D'après les descriptions phénoménologiques qui ont été rappelées dans la première partie de ce travail, les charges hydrique et thermique couplées engendrent dans le volume du sol, une répartition de pressions internes, désignées par succions. L'effet de ces succions s'apparente à celui de contraintes mécaniques internes qui provoquent des déplacements locaux dans la structure, initiateurs de déformation.

Dans cette deuxième partie, nous présentons la démarche du traitement numérique par la Méthode des Différences Finies (M.D.F.) qui permet de déterminer la répartition des succions dans le sol.

Les notions de base relatives à la mise en œuvre de la M.D.F. y seront rapportées en premier lieu, ensuite, nous enchaînerons sur la présentation de la méthode de résolution adoptée pour réaliser les calculs de simulation.

II.1- Concepts de base de la M.D.F.

Pour mener le traitement numérique du problème qui débouchera sur une analyse par simulation, nous avons opté pour la mise en œuvre de la M.D.F. [26], [27]. Le principe général de cette méthode repose sur l'idée de base qui est de substituer le problème réel continu à un modèle discret équivalent (à définir). Et dans la substitution, l'opération doit porter sur tous les éléments du problème, à savoir :

- le support géométrique référencié dans l'espace de définition du problème
- les relations mathématiques qui expriment les lois de description des phénomènes considérés
- le nombre de degré de liberté du problème
- les conditions aux limites
- etc.

Les modèles discrets équivalents à définir sont en générale déduits à partir des approximations dont les conditions de validité reposent sur des critères mathématiques (minimisation d'erreurs).

En guise de directive générale pour le choix des modèles équivalents, on peut proposer les cas fréquents suivants [28]:

- Les modèles mathématiques équivalents que l'on choisit pour représenter les équations aux dérivées partielles (E.D.P.) caractérisant les problèmes continus sont des fonctions polynomiales déduites du développement en séries de Taylor de ces E.D.P.

- Les modèles du support géométrique ont été choisis parmi les formes régulières (parallélépipède, polygone, quadrilatère, etc.) afin de faciliter l'opération de discrétisation par un maillage régulier.

Une fois que les modèles équivalents sont fixés, la résolution des E.D.P. du problème continu est remplacée par la résolution d'équations algébriques rapportées aux nœuds de discrétisation définis dans le modèle discrétisé. Par cette opération, les solutions réelles du problème qui sont des fonctions continues sont approximées par un ensemble de solutions discrètes [28], [29].

II.2- Modèle physique du système étudié

II.2.1- Modèle géométrique et conditions d'étude

II.2.1.1- Modèle géométrique

Nous avons choisi comme support géométrique des processus étudiés, un échantillon de sol qui est représenté par un parallélépipède à base carrée de dimensions $(2L, 2l, \delta)$, centré sur l'axe Oz du repère $(0x, 0y, 0z)$ de l'espace 3D (Figure II.1).

Figure II. 1 : Modèle géométrique du milieu étudié

II.2.1.2- Conditions d'étude sur le modèle

a) Conditions générales

Les calculs de simulation ont été réalisés dans un cadre général fait d'hypothèses portant sur les trois phases existantes dans le sol.

a.1- La phase solide

- le squelette du sol est indéformable : la texture du sol ne varie pas
- le milieu est homogène et isotrope : les propriétés hydriques et thermiques sont identiques dans toutes les directions de l'espace.

a.2- La phase liquide

- le liquide dans le sol s'identifie à un fluide incompressible et non visqueux
- il peut se répartir dans toutes les directions de l'espace
- le mode d'écoulement du fluide est de type laminaire

a.3- La phase gazeuse

La contribution de la phase gazeuse est négligée

- dans le bilan énergétique des processus
- dans les processus de transferts hydrique et thermique

b) Conditions aux limites

b.1- Conditions aux limites relatives au transfert hydrique

- La face supérieure du modèle reçoit sur un élément de surface dS centrée en son milieu, une charge hydrique de densité de flux q_e jusqu'à saturation du sol. Ensuite, cet apport est relayé par une dissipation par une évaporation, de densité de flux q_s , sur toute la surface.
- Les quatre faces latérales et la base du modèle ne sont soumises à aucune condition de charge extérieure. Par contre, les conditions de continuité de la propagation du flux hydrique doivent y être satisfaites.
- A l'instant initial, tout point du modèle est caractérisé par une teneur en eau résiduelle θ_r .

b.2- Conditions aux limites relatives au transfert thermique

- La face supérieure du modèle est exposée à un rayonnement solaire de puissance Φ_0 et, échange de la chaleur par convection avec le milieu extérieur à la température T_∞ .
- Les quatre faces latérales et la base du modèle ne sont soumises à aucune condition de charge extérieure mais, les conditions de continuité de la propagation du flux thermique doivent y être satisfaites.
- A l'instant initial, le modèle est caractérisé par une répartition uniforme de la température, à une valeur T_0 .

Figure II. 2 : Conditions aux limites appliquées au modèle

II.2.2- Réduction du modèle

Dans la pratique de mise en œuvre de la Méthode des Différences Finies, il est fréquent de ramener l'étude à un modèle réduit afin d'augmenter la précision de l'approximation sans avoir à gonfler le volume des calculs, qui est lié au nombre de nœuds de définition. La réduction consiste à effectuer des partitions du modèle géométrique initial selon les axes ou les plans de symétrie communs à la forme géométrique et aux conditions physiques, s'il en existe.

II.2.2.1- Modèle réduit de l'échantillon étudié

Dans le cas du modèle géométrique que nous avons choisi (Figure II.3a), les plans (0xz) et (0yz) sont des plans de symétrie aussi bien pour la forme géométrique que pour les conditions physiques, par conséquent, on peut travailler sur le modèle réduit présenté dans la figure II.3b.

Figure II. 3 : Réduction du modèle choisi

II.2.2.2- Conditions aux limites du modèle réduit

L'adoption du modèle réduit modifie la définition des frontières ainsi que des conditions physiques les caractérisant. Par conséquent, nous avons porté dans la figure II.4, la redéfinition des conditions aux limites après réduction du modèle.

Figure II. 4 : Conditions aux limites du modèle réduit

II.2.3- Discrétisation du modèle réduit

Cette étape consiste à quadriller le modèle géométrique, selon un maillage par pas régulier et, suivant les trois directions respectives $0x$, $0y$ et $0z$ du repère référençant l'espace de définition. Cette opération permet de définir les « nœuds de description » qui s'identifient aux points d'intersection des lignes du quadrillage et dont le nombre représente le nombre de degré de liberté du système discrétisé.

En adoptant les pas de discrétisation spatiale ci-après:

☞ suivant l'axe $0x$, $\Delta x = \frac{l}{4}$

☞ suivant l'axe $0y$, $\Delta y = \frac{L}{4}$

☞ suivant l'axe $0z$, $\Delta z = \frac{\delta}{5}$

le modèle réduit comporte 150 nœuds de description qui sont répartis selon la figure II.5.

Figure II. 5 : Emplacement des nœuds de description du modèle discrétisé

La répartition spatio-temporelle de la fonction solution, notée $u(x, y, z, t)$, du problème réel est approchée par l'ensemble des valeurs discrètes de u définies, à tout instant t , en chaque nœud, noté $N(x, y, z)$, du modèle discrétisé. Et dans le traitement numérique pourvu par la M.D.F., on adopte une normalisation de la notation des grandeurs solutions sous forme de variables indicées, soit :

$$u(x, y, z, t) \longrightarrow u_{ijkn}$$

selon les définitions ci-après :

- ✓ l'indice i représente l'itération suivant l'axe $Ox \Rightarrow x_i = i. \Delta x$
- ✓ l'indice j représente l'itération suivant l'axe $Oy \Rightarrow y_j = j. \Delta y$
- ✓ l'indice k représente l'itération suivant l'axe $Oz \Rightarrow z_k = k. \Delta z$
- ✓ l'indice n représente l'itération temporelle en $t \Rightarrow t_n = n. \Delta t$ (pour $t_0 = 0$)

Remarque :

Dans tout ce qui va suivre, les variables qui représentent respectivement l'humidité et la température seront notées : $\{\theta_{ijkn}\}$ et $\{T_{ijkn}\}$.

II.2.4- Modèle mathématique

II.2.4.1- Système d'équations différentielles du problème

En se référant aux formulations établies dans la première partie de ce travail, la traduction mathématique du processus de couplage hydro-thermique est décrite à partir d'un système d'équations différentielles. Ce système est composée de l'équation décrivant le transfert hydrique (II.1a) et celle décrivant le transfert thermique (II.1b).

$$\begin{cases} \frac{\partial \theta}{\partial t} = \text{div} [D_\theta \overrightarrow{\text{grad}} \theta] + \frac{\partial}{\partial z} [K_\theta] + \lambda \text{div} [D_T \overrightarrow{\text{grad}} T] & \text{(II.1a)} \\ \frac{\partial T}{\partial t} = \text{div} [D_T \overrightarrow{\text{grad}} T] - \alpha \text{div} [D_v \overrightarrow{\text{grad}} \theta] & \text{(II.1b)} \end{cases}$$

Les solutions $\theta(T, x, y, z, t)$ tirées de ce système d'équations permettent de déduire la répartition des succions $\psi(\theta, x, y, z, t)$ (charges internes de pression) qui s'appliquent au système. Pour résoudre ce système d'équations par la M.D.F., il faut la présenter sous sa forme discrétisée.

II.2.4.2- Système d'équations volumiques discrétisées

La forme discrétisée du système différentiel du problème est obtenue en remplaçant les termes de dérivation par leur expression approchée respective, déduite du développement en séries de Taylor.

Par ailleurs, les équations aux dimensions du système d'équations (II.1) permettent de tirer les relations

$$\left[\frac{\partial \theta}{\partial t} \right] = [\lambda] \left[\frac{\partial T}{\partial t} \right] \text{ et } \left[\frac{\partial T}{\partial t} \right] = [\alpha] \left[\frac{\partial \theta}{\partial t} \right] \quad (\text{II.2})$$

d'où l'on peut déduire l'existence d'une relation de proportionnalité entre a et $1/\lambda$ que l'on peut exprimer sous la forme générale :

$$\alpha = -\frac{a}{\lambda} \quad (a \text{ étant le coefficient de proportionnalité})$$

a) Formulation du transfert hydrique

Le développement de l'équation (II.1a) en coordonnées cartésiennes donne :

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = D_{\theta} \left[\frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \theta}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \theta}{\partial z^2} \right] + \frac{\partial D_{\theta}}{\partial x} \frac{\partial \theta}{\partial x} + \frac{\partial D_{\theta}}{\partial y} \frac{\partial \theta}{\partial y} + \frac{\partial D_{\theta}}{\partial z} \frac{\partial \theta}{\partial z} + \frac{\partial K_{\theta}}{\partial z} + \lambda D_T \left[\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right] + \lambda \frac{\partial D_T}{\partial x} \frac{\partial T}{\partial x} + \lambda \frac{\partial D_T}{\partial y} \frac{\partial T}{\partial y} + \lambda \frac{\partial D_T}{\partial z} \frac{\partial T}{\partial z} \quad (\text{II.3})$$

En appliquant les formules relatives au développement des dérivées partielles, la forme discrétisée de cette équation s'écrit:

$$\begin{aligned} & \frac{\theta_{ijkn+1} - \theta_{ijkn}}{\Delta t} \\ &= D_{ijk}^{\theta} \left[\frac{\theta_{i+1jkn+1} - 2\theta_{ijkn+1} + \theta_{i-1jkn+1}}{(\Delta x)^2} \right] + D_{ijk}^{\theta} \left[\frac{\theta_{ij+1kn+1} - 2\theta_{ijkn+1} + \theta_{ij-1kn+1}}{(\Delta y)^2} \right] \\ &+ D_{ijk}^{\theta} \left[\frac{\theta_{ijk+1n+1} - 2\theta_{ijkn+1} + \theta_{ijk-1n+1}}{(\Delta z)^2} \right] + \left(\frac{D_{i+1jk}^{\theta} - D_{ijk}^{\theta}}{\Delta x} \right) \left[\frac{\theta_{i+1jkn+1} - \theta_{ijkn+1}}{\Delta x} \right] \\ &+ \left(\frac{D_{ij+1k}^{\theta} - D_{ijk}^{\theta}}{\Delta y} \right) \left[\frac{\theta_{ij+1kn+1} - \theta_{ijkn+1}}{\Delta y} \right] + \left(\frac{D_{ijk+1}^{\theta} - D_{ijk}^{\theta}}{\Delta z} \right) \left[\frac{\theta_{ijk+1n+1} - \theta_{ijkn+1}}{\Delta z} \right] \\ &+ \frac{K_{ijk+1}^{\theta} - K_{ijk}^{\theta}}{\Delta z} + \lambda D_{ijk}^T \left[\frac{T_{i+1jkn+1} - 2T_{ijkn+1} + T_{i-1jkn+1}}{(\Delta x)^2} \right] \\ &+ \lambda D_{ijk}^T \left[\frac{T_{ij+1kn+1} - 2T_{ijkn+1} + T_{ij-1kn+1}}{(\Delta y)^2} \right] + \lambda D_{ijk}^T \left[\frac{T_{ijk+1n+1} - 2T_{ijkn+1} + T_{ijk-1n+1}}{(\Delta z)^2} \right] \\ &+ \lambda \left(\frac{D_{i+1jk}^T - D_{ijk}^T}{\Delta x} \right) \left[\frac{T_{i+1jkn+1} - T_{ijkn+1}}{\Delta x} \right] + \lambda \left(\frac{D_{ij+1k}^T - D_{ijk}^T}{\Delta y} \right) \left[\frac{T_{ij+1kn+1} - T_{ijkn+1}}{\Delta y} \right] \\ &+ \lambda \left(\frac{D_{ijk+1}^T - D_{ijk}^T}{\Delta z} \right) \left[\frac{T_{ijk+1n+1} - T_{ijkn+1}}{\Delta z} \right] \end{aligned}$$

Pour ce faire, nous allons poser :

$$b_x = \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} \quad ; \quad b_y = \frac{\Delta t}{(\Delta y)^2} \quad ; \quad b_z = \frac{\Delta t}{(\Delta z)^2}$$

On peut écrire alors:

$$\begin{aligned} \theta_{ijkn+1} - \theta_{ijkn} &= b_x D_{ijk}^\theta [\theta_{i+1jkn+1} - 2\theta_{ijkn+1} + \theta_{i-1jkn+1}] \\ &+ b_y D_{ijk}^\theta [\theta_{ij+1kn+1} - 2\theta_{ijkn+1} + \theta_{ij-1kn+1}] \\ &+ b_z D_{ijk}^\theta [\theta_{ijk+1n+1} - 2\theta_{ijkn+1} + \theta_{ijk-1n+1}] + b_x (D_{i+1jk}^\theta - D_{ijk}^\theta) [\theta_{i+1jkn+1} - \theta_{ijkn+1}] \\ &+ b_y (D_{ij+1k}^\theta - D_{ijk}^\theta) [\theta_{ij+1kn+1} - \theta_{ijkn+1}] + b_z (D_{ijk+1}^\theta - D_{ijk}^\theta) [\theta_{ijk+1n+1} - \theta_{ijkn+1}] \\ &+ \Delta z b_z (K_{ijk+1}^\theta - K_{ijk}^\theta) + \lambda b_x D_{ijk}^T [T_{i+1jkn+1} - 2T_{ijkn+1} + T_{i-1jkn+1}] \\ &+ \lambda b_y D_{ijk}^T [T_{ij+1kn+1} - 2T_{ijkn+1} + T_{ij-1kn+1}] \\ &+ \lambda b_z D_{ijk}^T [T_{ijk+1n+1} - 2T_{ijkn+1} + T_{ijk-1n+1}] \\ &+ \lambda b_x (D_{i+1jk}^T - D_{ijk}^T) [T_{i+1jkn+1} - T_{ijkn+1}] + \lambda b_y (D_{ij+1k}^T - D_{ijk}^T) [T_{ij+1kn+1} - T_{ijkn+1}] \\ &+ \lambda b_z (D_{ijk+1}^T - D_{ijk}^T) [T_{ijk+1n+1} - T_{ijkn+1}] \end{aligned}$$

En groupant les termes de cette relation par facteurs des variables de description $\{\theta_{ijkn}\}$ et $\{T_{ijkn}\}$, on obtient la forme discrétisée de l'équation couplée du transfert hydrique :

$$\begin{aligned} &[-b_z D_{ijk}^\theta] \theta_{ijk-1n+1} + [-b_y D_{ijk}^\theta] \theta_{ij-1kn+1} + [-b_x D_{ijk}^\theta] \theta_{i-1jkn+1} \\ &+ [1 + (b_x + b_y + b_z) D_{ijk}^\theta + b_x D_{i+1jk}^\theta + b_y D_{ij+1k}^\theta + b_z D_{ijk+1}^\theta] \theta_{ijkn+1} \\ &+ [-b_x D_{i+1jk}^\theta] \theta_{i+1jkn+1} + [-b_y D_{ij+1k}^\theta] \theta_{ij+1kn+1} + [-b_z D_{ijk+1}^\theta] \theta_{ijk+1n+1} \\ &+ [-\lambda b_z D_{ijk}^T] T_{ijk-1n+1} + [-\lambda b_y D_{ijk}^T] T_{ij-1kn+1} + [-\lambda b_x D_{ijk}^T] T_{i-1jkn+1} \\ &+ [\lambda (b_x + b_y + b_z) D_{ijk}^T + \lambda b_x D_{i+1jk}^T + \lambda b_y D_{ij+1k}^T + \lambda b_z D_{ijk+1}^T] T_{ijkn+1} \\ &+ [-\lambda b_x D_{i+1jk}^T] T_{i+1jkn+1} + [-\lambda b_y D_{ij+1k}^T] T_{ij+1kn+1} + [-\lambda b_z D_{ijk+1}^T] T_{ijk+1n+1} \\ &= \theta_{ijkn} + \Delta z b_z (K_{ijk+1}^\theta - K_{ijk}^\theta) \end{aligned}$$

On peut mettre sous cette forme pour obtenir une expression plus compacte:

$$\begin{aligned} &A_1^\theta \theta_{ijk-1n+1} + A_2^\theta \theta_{ij-1kn+1} + A_3^\theta \theta_{i-1jkn+1} + A_4^\theta \theta_{ijkn+1} + A_5^\theta \theta_{i+1jkn+1} \\ &+ A_6^\theta \theta_{ij+1kn+1} + A_7^\theta \theta_{ijk+1n+1} + A_1^T T_{ijk-1n+1} + A_2^T T_{ij-1kn+1} \\ &+ A_3^T T_{i-1jkn+1} + A_4^T T_{ijkn+1} + A_5^T T_{i+1jkn+1} + A_6^T T_{ij+1kn+1} \\ &+ A_7^T T_{ijk+1n+1} = \theta_{ijkn} + \Delta z b_z (K_{ijk+1}^\theta - K_{ijk}^\theta) \end{aligned} \quad (\text{II.4})$$

avec

$A_1^\theta = -b_z D_{ijk}^\theta$	$A_5^\theta = -b_x D_{i+1jk}^\theta$	$A_1^T = -\lambda b_z D_{ijk}^T$	$A_5^T = -\lambda b_x D_{i+1jk}^T$
$A_2^\theta = -b_y D_{ijk}^\theta$	$A_6^\theta = -b_y D_{ij+1k}^\theta$	$A_2^T = -\lambda b_y D_{ijk}^T$	$A_6^T = -\lambda b_y D_{ij+1k}^T$
$A_3^\theta = -b_x D_{ijk}^\theta$	$A_7^\theta = -b_z D_{ijk+1}^\theta$	$A_3^T = -\lambda b_x D_{ijk}^T$	$A_7^T = -\lambda b_z D_{ijk+1}^T$
$A_4^\theta = 1 + b_x(D_{i+1jk}^\theta + D_{ijk}^\theta)$ $\quad + b_y(D_{ij+1k}^\theta + D_{ijk}^\theta)$ $\quad + b_z(D_{ijk+1}^\theta + D_{ijk}^\theta)$		$A_4^T = \lambda b_x(D_{i+1jk}^T + D_{ijk}^T)$ $\quad + \lambda b_y(D_{ij+1k}^T + D_{ijk}^T)$ $\quad + \lambda b_z(D_{ijk+1}^T + D_{ijk}^T)$	

b) Formulation du transfert thermique

D'une manière analogue au cas du transfert hydrique, le développement de l'équation (II.1b) en coordonnées cartésiennes s'écrit :

$$\frac{\partial T}{\partial t} = D_T \left[\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right] + \frac{\partial D_T}{\partial x} \frac{\partial T}{\partial x} + \frac{\partial D_T}{\partial y} \frac{\partial T}{\partial y} + \frac{\partial D_T}{\partial z} \frac{\partial T}{\partial z} + \frac{a D_v}{\lambda} \left[\frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \theta}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \theta}{\partial z^2} \right] + \frac{a}{\lambda} \frac{\partial D_v}{\partial x} \frac{\partial \theta}{\partial x} + \frac{a}{\lambda} \frac{\partial D_v}{\partial y} \frac{\partial \theta}{\partial y} + \frac{a}{\lambda} \frac{\partial D_v}{\partial z} \frac{\partial \theta}{\partial z} \quad (\text{II.5})$$

En développant les termes de dérivées partielles, on obtient :

$$\begin{aligned} & \frac{T_{ijkn+1} - T_{ijkn}}{\Delta t} \\ &= D_{ijk}^T \left[\frac{T_{i+1jkn+1} - 2T_{ijkn+1} + T_{i-1jkn+1}}{(\Delta x)^2} \right] + D_{ijk}^T \left[\frac{T_{ij+1kn+1} - 2T_{ijkn+1} + T_{ij-1kn+1}}{(\Delta y)^2} \right] \\ &+ D_{ijk}^T \left[\frac{T_{ijk+1n+1} - 2T_{ijkn+1} + T_{ijk-1n+1}}{(\Delta z)^2} \right] + \left(\frac{D_{i+1jk}^T - D_{ijk}^T}{\Delta x} \right) \left[\frac{T_{i+1jkn+1} - T_{ijkn+1}}{\Delta x} \right] \\ &+ \left(\frac{D_{ij+1k}^T - D_{ijk}^T}{\Delta y} \right) \left[\frac{T_{ij+1kn+1} - T_{ijkn+1}}{\Delta y} \right] + \left(\frac{D_{ijk+1}^T - D_{ijk}^T}{\Delta z} \right) \left[\frac{T_{ijk+1n+1} - T_{ijkn+1}}{\Delta z} \right] \\ &+ \frac{a}{\lambda} D_{ijk}^v \left[\frac{\theta_{i+1jkn+1} - 2\theta_{ijkn+1} + \theta_{i-1jkn+1}}{(\Delta x)^2} \right] \\ &+ \frac{a}{\lambda} D_{ijk}^v \left[\frac{\theta_{ij+1kn+1} - 2\theta_{ijkn+1} + \theta_{ij-1kn+1}}{(\Delta y)^2} \right] \\ &+ \frac{a}{\lambda} D_{ijk}^v \left[\frac{\theta_{ijk+1n+1} - 2\theta_{ijkn+1} + \theta_{ijk-1n+1}}{(\Delta z)^2} \right] + \frac{a}{\lambda} \left(\frac{D_{i+1jk}^v - D_{ijk}^v}{\Delta x} \right) \left[\frac{\theta_{i+1jkn+1} - \theta_{ijkn+1}}{\Delta x} \right] \\ &+ \frac{a}{\lambda} \left(\frac{D_{ij+1k}^v - D_{ijk}^v}{\Delta y} \right) \left[\frac{\theta_{ij+1kn+1} - \theta_{ijkn+1}}{\Delta y} \right] + \frac{a}{\lambda} \left(\frac{D_{ijk+1}^v - D_{ijk}^v}{\Delta z} \right) \left[\frac{\theta_{ijk+1n+1} - \theta_{ijkn+1}}{\Delta z} \right] \end{aligned}$$

En adoptant les conversions précédentes, on obtient :

$$\begin{aligned}
T_{ijkn+1} - T_{ijkn} &= b_x D_{ijk}^T [T_{i+1jkn+1} - 2T_{ijkn+1} + T_{i-1jkn+1}] \\
&+ b_y D_{ijk}^T [T_{ij+1kn+1} - 2T_{ijkn+1} + T_{ij-1kn+1}] \\
&+ b_z D_{ijk}^T [T_{ijk+1n+1} - 2T_{ijkn+1} + T_{ijk-1n+1}] + b_x (D_{i+1jk}^T - D_{ijk}^T) [T_{i+1jkn+1} - T_{ijkn+1}] \\
&+ b_y (D_{ij+1k}^T - D_{ijk}^T) [T_{ij+1kn+1} - T_{ijkn+1}] + b_z (D_{ijk+1}^T - D_{ijk}^T) [T_{ijk+1n+1} - T_{ijkn+1}] \\
&+ \frac{a}{\lambda} b_x D_{ijk}^v [\theta_{i+1jkn+1} - 2\theta_{ijkn+1} + \theta_{i-1jkn+1}] \\
&+ \frac{a}{\lambda} b_y D_{ijk}^v [\theta_{ij+1kn+1} - 2\theta_{ijkn+1} + \theta_{ij-1kn+1}] \\
&+ \frac{a}{\lambda} b_z D_{ijk}^v [\theta_{ijk+1n+1} - 2\theta_{ijkn+1} + \theta_{ijk-1n+1}] \\
&+ \frac{a}{\lambda} b_x (D_{i+1jk}^v - D_{ijk}^v) [\theta_{i+1jkn+1} - \theta_{ijkn+1}] \\
&+ \frac{a}{\lambda} b_y (D_{ij+1k}^v - D_{ijk}^v) [\theta_{ij+1kn+1} - \theta_{ijkn+1}] \\
&+ \frac{a}{\lambda} b_z (D_{ijk+1}^v - D_{ijk}^v) [\theta_{ijk+1n+1} - \theta_{ijkn+1}]
\end{aligned}$$

En groupant les termes de cette relation par facteurs des variables de description $\{\theta_{ijkn}\}$ et $\{T_{ijkn}\}$, la forme discrétisée de l'équation couplée du transfert thermique s'écrit :

$$\begin{aligned}
&[-b_z D_{ijk}^T] T_{ijk-1n+1} + [-b_y D_{ijk}^T] T_{ij-1kn+1} + [-b_x D_{ijk}^T] T_{i-1jkn+1} \\
&+ [1 + (b_x + b_y + b_z) D_{ijk}^T + b_x D_{i+1jk}^T + b_y D_{ij+1k}^T + b_z D_{ijk+1}^T] T_{ijkn+1} \\
&+ [-b_x D_{ijk}^T] T_{i+1jkn+1} + [-b_y D_{ijk}^T] T_{ij+1kn+1} \\
&+ [-b_z D_{ijk}^T] T_{ijk+1n+1} \left[-\frac{a}{\lambda} b_z D_{ijk}^v \right] \theta_{ijk-1n+1} + \left[-\frac{a}{\lambda} b_y D_{ijk}^v \right] \theta_{ij-1kn+1} \\
&+ \left[-\frac{a}{\lambda} b_x D_{ijk}^v \right] \theta_{i-1jkn+1} \\
&+ \left[\frac{a}{\lambda} (b_x + b_y + b_z) D_{ijk}^v + \frac{a}{\lambda} b_x D_{i+1jk}^v + \frac{a}{\lambda} b_y D_{ij+1k}^v + \frac{a}{\lambda} b_z D_{ijk+1}^v \right] \theta_{ijkn+1} \\
&+ \left[-\frac{a}{\lambda} b_x D_{i+1jk}^v \right] \theta_{i+1jkn+1} + \left[-\frac{a}{\lambda} b_y D_{ij+1k}^v \right] \theta_{ij+1kn+1} + \left[-\frac{a}{\lambda} b_z D_{ijk+1}^v \right] \theta_{ijk+1n+1} \\
&= T_{ijkn}
\end{aligned}$$

D'où l'on déduit la forme discrétisée en $\{\theta_{ijkn}\}$ et $\{T_{ijkn}\}$ de l'équation couplée du transfert thermique:

$ \begin{aligned} &B_1^T T_{ijk-1n+1} + B_2^T T_{ij-1kn+1} + B_3^T T_{i-1jkn+1} + B_4^T T_{ijkn+1} + B_5^T T_{i+1jkn+1} \\ &+ B_6^T T_{ij+1kn+1} + B_7^T T_{ijk+1n+1} + B_1^\theta \theta_{ijk-1n+1} + B_2^\theta \theta_{ij-1kn+1} \\ &+ B_3^\theta \theta_{i-1jkn+1} + B_4^\theta \theta_{ijkn+1} + B_5^\theta \theta_{i+1jkn+1} + B_6^\theta \theta_{ij+1kn+1} \\ &+ B_7^\theta \theta_{ijk+1n+1} + = T_{ijkn} \end{aligned} $	(II.6)
---	--------

avec

$B_1^T = -b_z D_{ijk}^T$	$B_5^T = -b_x D_{i+1jk}^T$	$B_1^\theta = -\frac{a}{\lambda} b_z D_{ijk}^v$	$B_5^\theta = -\frac{a}{\lambda} b_x D_{i+1jk}^v$
$B_2^T = -b_y D_{ijk}^T$	$B_6^T = -b_y D_{ij+1k}^T$	$B_2^\theta = -\frac{a}{\lambda} b_y D_{ijk}^v$	$B_6^\theta = -\frac{a}{\lambda} b_y D_{ij+1k}^v$
$B_3^T = -b_x D_{ijk}^T$	$B_7^T = -b_z D_{ijk+1}^T$	$B_3^\theta = -\frac{a}{\lambda} b_x D_{ijk}^v$	$B_7^\theta = -\frac{a}{\lambda} b_z D_{ijk+1}^v$
$B_4^T = 1 + b_x(D_{i+1jk}^T + D_{ijk}^T)$ $\quad + b_y(D_{ij+1k}^T + D_{ijk}^T)$ $\quad + b_z(D_{ijk+1}^T + D_{ijk}^T)$		$B_4^\theta = \frac{a}{\lambda} b_x(D_{i+1jk}^v + D_{ijk}^v)$ $\quad + \frac{a}{\lambda} b_y(D_{ij+1k}^v + D_{ijk}^v)$ $\quad + \frac{a}{\lambda} b_z(D_{ijk+1}^v + D_{ijk}^v)$	

La suite des opérations consiste à exprimer les équations générales (II.4) et (II.6) en chaque nœud du modèle géométrique et, l'ensemble des équations ainsi établies représente le système d'équations algébriques à résoudre pour obtenir les solutions approchées du problème. Dans cette opération, il faut distinguer les nœuds de volume et les nœuds de frontière ; pour la première catégorie de nœuds, la transcription des équations générales s'effectue selon une traduction terme à terme. Par contre, pour la deuxième catégorie, il faut tenir compte des relations exprimant les conditions aux limites imposées.

II.2.4.3- Formulation des conditions aux limites

Passons en revue les conditions aux frontières imposées sur le modèle, en adoptant la convention de notation suivante :

X : coordonnée cartésienne généralisée pouvant s'identifier à x , y ou z

a) Symétrie

- hydrique : $\theta_{X-\Delta X} = \theta_{X+\Delta X}$
- thermique : $T_{X-\Delta X} = T_{X+\Delta X}$

b) Continuité du transfert

- hydrique : $\left(\frac{\partial \theta}{\partial X}\right)_X = \left(\frac{\partial \theta}{\partial X}\right)_{X+\Delta X}$
- thermique : $\left(\frac{\partial T}{\partial X}\right)_X = \left(\frac{\partial T}{\partial X}\right)_{X+\Delta X}$

c) Flux imposé q_{imp}

- hydrique : $-D(\theta) \frac{\partial \theta}{\partial X} = q_{imp}$
- thermique : $-K_T \frac{\partial T}{\partial X} = q_{imp}$

Pour les nœuds de frontière, la prise en compte de ces relations, dans les équations générales (II.4) et (II.6), se fera à partir de leur forme discrétisée respective.

Dans les traitements numériques, la construction systématique des équations nodales a montré que les formes d'expression des relations obtenues peuvent être identiques pour des nœuds différents s'ils ont un même domaine d'appartenance (nœuds appartenant à une même frontière). Ainsi, afin d'éviter des répétitions dans la construction des équations, nous les avons groupé par « type » selon leur forme d'expression. Et, dans le cas de notre modèle, 30 types de relations distinctes ont pu être définis à partir des conditions aux limites imposées. Ces 30 types d'équation, une fois numérotés, sont répartis sur les domaines-frontières du modèle tels que :

- chaque face frontière est caractérisée par un type d'équation qui y exprime les conditions aux limites imposées.
- à chaque ligne frontière est affectée la composition des équations caractérisant les deux faces adjacentes dont elle est l'intersection.
- à chaque point frontière est affectée la composition des équations caractérisant les trois faces ayant le point en commun.

Dans les calculs, l'ordre de numérotation, ainsi que l'emplacement de chaque type d'équation sur les domaines-frontières du modèle sont présentés dans la figure II.6.