ρ_P , ρ_D et ρ_G pris à leurs valeurs optimisées respectives une équioscillation aux points (θ_{min}, k_{min}) et (θ_{max}, k_{max}) . Au point $\tilde{\theta}(k)$ de la droite reliant (θ_{min}, k_{min}) et (θ_{max}, k_{max}) défini par

$$\tilde{\theta}(k) = \frac{(\theta_{max} - \theta_{min})k + \theta_{min}k_{max} - \theta_{max}k_{min}}{k_{max} - k_{min}}, \quad (7.61)$$

le taux de convergence discret global $\rho_G(\lambda_G^*)$ se comporte comme le taux de convergence discret dual $\rho_D(\lambda_D^*)$. Sur les figures de droite 7.2(b) et 7.2(d), nous comparons le taux de convergence discret pour les différents paramètres optimisés λ^* (trait plein magenta), λ_P^* (trait pointillé fin noir), λ_D^* (trait en pointillé rouge) et λ_G^* (trait pointillé avec des points en bleu). Le maximum du module du taux de convergence en λ^* est un peu plus élevé qu'en λ_G^* , mais très proche cependant. Cela montre que pour ces deux cas, le paramètre optimisé à partir du taux de convergence continu est très proche de celui optimisé à partir du taux de convergence discret. Les autres courbes des figures de droite confirment les figures de gauche, en montrant explicitement que $\lambda_{G*} \simeq \lambda_{D*} \neq \lambda_{P*}$ (car la courbe $\rho_G(\lambda_D^*, \tilde{\theta}(k), k)$ est confondue avec $\rho_G(\lambda_G^*, \tilde{\theta}(k), k)$).

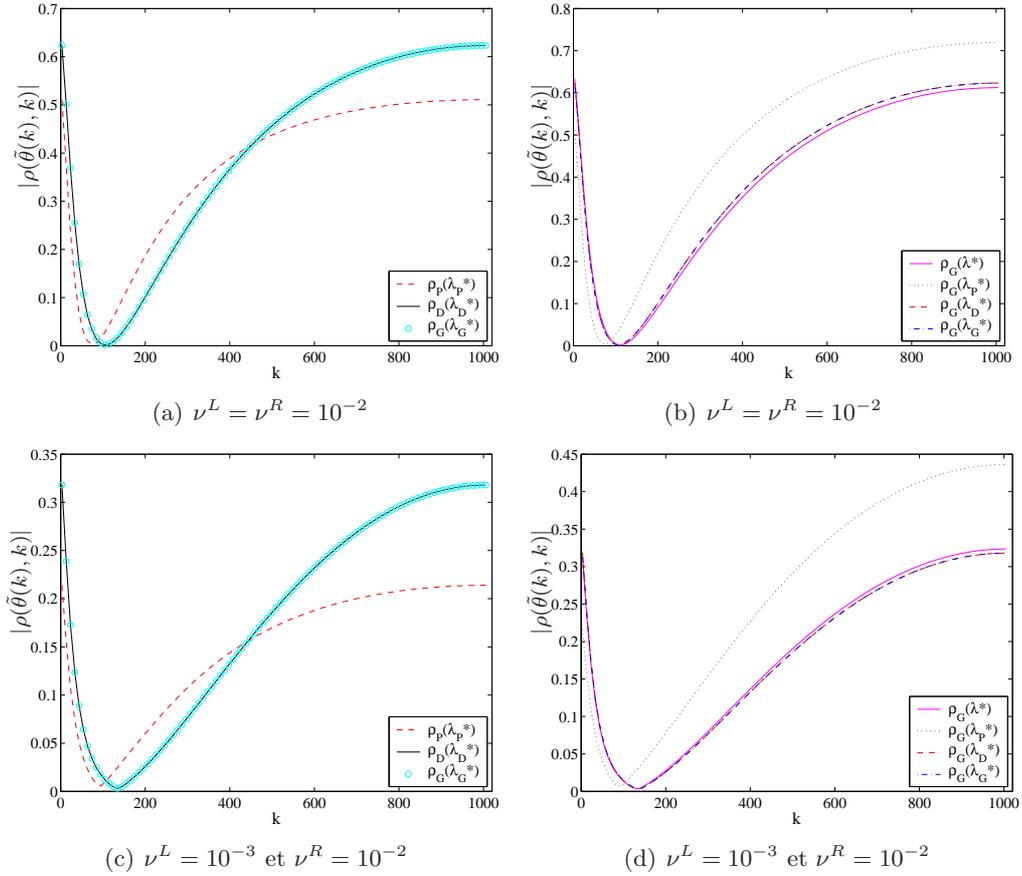


FIGURE 7.2 – (a) et (b) : $\nu^L = \nu^R = 10^{-2}$; (c) et (d) : $\nu^L = 10^{-3}$ et $\nu^R = 10^{-2}$. Maillage rectangulaire avec $h = 1/320$, $\Delta t = 1/50$, et $\omega = 1$. A gauche, les trois taux de convergence ρ_P (courbe en pointillé rouge), ρ_D (courbe en trait plein noir) et ρ_G (ronds cyan) à leurs valeurs optimisées respectives λ_P^* , λ_D^* et λ_G^* , représentés à $\theta = \tilde{\theta}$ en fonction de k . A droite, le taux de convergence discret ρ_G pour les paramètres optimisés λ^* (trait plein magenta), λ_P^* (trait pointillé fin noir), λ_D^* (trait en pointillé rouge) et λ_G^* (trait pointillé avec des points en bleu)

7.3 Le taux de convergence adapté à un problème dominé par la convection

Nous reprenons ici l'idée considérée en 1D dans la partie I, chapitre 3, paragraphes 3.2.1 et 3.2.2 pour les schémas décentré 0 et décentré 1. Rappelons que cette idée vient du fait qu'il est établi qu'un schéma décentré apporte de la diffusion numérique causée par le décentrage du terme de convection. Ainsi, lorsque la convection est dominante par rapport à la diffusion, il est intéressant d'écrire le schéma décentré initial sous la forme équivalente d'un schéma centré avec une diffusion modifiée. Un schéma centré étant d'ordre supérieur à un schéma décentré, le schéma approche en fait mieux l'équation de convection diffusion avec la valeur modifiée de la diffusion qu'il n'approche l'équation avec la valeur initiale de la diffusion. Pour l'optimisation du taux de convergence continu, il est alors préférable de considérer l'équation continue avec la nouvelle diffusion modifiée.

7.3.1 Ecriture du schéma décentré comme un schéma centré

Plaçons nous dans le cas particulier d'un maillage rectangulaire 2D, de pas régulier h dans les deux directions. On repère chaque maille primale par ses indices (m, q) et chaque maille duale par (m^*, q^*) . On suppose, pour simplifier l'écriture, que $\mathbf{K} = \begin{pmatrix} \nu_x & 0 \\ 0 & \nu_y \end{pmatrix}$ et \mathbf{b} sont constants, et que de plus b_x et b_y sont positifs.

La discrétisation étant la même selon les deux directions, nous donnons celle selon la direction x . Sur le maillage primal, le flux sortant $F_{m+\frac{1}{2},q}^{(m,q)}$ vu de la maille (m, q) s'écrit avec le schéma décentré comme

$$F_{m+\frac{1}{2},q}^{(m,q)} = 2\nu_x \frac{c_{m+\frac{1}{2},q} - c_{m,q}}{h} - b_x c_{m,q}, \quad (7.62)$$

et de même, le flux sortant $F_{m+\frac{1}{2},q}^{(m+1,q)}$ vu de la maille $(m+1, q)$ s'écrit

$$F_{m+\frac{1}{2},q}^{(m+1,q)} = -2\nu_x \frac{c_{m+1,q} - c_{m+\frac{1}{2},q}}{h} + b_x c_{m+\frac{1}{2},q}, \quad (7.63)$$

où $c_{m+\frac{1}{2},q}$ est l'inconnue située sur l'arête primale, intersection des mailles (m, q) et $(m+1, q)$. Elle est déterminée en écrivant l'égalité des flux sur chaque arête primale.

Détermination de $c_{m+\frac{1}{2},q}$

Par continuité du flux en $(m + \frac{1}{2}, q)$, la somme des flux sortants est nulle, d'où

$$2\nu_x \frac{c_{m+\frac{1}{2},q} - c_{m,q}}{h} - b_x c_{m,q} = 2\nu_x \frac{c_{m+1,q} - c_{m+\frac{1}{2},q}}{h} - b_x c_{m+\frac{1}{2},q}. \quad (7.64)$$

Cette égalité permet de déterminer l'inconnue sur l'arête primale

$$c_{m+\frac{1}{2},q} = \frac{\left(\frac{2\nu_x}{h} + b_x\right) c_{m,q} + \frac{2\nu_x}{h} c_{m+1,q}}{\frac{4\nu_x}{h} + b_x}. \quad (7.65)$$

Réécriture du flux décentré selon la direction x

Ainsi il est possible de réécrire le flux (7.62) en fonction des inconnues aux centre des mailles primales, en utilisant (7.65). D'autre part, le terme de convection est décomposé en un terme centré plus un reste. D'où

$$F_{m+\frac{1}{2},q}^{(m,q)} = \frac{2\nu_x}{h} \left[\frac{\frac{2\nu_x}{h} (c_{m+1,q} - c_{m,q})}{\frac{4\nu_x}{h} + b_x} \right] - b_x \left(\frac{c_{m,q} + c_{m+1,q}}{2} \right) + b_x \left(\frac{c_{m+1,q} - c_{m,q}}{2} \right). \quad (7.66)$$

Le reste peut se factoriser avec le flux diffusif pour faire apparaître un coefficient de diffusion modifiée. Ainsi, nous obtenons

$$\begin{aligned} F_{m+\frac{1}{2},q}^{(m,q)} &= \nu_x \left[\frac{\frac{4\nu_x}{h} + \frac{b_x h}{2\nu_x}}{\frac{4\nu_x}{h} + b_x} \right] \frac{(c_{m+1,q} - c_{m,q})}{h} - b_x \left(\frac{c_{m,q} + c_{m+1,q}}{2} \right) \\ &= \nu_x \left[\frac{1}{1 + \frac{b_x h}{4\nu_x}} + \frac{b_x h}{2\nu_x} \right] \frac{(c_{m+1,q} - c_{m,q})}{h} - b_x \left(\frac{c_{m,q} + c_{m+1,q}}{2} \right). \end{aligned} \quad (7.67)$$

La nouvelle diffusion sur le primal $\nu_{P'_x}$ (expression devant le terme de gradient normal dans (7.67)) peut être transformée sous la forme $\nu_x(1 + X)$ où X est à déterminer. En posant $\tau_x = \frac{b_x h}{2\nu_x}$, nous avons

$$\begin{aligned} \nu_{P'_x} &= \nu_x \left(\frac{1}{1 + \frac{\tau_x}{2}} + \tau_x \right) = \nu_x \left(1 + \left[\frac{-\frac{\tau_x}{2}}{1 + \frac{\tau_x}{2}} + \tau_x \right] \right) \\ &= \nu_x \left(1 + \left[\frac{\tau_x + \frac{\tau_x^2}{2} - \frac{\tau_x}{2}}{1 + \frac{\tau_x}{2}} \right] \right) \\ &= \nu_x \left(1 + \tau_x \left[\frac{1 + \tau_x}{2 + \tau_x} \right] \right). \end{aligned}$$

D'où, en définitive,

$$\nu_{P'_x} = \nu_x \left[1 + \frac{b_x h}{4\nu_x} \frac{\left(1 + \frac{b_x h}{2\nu_x}\right)}{\left(1 + \frac{b_x h}{4\nu_x}\right)} \right]. \quad (7.68)$$

Bilan sur le maillage primal

Les flux sortants $F_{m+\frac{1}{2},q}^{(m,q)}$ et $F_{m,q+\frac{1}{2}}^{(m,q)}$ dans les deux directions x et y , vus de la maille (m, q) , s'écrivent avec le schéma décentré

$$\begin{aligned} F_{m+\frac{1}{2},q}^{(m,q)} &= \nu_{P'_x} \frac{(c_{m+1,q} - c_{m,q})}{h} - b_x \left(\frac{c_{m,q} + c_{m+1,q}}{2} \right), \\ F_{m,q+\frac{1}{2}}^{(m,q)} &= \nu_{P'_y} \frac{(c_{m,q+1} - c_{m,q})}{h} - b_y \left(\frac{c_{m,q} + c_{m,q+1}}{2} \right), \end{aligned} \quad (7.69)$$

avec

$$\nu_{P'_x} = \nu_x \left[1 + \frac{b_x h}{4\nu_x} \frac{\left(1 + \frac{b_x h}{2\nu_x}\right)}{\left(1 + \frac{b_x h}{4\nu_x}\right)} \right] \quad \text{et} \quad \nu_{P'_y} = \nu_y \left[1 + \frac{b_y h}{4\nu_y} \frac{\left(1 + \frac{b_y h}{2\nu_y}\right)}{\left(1 + \frac{b_y h}{4\nu_y}\right)} \right]. \quad (7.70)$$

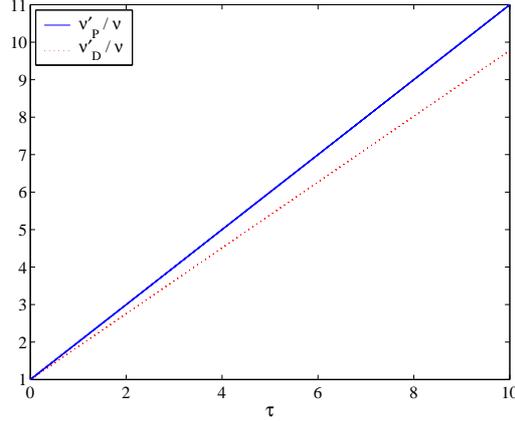


FIGURE 7.3 – Représentation de $\frac{\nu'_P}{\nu}$ (en trait bleu et continu) et $\frac{\nu'_D}{\nu}$ (en pointillé rouge) en fonction de $\tau = \frac{bh}{2\nu}$.

Sur le maillage dual

Le schéma décentré sur le maillage dual étant le schéma décentré classique, le flux sortant au travers de l'arête verticale, vu de la maille duale (m^*, n^*) est donné par

$$\begin{aligned}
 F_{m^*+\frac{1}{2},q^*}^{(m^*,q^*)} &= \nu_x \frac{c_{m^*+1,q^*} - c_{m^*,q^*}}{h} - b_x c_{m^*,q^*} \\
 &= \nu_x \frac{c_{m^*+1,q^*} - c_{m^*,q^*}}{h} - b_x \left(\frac{c_{m^*+1,q^*} + c_{m^*,q^*}}{2} \right) \\
 &\quad + b_x \left(\frac{c_{m^*+1,q^*} - c_{m^*,q^*}}{2} \right) \\
 &= \nu_x \left[1 + \frac{b_x h}{2\nu_x} \right] \frac{c_{m^*+1,q^*} - c_{m^*,q^*}}{h} - b_x \left(\frac{c_{m^*+1,q^*} + c_{m^*,q^*}}{2} \right).
 \end{aligned} \tag{7.71}$$

Nous avons donc

$$\begin{aligned}
 F_{m^*+\frac{1}{2},q^*}^{(m^*,q^*)} &= \nu_{D'_x} \frac{c_{m^*+1,q^*} - c_{m^*,q^*}}{h} - b_x \left(\frac{c_{m^*+1,q^*} + c_{m^*,q^*}}{2} \right), \\
 F_{m^*,q^*+\frac{1}{2}}^{(m^*,q^*)} &= \nu_{D'_y} \frac{c_{m^*,q^*+1} - c_{m^*,q^*}}{h} - b_y \left(\frac{c_{m^*,q^*+1} + c_{m^*,q^*}}{2} \right),
 \end{aligned} \tag{7.72}$$

avec

$$\nu_{D'_x} = \nu_x \left(1 + \frac{b_x h}{2\nu_x} \right) \quad \text{et} \quad \nu_{D'_y} = \nu_y \left(1 + \frac{b_y h}{2\nu_y} \right). \tag{7.73}$$

La figure 7.3 permet de visualiser et de comparer les deux diffusions modifiées $\nu_{P'}$ et $\nu_{D'}$ par rapport au coefficient de diffusion ν en fonction de $\tau = \frac{bh}{2\nu}$ où b (resp. ν) représente soit b_x (resp. ν_x) soit b_y (resp. ν_y).

7.3.2 Adaptation du taux de convergence

Le coefficient de diffusion modifiée étant différent sur le maillage primal (ν'_P) et sur le maillage dual (ν'_D) du fait de la discrétisation différente du flux convectif sur les deux maillages, cela donne lieu aussi à des paramètres optimisés différents sur

chacun des maillages. En effet, en écrivant l'équation continue (7.3) et les conditions de transmission (7.8) en remplaçant ν par ν'_P (resp. ν'_D), on aboutit au taux de convergence (7.11) défini avec ν'_P (resp. ν'_D). Notés ρ'_P et ρ'_D , ils sont donnés par

$$\rho'_P = \frac{\nu_{P_x}^{R'} r_R^- - b_x^R + \lambda_{\nu'_P}^L}{\nu_{P_x}^{L'} r_L^+ - b_x^L + \lambda_{\nu'_P}^L} \cdot \frac{-\nu_{P_x}^{L'} r_L^+ + b_x^L + \lambda_{\nu'_P}^R}{-\nu_{P_x}^{R'} r_R^- + b_x^R + \lambda_{\nu'_P}^R}. \quad (7.74)$$

et

$$\rho'_D = \frac{\nu_{D_x}^{R'} r_R^- - b_x^R + \lambda_{\nu'_D}^L}{\nu_{D_x}^{L'} r_L^+ - b_x^L + \lambda_{\nu'_D}^L} \cdot \frac{-\nu_{D_x}^{L'} r_L^+ + b_x^L + \lambda_{\nu'_D}^R}{-\nu_{D_x}^{R'} r_R^- + b_x^R + \lambda_{\nu'_D}^R}, \quad (7.75)$$

où $\lambda_{\nu'_P}^L$, $\lambda_{\nu'_P}^R$, $\lambda_{\nu'_D}^L$ et $\lambda_{\nu'_D}^R$ désignent les paramètres de Robin. Notons de plus, qu'en notant

$$\lambda_{\nu'_P} := (\lambda_{\nu'_P}^L, \lambda_{\nu'_P}^R) = \left(\frac{b_x^R}{2} + p_{\nu'_P}^L, -\frac{b_x^L}{2} + p_{\nu'_P}^R \right) \quad (7.76)$$

et

$$\lambda_{\nu'_D} := (\lambda_{\nu'_D}^L, \lambda_{\nu'_D}^R) = \left(\frac{b_x^R}{2} + p_{\nu'_D}^L, -\frac{b_x^L}{2} + p_{\nu'_D}^R \right), \quad (7.77)$$

deux problèmes d'optimisation analogues à (7.15) peuvent être définis : l'un sur $p_{\nu'_P}^L$ et $p_{\nu'_P}^R$, l'autre sur $p_{\nu'_D}^L$ et $p_{\nu'_D}^R$ comme

$$\min_{p_{\nu'_P}^L, p_{\nu'_P}^R > 0} \left(\max_{\substack{k \in [k_{min}, k_{max}] \\ \theta \in [\theta_{min}, \theta_{max}]}} |\rho'_P(p_{\nu'_P}^L, p_{\nu'_P}^R, k, \theta)| \right) \quad (7.78)$$

et

$$\min_{p_{\nu'_D}^L, p_{\nu'_D}^R > 0} \left(\max_{\substack{k \in [k_{min}, k_{max}] \\ \theta \in [\theta_{min}, \theta_{max}]}} |\rho'_D(p_{\nu'_D}^L, p_{\nu'_D}^R, k, \theta)| \right). \quad (7.79)$$

La résolution de ces problèmes d'optimisation définissent les couples de paramètres optimisés $(p_{\nu'_P}^{L*}, p_{\nu'_P}^{R*})$ pour le maillage primal et $(p_{\nu'_D}^{L*}, p_{\nu'_D}^{R*})$ pour le maillage dual, reliés à $\lambda_{\nu'_P}^{L*}$, $\lambda_{\nu'_P}^{R*}$, $\lambda_{\nu'_D}^{L*}$ et $\lambda_{\nu'_D}^{R*}$ par (7.76) et (7.77). Selon la condition de transmission utilisée, les paramètres $p_{\nu'_P}^{L*}$ et $p_{\nu'_P}^{R*}$ sont écrits comme

$$\left\{ \begin{array}{ll} (p_{\nu'_P}^{L*}, p_{\nu'_P}^{R*}) = (p_{\nu'_P}^*, p_{\nu'_P}^*) & \text{(Robin 1-sided)} \\ (p_{\nu'_P}^{L*}, p_{\nu'_P}^{R*}) = (\nu_{P_x}^{R'} p_{\nu'_P}^*, \nu_{P_x}^{L'} p_{\nu'_P}^*) & \text{(Robin 1-sided avec scaling)} \\ (p_{\nu'_P}^{L*}, p_{\nu'_P}^{R*}) = (\nu_{P_x}^{R'} p_{1\nu'_P}^*, \nu_{P_x}^{L'} p_{2\nu'_P}^*) & \text{(Robin 2-sided avec scaling)}. \end{array} \right. \quad (7.80)$$

Le couple des paramètres optimisés $(p_{\nu'_D}^{L*}, p_{\nu'_D}^{R*})$ est exprimé d'une manière similaire à (7.80), en remplaçant les indices P par les indices D :

$$\left\{ \begin{array}{ll} (p_{\nu'_D}^{L*}, p_{\nu'_D}^{R*}) = (p_{\nu'_D}^*, p_{\nu'_D}^*) & \text{(Robin 1-sided)} \\ (p_{\nu'_D}^{L*}, p_{\nu'_D}^{R*}) = (\nu_{D_x}^{R'} p_{\nu'_D}^*, \nu_{D_x}^{L'} p_{\nu'_D}^*) & \text{(Robin 1-sided avec scaling)} \\ (p_{\nu'_D}^{L*}, p_{\nu'_D}^{R*}) = (\nu_{D_x}^{R'} p_{1\nu'_D}^*, \nu_{D_x}^{L'} p_{2\nu'_D}^*) & \text{(Robin 2-sided avec scaling)}. \end{array} \right. \quad (7.81)$$

Chapitre 8

Résultats numériques

Sommaire

8.1	Ordre du schéma monodomaine	158
8.2	Problème de diffusion pure à coefficients discontinus . .	160
8.2.1	Maillage rectangulaire	161
8.2.2	Maillage triangulaire	163
8.3	Problème de convection-diffusion à coefficients constants	165
8.3.1	Différentes valeurs de convection	166
8.4	Problème de convection-diffusion avec une vitesse tour-	
	nante	169
8.5	Problème instationnaire de convection-diffusion - cas	
	Pamina	173

Sur le nouveau schéma monodomaine défini dans le chapitre 4 de cette partie pour les équations de convection-diffusion, nous n'avons pas d'analyse théorique de convergence. Cependant, le nouveau schéma est une extension du schéma DDFV proposé par [29] pour des problèmes de diffusion pure sur lequel des résultats de convergence ont été démontrés théoriquement. D'autre part, le nouveau schéma proposé est de type décentré hybride, tout comme le schéma utilisé par [50] sur des maillages orthogonaux, pour lequel un résultat de convergence est donné d'après [25]. Dans ce chapitre, nous établissons numériquement la convergence du schéma monodomaine défini dans le chapitre 4 et nous déterminons son ordre de convergence pour un cas-test où l'on connaît une solution analytique. Ensuite, des cas-tests plus difficiles seront résolus pour montrer que les solutions numériques obtenues sont bien réalistes. A travers ces cas-tests de difficulté croissante, nous mettrons en évidence la convergence de la solution multidomaine vers la solution monodomaine, convergence dont la preuve théorique a été donnée dans le chapitre 6. Nous donnons aussi des résultats propres à l'optimisation des paramètres en illustrant les différentes approches introduites dans le chapitre 7, en particulier l'utilisation du taux de convergence discret dans un cas de diffusion pure et celle du taux de convergence prenant en compte une diffusion modifiée dans un cas de convection dominante pour des maillages rectangulaires.

Ainsi, après l'étude numérique de l'ordre du schéma, nous considérons successivement un cas en diffusion pure à coefficients discontinus, un cas d'advection-diffusion

à coefficients constants, un problème avec une vitesse de convection variable sur un maillage triangulaire et enfin le cas Pamina présentant une géométrie plus complexe, un maillage non conforme en espace, des coefficients de porosité et diffusion discontinus avec un champ de vitesse variable provenant de la résolution d'un problème de Darcy.

8.1 Ordre du schéma monodomaine

P. Omnes et K. Domelevo [29] ont démontré la convergence du schéma DDFV pour des problèmes stationnaires en diffusion pure à coefficients continus. Ils ont obtenu l'ordre 1 dans la norme H_0^1 et dans la norme L^2 pour des maillages généraux, ainsi qu'un résultat de superconvergence (ordre $2 - \alpha$ en norme L^2 et ordre $1.5 - \alpha$ en norme H_0^1 , $\alpha > 0$) lorsque les cellules diamants sont presque toutes des parallélogrammes, où "presque" signifie que la surface cumulée des cellules diamants qui ne sont pas des parallélogrammes est bornée par $O(h)$. C'est le cas des maillages rectangulaires conformes, des maillages rectangulaires non conformes à condition que les cellules diamants autour de la non conformité soit dans une bande de taille en $O(h)$ et des maillages triangulaire dits homothétiques (après raffinement des triangles en 4 triangles semblables dont les nouveaux sommets sont les points milieux de chaque arête des triangles initiaux) où les points de contrôle des cellules primales sont les barycentres, à la condition que le second membre f soit dans $H^1(\Omega)$ et que la solution exacte soit dans $H^3(\Omega)$. P. Omnes a montré aussi l'ordre 2 en norme L^2 pour les maillages de type Delaunay-Voronoi [86] si f est dans $H^1(\Omega)$ et Ω est polygonal convexe. En revanche, en dehors de ces conditions sur la régularité de f et sur des classes particulières de maillages, des contre-exemples pour lesquels l'ordre 2 en norme L^2 n'est pas vérifié, peuvent être construits [85], déjà en dimension un d'espace. Numériquement (par exemple [84, 14, 68]), l'ordre 2 sur la solution est observé dans le cas d'un problème stationnaire avec une diffusion continue éventuellement anisotrope sur des maillages triangulaires où les arêtes du maillage dual relient les barycentres des cellules primales en passant par les points milieux σ_j des arêtes primales (caractérisation d'un maillage dual dit barycentrique qui est celui qui a été utilisé pour les tests numériques).

Sur un cas simple, nous déterminons l'ordre de convergence du schéma monodomaine défini dans le chapitre 4 pour l'équation (3.54) avec et sans convection, pour un maillage rectangulaire et un maillage triangulaire. Avec une vitesse de convection $b = 0$, ce schéma est le même, hormis la dérivée en temps, que le schéma DDFV défini pour le laplacien dans [29] et le schéma m-DDFV donné dans [14]. D'autre part, avec b non nul, ce schéma est identique sur les mailles primales au schéma hybride utilisé dans [50] qui donne un résultat de convergence d'ordre 1 emprunté à [25]. Ainsi, n'ayant pas de résultats théoriques de convergence, nous espérons trouver des résultats cohérents avec ceux connus ou observés pour ces deux schémas.

Le domaine $\Omega = \Omega^L \cup \Omega^R$ est le carré unité $[0, 1]^2$, avec $\Omega^L = [0, 0.5] \times [0, 1]$ et $\Omega^R = [0.5, 1] \times [0, 1]$. Pour un problème de diffusion pure, les conditions limites sont partout de type Dirichlet. Avec convection, les conditions limites sont de type Dirichlet sur les bords $x = 0$ et $y = 0$, et de type Neumann sur les bords $x = 1$ et $y = 1$, là où $\mathbf{b} \cdot \mathbf{n} \geq 0$. L'intervalle en temps est $(0, T) = (0, 1)$. La porosité vaut $\omega = 1$ et les coefficients de diffusion donnés par $\nu^L = 0.01$ et $\nu^R = 0.01$ ou 10^{-4}

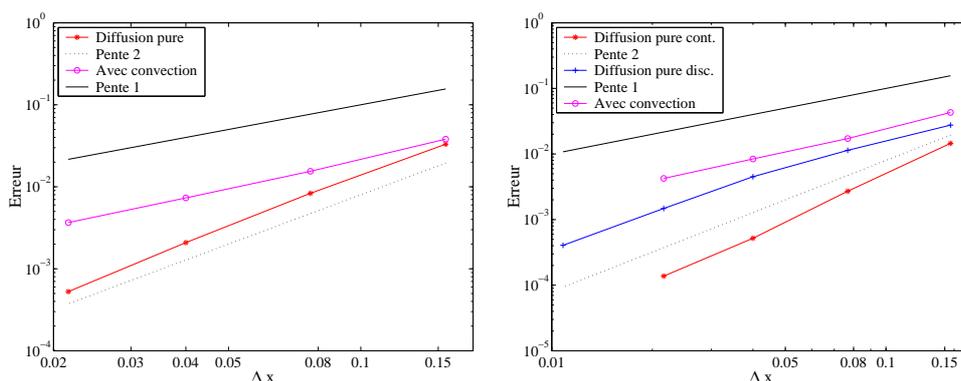


FIGURE 8.1 – Représentation de l’erreur en norme $L^\infty(0, T, L^2(\Omega))$ en fonction du pas d’espace Δx . Le pas de temps est fixé très petit à $\Delta t = 10^{-4}$. A gauche : Maillage rectangulaire. En diffusion pure (courbe rouge avec étoiles) : $\omega = 1$, $\nu^L = 0.01$ et $\nu^R = 0.0001$ et $\mathbf{b} = (0, 0)$; avec convection (courbe magenta avec ronds) : $\omega = 1$, $\nu^L = 0.01$ et $\nu^R = 0.0001$ et $\mathbf{b} = (0.1, 0.1)$. A droite : Maillage triangulaire. En diffusion pure : coefficients continus (courbe rouge avec étoiles) : $\omega = 1$, $\nu^L = 0.01$ et $\nu^R = 0.01$ et $\mathbf{b} = (0, 0)$; coefficients discontinus (courbe bleue avec croix) : $\omega = 1$, $\nu^L = 0.01$ et $\nu^R = 0.0001$ et $\mathbf{b} = (0, 0)$; avec convection (courbe magenta avec ronds) : $\omega = 1$, $\nu^L = 0.01$ et $\nu^R = 0.0001$ et $\mathbf{b} = (0.1, 0.1)$.

définissent les tenseurs de diffusion $\mathbf{K}^L = \nu^L \mathbf{Id}$ et $\mathbf{K}^R = \nu^R \mathbf{Id}$. Quant à la vitesse de convection, elle est soit nulle soit égale à $\mathbf{b} = (0.1, 0.1)$. Le second membre f est calculé à partir de la solution analytique $c = \sin(\pi x) \cdot \sin(\pi y) \cdot \cos(\pi t)$. Notons que cette solution est C^∞ sur Ω : la continuité du flux à l’interface a toujours lieu, que la diffusion soit discontinue ou non, parce que le gradient normal de c est nul en $x = 0.5$.

En partant d’un pas de temps suffisamment petit ($\Delta t = 10^{-4}$) pour n’observer que l’erreur en espace, nous raffinons plusieurs fois le pas d’espace. L’erreur est donnée en norme $L^\infty(0, T, L^2(\Omega))$ en fonction du pas d’espace. Nous considérons d’abord un maillage rectangulaire. Dans ce cas, les points de contrôle des mailles duales sont les barycentres de ces mailles, exceptées sur les mailles duales de bord (rappelons que l’intégration de l’EDP sur les cellules duales de bord est faite dans le cas de conditions de Neumann, non dans le cas des conditions de Dirichlet). Sur la figure 8.1 à gauche, nous observons au moins l’ordre 2 pour le problème instationnaire de diffusion pure à coefficients discontinus et l’ordre 1 avec un terme de convection, ce qui est cohérent avec les résultats théoriques. Nous considérons ensuite un maillage triangulaire, sur lequel les points de contrôle des cellules duales ne sont pas a priori les barycentres (les maillages étant assez réguliers, ils ne s’en éloignent sans doute pas beaucoup). Là encore (figure 8.1 à droite), pour des coefficients de diffusion continus, l’ordre 2 peut encore être observé (pour Δx plus petit) ainsi que l’ordre 1 en convection-diffusion, confortant les résultats numériques déjà observés. En revanche, dans le cas des coefficients discontinus, l’ordre observé est ici un peu moindre (ordre de 1.87). Bien que satisfaisant, ce cas-test ne permet de valider le schéma que pour des fonctions régulières.

Ainsi, dans les paragraphes 8.4 et 8.5 suivants où des cas plus complexes seront considérés, nous visualiserons d’abord la solution monodomaine avant de calculer la solution multidomaine, afin de vérifier que la solution monodomaine obtenue est réaliste par rapport au phénomène physique modélisé.

Dans la suite, l’algorithme de Schwarz utilisé pour la résolution du problème

multidomaine est considéré dans sa version multiplicative (de type Gauss-Seidel), afin de présenter, comme cela est couramment fait, des courbes avec deux fois moins d'itérations. Les conditions de transmission (6.8) et (6.9) sont alors remplacées par

$$\begin{aligned} F_{i_1 j}^{L,n(\ell+1)} + \lambda_j^L c_{\sigma_j}^{L,n(\ell+1)} &= -F_{i_1 j}^{R,n(\ell)} + \lambda_j^L c_{\sigma_j}^{R,n(\ell)} & \forall j : A_j \subset \Gamma_{Rob} \\ F_{k, \Gamma_{Rob}}^{L,n(\ell+1)} + \lambda_k^L c_k^{L,n(\ell+1)} &= -F_{k, \Gamma_{Rob}}^{R,n(\ell)} + \lambda_k^L c_k^{R,n(\ell)} & \forall k \in \Gamma_{Rob} \end{aligned} \quad (8.1)$$

et

$$\begin{aligned} F_{i_1 j}^{R,n(\ell+1)} + \lambda_j^R c_{\sigma_j}^{R,n(\ell+1)} &= -F_{i_1 j}^{L,n(\ell+1)} + \lambda_j^R c_{\sigma_j}^{L,n(\ell+1)} & \forall j : A_j \subset \Gamma_{Rob} \\ F_{k, \Gamma_{Rob}}^{R,n(\ell+1)} + \lambda_k^R c_k^{R,n(\ell+1)} &= -F_{k, \Gamma_{Rob}}^{L,n(\ell+1)} + \lambda_k^R c_k^{L,n(\ell+1)} & \forall k \in \Gamma_{Rob}. \end{aligned} \quad (8.2)$$

D'autre part, l'erreur entre la solution discrète multidomaine à l'itération (ℓ) de l'algorithme de Schwarz et la solution discrète monodomaine est calculée dans la norme $L^2(0, T; L^2(\Omega))$, relativement à l'erreur dans cette même norme entre la solution multidomaine à la première itération ($\ell = 1$) et la solution monodomaine. Cela permet de partir toujours d'une erreur relative égale à 1.

Dans le paragraphe suivant, nous étudions l'effet des paramètres de Robin sur la convergence pour un problème de diffusion pure à coefficients discontinus.

8.2 Problème instationnaire de diffusion pure à coefficients discontinus

Dans le cas d'un problème de diffusion pure, nous avons déterminé dans le paragraphe 7.2 le taux de convergence discret associé à l'algorithme de Schwarz pour un maillage cartésien régulier. Dans ce cas particulier dans lequel nous nous plaçons d'abord, il est possible de comparer la valeur du paramètre qui optimise le taux de convergence continu et celle qui optimise le taux de convergence discret pour des conditions de Robin 1-sided avec *scaling* et Robin 2-sided avec *scaling*. Cependant, lorsque le calcul du taux de convergence discret est compliqué, comme dans le cas d'un maillage triangulaire quelconque, nous cherchons à montrer que l'optimisation continue est une approche qui donne déjà de bons résultats.

On considère l'équation (3.54) avec $\mathbf{b} = 0$ et $\omega = 1$, c'est-à-dire l'équation de diffusion instationnaire

$$\frac{\partial c}{\partial t} - \nabla \cdot (\mathbf{K} \nabla c) = 0, \quad (8.3)$$

où la matrice de diffusion $\mathbf{K} = \nu \mathbf{Id}$ est supposée discontinue à l'interface entre les sous-domaines. Le domaine Ω est le carré unité $[0, 1]^2$, coupé en deux sous-domaines, avec une interface en $x = 0.5$. Ainsi $\Omega_L = [0, 0.5] \times [0, 1]$ et $\Omega_R = [0.5, 1] \times [0, 1]$. L'intervalle en temps est $(0, T) = (0, 1)$. La discrétisation en temps est de pas constant $\Delta t = 1/50$, et le maillage est rectangulaire ou triangulaire selon les cas considérés. Les conditions limites sont de type Dirichlet homogène. Nous considérons la convergence de la solution multidomaine vers la solution monodomaine nulle, avec pour itéré initial un random sur l'interface.

8.2.1 Maillage rectangulaire

Prenons $\nu^R = 0.01$ et $\frac{\nu^R}{\nu^L} \in \{1, 10, 100, 1000\}$. Le choix de ces paramètres assure la condition posée en (7.24) avec (7.29) où $\nu_x = \nu_y$. En effet, en prenant $T = 1$, $\omega = 1$, $L_x^- = 0.5$ et $L_{\Gamma_{Rob}} = 1$, il vient

$$\left| \frac{\sqrt{d^L}}{\nu_x^L} L_x^- \right| \geq \frac{1}{2\nu^L} \left[(2\nu^L \pi)^4 + (4\nu^L \pi)^2 \right]^{\frac{1}{4}}.$$

Comme $\nu^L \leq 0.01$, $(4\nu^L \pi)^2 \gg (2\nu^L \pi)^4$. Nous avons alors

$$\left| \frac{\sqrt{d^L}}{\nu_x^L} L_x^- \right| \geq \sqrt{\frac{\pi}{\nu^L}} \geq 10\sqrt{\pi},$$

et la même égalité peut être montrée sur Ω_R .

Dans la suite, nous considérons un maillage rectangulaire de pas $h = 1/320$.

Vérification de la valeur du paramètre optimisé - Robin 1-sided

Nous vérifions en premier lieu la valeur du paramètre optimisé obtenu pour une condition de Robin 1-sided avec *scaling*, pour différents cas de coefficients de diffusion discontinus. D'après (7.17), les paramètres d'optimisation p^L, p^R du problème continu min-max (7.15) sont alors cherchés pour cette condition de Robin 1-sided avec *scaling* sous la forme $p^L = \nu^R p$ et $p^R = \nu^L p$, où $p > 0$ est le seul paramètre à optimiser. La valeur du paramètre optimisé p^* est obtenue par une optimisation numérique utilisant la fonction *fminsearch* de *Matlab*. Notons que pour chacun des cas étudiés, nous observons une équioscillation à deux points (voir définition 7.1).

Nous déterminons par ailleurs les paramètres optimisés λ_G^{L*} et λ_G^{R*} solutions du problème min-max (7.59) relatif au taux de convergence discret ρ_G défini par (7.58). Pour une condition de Robin 1-sided avec *scaling*, (7.60) définit $\lambda_G^{L*} = \nu^R p_G^*$ et $\lambda_G^{R*} = \nu^L p_G^*$ de telle sorte que l'optimisation a lieu pour cette condition sur un unique paramètre p_G^* .

Pour réaliser ce cas-test, nous faisons varier la valeur du paramètre d'optimisation $p > 0$ en calculant l'erreur associée à chacun d'eux après 20 itérations de l'algorithme de Schwarz. Sur chacune des courbes obtenues, nous plaçons la valeur du paramètre optimisé p^* par un rond rouge et celle du paramètre optimisé associé au taux de convergence discret p_G^* par un losange vert (voir figure 8.2).

Remarquons tout d'abord que lorsque la valeur de ν^L tend vers 0, seule la dérivée en temps tend à subsister dans l'EDP en (8.3). Une unique itération de l'algorithme de Schwarz suffit alors pour la convergence de la solution multidomaine. Cela explique que l'échelle de l'erreur est de plus en plus petite pour les différentes valeurs de ν^L .

D'autre part, lorsque ν^L tend vers 0, les formules du taux de convergence discret primal (7.56) et dual (7.57) permettent de conclure que la valeur optimale de λ_G^R tend vers 0. D'après la figure 8.2, la valeur de p_G^* est de l'ordre de 10^2 quelque soit les valeurs de ν^L . Mais puisque $\lambda_G^R = \nu^L p_G^*$, cela signifie que la valeur optimisée λ_G^{R*} diminue en même temps que ν^L et donc tend bien aussi vers 0.

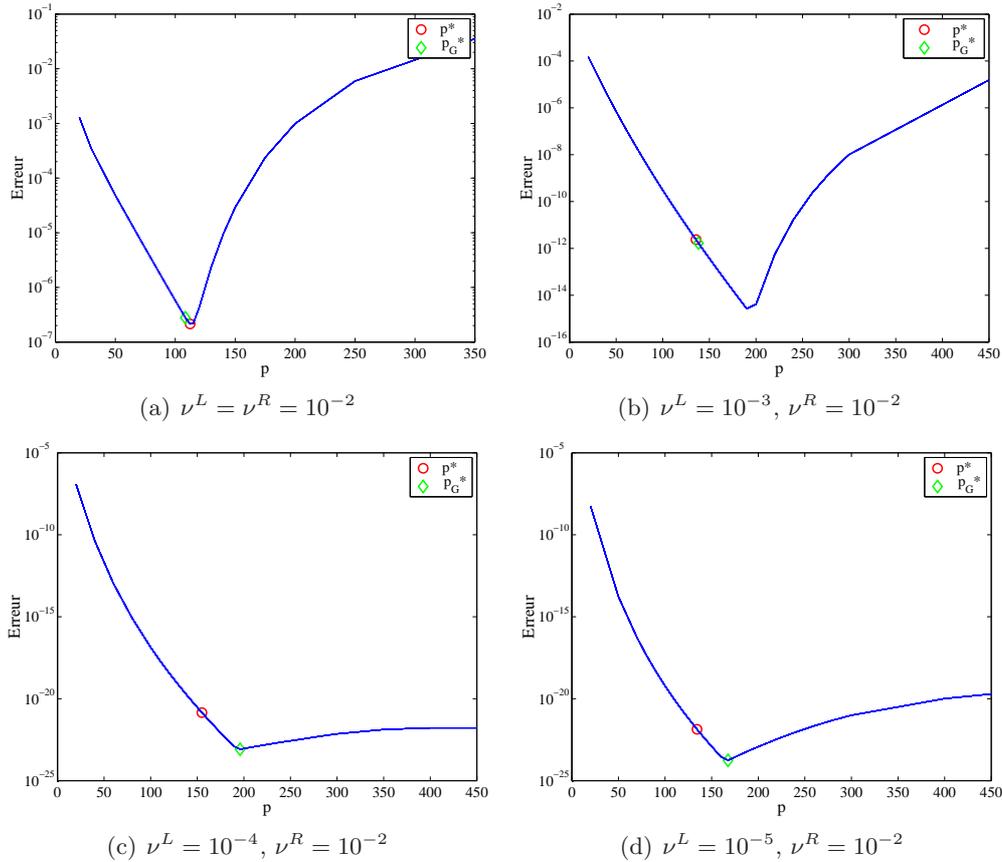


FIGURE 8.2 – Erreur entre la solution multidomaine et la solution monodomaine nulle après 20 itérations de l’algorithme de Schwarz avec une condition de Robin 1-sided avec *scaling*, pour une gamme de paramètres d’optimisation p et pour différentes valeurs de diffusions discontinues. Cas d’un maillage rectangulaire avec $\Delta x = 1/320$ et $\Delta t = 1/50$. Le rond rouge correspond à la valeur de p^* (relatif au taux de convergence continu) et le losange vert à celle de p_G^* (relatif au taux de convergence discret).

Mis à part le cas avec $\nu^R = 0.01$ et $\frac{\nu^R}{\nu^L} = 10$ où $p_G^* = 138.26$ n’améliore quasiment pas $p^* = 135.65$ (ce qui reste incompris), la valeur du paramètre p_G^* qui optimise le taux de convergence discret est proche de l’optimum numérique, ce qui confirme que la prise en compte du schéma dans l’optimisation des paramètres de Robin est une approche idéale.

Comparaison Robin 1-sided avec *scaling* vs Robin 2-sided avec *scaling*

Pour les cas où $\nu^R = 0.01$, $\frac{\nu^R}{\nu^L} = 10$ et $\nu^R = 0.01$, $\frac{\nu^R}{\nu^L} = 1000$, nous comparons la vitesse de convergence en utilisant une condition de Robin 1-sided avec *scaling* ou une condition de Robin 2-sided avec *scaling*. Dans chacun de ces deux cas, les paramètres de Robin définis par (7.17) et (7.60) sont ceux qui optimisent le taux de convergence continu ou discret. Les 4 courbes de convergence obtenues sont montrées sur la figure 8.3.

Dans le cas où $\nu^R = 0.01$, $\frac{\nu^R}{\nu^L} = 10$ (figure 8.3(a)), nous remarquons que la condition d’interface de Robin 2-sided avec *scaling* (2 paramètres d’optimisation indépendants) améliore nettement la convergence par rapport à la condition de

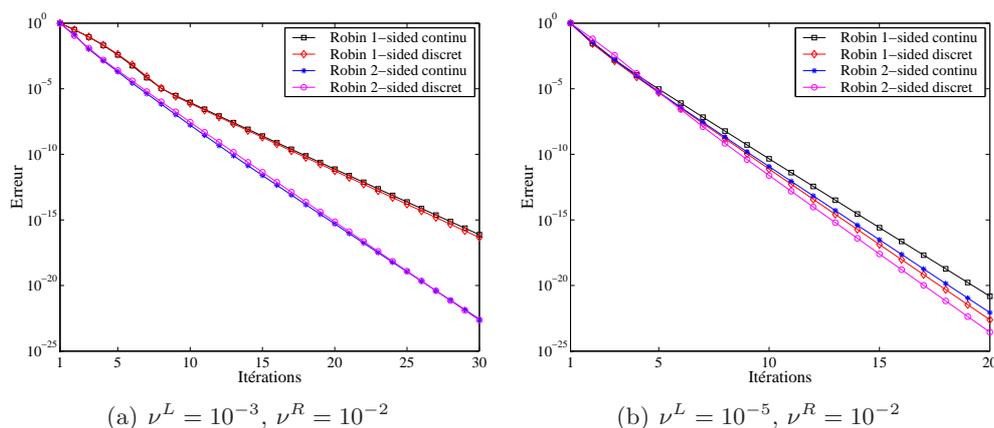


FIGURE 8.3 – Vitesse de convergence sur les 30 ou 20 premières itérations de l'algorithme de Schwarz dans deux cas : (a) : $\nu^R = 0.01$, $\frac{\nu^R}{\nu^L} = 10$ et (b) : $\nu^R = 0.01$, $\frac{\nu^R}{\nu^L} = 1000$. Maillage rectangulaire avec $\Delta x = 1/320$ et $\Delta t = 1/50$. La vitesse de convergence est comparée pour le ou les paramètres optimisant soit le taux de convergence continu, soit le taux de convergence discret. Pour chacun de ces deux cas, nous comparons les résultats obtenus avec une condition de Robin 1-sided avec *scaling* (carrés noirs dans le cas continu et losanges rouges dans le cas discret) ou de Robin 2-sided avec *scaling* (points bleus dans le cas continu et ronds magenta dans le cas discret).

Robin 1-sided. De même que précédemment (figure 8.2(b)), nous constatons que la prise en compte du taux de convergence discret dans le calcul des paramètres optimisés pour la condition de Robin 2-sided avec *scaling* n'améliore pas non plus la convergence par rapport au cas continu.

Dans le cas où $\nu^R = 0.01$, $\frac{\nu^R}{\nu^L} = 1000$ (figure 8.3(b)), nous constatons assez peu de différences entre les quatre courbes : pour une précision donnée, le nombre d'itérations varie peu selon le cas considéré. Nous observons néanmoins le comportement attendu, savoir que le cas discret améliore le cas continu, et que la condition de Robin 2-sided avec *scaling* donne une meilleure convergence que la condition de Robin 1-sided avec *scaling*.

A partir de ces cas-tests 2D en diffusion pure, nous pouvons conclure que la prise en compte du taux de convergence discret apporte une amélioration limitée en terme de vitesse de convergence par rapport à l'optimisation du taux de convergence continu. Cela revient à dire que les paramètres optimisant le taux de convergence continu sont adaptés pour les conditions d'interface discrétisées. Nous allons le vérifier en prenant un maillage triangulaire quelconque, pour lequel nous n'avons pas défini de taux de convergence discret.

8.2.2 Maillage triangulaire

Nous considérons maintenant un maillage triangulaire tel que le pas sur l'interface et sur chacun des bords soit égal à $\Delta x = 1/160$. Nous cherchons à comparer les paramètres optimisant le taux de convergence continu à l'optimum numérique dans le cas des conditions de Robin 2-sided avec *scaling* et de Robin 1-sided avec *scaling*.

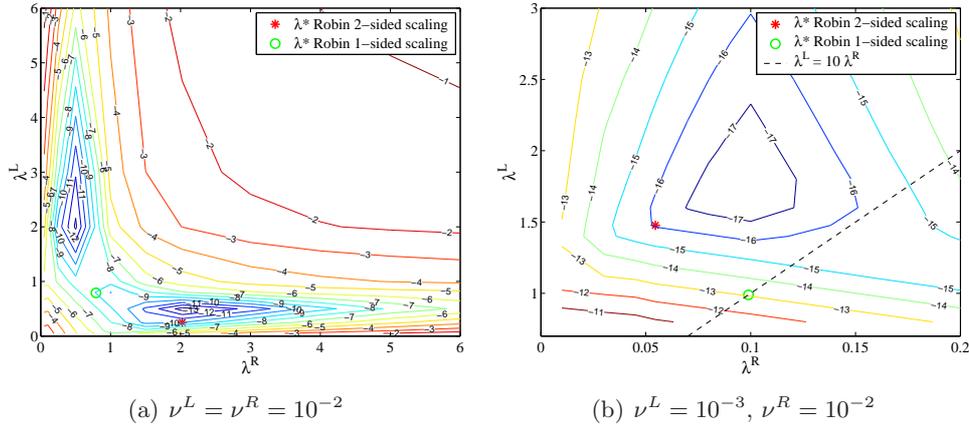


FIGURE 8.4 – Erreur après 20 itérations de l'algorithme de Schwarz pour différentes valeurs de $\lambda = (\lambda^L, \lambda^R)$. Maillage triangulaire tel que le pas d'espace $\Delta x = 1/160$ sur les bords. Le paramètre optimisé avec une condition de Robin 2-sided avec *scaling* est représenté par l'étoile rouge, tandis que le paramètre optimisé avec une condition de Robin 1-sided avec *scaling* est visualisé par le rond vert. Les autres valeurs des paramètres d'optimisation λ^L et λ^R . Dans le cas où la diffusion est discontinue (à droite), la droite en pointillé représente l'ensemble sur lequel est cherché le couple des paramètres optimisés dans le cas d'une condition de Robin 1-sided avec *scaling*.

Vérification de la valeur du paramètre optimisé - Robin 2-sided

Pour des valeurs de diffusion $\nu^R = 0.01$ et $\nu^L = 0.01$ ou $\nu^L = 0.001$, nous cherchons d'une part à vérifier que le couple de paramètres optimisés $\lambda^* = (\lambda^{L*}, \lambda^{R*})$ obtenu à partir du taux de convergence continu pour une condition d'interface de Robin 2-sided avec *scaling* (défini en (7.17)) est suffisamment proche de la valeur numérique optimale. D'autre part, nous comparons les deux couples de paramètres optimisés pour les deux conditions 1-sided et 2-sided avec *scaling*.

Pour cela, les lignes de niveaux de l'erreur au bout de 20 itérations de l'algorithme de Schwarz sont tracées sur la figure 8.4 pour différents couples de paramètres $\lambda = (\lambda^L, \lambda^R)$ tels que $\lambda^L = \nu^R p_1$ et $\lambda^R = \nu^L p_2$. Le couple de paramètres optimisés relatif à la condition de Robin 2-sided avec *scaling* est marqué par une étoile rouge, tandis que celui relatif à la condition de Robin 1-sided avec *scaling* ($\lambda^{L*} = \nu^R p_1^*$ et $\lambda^{R*} = \nu^L p_2^*$ d'après (7.17)) est désigné par un cercle vert.

Dans les deux cas présentés sur la figure 8.4, nous pouvons confirmer la conclusion précédente quant à l'amélioration qu'apporte la condition de Robin 2-sided par rapport à la condition de Robin 1-sided (notons que la figure 8.4(b) ne peut pas être rapprochée de la figure 8.3(a) ou 8.2(b) puisque le pas d'espace y est différent).

Par ailleurs, l'étoile rouge (paramètre optimisé) étant très proche de la valeur numérique optimale, cela signifie que l'optimisation des paramètres à partir du taux de convergence continu est une bonne approche.

Sur la figure (8.4(a)), nous voyons que l'optimum numérique ne se situe pas sur la droite $\lambda^L = \lambda^R$. Cela montre que les paramètres obtenus avec une condition de Robin 1-sided ne pourront pas approcher correctement l'optimum numérique, étant cherchés le long de cette droite. La condition pour approcher l'optimum numérique est donc de chercher les paramètres λ^L et λ^R de manière indépendante dans l'ensemble du plan. C'est justement ce que réalise la condition de Robin 2-sided. Ainsi, cette figure montre visuellement comment la condition de Robin 2-sided améliorera la vitesse de convergence de l'algorithme. Sur la figure (8.4(b)), les mêmes

remarques peuvent être faites. Nous avons tracé la droite d'équation $\lambda^L = 10\lambda^R$ qui correspond à l'ensemble des valeurs que peuvent prendre les paramètres optimisés pour une condition de Robin 1-sided avec *scaling*.

Nous voyons sur les deux sous-figures que les valeurs des paramètres optimisés pour la condition de Robin 2-sided avec *scaling* sont proches de l'optimum numérique, c'est-à-dire de la valeur qui donne la convergence la plus rapide de l'algorithme multidomaine discret DDFV. Le paramètre optimisé avec la condition de Robin 1-sided avec *scaling* est à comparer avec ce que serait l'optimum pour une telle condition. Sur la figure de gauche, la valeur obtenue par l'optimisation du taux de convergence continu (rond vert) semble optimale. Sur la figure de droite, l'optimum serait situé vers $\lambda^R = 0.15$, plutôt qu'en $\lambda^R = 0.1$.

Pour résumer, nous avons vu que la prise en compte du taux de convergence discret pour le problème de diffusion pure sur des maillages rectangulaires n'améliorait pas beaucoup la vitesse de convergence par rapport au cas continu. Sur des maillages triangulaires, nous avons observé que les paramètres de la condition de Robin 2-sided (avec *scaling*) optimisant le taux de convergence continu sont très proches de l'optimum numérique. Cela confirme ainsi que l'optimisation du taux de convergence continu est une bonne approche, surtout lorsqu'est utilisée une condition de Robin 2-sided (avec *scaling*).

Dans la suite, nous nous intéressons à un problème de convection-diffusion à coefficients constants pour différentes valeurs de vitesse de convection. Nous comparons la convergence de l'algorithme pour différents paramètres de Robin.

8.3 Problème instationnaire de convection-diffusion à coefficients constants

Pour un tel problème, nous n'avons pas déterminé le taux de convergence discret à cause de la complexité des calculs. Comme nous l'avons déjà dit, utiliser le taux de convergence continu au lieu du taux de convergence discret est d'autant plus cohérent que le schéma numérique utilisé approche mieux l'équation continue.

Or nous avons expliqué dans le paragraphe 7.3 que la diffusion numérique engendrée par le décentrage du terme de convection n'était pas prise en compte par l'optimisation du taux de convergence continu. Nous avons vu qu'un moyen de l'intégrer au problème d'optimisation est de remplacer, dans l'EDP continue, le coefficient de diffusion ν par les coefficients de diffusions modifiées ν'_P ou ν'_D définis par (7.70) et (7.73), rendant l'équation continue ainsi modifiée plus proche du schéma numérique lorsque le phénomène de convection domine celui de la diffusion.

Nous définissons différentes valeurs de convection, en passant d'un cas dominé par la diffusion à un cas largement dominé par la convection. Pour chacun de ces cas, nous cherchons à vérifier l'intérêt d'utiliser les paramètres (7.80) (resp. (7.81)) optimisant le taux de convergence continu (7.78) (resp. (7.79)), exprimé avec la nouvelle diffusion modifiée pour chacun des maillages primal et dual. Pour cela, nous comparons la vitesse de convergence de l'algorithme tenant compte des paramètres optimisés utilisant ce taux de convergence modifiée ou des paramètres basés sur le

taux de convergence continu.

8.3.1 Différentes valeurs de convection

On considère ici l'équation (3.54) avec $\omega = 1$ et $f = 0$, rappelée ci-dessous

$$\frac{\partial c}{\partial t} - \nabla \cdot (\mathbf{K} \nabla c - \mathbf{b}c) = 0,$$

de solution initiale nulle. Le domaine $\Omega = [0, 1]^2$ est le même que précédemment, avec une décomposition en deux sous-domaines $\Omega_L = [0, 0.5] \times [0, 1]$ et $\Omega_R = [0.5, 1] \times [0, 1]$. Les conditions limites sont de type Dirichlet homogène sur les bord $x = 0$ et $y = 0$ et de type Neumann homogène sur les bords $x = 1$ et $y = 1$. L'intervalle en temps est $(0, T) = (0, 1)$. Le maillage est rectangulaire de manière à pouvoir utiliser les calculs du chapitre 7. Les discrétisations en espace et en temps sont de pas constants, respectivement $h = 1/160$ et $\Delta t = 1/50$. La matrice de diffusion $\mathbf{K} = \nu \mathbf{Id}$ est définie par le coefficient de diffusion constant $\nu = 0.01$. Comme dans le cas-test précédent, nous considérons l'erreur entre la solution multidomaine et la solution monodomaine nulle, en prenant pour itéré initial un random sur l'interface.

Vérification de la valeur du paramètre optimisé - Robin 1-sided

Nous considérons différentes valeurs constantes de vitesse de convection \mathbf{b} , successivement $(0.1, 0.1)$, $(1, 1)$, $(4, 4)$ et $(10, 10)$. Nous nous plaçons d'abord dans le cas de la condition Robin 1-sided. Pour plusieurs valeurs de $p > 0$, nous traçons (Figure 8.5) l'erreur obtenue après 20 itérations de l'algorithme de Schwarz associée à chaque valeur de p via les paramètres λ^L et λ^R définis par (7.12) où $p^L = p^R = p$.

Quelque soit la valeur de \mathbf{b} , nous calculons l'unique paramètre optimisé p^* relatif à la condition de Robin 1-sided obtenu par la résolution du problème d'optimisation (7.15).

Par ailleurs, suivant la définition (7.73) de la diffusion modifiée ν_D' sur les mailles duales appliquée à notre cas ($\nu = 0.01$ et $h = 1/160$), nous avons

$$\nu_D' = \nu \left(1 + \frac{b_x h}{2\nu_x} \right) = \nu \left(1 + \frac{b_x}{3.2} \right).$$

- Pour $b_x = 0.1$, $\nu_D' \approx \nu$, impliquant que la prise en compte de ν_D' (et donc ν_P' car $\nu_P' < \nu_D'$) est inutile. Ils ne sont donc pas calculés dans ce cas.
- Pour $b_x = 1$, $\nu_D' = 1.3125\nu$: la diffusion numérique représente déjà un tiers de la diffusion physique. C'est un cas où le rôle de la convection n'est pas négligeable.
- Pour $b_x = 4$ et $b_x = 10$, ν_D' vaut respectivement 2.25ν et 4.125ν , et il est clair que la prise en compte de la diffusion modifiée peut s'avérer nécessaire.

Ainsi, pour le cas où $\mathbf{b} = (1, 1)$ et les deux cas à convection dominante $\mathbf{b} = (4, 4)$ et $\mathbf{b} = (10, 10)$, nous calculons aussi les erreurs obtenues après 20 itérations de Schwarz avec $\lambda_j = \lambda_k = \lambda_{\nu_P}'^*$ puis $\lambda_j = \lambda_k = \lambda_{\nu_D}'^*$ et enfin $\lambda_j = \lambda_{\nu_P}'^*$ et $\lambda_k = \lambda_{\nu_D}'^*$, où les paramètres primaires λ_j et duaux λ_k interviennent dans les conditions de transmission (8.1) et (8.2) et les paramètres optimisés $\lambda_{\nu_P}'^*$ et $\lambda_{\nu_D}'^*$ sont liés par (7.76)

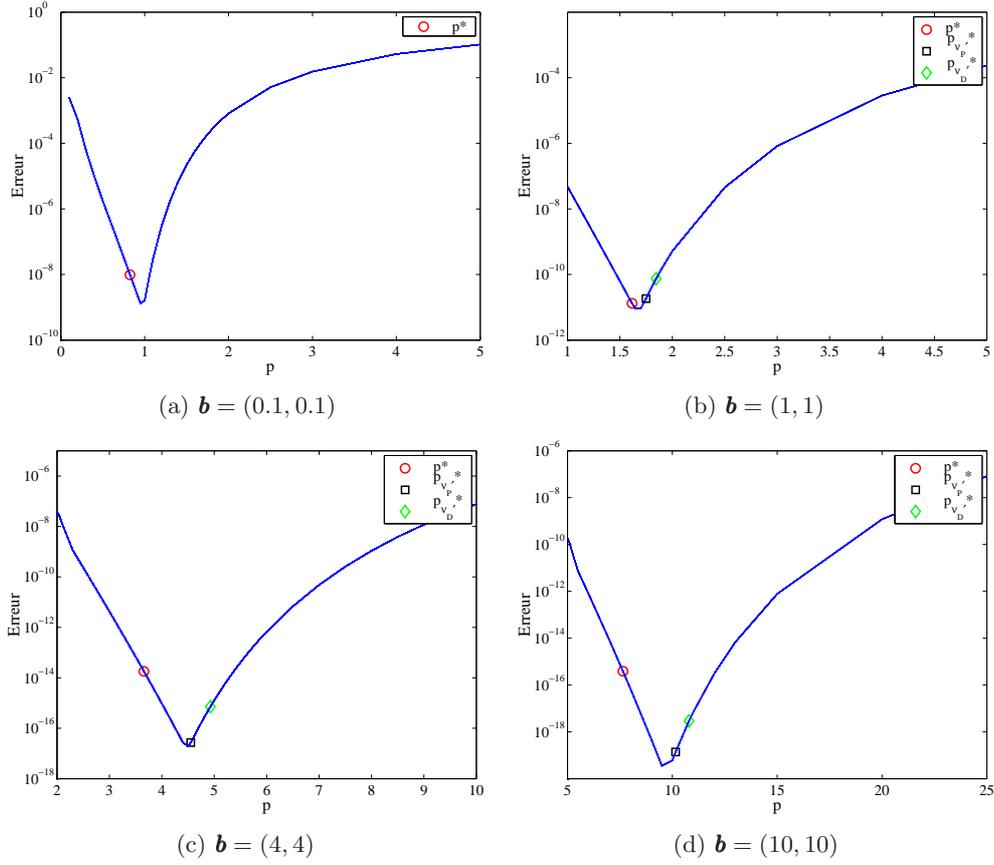


FIGURE 8.5 – Erreur entre la solution multidomaine et la solution monodomaine nulle après 20 itérations de l’algorithme de Schwarz avec une condition de Robin 1-sided avec *scaling*, pour une gamme de paramètres d’optimisation p et pour différentes valeurs de vitesse de convection \mathbf{b} . Maillage rectangulaire avec $\Delta x = 1/160$ et $\Delta t = 1/50$. Le rond rouge correspond à la valeur de p^* (relatif au taux de convergence continu avec le coefficient de diffusion ν), le carré noir et le losange vert correspondent aux valeurs du paramètre optimisé $p_{\nu'_P}^*$ et $p_{\nu'_D}^*$ (relatifs au taux de convergence continu avec le coefficient de diffusion modifiée ν'_P et ν'_D).

et (7.77) aux paramètres $p_{\nu'_P}^*$ et $p_{\nu'_D}^*$ qui sont solutions des problèmes d’optimisation (7.78) et (7.79).

Cherchant à comparer l’optimum numérique et la valeur du paramètre optimisé p^* (resp. $p_{\nu'_P}^*$ ou $p_{\nu'_D}^*$) reliés aux paramètres λ^* (resp. $\lambda_{\nu'_P}^*$ ou $\lambda_{\nu'_D}^*$), nous représentons pour toutes les valeurs de \mathbf{b} le paramètre optimisé p^* par un cercle rouge et dans les trois seuls cas convectifs mentionnés plus haut (cf figures 8.5(b), 8.5(c) et 8.5(d)) les paramètres optimisés $p_{\nu'_P}^*$ (rond noir) et $p_{\nu'_D}^*$ (rond vert).

En calculant l’erreur avec les paramètres $\lambda_j = \lambda_k = \lambda_{\nu'_P}^*$ et $\lambda_j = \lambda_k = \lambda_{\nu'_D}^*$, on voit l’influence de chacun des paramètres optimisés $\lambda_{\nu'_P}^*$ et $\lambda_{\nu'_D}^*$ pris séparément, mais seul le cas où $\lambda_j = \lambda_{\nu'_P}^*$ et $\lambda_k = \lambda_{\nu'_D}^*$ a vraiment du sens par rapport au schéma DDFV utilisé (voir les détails dans le paragraphe 7.3).

Nous observons sur la figure 8.5 que le paramètre optimisé p^* s’écarte de l’optimum numérique lorsque la convection est forte (voir figures 8.5(c) et 8.5(d)). En revanche le cas où $\mathbf{b} = (1, 1)$, qui semble un cas limite en raison de la valeur de $\nu'_D = 1.3125\nu$ seulement d’un tiers supérieure à celle de ν , semble montrer que la prise en compte de la diffusion modifiée n’est avantageuse que si la convection est

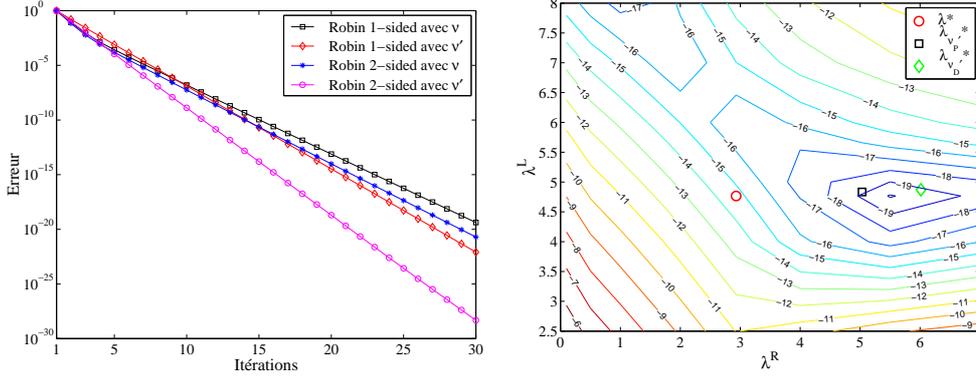


FIGURE 8.6 – Cas $\mathbf{b} = (4, 4)$. Maillage rectangulaire avec $\Delta x = 1/160$ et $\Delta t = 1/50$. (a) Vitesse de convergence sur les 30 premières itérations de l’algorithme de Schwarz avec une condition de Robin 1-sided (resp. Robin 2-sided) avec $\lambda_j = \lambda_k = \lambda^*$ (carrés noirs en Robin 1-sided et étoiles bleues en Robin 2-sided) ou $\lambda_j = \lambda_{\nu'_P}^*$ et $\lambda_k = \lambda_{\nu'_D}^*$ (losanges rouges en Robin 2-sided et ronds magenta en Robin 2-sided). (b) Lignes de niveaux de l’erreur après 20 itérations pour plusieurs couples (λ^L, λ^R) . Le paramètre optimisé λ^* (resp. $\lambda_{\nu'_P}^*$ et $\lambda_{\nu'_D}^*$) est représenté par un rond rouge (resp. carré noir et losange vert).

fortement dominante (disons $\nu_D' \approx 2\nu$). Les résultats numériques confirment donc que les paramètres optimisant le taux de convergence continu sont d’autant moins adaptés au problème discret que la valeur de \mathbf{b} augmente et engendre de la diffusion numérique. Cela justifie l’utilisation des nouveaux paramètres optimisés $p_{\nu'_P}^*$ et $p_{\nu'_D}^*$ introduits dans le paragraphe 7.3.2. Dans les cas étudiés, c’est clairement $p_{\nu'_P}^*$ qui est le meilleur, dans le sens où il est le plus proche de l’optimum numérique en comparaison des autres paramètres considérés.

Vérification de la valeur du paramètre optimisé - Robin 2-sided

Pour mieux voir comment la prise en compte de la diffusion modifiée améliore le cas convectif $\mathbf{b} = (4, 4)$, nous traçons la courbe de l’erreur en fonction des itérations. Nous considérons les conditions de Robin 1-sided avec *scaling* et de Robin 2-sided avec *scaling*, d’une part avec $\lambda_j = \lambda_{\nu'_P}^*$ et $\lambda_k = \lambda_{\nu'_D}^*$ définis par (7.76), (7.77), (7.80) et (7.81), d’autre part avec $\lambda_j = \lambda_k = \lambda^*$ défini par (7.16) et (7.17) – voir la figure 8.6(a). Nous constatons que sur les premières itérations, la vitesse de convergence est meilleure avec le paramètre optimisé λ^* . Si ce n’est qu’au bout d’une dizaine d’itérations (pour une erreur d’environ $7 \cdot 10^{-7}$) dans le cas de la condition de Robin 1-sided que la convergence devient meilleure avec les paramètres optimisés $\lambda_{\nu'_P}^*$ et $\lambda_{\nu'_D}^*$, c’est au bout de 5 itérations (pour une erreur de 10^{-4}) dans le cas de la condition de Robin 2-sided. En revanche, pour une erreur de 10^{-10} , l’amélioration est déjà bien sensible dans le cas de la condition Robin 2-sided.

Pour cette même valeur de $\mathbf{b} = (4, 4)$, nous donnons dans la figure 8.6(b) les lignes de niveaux de l’erreur associée à différents couples de paramètres (λ^L, λ^R) . Nous représentons le couple des paramètres optimisés $\lambda^* = (\lambda^{L*}, \lambda^{R*})$ (rond rouge) vérifiant le problème d’optimisation continu avec ν , ainsi que les paramètres optimisés $\lambda_{\nu'_P}^* = (\lambda_{\nu'_P}^{L*}, \lambda_{\nu'_P}^{R*})$ (carré noir) et $\lambda_{\nu'_D}^* = (\lambda_{\nu'_D}^{L*}, \lambda_{\nu'_D}^{R*})$ (losange vert) pris séparément ($\lambda_j = \lambda_k = \lambda_{\nu'_P}^*$ d’une part et $\lambda_j = \lambda_k = \lambda_{\nu'_D}^*$ d’autre part), afin de pouvoir les représenter sur la figure 8.6(b) et les comparer chacun à l’optimum numérique. Après

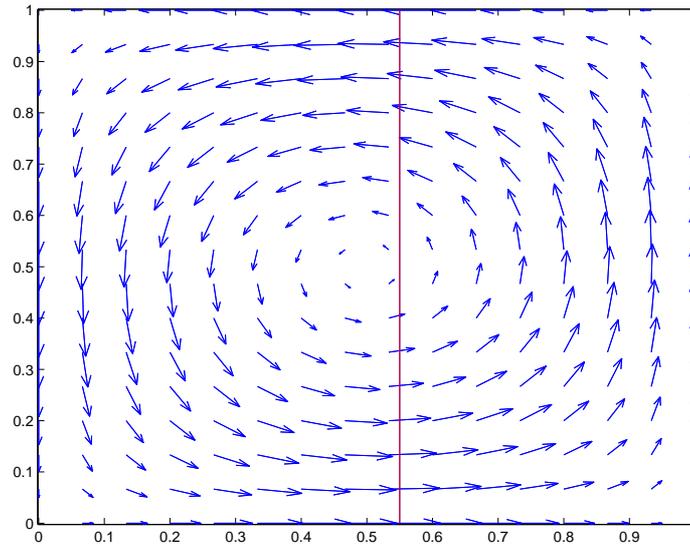


FIGURE 8.7 – Champ de vitesse de convection : vitesse tournante.

20 itérations de l'algorithme de Schwarz, les paramètres optimisés utilisant la valeur de ν' sont très proches de l'optimum numérique, à la différence du paramètre optimisé λ^* . Cela rejoint la conclusion donnée pour la condition Robin 1-sided (figure 8.5) quant à l'amélioration apportée par la prise en compte de la diffusion modifiée. Pour un nombre suffisant d'itérations et une vitesse de convection très dominante, nous pouvons conclure que l'utilisation des paramètres optimisés tenant compte de la diffusion modifiée apporte un réel gain sur la vitesse de convergence.

Dans le paragraphe suivant, nous allons considérer un cas à vitesse de convection variable sur un maillage triangulaire, où la prise en compte de la diffusion modifiée aurait pu être un atout supplémentaire. Cependant, étendre les calculs du paragraphe 7.3.2 au cas d'un maillage triangulaire n'est pas immédiat. En effet, la diffusion modifiée dépendant de $\mathbf{b} \cdot \mathbf{n}$, elle varie donc arête par arête. La question est donc de savoir quelle valeur de $\mathbf{b} \cdot \mathbf{n}$ il est judicieux de considérer. Nous pensons par exemple à une moyenne sur toutes les arêtes ou aux valeurs sur les arêtes de l'interface.

8.4 Problème instationnaire de convection-diffusion avec une vitesse tournante

Sur le problème de convection-diffusion (3.54) à vitesse \mathbf{b} variable, nous montrons la solution monodomaine calculée à partir du schéma présenté dans le chapitre (4) et la convergence de la solution multidomaine vers la solution monodomaine, validant ainsi le schéma monodomaine et le schéma multidomaine. Du fait de la vitesse variable, nous déterminerons les paramètres optimisés de Robin variables par arête primale et par arête duale. Comme nous considérons le cas d'un maillage triangulaire où nous n'avons pas défini le problème d'optimisation adapté à une nouvelle diffusion modifiée, nous nous restreignons à utiliser arête par arête le taux de convergence continu standard (avec ν) bien que le problème soit dominé par la

convection. Nous représenterons les valeurs des paramètres optimisés et le taux de convergence associé le long de l'interface.

Le domaine Ω est le carré unité, décomposé en deux sous-domaines Ω_L et Ω_R séparés par l'interface $\{x = 0.55\}$. Les conditions limites sont de type Dirichlet homogène partout sur $\partial\Omega$. Le maillage recouvrant le domaine Ω est triangulaire et les pas d'espace sur l'interface et les bord physiques valent $h = 1/100$. Le temps final est $T = 1$, et l'intervalle en temps est décomposé en 50 pas de temps égaux $\Delta t = 1/50$. Les coefficients de diffusion et de porosité sont discontinus : $\nu^L = 0.005$, $\omega^L = 0.2$ et $\nu^R = 0.01$, $\omega^R = 1$. Quant à la convection, elle est donnée par

$$\begin{aligned} b_x &= -\sin(\pi(y - 0.5)) * \cos(\pi(x - 0.5)) \\ b_y &= \cos(\pi(y - 0.5)) * \sin(\pi(x - 0.5)). \end{aligned}$$

Elle est visualisée sur la figure 8.7. La solution initiale vaut

$$c_0(x, y) = 0.5 \exp^{-100[(x-0.6)^2 + (2y-1.5)^2]} \quad (8.4)$$

et le terme source $f = 0$.

Nous montrons sur la figure 8.8 la solution monodomaine obtenue aux temps intermédiaires $t = 6\Delta t$ et $t = 15\Delta t$. Nous observons que la solution numérique est physiquement satisfaisante : le phénomène de convection est clairement apparent, et la discontinuité de la diffusion $x = 0.55$ est visible sur la figure 8.8(b), dans la moitié inférieure. Notons que le phénomène de diffusion physique est largement exagéré par la diffusion numérique liée à la convection. En effet, la diffusion numérique vaut à gauche $\nu^{L'} = \left(1 + \frac{bh}{2\nu^L}\right)\nu^L \sim 2\nu^L$ et à droite $\nu^{R'} = \left(1 + \frac{bh}{2\nu^R}\right)\nu^R \sim 1.5\nu^R$. Aussi, nous voyons que la diffusion numérique réduit la discontinuité de la diffusion : $\nu^R = 2\nu^L$, tandis que $\nu^{R'} = 1.5\nu^{L'}$.

La convergence de la solution multidomaine (avec pour itéré initial un random sur l'interface et avec la solution initiale c_0 définie en (8.4)) vers la solution monodomaine est représentée sur la figure 8.9, jusqu'à la précision proche de l'erreur machine, pour une condition de Robin 1-sided avec *scaling* (en pointillé noir) et une condition de Robin 2-sided avec *scaling* (tracé continu en rouge).

Dans ces conditions d'interface, il convient de prendre en compte la variabilité de la vitesse de convection sur l'interface en considérant des paramètres de Robin différents sur chaque arête. Les conditions d'interface (8.1) et (8.2) étant discrétisées sur chaque arête primale A_j et chaque frontière duale $\partial P_k \cap \Gamma_{Rob}$ associée au sommet $k \in \Gamma_{Rob}$, il nous faut déterminer deux paramètres optimisés par arête primale de bord A_j , notés λ_j^{L*} (du côté de Ω_L) et λ_j^{R*} (du côté de Ω_R) et deux paramètres optimisés sur les frontières duales $\partial P_k \cap \overset{\circ}{\Gamma}_{Rob}$ associées au sommet $k \in \overset{\circ}{\Gamma}_{Rob}$, notés λ_k^{L*} (du côté de Ω_L) et λ_k^{R*} (du côté de Ω_R). Les paramètres optimisés λ_j^{L*} , λ_j^{R*} , λ_k^{L*} et λ_k^{R*} sont définis d'après (7.16) avec $b_x^L = \mathbf{b}^L \cdot \mathbf{n}^L$ et $b_x^R = \mathbf{b}^R \cdot \mathbf{n}^L$ selon (7.2). Nous avons donc

$$\begin{aligned} (\lambda_j^{L*}, \lambda_j^{R*}) &= \left(\frac{(\mathbf{b}^R \cdot \mathbf{n}^L)_{i_1j}}{2} + p_j^{L*}, -\frac{(\mathbf{b}^L \cdot \mathbf{n}^L)_{i_1j}}{2} + p_j^{R*} \right) \\ (\lambda_k^{L*}, \lambda_k^{R*}) &= \left(\frac{(\mathbf{b}^R \cdot \mathbf{n}^L)_k}{2} + p_k^{L*}, -\frac{(\mathbf{b}^L \cdot \mathbf{n}^L)_k}{2} + p_k^{R*} \right) \end{aligned} \quad (8.5)$$

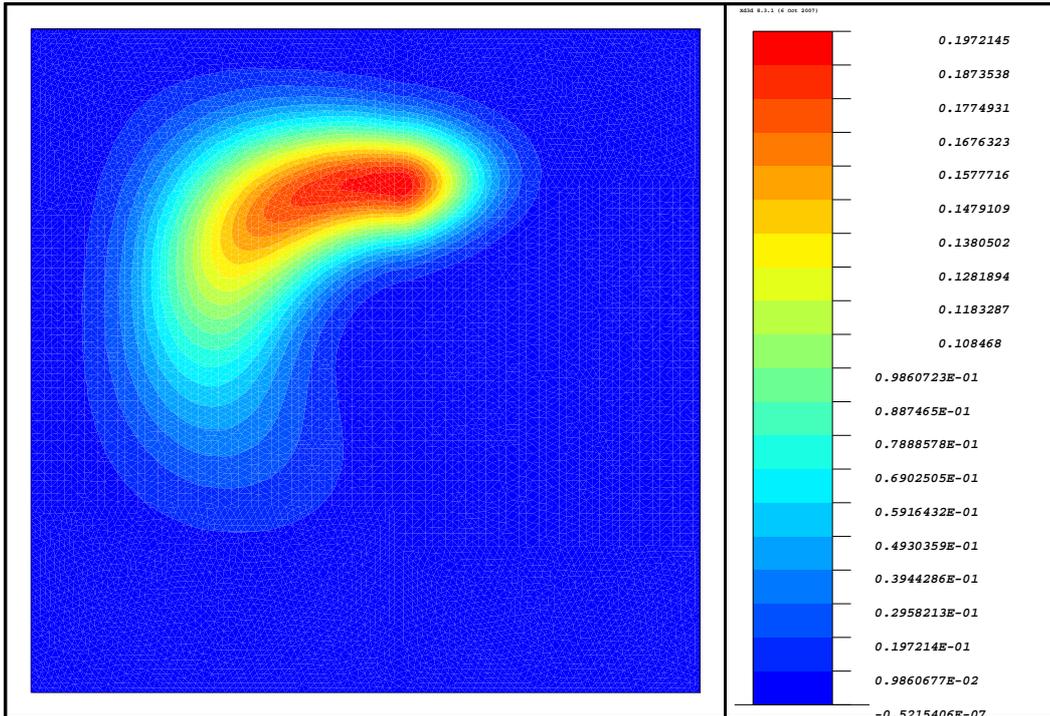
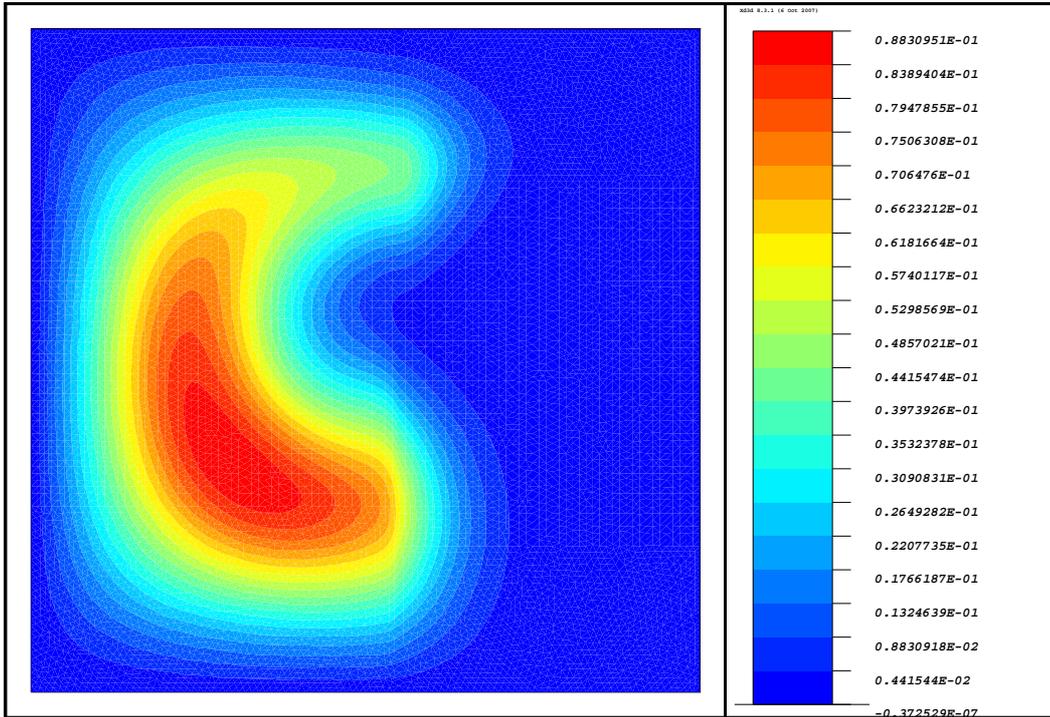

 (a) $t = 6\Delta t$

 (b) $t = 15\Delta t$

 FIGURE 8.8 – Solution monodomaine obtenue à $t = 6\Delta t$ (a) et $t = 15\Delta t$ (b).

où les paramètres p_j^{L*} , p_j^{R*} , p_k^{L*} et p_k^{R*} sont donnés pour les conditions de Robin 1-sided et 2-sided avec *scaling* par (7.16) et (7.17) et où les définitions de $(\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_{i,j}$ et $(\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_k$ ont été donnés dans le paragraphe 5.2.

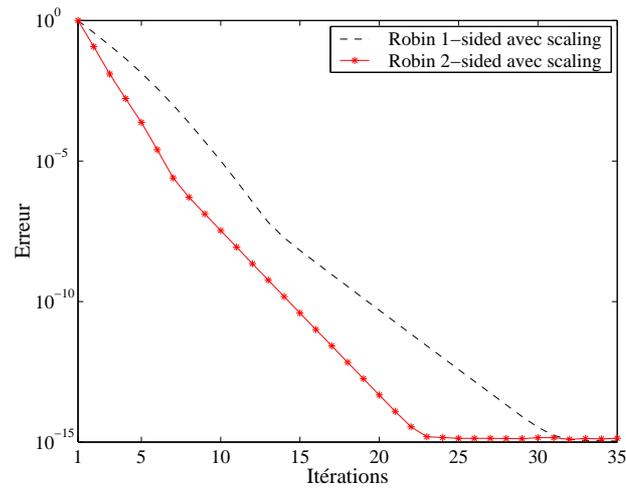


FIGURE 8.9 – Vitesse de convection variable sur l'interface. Maillage triangulaire avec $\Delta x = 1/100$ et $\Delta t = 1/50$. Convergence de la solution multidomaine vers la solution monodomaine. Comparaison de la vitesse de convergence de l'algorithme de Schwarz entre la condition de Robin 1-sided et la condition de Robin 2-sided.

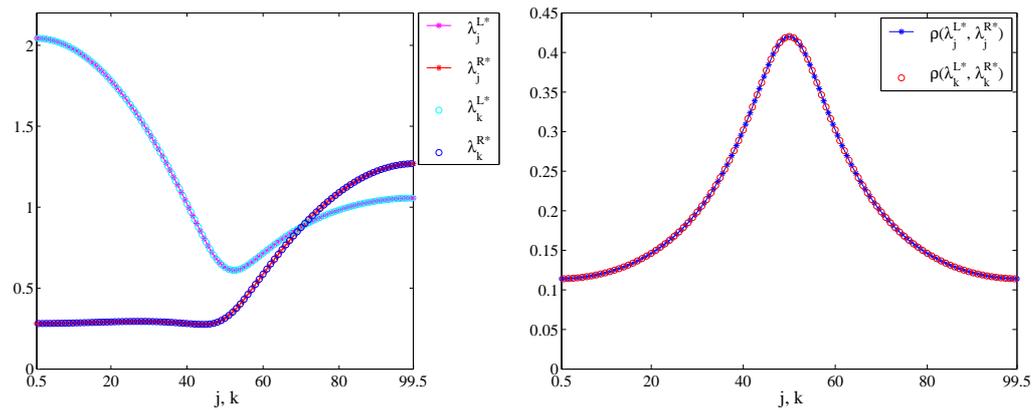


FIGURE 8.10 – Condition de Robin 1-sided : (a) Evolution des paramètres optimisés de Robin le long de l'interface $\{x = 0.55\}$. (b) Taux de convergence associé aux paramètres optimisés.

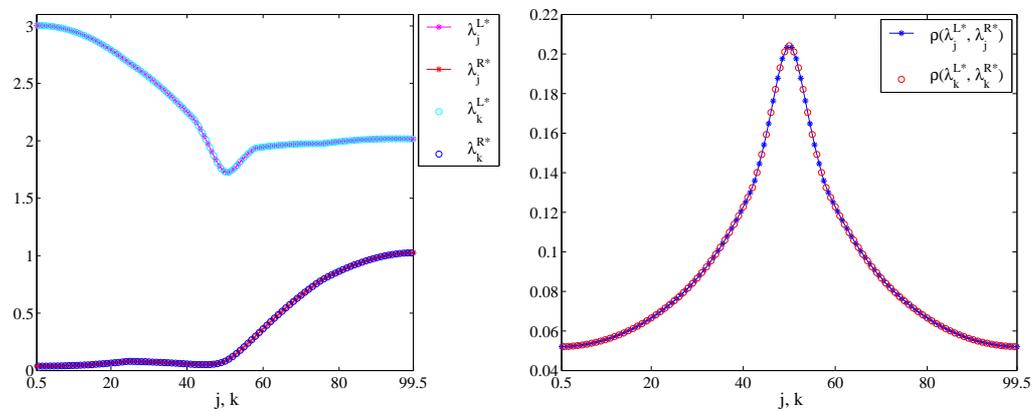


FIGURE 8.11 – Condition de Robin 2-sided : (a) Evolution des paramètres optimisés de Robin le long de l'interface $\{x = 0.55\}$. (b) Taux de convergence associé aux paramètres optimisés.

Sur la figure 8.10(a) (condition de Robin 1-sided avec un *scaling*) et 8.11(a) (condition de Robin 2-sided avec un *scaling*), nous traçons ces paramètres de Robin optimisés le long de l'interface. Les arêtes primales (resp. les frontières duales associées à un sommet) sur l'interface sont considérés dans l'ordre croissant depuis $[0; 0.01]$ (resp. $[0.005; 0.015]$) jusque $[0.99; 1]$ (resp. $[0.985; 0.995]$). On associe aux 100 arêtes A_j rangées dans l'ordre croissant la numérotation croissante $j \in \{0.5, 1.5, \dots, 99.5\}$. Nous faisons de même pour les 99 sommets duaux de $\dot{\Gamma}_{Rob}$ en leur associant la numérotation croissante $k \in \{1, 2, \dots, 99\}$. Nous constatons sans surprise que les courbes des paramètres primaux et duaux sont confondues : cela est dû au fait que les arêtes primales et duales de l'interface se chevauchent et se suivent. Sur les figures 8.10(b) et 8.11(b), nous donnons le taux de convergence associé à ces paramètres optimisés de Robin : le maximum du module du taux de convergence est divisé par deux dans le cas de la condition de Robin 2-sided avec *scaling*, par rapport à la condition de Robin 1-sided avec *scaling*. Cela s'accorde avec la courbe 8.9 donnant la vitesse de convergence de l'algorithme de Schwarz, et montrant le gain que donne la condition de Robin 2-sided avec *scaling* par rapport à la condition de Robin 1-sided avec *scaling*.

En visualisant la solution du problème monodomaine, nous avons vu que le phénomène de vitesse variable semblait bien pris en compte par le schéma monodomaine. Par ailleurs, la vitesse de convergence de la solution multidomaine vers la solution monodomaine à convergence de l'algorithme de Schwarz a permis de valider d'une part que la solution multidomaine coïncidait (à la précision machine près) avec la solution monodomaine confirmant les résultats théoriques du paragraphe 5.4, d'autre part de conclure sur la nette amélioration apportée par la condition de transmission de Robin 2-sided avec *scaling*, par rapport à celle de Robin 1-sided avec *scaling*. Dans la suite, nous proposons de réaliser un cas-test numérique réaliste avec une géométrie plus complexe où un sous-domaine est emboîté dans l'autre, et un maillage non conforme à l'interface entre les deux sous-domaines.

8.5 Problème instationnaire de convection-diffusion - cas Pamina

Comme cela a été présenté dans l'introduction générale, ce cas-test est inspiré de simulations réalisées pour le stockage des déchets radioactifs [47], où les radionucléides sont stockés dans un colis situé dans l'argile. Les galeries creusées (zones endommagées) sont remblayées avec de l'argilite, de propriétés assez différentes de l'argile [5]. Le transport des radionucléides est modélisé par l'équation de convection-diffusion (3.54) instationnaire (de terme source nul) rappelée ci-dessous :

$$\omega \partial_t c - \nabla \cdot (\mathbf{K} \nabla c - \mathbf{bc}) = 0 \quad \text{dans } \Omega \times (0, T). \quad (8.6)$$

Le domaine d'étude global est $\Omega = [0, 10] \times [0, 100]$ (en mètres) décomposé en deux sous-domaines : $\Omega_R = [4, 6] \times [49, 51]$ représentant le colis de dimension $[4.5, 5.5] \times [49.5, 51.5]$ (en rouge sur la figure 8.12(a)) et la couche de remblai (couleur cyan), et $\Omega_L = \Omega \setminus \Omega_R$ représentant l'argile (en jaune sur la figure 8.12(b)). Les conditions limites sont de type Dirichlet homogène sur les bords où $y = 0$ et $y = 100$ et

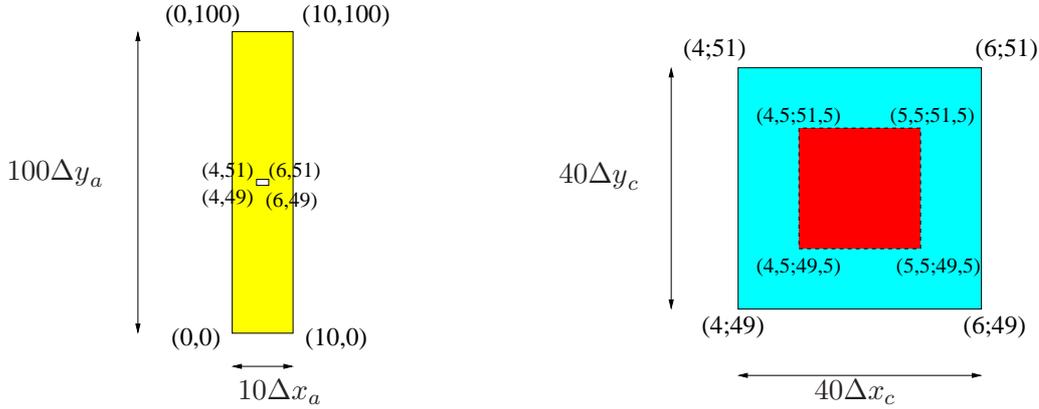


FIGURE 8.12 – Géométrie des deux sous-domaines : (a) Ω_L représente l'argile en jaune, (b) Ω_R représente le remblai de la zone endommagée (cyan) et le colis (rouge).

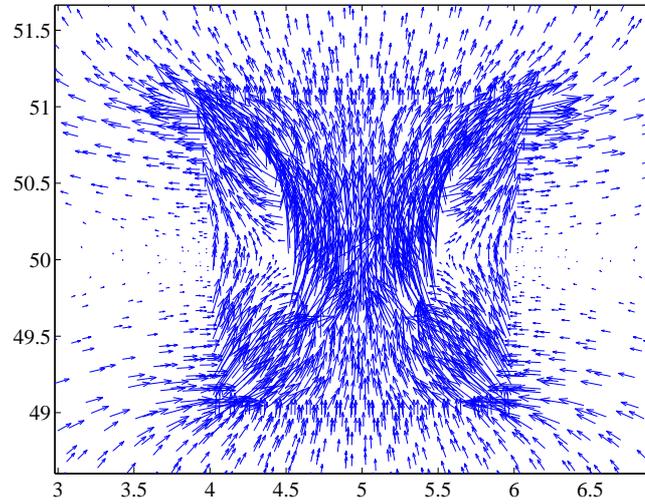


FIGURE 8.13 – Champ de vitesse de convection autour du colis et du remblai.

de type Neumann homogène sur les deux autres bords. Le phénomène est observé sur une période de temps $T = 10^{11}s$ (environ 3170 années). Au temps initial, la concentration en radionucléides vaut $c_0 = 1$ dans le colis et $c_0 = 0$ ailleurs (argile et remblai).

La vitesse de convection supposée indépendante du temps est obtenue par la résolution de l'équation de Darcy régissant l'écoulement stationnaire d'un fluide incompressible à travers un milieu poreux de perméabilité $\boldsymbol{\kappa}$ donnée par

$$\begin{cases} \mathbf{b} = -\boldsymbol{\kappa}\nabla h \\ \nabla \cdot \mathbf{b} = 0 \end{cases} \quad (8.7)$$

avec des conditions limites de type Neumann homogène en $x = 0$ et $x = 10$ et de type Dirichlet définissant h en $x = 0$ ($h = 0$) et $x = 10$ ($h = 100$). Les tenseurs de diffusion $\mathbf{K} = \nu \mathbf{Id}$ et de perméabilité $\boldsymbol{\kappa} = \begin{pmatrix} \kappa_x & 0 \\ 0 & \kappa_y \end{pmatrix}$, ainsi que la porosité ω sont donnés par [47] et rappelés dans le tableau 8.1.

Le maillage considéré est triangulaire non conforme à l'interface (figure 8.14), la non-conformité venant d'un pas de maillage différent de chaque côté de l'interface :

	Colis	Remblai	Argile
Porosité ω	0.1	0.2	0.06
Diffusion ν (m^2/s)	10^{-11}	$2 \cdot 10^{-11}$	$6 \cdot 10^{-13}$
Perméabilité κ_x (m/s)	$5 \cdot 10^{-8}$	$5 \cdot 10^{-11}$	$5 \cdot 10^{-12}$
Perméabilité κ_y (m/s)	$5 \cdot 10^{-8}$	$5 \cdot 10^{-11}$	$5 \cdot 10^{-13}$

Tableau 8.1 – Paramètres physiques dans les trois zones du stockage géologique autour du colis.

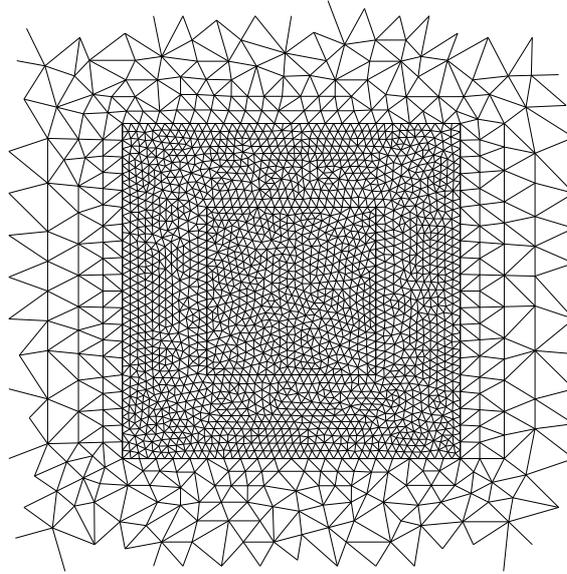


FIGURE 8.14 – Maillage Pamina autour de l'interface entre l'argile (mailles grossières) et l'ensemble colis-zone endommagée (mailles fines). Zoom sur la non conformité entre les mailles de la zone intermédiaire (remblai) et de l'argile.

$h^L = 0.1$ sur l'interface de Ω^L (argile) tandis que $h^R = 0.05$ sur l'interface de Ω^R . La discrétisation en temps est de pas constant $\Delta t = T/100$.

Le problème de Darcy (8.7) anisotrope et discontinu est résolu par le schéma DDFV [84] sur le domaine global Ω . La vitesse de convection obtenue est donnée par la figure 8.13. En référence à la discussion faite dans le chapitre 4, après l'expression (4.28) définissant le flux dual à travers les demi-arêtes de bord, notons que la valeur de $(\mathbf{b} \cdot \mathbf{n})_{j,k}$ sur les demi-arêtes de bord des mailles duales de bord Neumann est donnée par la résolution du problème de Darcy car les conditions limites sont de même type dans les deux problèmes.

Sur la figure 8.15, nous représentons la solution monodomaine obtenue après 1 et 20 pas de temps. Nous avons indiqué en pointillé les limites du colis et de la zone endommagée (remblai). Autant le phénomène de diffusion est clairement visible dans le colis après 2 pas de temps ($t = 1\Delta t = 0.01$), puis dans l'argile à $t = 20\Delta t = 0.2$, autant la convection l'est moins, sinon légèrement sur la figure 8.15(b). Cela s'explique par le fait que la physique du problème modélisé est dominée par la diffusion dans l'argile, et plus fortement encore dans le remblai et le colis. Le phénomène de diffusion se produit selon deux échelles de temps différentes.

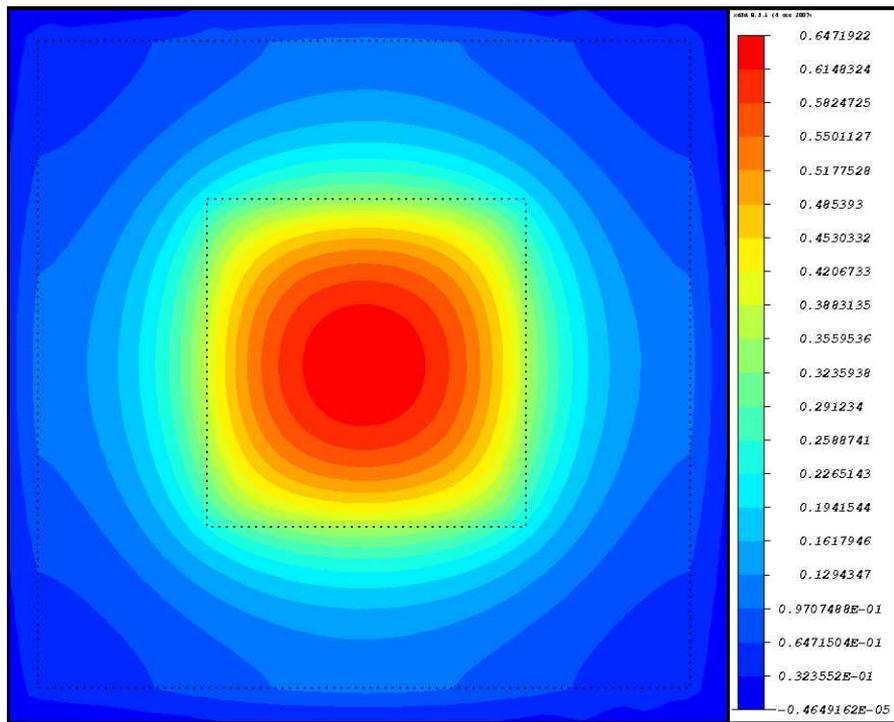
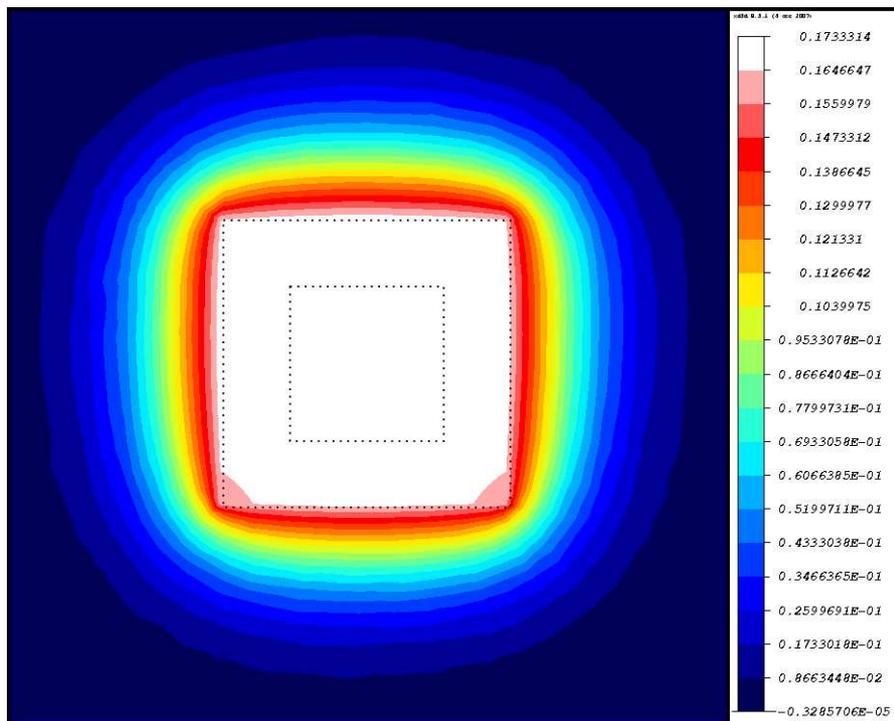
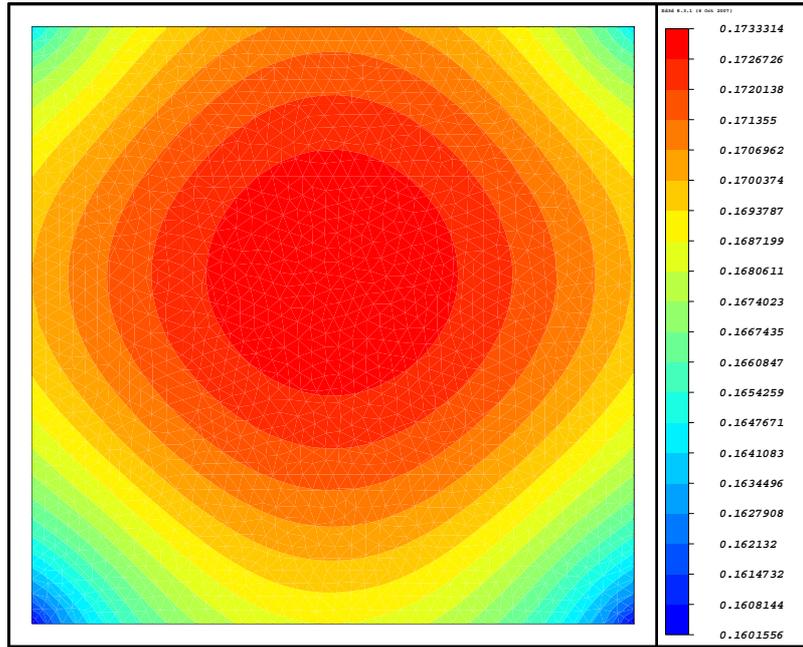
(a) $t = \Delta t$ (b) $t = 20\Delta t$

FIGURE 8.15 – Solution monodomain obtenue à $t = 2\Delta t$ (a) et $t = 20\Delta t$ (b) autour du colis et du remblai.

Dans le colis et le remblai, la diffusion est rapide (figure 8.15(a) au bout de 1 pas de temps) et semble tendre vers un état qui ne bouge plus beaucoup pouvant être

FIGURE 8.16 – Solution monodomaine, sur le colis et le remblai, obtenue à $t = 20\Delta t$.

observé au temps $t = 20\Delta t$ sur la figure 8.15(b), ou plus en détails sur la figure (8.16) représentant seulement le colis et le remblais. Sur cette même figure (8.16), l'influence de la convection peut être observée surtout au niveau des coins en bas à gauche et à droite. En revanche, une fois les radionucléides dans l'argile, la diffusion est très lente et l'échelle de temps où les phénomènes se produisent est donc beaucoup plus grande.

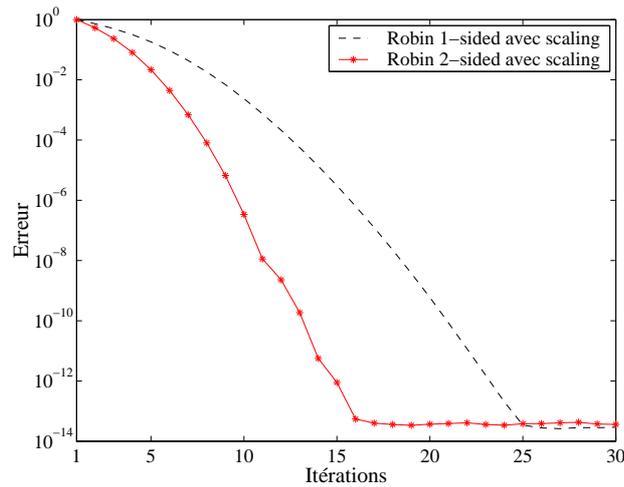


FIGURE 8.17 – Comparaison de la vitesse de convergence pour la condition d'interface de Robin 1-sided (noir) et celle de Robin 2-sided (rouge).

Dans l'algorithme de Schwarz, nous considérons les conditions de Robin 1-sided avec *scaling* ou de Robin 2-sided avec *scaling*. Comme dans le paragraphe précédent pour le cas-test à vitesse tournante, les paramètres de Robin sont déterminés par arête primale (resp. par frontière duale associée à un sommet de l'interface). La

définition de ces paramètres $\lambda_j^{L^*}$ et $\lambda_j^{R^*}$ (resp. $\lambda_k^{L^*}$ et $\lambda_k^{R^*}$) est donnée par (8.5), avec $p_j^{L^*}$, $p_j^{R^*}$, $p_k^{L^*}$ et $p_k^{R^*}$ données par (7.16) et (7.17) pour les deux conditions de transmission considérées.

La vitesse de convergence de l'algorithme de Schwarz jusqu'à la précision proche de l'erreur machine est donnée par la figure 8.17. L'erreur entre la solution multidomaine et la solution monodomaine associée à la condition de Robin 2-sided (courbe en trait plein rouge) est représentée aux côtés de l'erreur associée à la condition de Robin 1-sided avec *scaling* (courbe en pointillé noir). La conclusion est assez claire au regard de la figure : la condition de Robin 2-sided améliore grandement la vitesse de convergence (16 itérations nécessaires au lieu de 25 pour arriver à convergence).

Sur ce cas-test présentant plusieurs difficultés (coefficients discontinus, vitesse variable, géométrie non standard, maillage non conforme), la solution monodomaine semble réaliste. D'autre part, la convergence de la solution multidomaine vers la solution monodomaine a été mise en évidence, et de même que dans le cas-test précédent présenté dans le paragraphe 8.4, la convergence est bien plus rapide avec une condition de Robin 2-sided (avec *scaling*) qu'avec une condition de Robin 1-sided (avec *scaling*).

Conclusion

Ce travail de recherche, qui était motivé par la résolution du problème de convection-diffusion en régime instationnaire en milieu poreux pour l'application au stockage des déchets radioactifs, a été développé autour de deux axes : d'une part l'extension du schéma volumes finis DDFV à l'équation de convection-diffusion instationnaire et d'autre part l'extension, l'analyse et la mise en oeuvre de la méthode de décomposition de domaine espace-temps à ce nouveau schéma.

Dans la première partie de cette étude, nous avons réécrit en une dimension d'espace les schémas centré, décentré amont classique et décentré hybride pour lesquels nous avons montré une propriété de M-matrice. Nous avons vu que le schéma hybride, tout comme le schéma centré, peut être adapté de manière simple à une formulation multidomaine parce qu'il est naturellement local au sous-domaine. Au contraire, le schéma décentré amont standard a besoin d'être modifié sur les mailles de l'interface (d'où l'introduction des schémas décentré 0 et décentré 1), afin de pouvoir montrer l'équivalence, à l'aide des conditions de transmission discrétisées, entre le schéma monodomaine et le schéma multidomaine. Ayant choisi de résoudre le problème multidomaine par la méthode itérative de Schwarz, nous avons comparé ces schémas au travers de la vitesse à laquelle la solution multidomaine converge vers la solution monodomaine pour une condition de transmission de type Robin. Les résultats montrent que la convergence pour le schéma décentré hybride est toujours au moins aussi rapide que pour le schéma centré et le schéma décentré 0, le schéma décentré 1 donnant des résultats nettement moins bons. Du fait de son adaptation plus naturelle à la décomposition de domaine, le schéma décentré hybride a été retenu pour la discrétisation en deux dimensions.

Dans la deuxième partie de ce travail, nous avons proposé un nouveau schéma DDFV pour l'équation de convection-diffusion, à partir du schéma DDFV défini pour le problème de diffusion et en utilisant l'idée du schéma décentré hybride pour la discrétisation du flux convectif sur les mailles primales. Nous avons montré, par estimations d'énergie, le caractère bien posé du schéma DDFV monodomaine et nous avons établi numériquement sa convergence. Si d'autres cas-tests numériques seraient à envisager pour confirmer les résultats de l'ordre de convergence, il reste également à développer une analyse théorique de convergence du schéma proposé.

Ce schéma monodomaine a été défini ensuite dans un cadre multidomaine en proposant une discrétisation des conditions d'interface de type Robin, de telle sorte que les schémas multidomaine et monodomaine ont été montrés équivalents. Le caractère bien posé de ce schéma multidomaine a aussi été démontré. Enfin, la convergence de l'algorithme discret de Schwarz pour ce schéma DDFV a été prouvée, par estimations d'énergie, pour une grille conforme en temps, quelque soit l'ordre

du schéma en temps Galerkin Discontinu. Un travail à venir est la généralisation de cette preuve dans le cas de pas de temps différents, avec l'utilisation des projections globales en temps [55, 56]. Cela nécessite de définir le schéma monodomaine dont la solution est la limite de la solution multidomaine calculée par l'algorithme de Schwarz avec les projections à l'interface.

Pour déterminer les paramètres de Robin optimisés, nous avons envisagé différentes approches. Nous sommes d'abord partis de l'approche bien connue utilisant le taux de convergence de l'algorithme continu. Dans le cas des schémas 1D décentré 0 et décentré 1 et du schéma 2D pour le problème de diffusion pure pour des maillages cartésiens, nous avons également pu calculer explicitement le taux de convergence de l'algorithme discret. Et comme troisième approche, nous avons optimisé les paramètres de Robin à partir du taux de convergence de l'algorithme continu dans lequel nous avons considéré un coefficient de diffusion modifié pour prendre en compte la diffusion numérique venant du décentrage du terme de convection. Nous avons développé cette troisième approche en 1D, et en 2D pour des maillages rectangulaires. Nous avons observé qu'elle pouvait se montrer indispensable dans le cas d'un problème très fortement dominé par la convection. L'utilisation de cette troisième approche étant facile à mettre en oeuvre, il serait intéressant d'essayer de la généraliser à des maillages quelconques.

En 2D, une série de cas-tests de difficulté croissante a permis d'étudier la vitesse de convergence de l'algorithme de Schwarz en fonction des conditions de transmission (cas de diffusion pure à coefficients discontinus, cas de diffusion et convection constantes, cas de diffusion discontinue avec une vitesse variable et enfin le cas-test plus réaliste issu du projet européen PAMINA avec une géométrie moins standard, un maillage non conforme, des discontinuités dans la porosité et la diffusion ainsi qu'une vitesse variable). Dans le cas-test à vitesse de convection tournante et dans le cas représentatif des études de sûreté issu du projet PAMINA, les paramètres de Robin sont optimisés sur chacune des arêtes primales et duales de l'interface. Nous avons vérifié la convergence de la solution multidomaine vers la solution monodomaine dans ces deux cas, en observant une nette amélioration de la vitesse de convergence avec la condition de Robin 2-sided avec *scaling* par rapport à la condition de Robin 1-sided avec *scaling*. Si les résultats obtenus sur le cas réaliste PAMINA sont satisfaisants, il est néanmoins difficile de quantifier le gain en terme de temps de calcul apporté par la méthode de décomposition de domaine. Il faudrait pour cela considérer des pas de temps différents dans les deux sous-domaines afin de pouvoir utiliser un pas de temps beaucoup plus grand dans la zone d'argile. La mise en oeuvre effective de l'utilisation d'une grille non conforme en temps devrait être atteignable à court terme.

Outre les différentes idées déjà évoquées, une suite logique de ce travail serait de prendre en compte l'utilisation des conditions de transmission de Ventcell d'ordre 2 à la manière de [52] pour accélérer la convergence de l'algorithme de Schwarz. Comme perspectives plus lointaines, il vient à l'esprit la généralisation à trois dimensions d'espace, à partir de [6, 20, 22]. Enfin, il semblerait intéressant d'adapter cette étude à d'autres schémas volumes finis.

Bibliographie

- [1] www.andra.fr.
- [2] I. Aavatsmark, T. Barkve, Ø. Bøe, and T. Mannseth. Discretization on unstructured grids for inhomogeneous, anisotropic media. II. discussion and numerical results. *SIAM J. Sci. Comput.*, 19(5) :1717–1736, 1998.
- [3] Y. Achdou, C. Japhet, Y. Maday, and F. Nataf. A new cement to glue non-conforming grids with Robin interface conditions : the finite volume case. *Numer. Math.*, 92(4) :593–620, 2002.
- [4] ANDRA. Le journal de l’Andra. Edition Meuse/Haute-Marne. Numéros 1 à 15. Available at www.andra.fr.
- [5] ANDRA. Dossier Argile 2005, architecture et gestion du stockage géologique. *Collection Les Rapports*, 2005.
- [6] B. Andreianov, M. Bendahmane, F. Boyer, and F. Hubert. On 3D DDFV discretization of gradient and divergence operators. I. meshing, operators and discrete duality. *IMA J. of Numer. Anal.*, 32(4) :1574–1603, 2012.
- [7] B. Andreianov, M. Bendahmane, K. H. Karlsen, and C. Pierre. Convergence of discrete duality finite volume schemes for the cardiac bidomain model. *Networks and Heterogeneous Media*, 6 :195–240, 2011.
- [8] B. Andreianov, F. Boyer, and F. Hubert. Discrete duality finite volume schemes for Leray-Lions type elliptic problems on general 2D meshes. *Numer. Methods Partial Differ. Equations*, 23 :145–195, 2007.
- [9] O. Angelini. *Etude de schémas numériques pour les écoulements diphasiques en milieu poreux déformable pour des maillages quelconques. Application au stockage de déchets radioactifs*. PhD thesis, Université Paris-Est, 2010. Available at <http://tel.archives-ouvertes.fr/tel-00587364>.
- [10] D. Bennequin, M. J. Gander, and L. Halpern. A homographic best approximation problem with application to optimized Schwarz waveform relaxation. *Math. of Comput.*, 78(265) :185–223, 2009.
- [11] G. Bernard-Michel, C. Le Potier, S. Gounand, and M. Chraïbi. The Andra Couplex 1 test case : comparisons between finite-element, mixed hybrid element and finite volume element discretizations. *Computational Geosciences*, pages 187–201, 2004.
- [12] P. E. Bjørstad and O. B. Widlund. Solving elliptic problems on regions partitioned into substructures. In *Elliptic problem solvers, II (Monterey, Calif., 1983)*, pages 245–255. Academic Press, 1984.

- [13] E. Blayo, L. Halpern, and C. Japhet. Optimized Schwarz waveform relaxation algorithms with nonconforming time discretization for coupling convection-diffusion problems with discontinuous coefficients. In *Domain decomposition methods in science and engineering XVI*, volume 55 of *Lect. Notes Comput. Sci. Eng.*, pages 267–274. Springer, Berlin, 2007.
- [14] F. Boyer and F. Hubert. Finite volume method for 2D linear and nonlinear elliptic problems with discontinuities. *SIAM J. Numer. Anal.*, 46(6) :3032–3070, 2008.
- [15] F. Boyer, F. Hubert, and S. Krell. Non-overlapping Schwarz algorithm for solving 2D-mDDFV schemes. *IMA J. of Numer. Anal.*, 30(4) :1062–1100, 2010.
- [16] F. Brezzi, K. Lipnikov, and M. Shashkov. Convergence of mimetic finite difference method for diffusion problems on polyhedral meshes with curved faces. *SIAM J. Numer. Anal.*, 43(5) :1872–1896, 2005.
- [17] X.-C. Cai. Additive Schwarz algorithms for parabolic convection-diffusion equations. *Numer. Math.*, 6(1) :41–61, 1991.
- [18] C. Chainais-Hillairet. Discrete duality finite volume schemes for two-dimensional drift-diffusion and energy-transport models. *Intern. J. Numer. Methods Fluids*, 59 :239–257, 2009.
- [19] P. Charton, F. Nataf, and F. Rogier. Méthode de décomposition de domaine pour l'équation d'advection-diffusion. *C. R. Acad. Sci.*, 313(9) :623–626, 1991.
- [20] Y. Coudière and F. Hubert. A 3D discrete duality finite volume method for nonlinear elliptic equations. *SIAM J. Sci. Comput.*, 33 :1739–1764, 2011.
- [21] Y. Coudière and G. Manzini. The discrete duality finite volume method for convection-diffusion problems. *SIAM J. Numer. Anal.*, 47 :4163–4192, 2010.
- [22] Y. Coudière, C. Pierre, O. Rousseau, and R. Turpault. A 2D/3D Discrete Duality Finite Volume scheme. Application to ECG simulation. *Int. J. Finite Volumes*, 6 :electronic only, 2009.
- [23] Y. Coudière, J.-P. Vila, and P. Villedieu. Convergence rate of a finite volume scheme for a two-dimensional convection-diffusion problem. *ESAIM : M2AN*, 33(3) :493–516, 1999.
- [24] Y. Coudière and P. Villedieu. Convergence rate of a finite volume scheme for a linear convection-diffusion equation on locally refined meshes. *ESAIM : M2AN*, 34 :1123–1149, 2000.
- [25] L.B. da Veiga, J. Droniou, and G. Manzini. A unified approach for handling convection terms in finite volumes and mimetic discretization methods for elliptic problems. *IMA J. of Numer. Anal.*, pages 1–45, 2010.
- [26] S. Delcourte. *Développement de méthodes de volumes finis pour la mécanique des fluides*. PhD thesis, Université de Toulouse III, France, 2007. Available at <http://tel.archives-ouvertes.fr/tel-00200833/fr/>.
- [27] S. Delcourte, K. Domelevo, and P. Omnes. Discrete duality finite volume method for second order elliptic problems. In D. Ouazar F. Benkhaldoun and S. Raghay, editors, *In Finite Volumes for Complex Applications IV*, pages 447–458. Hermes Science publishing, 2005.

- [28] S. Delcourte, K. Domelevo, and P. Omnes. A discrete duality finite volume approach to hodge decomposition and div-curl problems on almost arbitrary two-dimensional meshes. *SIAM J. Numer. Anal.*, 45 :1142–1174, 2007.
- [29] K. Domelevo and P. Omnes. A finite volume for the Laplace equation on almost arbitrary two-dimensional grids. *Math. Model. Numer. Anal.*, 39 :1203–1249, 2005.
- [30] J. Droniou. Finite volume schemes for diffusion equations : introduction to and review of modern methods. *Math. Models Methods Appl. Sci.*, 2013.
- [31] J. Droniou and R. Eymard. A mixed finite volume scheme for anisotropic diffusion problems on any grid. *Numer. Math.*, 105 :35–71, 2006.
- [32] J. Droniou, R. Eymard, T. Gallouët, and R. Herbin. A unified approach to mimetic finite difference, hybrid finite volume and mixed finite volume methods. *Math. Models Methods Appl. Sci.*, 20(2) :1–31, 2010.
- [33] O. Dubois. *Optimized Schwarz Methods for the Advection-Diffusion Equation and for Problems with Discontinuous Coefficients*. PhD thesis, McGill University, Montréal, 2007.
- [34] R. Eymard, T. Gallouët, and R. Herbin. A finite volume scheme for anisotropic diffusion problems on any grid. *C. R. Math. Acad. Sci. Paris*, 339(4) :299–302, 2004.
- [35] R. Eymard, T. Gallouët, and R. Herbin. Discretization of heterogeneous and anisotropic diffusion problems on general non-conforming meshes SUSHI : a scheme using stabilization and hybrid interfaces. *IMA J. of Numer. Anal.*, 30 :1009–1043, 2010.
- [36] I. Faille, F. Nataf, F. Willien, and S. Wolf. Local time steps for a finite volume scheme. *ESAIM : Proceedings*, 29 :58–72, 2009.
- [37] M. J. Gander. Optimized Schwarz methods. *SIAM J. Numer. Anal.*, 44(2) :699–731, 2006.
- [38] M. J. Gander and L. Halpern. Méthodes de relaxation d’ondes pour l’équation de la chaleur en dimension 1. *C. R. Acad. Sci. Paris t. 336, Série I*, pages 519–524, 2003.
- [39] M. J. Gander and L. Halpern. Optimized Schwarz waveform relaxation for advection reaction diffusion problems. *SIAM J. Numer. Anal.*, 45(2) :666–697, 2007.
- [40] M. J. Gander, L. Halpern, and M. Kern. A Schwarz waveform relaxation method for advection-diffusion-reaction problems with discontinuous coefficients and non-matching grids. In *Domain decomposition methods in science and engineering XVI*, volume 55 of *Lect. Notes Comput. Sci. Eng.*, pages 283–290. Springer, Berlin, 2007.
- [41] M. J. Gander, L. Halpern, and F. Nataf. Optimal convergence for overlapping and non-overlapping Schwarz waveform relaxation. In C-H. Lai, P. Bjørstads, M. Cross, and O. Widlund, editors, *Proceedings of the 11th International Conference on Domain Decomposition Methods*, pages 27–36, 1999.
- [42] M. J. Gander, L. Halpern, and F. Nataf. Optimal Schwarz waveform relaxation for the one dimensional wave equation. *SIAM J. Numer. Anal.*, 41(5) :1643–1681, 2003.

- [43] M. J. Gander, F. Hubert, and S. Krell. Optimized Schwarz algorithms in the framework of DDFV schemes. In *Proceedings of the 21th International Conference on Domain Decomposition Methods*, 2013.
- [44] M. J. Gander and C. Japhet. Algorithm PANG : Software for non-matching grid projections in 2D and 3D with linear complexity. In *Proceedings of the 21st International Conference on Domain Decomposition*. To appear, 2013.
- [45] M. J. Gander, C. Japhet, Y. Maday, and F. Nataf. A new cement to glue nonconforming grids with Robin interface conditions : the finite element case. In *Domain decomposition methods in science and engineering*, volume 40 of *Lect. Notes Comput. Sci. Eng.*, pages 259–266. Springer, Berlin, 2005.
- [46] M. J. Gander and A. M. Stuart. Space-time continuous analysis of waveform relaxation for the heat equation. *SIAM J. Sci. Comput.*, 19(6) :2014–2031, 1998.
- [47] A. Genty, G. Mathieu, and E. Weetjens. PAMINA : Performance assessment methodologies in application to guide the development of the safety case. *Final report on benchmark calculation in clay. Deliverable D-N° : 4.2.4 of the European Contract Number FP6-036404*, 2009.
- [48] E. Giladi and H. B. Keller. Space-time domain decomposition for parabolic problems. *Numer. Math.*, 93(2) :279–313, 2002.
- [49] R. Glowinski, Q.V. Dinh, and J. Periaux. Domain decomposition methods for nonlinear problems in fluid dynamics. *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, 40(1) :27–109, 1983.
- [50] F. Haeberlein. *Time Space Domain Decomposition Methods for Reactive Transport. Application to CO₂ Geological Storage*. PhD thesis, Université Paris XIII, 2011. <http://tel.archives-ouvertes.fr/tel-00634507/en/>.
- [51] L. Halpern. Artificial boundary conditions for the linear advection diffusion equation. *Math. of Comput.*, 46 :425–438, 1986.
- [52] L. Halpern and F. Hubert. A finite volume Ventcell-Schwarz algorithm for advection-diffusion equations. In *Proceedings of the 21th International Conference on Domain Decomposition Methods*. To appear, 2013.
- [53] L. Halpern and C. Japhet. Discontinuous Galerkin and nonconforming in time optimized Schwarz waveform relaxation for heterogeneous problems. In U. Langer, M. Discacciati, D.E. Keyes, O.B. Widlund, and W. Zulehner, editors, *Decomposition Methods in Science and Engineering XVII*, volume 60 of *Lecture Notes in Computational Science and Engineering*, pages 211–219. Springer, 2008.
- [54] L. Halpern, C. Japhet, and P. Omnes. Nonconforming in time domain decomposition method for porous media applications. In J. C. F. Pereira and A. Sequeira, editors, *Proceedings of the 5th European Conference on Computational Fluid Dynamics ECCOMAS CFD 2010*, Lisbon, Portugal, 2010.
- [55] L. Halpern, C. Japhet, and J. Szeftel. Discontinuous Galerkin and nonconforming in time optimized Schwarz waveform relaxation. In Y. Huang, R. Kornhuber, O. Widlund, and J. Xu, editors, *Domain decomposition methods in science and engineering XIX*, volume 78 of *Lect. Notes Comput. Sci. Eng.* Springer, Heidelberg, 2011.

- [56] L. Halpern, C. Japhet, and J. Szeftel. Optimized Schwarz waveform relaxation and discontinuous Galerkin time stepping for heterogeneous problems. *SIAM J. Numer. Anal.*, 50 :2588–2611, 2012.
- [57] R. Herbin and F. Hubert. Benchmark on discretization schemes for anisotropic diffusion problems on general grids. *Finite volumes for complex applications V, ISTE, London*, pages 659–692, 2008.
- [58] F. Hermeline. A finite volume method for the approximation of diffusion operators on distorted meshes. *J. Comput. Phys.*, 160 :481–499, 2000.
- [59] F. Hermeline. Approximation of diffusion operators with discontinuous tensor coefficients on distorted meshes. *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, 192 :1939–1959, 2003.
- [60] T. T. P. Hoang, J. Jaffré, C. Japhet, M. Kern, and J. E. Roberts. Space-time domain decomposition for mixed formulations of diffusion equations. In *Proceedings of the 21st International Conference on Domain Decomposition Methods*. To appear, 2013.
- [61] T. T. P. Hoang, J. Jaffré, C. Japhet, M. Kern, and J. E. Roberts. Space-time domain decomposition methods for diffusion problems in mixed formulations. *SIAM J. Numer. Anal.*, Accepted.
- [62] J. Janssen and S. Vandewalle. On SOR waveform relaxation methods. *SIAM J. Numer. Anal.*, 34(6) :2456–2481, 1997.
- [63] C. Japhet. *Méthode de décomposition de domaine et conditions aux limites artificielles en mécanique des fluides : méthode optimisée d'ordre 2*. PhD thesis, Université Paris XIII, 1998.
- [64] C. Japhet. Optimized Krylov-Ventcell method. Application to convection-diffusion problems. In U. Bjørstad, M. Espedal, and D.E. Keyes, editors, *Domain decomposition methods in science and engineering IX*, pages 382–389. John Wiley & Sons Ltd, 1998.
- [65] C. Japhet, F. Nataf, and F. Rogier. The Optimized Order 2 method. Application to convection-diffusion problems. *Future Gener. Comput. Syst.*, 18(1) :17–30, 2001.
- [66] C. Japhet and P. Omnes. Optimized Schwarz waveform relaxation for porous media applications. In *Proceedings of the 20th International Conference on Domain Decomposition Methods*, 2013.
- [67] C. Johnson, K. Eriksson, and V. Thomee. Time discretization of parabolic problems by the discontinuous Galerkin method. *RAIRO Model. Math. Anal. Numer.*, 19, 1985.
- [68] S. Krell. *Schémas Volumes Finis en mécanique des fluides complexes*. PhD thesis, Université de Provence, 2010. <http://hal.archives-ouvertes.fr/tel-00524509/>.
- [69] S. Krell. Stabilized DDFV schemes for Stokes problem with variable viscosity on general 2D meshes. *Numer. Methods Partial Differ. Equations*, pages 1666–1706, 2011. <http://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00385687>.
- [70] S. Krell. Finite volume method for general multifluid flows governed by the interface Stokes problem. *Math. Models Methods Appl. Sci.*, 2012.

- [71] S. Krell and G. Manzini. The discrete duality finite volume method for Stokes equations on three-dimensional polyhedral meshes. *SIAM J. Numer. Anal.*, 50 :808–837, 2012.
- [72] F. Lemarié. *Algorithmes de Schwarz et couplage océan-atmosphère*. PhD thesis, Université Joseph Fourier, 2008. <http://tel.archives-ouvertes.fr/tel-00343501>.
- [73] F. Lemarié, F. Debreu, and E. Blayo. Toward an optimized global-in-time Schwarz algorithm for diffusion equations with discontinuous and spatially variable coefficients. Part 1 : the constant coefficients case. *Elec. Trans. Num. Anal.*, 40 :148–169, 2013.
- [74] F. Lemarié, F. Debreu, and E. Blayo. Toward an optimized global-in-time Schwarz algorithm for diffusion equations with discontinuous and spatially variable coefficients. Part 2 : the variable coefficients case. *Elec. Trans. Num. Anal.*, 40 :170–186, 2013.
- [75] P.-L. Lions. On the Schwarz alternating method. I. In G. A. Meurant R. Glowinski, G. H. Golub and J. Périaux, editors, *First International Symposium on Domain Decomposition Methods for Partial Differential Equations*, pages 1–42. Philadelphia, PA, SIAM, 1988.
- [76] P.-L. Lions. On the Schwarz alternating method. II. In J. Périaux T. Chan, R. Glowinski and O. Widlund, editors, *Second International Symposium on Domain Decomposition Methods for Partial Differential Equations*, pages 47–70. Philadelphia, PA, SIAM, 1989.
- [77] P.-L. Lions. On the Schwarz alternating method. III : a variant for nonoverlapping subdomains. In J. Périaux T. F. Chan, R. Glowinski and O. Widlund, editors, *Third International Symposium on Domain Decomposition Methods for Partial Differential Equations, held in Houston, Texas, March 20-22, 1989*, pages 202–223. Philadelphia, PA, SIAM, 1990.
- [78] C. Makridakis and R. Nocketto. A posteriori error analysis for higher order dissipative methods for evolution problems. *Numer. Math.*, 104, 2006.
- [79] V. Martin. Schwarz waveform relaxation method for the viscous shallow water equations. In *Domain decomposition methods in science and engineering*, volume 40 of *Lect. Notes Comput. Sci. Eng.*, pages 653–660. Springer, Berlin, 2005.
- [80] T. Mathew. *Domain Decomposition Methods for the Numerical Solution of Partial Differential Equations*, volume 61 of *Lecture Notes in Computational Science and Engineering*. Springer, 2008.
- [81] F. Nataf. Absorbing boundary conditions in block Gauss-Seidel methods for the convection problems. *I.R. n°284, CMAP (Ecole Polytechnique)*, 1996.
- [82] F. Nataf and F. Rogier. Factorization of the convection-diffusion operator and the Schwarz algorithm. *Math. Models Methods Appl. Sci.*, 5(1) :67–93, 1995. <http://dx.doi.org/10.1142/S021820259500005X>.
- [83] F. Nataf, F. Rogier, and E. De Sturler. Optimal interface conditions for domain decomposition methods. *I.R. n°301, CMAP (Ecole Polytechnique)*, 1994.
- [84] P. Omnes. Benchmark on discretization schemes for anisotropic diffusion problems on general grids. Tests with the discrete duality finite volume method. *Finite volumes for complex applications V, ISTE, London*, pages 919–934, 2008.

- [85] P. Omnes. Error estimates for a finite volume method for the Laplace equation in dimension one through discrete Green functions. *International Journal On Finite Volumes*, 6, 2009.
- [86] P. Omnes. On the second-order convergence of finite volume methods for the Laplace equation on Delaunay-Voronoi meshes. *ESAIM : M2AN*, 45 :627–650, 2011.
- [87] C. Le Potier. Méthode de volumes finis pour une équation de transport. Application à Couplex1, au site du Mont-Terri et au site Est. *Rapport DM2S*, 2003.
- [88] C. Le Potier. A finite volume method for the approximation of highly anisotropic diffusion operators on unstructured meshes. *Finite Volumes for Complex Applications IV, Marrakesh, Morocco*, 2005.
- [89] C. Le Potier. Schéma volumes finis monotone pour des opérateurs de diffusion fortement anisotropes sur des maillages de triangles non structurés. *C. R. Acad. Sci. Paris, Ser. I 341*, 2005.
- [90] A. Quarteroni. *Méthodes numériques pour le calcul scientifique*. Springer, 2000.
- [91] A. Quarteroni and A. Valli. *Domain decomposition methods for partial differential equations*. Clarendon Press, Oxford New York, 1999.
- [92] L. Saas, I. Faille, F. Nataf, and F. Willien. Finite volume methods for domain decomposition on nonmatching grids with arbitrary interface conditions and highly heterogeneous media. In R. Kornhuber, R. Hoppe, J. Periaux, O. Pironneau, O. Widlund, and J. Xu, editors, *Domain Decomposition Methods in Science and Engineering Series*, volume 40 of *Lecture Notes in Computational Science and Engineering*, 2004.
- [93] H. A. Schwarz. *Gesammelte mathematische Abhandlungen. Band I, II*. Chelsea Publishing Co., Bronx, N.Y., 1890. Nachdruck in einem Band der Auflage von 1890.
- [94] V. Thomee. *Galerkin Finite Element Methods for Parabolic Problems*, volume 25 of *Springer Series in Computational Mathematics*. Springer, 1997.
- [95] A. Toselli and O. Widlund. *Galerkin Finite Element Methods for Parabolic Problems*, volume 34 of *Springer Series in Computational Mathematics*. Springer-Verlag, 2005.

Résumé : Dans le contexte du stockage des déchets radioactifs en milieu poreux, nous considérons l'équation de convection-diffusion instationnaire et sa discrétisation par des méthodes numériques. La discontinuité des paramètres physiques et la variabilité des échelles d'espace et de temps conduisent à utiliser des discrétisations différentes en temps et en espace dans différentes régions du domaine. Nous choisissons dans cette thèse le schéma volumes finis en dualité discrète (DDFV) et le schéma de Galerkin Discontinu en temps couplés à une méthode de décomposition de domaine de Schwarz de type relaxation d'ondes optimisées (OSWR), ce qui permet de traiter des maillages espace-temps non conformes. La principale difficulté réside dans l'obtention d'une discrétisation amont du flux convectif qui reste locale à un sous-domaine et telle que le schéma monodomaine soit équivalent au schéma multidomaine. Ces difficultés sont appréhendées d'abord en une dimension d'espace où différentes discrétisations sont étudiées. Le schéma retenu introduit une inconnue hybride sur les interfaces entre cellules. L'idée du décentrage amont par rapport à cette inconnue hybride est reprise en dimension deux d'espace, et adaptée au schéma DDFV. Le caractère bien posé de ce schéma et d'un schéma multidomaine équivalent est montré. Ce dernier est résolu par un algorithme OSWR dont la convergence est prouvée. Les paramètres optimisés des conditions de Robin sont obtenus par l'étude du taux de convergence continu ou discret. Différents cas-tests, dont l'un est inspiré du stockage des déchets nucléaires, illustrent ces résultats.

Mots-Clés : Décomposition de domaine espace-temps, méthodes de Schwarz de type relaxation d'ondes, conditions de Robin, équation de convection-diffusion, schéma DDFV, schéma Galerkin Discontinu, optimisation des paramètres de Robin.

Abstract : In the context of nuclear waste repositories, we consider the numerical discretization of the non stationary convection diffusion equation. Discontinuous physical parameters and heterogeneous space and time scales lead us to use different space and time discretizations in different parts of the domain. In this work, we choose the discrete duality finite volume (DDFV) scheme and the discontinuous Galerkin scheme in time, coupled by an optimized Schwarz waveform relaxation (OSWR) domain decomposition method, because this allows the use of non-conforming space-time meshes. The main difficulty lies in finding an upwind discretization of the convective flux which remains local to a sub-domain and such that the multidomain scheme is equivalent to the monodomain one. These difficulties are first dealt with in the one-dimensional context, where different discretizations are studied. The chosen scheme introduces a hybrid unknown on the cell interfaces. The idea of upwinding with respect to this hybrid unknown is extended to the DDFV scheme in the two-dimensional setting. The well-posedness of the scheme and of an equivalent multidomain scheme is shown. The latter is solved by an OSWR algorithm, the convergence of which is proved. The optimized parameters in the Robin transmission conditions are obtained by studying the continuous or discrete convergence rates. Several test-cases, one of which inspired by nuclear waste repositories, illustrate these results.

Keywords : Space-Time Domain Decomposition, Schwarz Waveform Relaxation Methods, Robin conditions, convection-diffusion equation, DDFV scheme, Discontinuous Galerkin Method, Robin parameter optimization.